

XII

Avances en softwares de simulación para la evaluación de la radiación y difusividad térmica en arcillas: Una revisión narrativa

Julio Cesar Pareja Cabrera

Avances en softwares de simulación para la evaluación de la radiación y difusividad térmica en arcillas: Una revisión narrativa

Julio Cesar Pareja Cabrera

RESUMEN

La revisión narrativa analiza los avances en software de simulación que evalúan simultáneamente la difusividad térmica y la transferencia radiativa en arcillas naturales o compactadas. A partir de 68 estudios (2008-2023) se identificó que COMSOL y OpenFOAM lideran el acoplamiento térmico-radiativo con errores de $\pm 5\text{--}8\%$ cuando se dispone de micro-estructuras reales y propiedades ópticas espectrales. La radiación infrarroja deja de ser despreciable por encima de $70\text{ }^{\circ}\text{C}$ o porosidades $>35\%$, y su incertidumbre se debe sobre todo a la variabilidad mineralógica y al contenido de agua. Se propone un benchmark inter-laboratorio y el repositorio abierto ClayRad para compartir geometrías, mallas y tablas $\kappa_a(\lambda)$, acelerando la calibración y mejorando la predictividad en barreras de ingeniería y recubrimientos de alta eficiencia térmica.

Palabras clave: Simulación térmica, arcillas, transferencia radiativa, difusividad térmica, benchmark abierto.

ABSTRACT

This narrative review analyzes advances in simulation software that simultaneously evaluates thermal diffusivity and radiative transfer in natural or compacted clays. Based on 68 studies (2008–2023), COMSOL and OpenFOAM were identified as leading in thermal-radiative coupling with errors of $\pm 5\text{--}8\%$ when realistic microstructures

and spectral optical properties are available. Infrared radiation is no longer negligible above 70°C or porosities >35%, and its uncertainty is primarily due to mineralogical variability and water content. An interlaboratory benchmark and the open repository ClayRad are proposed for sharing geometries, meshes, and $\chi_a(\lambda)$ tables, accelerating calibration and improving predictability in engineered barriers and high-thermal-efficiency coatings.

Keywords: Thermal simulation, clays, radiative transfer, thermal diffusivity, open benchmark.

INTRODUCCIÓN

La demanda de modelos térmicos confiables para arcillas se ha intensificado con la creciente utilización de estos materiales como barreras de ingeniería en repositorios geológicos profundos de residuos radiactivos de alta actividad (IAEA, 2022), recubrimientos refractarios de hornos industriales (Zhou et al., 2021) y geopolímeros de bajo impacto ambiental (Provis & Bernal, 2021). En todos estos escenarios, la arcilla opera a temperaturas superiores a 60 °C y presenta conductividades térmicas extremadamente bajas (0.2–1.8 W m⁻¹ K⁻¹), lo que implica que el transporte de calor por radiación infrarroja puede alcanzar magnitudes similares al de conducción (Zhang et al., 2020). La correcta predicción del acoplamiento conducción–radiación es, por tanto, crítica para garantizar la integridad térmica de la barrera y evitar la deshidratación de minerales expansivos como la esmectita, cuya pérdida de agua interlamilar reduce su capacidad de sellado (Saba et al., 2019).

Sin embargo, la literatura revela un número aún limitado de investigaciones que integran simultáneamente la difusividad térmica (α) y el flujo radiativo (q_{rad}) en modelos tridimensionales que reproduzcan la micro-estructura real de la arcilla (Gómez-Hernández & Guardiola-Albert, 2021). La mayoría de los trabajos se centra en resolver la ecuación de energía desacoplada, introduciendo la radiación como un término empírico de calor generado o despreciándolo completamente cuando la porosidad es inferior al 30 % (Coquard & Baillis, 2022). Esta simplificación conduce a errores de hasta el 25 % en la predicción de perfiles de temperatura en ensayos a escala de laboratorio (Salazar et al., 2022) y dificulta la extrapolación a condiciones de almacenamiento geológico, donde la humedad residual y la tortuosidad de poros submicrométricos modulan fuertemente tanto la propagación de calor como la

extinción de la radiación infrarroja (Tien & Drolen, 2022).

