

**DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN MONOLITOS TIPO  
ESPUMA EMPLEANDO EL CONCEPTO DE LAGUNARIDAD**

**LEYDI KATHERINE JIMÉNEZ RODRÍGUEZ**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2010**

**DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN MONOLITOS TIPO  
ESPUMA EMPLEANDO EL CONCEPTO DE LAGUNARIDAD**

**LEYDI KATHERINE JIMÉNEZ RODRÍGUEZ**

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título  
de Ingeniero Químico

**Director**

**CRISÓSTOMO BARAJAS FERREIRA**  
Ingeniero Químico M.Sc

**Co-director**

**IVÁN DARÍO ORDÓÑEZ SUPÚLVEDA**  
Ingeniero Químico M.Sc

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2010**

*A mis Padres por representar en mi vida el amor incondicional;*

*A mi hermano, John, porque juntos hemos compartido los buenos y malos momentos de la vida;*

*A Carlos Fernando, porque con todo su amor y paciencia ha sido mi compañía y la luz que iluminó este camino.*

## **AGRADECIMIENTOS**

Quiero expresar mi más grande agradecimiento a Iván Ordóñez por su dedicación, por sus enseñanzas y por hacer posible este proyecto.

Al Centro de Investigación para el Desarrollo Sostenible en Industria y Energía, CIDES, especialmente a Diego y Wilmer, por brindarme siempre su colaboración.

A Jairo Aguinda, Oscar Pineda y Oscar Ordóñez, mis amigos de la 'U', por darme la mano y compartir a mi lado esta etapa de nuestras vidas y porque de alguna u otra manera siguen y seguirán presentes en la mía.

A Luisa Fernanda, Ludwing Rodríguez y Diego Toloza por apoyarme, sufrir y reír conmigo desde la distancia.

## TABLA DE CONTENIDO

	<b>Pág.</b>
INTRODUCCIÓN	1
1. FUNDAMENTO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE	3
1.1. MONOLITOS TIPO ESPUMA	3
1.2. LAGUNARIDAD	4
1.3. PROPIEDADES EFECTIVAS DE TRANSPORTE	5
2. METODOLOGÍA	7
2.1. CÁLCULO DE PROPIEDADES EFECTIVAS	8
2.1.1. Modelo de difusión	9
2.1.2. Modelo de conducción	10
2.2. DETERMINACIÓN DE LAGUNARIDAD	11
2.3. CORRELACIÓN DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN FUNCIÓN DE LA LAGUNARIDAD	12
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS	13
3.1. CÁLCULO DE PROPIEDADES EFECTIVAS Y SELECCIÓN DE LA MEJOR ESCALA	13
3.2. LAGUNARIDAD MÁSCA	21

3.3. CORRELACIONES DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN FUNCIÓN DE LA LAGUNARIDAD	22
3.3.1. Correlación para determinar difusividad efectiva, $D_{eff}$	22
3.3.2. Correlaciones para determinar conductividad efectiva, $k_{eff}$	24
4. CONCLUSIONES	28
5. RECOMENDACIONES	29
REFERENCIAS	30
ANEXOS	32

## LISTA DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
Tabla 1. Características físicas del monolito estudiado	8
Tabla 2. Propiedades de transporte del fluido y condiciones de frontera para el modelo de difusión	10
Tabla 3. Propiedades de transporte del fluido y condiciones de frontera para el modelo de conducción	11
Tabla 4. Constantes de la correlación para la determinación de difusividad efectiva	23
Tabla 5. Constantes de la correlación para la determinación de conductividad efectiva para $F_{sol/fluido}$ menores a 100	25
Tabla 6. Constantes de la correlación para la determinación de conductividad efectiva para $F_{sol/fluido}$ mayores a 100	27

## LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la fracción de vacío según la escala para un monolito de 45 PPI (Ordóñez, 2010)	2
Figura 2. Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva según la escala para un monolito de 45 PPI (Ordóñez, 2010)	2
Figura 3. Monolitos tipo espuma típicos	3
Figura 4. Diagrama de la metodología general para la determinación de propiedades efectivas	7
Figura 5. Imagen binaria del monolito de 10 PPI	8
Figura 6. Geometría de FEMLAB con condiciones de frontera para una escala ( $\Delta\Phi$ ) de $104^\circ$	9
Figura 7. Malla generada por FEMLAB para una escala ( $\Delta\Phi$ ) de $104^\circ$	13
Figura 8. Perfil de temperatura generado por FEMLAB para una escala ( $\Delta\Phi$ ) de $104^\circ$	14
Figura 9. Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva para $D_{fluido} = 4,86 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	15
Figura 10. Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva cuando $D_{fluido} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$	15
Figura 11. Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva para $D_{fluido} = 9 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	15
Figura 12. Diagramas de cajas y bigotes de la distribución de la conductividad efectiva para $k_{fluido} = 0,01 \text{ J}/(\text{m} \cdot \text{s} \cdot \text{K})$	16
Figura 13. Diagramas de cajas y bigotes de la distribución de la conductividad efectiva para $k_{fluido} = 0,001 \text{ J}/(\text{m} \cdot \text{s} \cdot \text{K})$	17
Figura 14. Lagunaridad de difusividad efectiva para $D_{fluido} = 4,86 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ , en función de la escala	18
Figura 15. Lagunaridad de difusividad efectiva para $D_{fluido} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ , en función de la escala	18

Figura 16. Lagunaridad de difusividad efectiva para $D_{fluido}=9*10^{-10}$ m <sup>2</sup> /s, en función de la escala	18
Figura 17. Lagunaridad de conductividad efectiva para $k_{fluido}=0,01$ J/(m*s*K) en función de la escala	19
Figura 18. Lagunaridad de conductividad efectiva para $k_{fluido}=0,001$ J/(m*s*K) en función de la escala	19
Figura 19. Pendiente de la lagunaridad de la conductividad efectiva, $k_{eff}$ , en función del factor sólido-fluido, para $k_{fluido} = 0,01$ J/(m*s*K)	20
Figura 20. Pendiente de la lagunaridad de la conductividad efectiva, $k_{eff}$ , en función del factor sólido-fluido, para $k_{fluido} = 0,001$ J/(m*s*K)	20
Figura 21. Lagunaridad másica para un monolito de 10 PPI	21
Figura 22. Difusividad efectiva observada frente al valor predicho por la correlación para $D_{fluido} = 4,86*10^{-5}$ m <sup>2</sup> /s	23
Figura 23. Difusividad efectiva observada frente al valor predicho por la correlación para $D_{fluido} = 5*10^{-7}$ m <sup>2</sup> /s	23
Figura 24. Difusividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para $D_{fluido} = 9*10^{-10}$ m <sup>2</sup> /s	24
Figura 25. Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para $k_{fluido} = 0,01$ J/(m*s*K), para el $F_{sol/fluido} = 10$	26
Figura 26. Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para $k_{fluido} = 0,01$ J/(m*s*K), para el $F_{sol/fluido} = 100$	26
Figura 27. Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para $k_{fluido} = 0,01$ J/(m*s*K), para el $F_{sol/fluido} = 10^3$	27
Figura 28. Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para $k_{fluido} = 0,01$ J/(m*s*K), para el $F_{sol/fluido} = 10^4$	27
Figura 29. Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para $k_{fluido} = 0,01$ J/(m*s*K), para el $F_{sol/fluido} = 10^5$	27

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
ANEXO A. Algoritmo de <i>gliding box</i> programado en MATLAB 7.5	32
ANEXO B. Interfaz gráfica en MATLAB 7.5 para el ingreso de datos para la determinación de propiedades efectivas en FEMLAB 3.1	36
ANEXO C. Comparación de los modelos empíricos obtenidos para correlacionar las propiedades efectivas de transporte con la lagunaridad	38
ANEXO D. Análisis estadístico para la determinación de las correlaciones para calcular propiedades efectivas de transporte	39

## RESUMEN

### TÍTULO

DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN MONOLITOS TIPO ESPUMA EMPLEANDO EL CONCEPTO DE LAGUNARIDAD\*

### AUTOR

JIMÉNEZ RODRÍGUEZ, Leydi Katherine\*\*

### PALABRAS CLAVE

Monolitos tipo espuma, lagunaridad, conductividad efectiva, difusividad efectiva

En el presente trabajo se proponen algunas correlaciones matemáticas útiles para la determinación de la conductividad térmica y la difusividad másica efectivas en monolitos tipo espuma de 10 PPI (poros por pulgada lineal). Dichas correlaciones tienen en cuenta las propiedades de transporte de la fase sólida y del fluido en el monolito y su lagunaridad. Se desprecian los efectos por radiación (para transferencia de calor) y por convección dentro del medio poroso.

Inicialmente, se realizó el cálculo de las propiedades efectivas simulando procesos de transferencia de masa y de calor dentro del medio poroso, empleando modelos clásicos basados en las leyes de Fick y de Fourier, respectivamente. Dichos modelos fueron aplicados a una geometría heterogénea tipo pastel creada a partir de una imagen bidimensional real del monolito y el sistema de ecuaciones diferenciales resultante fue solucionado por la técnica de los elementos finitos utilizando el software FEMLAB 3.1; posteriormente, se determinó la lagunaridad del monolito aplicando el algoritmo de *gliding box*. Para finalizar, se realizó un análisis de resultados empleando las herramientas MATLAB 7.5 y STATGRAPHICS Plus 5.1, a partir del cual, se estableció que es más confiable aplicar el cálculo de propiedades efectivas a escalas pequeñas y se obtuvieron las respectivas correlaciones.

Para la difusividad efectiva se propone una correlación aplicable a todo el rango de difusividades de fluido conocidas. Para la conductividad efectiva, en cambio, el factor sólido-fluido (cociente entre las propiedades de transporte del sólido y del fluido) se dividió en dos regiones, para cada una de las cuales se aplica una correlación distinta; una para valores de factor sólido-fluido menores a 100, y otra para los valores de 100 en adelante; esto debido a que los factores sólido-fluido más altos producen un fuerte efecto en la determinación de las propiedades efectivas.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Crisóstomo Barajas Ferreira. Iván Darío Ordóñez Sepúlveda.

## ABSTRACT

### TITLE:

DETERMINATION OF EFFECTIVE PROPERTIES ON MONOLITHS TYPE FOAM USING THE LACUNARITY CONCEPT\*

### AUTHOR

JIMÉNEZ RODRÍGUEZ, Leydi Katherine\*\*

### KEYWORDS

Monoliths type foam, lacunarity, effective diffusivity, effective conductivity.

In the present study suggests some useful mathematical correlations to determine the effective thermal conductivity and effective mass diffusivity on monoliths type foam of 10 PPI (pores by linear inch). These correlations take into account the transport properties of the solid phase and of the fluid in the monolith and its lacunarity. Convection and radiation (for heat transfer) effects within the porous medium are neglected.

Initially, the lacunarity of the monolith using the gliding box algorithm was determined. Subsequently, the calculation of the effective properties simulating mass and heat transfer processes within the solid, using classical models based on the laws of Fick and Fourier, respectively, was performed. These models were applied to a type cake heterogeneous geometry created from a real two-dimensional image of the monolith. The resulting system of differential equations was solved by the finite element technique using FEMLAB 3.1. Finally, an analysis of results using MATLAB 7.5 and STATGRAPHICS Plus 5.1 was performed. After a graphic, mathematician and statistician analysis, was established that is more reliable to apply the calculation of effective properties to small scales and three correlations for determining these properties were obtained.

For the effective diffusivity a correlation applied to the entire range of known fluid diffusivities is proposed. For the effective conductivity, however, the solid-fluid factor (ratio between the transport properties of solid and fluid) was divided into two regions, for each of which applies a different correlation; a for smaller than 100 solid-fluid factors and the another for bigger than 100 values, because the higher solid-fluid factors produce a strong effect on the determination of the effective properties.

---

\* Degree Work

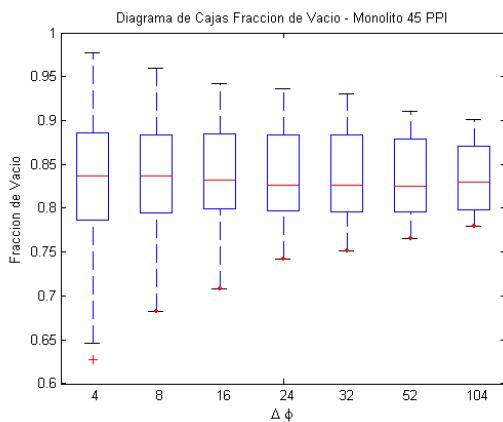
\*\* Faculty of Physicochemical Engineering. Department of Chemical Engineering. Crisóstomo Barajas Ferreira. Iván Darío Ordóñez Sepúlveda.

## INTRODUCCIÓN

Gracias a su alta estabilidad térmica y porosidad, entre otras ventajas, las espumas monolíticas han permitido importantes avances en el campo de la ingeniería de las reacciones catalíticas presentando mejor desempeño que los catalizadores clásicos y que otras estructuras similares como los monolitos tipo panel (Lévêque et al., 2009, Carty et al., 1996). Sin embargo, la intrincada geometría que las caracteriza no ha permitido un conocimiento pleno de numerosos aspectos como su estructura física y los mecanismos de transporte que se llevan a cabo en su interior. Es precisamente esta compleja geometría la que hace que en el campo de los fenómenos de transporte se definan las llamadas propiedades efectivas, las cuales permiten cuantificar la difusividad másica y la conductividad térmica “promedio” para cualquier tipo de cuerpo poroso.

