

**SIMULACIÓN HIDRODINÁMICA DE MONOLITOS TIPO ESPUMA
MEDIANTE LA TÉCNICA DE LOS ELEMENTOS FINITOS**

**LAURA ANDREA DUARTE BALLEEN
JOHNY LEONARDO JEREZ BARAJAS**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2007

**SIMULACION HIDRODINAMICA DE MONOLITOS TIPO ESPUMA
MEDIANTE LA TÉCNICA DE LOS ELEMENTOS FINITOS**

**LAURA ANDREA DUARTE BALLEEN
JOHNY LEONARDO JEREZ BARAJAS**

**Proyecto de grado para optar el título de
Ingeniero Químico**

**Director
RAMIRO MARTINEZ REY, Ph. D.**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2007

A Mis Papás, con todo mi amor y agradecimiento, por enseñarme que todo cuanto existe guarda en su interior la infinita perfección del Universo.

A Sergio, mi Amor, por ser mi compañero y mi luz en este hermoso viaje de la vida.

Laura

A mi madre Alejandrina, quien con su amor, cuidado y sacrificio ha hecho posible que mi sueño se convierta en realidad. Gracias por estar siempre conmigo y espero que me acompañes muchos años mas, y compartir contigo todas las alegrías y triunfos por venir.

A mis hermanos Juan, Zulma, Zayra y Mayra, quienes me han soportado y brindado su amor durante toda su vida. Gracias hermanitos, y este triunfo es de todos nosotros.

Johny

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	1
1. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE	3
1.1 MODELAMIENTO DE MONOLITOS TIPO ESPUMA	3
1.1.1 Modelamiento teórico	4
1.1.2 Modelamiento a partir de estructuras reales	6
1.2 MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS	7
2. METODOLOGÍA	9
2.1 FORMULACIÓN DEL MODELO GEOMÉTRICO	9
2.1.1 Modelo geométrico a partir de tomografía de rayos X	9
2.1.2 Modelo geométrico a partir de datos estadísticos	12
2.2 FORMULACIÓN DEL MODELO HIDRODINÁMICO	14
2.3 OPTIMIZACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS	15
2.3.1 Características de la malla	16
2.3.2 Parámetros del <i>solver</i>	16
2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO	16
2.5 ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LOS RESULTADOS	17
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS	18
3.1 COMPARACIÓN CON DATOS EXPERIMENTALES	27
3.1.1 Estructuras de 10 PPI	27
3.1.2 Estructuras de 30 PPI	29
3.2 ANÁLISIS ESTADÍSTICO	30
4. CONCLUSIONES	32
5. RECOMENDACIONES	33
BIBLIOGRAFÍA	34
ANEXOS	36

LISTA DE TABLAS

pág.

Tabla 1. Características de los monolitos estudiados

9

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Estructura típica de un monolito tipo espuma	3
Figura 2. Volúmenes elementales representativos propuestos en la literatura	5
Figura 3. Estructura geométrica bidimensional obtenida a partir de tratamiento de imágenes	7
Figura 4. Elemento finito triangular plano	8
Figura 5. Mallas de elementos finitos triangulares generadas por el software FEMLAB	8
Figura 6. Cortes transversales obtenidos por tomografía de rayos X de los monolitos de 10 PPI y 30 PPI	10
Figura 7. Imagen original del monolito de 10 PPI junto con imágenes segmentadas de diferentes porosidades	11
Figura 8. Modelos geométricos obtenidos por tratamiento de imágenes de tomografías de rayos X de los monolitos de 10 PPI y 30 PPI	12
Figura 9. Interfaz gráfica de la rutina creada para realizar el tratamiento digital de imágenes	12
Figura 10. Modelo geométrico generado a partir de datos estadísticos	13
Figura 11. Condiciones de frontera del modelo hidrodinámico	15
Figura 12. Perfiles internos de velocidad y presión para estructuras de diferentes porosidades obtenidas a partir de tomografías del monolito de 10 PPI	20
Figura 13. Perfiles internos de velocidad y presión para una estructura obtenida a partir de una de las tomografías del monolito de 10 PPI a diferentes velocidades de entrada	20
Figura 14. Perfiles internos de velocidad y presión para estructuras de diferentes densidades de poro obtenidas a partir de tomografías de rayos X	21

Figura 15. Perfiles internos de velocidad y presión para estructuras obtenidas por medio de diferentes metodologías	21
Figura 16. Perfil axial de presión y perfil interno de presión de una de las estructuras obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI	23
Figura 17. Perfiles axiales de presión de estructuras diferentes porosidades obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI	24
Figura 18. Perfiles axiales de presión de estructuras obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI a diferentes velocidades de entrada	24
Figura 19. Perfiles axiales de presión de las estructuras obtenidas a partir de las tomografías de los monolitos de 10 y 30 PPI	24
Figura 20. Perfiles axiales de presión de estructuras creadas por medio de tomografía de rayos X y datos estadísticos	25
Figura 21. Aumento porcentual del número de Reynolds para estructuras diferentes porosidades, obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI	26
Figura 22. Aumento porcentual del número de Reynolds para estructuras de obtenidas a partir de las tomografías de los monolitos de 10 y 30 PPI	26
Figura 23. Aumento porcentual del número de Reynolds para estructuras creadas por medio de tomografías de rayos X y datos estadísticos	26
Figura 24. Caída de presión por unidad de longitud de las simulaciones de 10 PPI obtenidas de tomografías junto con los datos reportados en la literatura	27
Figura 25. Caída de presión por unidad de longitud de las estructuras creadas por medio de diferentes metodologías junto con los datos reportados en la literatura	28
Figura 26. Caída de presión por unidad de longitud de las estructuras obtenidas a partir de las tomografías del monolito de 30 PPI junto con los datos reportados en la literatura	29
Figura 27. Caída de presión por unidad de longitud de las estructuras obtenidas a partir de las tomografías del monolito de 10 y 30 PPI	29

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo A. Creación del modelo geométrico a partir de datos estadísticos reportados en la literatura	36
Anexo B. Gráficos de Pareto para las estructuras obtenidas a partir de tomografías de rayos X	38
Anexo C. Gráficos de Pareto para las estructuras creadas por medio de diferentes metodologías	39

RESUMEN

TÍTULO

SIMULACIÓN HIDRODINÁMICA DE MONOLITOS TIPO ESPUMA MEDIANTE LA TÉCNICA DE LOS ELEMENTOS FINITOS*

AUTORES

LAURA ANDREA DUARTE BALLEEN

JOHNY LEONARDO JEREZ BARAJAS**

PALABRAS CLAVES

Monolitos tipo espuma, Tratamiento de imágenes, Elementos finitos, Caída de presión.

DESCRIPCIÓN

Los monolitos tipo espuma presentan características muy favorables para aplicaciones de reactores químicos y filtros, donde se requieren muy bajas caídas de presión. Este trabajo presenta una simulación del perfil interno de velocidad y la caída de presión del flujo de un fluido (aire) a través de monolitos tipo espuma. Para ello, se planteó el modelamiento geométrico computacional en dos dimensiones de monolitos de 10 y 30 PPI (poros por pulgada lineal), mediante el uso de imágenes tomadas por tomografía de rayos X y procesadas por medio de técnicas de tratamiento digital de imágenes. Adicionalmente se plantearon modelos geométricos construidos a partir de datos estadísticos referentes a la geometría de los monolitos tipo espuma y se realizó un estudio comparativo con los resultados obtenidos con los modelos provenientes de las tomografías.

Para el cálculo del perfil de velocidad y caída de presión se utilizó la ecuación de Navier-Stokes, bajo condiciones isotérmicas en ausencia de reacción química. El modelo hidrodinámico se solucionó mediante la técnica de los elementos finitos utilizando el software FEMLAB.

Se obtuvieron los perfiles internos de presión y velocidad, junto con la caída de presión global, a diferentes velocidades de entrada del fluido y a diferentes porosidades del monolito. Los resultados obtenidos de la caída de presión por unidad de longitud se validaron con datos experimentales reportados en la literatura, correspondientes a estudios realizados en condiciones similares a las utilizadas en este trabajo. Los resultados muestran que la simulación bidimensional de monolitos tipo espuma de densidades de poro de 10 PPI ofrece buenas aproximaciones al comportamiento real. Sin embargo, para monolitos de densidades de poro de 30 PPI, no se obtienen resultados satisfactorios, debido a que el modelo bidimensional no logra capturar las características geométricas más influyentes en el comportamiento real.

*Trabajo de Grado

**Facultad de Ingenierías Físico – Químicas, Escuela de Ingeniería Química, Director: Ph D. Ramiro Martínez Rey

ABSTRACT

TITLE

HYDRODYNAMIC SIMULATION OF MONOLITHS TYPE FOAM BY MEANS OF THE TECHNIQUE OF THE FINITES ELEMENTS*

AUTORS

LAURA ANDREA DUARTE BALLEEN
JHONY LEONARDO JEREZ BARAJAS**

KEY WORDS

Monoliths type foam, Treatment of images, Finites elements, Pressure drop.

DESCRIPTION

Monoliths type foam present very favorable characteristics for applications on chemical reactors and filters, where very low pressure drops are required. This work presents a simulation of the internal speed profile and the pressure drop of a fluid flow through monolith type foam. For it, the geometric computational modeling in two dimensions of monoliths with 10 and 30 PPI (Pores per Lineal Inch) was developed by means of the use of cross section images taken by X-ray tomography and processed by means of the technique of digital treatment of images. Additionally, two geometrical models build from statistical data referring to monoliths type foam geometry were developed and a comparative study with the results obtained from the model that came from the tomographies was carried out.

For the calculation of the speed profile and the pressure drop, the Navier-Stokes equations were used under isothermal conditions and in absence of chemical reaction. The hydrodynamic model proposed is formed by a joint of partial differential equations which solution was given by the technique of finites elements using the software FEMLAB.

The internal pressure and speed profiles were obtained, together with the global pressure drop calculated under different fluid entrance velocities and different porosities of the monolith. The results obtained for the pressure drop per unit of length were validated with experimental data reported in literature corresponding to studies carried out under similar conditions to the ones used on this work. The results show that the two dimensions simulation of the monoliths type foam with pores density of 10 PPI offer better approximations to the real behavior, however, for monoliths type foam with pores density of 30 PPI the results were not satisfactory, due to the two dimensions model does not reflects the most influential geometrical characteristics of the real behavior.

*Degree Work

**Faculty of Physicochemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Director:
Ph D. Ramiro Martínez Rey

INTRODUCCIÓN

Los monolitos tipo espuma presentan características muy favorables para gran variedad de procesos en la industria química. Una de estas características es la alta superficie específica que poseen, la cual los convierte en una excelente alternativa para procesos que involucran operaciones de transferencia de masa y energía. Los monolitos tipo espuma presentan gran cantidad de poros que incrementan la turbulencia, el mezclado y el transporte, proporcionando esto muchas ventajas para procesos limitados por transferencia de masa y calor. Igualmente, gracias a su alta porosidad macroscópica producen caídas de presión hasta 100 veces más bajas que los lechos empacados [17], lo cual es deseable para reacciones que requieren tiempos de contacto muy cortos y en procesos donde la alta caída de presión es un problema [14].

A pesar de las diversas ventajas expuestas anteriormente el análisis de las espumas monolíticas no es abundante y su comportamiento continúa sin comprenderse totalmente. Uno de los aspectos más importantes en el estudio de los monolitos tipo espuma es la predicción de su comportamiento hidrodinámico al interactuar con fluidos. La caída de presión es un factor determinante en algunos procesos en los que se involucran reacciones catalíticas e intercambio de calor, por lo cual, poder realizar predicciones precisas puede ser fundamental para mejorar y expandir las aplicaciones de estas estructuras.

