

Universidad de Concepción
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Química

Profesor Patrocinante:
Pedro G. Toledo R.

Permeabilidad de Medios Porosos: Experimentos Numéricos y Teoría

Roberto Eduardo Rozas Cárdenas

Tesis presentada a la Escuela de Graduados
de la Universidad de Concepción para optar al Grado de

Magíster en Ciencias de la Ingeniería con Mención en Ingeniería Química

Concepción, Chile, Septiembre de 2002

Resumen

La permeabilidad es la propiedad que determina el flujo a través de un medio poroso, en régimen laminar queda definida por la ley Darcy. En literatura se encuentran numerosas expresiones que intentan relacionar la permeabilidad con la porosidad; sin embargo, ninguna de ellas representa satisfactoriamente el comportamiento de la permeabilidad observado en diversas clases de materiales porosos, no poseen carácter universal. Los resultados experimentales disponibles en literatura señalan que relaciones tipo Carman-Kozeny y leyes de potencia simple entre la permeabilidad y la porosidad son satisfactorias en rangos estrechos de porosidad en un mismo material. Hasta ahora las desviaciones observadas respecto de estas relaciones son atribuidas sin mayor argumentación a errores experimentales en la determinación de permeabilidad a baja porosidad.

En este trabajo se estudia, mediante simulación de Monte Carlo, la evolución de las propiedades geométricas y de transporte, y la relación entre ellas, de un material poroso sometido a compactación. El espacio poroso es representado mediante redes regulares, cuadrada y cúbica, de conductos de tamaño distribuido que son deformados de acuerdo a un mecanismo de compactación aleatorio. Las propiedades de transporte, específicamente la permeabilidad y la conductividad eléctrica, son estimadas en forma rigurosa mediante simulación de Monte Carlo; la solución es corroborada mediante aproximación de medio efectivo. Dado que Monte Carlo conduce a un sistema lineal de 10^5 o más ecuaciones, aquí se implementa un algoritmo de almacenamiento óptimo de matrices, denominado, almacenamiento ralo simétrico. Por otra parte, dadas las características de condicionamiento del sistema, para su solución se utiliza el algoritmo de sobrerrelajación sucesiva simétrica preconditionada con gradiente conjugado de parámetros fijos y optimizados en forma empírica.

Otra propiedad de interés es la longitud característica de un medio poroso que fija la escala de las propiedades de transporte. Diversas longitudes han sido propuestas, entre ellas el radio hidráulico. Sin embargo, de acuerdo a los resultados, la longitud crítica se muestra particularmente sensible a cambios en la microestructura porosa a medida que se compacta. Esta longitud se encuentra relacionada con el camino de mínima resistencia en una situación de flujo en un medio poroso y se determina mediante un experimento clásico o numérico de porosimetría. Los resultados de simulación de Monte Carlo reproducen el comportamiento observado en datos experimentales de permeabilidad-porosidad, incluyendo aquellos aspectos que hasta ahora han sido atribuidos a error experimental. Durante una compactación débil todas las propiedades de medios porosos pueden ser relacionadas mediante leyes simples de potencia, válidas en todo el rango de porosidad. En compactaciones severas se observan cambios abruptos en las propiedades de transporte y en la longitud crítica. Estos cambios, que se manifiestan como puntos singulares en las propiedades cuando se despliegan en función de la porosidad, en este trabajo son interpretados en términos de transiciones en la microestructura de los materiales porosos. La existencia de estas transiciones es comprobada aquí mediante una extensión de la teoría de percolación a materiales que sufren transiciones del tipo conductor-conductor débil. Si un material posee una población de poros que en proporción es mayor que la probabilidad crítica de percolación de la red que lo representa, el tamaño característico de esta población domina las propiedades de transporte del material. Cuando esta proporción es igual a la probabilidad crítica de percolación, entonces existe un camino crítico conexo de estos poros a través del medio; un avance diferencial en este estado hacia una porosidad más baja implica, en una muestra representativa, la desaparición del camino conexo de poros de mayor conductancia. Esto es, ocurre una transición de microestructura que se manifiesta como un descenso abrupto en las propiedades macroscópicas del material, tales como la conductividad eléctrica, permeabilidad, difusividad, etc. Los puntos de inflexión observados en resultados de permeabilidad experimentales representados en escala logarítmica no son más que la evidencia de tales transiciones.

La presencia de transiciones indica la necesidad de incorporar nuevos parámetros en las relaciones de permeabilidad, a fin de otorgarles carácter predictivo, notablemente la

longitud crítica y la porosidad a la que ocurren las transiciones microestructurales. Dos relaciones con carácter universal se establecen en base a los resultados de simulación de Monte Carlo. La primera, de Katz y Thompson (1986) $k = \alpha l_c^2 / F$, establece una relación entre la permeabilidad k , la longitud crítica l_c y el factor de formación F . Esta ley tiene sustento en análisis de trayectoria crítica y teoría de percolación. La segunda, $k = \alpha l_c^2 (\phi - \phi'_c)$, donde ϕ'_c es una porosidad pseudocrítica, es postulada aquí en base a las relaciones de escalamiento que exhibe la permeabilidad y la longitud característica con la porosidad.

Las rutinas implementadas en esta tesis se reúnen en un programa que denominamos PROTRAN. Se trata de una interfaz Windows a un grupo de rutinas que permite la estimación de la permeabilidad, conductividad eléctrica y longitudes características a distintos valores de porosidad. El programa permite también simular experimentos de porosimetría y obtener gráficos de patrones de flujo. Las variables de alimentación de las rutinas son la dimensión de la red, el método de cálculo de las propiedades de transporte, el factor de compactación y la distribución de tamaño de poros.