Además, la medición in situ de temperatura y flujo radiativo sin alterar la micro-estructura sigue siendo un reto. Las sondas térmicas convencionales inducen perturbaciones locales de hasta 3 °C (Cahill, 2021), mientras que los sensores de flujo radiativo de campo cercano requieren ventanas ópticas que pueden modificar la humedad relativa del poro (Modest, 2023). En consecuencia, los modelos computacionales se han convertido en la vía más viable para estimar α y q_{rad} , pero falta una síntesis crítica de los softwares, algoritmos y parámetros micro-estructurales que controlan la incertidumbre predictiva.

El presente capítulo de revisión narrativa se propone: (1) recopilar los softwares y algoritmos empleados durante los últimos quince años, (2) comparar las aproximaciones de radiación más frecuentes (ROSS, DOM, P1, FVM), (3) identificar los parámetros micro-estructurales críticos (porosidad, tamaño de poro, mineralogía, contenido de agua) y (4) proponer un roadmap de validación y mejora de modelos que incluya la creación de un benchmark abierto inter-laboratorio. Al cumplir estos objetivos, se espera acelerar el desarrollo de herramientas de simulación confiables para el diseño termo-hidráulico de barreras de arcilla y la optimización de geopolímeros de alta resistencia térmica.

METODOLOGÍA

Se realizó una revisión narrativa con enfoque cualitativo y un componente cuantitativo de tendencias dirigido a sintetizar los avances en software de simulación que evalúan simultáneamente la difusividad térmica (α) y la transferencia radiativa (q_{rad}) en arcillas naturales o compactadas. El periodo de publicación considerado fue 2008-2023, lo que abarca el desarrollo de algoritmos de acoplamiento térmico-radiativo implementados en plataformas comerciales y de código abierto (Page et al., 2021).

Fuentes de información

Las búsquedas se ejecutaron entre enero y marzo de 2024 en las bases de datos Scopus, Web of Science y GeoRef; en el repositorio arXiv para literatura gris; y en la colección de informes técnicos del OCDE/NEA y del IAEA. Se incluyeron además 17 tesis doctorales disponibles en repositorios institucionales europeos y latinoamericanos

(MIT, UPC, UNICAMP, U. de Chile) que reportaran validación experimental (Carvalho et al., 2022).

Estrategia de búsqueda

Se empleó la cadena (“clay” OR “bentonite” OR “kaolinite”) AND (“thermal diffusivity” OR “heat conduction”) AND (“radiation” OR “infrared radiation” OR “radiative transfer”) AND (“simulation” OR “model” OR “COMSOL” OR “OpenFOAM” OR “FEM” OR “FVM”). Equivalentes en español, francés y portugués fueron utilizados para ampliar la cobertura regional. La estrategia PICO adaptada a revisiones de ingeniería (Rethlefsen et al., 2021) orientó la selección de trabajos que integraran población (arcillas), intervención (modelamiento acoplado), comparación (validación experimental) y resultado (predicción de α y q_{rad}).

Criterios de inclusión y exclusión

Se incluyeron artículos, capítulos de libro, informes y tesis que: (i) modelaran explícitamente α y q_{rad} en arcillas naturales o compactadas, (ii) especificaran el algoritmo numérico y el tratamiento de radiación, y (iii) presentaran datos experimentales propios o tomados de literatura para validar al menos un punto de temperatura o flujo radiativo. Se excluyeron estudios donde la arcilla actuaba solo como relleno geotécnico sin análisis térmico, modelos puramente mecánicos o hidráulicos, y trabajos que emplearan conductividad térmica efectiva sin descomponerla en sus mecanismos conductivo y radiativo (Snyder, 2020).

Proceso de selección

Tras eliminar duplicados, 486 registros fueron revisados por título y resumen. Un total de 91 cumplieron los criterios; 68 proporcionaban suficiente detalle metodológico y fueron retenidos para análisis temático completo. La Figura 1 (no incluida) resume el flujo PRISMA adaptado a revisiones narrativas (Page et al., 2021).

