

# Análisis Comparativo de la Difusividad Efectiva, Artificial y Real en Materiales Porosos

## Comparative analysis of effective diffusivity, artificial and real in porous materials

Jorge Manriquez<sup>1</sup> y Pablo Olivares<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad de Ingeniería, Universidad de Santiago de Chile

<sup>2</sup>J.E.J. Ingeniería S.A.

[jorge.manriquez@usach.cl](mailto:jorge.manriquez@usach.cl)

### Resumen

Se comparó el transporte de una especie a través de una estructura porosa teórica artificial y una real analizando el efecto que tiene la porosidad y tortuosidad en la difusión de la especie a través de un dominio modelado que representa ambas estructuras. Para la modelación dinámica se usaron las ecuaciones de transporte de especies químicas sin convección y sin el término de reacciones químicas en el dominio. Una vez alcanzado el estado estacionario el flujo promedio para la estructura artificial es  $8,051 \times 10^{-3}$  [mol·m<sup>2</sup>/s] y la concentración promedio en la salida es  $c_{out} = 1,61 \times 10^3$  utilizando  $L_0 = 8 \times 10^4$  [m], en tanto que para la estructura real el flujo promedio resultó ser mayor e igual a  $2,5 \times 10^{-2}$  [mol·m<sup>2</sup>/s] y la concentración promedio en la salida menor e igual a  $1,43 \times 10^3$  [mol/m<sup>3</sup>] con  $L_0 = 6,4 \times 10^4$  [m]. Los resultados de flujo y concentración muestran que la transferencia de masa se favorece en la estructura real y disminuye a medida que usamos modelos con suposiciones teóricas y geométricas cada vez más diferentes a ésta.

**Palabras Clave:** Porosidad; Tortuosidad; Difusividad; Transporte; Modelación.

### Abstract

The transport of a species through an artificial theoretical porous structure and a real was compared by analyzing the effect that porosity and tortuosity have on the diffusion of the species through a modeled domain that represents both structures. For the dynamic modeling, the transport equations of chemical species without convection and without the term of chemical reactions in the domain were used. Once the steady state is reached, the average flow for the artificial structure is  $8.051 \times 10^{-3}$  [mol·m<sup>2</sup>/s] and the average concentration at the outlet is  $c_{out} = 1.61 \times 10^3$  using  $L_0 = 8 \times 10^4$  [m], while for the real structure the average flow turned out to be greater than and equal to  $2.5 \times 10^{-2}$  [mol·m<sup>2</sup>/s] and the average concentration at the outlet less than and equal to  $1.43 \times 10^3$  [mol/m<sup>3</sup>] with  $L_0 = 6.4 \times 10^4$  [m]. The flux and concentration results show that mass transfer is favored in the real structure and decreases as we use models with increasingly different theoretical and geometric assumptions than this one.

**Keywords:** Porosity; Tortuosity; Diffusivity; Transport; Modeling.

## Introducción

El modelo introduce el concepto de la difusividad efectiva en materiales porosos mediante la comparación del transporte difusivo a través de una estructura porosa artificial y una más cercana a lo que se encuentra en la realidad respecto de una estructura homogénea simplificada.

## Antecedentes Teóricos

Los poros de un granulo no son rectos, ni cilíndricos; más bien son una serie de trayectos tortuosos, con interconexiones que consisten en caminos de área de sección variable (ver Figura N° 1). Por lo tanto, no se puede plantear que la difusión se produce en todos y en cada uno de los tortuosos caminos de una estructura porosa. Por ello es que se define la difusividad efectiva, que describe una difusión promedio que ocurre dentro de un granulo (Scott Fogler, 2001).

La difusividad efectiva toma en cuenta el hecho de que:

- No toda el área normal a la dirección del flujo está disponible para la difusión de las moléculas (es decir, no es toda hueca).
- Los caminos son tortuosos.
- Los poros tienen área de sección transversal variable.
- La difusividad efectiva ( $D^{\text{eff}}$ ) está relacionada con difusión libre ( $D$ ) por la siguiente expresión:

$$D^{\text{eff}} = D \frac{\epsilon}{\tau} \quad (1)$$

Donde  $\epsilon$  es la porosidad de la estructura y es la tortuosidad, la primera relaciona el volumen de espacio hueco respecto al volumen total. Mientras que la segunda representa una medida de la longitud real por unidad de longitud efectiva que tiene una molécula para difundir en un granulo poroso (Comsol, 2007a; Comsol, 2007b).