Para la determinación precisa del comportamiento hidrodinámico de los monolitos tipo espuma es de gran importancia tener un conocimiento amplio acerca de su estructura. Sin embargo, actualmente existen pocos modelos en la literatura en los que se presente de forma suficientemente explícita la influencia de la geometría. Se han planteado modelos que utilizan *volúmenes elementales representativos* [7, 9, 13, 16], los cuales tratan de sintetizar los detalles más característicos de la estructura. La mayor limitación de estos modelos es que presentan una estricta regularidad y simetría, lo que no concuerda con las estructuras reales. Debido a la dificultad para modelar de forma teórica la estructura

de las espumas se han propuesto modelos que parten de la estructura real, por medio de tomografías de rayos X o MRI y tratamiento digital de imágenes [2, 5, 12].

La intrincada estructura interna de las espumas monolíticas origina dificultades en la simulación de su comportamiento, por esta razón es indispensable realizar una cuidadosa selección del método numérico a utilizar y sus parámetros. El método de los elementos finitos es tal vez el más adecuado para este tipo de problemas que presentan geometrías altamente irregulares dado que se ha utilizado en estudios anteriores en medios porosos con algunas similitudes a los monolitos tipo espuma [2, 4].

En este trabajo se simuló el comportamiento hidrodinámico de monolitos tipo espuma de 10 y 30 PPI (poros por pulgada lineal) utilizando modelos geométricos bidimensionales creados a partir de la estructura real de los mismos por medio de tratamiento digital de imágenes de tomografías de rayos X. Adicionalmente, se construyeron modelos geométricos a partir de datos estadísticos referentes a la geometría de monolitos tipo espuma. Para estas dos versiones de modelos geométricos se obtuvieron los perfiles internos de velocidad y presión, así como la caída de presión por unidad de longitud y el aumento porcentual del número de Reynolds. Se compararon los resultados obtenidos con datos experimentales reportados en la literatura [6] y se realizaron análisis estadísticos de los resultados con respecto a variables como la porosidad, la velocidad de entrada del fluido, la forma y el método de creación del modelo geométrico.

1. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE

1.1 MODELAMIENTO DE MONOLITOS TIPO ESPUMA

Los monolitos tipo espuma son estructuras unitarias que poseen una relación superficie-volumen grande y porosidades considerablemente elevadas. Dichas características hacen que estas estructuras sean atractivas en procesos en donde se requieran elevadas áreas superficiales y tiempos de proceso cortos [5]. Debido a esto, los monolitos tipo espuma tienen un gran número de aplicaciones en la industria química, que van desde su uso como filtros hasta la utilización de los mismos como reactores químicos. El número de investigaciones de estas estructuras ha venido en crecimiento con el propósito de poder plantear modelos matemáticos que permitan describir tanto su estructura física como cualquier fenómeno que ocurra en su interior.

Figura 1. Estructura típica de un monolito tipo espuma



Varios modelos se han reportado en la literatura [3, 7, 10] para describir los fenómenos básicos tales como la transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento en monolitos, siendo esta última de gran interés para predecir la caída de presión y el perfil de velocidad que desarrolla el flujo de un fluido a través de este medio. Estas variables determinan directamente la hidrodinámica del sistema que es de importancia en la determinación del tiempo de residencia del fluido dentro de la espuma.

El comportamiento hidrodinámico de cualquier fluido a través de un cuerpo está estrechamente ligado a su estructura interna. Sin embargo, en el caso de los monolitos espuma existen en la actualidad pocos modelos en la literatura en los que se presente de forma suficientemente explícita la influencia de su geometría. Estos modelos van desde el planteamiento de volúmenes elementales representativos hasta el tratamiento digital de imágenes tomadas por medio de tomografías de rayos X o MRI.

1.1.1 Modelamiento teórico

Entre los primeros modelos planteados para predecir la caída de presión en medios porosos se encuentra la ecuación de Forchheimer (Ecuación 1). En esta ecuación $\Delta P/L$ es la caída de presión por unidad de longitud, V es la velocidad superficial, y a_0 y a_1 son constantes. La interpretación más comúnmente aceptada de las constantes de la ecuación es que a_0 representa las contribuciones viscosas a la resistencia al flujo y a_1 representa las contribuciones inerciales. [5]

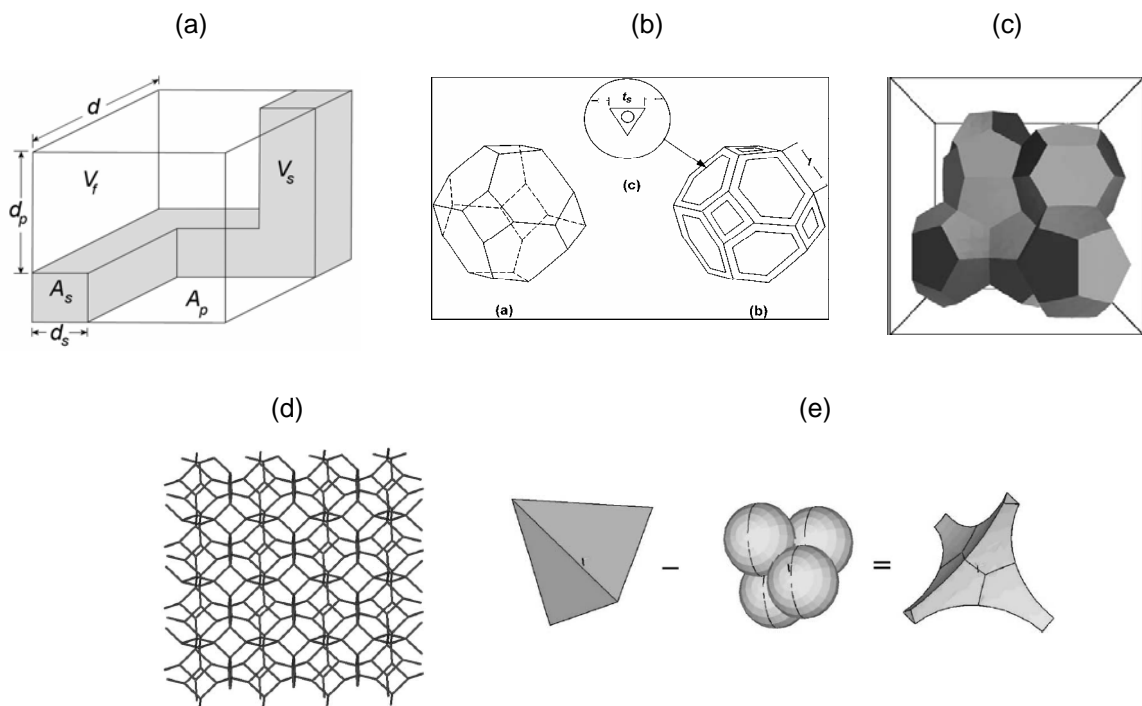
$$\frac{\Delta P}{L} = a_0 V + a_1 V^2 \quad (1)$$

Una primera aproximación de la estructura de la espuma fue propuesta por Du Plessis et al. [13], quienes con su modelo geométrico de prismas rectangulares trataron de capturar los aspectos más relevantes de la estructura y aplicaron balances de cantidad de movimiento usando como fluidos de trabajo glicerol y agua. En este trabajo se encontró básicamente una expresión para el diámetro de poro y un modelo matemático para predecir la caída de presión sobre esta geometría en particular (ver Figura 2a). A partir de esta aproximación Lu et al. [11] modeló el flujo de un fluido a través de una espuma de celda abierta como el flujo alrededor de un conjunto de cilindros. Esta propuesta posteriormente fue comparada con datos experimentales dando resultados de mejor precisión que los de Du Plessis ya que incluían el término convectivo para transporte de calor y cantidad de movimiento.

Con el creciente número de aplicaciones que presentaban las espumas monolíticas fue necesario aumentar el detalle en el modelamiento geométrico de su estructura. Se propusieron nuevas formas de volúmenes representativos que contaban con mayor

fundamento teórico. Entre estas propuestas se encuentra el tetracaidecahedron, una figura de ocho caras hexagonales y seis cuadriláteros postulada por Lord Kelvin que satisfacía las condiciones de Plateau para la tensión superficial de espumas y se caracterizaba por poseer una energía superficial mínima (ver Figura 2b). Sobre esta geometría se realizaron varios estudios no solo en la ingeniería de procesos sino también en la mecánica estructural en la cual se determinan propiedades como el módulo de Young y la relación de Poisson. Investigaciones como las de Li et al. [8, 9], usaron esta geometría para desarrollar modelos matemáticos que permiten predecir dichas propiedades (ver Figura 2d).

Figura 2. Volúmenes elementales representativos propuestos en la literatura: (a) Du Plessis et al. [13], (b). Tetracaidecahedron, (c). Boomsma et al. [7], (d). Li et al. [8, 9], (e). Sihn et al. [16].



Boomsma et al. [7], simulaban el flujo a través de una espuma de celda abierta metálica haciendo modificaciones al modelo del tetracaidecahedron para proponer una estructura que minimiza aun más su energía superficial. Esta nueva estructura consiste de ocho unidades de igual volumen de las cuales dos son dodecaedros y las seis restantes son poliedros con doce lados pentagonales y dos lados hexagonales. Sobre esta estructura se

aplicaron los balances de cantidad de movimiento a un flujo de agua, se calcularon el perfil de velocidad interno y la caída de presión utilizando como método de solución del modelo la técnica de los elementos finitos (ver Figura 2c).

Sihn et al. [16] modelaron una espuma de carbón, mediante un volumen elemental representativo basado en un tetraedro ordinario con superposición de esferas. En este trabajo se predijeron la densidad aparente de la espuma, el módulo de Young y la razón de Poisson (ver Figura 2e).

1.1.2 Modelamiento a partir de estructuras reales

Algunos investigadores han modelado el comportamiento de medios porosos partiendo de su estructura geométrica real, obteniendo resultados de mayor exactitud que los modelos teóricos. Richardson et al. [5] calcularon, con la ayuda de imágenes digitales de la espuma, distribuciones de tamaño de poro teniendo en cuenta la densidad de poro y la presencia de recubrimiento catalítico. Así mismo, estos autores determinaron los parámetros de un modelo semiempírico para el cálculo de la caída de presión de un flujo a través de este medio poroso.

Montminy et al. [12], caracterizaron la estructura tridimensional de una espuma polimérica a partir del tratamiento digital de imágenes obtenidas por medio de tomografías de rayos X. Estas imágenes digitalizadas fueron tratadas estadísticamente para caracterizar la geometría de la espuma mediante distribuciones de forma, tamaño, longitud, área y volumen de poro, entre otros.

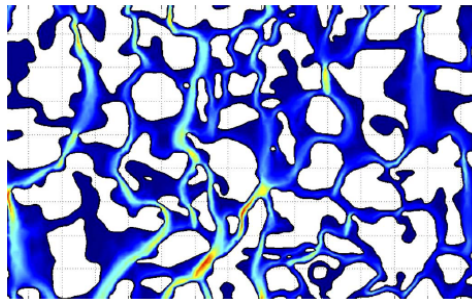
Keller et al. [2], usando el tratamiento de imágenes, digitalizaron la imagen de una espuma y la utilizaron directamente como geometría bidimensional. Sobre esta estructura se aplicaron los balances de cantidad de movimiento utilizando como método de solución del modelo la técnica de los elementos finitos. De esta última propuesta se obtuvieron estructuras como las que se muestran en la Figura 3.

La mayoría de los modelos mencionados fueron validados por sus autores mediante datos experimentales, obtenidos por medición propia o tomados de otros trabajos. En el trabajo de Du Plessis et al. [13] se reportan datos experimentales de caída de presión en

espumas para glicerol y agua como fluido de trabajo. En Boomsma et al. [7] los datos obtenidos de la simulación son comparados con datos experimentales de velocidad y caída de presión usando como fluido de trabajo agua. El mismo conjunto de datos fue obtenido por medición propia en la investigación de Richardson et al. [5] para aire como fluido de trabajo.

Hasta ahora no se ha modelado el comportamiento de monolitos tipo espuma utilizando modelos geométricos extraídos de estructuras reales.