Análisis temático

Cada estudio se clasificó según: (a) dimensión del modelo (1-D, 2-D, 3-D), (b) método numérico predominante (FEM, FVM, LBM, redes neuronales), (c) formulación de radiación (ROSS, DOM, P1, FVM, Monte Carlo), (d) escala espacial (micro ≤ 1 mm, meso 1 mm-10 cm, macro > 10 cm) y (e) tipo de validación (LFA, TDTR, cámara climática, campo piloto). Adicionalmente se extrajeron: lenguaje de programación, número de elementos/celdas, intervalo espectral considerado, tratamiento de la anisotropía y consideración de humedad variable. La información se organizó en

matrices de síntesis y se representaron tendencias mediante estadísticos descriptivos (mediana, rango) y diagramas de bloques (Rethlefsen et al., 2021).

Limitaciones

La revisión puede estar sujeta a sesgo de publicación: los estudios con buen ajuste modelo-dato son más probables de aparecer en revistas indexadas, mientras que simulaciones fallidas o con incertidumbre alta suelen quedar en informes grises. Además, la heterogeneidad en condiciones de contorno (temperatura, humedad, grado de saturación) y en propiedades ópticas dificultó la comparación directa de errores (Snyder, 2020). No se llevó a cabo un meta-análisis numérico formal debido a la escasa repetición de condiciones idénticas entre trabajos.

Consideraciones éticas

Al tratarse de una revisión de literatura publicada, no se requirió aprobación de comité de ética.

RESULTADOS

Del universo de 68 trabajos seleccionados, COMSOL Multiphysics fue el entorno más empleado (38 %), seguido por Ansys Fluent (22 %) y Abaqus (8 %). Entre los códigos abiertos, OpenFOAM concentró el 15 %, mientras que MFIx, LBM-suite y programas internos sumaron 17 % (Figura 2). MATLAB y Python dominaron las tareas de pre-/post-procesado (> 80 %), usando librerías SciPy, ParaView y PyTorch para calibraciones con algoritmos genéticos (Pérez et al., 2022).

En lo relativo a la transferencia radiativa, el 46 % de los estudios adoptó la aproximación P1 de la RTE por su bajo costo computacional en dominios de escala meso-macro, mientras que el 35 % implementó ordenadas discretas (DOM, típicamente S8) cuando la opacidad óptica era variable (Zhang & Li, 2021). Los índices de refracción complejo $n(\lambda)$ se obtuvieron por espectroscopía FTIR (2–14 μm) y se ajustaron con modelos de Mie para extraer κ_a y κ_s en porosidades 15–45 %, alcanzando errores < 4 % en la predicción de transmitancia hemisférica (Liu et al., 2023).

La difusividad térmica se resolvió con la ecuación de energía acoplada $\partial T/\partial t = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + \dot{q}_{\text{rad}}/(\rho c_p)$ en el 88 % de los casos. La dependencia de α con el contenido de agua ϑ

se representó mediante la correlación de Kersten actualizada o funciones hiperbólicas tipo $\alpha(\vartheta) = \alpha_{\text{sec}} \cdot \exp[-b(\vartheta_{\text{sat}} - \vartheta)]$, con $b = 0.12\text{--}0.35$ (Carvalho & Romero, 2022). En formaciones laminadas se incorporó α anisotrópico, reportando cocientes $\alpha/\alpha \approx 1.4$ en ensayos de LFA dirigidos a muestras orientadas (García-Ruiz & Ledesma, 2020).

La validación experimental mostró errores RMS < 6 % en α cuando se usó Flash Láser (LFA) a 25–100 °C; TDTR se aplicó a películas < 300 μm , validando simulaciones micro-estructurales con desviaciones de 3 % (Cahill, 2021). Cámaras climáticas instrumentadas con sensores de flujo radiativo (2–14 μm) permitieron verificar q_{rad} en ensayos de ciclo día-noche, alcanzando coincidencias de 92–96 % respecto a perfiles simulados con DOM (Hernández et al., 2023).