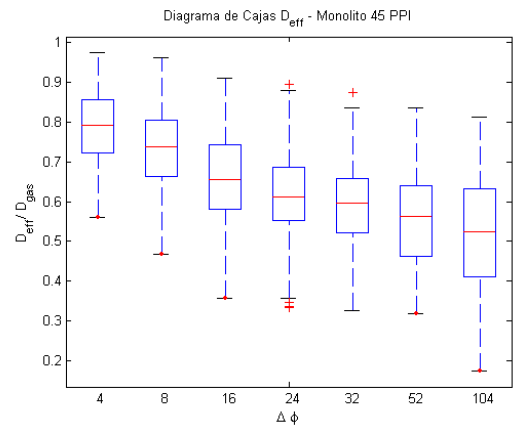
Las propiedades efectivas a menudo se obtienen experimentalmente, lo que incrementa la incertidumbre de los resultados, por lo que a lo largo de los años, algunos investigadores (DuPlessis et al., 1994; Lu et al., 1998; Boomsma et al., 2003) se han propuesto la tarea de buscar nuevas formas para determinarlas mediante el modelamiento. Para tal fin, es necesario contar con una estructura de volumen elemental representativo (VER) adecuada. A menudo la selección de la VER se basa en la fracción de vacío, la cual se mide de forma directa, para elegir así el tamaño de caja mínimo requerido para que esta sea prácticamente invariante sin importar la posición desde donde se mida. Investigaciones (Ordóñez et al., 2010) demuestran que a tamaños de escala grandes, la dispersión de la distribución de la fracción de vacío disminuye, mientras su valor promedio no varía considerablemente, como se puede observar en la figura 1. Sin embargo, demuestran también que ciertas propiedades en los monolitos sí dependen del

tamaño de la escala de la muestra, como en el caso de la difusividad efectiva, de la cual se ha encontrado que disminuye monótonamente con el aumento de la escala, mientras que el tamaño de la dispersión de su distribución es poco variable, como se muestra en la figura 2. Aún así, en la práctica es usual seleccionar escalas pequeñas para el modelamiento de estas estructuras por la simplicidad que esto representa. Sin embargo, una mala selección del tamaño de muestra, puede causar errores indeseables en los resultados, como se aprecia en la figura 2, en la que se observa claramente que los valores de difusividad relativa,  $D_{eff}/D_{fluido}$  se encuentran dentro de un intervalo entre 0,1 y 0,98, aproximadamente, una diferencia considerable en el cálculo de difusividades efectivas. Es por esto que el presente trabajo pretende ofrecer una herramienta a los investigadores en el área de modelamiento de propiedades efectivas que proporcione un criterio de selección del adecuado tamaño de muestra a estudiar. Así mismo se proponen algunas correlaciones para la determinación de las propiedades efectivas para un monolito de 10 PPI, en las cuales se aprovecha el concepto de lagunaridad como medida de heterogeneidad, teniendo en cuenta, además, las propiedades de transporte del sólido y del fluido que se transporta a través de éste.



**Figura 1.** Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la fracción de vacío según la escala para un monolito de 45 PPI.

Fuente: Ordóñez et al., 2010



**Figura 2.** Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva según la escala para un monolito de 45 PPI

Fuente: Ordóñez et al., 2010

## 1. FUNDAMENTO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE

### 1.1. MONOLITOS TIPO ESPUMA

Los monolitos tipo espuma son estructuras rígidas con múltiples y estrechos canales entrecruzados y distribuidos aleatoriamente. Estas estructuras poseen enormes ventajas, como su baja densidad aparente y atractivas propiedades térmicas, mecánicas, eléctricas y acústicas, que le han permitido estar presentes en un amplio rango de aplicaciones en las que intervienen reacciones químicas y procesos de intercambio de masa y de energía. En la figura 3 se muestran algunos monolitos tipo espuma típicos.



**Figura 3.** Monolitos tipo espuma típicos

Fuente: Burgos et al., 2001

Las espumas monolíticas están formadas por una red porosa a nivel tanto macro como microscópico. A nivel macroscópico, se identifican por la densidad de poro (PPI), es decir, el número de poros o celdas por pulgada lineal. A nivel microscópico la porosidad es función del material de fabricación de la espuma (metálica, cerámica, polimérica) o de la naturaleza del recubrimiento que usualmente es adherido a ella (Ordóñez et al., 2010). Con el propósito de establecer modelos matemáticos que permitan describir y comprender su comportamiento, se han adelantado diferentes investigaciones en torno a ellas.

Aunque su primer uso como soporte catalítico fue realizado por Stopka (1950), las aplicaciones más importantes de este material, desde el punto de vista comercial, fueron desarrolladas por Andersen et al. (1966) para decolorar los gases de salida de las plantas de ácido nítrico y por Keith et al. (1971) para controlar las emisiones de los automóviles. En 1992, Hickman et al., realizaron un estudio relacionado con el uso de las espumas cerámicas como soportes estructurados y la mejora de la selectividad a compuestos intermedios en reacciones complejas. Seijger et al. (2001) y Richardson et al. (2003) publicaron trabajos acerca de las espumas monolíticas como superficies catalíticas potenciales para reacciones en fase gas. Aspectos como sus propiedades relacionadas con la transferencia de masa y de calor han sido estudiados por autores como Younis y Viskanta (1993), Richardson et al. (2003) y Giani et al. (2005).

## **1.2. LAGUNARIDAD**

La lagunaridad es, en términos generales, una medida adimensional de la heterogeneidad de un conjunto de datos, con la cual se busca medir el grado de aglomeración de los mismos y/o patrones espaciales a diferentes escalas. Aunque este concepto se introdujo, inicialmente, para medir la heterogeneidad de cuerpos fractales (Mandelbrot, 1982), a través de los años se han propuesto generalizaciones y diferentes métodos para calcularla (Smith et al., 1996, Cheng, 1999 y Tolle et al., 2003). Uno de los aportes más importantes fue hecho por Vernon-Carter et al. (2009), quienes generalizaron este concepto extendiéndolo a cuerpos no fractales, en el cual se cuantificó la lagunaridad para cuerpos de diferente tamaño y para imágenes y texturas de diferentes orígenes. Con esto se logró ilustrar la aplicación de la lagunaridad en diferentes campos, tales como el de la biomédica, el procesamiento de alimentos, el modelamiento ecológico, entre otros. Dougherty et al. (2001) distinguieron varios grados de heterogeneidad o dispersión de un sólido por medio de un gráfico en escala log-log de lagunaridad contra la escala, lo que demuestra que la lagunaridad es un parámetro útil para la

descripción de una distribución de sólidos y potencialmente permitiría correlacionarlo con propiedades de un medio poroso, como fue demostrado por Ordóñez et al. (2010), quienes encontraron una tendencia entre la difusividad efectiva en un monolito tipo espuma y su lagunaridad calculada por el algoritmo de *gliding box*. A su vez, demostraron que la tortuosidad promedio puede ser estimada en función de la escala del medio mediante la lagunaridad.

La lagunaridad  $L$  en función del tamaño de la escala  $r$  se define como:

$$L(r) = \frac{\sigma^2(r)}{(\mu(r))^2} + 1 \quad \text{Ec. 1}$$

donde  $\sigma^2(r)$  y  $\mu(r)$  son respectivamente la varianza y el promedio de un grupo de datos al tamaño de escala  $r$ . Aplicando este concepto al estudio de medios porosos, se puede afirmar que un conjunto de cuerpos sólidos dispersos tiene lagunaridad más alta que un conjunto de cuerpos densos y que a medida que la lagunaridad se acerca a 1, el sólido tiende a ser homogéneo. Cuando esta alcanza el valor de 1, entonces se puede concluir que existe un patrón que se repite espacialmente dentro de la estructura (Dougherty et al., 2001).

Varios métodos han sido propuestos para el cálculo de la lagunaridad, entre los que se destacan el algoritmo de *gliding box* por Allain et al. (1991) y una implementación eficiente de este mismo algoritmo propuesta por Tolle et al. (2008) el cual mejora el tiempo de cómputo empleado por el algoritmo de *gliding box* tradicional.

### 1.3. PROPIEDADES EFECTIVAS DE TRANSPORTE

En medios porosos, los canales a través de los cuales se transporta un fluido son una serie de trayectos tortuosos y entrecruzados con tamaño de poro variable, por lo tanto no sería práctico describir los mecanismos de transporte dentro de todos y cada uno de ellos. Debido a esto, se definen coeficientes efectivos de difusión y

conducción para el transporte de masa y de energía, respectivamente, los cuales permiten cuantificar la difusión másica y conductividad térmica promedio que ocurre en cualquier posición  $r$  dentro del sólido<sup>1</sup>.

El concepto de difusividad efectiva está definido por la siguiente ecuación:

$$N_A = -D_{effA} \nabla C_A \quad \text{Ec. 2}$$

donde  $N_A$  es la densidad de flujo molar de la especie A,  $D_{effA}$  es el coeficiente efectivo de difusión de A y  $\nabla C_A$  denota el gradiente de concentración de A.

Análogamente se puede definir la conductividad térmica efectiva de la siguiente manera:

$$q = -k_{eff} \nabla T \quad \text{Ec. 3}$$

donde  $q$  es la densidad de flujo de calor,  $k_{eff}$  es el coeficiente efectivo de conductividad térmica y  $\nabla T$  denota el gradiente de temperatura dentro del sólido.

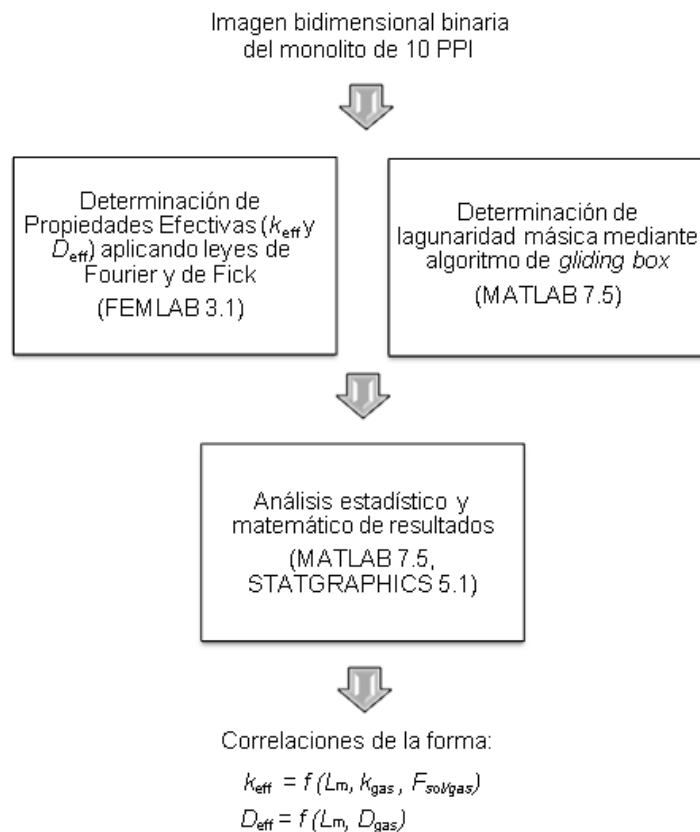
Entre los estudios realizados en torno al comportamiento de estas propiedades en sólidos complejos, se destaca el realizado por Boomsma et al. (2001), quienes demostraron que la conductividad térmica efectiva en este tipo de estructuras es controlada principalmente por la conductividad térmica de la fase sólida y que por ello es necesaria en los modelos de conductividad efectiva. Por su parte, Zalc et al. (2004), demostraron que los mecanismos de transporte en cuerpos porosos se encuentran altamente influenciados por las distribuciones de tamaño de poro. Mientras que Ordóñez et al. (2010) encontraron que existe una correspondencia entre las propiedades de transporte y la escala o tamaño de muestra de los monolitos.

---

<sup>1</sup> Fogler, Scott. *Elements of Chemical Reaction Engineering*. Third Edition. Prentice-Hall International, Inc. United States of America, 1999 p. 739-740.

## 2. METODOLOGÍA

El procedimiento para la determinación de las propiedades efectivas inicia con una imagen binaria bidimensional del monolito (ver Tabla 1) a la cual se le determina las propiedades efectivas y la lagunaridad másica. Posteriormente se realiza el análisis gráfico, matemático y estadístico de los resultados, para obtener, de esta manera, una serie de correlaciones que permitan determinar propiedades efectivas relacionándolas con la lagunaridad másica del sólido y seleccionar la escala más adecuada para el cálculo de estas propiedades. En la figura 4 se presenta un diagrama que esquematiza esta metodología.