Figura 3. Estructura geométrica bidimensional obtenida a partir de tratamiento digital de imágenes [2]



1.2 MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

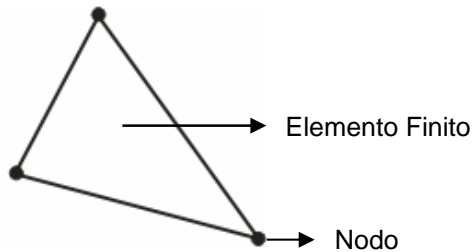
El método de los elementos finitos (MEF) es un método numérico avanzado destinado a resolver mediante ecuaciones matriciales las ecuaciones diferenciales que se plantean en sistemas discretos o continuos, bajo ciertas condiciones de frontera [18].

Las aplicaciones actuales de este método son muy extensas e incluyen sistemas lineales y no lineales, estáticos y dinámicos, en áreas tales como mecánica de sólidos, teoría de la elasticidad, mecánica de fluidos, transferencia de calor y electromagnetismo.

En el caso de sistemas continuos, el método consiste en transformar una estructura o *dominio* de naturaleza continua en un modelo discreto aproximado, lo cual se logra dividiendo dicho dominio en un número finito de partes o *elementos*. Esta transformación

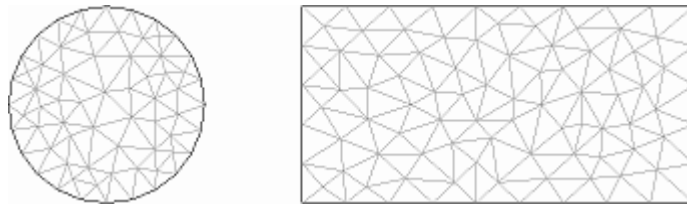
se denomina discretización. Los vértices de cada elemento se conocen como *nodos* [18]. La Figura 4 muestra un único elemento finito triangular plano.

Figura 4. Elemento finito triangular plano



El conjunto de nodos y elementos se denomina malla de elementos finitos. La Figura 5 muestra una malla de elementos finitos triangulares para una estructura circular y otra rectangular generada por el software FEMLAB.

Figura 5. Mallas de elementos finitos triangulares generadas por el software FEMLAB



Al dominio de cálculo se le asocia el modelo matemático que representa su comportamiento fenomenológico (físicoquímico, mecánico, etc.), junto con los parámetros numéricos propios del sistema (viscosidad, densidad, conductividad térmica, coeficiente de difusividad, etc.) [19]. Además de esto, se le deben asignar a la estructura las condiciones de frontera correspondientes al problema.

La solución del sistema de ecuaciones se realiza sobre la malla creada. El comportamiento en el interior de cada elemento queda definido a partir del comportamiento de los nodos mediante funciones de interpolación. La respuesta es por tanto una aproximación de los valores de una función a partir del conocimiento de los valores de un número determinado y finito de puntos.

2. METODOLOGÍA

2.1 FORMULACIÓN DEL MODELO GEOMÉTRICO

Para este estudio se utilizaron monolitos tipo espuma crudos de sílice fundida de 10 y 30 PPI (poros por pulgada lineal), provistos por Vesuvius Hi-Tech Ceramics. Las características de los monolitos estudiados se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Características de los monolitos estudiados

Densidad de Poro (PPI)	Diámetro (cm)	Longitud (cm)	Porosidad (%)
10	4.7	1.27	87.8
30	4.3	1.11	87.4

En este trabajo se emplearon dos estrategias para la creación del modelo geométrico. La primera consiste en extraer el modelo directamente de la estructura real mediante la tomografía de rayos X. La segunda estrategia consiste en construir el modelo geométrico a partir de datos estadísticos referentes a la geometría de los monolitos tipo espuma, utilizando para ello un algoritmo computacional. En las secciones 2.1.1 y 2.1.2 se hablará en detalle de las dos estrategias empleadas.

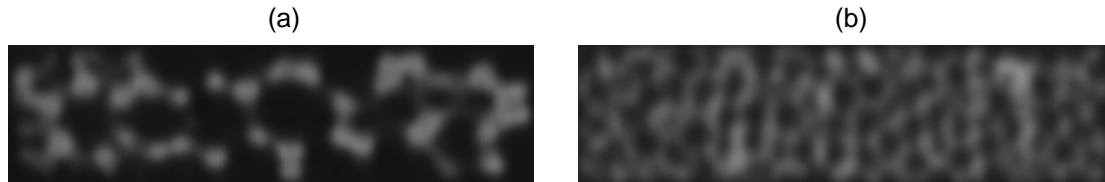
En este estudio se decidió adoptar un modelo geométrico bidimensional debido a que la simulación de un modelo tridimensional requiere de una capacidad de cálculo excesiva, superior a la que se dispone actualmente.

2.1.1 Modelo geométrico a partir de tomografía de rayos X

La tomografía de rayos X es una técnica no destructiva que permite extraer directamente imágenes de la estructura de los monolitos reales. A estos monolitos se les aplicó tomografía de rayos X en un tomógrafo helicoidal de multicortes marca Toshiba Aquilion32. Las imágenes obtenidas consisten en cortes transversales de los monolitos, espaciados 0.5 mm uno de otro. Con el fin de que las imágenes a estudiar fueran

representativas se seleccionaron aquellas pertenecientes a la zona central de los monolitos. Dos de las imágenes aportadas por la tomografía se muestran en la Figura 6.

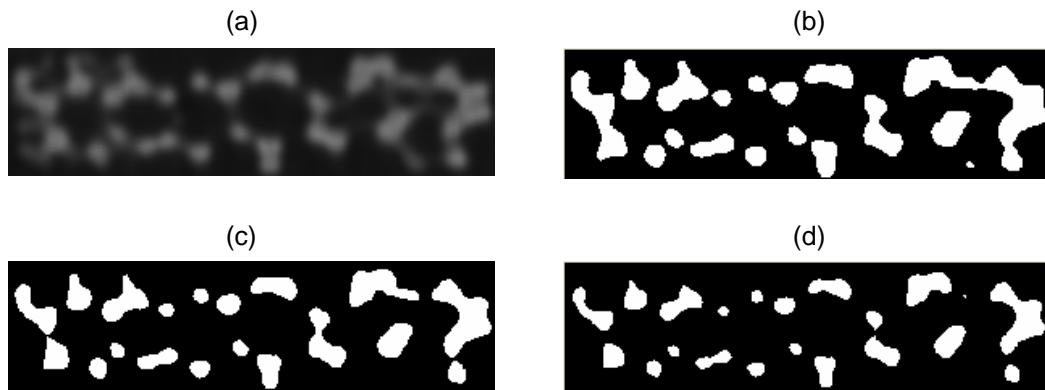
Figura 6. Cortes transversales obtenidos por tomografía de rayos X de los monolitos de (a) 10 PPI y (b) 30 PPI



En esta figura las zonas claras representan el sólido que compone la estructura del monolito y las zonas oscuras representan el espacio vacío. Para obtener el modelo geométrico es necesario dividir la imagen en dos fases claramente diferenciadas, esto se logra mediante un procedimiento propio del tratamiento de imágenes llamado segmentación. Mediante este proceso, la imagen original en escala de grises (256 colores), se convierte a una imagen en blanco y negro (binaria).

Para la segmentación es necesario definir un valor dentro del rango de colores (de 0 a 255) conocido como umbral. Al aplicar la segmentación sobre la imagen los valores de color superiores al umbral son asignados a la fase uno (sólido) y los valores inferiores se asignan a la fase dos (vacío). Existen varios métodos para determinar el umbral, todos ellos se basan en el análisis del histograma de las intensidades del color de la imagen. Cada uno de estos métodos da como resultado un umbral diferente y a su vez, cada umbral, genera un modelo geométrico con porosidad diferente. Debido a que no existe un criterio que establezca cuál umbral es el mejor, no es posible determinar, al menos en este punto, cuál modelo resultante es el mejor. Por esta razón se decidió tratar cada una de las imágenes a estudiar con tres umbrales diferentes y estudiar la hidrodinámica de los modelos generados. De esta forma, para cada imagen de los monolitos se crearon tres modelos, con valores de porosidad de aproximadamente 75, 80 y 85%. En la Figura 7 se observan las tres imágenes segmentadas junto con la imagen original para un corte transversal del monolito de 10 PPI.

Figura 7. (a) Imagen original del monolito de 10 PPI junto con imágenes segmentadas de diferentes porosidades: (b) 75% (c) 80% (d) 85%

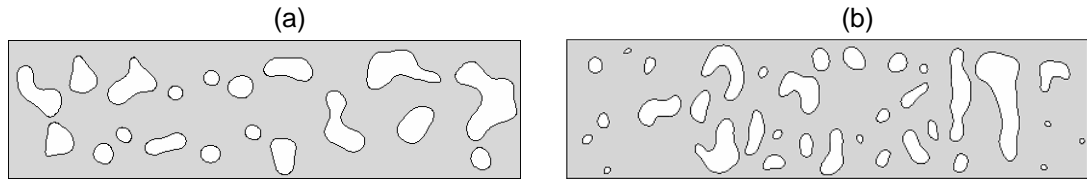


Después de realizar la segmentación es preciso convertir la imagen binaria en un modelo geométrico sobre el cual se aplicarán los balances de cantidad de movimiento. Para esta etapa es necesario identificar el contorno de la imagen segmentada y convertirlo en una estructura sólida que sea plenamente reconocida por el software FEMLAB.

Finalmente se realiza un procedimiento que hemos llamado depuración. La depuración consiste en eliminar las secciones pequeñas de sólido, menores a un tamaño mínimo predefinido. La depuración se hace necesaria ya que la presencia de estas pequeñas secciones de sólido disminuye la eficiencia del método numérico empleado para la solución de los balances de cantidad de movimiento. Lo anterior se debe a que en las regiones cercanas a dichas secciones, la malla empleada por el método numérico se hace muy fina, incrementando en gran medida el consumo de memoria y el tiempo de cómputo. Pruebas preliminares permitieron establecer que utilizando un tamaño mínimo de sólido de 0.1 mm^2 para la depuración, el modelo resultante muestra un comportamiento hidrodinámico prácticamente igual que el modelo original.

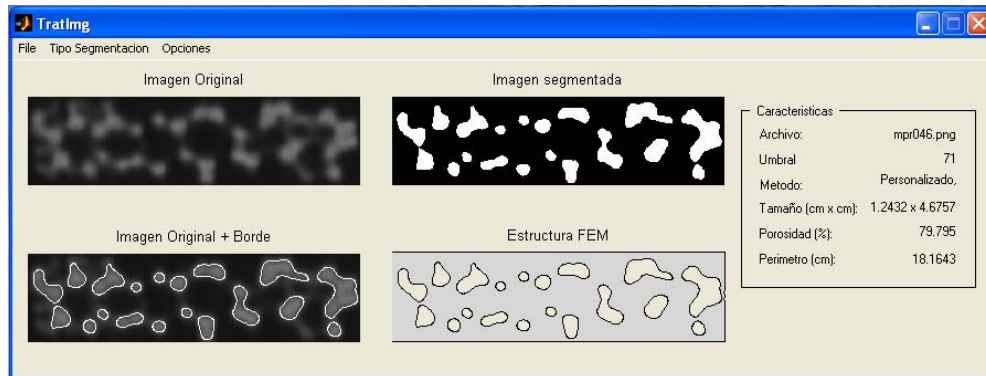
La Figura 8 muestra dos de los modelos geométricos obtenidos a partir de las tomografías de los monolitos de 10 y 30 PPI. Las zonas de color blanco representan el sólido y las zonas de color gris representan el espacio vacío, este último es el lugar por donde circula el fluido y por tanto donde deben aplicarse los balances de cantidad de movimiento.