## Descripción del Modelo

### Geometría

A continuación se presentan las geometrías utilizadas en el programa como gránulos porosos, en la izquierda la estructura porosa artificial y en la derecha la estructura ramificada o más "real".

### Definición del Modelo para el estudio

La ecuación del modelo en el dominio presentado en la Figura N° 2, correspondiente a la física de trans-

porte de especies diluidas, en su condición dependiente del tiempo es:

$$\partial c_i / \partial t + u \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (D \nabla c_i) + R_i \quad (2)$$

El término de la izquierda corresponde a la variación en el tiempo de la concentración del soluto  $i$ ,  $u \cdot \nabla c_i$  representa al mecanismo de transporte de masa por convección,  $\nabla \cdot (D \nabla c_i)$  representa al transporte de masa por difusión y finalmente  $R_i$  es el término fuente correspondiente a una reacción química en todo el volumen de control (Szekely y Themelis, 1971; Gaskell, 1992) o dominio en términos de modelación (Comsol, 2007b).

El modelo a estudiar no considera el término convectivo ni una fuente externa por lo que la ecuación resultante es:

$$\partial c_i / \partial t = \nabla \cdot (D \nabla c_i) \quad (3)$$

Donde  $c_i$  esta en  $\text{mol}/\text{m}^3$  y  $D$  el coeficiente de difusión en  $\text{m}^2/\text{s}$ .

### Condiciones de Borde

Las condiciones de borde son de tres tipos. Una condición de borde de concentración aplicada en el lado vertical izquierdo de las estructuras en Figura N° 2 expresada como:

$$c = c_0 \quad (4)$$

Donde  $c_0$ : Concentración inicial [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ].

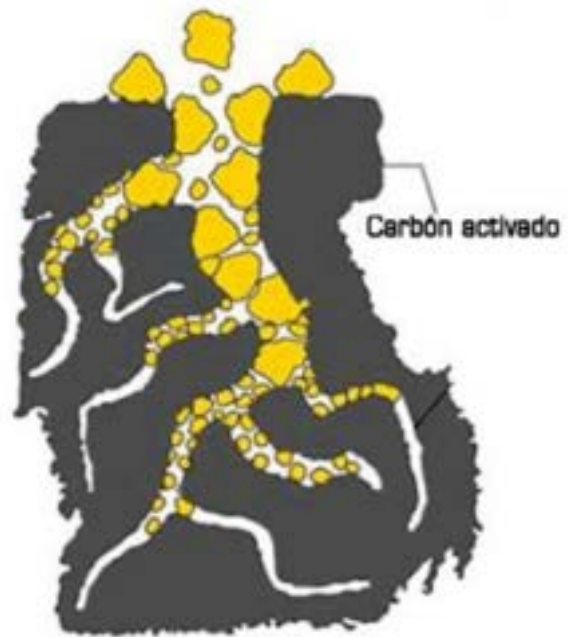


Figura N° 1. Esquema de una estructura porosa, partícula de carbón activado.

El borde vertical derecho de las estructuras en Figura N° 2 se establece según:

$$-(D\nabla c) \cdot n = k_m(c - c_b) \quad (5)$$

Donde

$k_m$ : Coeficiente de transferencia de masa [m/s]

$c_b$ : Concentración de la solución en el seno del fluido, fuera de la estructura porosa.

Los restantes bordes corresponden a bordes de aislación según:

$$-(D\nabla c) \cdot n = 0 \quad (6)$$

La condición inicial está dada por el perfil en forma de campana de la concentración a lo largo del eje x, con su máximo en  $x=0$ , correspondiente a  $c = c_0$ .

$$c(t_0) = c_0 \exp(-ax^2) \quad (7)$$

**Parámetros**

Parámetro	Expresión
Coeficiente de Difusión	10-5 [m²/s]
Concentración inicial	3[mol/m³]
Coeficiente de transferencia de masa	5 [m/s]
Constante adimensional	1000

Tabla N° 1. Parámetros del Sistema.

**Resultados y Discusión**

Las simulaciones se ejecutaron desde  $t=0$  a  $t=0,1$  s para el granulo artificial y desde  $t = 0$  a  $t = x 0,11$  para la estructura más real, tiempos en que las estructuras alcanzan el estado estacionario.

La Figura N° 3 muestra el perfil de concentración luego de 0,05 s en el granulo artificial y en 0,055 en el ramificado. En esta etapa la concentración casi ha alcanzado el estado estacionario, lo cual es visible debido al perfil casi lineal de la concentración a través de ambas estructuras.