**Figura 4.** Diagrama de la metodología general para la determinación de propiedades efectivas. ( $k_{fluido}$ =Conductividad térmica del fluido,  $L_m$ =Lagunaridad másica,  $F_{sol/fluido}$ =Factor sólido-fluido,  $D_{fluido}$ =Difusividad másica del fluido)

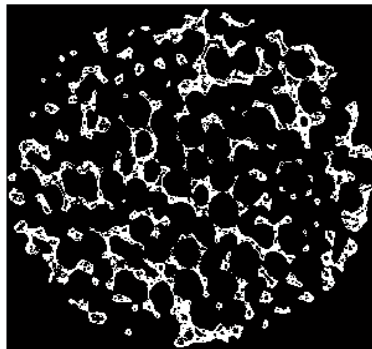
Fuente: El autor

**Tabla 1.** Características físicas del monolito estudiado

Densidad de Poro [PPI]	Diámetro [mm]	Resolución de Imagen [pixel]	Fracción de Vacío
10	68	1680 x 1680	0,8286

## 2.1. CÁLCULO DE PROPIEDADES EFECTIVAS

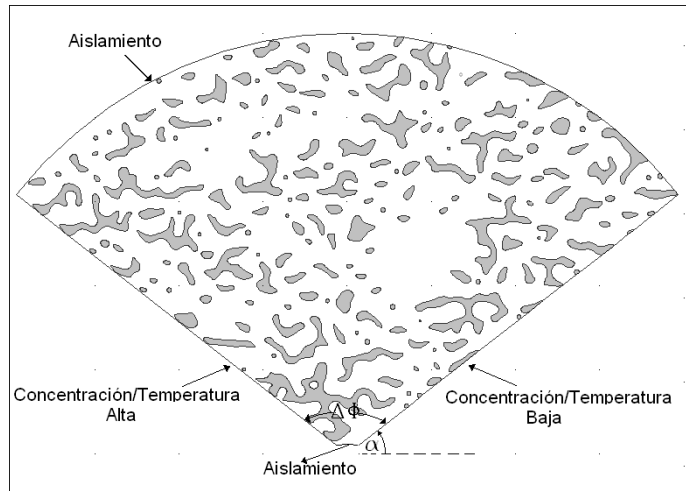
El cálculo de las propiedades efectivas se realizó para 1620 geometrías tipo pastel, distribuidas en 9 tamaños diferentes  $\Delta\Phi$  (escalas), de 4 a  $162^\circ$ , y cada una de estas en 180 ángulos iniciales  $\alpha$  (posiciones), que van de 0 a  $358^\circ$ . La construcción de estas geometrías se realizó a partir de la imagen binaria de la figura 5. Esta imagen fue cortada en rebanadas, las cuales fueron convertidas, posteriormente, mediante algoritmos creados en MATLAB 7.5, a geometrías de FEMLAB 3.1 (Comsol Multiphysics 2004), como la presentada en la figura 6, en donde es posible distinguir los subdominios sólido (color gris) y fluido (color blanco). A estas se acoplaron luego los modelos fenomenológicos y sus respectivas condiciones de frontera.



**Figura 5.** Imagen binaria del monolito de 10 PPI

Fuente: Ordóñez et al., 2010

Los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales resultantes fueron resueltos por la técnica de los elementos finitos utilizando el software FEMLAB, para lo cual se usó un *solver* no lineal estacionario con una tolerancia de  $1 \cdot 10^{-6}$ . El ingreso de datos se realizó mediante una interfaz gráfica creada en MATLAB por el autor de este trabajo. Esta interfaz se presenta con detalle en el Anexo B.



**Figura 6.** Geometría de FEMLAB con condiciones de frontera para una escala ( $\Delta\Phi$ ) de  $104^\circ$

Fuente: El autor

### 2.1.1. Modelo de difusión

Para la determinación de la difusividad efectiva se aplicó un modelo heterogéneo sencillo basado en la Ley de Fick (Ecs. 4 y 5).

$$N_{Het} = -D_{gas} \nabla C \quad \text{Ec. 4}$$

$$-D_{gas} \nabla^2 C = 0 \quad \text{Ec. 5}$$

Conociendo el gradiente de concentración,  $\nabla C$ , y la difusividad del fluido,  $D_{fluido}$  y sabiendo que el factor sólido-fluido,  $F_{sol/fluido}^2$ , es igual a cero, se obtuvo un perfil bidimensional de concentración en el monolito y su respectiva densidad de flujo molar heterogénea,  $N_{Het}$ .

Teniendo en cuenta que, bajo las mismas condiciones, la densidad de flujo molar heterogénea (Ec. 6) debe ser igual a la densidad de flujo molar homogénea  $N_{Hom}$ ,

<sup>2</sup> Debido a que no hay transferencia de masa dentro del sólido,  $D_{sól} = 0$ . Como el factor sólido-fluido es el cociente entre las propiedades de transporte del sólido y del gas, su valor debe ser también cero.

se igualaron estos perfiles (Ec. 7) y se resolvió para obtener, finalmente, la difusividad efectiva,  $D_{eff}$ , en el monolito (Ec. 8).

$$N_{Hom} = -D_{eff} \nabla C \quad \text{Ec. 6}$$

$$N_{Hom} \equiv N_{Hets} \quad \text{Ec. 7}$$

$$D_{eff} = -N_{Hom} * \nabla C^{-1} \quad \text{Ec. 8}$$

Este modelo fue aplicado para tres sustancias con difusividad de fluido,  $D_{fluido}$ , de diferente orden de magnitud. El fenómeno de difusión másica ocurre a una temperatura constante de 200°C (473,15 K) y se asume que las fronteras semicirculares del monolito se encuentran aisladas. El fluido no es permeable dentro del sólido y no se tienen en cuenta efectos convectivos. Las propiedades de transporte del fluido y las condiciones de frontera se encuentran en la tabla 2.

**Tabla 2.** Propiedades de transporte del fluido y condiciones de frontera para el modelo de difusión

Sustancia	$D_{fluido}$ [m <sup>2</sup> /s]	$C_{alta}$ [mol/m <sup>3</sup> ]	$C_{baja}$ [mol/m <sup>3</sup> ]
Fluido A	$4,86 \cdot 10^{-5}$		
Fluido B	$5 \cdot 10^{-7}$	25	2,5
Fluido C	$9 \cdot 10^{-10}$		

### 2.1.2. Modelo de conducción

En la determinación de la conductividad térmica efectiva se aplicó un modelo heterogéneo basado en la Ley de Fourier (Ecs. 9 y 10).

$$q_{Hets} = -k_{gas} \nabla T \quad \text{Ec. 9}$$

$$-k_{gas} \nabla^2 T = 0 \quad \text{Ec. 10}$$

El procedimiento para determinar la  $k_{eff}$  es análogo al empleado para la determinación de la  $D_{eff}$ . En este caso se conoce el gradiente de temperatura, la conductividad del fluido,  $k_{fluido}$ , y, adicionalmente, el factor sólido-fluido,  $F_{sol/fluido}$ . Al igual que para la  $D_{eff}$ , se aprovechó la igualdad entre las densidades de flujo de los

modelos heterogéneo y homogéneo (Ecs.11 y 12), para determinar la  $k_{eff}$  en el monolito (Ec.13).

$$q_{Hom} = -k_{eff} \nabla T \quad \text{Ec.11}$$

$$q_{Hom} \equiv q_{Hets} \quad \text{Ec.12}$$

$$k_{eff} = -q_{Hom} * \nabla T^{-1} \quad \text{Ec.13}$$

Las sustancias para las cuales fue aplicado el modelo de conducción, con sus respectivas propiedades, y las condiciones de frontera supuestas se encuentran en la tabla 3. Se asume que las fronteras semicirculares del monolito se encuentran aisladas. No se tienen en cuenta efectos por convección ni por radiación.

**Tabla 3.** Propiedades de transporte del fluido y condiciones de frontera para el modelo de conducción

Sustancia	$k_{fluido}$ [J/(m*s*K)]	$F_{sol/fluido}$	$T_{alta}$ [K]	$T_{baja}$ [K]
Fluido D	0,01	$10, 10^2, 10^3, 10^4$ y $10^5$	474	472
Fluido E	0,001	$10, 10^2, 10^3, 10^4$ y $10^5$		

## 2.2. DETERMINACIÓN DE LAGUNARIDAD

El concepto de lagunaridad se aplicó de dos maneras: Primero, como lagunaridad de la propiedad efectiva. De esta forma se aplica este concepto al grupo de datos obtenidos de las propiedades efectivas a diferentes escalas, con el fin de analizar su heterogeneidad y/o encontrar un patrón entre ellos que permitiera seleccionar la mejor escala para realizar el cálculo de este tipo de propiedades. Segundo, como lagunaridad másica del monolito para medir la distribución del sólido a diferentes escalas y correlacionarla con las propiedades efectivas obtenidas durante la etapa de simulación.

La lagunaridad se determina mediante el algoritmo de *gliding box* (Allain et al., 1991), el cual parte de una caja de tamaño específico que se desplaza sobre la imagen a distancias muy pequeñas hasta cubrirla totalmente. El algoritmo calcula,

entonces, la “masa” o número de píxeles blancos contenidos en la caja en cada posición en la que ésta se ubique. Con estos datos se obtiene una distribución de frecuencia de la masa para un tamaño de caja  $r$  determinado. Al convertir dicha distribución a una distribución de probabilidad se obtiene entonces la Ecuación 1, donde la lagunaridad es una cantidad adimensional que representa la distribución del sólido en toda la imagen a determinada escala. Repitiendo este proceso a diferentes tamaños de escala se crea un gráfico típico log-log de lagunaridad contra escala (Ordóñez et al., 2010).

En el presente trabajo se programó este algoritmo empleando el software MATLAB 7.5 (Mathworks, 2007), como se presenta en el Anexo A, y fue aplicado a 16200 cajas tipo pastel. Para crear dichas cajas, la imagen fue cortada en rebanadas con 90 escalas,  $\Delta\Phi$ , entre los 2 y  $180^\circ$  y cada una de ellas se ubicó en 180 ángulos iniciales,  $\alpha$ , sobre la imagen, cuyos valores fueron definidos entre 0 y  $358^\circ$ .

### **2.3. CORRELACIÓN DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN FUNCIÓN DE LA LAGUNARIDAD**

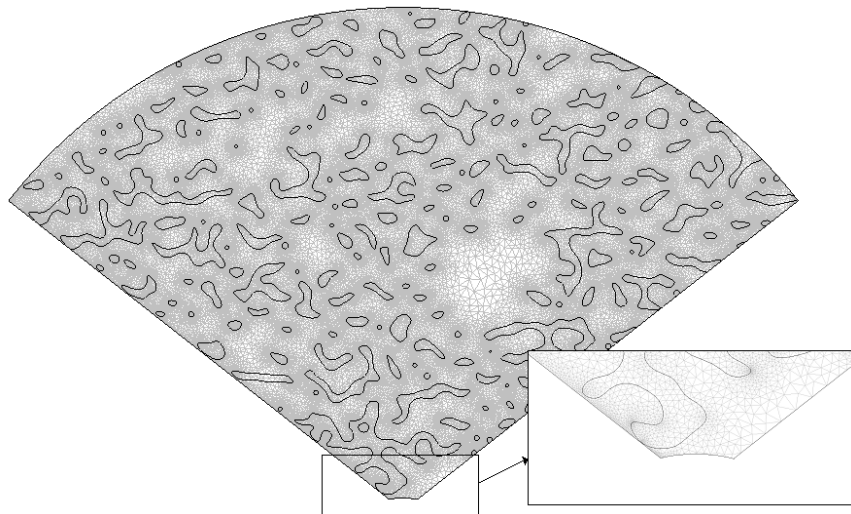
La etapa final del trabajo consistió en determinar correlaciones matemáticas que permiten calcular de propiedades efectivas con base en la lagunaridad másica del monolito. Estas correlaciones se determinaron mediante el análisis gráfico, matemático y estadístico de los datos obtenidos durante la fase de simulación. Los datos de propiedades efectivas tomados en cuenta para estos análisis son los correspondientes al promedio para cada escala simulada.

El análisis gráfico y matemático fue llevado a cabo en MATLAB 7.5, a partir del cual se pudo establecer la escala más apropiada para calcular propiedades efectivas y se establecieron relaciones matemáticas generales entre las variables estudiadas. El análisis estadístico se realizó en STATGRAPHICS Plus 5.1, aplicando regresión simple y diseño experimental tipo multinivel factorial.

### 3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

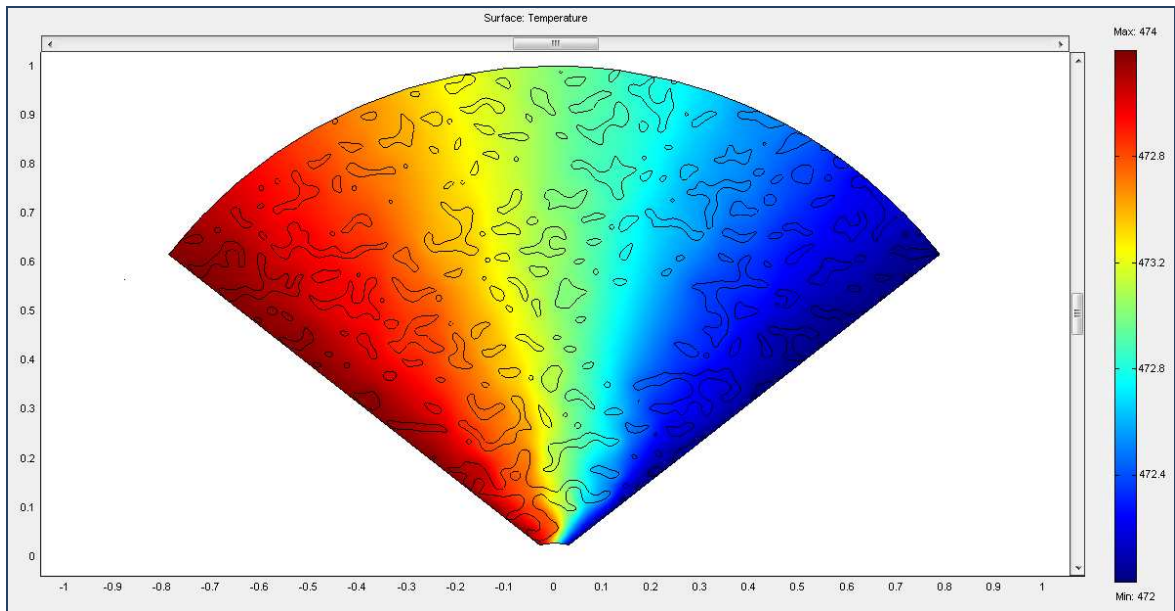
#### 3.1. CÁLCULO DE PROPIEDADES EFECTIVAS Y SELECCIÓN DE LA MEJOR ESCALA

Como se mencionó anteriormente, la solución de los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales resultantes de aplicar los modelos fenomenológicos, se llevó a cabo haciendo uso de FEMLAB por medio de la técnica de los elementos finitos. Creada la geometría e ingresadas las condiciones de frontera, el software generó una malla proporcional al tamaño de la geometría, de aproximadamente 200000 elementos, para cada una de las 1620 cajas simuladas, como la mostrada en la figura 7. Posteriormente, resolvió para cada elemento los modelos heterogéneos de difusión y de conducción, generando perfiles de concentración y de temperatura, respectivamente. Uno de estos perfiles generados por el software se puede apreciar en la figura 8. A partir de estos perfiles, como se explicó en la metodología, se determinaron las propiedades efectivas de transporte del monolito.