Figura 8. Modelos geométricos obtenidos por tratamiento de imágenes de tomografías de rayos X de los monolitos de (a) 10 PPI y (b) 30 PPI, con una porosidad de 80%



Se desarrolló una rutina de cálculo en MATLAB con el fin de agilizar todo el proceso de obtener el modelo geométrico a partir de las imágenes aportadas por las tomografías. Esta rutina permite abrir la imagen a tratar y segmentarla por medio de los métodos convencionales del tratamiento digital de imágenes (kapur, triangular, etc.). Así mismo, la rutina de cálculo realiza la determinación de las características del modelo geométrico creado como porosidad y perímetro. El modelo obtenido puede guardarse como un archivo de FEMLAB. La interfaz gráfica de la rutina creada se muestra en la Figura 9.

Figura 9. Interfaz gráfica de la rutina creada para realizar el tratamiento digital de imágenes



2.1.2 Modelo geométrico a partir de datos estadísticos

Inicialmente, se propusieron modelos geométricos construidos a partir de una distribución de tamaño de poro reportada por Richardson et al. [5] para monolitos tipo espuma de alúmina de las mismas porosidades aquí trabajadas. Sin embargo, pruebas preliminares indicaron que las geometrías resultantes eran más complejas y la simulación de su comportamiento hidrodinámico requería una capacidad de cómputo excesiva. Por tal motivo, los modelos geométricos construidos a partir de la distribución de Richardson et

al. [5] no fueron implementados en este trabajo. En el Anexo A se describe en detalle el procedimiento empleado para la creación de estos modelos.

Debido a lo anterior, se desarrolló una estrategia adicional para la creación de los modelos geométricos. Se analizaron las tomografías de rayos X del monolito de 10 PPI con el fin de recopilar datos referentes a sus características geométricas. Estos datos corresponden al número de secciones sólidas presentes en las tomografías y sus respectivas áreas. A partir de estos datos se realizó una distribución de tamaño para las secciones de sólido presentes en la estructura. Se creó una rutina de cálculo que construye modelos geométricos a partir de la distribución de tamaño de sólidos calculada, y que permite definir la geometría en función de las dimensiones (largo y ancho) y la porosidad del monolito.

La construcción del modelo se inicia con una estructura de porosidad de 100%, es decir, completamente vacía, a medida que avanza la rutina se van agregando secciones sólidas a esta estructura, de tal forma que la porosidad va disminuyendo; la rutina se detiene cuando la estructura alcanza la porosidad deseada.

Figura 10. Modelo geométrico generado a partir de datos estadísticos de distribución de tamaño de sólidos



A continuación se describe brevemente la metodología empleada en la creación de estos modelos. El primer paso consiste en hacer un estimativo del número de secciones sólidas necesarias para alcanzar la porosidad deseada; una vez hecho esto, se le asigna a cada uno de estos sólidos su correspondiente tamaño, teniendo en cuenta la distribución de tamaño de sólidos calculada previamente. Cada sección de sólido se construye a partir de pequeñas secciones circulares que se van agregando una a una hasta alcanzar el tamaño asignado del sólido. Cada vez que se agrega una sección circular se calcula la porosidad de la estructura con el fin de no sobrepasar la porosidad deseada. La posición de las secciones sólidas se determina aleatoriamente, aunque siempre evitando que se solapen

con otras secciones ya creadas. Una vez alcanzada la porosidad deseada se realiza la depuración del modelo. La aleatoriedad implícita en la metodología de creación de los modelos geométricos ocasiona que cada modelo generado sea único. Uno de los modelos obtenidos se muestra en la Figura 10.

2.2 FORMULACIÓN DEL MODELO HIDRODINÁMICO

Sobre cada uno de los modelos geométricos obtenidos, se realizó el modelamiento bidimensional de un flujo de aire con una densidad de 1.161 kg/m^3 y una viscosidad de $1.827 \times 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$. Se emplearon tres velocidades de flujo de entrada distintas: 2, 4 y 6 m/s, en régimen laminar con perfil completamente desarrollado.

El modelo empleado para llevar a cabo el cálculo de los perfiles internos de velocidad y presión está compuesto por la ecuación de Navier-Stokes bidimensional y la ecuación de continuidad (Ecuaciones 2 y 3). En estas ecuaciones ρ es la densidad del fluido, η es la viscosidad del fluido, u es el vector velocidad y p es la presión. Para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales resultante se empleó el método de los elementos finitos y su ejecución se llevó a cabo mediante el software FEMLAB.

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla u + (\nabla u)^T) + \rho (u \cdot \nabla) u + \nabla p = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (3)$$

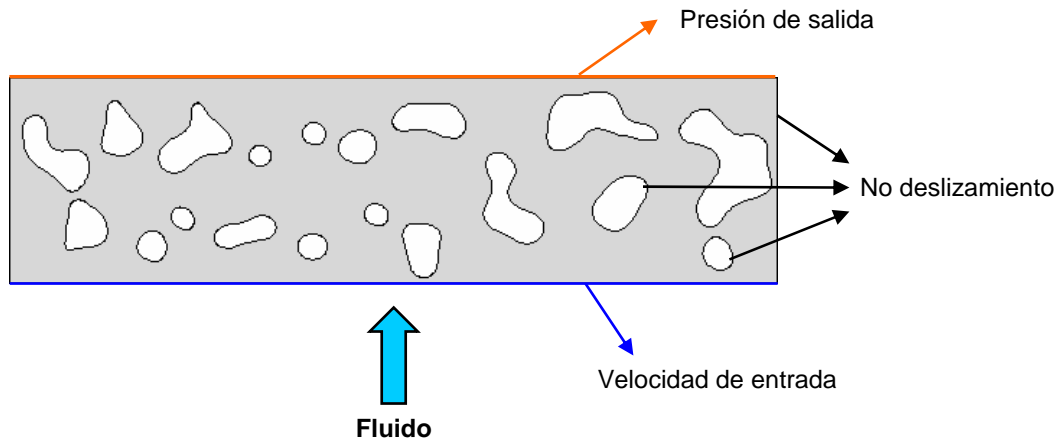
Las condiciones de frontera empleadas para llevar a cabo la solución del modelo hidrodinámico se muestran en las ecuaciones 4, 5 y 6. En donde u_{max} es la velocidad máxima del perfil de velocidad de entrada, x es la posición en el radio del monolito, R es el radio del monolito, p_{atm} es la presión atmosférica y n es la componente normal. La Figura 11 ilustra las condiciones de frontera aplicadas sobre el modelo geométrico.

Velocidad de entrada:
$$u = 4u_{max} \left(x - \left(\frac{x}{R} \right)^2 \right) \quad (4)$$

Presión de salida:
$$\eta (\nabla u + (\nabla u)^T) \cdot n = p_{atm} \cdot n \quad (5)$$

No deslizamiento:
$$u = 0 \quad (6)$$

Figura 11. Condiciones de frontera del modelo hidrodinámico



El modelo se formuló bajo condiciones isotérmicas, sin reacción química, empleando aire como fluido de trabajo. El aire es un fluido compresible ya que sus propiedades de volumen específico y densidad varían considerablemente con los cambios de presión y temperatura. Sin embargo, dadas las condiciones isotérmicas en las que se ha planteado el modelo hidrodinámico y bajo la premisa de que en estas estructuras monolíticas tanto la presión como la caída de presión son bajas, el fluido de trabajo se puede considerar como un fluido incompresible, por lo que la ecuación de Navier-Stokes es válida.

2.3 OPTIMIZACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

La alta irregularidad de la geometría de los monolitos tipo espuma junto con la complejidad del modelo hidrodinámico empleado en la simulación (ecuaciones diferenciales parciales no lineales) ocasionan dificultades en la convergencia de la solución. Para alcanzar la convergencia es necesario incrementar el número de elementos finitos empleados por el método, sin embargo, esto implica un aumento en el requerimiento de capacidad de cómputo. Para este estudio, se realizó un proceso de optimización de los parámetros del método de los elementos finitos con el fin de alcanzar la convergencia de la solución sin sobrepasar la capacidad de cómputo disponible.

2.3.1 Características de la malla

La malla es uno de los aspectos más determinantes para alcanzar la convergencia de la solución, puesto que la malla establece el tamaño y la cantidad de elementos finitos utilizados por el método numérico. FEMLAB tiene como parámetros de ajuste de la malla: tipo de malla (Extra fina, fina, normal, gruesa, etc.), tamaño máximo de elemento, factor de escalado, velocidad de crecimiento, factor de curvatura de la malla, entre otros.

Se estudió el efecto de cada parámetro por separado y de las posibles combinaciones de estos. Se encontró que el tipo de malla y el tamaño máximo de elementos, eran los factores más influyentes sobre la convergencia del modelo. La malla escogida para la simulación es de tipo extra fina y el tamaño máximo de elemento es de 3×10^{-4} para los modelos de 10 PPI y de 4×10^{-4} para los modelos de 30 PPI.

2.3.2 Parámetros del solver

Para usar adecuadamente el *solver* no lineal es necesario hacer un ajuste sus parámetros. Entre los parámetros que ofrece FEMLAB para realizar el ajuste se encuentran: tipo de método (directo o iterativo), el tipo de preconditionador de matrices y el criterio de convergencia. Se encontró que utilizando un criterio de convergencia de 1×10^{-6} , un método iterativo y un preconditionador de matrices tipo SPOOLES, la solución converge. Además de lo anterior es necesario especificar dentro del *solver* que el problema a resolver es altamente no lineal.

2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO

Se analizó la validez del modelo propuesto por medio de la comparación con datos experimentales reportados en Richardson et al [5], referentes a la caída de presión en espumas monolíticas. Se compararon, únicamente, valores de entrada y de salida, es decir, no se validaron los perfiles internos.

2.5 ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LOS RESULTADOS

Se realizó un análisis estadístico de los resultados obtenidos, utilizando el Toolbox Estadístico de MATLAB. Se tomaron como factores experimentales la porosidad, la velocidad de entrada del fluido, la forma y método de creación del modelo geométrico. Las variables de resultados corresponden a los datos de la caída de presión por unidad de longitud y el aumento porcentual del número de Reynolds.

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

Para llevar a cabo la simulación se utilizaron cuatro planos transversales obtenidos de las tomografías de rayos X del monolito de 10 PPI y tres planos del monolito de 30 PPI. Como se mencionó en la sección 2.1.1, a partir de cada una de estas imágenes originales se crearon tres modelos geométricos de distintas porosidades (75, 80 y 85%), es decir se crearon en total doce estructuras de 10 PPI y nueve de 30 PPI. Adicionalmente, se crearon dos modelos geométricos de 10 PPI con una porosidad de 85% construidos a partir de la distribución de tamaño de sólidos calculada, utilizando la metodología descrita en la sección 2.1.2; cada modelo posee una forma geométrica particular que lo diferencia del otro. Sobre cada una de dichas estructuras, se realizó el modelamiento bidimensional de un flujo de aire usando tres velocidades de flujo de entrada distintas, 2, 4 y 6 m/s. Los resultados obtenidos son los perfiles internos de velocidad y presión, la caída de presión global por unidad de longitud del monolito, los perfiles axiales de presión y el aumento porcentual del número de Reynolds.

La Figura 12 muestra los perfiles internos de velocidad y presión con un valor de velocidad de entrada de flujo de 4 m/s, para los tres modelos geométricos de diferentes porosidades obtenidos a partir de una misma sección longitudinal del monolito de 10 PPI. Por motivos de escala, los valores de presión se reportan, en todas las figuras, tomando un valor de referencia de cero para la presión atmosférica.

Los diagramas mostrados ilustran el perfil interno de velocidad y la distribución de presión dentro de la estructura monolítica como un mapa de colores. Los valores mínimos de velocidad y presión se representan con color azul oscuro y los valores máximos con color rojo oscuro. De los diagramas anteriores se observa que los máximos de velocidad y presión se encuentran en la estructura de menor porosidad (75%), esto se debe a que esta estructura existen mayor cantidad de sólidos, lo que genera la aparición zonas cerradas y estrechas que ofrecen mayor resistencia al flujo. En estas zonas se producen contracciones las cuales ocasionan un incremento sustancial en el valor de la velocidad de fluido. Por el contrario un aumento en la porosidad del monolito hace que se formen

nuevos caminos preferenciales de flujo, lo cual permite reducir las zonas de fluido estancado, disminuyendo así la resistencia al flujo.

