

MODELACIÓN DE MEDIOS FILTRANTES
APLICANDO DIAGRAMAS DE
VORONOI-LAGUERRE

FILTER MEDIA MODELING APPLYING
VORONOI-LAGUERRE DIAGRAMS

ROBERTO C. DUARTE¹ JORGE A. DESTEPHEN²

Received: 07/03/2022; Accepted: 12/04/2023

Revista de Matemática: Teoría y Aplicaciones is licensed under a Creative Commons
Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual 4.0 International License.
Creado a partir de la obra en <http://www.revistas.ucr.ac.cr/index.php/matematica>



¹ Universidad Nacional Autónoma de Honduras, Departamento de Estadística, Tegucigalpa, Honduras. E-Mail: roberto.duarte@unah.edu.hn

² Universidad Nacional Autónoma de Honduras, Departamento de Matemática Aplicada, Tegucigalpa, Honduras. E-Mail: jorge.destephen@unah.edu.hn

Resumen

Los procesos de separación de partículas contaminantes en líquidos y gases son procesos cruciales en muchas industrias. Existen distintas aproximaciones para modelar estos procesos que incluyen modelos en 2 y 3 dimensiones. Algunas desventajas de estos modelos van desde no ajustarse con precisión a la complejidad real del problema y otros que mejoran esto pueden ser muy complejos en sentido computacional. La propuesta de este trabajo es un modelo computacional basado en un medio filtrante de múltiples capas construido utilizando diagramas de Voronoi-Laguerre para representar los materiales fibrosos no tejidos. Se utilizaron simulaciones de Monte Carlo para estimar la eficiencia del filtro bajo diferentes condiciones de proceso y con análisis estadístico. Los resultados concuerdan con la teoría general de filtración y se permitió ubicar las partículas capturadas en poros o fibras, lo que permite visualizar la estructura del medio filtrante en 3D. Además este modelo tiene el potencial para estimar propiedades topológicas del medio filtrante como la tortuosidad y conectividad. Se requiere trabajo futuro para mejorar el tiempo computacional para generar los modelos.

Palabras clave: modelación de filtración; modelo de filtro; materiales no-tejidos; método de Monte Carlo; diagramas de Voronoi-Laguerre.

Abstract

The processes of separating pollutant particles in liquids and gases are crucial processes in many industries. There are different approaches to modeling these processes, including 2D and 3D models. Some disadvantages of these models range from not accurately fitting the real complexity of the problem, and other models that improve this can be very computationally complex. The proposal of this work is a computational model based on a multi-layered filtering medium constructed using Voronoi-Laguerre diagrams to represent non-woven fibrous materials. Monte Carlo simulations were used to estimate the filter efficiency under different process conditions and with statistical analysis. The results are consistent with the general theory of filtration and allowed the captured particles to be located in pores or fibers, enabling visualization of the 3D structure of the filtering medium. Moreover, this model has the potential to estimate the topological properties of the filtering medium, such as tortuosity and connectivity. Future work is required to improve the computational time for generating the models.

Keywords: filtration modeling; filter modeling; non-woven materials; Monte Carlo method; Voronoi-Laguerre diagrams.

Mathematics Subject Classification: 52-08, 65C05, 37M05.

1 Introducción

La separación de partículas contaminantes de líquidos y gases es un proceso muy importante en la industria de alimentos, farmacéutica, de semiconductores, de sistemas de lubricación, purificación de agua, aire acondicionado, limpieza del aire de polvo y virus [13] [8].

Para remover partículas de diámetro mayor de $1 \mu m$ los materiales fibrosos no-tejidos han sido utilizados extensivamente para proveer niveles de pureza deseados (ver [8]). La eficacia de un filtro se caracteriza por su eficiencia y capacidad. La eficiencia de un material de filtración se puede definir como la razón entre el número de partículas mayores que un tamaño dado capturadas en el filtro y el número de partículas mayores que ese mismo tamaño en el fluido de entrada. La capacidad del filtro se define como la masa de partículas por unidad de área que es capaz de retener sin sufrir daño, determina la vida útil del filtro [4].

Los materiales fibrosos tienen una estructura geométrica compleja, caracterizada por su anisotropía y heterogeneidad [8]. La modelación matemática del medio filtrante fibroso tiene una gran utilidad para la estimación de la eficiencia haciendo simulaciones de los procesos de filtración.

Los materiales fibrosos no tejidos consisten de una red de fibras entrelazadas que crean poros a través de los cuales fluye el fluido del proceso. El flujo de suspensiones a través de medios porosos es un fenómeno muy complejo debido a la diversidad de mecanismos de filtración involucrados. Los mecanismos de filtración que operan en un proceso particular de filtración dependen del tamaño de las partículas, tipo de medio poroso, velocidades de flujo y de las interacciones mecánicas y físico-químicas del sistema partícula-fluido-filtro [4].

El modelo del filtro propuesto en este trabajo combina características de los modelos de tubos capilares, de los basados en la teoría de poros y del tridimensional de mallas superpuestas. El propósito fundamental de este trabajo fue desarrollar un modelo del medio filtrante que sea capaz de predecir dinámicamente la eficacia de filtros fibrosos y que tenga la flexibilidad para analizar cambios en porosidad, forma de deposición de las partículas, tortuosidad de la trayectoria de las partículas que pasan y conectividad del medio.

2 Revisión de literatura

Existen dos teorías principales para abordar los procesos de filtración en medios no tejidos: la de modelos celulares y la de canales. Estas son discutidas en [5]. La teoría de canales está basada en los procesos de filtración a través de lechos empaquetados no fibrosos como la arena. Esta también es conocida como el modelo de tubos capilares, pues asume el medio como un conjunto de tubos cilíndricos que van de una superficie del medio a otra, no necesariamente en forma perpendicular a la superficie del medio. Se puede aplicar a los medios filtrantes no tejidos en los procesos de filtración de líquidos.

Una descripción microscópica de un proceso de filtración considera el filtro como un ensamble de colectores, su descripción caracteriza la estructura geométrica del material de filtración de forma que permita establecer relaciones con las propiedades macroscópicas. Entre los modelos microscópicos destacan el de tubos capilares, los modelos basados en la teoría de poros, los de barrera y los tridimensionales de mallas superpuestas [6].