**Figura 7.** Malla generada por FEMLAB para una escala ( $\Delta\Phi$ ) de  $104^\circ$

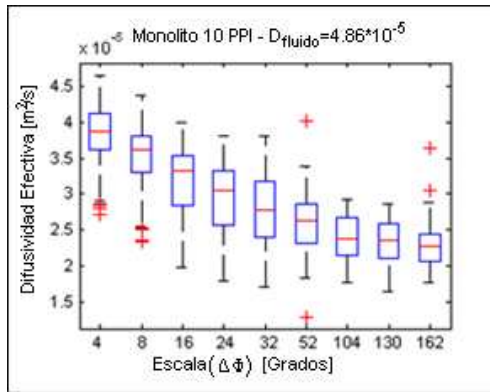
Fuente: El autor



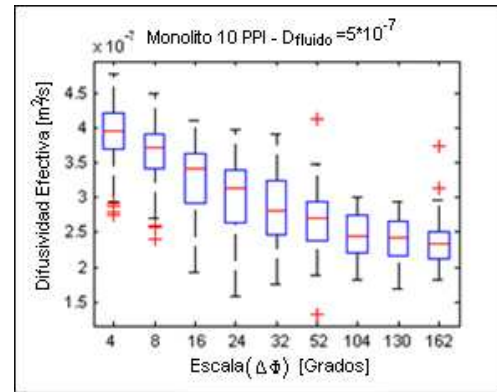
**Figura 8.** Perfil de temperatura generado por FEMLAB para una escala ( $\Delta\Phi$ ) de  $10^4$

Fuente: El autor

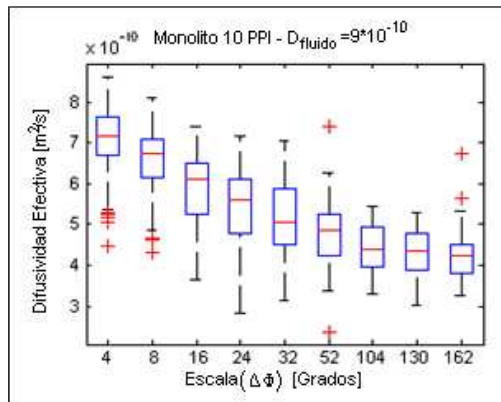
Tanto para la difusividad efectiva como para la conductividad efectiva, el promedio y la dispersión de su distribución disminuyen cuando aumenta la escala, lo que demuestra que, efectivamente, existe una tendencia entre la propiedad efectiva y el tamaño de muestra del monolito. En las figuras 9, 10 y 11 se presentan los diagramas de cajas y bigotes de la difusividad efectiva según la escala para los tres valores de  $D_{fluido}$  estudiados ( $4,86 \cdot 10^{-5}$ ,  $5 \cdot 10^{-7}$  y  $9 \cdot 10^{-10}$  m<sup>2</sup>/s). En las figuras 12 y 13 se muestran los diagramas de cajas y bigotes correspondientes a la conductividad efectiva para los dos valores de  $k_{fluido}$  simulados (0,01 y 0,001 J(m\*s\*K)), cada uno de ellos para los cinco factores sólido-fluido mencionados en la tabla 3.



**Figura 9.** Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva para  $D_{fluido} = 4,86 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



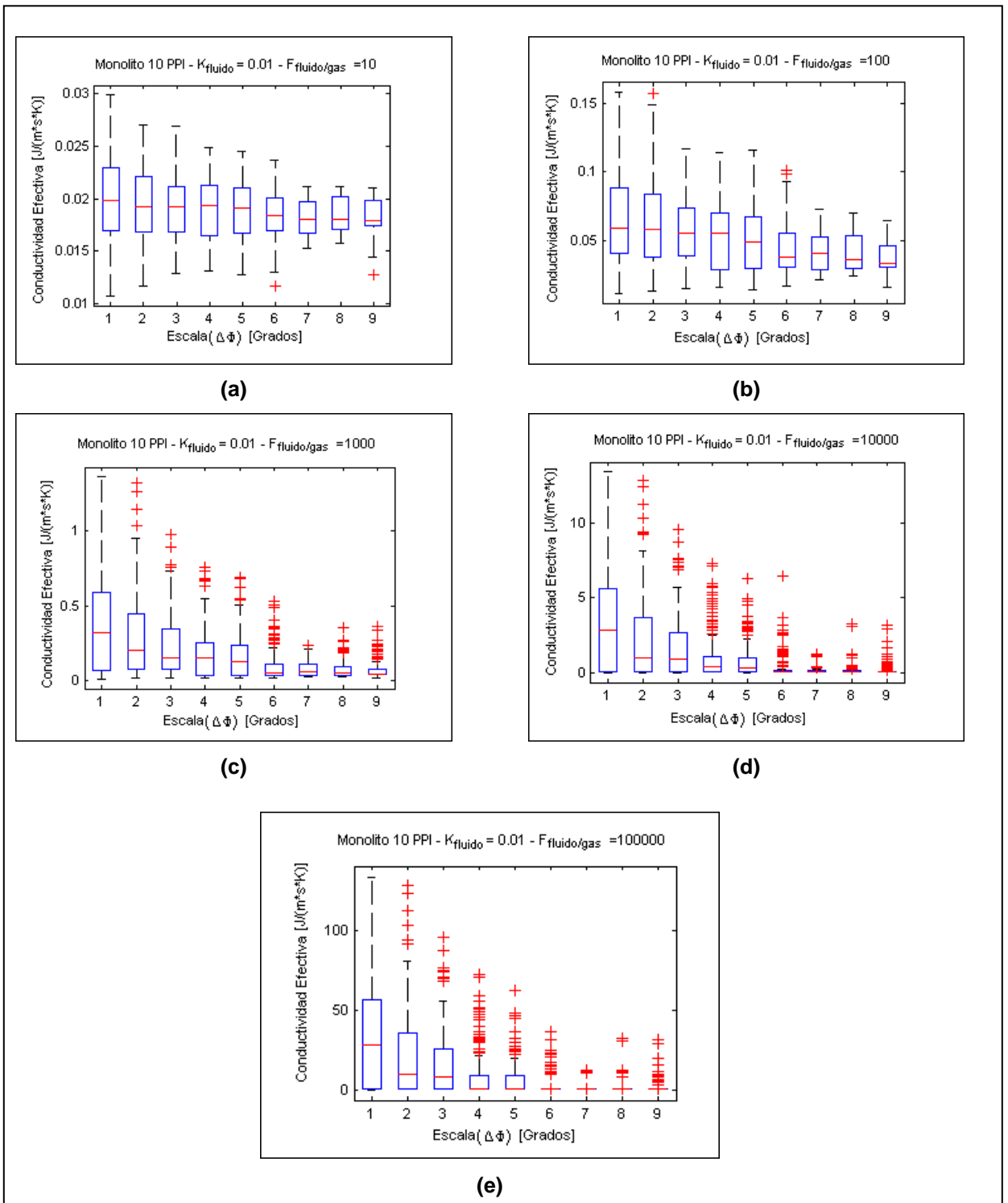
**Figura 10.** Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva cuando  $D_{fluido} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$



**Figura 11.** Diagrama de cajas y bigotes de la distribución de la difusividad efectiva para  $D_{fluido} = 9 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

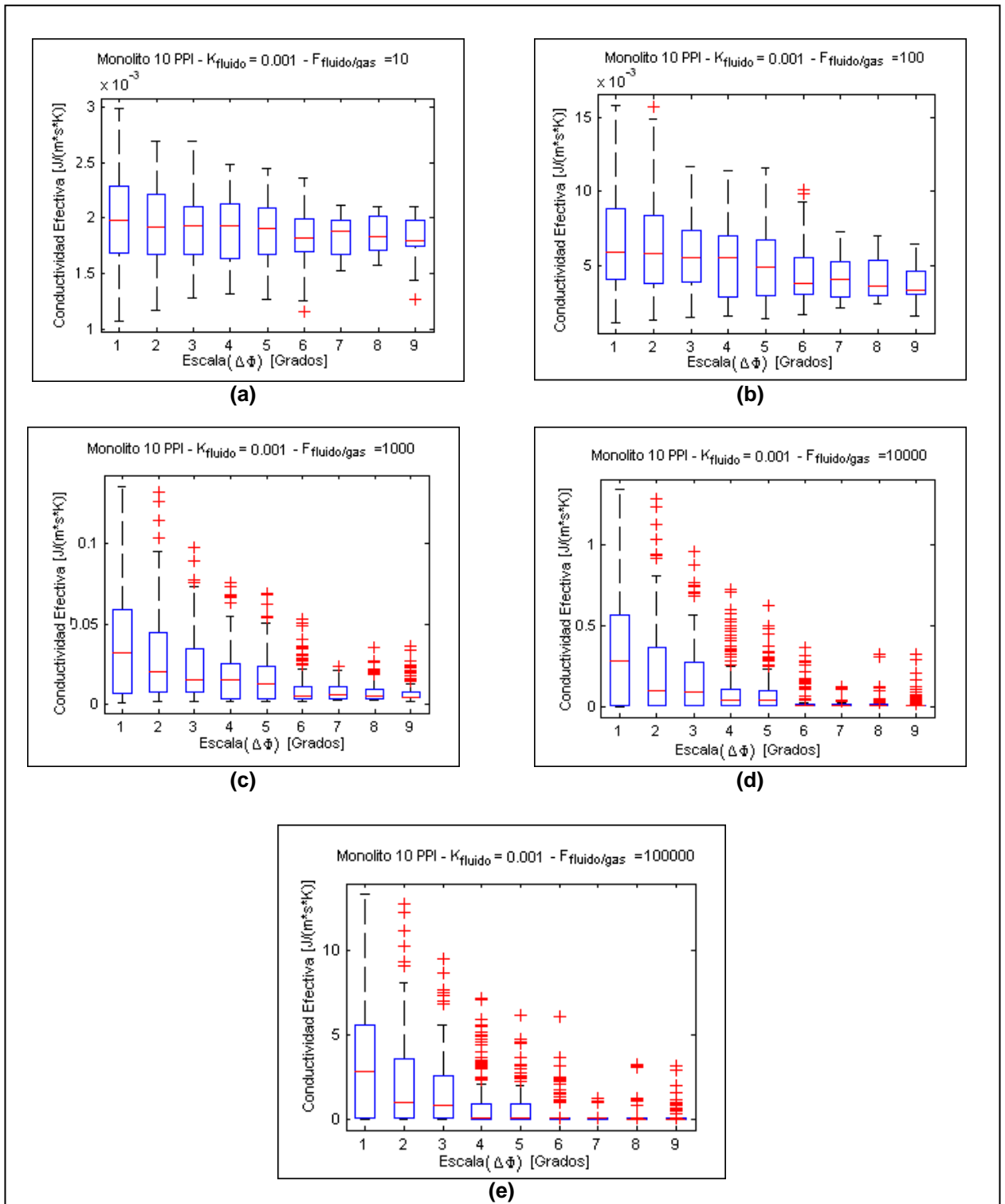
Fuente: El autor

Para el caso de la conductividad efectiva, el cambio en el valor de la propiedad efectiva y de la dispersión de su distribución con el aumento de escala se hace más fuerte a medida que se incrementa el factor sólido-fluido. Con ello se confirma, una vez más, tal como fue afirmado por Boomsma et al. (2001), que la conductividad térmica efectiva en el monolito está mayormente controlada por la conductividad térmica de la porción sólida, en este caso representada por el factor sólido-fluido,  $F_{sol/fluido}$ , a pesar de ser medios porosos con altas fracciones de vacío. En los diagramas de Pareto presentados en el Anexo D, se puede apreciar la importancia estadística de esta variable, comparada con las demás y sus interacciones.