La Figura 13 muestra los perfiles de velocidad y presión para una misma estructura obtenida a partir de las tomografías del monolito de 10 PPI, a tres velocidades de entrada de flujo distintas. En estos se observa la formación de caminos preferenciales de flujo así como zonas en las que hay ausencia de flujo (velocidad igual a cero), las cuales son representadas en el diagrama por un color azul oscuro.

La Figura 14 muestra el comportamiento hidrodinámico de las estructuras de 10 y 30 PPI extraídas de las tomografías de rayos X. Puede observarse que la estructura de 30 PPI presenta mayor cantidad de secciones sólidas, debido a esto se forman mayor número de caminos preferenciales. Sin embargo las secciones sólidas son más pequeñas que las presentes en la estructura de 10 PPI por lo que tienen menor impacto en el comportamiento global, produciendo una disminución en la resistencia al flujo.

En la Figura 15 se compara el comportamiento de las estructuras de 10 PPI creadas a partir de las tomografías de rayos X y las creadas a partir de datos estadísticos. Se observa que, en general, las dos estructuras presentan un comportamiento hidrodinámico similar, sin embargo, la segunda estructura presenta menor cantidad de zonas estrechas por lo que ofrece una resistencia al flujo más baja.

Figura 12. Perfiles internos de velocidad y presión para estructuras de diferentes porosidades: (a) 75%, (b) 80%, (c) 85%, obtenidas a partir de una de las tomografías del monolito de 10 PPI, con una velocidad de entrada de 4 m/s

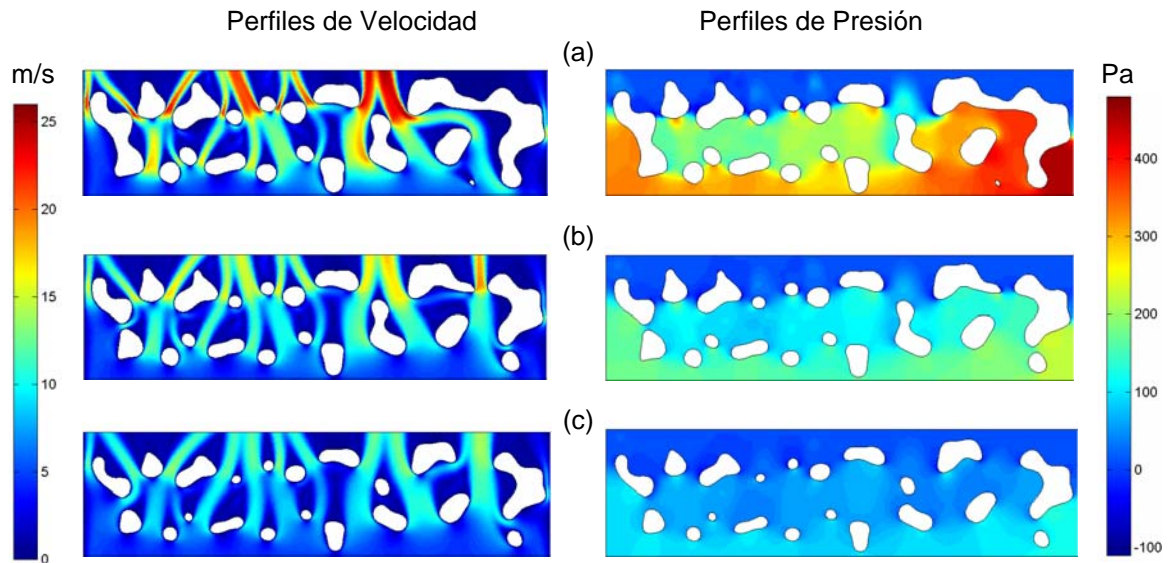


Figura 13. Perfiles internos de velocidad y presión para una estructura con una porosidad de 85%, obtenida a partir de una de las tomografías del monolito de 10 PPI, a diferentes velocidades de entrada: (a) 2 m/s, (b) 4 m/s, (c) 6 m/s

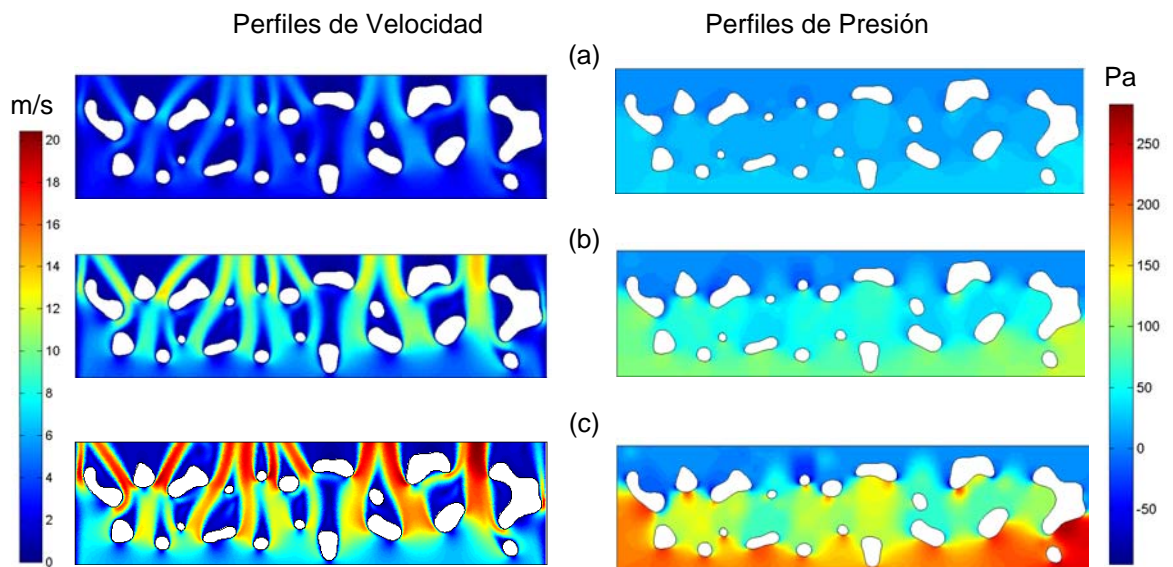


Figura 14. Perfiles internos de velocidad y presión, para estructuras de diferentes densidades de poro: (a) 10 PPI y (b) 30 PPI, y una porosidad de 85%, obtenidas a partir de tomografías de rayos X, con una velocidad de entrada de flujo de 6 m/s

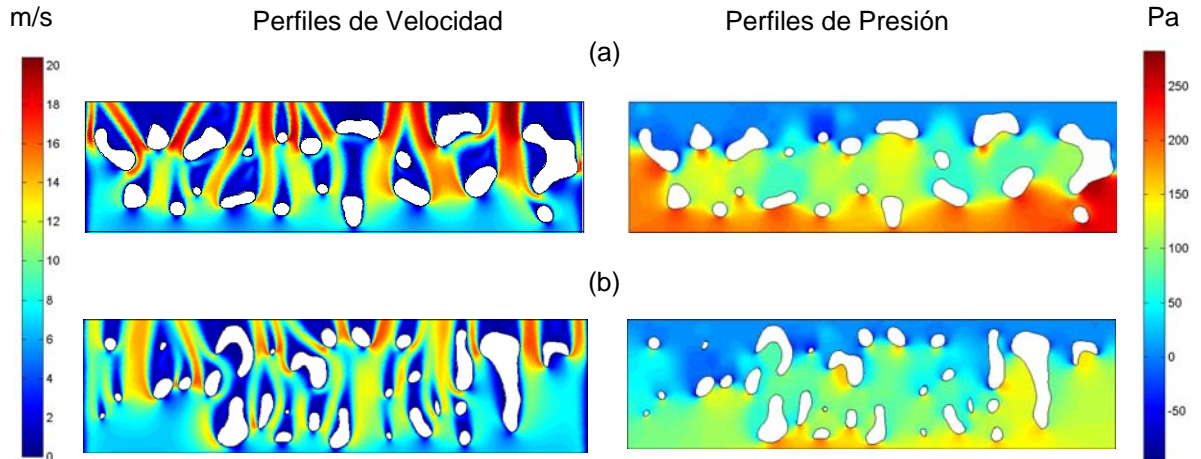
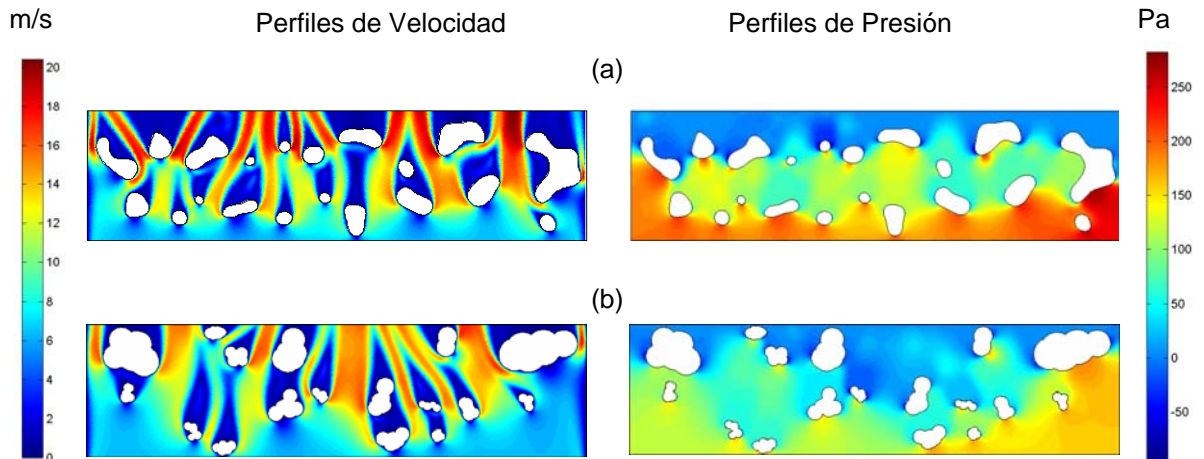


Figura 15. Perfiles internos de velocidad y presión, para estructuras de 10 PPI obtenidas por medio de diferentes metodologías: (a) tomografía de rayos X y (b) datos estadísticos, con una velocidad de entrada de flujo de 6 m/s



A partir de los perfiles internos de presión se calcularon los perfiles axiales de presión. Para esto se tomó el promedio de los valores de presión en 10 diferentes puntos equiespaciados a lo largo cada una de las estructuras. La Figura 16 muestra el perfil axial de presión para una de las estructuras creadas a partir de las tomografías del monolito de 10 PPI, junto con su respectivo perfil de presión. Se observa un comportamiento escalonado del perfil axial, es decir zonas donde la presión permanece casi constante (zonas 1, 3 y 5) y zonas donde se produce una rápida caída de presión (zonas 2 y 4).

La Figura 16c muestra que las zonas 2 y 4 presentan menor de porosidad, es decir, en estas zonas existen mayor número de secciones sólidas. Este aumento del número de sólidos produce un incremento en la resistencia al flujo y por tanto un descenso de la presión. Además de lo anterior, estos resultados sugieren que la estructura geométrica de los monolitos estudiados, al menos desde el punto de vista bidimensional, no es tan aleatoria como se supuso inicialmente sino que presenta cierto orden. Por otra parte, el comportamiento escalonado del perfil advierte la posibilidad cometer errores en la determinación de la caída de presión por unidad de longitud, al tomar una longitud de monolito pequeña.

Las Figuras 17 y 18 muestran los valores promedio de los perfiles axiales de presión para las estructuras obtenidas a partir de las tomografías del monolito de 10 PPI a diferentes porosidades de la estructura y a diferentes velocidades de entrada del flujo, respectivamente. Se observa que los valores altos de porosidad producen menores caídas de presión, mientras que velocidades altas ocasionan significativos aumentos en la caída de presión. En todos los casos se observa el comportamiento escalonado del perfil.