Los modelos tridimensionales para medios filtrantes aplican técnicas de geometría computacional como el uso de los diagramas de Voronoi. Para modelar microestructuras poliédricas granulares se han usado técnicas como las particiones de Laguerre [9], permitiendo obtener una aproximación de la forma y tamaño de los granos reales del material. Otra idea bastante utilizada consiste en la construcción de modelos tridimensionales de fibras generados aleatoriamente [11]. La complejidad de estos modelos tridimensionales vuelve prácticamente imposible resolver las ecuaciones de Navier-Stokes las cuales, en teoría, describen el flujo del fluido y las partículas. Por esto la popularidad ganada por el método de simulación de Monte Carlo para abordar de forma más sencilla el problema del movimiento del fluido y de partículas a través de medios porosos. Para una revisión bibliográfica más amplia de los modelos, ver la tesis de maestría [3].

3 Modelos para el medio y proceso de filtración

En esta sección se presentan los modelos usados en este trabajo para el medio filtrante y también el modelo para simular el proceso de filtración a través del medio.

3.1 Modelo para el medio de filtración

El objetivo de modelar un medio poroso es obtener una representación tan cercana como sea posible a la geometría del filtro real. Para hacer esto se toman ciertas características de este y con base en ellas se genera computacionalmente una versión artificial (modelo). En este trabajo el material fibroso no tejido se modeló basándose en la porosidad (ϵ), espesor (L), diámetro promedio de fibras (Df) y distribución de tamaño de poros del material filtrante; con el objeto de incluir en el modelo la interconectividad de los poros se consideró que el medio poroso está formado por capas.

El medio filtrante artificial es representado tomando como base la idea utilizada en [2], el cual es multicapa, donde cada capa de pequeño espesor consiste en un conjunto de tubos cilíndricos huecos conectados por el material, cada poro en la capa es representado por un cilindro, cuyo radio es calculado a partir de una distribución de tamaños de poros que corresponde al material específico real. Se asume que la distribución de tamaños de poros para un material filtrante se determina con técnicas como la del punto de burbuja (“*The Buble Point Test*”). Por lo anterior, el modelo que aquí se presenta puede resultar más apropiado cuando la distribución se estima usando el equipo “*Coulter porometer*”, ver capítulo 3 de [12]. Las desventajas del modelo de medio usado en [2] son: no permite ubicar las partículas capturadas en el sitio de captura en un sistema de coordenadas, no permite dar seguimiento a las partículas no capturadas y no permite hacer visualizaciones del medio filtrante con las partículas capturadas.

En este trabajo superamos las limitaciones antes mencionadas aplicando los diagramas de Voronoi-Laguerre para modelar el medio filtrante. Esto permite que, además de estimar la eficiencia del material filtrante, podamos estudiar la estruc-

tura dinámica de las partículas capturadas en el medio y con las visualizaciones cuasi-3D podamos tener la capacidad de comparar con resultados experimentales. También se abre la posibilidad de estudiar propiedades topológicas del medio y del proceso de filtración, como son la conectividad y la tortuosidad.

Existen otras técnicas que están siendo usadas para modelar medios fibrosos no-tejidos. Algunos ejemplos son unas técnicas aplicadas a procesos con ciertas características y otras que requieren recursos tecnológicos como microscopios electrónicos y con un alto costo computacional. Ninguna técnica hasta el momento resuelve completamente el problema de modelación de la estructura geométrica de materiales fibrosos no-tejidos.

3.1.1 Diagramas de Voronoi-Laguerre

Un diagrama de Voronoi se define como una partición del plano en regiones las cuales están determinadas mediante la distancia a los puntos en la región respecto a un punto o conjunto de puntos de forma específica. A continuación una definición formal de los diagramas de Voronoi descrita en [7].

Definición 3.1 (Diagrama de Voronoi). *Para el caso bidimensional, sea un conjunto de puntos $P = \{p_1, \dots, p_n\}$ en el plano. Un diagrama de Voronoi de P , $Vor(P)$, divide el plano en n regiones de Voronoi con las siguientes propiedades:*

1. Cada región contiene exactamente un punto p_i , también conocido como generador.
2. Para un punto arbitrario $q \notin P$ en la misma región de p_i , la distancia de q a p_i no debe ser mayor que la distancia de q a p_j donde p_j es un punto arbitrario en P .

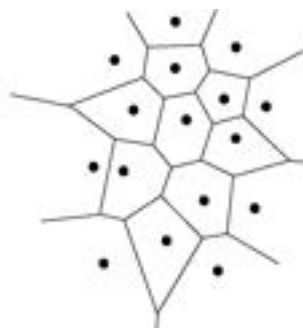


Figura 1: Diagrama de Voronoi.

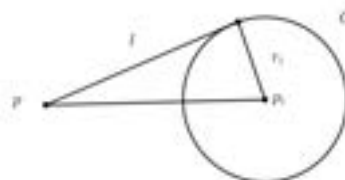


Figura 2: Representación de la distancia de Laguerre.

La Figura 1 es un ejemplo de un diagrama de Voronoi para un conjunto de puntos, cada punto es llamado generador y cada polígono que envuelve los generadores son conocidos como regiones de Voronoi o celdas de Voronoi, cada una de

estas regiones se define como:

$$\text{Vor}(p_i) = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid d(x, p_i) \leq d(x, p_j), \forall j \neq i\},$$

donde p_i y $p_j \in P$ y $d(\cdot, \cdot)$ es la distancia euclidiana.

La representación geométrica de una capa del filtro consta de un conjunto de cilindros disjuntos, cuando los generadores de las regiones en los diagramas de Voronoi son sustituidos por círculos se puede lograr la representación deseada para las capas del filtro, para generar las regiones de Voronoi para un conjunto de círculos se debe cambiar la distancia euclídea por la distancia de Laguerre.

Definición 3.2 (Distancia de Laguerre). Sean p_i y r_i el centro y el radio de un círculo C_i y sea $p \in \mathbb{R}^2$ un punto fuera de C_i , se define la distancia de Laguerre de p a C_i como:

$$d_L(p, C_i) = d(p, p_i)^2 - r_i^2.$$

Si definimos l como el segmento de recta que pasa por el p y es tangente a la circunferencia de C_i en algún punto, entonces, geoméricamente, la distancia de Laguerre es el cuadrado de la distancia entre p y el punto de tangencia de l en C_i . La Figura 2 ilustra la distancia de Laguerre [7]. Tomando la distancia de Laguerre como una distancia entre un círculo y un punto en \mathbb{R}^2 , podemos definir un diagrama de Voronoi-Laguerre.

Definición 3.3 (Diagramas de Voronoi-Laguerre). Dado un conjunto finito de círculos en el plano, P , el diagrama de Voronoi-Laguerre de P , $\text{VorLag}(P)$, es la descomposición del plano en las regiones asociadas, por proximidad, a cada uno de los puntos en P . Dichas regiones se denominan regiones de Voronoi-Laguerre.

