



**UNIVERSIDAD DE CONCEPCION
FACULTAD DE INGENIERIA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUIMICA**

**SIMULACION DE FLUJO EN MEDIOS POROSOS Y SEDIMENTOS
MEDIANTE METODOS DE MONTE CARLO, GAS AUTOMATA Y
RETICULO DE BOLTZMANN**

TESIS PRESENTADA A LA

**ESCUELA DE GRADUADOS
DE LA UNIVERSIDAD DE CONCEPCION**

POR

JAVIER RENE QUISPE CURASI

PARA OPTAR AL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA CON MENCIÓN EN
INGENIERIA QUIMICA**

CONCEPCION – CHILE

2002



UNIVERSITY OF CONCEPCION
FACULTY OF ENGINEERING
DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING

SIMULATION OF FLOW IN POROUS MEDIA AND SEDIMENTS
BY MONTE CARLO, LATTICE GAS AUTOMATA AND LATTICE
BOLTZMANN METHODS

SUBMITTED TO

GRADUATE SCHOOL
UNIVERSITY OF CONCEPCION

BY

JAVIER RENE QUISPE CURASI

IN PARTIAL FULFILLMENT OF THE REQUIREMENTS FOR THE DEGREE OF

DOCTOR OF SCIENCE IN CHEMICAL ENGINEERING

CONCEPCION – CHILE

2002

Resumen

El flujo de fluidos y partículas en medios porosos ocurre en prácticamente todas las aplicaciones industriales y también en el medio ambiente natural. Aplicaciones importantes incluyen la explotación de gas y petróleo; migración de contaminantes y fertilizantes en suelos; lixiviación de minerales, especialmente de cobre; manufactura de papel; secado de madera, papel, alimentos; preparación de catalizadores y materiales cerámicos; procesos de separación con catalizadores, membranas, filtros, columnas empacadas; diseño y funcionamiento de cementos y hormigones. Aplicaciones relacionadas incluyen operaciones de separación sólido-líquido como la sedimentación. Una mejor comprensión de fenómenos de flujo en medios porosos, migración de partículas y sedimentación es entonces necesaria para optimizar diseños actuales de procesos y para proponer nuevos diseños e incluso nuevos procesos.

La simulación de fenómenos de flujo en materiales porosos es difícil por la naturaleza compleja de la geometría y topología del espacio poroso y la heterogeneidad en la composición química de las superficies internas. El problema es agravado por efectos multicomponentes, multifásicos, presencia de partículas sólidas y fenómenos de deformación, entre varios otros. Así, la simulación tradicional de flujo en medios porosos es difícil y de carácter limitado. El resultado generalmente es un ajuste de historia con escasa o nula capacidad predictiva. En cuanto a sedimentación, a pesar que sigue siendo intensa y extensamente estudiada, hasta ahora no ha sido posible generar un modelo con capacidad predictiva. La imposibilidad de atacar estos problemas con esquemas numéricos tradicionales, diferencias finitas y elementos finitos, ha estimulado el uso de métodos discretos inspirados en la filosofía de los autómatas celulares desarrollados para simular fluidos. De estos, los métodos de Gas Automata (LGA) y Retículo de Boltzmann (LB) son los más notables.

En la primera parte de este trabajo se plantea la posibilidad de simular rigurosamente el proceso de sedimentación a nivel de partículas, que permita describir el movimiento de las partículas y sus interacciones entre sí y con el medio fluido. La base del modelo es mecánica, basada en mecanismos físicos que ocurren a nivel de partículas, y constituye una simulación de Monte Carlo del proceso de sedimentación. El modelo considera fuerzas de gravedad, hidrodinámicas, de interacción entre partículas y aleatorias. El modelo con su simplicidad es capaz de reproducir satisfactoriamente todas las características del comportamiento de la sedimentación de partículas de tamaño

monodisperso. Dado que las partículas son tratadas individualmente, el modelo se puede aplicar fácilmente a sistemas con partículas de tamaño distribuido. A pesar que las simulaciones presentadas en este trabajo se realizan en un retículo cuadrado, las simulaciones pueden ser extendidas fácilmente a tres dimensiones y a dominios libres de retículo.

En la segunda parte de este trabajo se emplea el método de LGA y el método de Retículo de Boltzmann LB, más estable, menos ruidoso, y más flexible que LGA, para simular flujo de fluidos en materiales porosos artificiales y en medios porosos reales granulares, que se forman al interior de sedimentos durante el proceso de sedimentación de suspensiones de partículas esféricas de vidrio y arena. Adicionalmente, se estudia la relación entre la permeabilidad de materiales porosos y su dependencia funcional con la porosidad en sistemas que exhiben evolución de porosidad. El método LB para simular fluidos es una evolución del método LGA. Ambos métodos tienen su origen en la teoría cinética de los gases. La idea común detrás de estos métodos es que el proceso de advección y colisión de partículas de fluido puede conducir a las ecuaciones de Navier-Stokes cuando la colisión conserva masa, momento y energía. Adicionalmente, las partículas deben moverse a lo largo de los enlaces de un retículo altamente simétrico. El método de LGA utiliza un modelo de 7 partículas en un retículo hexagonal (conocido como FHP-7 en la literatura). El método de LB utiliza un modelo de 9 velocidades en un retículo ortogonal (conocido como D2Q9 en la literatura). Ambos métodos son implementados computacionalmente aquí con atención especial a condiciones iniciales y de borde.

El modelo LB utilizado en este trabajo es validado, más rigurosamente que LGA, en tres situaciones. 1. Capacidad para modelar flujo Poiseuille mediante comparación directa con la solución analítica. Se investiga el efecto de resolución del retículo y su orientación espacial en la solución, dos temas que concitan gran interés. 2. Capacidad para modelar flujo en empaques regulares de esferas mediante comparación con resultados precisos del método MAC de diferencias finitas. 3. Capacidad para modelar flujo en medios porosos de mediana complejidad también mediante comparación con resultados del método MAC. En los experimentos de simulación de flujo Poiseuille se encuentra que la refinación del retículo es determinada por los poros más pequeños y no puede ser menor a 5 unidades de retículo en la longitud más corta de los poros. Esta restricción mejora la calidad de la solución de LB y la representación de la condición de borde de no-deslizamiento. También se encuentra que la inclinación del retículo no representa dificultad alguna en la simulación de flujo mediante LB. Para el experimento numérico de flujo de fluidos en empaques regulares se encuentra excelente acuerdo entre los campos de velocidades calculados con MAC y LB. Como extensión, la permeabilidad de LB también concuerda con la de MAC. Los experimentos numéricos en medios