La Figura 19 muestra los perfiles axiales de presión para las estructuras creadas a partir de las tomografías de los monolitos 10 y 30 PPI. La longitud del monolito se expresa en porcentaje debido a que las estructuras poseen diferentes dimensiones. El perfil de 30 PPI presenta un comportamiento escalonado, al igual que las estructuras de 10 PPI, aunque ligeramente diferente, puesto que se inicia con una zona de rápida caída de presión.

Figura 16. (a) Perfil axial de presión y (b) perfil interno de presión de una de las estructuras obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI con una porosidad de 85% y una velocidad de entrada de 6 m/s

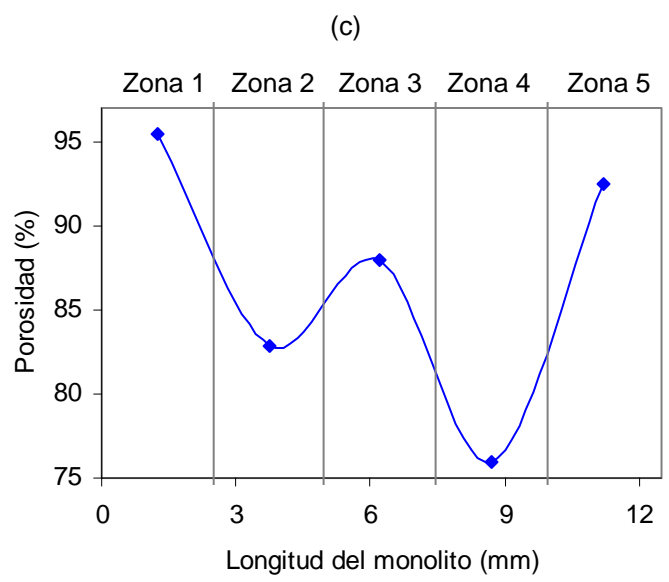
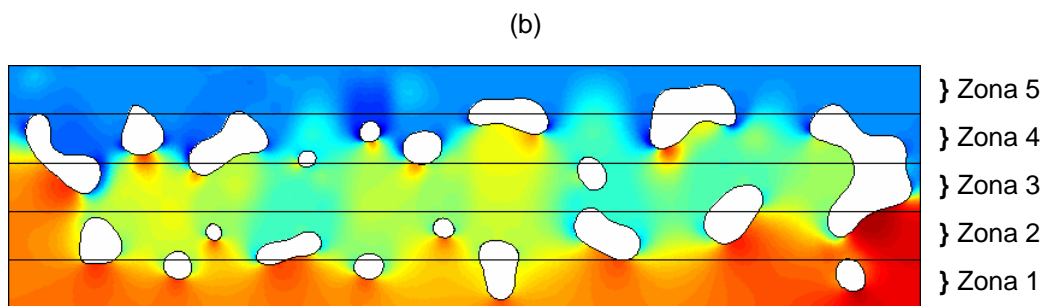
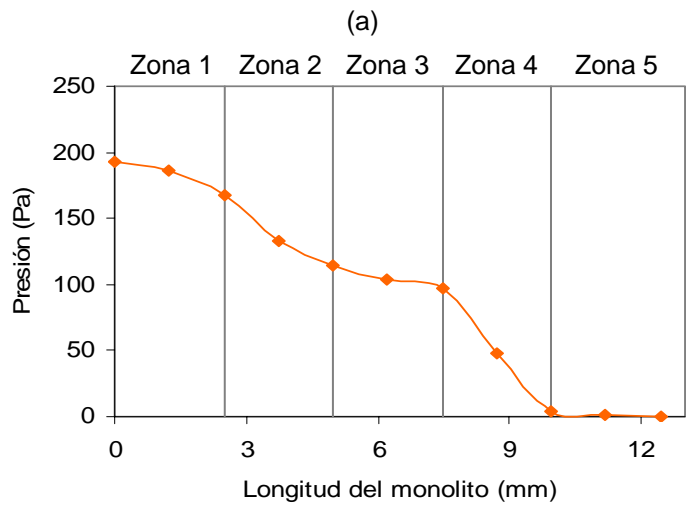


Figura 17. Perfiles axiales de presión de estructuras diferentes porosidades (ϵ), obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI, para una velocidad de entrada de 6 m/s

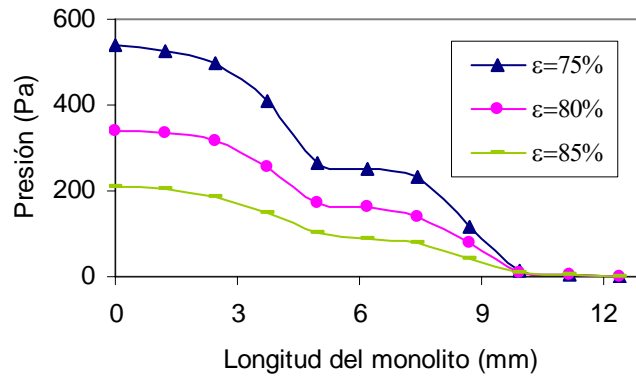


Figura 18. Perfiles axiales de presión de estructuras de porosidad de 75% obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI, a diferentes velocidades de entrada del flujo

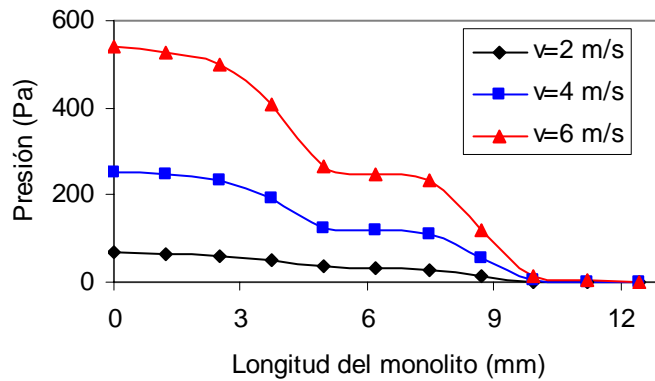


Figura 19. Perfiles axiales de presión de las estructuras obtenidas a partir de las tomografías de los monolitos de 10 y 30 PPI, con una velocidad de entrada de 6 m/s y una porosidad de 85%

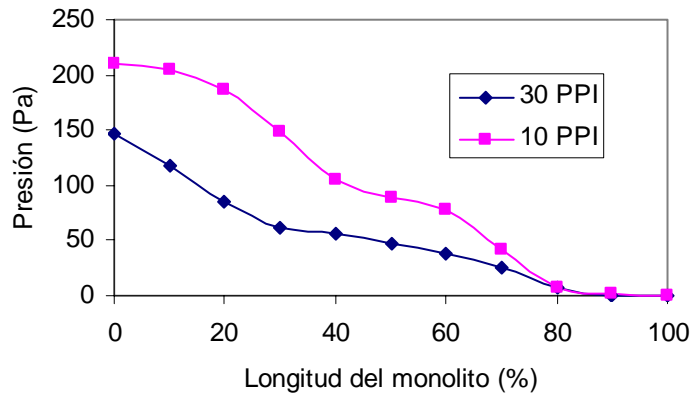
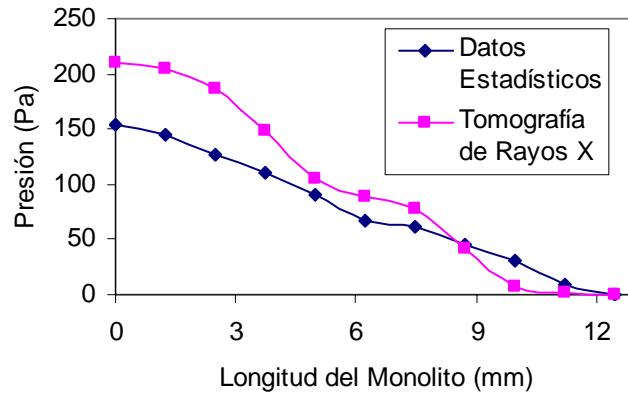


Figura 20. Perfiles axiales de presión de estructuras de 10 PPI creadas por medio de tomografía de rayos X y datos estadísticos, con una velocidad de entrada de 6 m/s y una porosidad de 85%



En la Figura 20 se comparan los perfiles axiales de presión de las estructuras creadas a partir de las tomografías de rayos X del monolito de 10 PPI y las estructuras creadas a partir de datos estadísticos. Es notable el comportamiento más lineal de estas últimas con respecto a las primeras. Esto se debe a una diferencia en la distribución espacial de las secciones sólidas. En los modelos obtenidos por tomografía se observa mayor presencia de sólidos en dos zonas a lo largo del monolito; por el contrario en los modelos creados a partir de datos estadísticos los sólidos se distribuyen de manera aleatoria en toda longitud del modelo, produciendo un cambio más gradual en los valores de presión.

Se calculó el número de Reynolds a la entrada y a la salida de los modelos planteados, con el fin de evaluar la generación de turbulencia. La Figura 21 muestra que el porcentaje de aumento del número de Reynolds de los modelos creados a partir de las tomografías del monolito de 10 PPI es alto; esto indica que se produce un aumento significativo de la turbulencia del fluido en un trayecto muy corto (aproximadamente 1 cm), reflejando así una de las características más importantes de los monolitos tipo espuma.

En la Figura 22 se observa que las estructuras de 30 PPI generan menor grado de turbulencia que las de 10 PPI. Igualmente, la Figura 23 muestra que los modelos creados a partir de datos estadísticos ocasionan menor turbulencia en el fluido que los generados a partir de las tomografías.

Figura 21. Aumento porcentual del número de Reynolds para estructuras diferentes porosidades (ε), obtenidas de las tomografías del monolito de 10 PPI

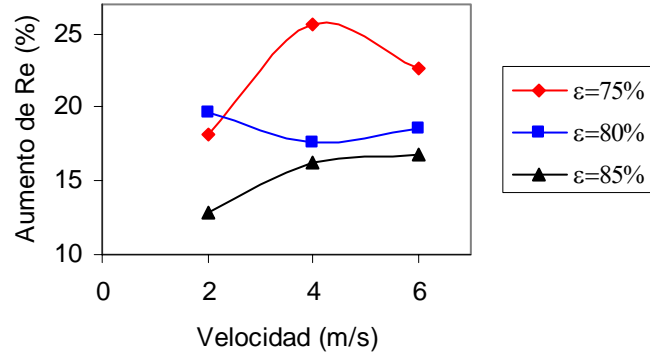


Figura 22. Aumento porcentual del número de Reynolds para estructuras obtenidas a partir de las tomografías de los monolitos de 10 y 30 PPI, con una porosidad de 85%

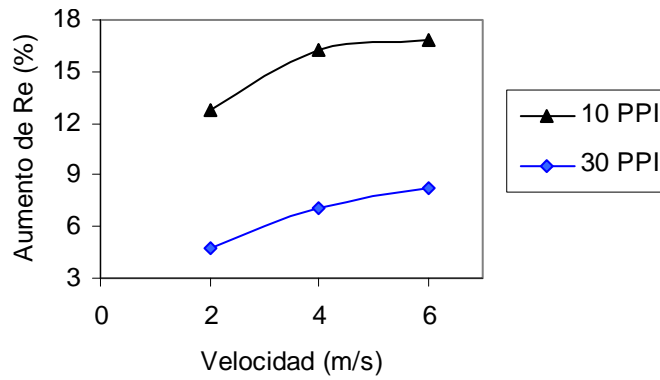
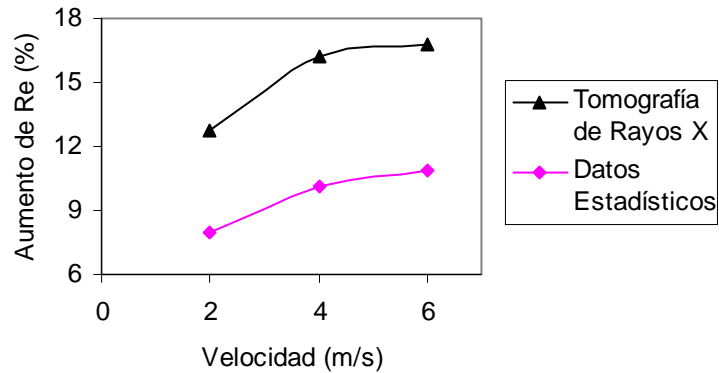