La región de Voronoi-Laguerre para un círculo $C_i \in P$ de radio r_i es:

$$\text{VorLag}(C_i) = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid d_L(x, C_i) \leq d_L(x, C_j), \forall j \neq i\}.$$

En el caso que los círculos sean mutuamente disjuntos, la partición genera regiones que contienen solamente uno de ellos. En el capítulo 3 de [1] se puede ver un análisis detallado sobre los diagramas de Voronoi-Laguerre. El término “empaquetado de círculos” se usa generalmente para evocar el estudio matemático de los arreglos de círculos no superpuestos que llenan un dominio determinado.

El algoritmo utilizado en esta investigación para generar el empaquetado es el algoritmo de intersección de envolventes. Este consiste en que, a partir de dos círculos C_i y C_j de radios r_i y r_j , se puede ubicar un tercer C_k de radio r_k , centrado en uno de los puntos de intersección de las envolventes de C_i y C_j con respecto al radio r_k . Por supuesto que los centros de C_i y C_k deben estar a una distancia no superior a $r_i + r_j + 2r_k$, ya que esto hace que los círculos que forman las envolventes no sean disjuntos. En la Figura 3 se ilustra la intersección de envolventes de C_i y

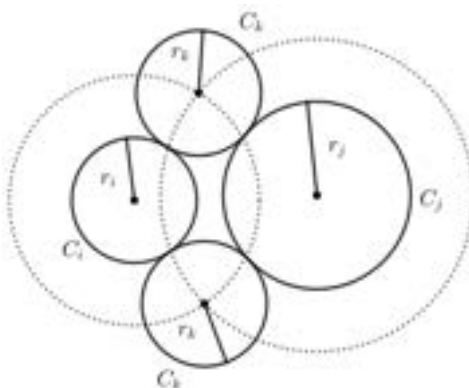


Figura 3: Intersección de envolventes de C_i y C_j con respecto al radio r_k .

C_j con respecto a r_k . Claramente para cada par de círculos hay dos opciones para ubicar un tercer C_k .

Se desarrolló un algoritmo para encontrar la intersección de envolventes. El algoritmo devuelve dos posiciones posibles para el círculo nuevo, la decisión sobre cuál intersección tomar en cuenta dependerá de que los nuevos elementos sean disjuntos a otros círculos ubicados previamente.

Para comenzar la colocación de círculos disjuntos sobre un dominio, se debe establecer un conjunto inicial de partida, esto se puede hacer de dos formas:

1. Comenzar con dos círculos tangentes en un punto ubicados de forma aleatoria dentro del dominio fijado y luego crear la partición de adentro hacia afuera.
2. Delimitar la frontera del dominio con una secuencia de círculos tangentes y luego crear la partición de afuera hacia adentro.

Aunque la técnica se basa en la construcción de círculos tangentes en esta aplicación, entre los círculos (poros) existe material sólido que los separa, lo cual hace que los círculos no sean exactamente tangentes.

En la Figura 4 se pueden observar ambos mecanismos para el conjunto inicial, en gris se marcan los círculos que definen el conjunto inicial, mientras en color blanco cómo se van acomodando los demás círculos. En el presente trabajo se usó la primera estrategia de adentro hacia afuera, ya que es la estrategia apropiada para hacer que se cumpla la distribución de tamaño de poros y la porosidad del medio. En la frontera de la muestra, los círculos pueden no ser completos como es el caso cuando se corta una muestra real. En la segunda estrategia se presenta la dificultad al acercarse al centro de la muestra para ajustarse a la distribución del tamaño de poros y la porosidad con igual precisión que en la estrategia 1.

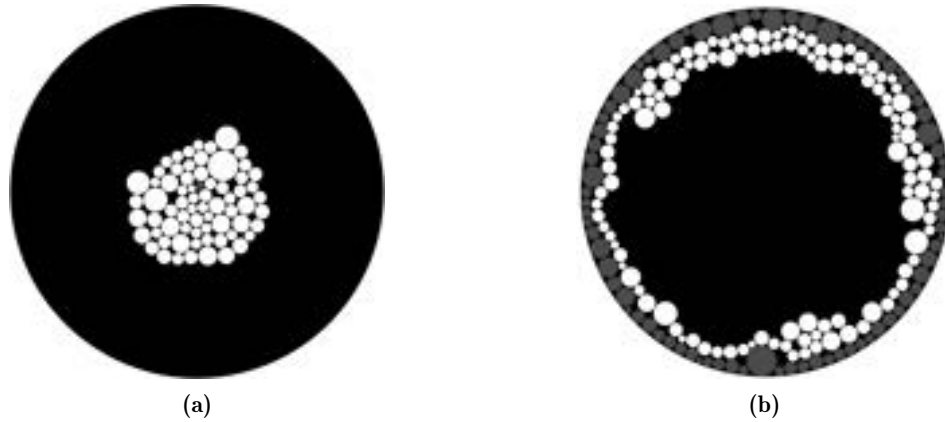


Figura 4: Estrategias de construcción: a) de adentro hacia afuera y b) de afuera hacia adentro.

Una vez definido el conjunto de partida se debe comenzar con la ubicación de los demás poros, para esto se debe determinar un dominio de búsqueda, este dominio es un subconjunto de los poros previamente ubicados que se encuentran a una distancia de dos veces el radio mayor entre los ya ubicados y el nuevo a ubicar, es en este dominio de búsqueda que se verificará si el nuevo se interseca con otro ya ubicado antes, de no ser así, se acepta la nueva posición del poro y se actualiza la lista de los ubicados. Se desarrolló un programa en R para construir el modelo del medio filtrante sobre la base del método descrito. La Figura 5 muestra un ejemplo de un modelo de filtro de una capa generado aplicando el algoritmo sobre la base de diagramas de Voronoi-Lagurre.

El número de capas del filtro artificial depende del tipo de material de filtración y del mecanismo o mecanismos de filtración dominante en el proceso particular en estudio, no existe un criterio único para su cálculo. Una forma de estimar el número de capas ($NLAY$), cuando aplique, es considerando la siguiente ecuación [2]:

$$NLAY = \frac{L}{D_f}(1 - \epsilon).$$

Cada capa del filtro artificial tiene las mismas propiedades y distribución inicial de tamaños de poros. Además cada una consiste de poros circulares rodeados de sólidos y los poros de capa a capa están conectados de forma múltiple. Entonces, se puede decir que el modelo para el filtro real es un medio de capas múltiples con una red tridimensional de poros conectados de forma múltiple.

Es importante distinguir cuando se modela un medio filtrante que consta de capas de diferentes materiales, en este caso cada capa de material podría modelarse con un modelo multicapa.