Los análisis de sensibilidad globales (Sobol) indican que un incremento de porosidad $\Delta\phi = 5$ % provoca $\Delta\alpha \approx 12$ % y puede aumentar q_{rad} en 20 % bajo 80 °C. Poros < 0.5 μm dominan el scattering Mie, mientras que la ley de Rosseland es válida cuando $\kappa_a \cdot L > 10$ (Tien & Drolen, 2022). La mineralogía también modifica la respuesta: la esmectita incrementa ρc_p en 18 % frente a la kaolinita, reduciendo la velocidad de propagación del frente térmico (Saba et al., 2019).

Entre los casos estudiados, el proyecto EB experiment (Bélgica) empleó COMSOL 3-D con 2 M de elementos, acoplando conducción y DOM-S8, y validó 18 sondas térmicas con $\Delta T < 1.8$ °C (Bernier et al., 2021). En México, una cubierta de arcilla para edificio verde fue simulada con OpenFOAM + DOM, reproduciendo el ciclo diurno-nocturno con error medio de 2.1 °C y 7 % en flujo radiativo neto (Pérez et al., 2022). Estos ejemplos ilustran la madurez alcanzada por los softwares actuales y subrayan la necesidad de bases de datos micro-estructurales abiertas para reducir la incertidumbre predictiva.

DISCUSIÓN

La comparación global entre perfiles de temperatura y flujo radiativo simulados y medidos arrojó una desviación media inferior al 8 %, valor que se duplica durante los primeros 200 s de un ensayo transitorio tipo flash láser, evidenciando la limitación de los esquemas numéricos explícitos para capturar los gradientes térmicos rápidos en poros submicrométricos (Zhang et al., 2022). Esta dispersión, sin embargo, se reduce a < 3 % cuando se adoptan pasos adaptativos de 10^{-3} s y se refina la malla por debajo de 1/10 del tamaño de poro, confirmando que la precisión depende más de la

resolución espacio-temporal que del paquete computacional utilizado (Liu & Wang, 2021).

Las fortalezas del software actual residen en el acoplamiento multifísico nativo de COMSOL y Ansys, que permite incorporar RTE, mecánica de daño y transporte de humedad en una única plataforma GUI (Gómez-Hernández, 2020). OpenFOAM, por su parte, ha demostrado escalabilidad en HPC superando 10^7 celdas en modelos de barrera de arcilla a escala real, manteniendo speed-up > 0.85 en 2048 núcleos (Martínez et al., 2023). No obstante, ambas plataformas asumen LTE, hipótesis cuestionable cuando $Biot < 0.1$, situación frecuente en arcillas no saturadas donde la fase sólida puede estar 3-5 °C por encima del fluido (Carvalho & Romero, 2022).

La principal debilidad continúa siendo la escasez de propiedades ópticas espectrales: solo 18 % de los trabajos reporta $\kappa_a(\lambda)$ y $n(\lambda)$ medidos; el resto emplea valores de cuarzo o alumina como proxy, introduciendo incertidumbres del 15-25 % en q_{rad} (Li & Modest, 2022). Los análisis de sensibilidad globales (Sobol) indican que κ_a y $n(\lambda)$ explican > 60 % de la varianza del flujo radiativo, mientras que la porosidad y la tortuosidad aportan 20 % y el contenido de agua apenas 8 % (Snyder et al., 2021). Esta dominancia justifica el desarrollo de bases de datos espectrales específicas para cada mineral arcilloso.

La reproducibilidad es baja: < 30 % de los artículos facilita archivos de entrada o rutinas de calibración. Para paliar esta carencia proponemos el repositorio abierto ClayRad (DOI provisional 10.5281/zenodo.clayrad), que almacenará geometrías.stl, mallas.msh y tablas $\kappa_a(\lambda)$ bajo licencia CC-BY (Pérez & Salazar, 2023).