Figura 23. Aumento porcentual del número de Reynolds para estructuras de 10 PPI con una porosidad de 85%, creadas por medio de tomografía de rayos X y datos estadísticos



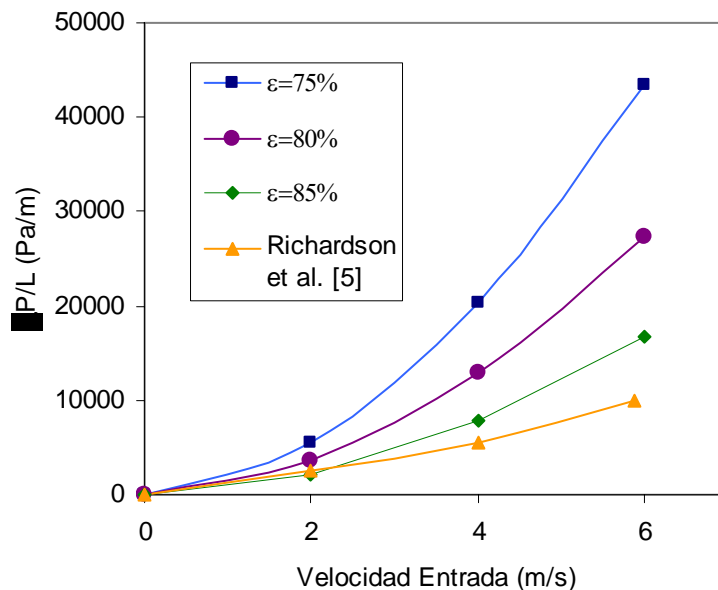
3.1 COMPARACIÓN CON DATOS EXPERIMENTALES

A partir del perfil de presión se calculó la caída de presión global por unidad de longitud para cada uno de los modelos estudiados. Los resultados obtenidos de la caída de presión fueron comparados con datos experimentales reportados en Richardson et al. [5]. Éstos últimos fueron obtenidos para monolitos de 10 y 30 PPI y bajo las mismas condiciones de operación utilizadas en esta simulación.

3.1.1 Estructuras de 10 PPI

La Figura 24 muestra los valores promedio de caída de presión a diferentes velocidades de entrada del fluido para las tres porosidades manejadas en los modelos geométricos obtenidos a partir de las tomografías del monolito de 10 PPI. Se observa que la caída de presión presenta una tendencia parabólica con respecto a la velocidad, lo cual coincide con la suposición básica de la ecuación de Forscheimer (Ecuación 1).

Figura 24. Caída de presión por unidad de longitud de las simulaciones de 10 PPI obtenidas de las tomografías junto con los datos reportados por Richardson et al. [5]



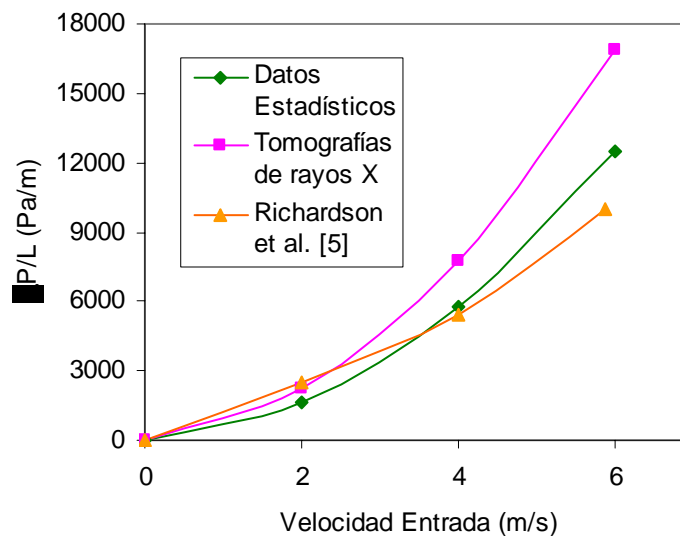
Los resultados muestran que las caídas de presión predichas por los modelos planteados son mayores a los reportados en la literatura. Posiblemente esto se debe a diferencias entre el experimento de Richardson et al. [5] y los modelos utilizados en esta simulación:

en el experimento se utilizó un montaje de tres monolitos en serie de 1.27 cm de diámetro y 2.54 cm de longitud cada uno; mientras que en la simulación se utilizó un monolito 4.7 cm de diámetro y 1.27 cm de longitud, por lo tanto, la relación diámetro-longitud utilizada en ambos casos es muy diferente. Por otra parte, el material de los monolitos empleados por Richardson et al. [5] es alúmina y el de los monolitos simulados es sílica.

Puede observarse que la caída de presión global calculada tiende al valor de los datos experimentales reportados en la literatura cuando la porosidad del modelo aumenta y se acerca a la porosidad real del monolito. Lo anterior muestra que es posible obtener buenas aproximaciones al comportamiento real de los monolitos tipo espuma de densidades de poro de 10 PPI a partir de un modelo bidimensional.

En la Figura 25 se comparan los resultados obtenidos para la caída de presión de las estructuras creadas a partir de las tomografías de los monolitos de 10 PPI y las creadas a partir de datos estadísticos. Los dos tipos de estructuras presentan comportamientos similares y cercanos, mostrando así que si bien estas últimas presentan un comportamiento interno diferente (ver Figura 20) pueden ser una buena aproximación al comportamiento global de las estructuras creadas a partir de tomografías de rayos X. Así mismo, se observa una mayor concordancia con los datos experimentales.

Figura 25. Caída de presión por unidad de longitud de las simulaciones de estructuras de 10 PPI creadas por medio de diferentes metodologías, con una porosidad de 85%, junto con los datos reportados por Richardson et al. [5]



3.1.2 Estructuras de 30 PPI

La Figura 26 muestra los valores promedio de caída de presión a diferentes velocidades de entrada del fluido para las tres porosidades manejadas en los modelos geométricos creados a partir de las tomografías del monolito de 30 PPI junto con los datos experimentales reportados por Richardson et al. [5]. Se observa que los valores de presión obtenidos en la simulación están por debajo de los valores experimentales e incluso, como lo muestra la Figura 27, se encuentran por debajo de los valores obtenidos para la simulación de 10 PPI.

Estos resultados contradicen el comportamiento real de los monolitos tipo espuma. Esta discordancia se debe posiblemente a que los monolitos de 30 PPI presentan una geometría tridimensional mucho más compleja que los de 10 PPI (ver Figura 6); sin embargo, para realizar la simulación bidimensional de su comportamiento hidrodinámico fue necesario simplificar demasiado su estructura, hasta tal punto que se han perdido las características geométricas más influyentes en el comportamiento real.

Figura 26. Caída de presión por unidad de longitud de las estructuras obtenidas a partir de las tomografías del monolito de 30 PPI junto con los datos reportados por Richardson et al.[5]

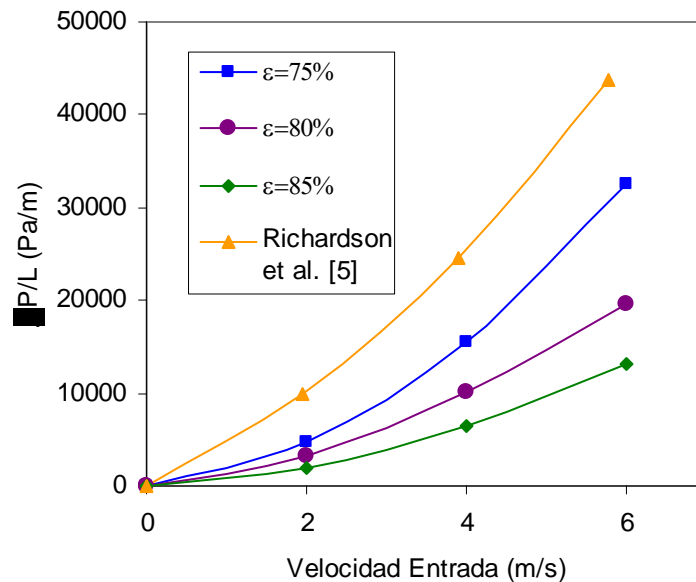
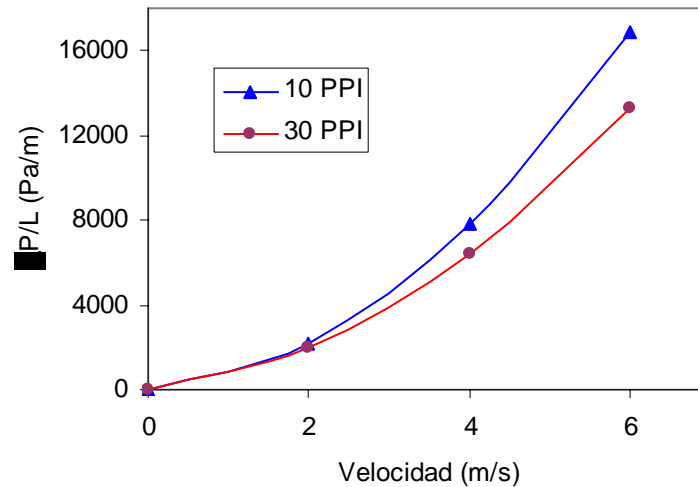


Figura 27. Caída de presión por unidad de longitud de las estructuras obtenidas a partir de las tomografías de los monolitos de 10 y 30 PPI con una porosidad de 85%



3.2 ANÁLISIS ESTADÍSTICO

Se realizó un análisis estadístico de los resultados obtenidos con el fin de estudiar la influencia de variables como porosidad, perímetro, velocidad de entrada del fluido, forma y método de creación del modelo geométrico, sobre el comportamiento hidrodinámico del modelo. La variable forma se refiere a la geometría particular de cada uno de los diferentes modelos geométricos utilizados para la simulación. Debido a que las simulaciones del monolito de 30 PPI no arrojaron resultados satisfactorios, estos datos no se incluyen en los análisis estadísticos y tampoco se incluye la densidad de poro como variable independiente. Se tomaron como variables de resultados la caída de presión y el aumento porcentual del número de Reynolds.

Con el fin de determinar la independencia de las variables geométricas (porosidad y perímetro), se hicieron análisis estadísticos previos y se determinó que en los modelos planteados el perímetro es dependiente de la porosidad y por tanto éste no se incluye como variable independiente de los posteriores análisis.

El efecto de las variables independientes de la simulación sobre la caída de presión se muestra en la Figura 1 del Anexo B. Se observa que la variable más influyente es la

velocidad de entrada del flujo, seguida de la porosidad. La forma geométrica de cada uno de los modelos planteados también influye en los resultados pero su efecto es pequeño.

En la Figura 2 del Anexo B se observa que el aumento porcentual de número de Reynolds depende principalmente de la variable forma, esto significa que existen diferencias significativas en el grado de turbulencia generado por cada uno de los modelos planteados. Así mismo, se observa que las estructuras de menor porosidad ocasionan mayores incrementos en la turbulencia del fluido.

Se compararon los resultados de las estructuras creadas a partir de las tomografías de rayos X y de las construidas en base a datos estadísticos. Las figuras 1 y 2 del Anexo C muestran el efecto del método empleado para la creación de la geometría sobre las variables de respuesta.

Los análisis muestran que el método de creación de la geometría influye ligeramente sobre los resultados de caída de presión. Por el contrario el incremento en el número de Reynolds se ve significativamente afectado por el método de creación del modelo geométrico.