En la modelación de materiales porosos, conocer el valor exacto de la concentración en la estructura no es lo más importante debido a que generalmente se asume que el granulo es homogéneo y no detallado tal cual se aprecian las estructuras de la Figura N° 3. En consecuencia lo más interesante es entonces la descripción del flujo. Para calcular el flujo promedio, integramos sobre el borde del flujo y se divide por la longitud  $L_0$ , obteniendo la siguiente expresión:

$$\text{Flujo}_{\text{promedio}} = \frac{1}{L_0} \int_0^{L_0} k_m(c - c_b) dS \quad (8)$$

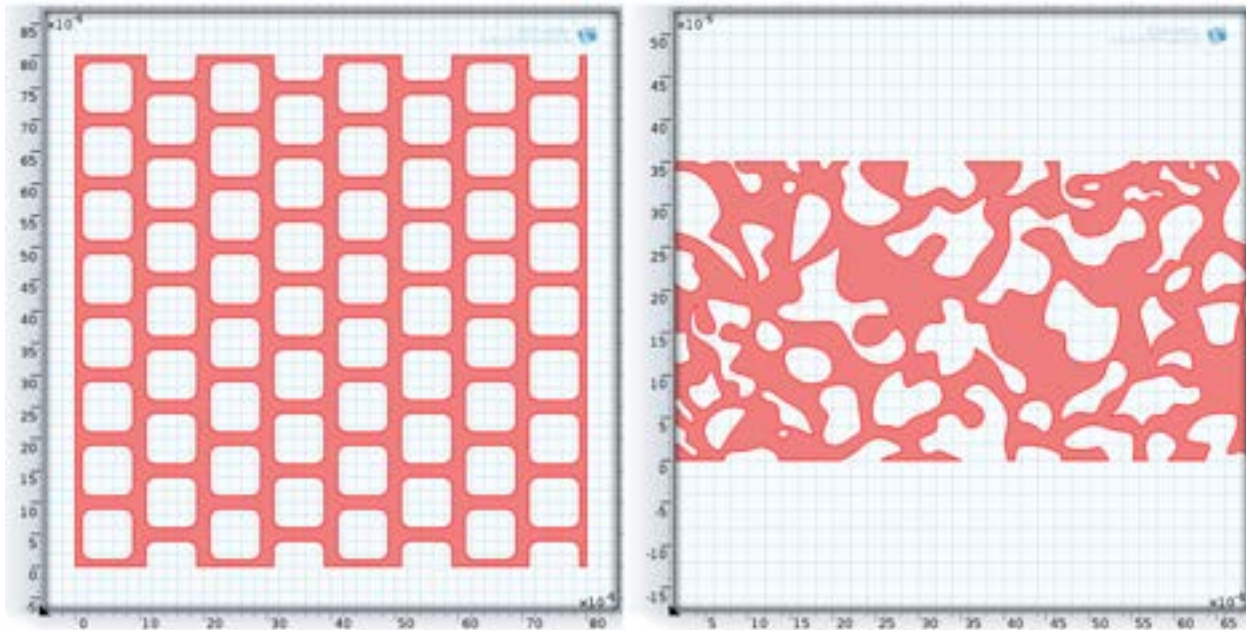


Figura N° 2. Estructuras porosas artificial y real.