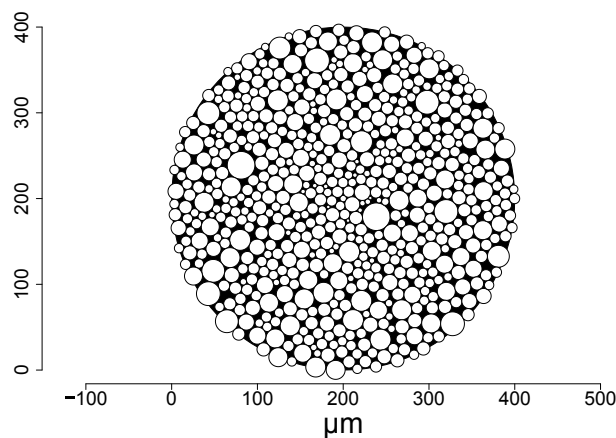


Figura 5: Modelo de una capa generado.

3.2 Modelo para el proceso de filtración

La predicción de la eficacia de materiales de filtración requiere la descripción de la estructura geométrica del medio poroso, selección de mecanismos de filtración y dinámica del flujo de fluido-partícula a través del medio poroso.

El movimiento de las partículas a través del medio se simuló asumiendo flujo tridimensional aleatorio, aplicando el método de Monte Carlo [10]. Una partícula puede interactuar con un poro, fibra o partícula. La probabilidad de que la partícula impacte en una fibra se asume igual a la solidez del material de filtración ($1-\epsilon$). El supuesto anterior es usual cuando se consideran los mecanismos básicos de filtración que no involucran material o partículas cargadas eléctricamente. En el caso que se consideren mecanismos que involucren cargas eléctricas o electroquímicas la probabilidad de impacto en una fibra podría ser diferente a la solidez.

Los mecanismos de filtración e interacciones considerados en esta investigación fueron: captura de partículas por tamizado, captura de partículas por poros bloqueados y captura de partículas en las fibras. Los últimos tres mecanismos mencionados involucran interacciones partícula-poro, partícula-partícula y partícula-fibra respectivamente.

Se desarrolló un programa en R para implementar el modelo del proceso de filtración, el programa usa números aleatorios para fabricar el medio artificial de filtración y para simular la percolación de las partículas a través del medio de capas múltiples. La Figura 6 muestra un diagrama de flujo para la simulación del proceso de filtración y el cálculo de la eficiencia. Para calcular la eficiencia se

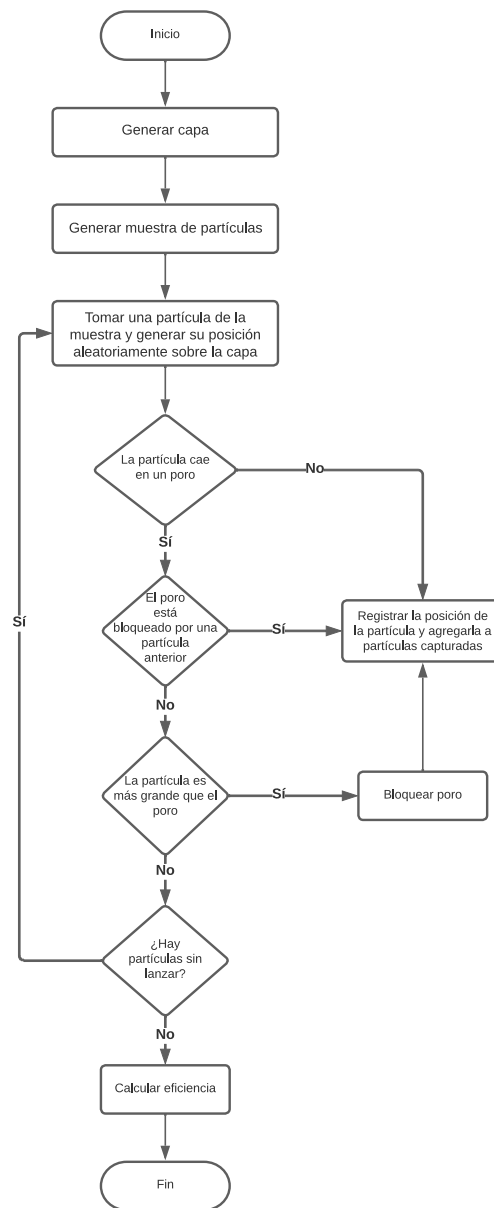


Figura 6: Diagrama de flujo para la simulación del proceso de filtración y cálculo de eficiencia.

divide el número de partículas que pasaron por las capas sin ser capturadas entre el número de partículas lanzadas.

Nuestro objetivo es hacer una primera validación general del modelo, por eso estamos considerando los mecanismos básicos de filtración y partiendo de algunas propiedades de partículas contaminantes y materiales que realmente existe.

4 Resultados y análisis

Con el propósito de realizar simulaciones y dar una validación al modelo del material fibroso se seleccionó un material no tejido usado en la industria de filtros para líquidos hidráulicos del cual conocemos su porosidad, diámetro medio de fibra, espesor y la distribución de tamaños de poros estimada usando el equipo *Coulter porometer* [12]. Además, se usaron como partículas contaminantes las provenientes del polvo estándar ACFine [12]. En las Figuras 7 y 8 se muestran las distribuciones de los tamaños de poros y tamaños de partículas utilizadas en las simulaciones.

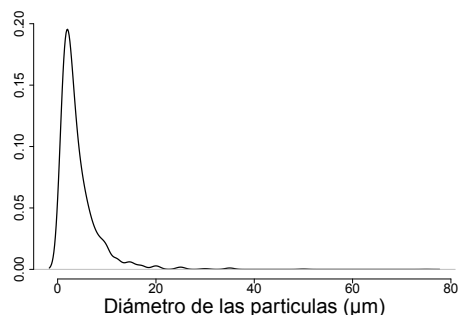


Figura 7: Distribución de diámetro de partículas.

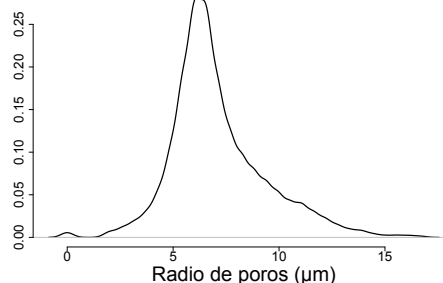


Figura 8: Distribución de radio de los poros.

4.1 Estimación de tamaño de la muestra

Para determinar el tamaño de la muestra del filtro que se utilizará para efectuar las simulaciones numéricas se construyen modelos del filtro variando el radio del mismo. Con el radio, se calcula el área (A) de la muestra. Luego sobre la base de las propiedades del polvo “ACFine Dust”, en la Tabla 1, con la velocidad lineal del fluido (flujo volumétrico sobre área de la muestra) y un tiempo de duración del proceso de filtración se determina la cantidad de partículas que se lanzarán aleatoriamente al medio filtrante.