**Figura 12.** Diagramas de cajas y bigotes de la distribución de la conductividad efectiva para  $k_{\text{fluido}} = 0,01 \text{ J}/(\text{m}^2\text{s}^*\text{K})$ . (a)  $F_{\text{sol/fluido}} = 10$ , (b)  $F_{\text{sol/fluido}} = 100$ , (c)  $F_{\text{sol/fluido}} = 10^3$ , (d)  $F_{\text{sol/fluido}} = 10^4$ , (e)  $F_{\text{sol/fluido}} = 10^5$

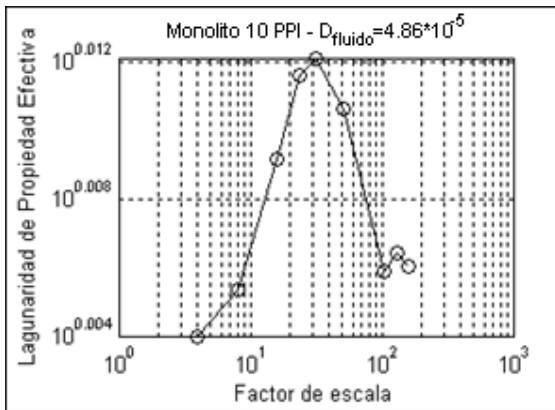
Fuente: El autor



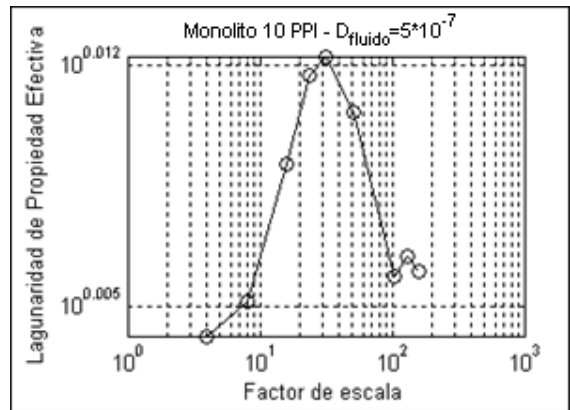
**Figura 13.** Diagramas de cajas y bigotes de la distribución de la conductividad efectiva para  $k_{fluido} = 0,001$  J/(m\*s\*K). (a)  $F_{sol/fluido} = 10$ , (b)  $F_{sol/fluido} = 100$ , (c)  $F_{sol/fluido} = 10^3$ , (d)  $F_{sol/fluido} = 10^4$ , (e)  $F_{sol/fluido} = 10^5$

Fuente: El autor

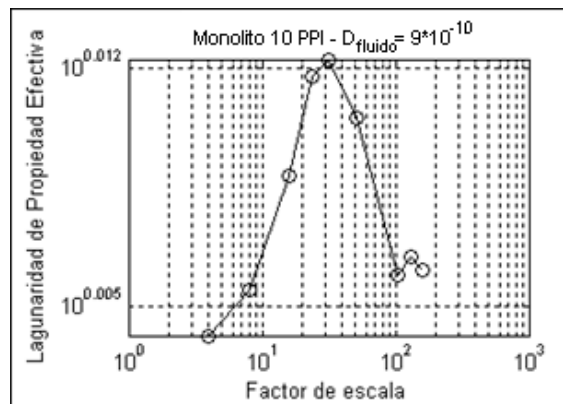
La escala más adecuada para el cálculo de propiedades efectivas se determinó aplicando el concepto de lagunaridad a los conjuntos de datos obtenidos durante la simulación y que fueron mostrados en las anteriores figuras. Esto se hizo con el fin de observar la heterogeneidad de los datos con el cambio de la escala, tomando en cuenta la dispersión y el promedio general de los valores de las propiedades efectivas en cada escala al mismo tiempo. A partir de esto se generaron las gráficas mostradas en las figuras 14, 15 y 16, para la lagunaridad de la difusividad efectiva, y las figuras 17 y 18, para la lagunaridad de la conductividad efectiva.



**Figura 14.** Lagunaridad de difusividad efectiva para  $D_{fluido} = 4,86 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ , en función de la escala



**Figura 15.** Lagunaridad de difusividad efectiva para  $D_{fluido} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ , en función de la escala

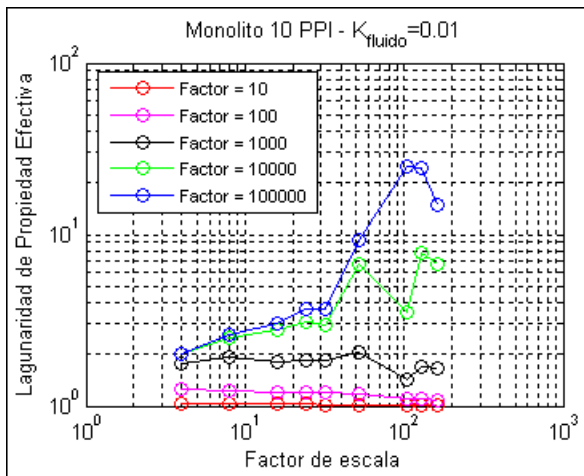


**Figura 16.** Lagunaridad de difusividad efectiva para  $D_{fluido} = 9 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ , en función de la escala

Fuente: El autor

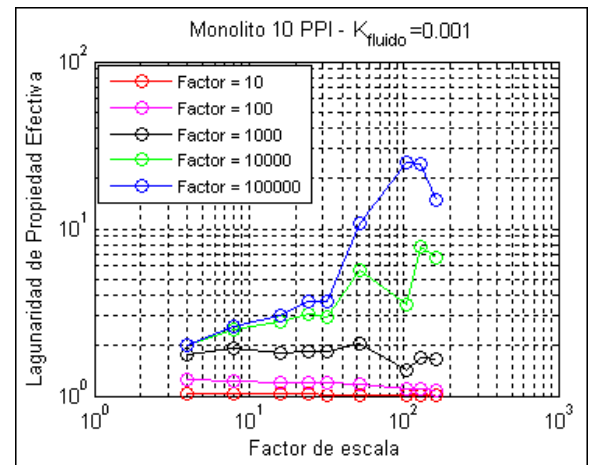
De las figuras 14, 15 y 16, se puede observar claramente que la lagunaridad es prácticamente invariante con el cambio de la difusividad del fluido en cada una de las escalas lo que significa que, para cualquier orden de magnitud de difusividad efectiva del fluido que se transporta a través del sólido, la heterogeneidad de los datos siempre será igual. Por consiguiente, para el cálculo de difusividades efectivas en este tipo de monolitos es recomendable trabajar a la menor escala posible. Aunque el orden de magnitud de la máxima lagunaridad obtenida es pequeño, cabe resaltar que en este punto máximo es poco recomendable calcular la difusividad efectiva debido a la heterogeneidad de valores que allí se presenta.

De acuerdo a las figuras 17 y 18, se puede observar que la lagunaridad de la  $k_{eff}$  se comporta exactamente igual para los dos valores de conductividad del fluido,  $k_{fluido}$ , es decir, la lagunaridad de la  $k_{eff}$  no depende de la propiedad de transporte del fluido, sino de la propiedad del sólido, representada aquí por el factor sólido-fluido ( $F_{sol/fluido}$ ).



**Figura 17.** Lagunaridad de conductividad efectiva para  $k_{fluido}=0,01$  J/(m\*s\*K) en función de la escala

Fuente: El autor

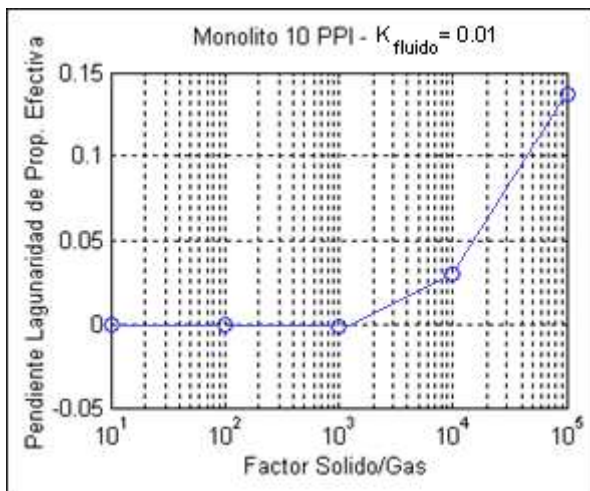


**Figura 18.** Lagunaridad de conductividad efectiva para  $k_{fluido}=0,001$  J/(m\*s\*K) en función de la escala

Fuente: El autor

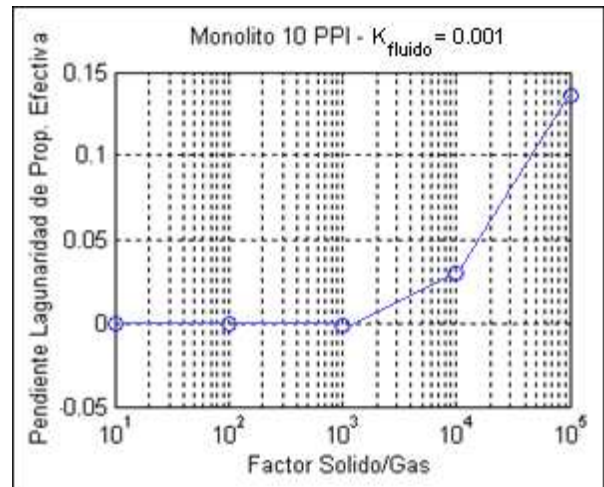
La variación de la heterogeneidad, se da con el cambio del  $F_{sol/fluido}$  de la siguiente manera: A mayor  $F_{sol/fluido}$ , mayor lagunaridad de  $k_{eff}$ , lo que indica que cuando la

propiedad del sólido es muy grande comparada con la propiedad del fluido, se obtienen datos de conductividad efectiva más dispersos. Así mismo, se observa también, en las figuras 19 y 20, que la pendiente calculada para cada curva de lagunaridad aumenta con el incremento del  $F_{sol/fluido}$  y que es exactamente igual para los dos valores de  $k_{fluido}$  trabajados. Esto significa que cuando el  $F_{sol/fluido}$  es grande, el cambio de una escala a otra genera mayores variaciones en la  $k_{eff}$  obtenida, contrario a lo que ocurre para  $F_{sol/fluido}$  pequeños.



**Figura 19.** Pendiente de la lagunaridad de la conductividad efectiva,  $k_{eff}$ , en función del factor sólido-fluido, para  $k_{fluido} = 0,01 \text{ J}/(\text{m}^*\text{s}*\text{K})$

Fuente: El autor



**Figura 20.** Pendiente de la lagunaridad de la conductividad efectiva,  $k_{eff}$ , en función del factor sólido-fluido, para  $k_{fluido} = 0,001 \text{ J}/(\text{m}^*\text{s}*\text{K})$

Fuente: El autor

En cuanto a la escala más adecuada para el cálculo de conductividades efectivas, de acuerdo a las figuras 19 y 20, se puede afirmar que, al igual que para la  $D_{eff}$ , es recomendable trabajar a la menor escala posible, en especial cuando el  $F_{sol/fluido}$  es alto, porque, como se puede ver en estas gráficas, para  $F_{sol/fluido}$  tan grandes como 10000 o 100000, se presenta un incremento brusco en la lagunaridad de la  $k_{eff}$  al aumentar la escala, lo que puede conducir a errores de gran magnitud en el cálculo de la propiedad efectiva. Para  $F_{sol/fluido}$  tan bajos como 10 y 100, la escala es prácticamente indiferente al valor de la heterogeneidad de los datos. Esta afirmación es aplicable a todo tipo de fluido que se transporte a través del

monolito, debido a que, como se afirmó anteriormente, la heterogeneidad en función de la escala no depende de la conductividad del fluido, tan sólo de la conductividad del material del que esté fabricado el monolito.

### 3.2. LAGUNARIDAD MÁSCICA

El comportamiento de la lagunaridad másica con la escala se muestra en la figura 21, en la cual se puede observar que cuando aumenta la escala, el valor de la lagunaridad másica disminuye, puesto que con el incremento del tamaño de la caja disminuye la varianza relativa de la masa, luego, va tomando un valor constante, es decir, para muestras más grandes, el sólido se hace menos heterogéneo y a partir de cierta escala, en este caso de 90-100°, la heterogeneidad del sólido es prácticamente invariable hasta llegar al punto en el cual el valor de la lagunaridad es casi 1, lo que hace que en este punto, el sólido sea considerado una estructura cuasi homogénea, es decir, un medio poroso con subestructuras cuya distribución de sólido es básicamente la misma.

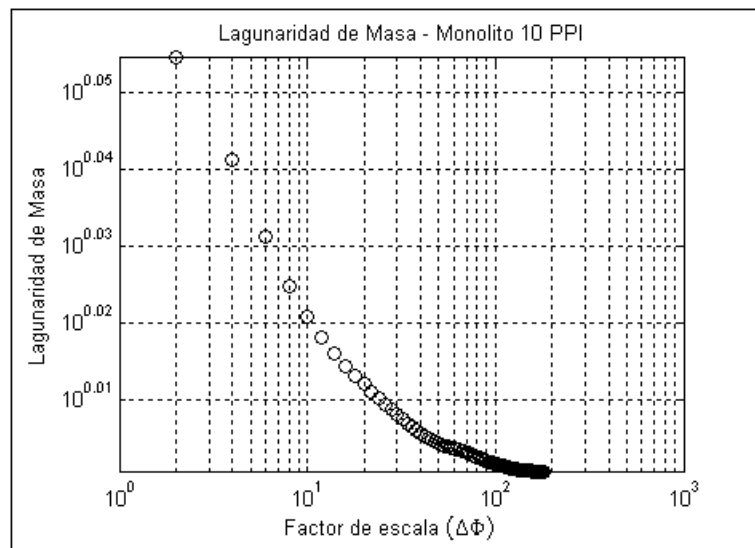


Figura 21. Lagunaridad másica para un monolito de 10 PPI

Fuente: El autor

### 3.3. CORRELACIONES DE PROPIEDADES EFECTIVAS EN FUNCIÓN DE LA LAGUNARIDAD

A partir de los valores de difusividad y conductividad efectivas obtenidos durante la etapa de simulación, presentados en el capítulo 3.1, se observó que la propiedad efectiva es una función lineal de la propiedad del fluido, ya sea  $D_{fluido}$  o  $k_{fluido}$ , es decir:

$$Prop_{eff} = Prop_{fluido} * f(L_m, F_{sol/fluido}) \quad Ec. 14$$

Aprovechando este hecho, se realizó el ajuste de los modelos con base, solamente, en la lagunaridad másica,  $L_m$ , del monolito y en el factor sólido-fluido,  $F_{sol/fluido}$ , para el caso del modelo de conducción térmica. A partir de esto, fue posible construir varios modelos empíricos apelando a la lógica de los datos, de los cuales fueron seleccionados los que mejor coeficiente de correlación presentaron. En el Anexo C se presenta un listado de estos modelos con su correspondiente coeficiente de correlación. Detalles del análisis estadístico de los modelos seleccionados se presentan en el Anexo D.