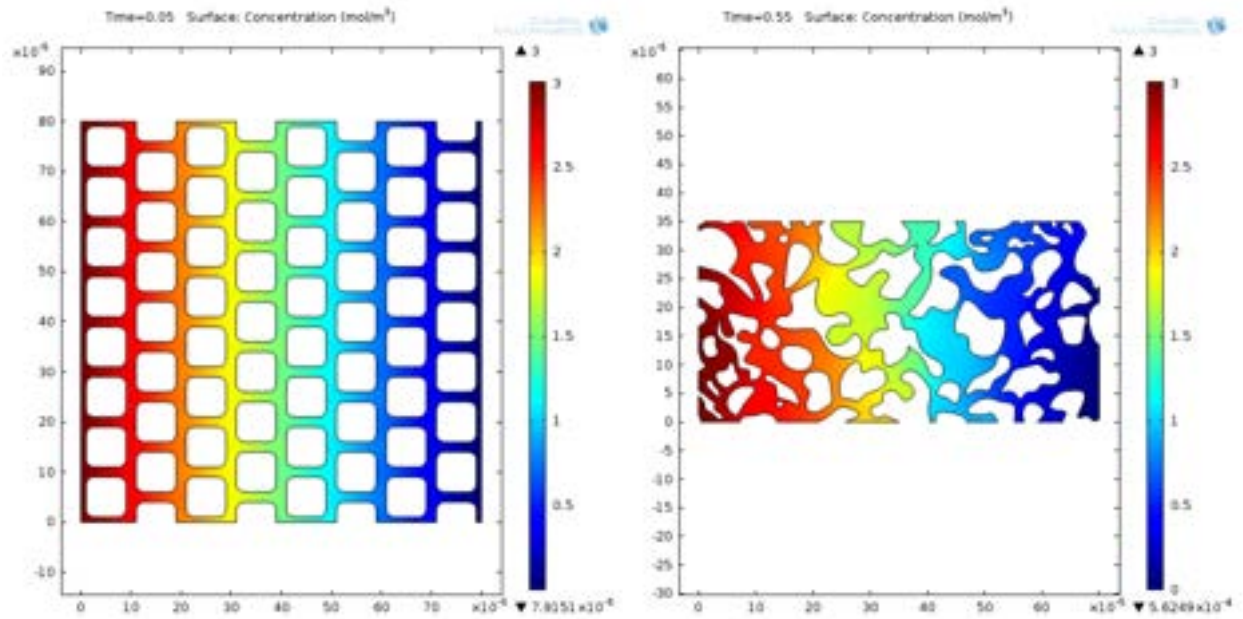


Figura N° 3. Perfil de concentración en estructuras porosas.

El valor del flujo promedio una vez que el sistema alcanza el estado estacionario es de  $8,051 \times 10^{-3}$  [mol·m<sup>2</sup>/s] para el granulo artificial en tanto que el ramificado resulto ser de 0,025 [mol·m<sup>2</sup>/s] tal cual muestra la Figura N° 4.

Calculando luego la difusividad efectiva de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\text{Flujo}_{\text{promedio}} = D^{eff} \frac{(c_0 - c_{out})}{L_0} \quad (9)$$

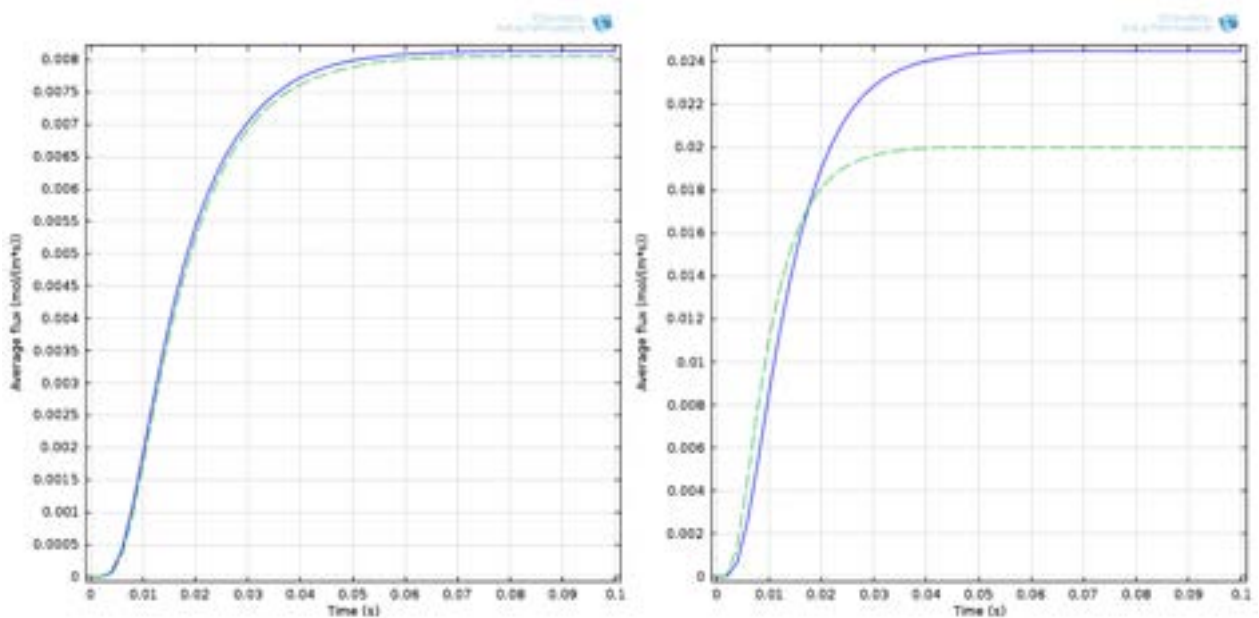


Figura N° 4. Flujo promedio en estructuras porosas, en la izquierda granulo artificial y en la derecha granulo ramificado, las que se identifican con la línea solida azul. Mientras que las segmentadas de color verde representan la aproximación a un modelo 1D homogéneo.