4. CONCLUSIONES

1. Los modelos bidimensionales contruidos a partir de las tomografías de monolitos reales y de la distribución de tamaño de áreas sólidas ofrecen buenas aproximaciones al comportamiento real de los monolitos tipo espuma de densidades de poro de 10 PPI. Estos modelos están en capacidad de predecir las bajas caídas de presión y el aumento de la turbulencia (características propias de los monolitos tipo espuma), así como la ubicación de máximos y mínimos de velocidad y presión al interior del monolito.
2. La caída de presión global se ve fuertemente influenciada, de forma inversa, por la porosidad del modelo geométrico, es decir, al aumentar la porosidad de la geometría disminuye la caída de presión predicha por el modelo. Cuando los modelos de 10 PPI presentan una porosidad cercana a la porosidad de la estructura real, la caída de presión global calculada es muy cercana a los datos experimentales reportados en la literatura.
3. El perfil axial de presión en los monolitos tipo espuma desciende escalonadamente a lo largo de su longitud. Esto se debe a que la caída de presión, al menos desde el punto de vista bidimensional, depende fuertemente de la porosidad local, la cual varía alternando entre valores altos y bajos.
4. La simulación bidimensional de monolitos de densidades de poro de 30 PPI no ofrece resultados satisfactorios. Consideramos que esto se debe a que este modelo geométrico simplifica demasiado la estructura, hasta tal punto que llegan a perderse las características geométricas más influyentes en el comportamiento real.

5. RECOMENDACIONES

1. Para simular el comportamiento de los monolitos tipo espuma con densidades de poro de mayores a 10 PPI es recomendable plantear modelos geométricos tridimensionales rigurosos o en su defecto modelos semiempíricos como los planteados en la literatura adaptándolos al caso de monolitos de sílica.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. Constantinides, N. Mostoufi. Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications. Ed. Prentice Hall. United States. 1999.
- [2] A. Keller, M. Auset. *Advances in Water Resources*. (2006).
- [3] J. G. Fourie, J. P. DuPlessis. *Chem Eng Sci* 57 (2002) 2781 – 2789.
- [4] J. R. Iglesias, O. A. Nagel, S. Goncalves, M. Kiwi. J. *Magnetism and Magnetic Materials* 223-230 (2001) 548-549.
- [5] J. T. Richardson, Y. Peng, D. Remue. *Appl. Catalysis A: Gen* 204 (2000) 19–32.
- [6] J.T. Richardson, D. Remue, J.-K. Hung. *Appl. Cat. A: Gen* 250 (2003) 319-329.
- [7] K. Boomsma, D. Poulikakos, Y. Ventikos. *Int. J. Heat Fluid Flow* 24 (2003) 825–834.
- [8] K. Li, X. L. Gao, A.K. Roy. *Composites Science and Technology* 63 (2003) 1769–1781.
- [9] K. Li, X.-L. Gao, A.K. Roy. *Composites: Part B* 36 (2005) 249–262.
- [10] L. Giani, G. Groppi, E. Tronconi. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44 (2005) 4993-5002.
- [11] T. J. Lu, H. A. Stone, M. F. Ashby. *Acta Materiala* 46 (1998) 3619-3635.
- [12] M. D. Montminy, A. R. Tannenbaum, C. W. Macosko. *J. Colloid and Interface Sci.* 280 (2004) 202–211.
- [13] P. DuPlessis, A. Montillet, J. Comiti, J. Legrand. *Chem. Eng. Sci.* 49 (1994) 3545-3553.

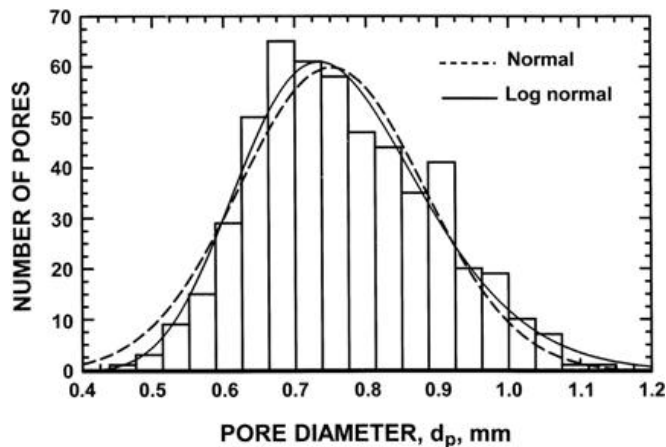
- [14] R. Martínez, M.C. Huff, M.A. Barteau. *Appl. Catal. A: Gen* 200 (2000) 79-88.
- [15] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. Ed. Wiley Inc. United States. 2002.
- [16] S. Sihn, A.K. Roy. *J. Mechanics and Physics of Solids* 52 (2004) 167–191.
- [17] T. Boger, A. Heibel. *Industrial and Engineering Chemical Research*, 2004. 43(16): p. 4602-4611.
- [18] O.C. Zienkiewics, R.L. Taylor. *The Finite Element Method. Vol 1: The Basis*. Quinta edición. Butterworth-Heinemann. 2000.
- [19] R. W. Lewis, Perumal Nithiarasu, Kankanhalli N. Seetharamu. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. John Wiley & Sons Ltda. 2004

Anexo A. Creación del modelo geométrico a partir de datos estadísticos reportados en la literatura

En la literatura pueden encontrarse trabajos que contienen datos estadísticos referentes a la geometría de los monolitos tipo espuma. Estos datos consisten en distribuciones estadísticas de tamaño de poro, forma de los poros, longitud de los lados de los poros, entre otras.

Se creó un rutina de cálculo que construye modelos geométricos a partir de la distribución de tamaño de poro reportada por Richardson et al [5]. La rutina permite seleccionar las dimensiones del modelo, la porosidad, la forma de los poros, el tamaño mínimo de las secciones sólidas.

Figura 1. Distribución de tamaño de poro reportada por Richardson et al. [5]

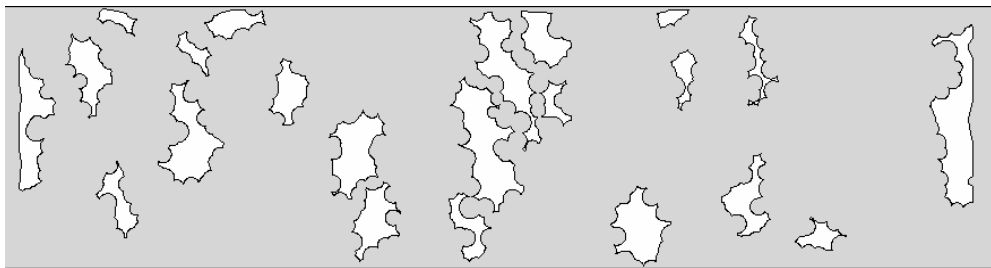


La construcción del modelo se inicia con una estructura de porosidad de cero, es decir, completamente sólida, a medida que avanza la rutina se van agregando poros o espacios vacíos a esta estructura, de tal forma que la porosidad va aumentando; la rutina se detiene cuando la estructura alcanza la porosidad deseada.

A continuación se describe brevemente el algoritmo empleado en la creación del modelo. El primer paso consiste en hacer un estimativo del número de poros necesarios para

alcanzar la porosidad deseada; una vez hecho esto, se le asigna a cada uno de estos poros su correspondiente tamaño, teniendo en cuenta la distribución de tamaño de poro. Los poros se agregan uno a uno al modelo. Cada vez que se agrega un poro se calcula la porosidad de la estructura con el fin de no sobrepasar la porosidad deseada. Si el número de poros estimado inicialmente no es suficiente para alcanzar la porosidad deseada se agrega un nuevo grupo de poros al modelo. Para esto se calcula un nuevo estimativo de poros y a éstos se les asignan tamaños acordes con la distribución de tamaño. Una vez alcanzada la porosidad deseada se realiza la depuración del modelo y la caracterización final del mismo. Uno de los modelos geométricos generados se muestra en la Figura 2.

Figura 2. Modelo geométrico generado a partir de la distribución de tamaño de poro reportada por Richardson et al [5].



Anexo B. Gráficos de Pareto para las estructuras obtenidas a partir de tomografías de rayos X

Figura 1. Gráfico de Pareto estandarizado para la caída de presión por unidad de longitud para las estructuras obtenidas a partir de las tomografías de rayos X

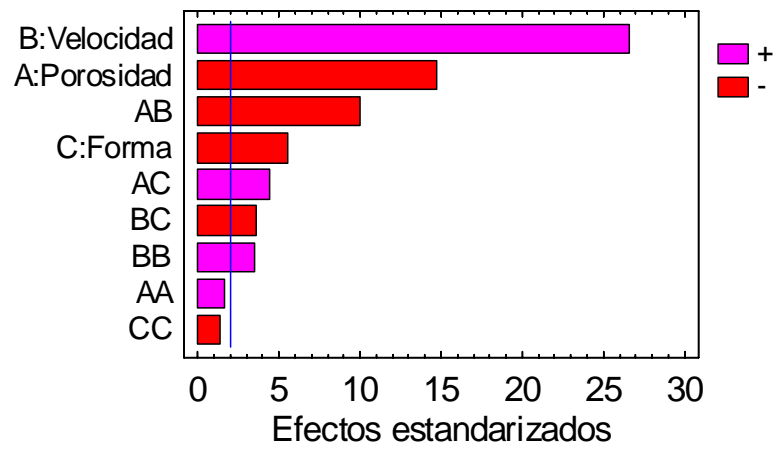
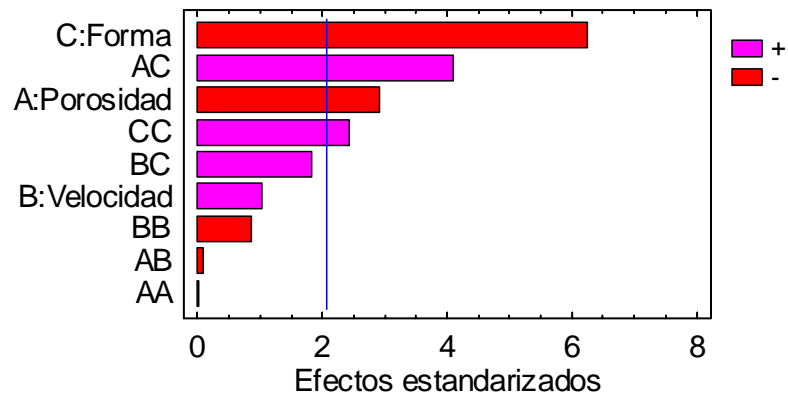


Figura 2. Gráfico de Pareto estandarizado para el aumento del número de Reynolds para las estructuras obtenidas a partir de las tomografías de rayos X



Anexo C. Gráficos de Pareto para las estructuras creadas por medio de diferentes metodologías

Figura 1. Gráfico de Pareto estandarizado para la caída de presión por unidad de longitud para las simulaciones de estructuras 10 PPI creadas por medio de diferentes metodologías: tomografías de rayos X y datos estadísticos

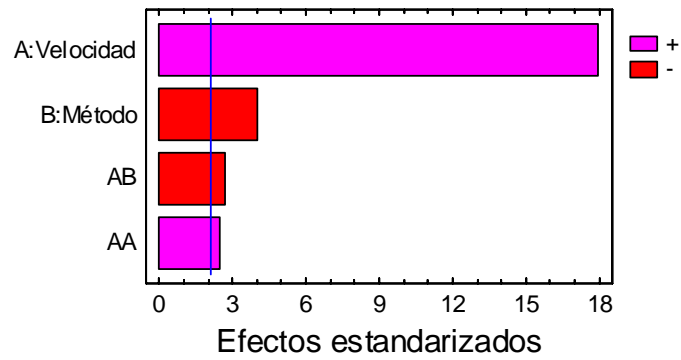


Figura 2. Gráfico de Pareto estandarizado para el aumento del número de Reynolds para las simulaciones de estructuras 10 PPI creadas por medio de diferentes metodologías: tomografías de rayos X y datos estadísticos