Tabla 1: Parámetros de partículas, velocidad de fluido e incremento de tiempo.

| <i>NPAR</i> | <i>CONC</i> | <i>V</i> | Δt |
|-------------------------|-------------|--------------|------------|
| $1,7519 \times 10^6/mg$ | $1 mg/l$ | $0,10 m/min$ | $5 min$ |

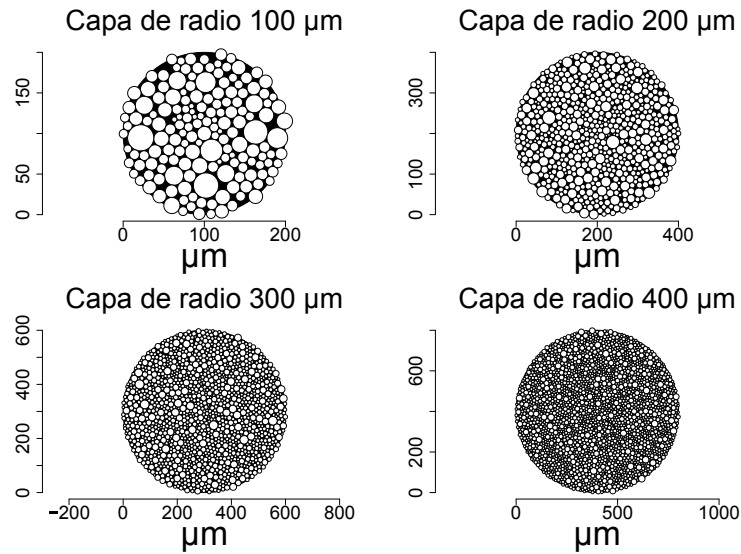


Figura 9: Tamaños de muestra de radios 100, 200, 300 y 400 μm .

La ecuación que determina el número de partículas es

$$NUM = NPAR \times CONC \times V \times \Delta t \times A.$$

En las Figuras 9 y 10, se presentan los modelos de una capa generados para diferentes tamaños de muestra.

Se realizan simulaciones del proceso de filtración considerando los mecanismos de filtración mencionados en la sección del modelo del proceso de filtración. En la Tabla 2 se muestran los resultados de la eficiencia en función del tamaño de muestra y se indica la varianza y el intervalo con un nivel de confianza del 95 %.

En la Figura 11, se muestra como varían y convergen las estimaciones de la eficiencia en función del tamaño de la muestra.

Como lo indica la Tabla 1 y la Figura 11, al aumentar el tamaño de la muestra la varianza disminuye, de forma que el intervalo de confianza para la estimación de la eficiencia se reduce a valores que son menores que la precisión que se tiene actualmente para medidas experimentales de la eficiencia en este tipo de procesos.

A manera de verificación hacia atrás, se recalculan las distribuciones de tamaños de poros con base en los modelos generados. La Figura 12 compara la distribución del tamaño de poros (medida con equipo) con las estimadas de los modelos de filtros para diferentes tamaños de muestra.

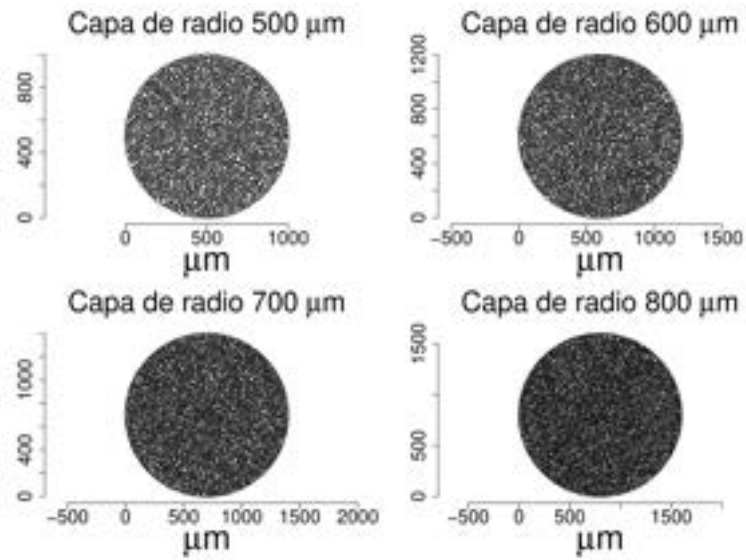


Figura 10: Tamaños de muestra de radios 500, 600, 700 y 800 μm .

Tabla 2: Eficiencia en función del tamaño de muestra.

| Radio de capa (μm) | # partículas | Eficiencia | Varianza | LI | LS |
|---------------------------|--------------|------------|----------|--------|--------|
| 100 | 28 | 0.1950 | 0.00595 | 0.1736 | 0.2164 |
| 200 | 111 | 0.1886 | 0.00103 | 0.1797 | 0.1976 |
| 300 | 248 | 0.1867 | 0.00039 | 0.1812 | 0.1921 |
| 400 | 441 | 0.1907 | 0.00030 | 0.1859 | 0.1956 |
| 500 | 688 | 0.1882 | 0.00023 | 0.1840 | 0.1924 |
| 600 | 991 | 0.1895 | 0.00017 | 0.1858 | 0.1932 |
| 700 | 1349 | 0.1854 | 0.00014 | 0.1822 | 0.1887 |
| 800 | 1762 | 0.1858 | 0.00005 | 0.1840 | 0.1877 |

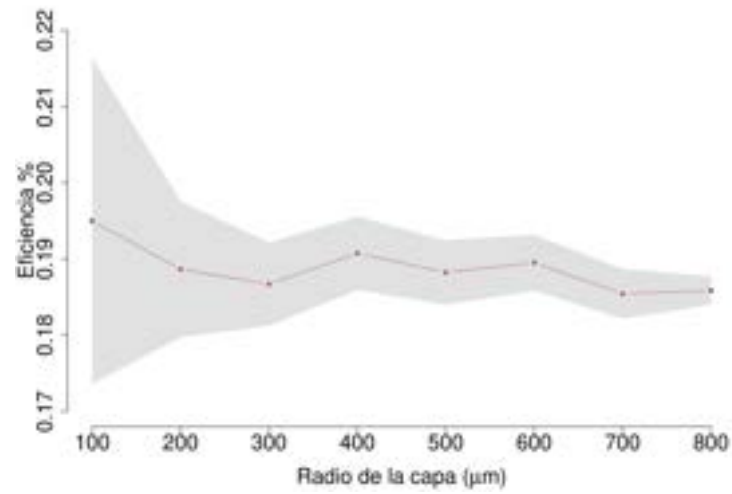


Figura 11: Cambio en la varianza al aumentar el tamaño de muestra para el cálculo de la eficiencia.