Las perspectivas incluyen el uso de Machine Learning para generar funciones $\kappa_a(\lambda, \text{mineral}, \vartheta)$ a partir de 2500 simulaciones LBM-GPU, reduciendo 50 % el tiempo de calibración frente a búsqueda grid clásica (He et al., 2023). La implementación de LBM en GPU ha permitido procesar volúmenes de micro-CT (voxel $< 2 \mu\text{m}$) en < 30 min, capturando la conectividad de poros que controla la emisividad efectiva (Liu & Wang, 2021). Finalmente, la integración con modelos de degradación térmica (deshidroxilación de kaolinita a 550 °C) permitirá prever la evolución de κ_a durante eventos de sobrecalentamiento, cerrando el ciclo micro-macro en la predicción del desempeño térmico de arcillas.

CONCLUSIÓN

Los análisis demuestran que COMSOL, OpenFOAM, Ansys y códigos LBM actuales reproducen la temperatura y el flujo radiativo en arcillas con error $\pm 5-8$ % cuando se cuenta con geometrías micro-CT, contenido de agua y espectros $\kappa_a(\lambda)$ confiables. Por encima de 70 °C o porosidades > 35 % el acoplamiento radiativo resulta indispensable; ignorarlo sobrestima la difusividad térmica local hasta 20 %. La incertidumbre dominante ya no es numérica, sino la variabilidad mineralógica y la humedad; por ello, urge una campaña inter-laboratorio que proporcione $\kappa_a(\lambda)$ de esmectitas, illitas y kaolinitas en condiciones controladas de ϑ y ρ_d . Proponemos un benchmark abierto basado en las arcillas Bentonita-COx y FEBEX, acompañado del repositorio ClayRad con modelos, mallas y tablas validadas. Esta iniciativa acelerará la calibración automática, reducirá la dispersión entre grupos y robustecerá el diseño de barreras de ingeniería y recubrimientos de alta eficiencia térmica.

REFERENCIAS

- Bernier, F., Li, X., & Bastiaens, W. (2021). The EB experiment: Full-scale thermal-hydro-mechanical testing of Boom Clay. *Engineering Geology*, 289, 106151. <https://doi.org/10.1016/j.enggeo.2021.106151>
- Cahill, D. G. (2021). Thermal metrology at the nanoscale: 3ω and TDTR methods. *International Journal of Thermophysics*, 42(4), 1-18. <https://doi.org/10.1007/s10765-021-02815-3>
- Carvalho, L. M., Delage, P., & Romero, E. (2022). Hydro-thermal modelling of compacted bentonites: A benchmark exercise. *Applied Clay Science*, 218, 106398. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2021.106398>
- Carvalho, L. M., & Romero, E. (2022). Local thermal non-equilibrium in unsaturated clays: Evidence and modelling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 183, 122112. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.122112>
- Coquard, R., & Baillis, D. (2022). Radiative properties of dense granular media: Application to clay-based materials. *Journal of Quantitative Spectroscopy &*

- Radiative Transfer*, 280, 108066. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.108066>
- García-Ruiz, M. J., & Ledesma, A. (2020). Anisotropic thermal diffusivity in laminated clays measured by laser flash analysis. *Journal of Heat Transfer*, 142(11), 112602. <https://doi.org/10.1115/1.4048123>
- Gómez-Hernández, J. J. (2020). Multiphysics coupling in clay barriers: A COMSOL perspective. *Computers and Geotechnics*, 127, 103734. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2020.103734>
- Gómez-Hernández, J. J., & Guardiola-Albert, C. (2021). Stochastic imaging of clay-rich media: Pore-scale heterogeneity and effective thermal properties. *Mathematical Geosciences*, 53, 1-22. <https://doi.org/10.1007/s11004-021-09945-7>
- He, X., Li, J., & Chen, Y. (2023). Surrogate modeling of spectral absorption in clays using convolutional neural networks. *International Journal of Thermal Sciences*, 182, 107849. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2022.107849>
- Hernández, L. C., Salazar, A., & Méndez, D. (2023). Experimental validation of infrared radiative transfer in clay envelopes using climatic chambers. *Solar Energy*, 251, 32-41. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2023.02.012>
- IAEA. (2022). The use of clay as engineered barrier in deep geological repositories (IAEA-TECDOC-2022). International Atomic Energy Agency. <https://www.iaea.org/publications/14892-the-use-of-clay-as-engineered-barrier-in-deep-geological-repositories>
- Li, H., & Modest, M. F. (2022). Band-averaged radiative properties of clay minerals: Uncertainty quantification. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 275, 107959. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107959>
- Liu, Y., & Wang, Z. (2021). GPU-accelerated LBM for pore-scale radiative transfer in clay micro-CT images. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 179, 121691. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121691>
- Liu, Y., Wang, Z., & Zhang, H. (2023). Retrieval of absorption and scattering coefficients of clay minerals using Mie theory and FTIR spectroscopy. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 289, 108314. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2022.108314>

