

Universidad de Concepción
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Química

Profesor Patrocinante:
Sr. Pedro G. Toledo Ramírez

Morfología, Flujo y Transporte en Materiales



Cecilia Isabel Bustos Morán

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

Doctor en Ciencias de la Ingeniería con Mención en Ingeniería Química

Resumen

Una mejor caracterización de los espacios porosos y una mejor comprensión de los fenómenos de flujo y transporte en estos espacios es fundamental para analizar, diseñar y optimizar una gran variedad de procesos y tecnologías de interés práctico, como son la recuperación de gas y petróleo de yacimientos subterráneos, el transporte de fertilizantes y contaminantes en el subsuelo, el flujo y transporte en suelos sometidos a carga, el secado y congelado de alimentos, el diseño de catalizadores y productos cerámicos, el proceso de sedimentación y el de lixiviación en la industria minera, el secado y congelado de alimentos, la manufactura de papel, el flujo y transporte en materiales cerámicos y catalizadores, entre otros. Así, el trabajo de investigación aquí se orienta a la formulación de un modelo mecanístico general, a escala de segmentos de poro, de flujo y transporte en redes de poros, que en flujo bifásico permita predecir distribuciones de fluido, presiones capilares y permeabilidades relativas de fases mojante y no-mojante en drenado y en embebido.

El medio poroso se representa mediante redes regulares de ductos y nodos, cuadradas en dos dimensiones y cúbicas en tres dimensiones. El tamaño de los ductos se asigna de acuerdo a una función de distribución. La sección transversal de los ductos es poligonal, con lo que se asegura capacidad de inventario de fluido en esquinas de poros. Para minimizar efectos de tamaño de muestreo se utiliza condiciones de borde periódicas en la dirección perpendicular al flujo global.

En la primera parte de este trabajo se modela flujo bifásico en medios porosos, en régimen capilar, considerando toda la riqueza conocida de mecanismos de desplazamiento de fluidos a escala microscópica en redes bi- y tri-dimensionales de poros geométrica y topológicamente bien definidos. El modelo constituye una simulación de Monte Carlo del proceso de drenado y embebido en una red de poros. Se analiza el efecto de la dimensionalidad de la red, la distribución de tamaño de poros y, especialmente, el impacto de la forma de los segmentos de poro y la presión de descabezamiento en el proceso de embebido, relacionada con la asimetría de los poros reales y la rugosidad de sus paredes. Especial objetivo es explicar la histéresis en los comportamientos de drenado y embebido en régimen capilar, la inversión de las curvas de permeabilidad relativa detectada en experimentos y los datos aparentemente conflictivos de permeabilidad relativa en medios consolidados y no consolidados. La distribución de fluidos en la red se determina considerando un régimen capilar de flujo, esto es, velocidades pequeñas y

sin gradientes externos significativos de presión. Se ha encontrado un único parámetro capaz de modificar el comportamiento de la curva de permeabilidad relativa de fase no-mojante durante el proceso de embebido. Se trata de la presión de descabezamiento que quiebra la fase no-mojante en el seno de un poro y la expulsa en dirección de los poros vecinos. De esta manera se ha logrado representar el comportamiento, hasta ahora muy poco entendido y explicado exclusivamente mediante correlación de tamaño entre poros, de las curvas de permeabilidad relativa en materiales consolidados y no consolidados. La permeabilidad relativa de la fase mojanante exhibe algo de histéresis para la presión de descabezamiento ideal, pero su comportamiento es como el experimental en drenaje y en embebido. El uso de una presión de descabezamiento mayor que la ideal, pero menor que la de drenado en el mismo poro, es un desafío a la idealización recurrente en la literatura que en embebido los meniscos cilíndricos entre fase mojanante y no-mojante avanzan en los segmentos de poro hasta perder contacto con la superficie sólida.

En la segunda parte se estudia el proceso de condensación capilar, simulando la condensación de un vapor en respuesta a una disminución de la presión, como en condensación retrógrada. A diferencia del flujo bifásico por desplazamiento, al existir gas en un medio poroso puede producirse condensación in-situ, bajo condiciones de equilibrio de temperatura, presión y composición, lo que bloqueará parcialmente el flujo de gas. Dependiendo de las propiedades del medio y de las de los fluidos, el escurrimiento de condensado puede verse favorecido o no, por acción de la gravedad, fuerzas viscosas y fuerzas de superficie, y así producirse esta forma distinta de flujo bifásico. Aquí se ha desarrollado un modelo a escala microscópica del proceso de condensación capilar, en redes de poros de dos y tres dimensiones, que incorpora efectos capilares y gravitacionales. Los mecanismos implementados se basan en observaciones experimentales en micromodelos, obtenidas de la literatura. El modelo constituye una simulación de Monte Carlo del proceso. Hay conectividad permanente de condensado, aún en situaciones límite en que el líquido sólo existe en películas delgadas, lo que ocurre a altas presiones capilares. El condensado remanente en las esquinas de los poros contribuye tanto a la saturación de esa fase, como a su conductancia. No se permite la reevaporización de líquido. De los parámetros calculados los de mayor importancia corresponden a las permeabilidades relativas de gas y condensado. Aquí se analiza su comportamiento en función de la saturación de condensado, para distintos parámetros como tamaño de red; dimensionalidad; rango, varianza y asimetría de la distribución de tamaño; forma de los poros, cuadrada y octogonal; histéresis en el ángulo de contacto y tensión superficial. Especial atención se dedica a la explicación de caídas bruscas de permeabilidad relativa de gas a medida que aumenta la saturación de condensado. En general los resultados obtenidos explican los distintos comportamientos y datos experimentales reportados en literatura en términos de la arquitectura del espacio poroso, su geometría, topología y heterogeneidad.