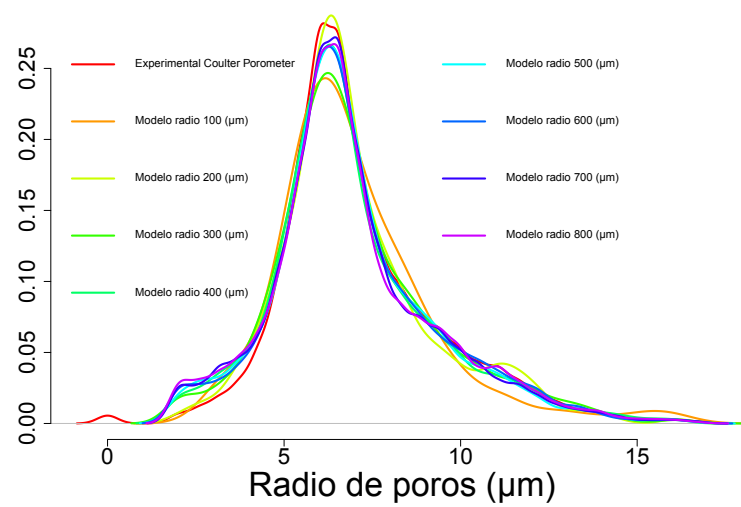


Figura 12: Distribución de tamaños de poros medida y recalculada de los modelos para diferentes tamaños de muestra.

El alto grado de aproximación de las distribuciones de los modelos construidos comparada con la distribución del material muestra la capacidad del modelo de captar características del medio filtrante.

Considerando los resultados anteriores, se seleccionó el tamaño de la muestra del filtro con radio $800 \mu m$ y área $0.02 cm^2$. En este caso se usará ese tamaño de muestra del medio filtrante generado para realizar simulaciones y mostrar la versatilidad del modelo para realizar estimaciones de interés en un proceso de filtración.

4.2 Simulaciones para estudiar la eficiencia

Se presentan los resultados de simulaciones usando modelo de una capa y modelo de tres capas para estimar la eficiencia del filtro.

4.2.1 Modelo de una capa

La simulación se realizó considerando un proceso de filtración de duración de 120 minutos con la muestra seleccionada. En la Figura 13 se muestran gráficamente los resultados para la eficiencia en función del tiempo y clasificadas por tamaños de partículas. El modelo de una capa es apropiado cuando, debido a combinación de factores del proceso de filtración, la mayor parte de las capturas se realizan en la superficie del material filtrante.

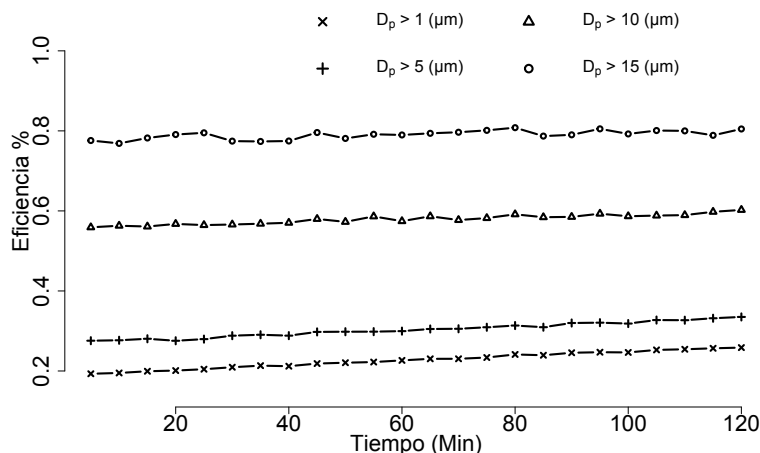


Figura 13: Estimaciones dinámicas de la eficiencia del filtro para diferentes tamaños de partículas.

El modelo de filtro permite llevar recuento de las partículas capturadas en poros, en fibra y en poros bloqueados, registrando también los tamaños de partículas y poros. Estos registros posibilitan efectuar estimaciones de eficiencia del filtro por tamaño de partícula y en función del tiempo como lo muestra la Figura 13. Como se esperaba la eficiencia aumenta al incrementar el tamaño de partículas.

En la Tabla 3 se indican las varianzas máximas para las estimaciones de las eficiencias en función del tiempo y por tamaño de partículas en el modelo de una capa. Notamos que los valores de las varianzas aumentan al aumentar el tamaño de partículas, esto se explica porque la cantidad de partículas grandes es menor. En general, se observa que los valores de las varianzas son consistentes con los experimentos para determinar el tamaño de la muestra.

Tabla 3: Varianzas máximas para la eficiencia por tamaño de partículas modelo de una capa.

| Tamaño de Partículas | Dp >1 μm | Dp >5 μm | Dp >10 μm | Dp >15 μm |
|----------------------|---------------|---------------|----------------|----------------|
| Varianza Máxima | 0.00021 | 0.00082 | 0.00352 | 0.00602 |

En la Figura 14 se visualizan las partículas capturadas en diferentes tiempos. Los gráficos muestran la capacidad del modelo para ubicar las partículas capturadas en la estructura geométrica del medio en función del tiempo.

4.2.2 Modelo de tres capas

La simulación se realizó considerando un proceso de filtración de duración de 120 minutos, con la muestra seleccionada.

En la Figura 15 se muestran gráficamente los resultados para la eficiencia en función del tiempo y clasificadas por tamaños de partículas. Se observa claramente como en el modelo multicapa la eficiencia aumenta respecto al modelo de una sola capa. Este tipo de modelos es apropiado cuando debido al tamaño de partículas, material de filtración y mecanismos de filtración involucrados la captura de partículas también ocurre en la profundidad del material.

En la Tabla 4 están indicadas las varianzas máximas para las estimaciones en función del tiempo y por tamaño de partículas en el modelo multicapa. En general, observamos un comportamiento similar a los resultados del modelo de una capa.

En la Figura 16 se visualiza en cuasi-3D la captura y el paso de partículas en las tres capas, para diferentes tiempos del proceso de filtración.