En la que  $c_{out}$  ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ) es la concentración promedio en la salida y  $L_0$  es la longitud de las geometrías a lo largo del eje x. La concentración promedio se obtiene por medio de la siguiente integral:

$$c_{out} = \frac{1}{L_0} \int_0^{L_0} c \, dS \quad (10)$$

Teniendo que  $c_{out} = 1,61 \cdot 10^3$  y de  $1,43 \cdot 10^3$  [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ] para el granulo artificial y ramificado respectivamente, utilizando  $L_0 = 8 \cdot 10^4$  y  $6,4 \cdot 10^4$  [m]. Conocida la concentración de salida y reemplazando el resto en la ecuación 9, obtenemos la difusividad efectiva. Que como se vio anteriormente está relacionada a la difusividad libre a través de la ecuación 1.

La Tabla N° 2 nos entrega los resultados de la difusividad efectiva obtenida de la ecuación 9, la porosidad integrando los huecos y tortuosidad obtenida de la ecuación 1 en ambas estructuras porosas.

Utilizando los valores de la difusividad efectiva en un granulo homogéneo 1D brinda la posibilidad de comparar el flujo promedio de la estructuras porosas presentadas en la Figura N° 2 respecto a un granulo homogéneo simple 1D. La Figura N° 4 (a la izquierda) muestra que existe una excelente concordancia entre el granulo artificial y el modelo simple 1D en todo el rango de tiempo analizado [0, 0,1s]. La diferencia en el flux promedio es apenas visible en estos casos.

En tanto que la Figura N° 4 (a la derecha) muestra que solo hay una buena concordancia entre el granulo ramificado y uno simple 1D en un rango de tiempo entre [0 y 0,02 s]. A partir de los 0,02 se aprecia un desacople entre ambas estructuras.

Estos resultados nos indican que en el caso del granulo artificial si es posible aproximar su comportamiento a una estructura homogénea simple en una dimensión. Mientras que para una estructura más compleja como el granulo ramificado esta suposición puede ser posible solo para rangos de tiempo acotados, en este caso entre 0 a 0,02 s.

## Conclusiones

La concentración alcanza el estado estacionario luego de 0,05 s en el granulo artificial y en 0,055 en el ramificado.

Alcanzado el estado estacionario el flujo promedio para el granulo artificial es de  $8,051 \cdot 10^{-3}$  [ $\text{mol} \cdot \text{m}^2/\text{s}$ ] y para el granulo ramificado es de  $25 \cdot 10^{-3}$  [ $\text{mol} \cdot \text{m}^2/\text{s}$ ].

La concentración promedio en la salida para el granulo artificial es  $c_{out} = 1,61 \cdot 10^3$  utilizando  $L_0 = 8 \cdot 10^4$  y para el granulo "real" de  $1,43 \cdot 10^3$  [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ] con  $L_0 = 6,4 \cdot 10^4$  [m].

La difusividad efectiva, porosidad y tortuosidad muestran que la transferencia de masa es favorecida en una estructura "real".

A medida que la estructura se acerca a un granulo real, el modelo de difusividad efectiva es menos representativo.

## Recomendaciones

De las dos últimas conclusiones el próximo estudio será la transferencia de masa en distintas estructuras reales, con diferentes porosidades y tortuosidades.

Parámetro	Granulo artificial	Granulo ramificado
Difusividad Efectiva [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]	$2,15 \cdot 10^{-6}$	$5,33 \cdot 10^{-6}$
Porosidad	0,382	0,5536
Tortuosidad	1,73	1,03

Tabla N° 2. Resumen de resultados ( $D = 10^{-5}$  [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]).

## Referencias

---

COMSOL Multiphysics. 2007a. Effective diffusivity in porous materials. Comsol Documentation.

COMSOL Multiphysics. 2007b. Comsol Documentation, COMSOL 4.3b CPU License No: 2079130.

Gaskell DR. 1992. An introduction to transport phenomena in materials engineering. Macmillan Publishing Company, Nueva York, USA.

Scott Fogler H. 2001. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Pearson Educación, México

Szekely J, Themelis NJ. 1971. Rate phenomena in process metallurgy. John Wiley and Sons, Londres, UK.