#### 3.3.1. Correlación para difusividad efectiva, $D_{eff}$

Como se mencionó arriba, en el ajuste de los modelo se simplificó la propiedad del fluido como factor común; de esta manera se hizo posible, entonces, hacer una regresión lineal simple, la cual fue luego transformada a una función de doble inversa por el software STATGRAPHICS, con el fin de lograr un modelo que se acercara de la manera más fiel posible a los datos producto de la simulación.

De esta manera se obtuvo la correlación representada en la ecuación 15:

$$D_{eff} = D_{fluido} * \exp\left(\frac{1}{\alpha + \frac{\beta}{L_m}}\right) \quad Ec. 15$$

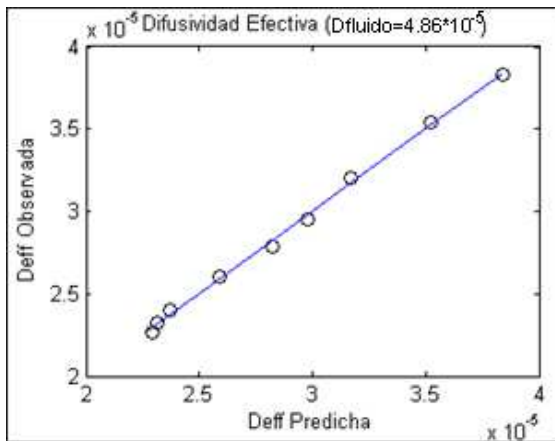
donde  $D_{eff}$  es la difusividad efectiva,  $D_{fluido}$  es la difusividad del fluido y  $L_m$  es la lagunaridad másica del monolito. El valor numérico de las constantes a y b se presenta en la tabla 4.

**Tabla 4.** Constantes de la correlación para la determinación de difusividad efectiva

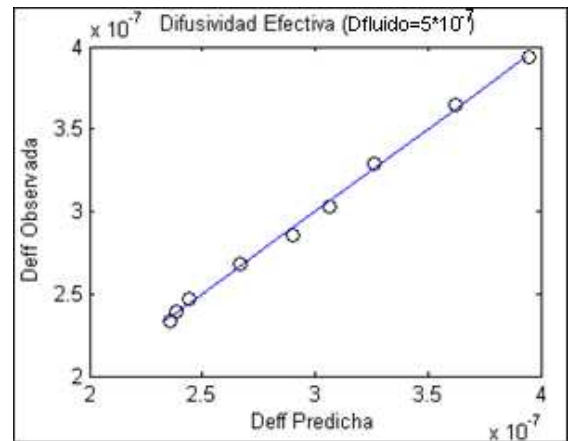
Constante	Valor
$\alpha$	-33,9754
$\beta$	32,6926

La Ec. 15 presenta un R-cuadrado de 99,8285%, lo cual indica que el modelo explica un alto porcentaje los resultados de la  $D_{eff}$ .

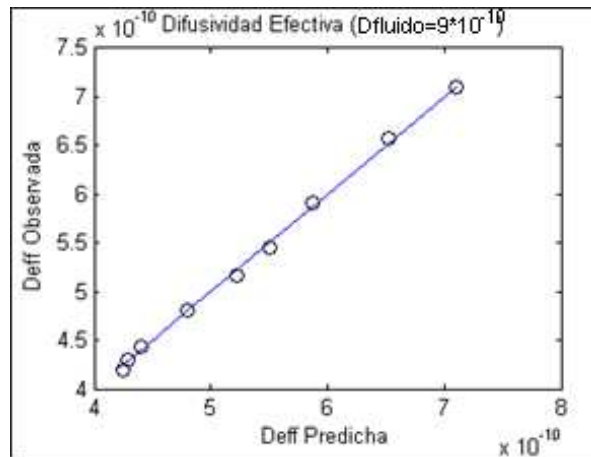
Las gráficas de valor de  $D_{eff}$  observado frente a predicho para las tres  $D_{fluido}$  trabajadas se muestran en las figura 22, 23 y 24; a partir de las cuales se puede apreciar la buena aproximación de la correlación propuesta.



**Figura 22.** Difusividad efectiva observada frente al valor predicho por la correlación para  $D_{fluido} = 4,86 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



**Figura 23.** Difusividad efectiva observada frente al valor predicho por la correlación para  $D_{fluido} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$



**Figura 24.** Difusividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para  $D_{fluido} = 9 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

Fuente: El autor

### 3.3.2. Correlaciones para conductividad efectiva, $k_{eff}$

Teniendo en cuenta la ecuación 14, las correlaciones para determinar la conductividad efectiva se determinaron solamente en función de la lagunaridad másica y del factor sólido-fluido. Debido a que hay más de una variable independiente, no fue posible aplicar un modelo de regresión simple como se hizo en el caso de la difusividad efectiva. Para esto, se aplicó un diseño experimental tipo multinivel factorial en donde las variables experimentales fueron la lagunaridad másica del monolito,  $L$ , y el factor sólido-fluido,  $F_{sol/fluido}$ ; la variable de respuesta fue la conductividad efectiva.

Debido a que cuando el  $F_{sol/fluido}$  es grande, el efecto sobre las propiedades efectivas se hace más fuerte que para  $F_{sol/fluido}$  pequeños, una misma correlación no se ajustó muy bien para todo el rango de  $F_{sol/fluido}$ , en especial para los más grandes. De esta manera, se hizo necesario el ajuste de dos modelos para la determinación de la conductividad efectiva. El primero, para  $F_{sol/fluido}$  menores a 100 (materiales de monolito poco conductores) y el segundo, para  $F_{sol/fluido}$  de 100 en adelante (monolitos muy conductores comparados con el fluido, como en el caso de los monolitos metálicos).

La primera correlación, aplicable a  $F_{sol/fluido}$  menores a 100, se presenta en la ecuación 16:

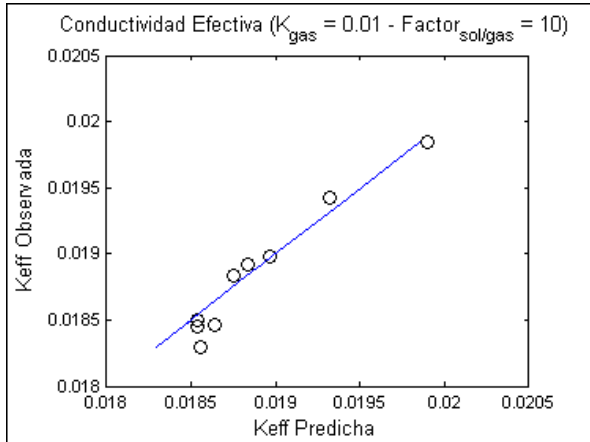
$$k_{eff1} = k_{fluido} * \exp(\alpha + \beta * \ln(F_{sol/fluido}) + \gamma * (L) + \delta * (L) * \ln(F_{sol/fluido})) \quad Ec. 16$$

donde  $k_{eff1}$  es la conductividad efectiva correspondiente a  $F_{sol/fluido}$  menores a 100,  $k_{fluido}$  es la conductividad del fluido,  $F_{sol/fluido}$  es el factor sólido-fluido y  $L$  es la lagunaridad másica del monolito. El valor numérico de las constantes se presenta en la tabla 5.

**Tabla 5.** Constantes de la correlación para la determinación de conductividad efectiva para  $F_{sol/fluido}$  menores a 100

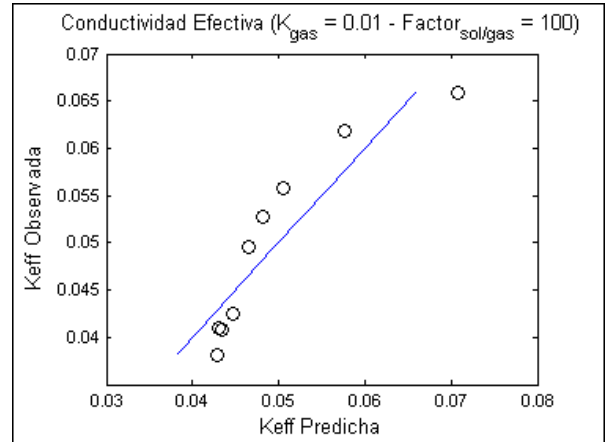
Constante	Valor
$\alpha$	3,44559
$\beta$	-1,54496
$\gamma$	-3,66333
$\delta$	1,90699

La Ec. 16 presenta un R-cuadrado de 98,7924% y las predicciones de la  $k_{eff}$  hechas por esta, para los dos  $F_{sol/fluido}$  correspondientes y para  $k_{fluido}=0,01$  J/(m\*s\*K), se muestran en las figuras 25 y 26, en las cuales se observa que, aunque la predicción no es exacta, es una buena aproximación al valor de conductividad efectiva obtenido por medios computacionales. El comportamiento de la correlación para otras  $k_{fluido}$  es exactamente igual.



**Figura 25.** Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para  $k_{fluido} = 0,01$  J/(m\*s\*K), para el  $F_{sol/fluido} = 10$

Fuente: El autor



**Figura 26.** Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para  $k_{fluido} = 0,01$  J/(m\*s\*K), para el  $F_{sol/fluido} = 100$

Fuente: El autor

La segunda correlación para la determinación de conductividad efectiva para valores de  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100 se presenta en la ecuación 17:

$$k_{eff2} = k_{fluido} * \exp(\alpha + \beta * \ln(F_{sol/fluido}) + \gamma * L + \delta * (L) * \ln(F_{sol/fluido}) + \zeta * (L)^2)$$

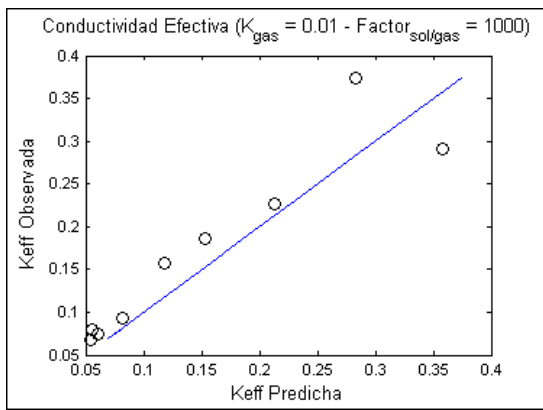
*Ec. 17*

donde  $k_{eff2}$  es la conductividad efectiva para  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100,  $k_{fluido}$  es la conductividad del fluido,  $F_{sol/fluido}$  es el factor sólido-fluido y  $L$  es la lagunaridad másica del monolito. El valor numérico de las constantes para esta correlación se presenta en la tabla 6.

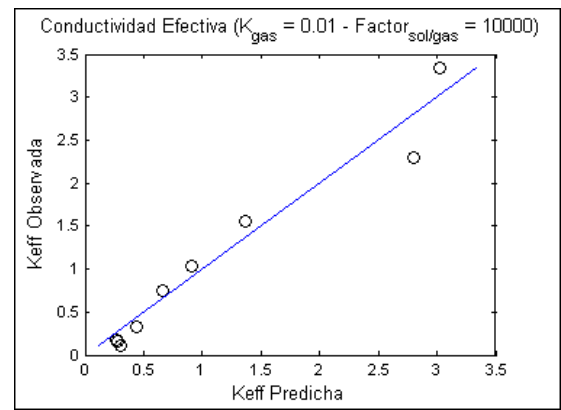
El R-cuadrado de esta ecuación es de 98,1472% y las predicciones para los tres  $F_{sol/fluido}$  correspondientes se muestran en las figuras 27, 28 y 29, a partir de las cuales se puede afirmar que, aunque para ciertos valores de conductividad efectiva la predicción deja de ser exacta, se puede considerar, sin embargo, que sigue siendo una buena aproximación a los valores de conductividad efectiva simulados.

**Tabla 6.** Constantes de la correlación para la determinación de conductividad efectiva para  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100

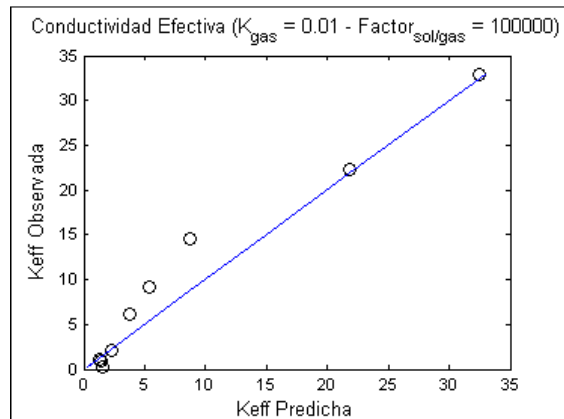
Constante	Valor
$\alpha$	-434,71
$\beta$	-2,71401
$\gamma$	828,308
$\delta$	3,40558
$\zeta$	-397,413



**Figura 27.** Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para  $k_{fluido} = 0,01$  J/(m\*s\*K), para el  $F_{sol/fluido} = 10^3$



**Figura 28.** Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para  $k_{fluido} = 0,01$  J/(m\*s\*K), para el  $F_{sol/fluido} = 10^4$



**Figura 29.** Conductividad efectiva observada en la simulación, frente al valor predicho por la correlación para  $k_{fluido} = 0,01$  J/(m\*s\*K), para el  $F_{sol/fluido} = 10^5$

Fuente: El autor

#### 4. CONCLUSIONES

El valor de la lagunaridad másica ( $L_m$ ) disminuye y tiende a ser constante cuando la escala ( $\Delta\Phi$ ) aumenta, debido a que con el incremento en el tamaño de la caja disminuye la varianza relativa de la masa. Esto demuestra que a escalas grandes, la distribución del sólido dentro del monolito se hace menos heterogénea hasta alcanzar un valor cuasi constante de lagunaridad.