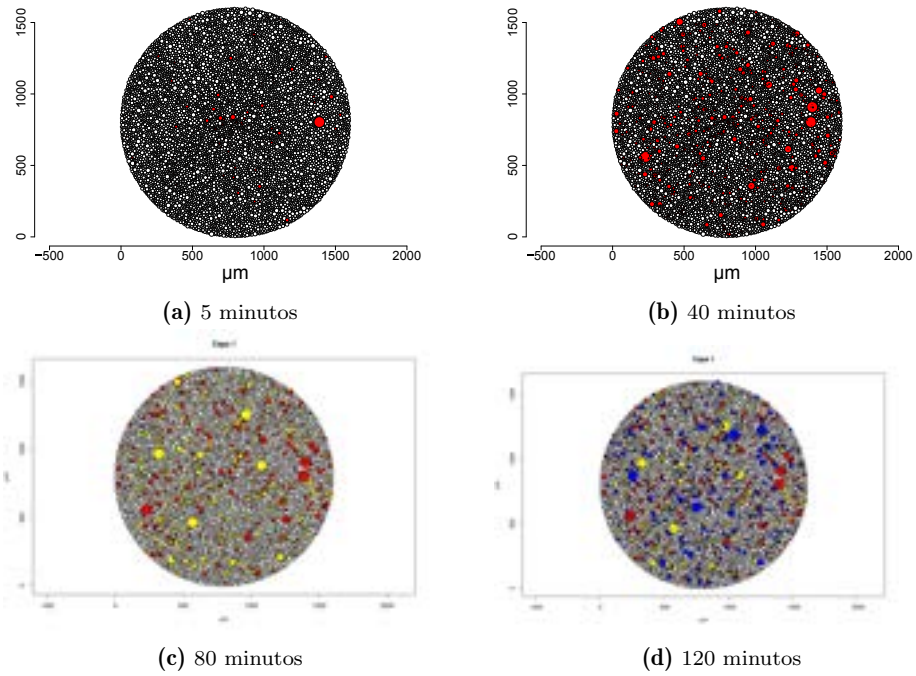


Figura 14: Partículas capturadas en la superficie del filtro.

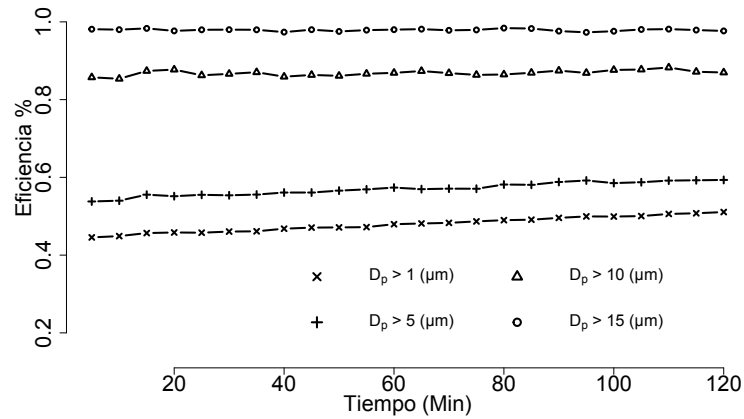


Figura 15: Estimaciones dinámicas de la eficiencia del filtro para diferentes tamaños de partículas.

Tabla 4: Varianzas máximas para la eficiencia por tamaño de partículas modelo multicapa.

| Tamaño de Partículas | $D_p > 1 \mu m$ | $D_p > 5 \mu m$ | $D_p > 10 \mu m$ | $D_p > 15 \mu m$ |
|----------------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|
| Varianza Máxima | 0.00026 | 0.00102 | 0.00164 | 0.00076 |

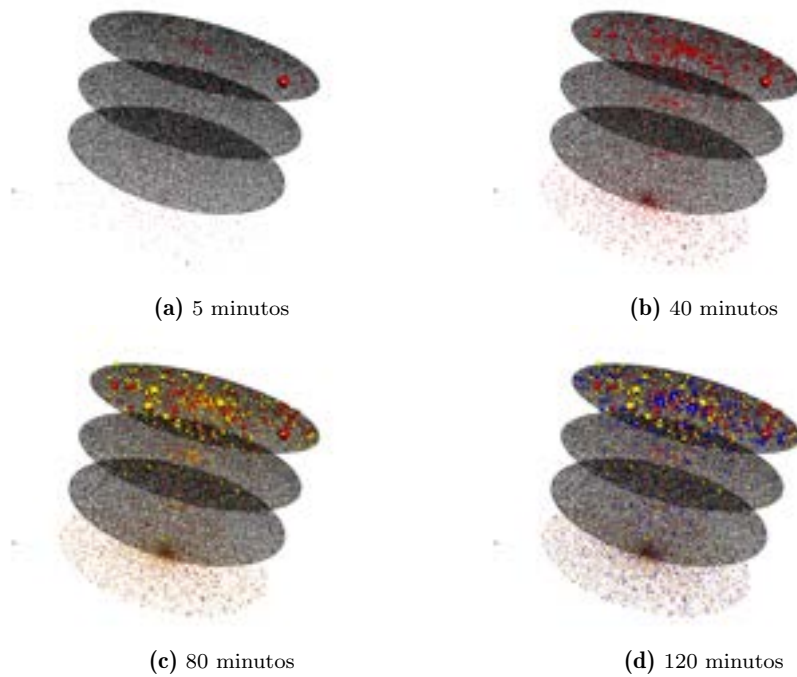


Figura 16: Simulación del modelo del filtro de tres capas.

En los primeros cuarenta minutos se lanzaron partículas de color rojo, los siguientes cuarenta minutos las partículas fueron de color amarillo y los últimos cuarenta minutos las partículas fueron azules. En [3] se puede encontrar más experimentos y resultados sobre los procesos de filtración.

Las visualizaciones junto con todos los datos generados permiten hacer análisis detallados de procesos de filtración. Por ejemplo, se podrá analizar la trayectoria de las partículas que pasan o que son capturadas en las capas, con lo cual se puede estimar la tortuosidad y conectividad del medio. También se puede hacer estimaciones de eficiencias por capas. La estimación de la capacidad del material filtrante es posible, ya que se puede calcular la cantidad de masa de partículas capturadas.

Para estudiar las propiedades topológicas mencionadas de la estructura de poros, una estrategia a considerar es asociarle un grafo a dicha estructura, como se muestra en la Figura 17.

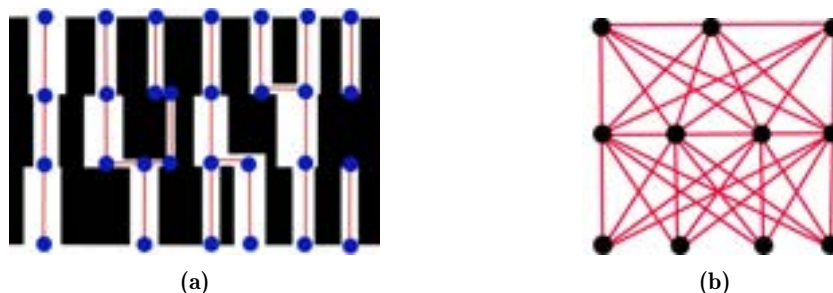


Figura 17: a) Grafo en rojo asociado a una estructura de poros b) Grafo de estructura de poros conectado de forma múltiple (grafo conexo).