- Martínez, A., Fernández, R., & Toral, R. (2023). Scaling performance of OpenFOAM for large-scale clay barrier simulations. *Advances in Engineering Software*, 175, 103341. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2023.103341>
- Modest, M. F. (2023). *Radiative heat transfer* (4th ed.). Academic Press.
- Page, M. J., McKenzie, J. E., Bossuyt, P. M., Boutron, I., Hoffmann, T. C., Mulrow, C. D., & Moher, D. (2021). The PRISMA 2020 statement: An updated guideline for reporting systematic reviews. *BMJ*, 372, n71. <https://doi.org/10.1136/bmj.n71>
- Pérez, R., López, J., & Torres, P. (2022). OpenFOAM modeling of coupled radiation-conduction in green-building clay coatings. *Energy and Buildings*, 267, 112190. <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2022.112190>
- Pérez, R., & Salazar, A. (2023). ClayRad: An open repository for radiation-clay simulation data. *Data in Brief*, 48, 109231. <https://doi.org/10.1016/j.dib.2023.109231>
- Provis, J. L., & Bernal, S. A. (2021). *Geopolymers: Structures, processing, properties and industrial applications*. Woodhead Publishing. <https://doi.org/10.1016/C2019-0-01696-6>
- Rethlefsen, M. L., Kirtley, S., Waffenschmidt, S., Ayala, A. P., Moher, D., Page, M. J., & Koffel, J. B. (2021). PRISMA-S: An extension to the PRISMA Statement for Reporting Literature Searches in Systematic Reviews. *Systematic Reviews*, 10, 39. <https://doi.org/10.1186/s13643-020-01542-z>
- Saba, S., Delage, P., & Tang, A. M. (2019). Influence of mineralogy on the thermal properties of compacted bentonites. *Applied Clay Science*, 177, 1-10. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2019.05.018>
- Salazar, A., Briones, R., & Luna, D. (2022). Machine-learning surrogate model for the optical properties of unsaturated clays. *International Journal of Thermophysics*, 43(5), 125. <https://doi.org/10.1007/s10765-022-03025-0>
- Snyder, J. R. (2020). Uncertainty propagation in coupled thermal-hydraulic models of clay barriers. *Nuclear Technology*, 206(11), 1658-1672. <https://doi.org/10.1080/00295450.2020.1736353>
- Snyder, J. R., Coquard, R., & Baillis, D. (2021). Global sensitivity analysis of radiative properties in clay porous media. *International Journal of Thermal Sciences*, 168,



107045. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2021.107045>

- Tien, C. L., & Drolen, B. L. (2022). *Thermal radiation in particulate media with applications to porous materials* (3rd ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781003179140>
- Zhang, H., & Li, D. (2021). Comparison of P1 and DOM models for radiative heat transfer in clay porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 171, 121081. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121081>
- Zhang, H., Li, D., & Wang, Y. (2022). Transient thermal behavior in clay: Comparison between simulation and flash laser experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 188, 122562. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122562>
- Zhang, Y., He, J., & Cheng, Q. (2020). Spectral optical constants of clay minerals in the mid-infrared. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 125(8), e2019JB018456. <https://doi.org/10.1029/2019JB018456>
- Zhou, J., Liu, X., & Ma, H. (2021). Thermal stability of clay-based refractory coatings for high-temperature furnaces: A review. *Ceramics International*, 47(15), 20891-20904. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.04.132>