Tanto la dispersión de la distribución de las propiedades efectivas como el valor promedio de las mismas disminuyen cuando aumenta la escala, lo que indica que, efectivamente, existe una tendencia entre las propiedades efectivas y la escala del monolito y la lagunaridad pudo representar esta relación con la sensibilidad requerida para un análisis del tamaño de escala correcto y del valor de las propiedades efectivas promedio.

Para la determinación de propiedades efectivas en monolitos tipo espuma se recomienda trabajar con la menor escala posible, debido a que, en este punto, los resultados de las propiedades efectivas determinados para cualquier posición de la caja sobre la imagen son menos heterogéneos que para cualquier otra escala.

La lagunaridad de la propiedad efectiva, o heterogeneidad de los datos obtenidos por escala, no depende de la propiedad del fluido, tan sólo del factor sólido-fluido y del tamaño de porción de sólido en estudio.

La variación de la propiedad efectiva promedio con la escala es más crítica cuando el factor sólido-fluido ( $F_{sol/fluido}$ ), se hace muy grande. Esto demuestra que en los monolitos tipo espuma, las propiedades efectivas de transporte están principalmente controladas por la propiedad de transporte de la porción sólida.

## **5. RECOMENDACIONES**

Se recomienda tomar en cuenta, en estudios posteriores, aportes por convección tanto de energía como de masa en el monolito, para ampliar, de esta manera, las correlaciones propuestas en el presente trabajo incluyendo en ellas el componente dinámico de las propiedades efectivas.

## REFERENCIAS

- Allain, C., Cloitre, M. *Physical Review A*. 44 (1991) p. 3552
- Boomsma, K., Poulikakos, D., Ventikos, Y. *Int. J. Heat Fluid Flow* 24 (2003) p. 825-834
- Burgos, N., Paulis, M., Montes, M. *Grupo de Ingeniería Químicas Departamento de Química Aplicada, Fac. de Química de San Sebastián. Universidad del País Vasco. San Sebastián, España* (2001) p. 190
- Carty, W., Lednor, P. *Current Opinion in Solids State & Materials Science*. (1996) p. 88-95
- Cheng, Q. *Computers & Geosciences*. 25. 1999, p. 1073-1079
- Dougherty, G. and Henebry, G.M. *Medical Engineering & Physics*. 23 (2001) p. 369-380
- DuPlessis, P., Montillet, A., J. Comiti, J. Legrand. *Chem. Eng. Sci.* 49 (1994) p. 3545-3553
- Giani, L., Groppi, G., Tronconi, E. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 44 (2005) p. 4993–5002
- Hickman, A., Schmidt, L.D. *J. Catal.* 136 (1992) p. 300
- Lévêque, J., Rouzineau, D., Prévost, M. and Meyer, M. *Chemical Engineering Science*. (2009) p. 2607-2616
- Lu, T.J., Stone, H.A., Ashby, M.F. *Acta Materialia* 46 (1998) p. 3619-1635
- Mandelbrot, B.B. *Fractals in Biology and Medicine* (1994) p. 21–28
- Ordóñez, I., Martínez, R., Álvarez-Ramírez, J. *Relación entre la tortuosidad y la lagunaridad de espumas monolíticas*. Universidad Industrial de Santander (2010) (Artículo en construcción)
- Richardson, J.T., Remue, D., Hung, J.K. *Applied Catalysis A: General* 250 (2003) p. 319–329

Seijger, G.B.F., Oudshoorn, O.L., Boekhorst, A., van Bakkum, H., van den Bleek, C.M., Calis, H.P.A. *Chemical Engineering Science* 56 (2001) p. 849–857  
Smith, T.G., Lange, G.D., Marks, W.B. *Journal of Neuroscience Methods* 69 (1996) p. 123-136

Tolle, C.R., McJunkin, T.R. *Physica D*, 179 (2003) p. 129-152

Vernon-Carter, J., Lobato-Calleros, C., Escarela-Pérez, R., Rodríguez, E., Álvarez-Ramírez, J. *Physica A*. 388 (2009) p. 4305-4314

Younis, L.B., Viskanta, R. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 36 (1993) p. 1425–1434

Zalc, J.M., Reyes, S.C., and Iglesia, E. *Chemical Engineering Science*. 59 (2004) p. 2947 – 2960

## ANEXO A. Algoritmo de *gliding box* programado en MATLAB 7.5

El algoritmo de *gliding box* programado para el presente trabajo consta de dos códigos principales. El primero calcula la masa para las cajas tipo pastel y el segundo se encarga de leer los datos resultantes del cálculo de la masa y con esta información determinar la lagunaridad de cada caja.

A continuación se presentan cada una de los códigos empleados.

### Cálculo de la masa

```
% MASA_CAJAPASTEL (IMAGEN)
%
% CALCULA LA MASA DE UNA IMAGEN CIRCULAR UTILIZANDO CAJAS PASTEL. CALCULO
% BASICO PARA LA ESTIMACION DE LA LAGUNARIDAD MASICA.
% LAS MASAS SE ALMACENAN EN UNA VARIABLE LLAMADA 'MASA' CONSIGNADA EN EL
% ARCHIVO 'MASA.mat' DEL CURRENT DIRECTORY
%
% 'IMAGEN' ES LA MATRIZ BINARIA DONDE SE ALMACENA LA IMAGEN DEL MONOLITO
%
%FORMA DE MONOLITO: CIRCULAR
%FORMA DE LA CAJA: PASTEL

NumEscalas=90;
NumCajas=180;

t0=clock;
disp(['Hora Inicio: ',datestr(now)])
warning off

DiamImg=length(Imagen);
Tamano=size(Imagen);

%SE DEFINE EL TAMAÑO Y UBICACION DE CADA ESCALA Y CADA CAJA
CrearIndicesPastel1(DiamImg,NumEscalas,NumCajas);

NombreRtas=[pwd, '\Masa.mat'];
disp(['Procesando Imagen ',NombreImagen])

Masa=zeros(2,NumEscalas,NumCajas);
save(NombreRtas, 'Masa')

for j=1:NumCajas %NUMERO DE CAJAS
```

```

IndicesTodos=[];

for k=1:NumEscalas
    NombreJ=['Indices_Escala',int2str(k),'.mat',];
    NombreK=['Indices_Caja',int2str(j)];

    S=load(NombreJ,NombreK);
    if isfield(S,NombreK)
        Indices=getfield(S,NombreK);

        IndicesTodos=[IndicesTodos; Indices];
        IndCaja=Imagen(IndicesTodos);
        IndSolido=find(IndCaja==1);

        Masa(1,k,j)=Escala(k);
        Masa(2,k,j)=length(IndSolido);
    else
        disp(['Los indices de la Caja ',int2str(j),' Escala
',int2str(k), 'no fueron tenidos en cuenta por que no existen'])
    end %if
end %for k

save(NombreRtas,'Masa','-append')

end %for j

disp(['Hora Fin: ',datestr(now)])
disp(['Tiempo Transcurrido
=',datestr(datetime(1,1,1,0,0,etime(clock,t0)),13)])

%=====
function
TamanoImg=CrearIndicesPastell(DiamImg,NumEscalas,NumCajas,CalcularInd)
%=====
MiArchivoIndices=['IndicesEscalasCajas.mat'];

%SE DEFINE LAS ESCALAS
Escala = linspace(2,180,NumEscalas);
%SE DEFINE LAS CAJAS
Angulos=fix(linspace(0,358,NumCajas));
save(MiArchivoIndices,'NumEscalas','NumCajas','Angulos','Escala')

Circulo1=MiCirculoV1([DiamImg DiamImg], fix(DiamImg/2));
IndCirculo1=find(Circulo1==1);
disp('Inicio de Creacion de Escalas y Cajas')

for j=1:NumCajas
    MisIndicesCaja=['Indices_Caja',int2str(j),'.mat'];

    if EscalaIni~=1
        DeltaAngulo = Escala(EscalaIni-1);

```

```

        Pastelito=CortarImagen360b(DiamImg,DeltaAngulo,Angulos(j));
        IndicesAnt=find(Pastelito==1);
    else
        IndicesAnt=[];
    end %if

    for k=1:NumEscalas
        %DELTA_ANGULO DEL PEDAZO DE PASTEL
        DeltaAngulo = Escala(k);

        Pastelito=CortarImagen360b(DiamImg,DeltaAngulo,Angulos(j));
        Indices=find(Pastelito==1);
        IndicesNuevos=setdiff(Indices,IndicesAnt);
        IndicesAnt=Indices;
        Indices=IndicesNuevos;

        IndEscala=['Indices_Escala',int2str(k)];
        eval([IndEscala,'=Indices;'])

        if ~exist(MisIndicesCaja,'file')
            save(MisIndicesCaja,IndEscala)
        else
            save(MisIndicesCaja,IndEscala,'-append')
        end %if

        Circulo1(Indices)=0;
        clear(IndEscala)
    end %for k
    disp(['Procesada todas las Escalas de la Caja ', int2str(j)])
end %for j

disp(['Fin de Creacion de Cajas ',datestr(now)])

```

```

%=====
function Img2=CortarImagen360b(Tam,AnguloCorte,AnguloIni)
%=====
R=fix(Tam/2);
Paso=0.5;if AnguloCorte<=(Paso*2),Paso=AnguloCorte;end
Angulos=AnguloIni:Paso:(AnguloIni+AnguloCorte);
if Angulos(end)~=(AnguloIni+AnguloCorte),Angulos=[Angulos
(AnguloIni+AnguloCorte)];end
[MiX,MiY] = pol2cart((-Angulos*pi/180),R);
Ind=1:2:length(MiX);
MiX=round([MiX(Ind)+Tam/2 R]);
MiY=round([MiY(Ind)+Tam/2 R]);
Img2=roipoly(zeros(Tam),MiX,MiY);

%=====
function f = MiCirculoV1(tam, R)
%=====
f = zeros(tam);
[n m] = size(f);

```

```

[N,M] = meshgrid(1:n, 1:m);
dist = sqrt(((N-n/2).^2)+((M-m/2).^2));
Ind=find(dist<=R);
f(Ind) = 1;
f = logical(f);

```

## Cálculo de Lagunaridad

```

function [Escala,L]=CalcularLacunaridad(Masa)
% [ESCALA,L] = CALCULARLACUNARIDAD(MASA)
%
% RETORNA LA LAGUNARIDAD 'L' DE UNA IMAGEN BASADA EN LA INFORMACION DE LA
% DISTRIBUCION DEL SOLIDO A DIFERENTES ESCALAS. 'MASA' ES UNA MATRIZ 3D
CON
% EL VALOR DE LA MASA CALCULADA EN CADA CAJA Y CADA ESCALA.
%

[I,K,J]=size(Masa);
L=zeros(1,K);

for k=1:K
    NumSolidos=Masa(2,k,:);
    NumSolidos=NumSolidos(:);

    PromNumSolidos=mean(NumSolidos);
    VarNumSolidos=var(NumSolidos);

    L(k)=(VarNumSolidos)/(PromNumSolidos.^2)+1;

end %for j

Ind=find(~isnan(L));
if ~isempty(Ind),L=L(Ind);,end

Escala=Masa(1,:,1);
if ~isempty(Ind),Escala=Escala(Ind);,end
Tabla=[Escala(:),L(:)];
Tabla=sortrows(Tabla,1);
Escala=Tabla(:,1);
L=Tabla(:,2);

figure
loglog(Escala,L,'ko')
xlabel('Escala')
ylabel('Lagunaridad')
grid on

```

## **ANEXO B. Interfaz gráfica para el ingreso de datos para la determinación de propiedades efectivas en FEMLAB 3.1**

En la figura B.1 se muestra la interfaz gráfica para el ingreso de datos para un modelo de difusividad. Al ingresar los datos, se pulsa el botón 'Crear Archivo de Datos' e inmediatamente estos se guardan en un archivo utilizado por el programa que calcula las propiedades efectivas. Esta interfaz gráfica se divide en tres grupos de datos.

En el primer grupo llamado 'Archivos para ejecución' se ingresan los archivos de trabajo necesarios para ejecutar el programa que calcula las propiedades efectivas. Entre estos se encuentran la carpeta en la cual se ubican los códigos y en donde se guardarán los archivos de respuesta, el archivo que contiene la imagen binaria del monolito, el archivo de los ángulos iniciales,  $\alpha$ , y las escalas a trabajar,  $\Delta\Phi$ , el archivo en el cual se guardarán las propiedades geométricas de las cajas y la carpeta donde se guardarán las respectivas geometrías.