Se aplicará la definición de conectividad como en teoría de grafos y el concepto de la característica de Euler [15].

En la Figura 17 (a) se muestran esquemáticamente los caminos que pueden seguir el fluido y/o las partículas para pasar por el medio filtrante de acuerdo al modelo. La tortuosidad se define como $T = \frac{L_e}{L}$, donde L es el espesor del medio filtrante y L_e es la longitud efectiva del camino [14].

5 Conclusiones y trabajos futuros

5.1 Conclusiones

La metodología desarrollada en esta investigación para generar modelos de medios filtrantes fibrosos ofrece una gran versatilidad para simular y estudiar procesos de filtración. Con los datos obtenidos en las simulaciones no solo se pueden hacer estimaciones de la eficiencia de los filtros en función del tiempo y del tamaño de partículas, sino también se pueden obtener datos de la ubicación de las partículas

capturadas y no capturadas en las diferentes capas. Con esos datos se hace posible estimar trayectorias, tortuosidad y conectividad. Los resultados de la simulación para eficiencias de filtros en función del tiempo y del tamaño de partículas están en un buen acuerdo con el comportamiento general esperado. El algoritmo implementado en R permite realizar fácilmente análisis estadístico.

Una gran ventaja del modelo de filtro desarrollado aplicando los diagramas de Voronoi-Laguerre es que permite hacer visualizaciones en 2D y cuasi-3D, las cuales serán muy útiles para analizar los cambios dinámicos de la estructura del filtro a medida que se capturan partículas.

5.2 Trabajos futuros

Trabajar en el desarrollo de algoritmos para estimar tortuosidad, conectividad y porosidad en función del tiempo.

Realizar pruebas del modelo desarrollado comparando con datos experimentales, para ello, seguramente habrá que implementar más mecanismos de filtración dependiendo del proceso particular de filtración.

Reducir el costo computacional al generar el modelo con el tamaño de muestra apropiada. Una posibilidad es el desarrollo del algoritmo con programación en paralelo.

Estudiar y analizar el costo computacional en tiempo y almacenamiento del algoritmo junto con el modelo del filtro y en medida de lo posible comparar con otros modelos similares.

6 Apéndice: software y datos

Se preparó un repositorio en GitHub con las rutinas y los datos para reproducir los experimentos y figuras mostrados en este artículo. El repositorio está localizado en: <https://github.com/rcduarte01/Duarte-Destephen-VL.git>.

Referencias

- [1] L. Burtseva y F. Werner, *Modelling of spherical particle packing structures using mathematical tessellation*. Otto-von-Guericke-Universität, Fakultät für Mathematik, 2015. DOI: [10.13140/2.1.2664.7840](https://doi.org/10.13140/2.1.2664.7840)
- [2] J. A. Destephen y K.-J. Choi, *Modelling of filtration processes of fibrous filter media*. Separations Technology **6**(1996), no. 1, 55-67. DOI: [10.1016/0956-9618\(96\)00140-3](https://doi.org/10.1016/0956-9618(96)00140-3)
- [3] R. Duarte, *Simulación estocástica de procesos de filtración utilizando un modelo de medio filtrante basado en diagramas de Voronoi-Laguerre*. Universidad Nacional Autónoma de Honduras, (2022).

- [4] D. Grant, B. Liu, W. Fisher y R. Bowling, *Particle Capture Mechanisms in Gases and Liquids: An Analysis of Operative Mechanisms in Membrane/Fibrous Filters*. The Journal of Environmental Sciences **32**(1989), no. 4, 43-51. DOI: [10.17764/jiet.1.32.4.aq48094264312771](https://doi.org/10.17764/jiet.1.32.4.aq48094264312771)
- [5] I. M. Hutten, *Handbook of nonwoven filter media*. Elsevier, 2007. DOI: [10.1016/B978-1-85617-441-1.X5015-X](https://doi.org/10.1016/B978-1-85617-441-1.X5015-X)
- [6] A. Khan, *Historical review of filtration theories in fibrous media*. Adv. Filtr. Sep. Technol. **9**(1995), 200-203.
- [7] J. L. Moreno Durán y S. Ordóñez Pérez, *Diagramas de Voronoi de alcance limitado*. Universitat Politècnica de Catalunya, (2009).
- [8] N. Pan y W. Zhong, *Fluid transport phenomena in fibrous materials*. Textile Progress **38**(2006), no. 2, 1-93. DOI: [10.1533/tepr.2006.0002](https://doi.org/10.1533/tepr.2006.0002)
- [9] R. L. Roselló Valera, I. P. Pérez Morales y H. Díaz-Guzmán Casañas, *Modelación geométrica de microestructuras granulares poliédricas*. Revista Cubana de Ciencias Informáticas **10**(2016), 186-194.
- [10] R. Y. Rubinstein y D. P. Kroese, *Simulation and the Monte Carlo method*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2017. DOI: [10.1002/9780470230381](https://doi.org/10.1002/9780470230381)
- [11] W. Sampson, *Modelling Stochastic Fibrous Materials with Mathematica®*. Engineering Materials and Processes. Springer London, 2008. DOI: [10.1007/978-1-84800-991-2](https://doi.org/10.1007/978-1-84800-991-2)
- [12] J. A. D. Soler, *Liquid filtration simulation through nonwoven fibrous materials: a dissertation presented to the faculty of the Graduate School, Tennessee Technological University*. Tennessee Technological University, (1995).
- [13] P. Tharewal, S. Landage y A. Wasif, *Application of nonwovens for air filtration*. International Journal of Advanced Research in IT and Engineering **2**(2013), no. 2, 14-36.
- [14] R. Vallabh, P. Banks-Lee y A.-F. Seyam, *New approach for determining tortuosity in fibrous porous media*. Journal of Engineered Fibers and Fabrics **5**(2010), no. 3, 155892501000500302. DOI: [10.1177/155892501000500302](https://doi.org/10.1177/155892501000500302)
- [15] H.-J. Vogel, *Topological characterization of porous media*. Morphology of condensed matter: Physics and geometry of spatially complex systems. Springer, 2002, 75-92. DOI: [10.1007/3-540-45782-8_3](https://doi.org/10.1007/3-540-45782-8_3)