En el segundo grupo, 'Parámetros Modelo Fenomenológico', se especifica cada una de las condiciones bajo las cuales se llevan a cabo los fenómenos de difusión y conducción. Aquí se especifica el tipo de modelo que se simulará, sea difusivo, 'D', o convectivo, 'K'; se definen también los valores de las propiedades de transporte del fluido y del factor sólido-fluido, las condiciones de frontera (concentración/temperatura alta y baja) y el tamaño del monolito simulado.

El último grupo denominado 'Opciones de ejecución' contiene las instrucciones a tener en cuenta para la simulación. Entre estas, el tipo de geometría que se quiere crear, sea pastel o rectángulo; las estrategias de geometría y de solución, en donde la primera contiene información de si se desea modificar algunas de las

opciones para crear las geometrías (escala, ángulo inicial o 'keepFrac'<sup>3</sup>) y en la segunda se elije el *solver* que se quiere usar para resolver los modelos; las escalas y cajas a evaluar; algunas opciones de guardado para la fem creada y la función que se desea ejecutar, sea sólo creación de geometrías, solución de modelos o las dos opciones, si se requiere.

Las opciones correspondientes a modelos dinámicos se encuentran inactivas debido a que para este trabajo sólo se determinó el componente dinámico para la transferencia de masa y de calor.



**Figura B.1.** Interfaz gráfica de MATLAB para el ingreso de datos para la determinación de propiedades efectivas en FEMLAB

<sup>3</sup> El 'KeepFrac' es una especificación del grado de exactitud al generar la malla en la geometría. Su valor oscila entre 0-1, donde 1 es el mayor grado de exactitud y 0 el más bajo.

**ANEXO C. Comparación de los modelos empíricos obtenidos para correlacionar las propiedades efectivas de transporte con la lagunaridad**

En las tabla C.1, C.2 y C.3 se presenta el listado de los modelos obtenidos para correlacionar las propiedades efectivas con la lagunaridad másica con su correspondiente valor de R<sup>2</sup>. El mejor modelo se seleccionó con base en este valor y se muestra resaltado en color azul en cada tabla.

**Tabla C.1.** Modelos empíricos que correlacionan la difusividad efectiva y la lagunaridad másica del monolito

Modelo	R <sup>2</sup>
$D_{eff} = D_{ftuideo} * \exp(-6,06 + 5,37 * L_m)$	87,46%
$D_{eff} = D_{ftuideo} * (-2,84 + 3,34 * L_m)$	91,60%
$D_{eff} = D_{ftuideo} * \exp(-0,69 + 5,65 * \ln(L_m))$	88,32%
$D_{eff} = D_{ftuideo} * (0,498 + 3,511 * \ln(L_m))$	92,32%
$D_{eff} = D_{ftuideo} * \exp\left(\frac{1}{-33,98 + 32,69/L_m}\right)$	99,83%
$D_{eff} = D_{ftuideo} * \left(\frac{1}{-7,76 + 9,76/L_m}\right)$	84,61%

**Tabla C.2.** Modelos empíricos que correlacionan la conductividad efectiva y la lagunaridad másica del monolito para factores sólido/fluido menores a 100

Modelo	R <sup>2</sup>
$k_{eff} = k_{ftuideo} * \exp(3,45 - 1,54 * \ln\left(\frac{F_{sol}}{ftuideo}\right) - 3,66 * L_m + 1,91 * \ln(F_{sol}/ftuideo) * L_m)$	98,79%
$k_{eff} = k_{ftuideo} * \exp(-106,47 - 2,89 * \ln(F_{sol}/ftuideo) + 209,59 * L_m + 13,24 * \ln(F_{sol}/ftuideo) - 103,46 * (L_m)^2)$	98,10%

**Tabla C.3.** Modelos empíricos que correlacionan la conductividad efectiva y la lagunaridad másica del monolito para factores sólido/fluido mayores a 100

Modelo	R <sup>2</sup>
$k_{eff} = k_{ftuideo} * \exp(-434,07 - 2,71 * \ln\left(\frac{F_{sol}}{ftuideo}\right) + 828,31 * L_m + 3,41 * \ln\left(\frac{F_{sol}}{ftuideo}\right) * L_m - 397,41 * (L_m)^2)$	98,15%
$k_{eff} = k_{ftuideo} * \exp(-565,62 + 0,94 * \ln(F_{sol}/ftuideo) + 1041,4 * L_m - 481,74 * (L_m)^2)$	97,58%

**ANEXO D. Análisis estadístico para la determinación de las correlaciones  
para calcular propiedades efectivas de transporte**

**Correlación para determinar difusividad efectiva,  $D_{eff}$**

A continuación se presenta un resumen del análisis estadístico (Tabla ANOVA) de la correlación para el cálculo de difusividad efectiva, entregado por STATGRAPHICS.

Análisis de la Varianza					
Fuente	Suma de cuadrados	GL	Cuadrado medio	Cociente-F	P-Valor
Modelo	7,60037	1	7,60037	4074,08	0,0000
Residuo	0,0130588	7	0,00186554		
Total (Corr.)	7,61343	8			

Coefficiente de Correlación = 0,999142

R-cuadrado = 99,8285 porcentaje

R-cuadrado (ajustado para g.l.) = 99,804 porcentaje

Error estándar de est. = 0,0431919

Error absoluto medio = 0,032697

Estadístico de Durbin-Watson = 1,81354 (P=0,2332)

Autocorrelación residual en Lag 1 = 0,0165407

Dado que el p-valor en la tabla ANOVA es inferior a 0.01, existe relación estadísticamente significativa entre  $D_{eff}$  y  $Lag_{Masica}$  para un nivel de confianza del 99%.

**Correlaciones para determinar conductividad efectiva,  $k_{eff}$**

***Correlación aplicable a factores sólido-fluido menores a 100***

El resumen estadístico generado por STATGRAPHICS, junto con la tabla ANOVA, resultado del ajuste del modelo de la primera correlación para el cálculo de conductividad efectiva (para  $F_{sol/fluido}$  menores a 100), se presenta a continuación:

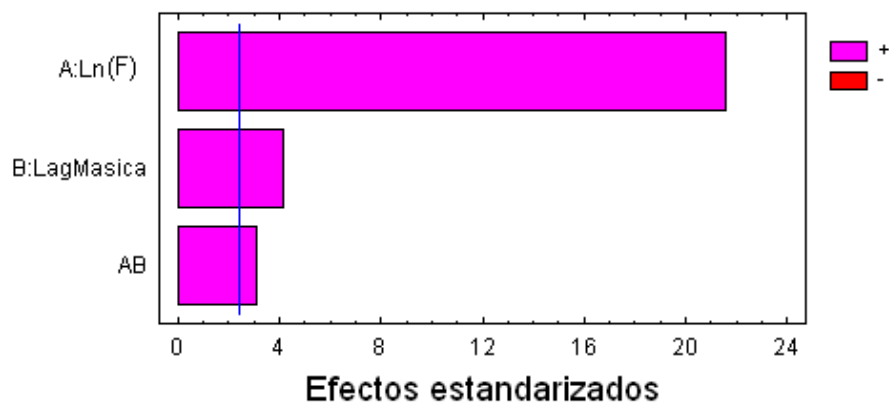
Análisis de la Varianza para Keff					
Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado medio	F-Ratio	P-Valor
A:Ln(F)	2,78215	1	2,78215	464,15	0,0000
B:LagMasica	0,102397	1	0,102397	17,08	0,0061
AB	0,0577625	1	0,0577625	9,64	0,0210
Error Total	0,0359647	6	0,00599412		
-----					
Total (corr.)	2,97832	9			

R-cuadrado = 98,7924 por ciento  
 R-cuadrado (ajustado para g.l.) = 98,1887 por ciento  
 Error Estándar de Est. = 0,0774217  
 Error absoluto de la media = 0,0395128  
 Estadístico Durbin-Watson = 1,76939 (P=0,4289)  
 Autocorrelación residual Lag 1 = 0,0408436

La tabla de ANOVA divide la variabilidad en Keff en distintos segmentos separados para cada uno de los efectos. En este caso, 3 de los efectos tienen los p-valores inferiores a 0,05, indicando que son significativamente diferentes de cero al 95,0% de nivel de confianza.

En la figura D.1 se muestra el diagrama de Pareto para el modelo de conductividad efectiva ajustado para los factores sólido-fluido menores a 100, en el cual se puede apreciar la significación estadística de las variables involucradas en el modelo y sus interacciones.

Gráfico de Pareto estandarizado para Keff



**Figura D.1.** Gráfico de Pareto estandarizado para la conductividad efectiva,  $k_{eff}$ , aplicable a  $F_{sol/fluido}$  menores a 100

En la figura D.2 se presenta el gráfico de efectos principales para las variables experimentales usadas en el diseño experimental,  $\ln(F_{sol/fluido})$  y Lagunaridad másica, L, sobre la variable respuesta,  $k_{eff}$ , para factores sólido-fluido menores a 100.



**Figura D.2.** Gráfico de efectos principales de las variables experimentales sobre la conductividad efectiva, aplicable a  $F_{sol/fluido}$  menores a 100

### **Correlación aplicable a factores sólido-fluido menores a 100**

El resumen estadístico generado por STATGRAPHICS, junto con la tabla ANOVA, resultado del ajuste del modelo de la segunda correlación para el cálculo de conductividad efectiva (para  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100), se presenta a continuación:

#### **Análisis de la Varianza para Keff**

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado medio	F-Ratio	P-Valor
A:Ln(F)	39,5074	1	39,5074	389,95	0,0000
B:LagMasica	11,0417	1	11,0417	108,99	0,0000
AB	0,736867	1	0,736867	7,27	0,0224
BB	2,38109	1	2,38109	23,50	0,0007
Error Total	1,01313	10	0,101313		
Total (corr.)	54,6815	14			

R-cuadrado = 98,1472 por ciento  
R-cuadrado (ajustado para g.l.) = 97,4061 por ciento  
Error Estándar de Est. = 0,318298  
Error absoluto de la media = 0,223852  
Estadístico Durbin-Watson = 1,85935 (P=0,2088)  
Autocorrelación residual Lag 1 = 0,0413199

La tabla de ANOVA divide la variabilidad en  $k_{eff}$  en distintos segmentos separados para cada uno de los efectos. En este caso, 4 de los efectos tienen los p-valores inferiores a 0,05, indicando que son significativamente diferentes de cero al 95,0% de nivel de confianza.

En la figura D.3 se presenta el diagrama de Pareto para el modelo de conductividad efectiva ajustado para los factores sólido-fluido mayores a 100, en el cual se puede apreciar la significación estadística de las variables involucradas en el modelo y sus interacciones.

Gráfico de Pareto estandarizado para  $k_{eff}$

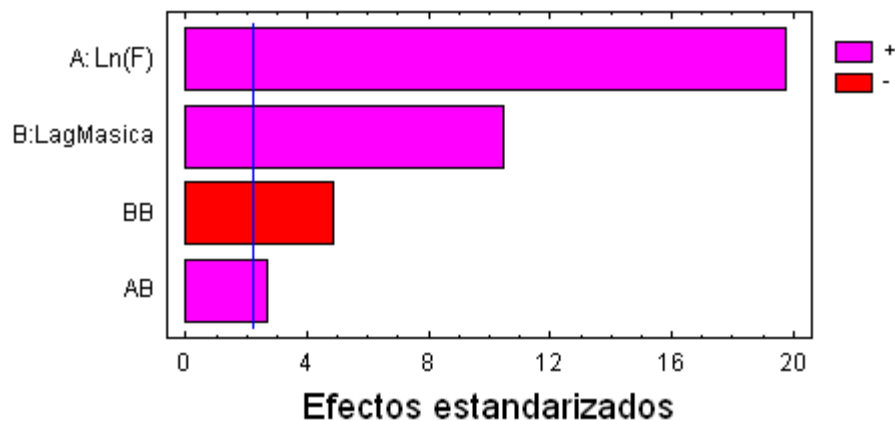
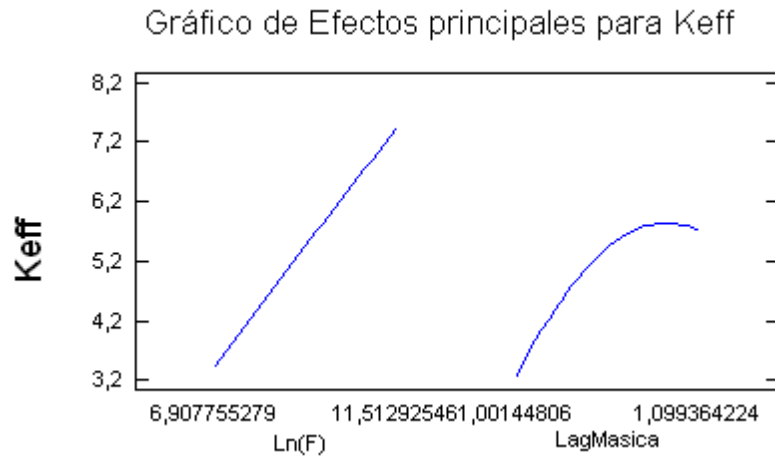


Figura D.3. Gráfico de Pareto estandarizado para la conductividad efectiva,  $k_{eff}$ , aplicable a  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100

En la figura D.4 se presenta el gráfico de efectos principales para las variables experimentales usadas en el diseño experimental,  $\ln(F_{sol/fluido})$  y Lagunaridad másica,  $L_m$ , sobre la variable respuesta,  $k_{eff}$ , para  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100.



**Figura D.4.** Gráfico de efectos principales de las variables experimentales sobre la conductividad efectiva, aplicable a  $F_{sol/fluido}$  mayores a 100