

TÉCNICAS DE DISCRETIZACIÓN EN ELEMENTOS FINITOS APROPIADAS PARA FLUJOS CON INTERFASES Y EN PRESENCIA DE SURFACTANTES

Marcelo Severino, María D. Giavedoni, Fernando A. Saita

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
Universidad Nacional del Litoral - CONICET
Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina

RESUMEN

En este trabajo presentamos modificaciones a la metodología original desarrollada en la Universidad de Minnesota para resolver flujos con superficies libres. Estas modificaciones son especialmente adecuadas para resolver problemas en los cuales se considera la presencia de agentes tensioactivos. Incluyen, el refinamiento local de la malla en las proximidades de la superficie libre y la implementación de un elemento infinito.

ABSTRACT

In this work we present modifications to the original methodology developed at the University of Minnesota to solve free surface flows. These modifications are specially suited to solve problems in which the presence of surface active agents is considered. They include the local refinement of the mesh in the neighbourhood of the interface and the implementation of an infinite element.

INTRODUCCION

Los problemas de flujos de fluidos con superficies libres requieren resolver las ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica en un dominio cuyos límites dependen de la forma y la localización de la superficie libre. La presencia de una interfase curva, cuya forma y localización son desconocidas a priori, introduce no linealidades aún en el caso en que las fuerzas de inercia sean nulas. Kistler¹ y Kistler y Scriven² desarrollaron una técnica que utiliza FEM con una conveniente parametrización de la superficie, siendo la clave para "manejar" la superficie libre el uso de una transformación isoparamétrica que transforma cada elemento del dominio real en un cuadrado de lado unitario; a través de esta transformación el dominio físico irregular se convierte en un dominio computacional cuadrangular en el cual las condiciones de borde, especialmente las que se aplican en la superficie libre, se imponen fácilmente. Cuando se considera la existencia de agentes activos en el sistema, el balance de tensiones normal y tangencial en la interfase adopta una forma compleja, porque las propiedades interfaciales (viscosidad interfacial y tensión superficial) son funciones de la concentración local de surfactante.

Este trabajo surge, precisamente, como solución a las dificultades numéricas encontradas en la computación del desplazamiento en estado estacionario de un líquido confinado entre dos placas planas y paralelas, separadas por una distancia pequeña, por un gas; el líquido es Newtoniano e incompresible y la fase gas se supone inviscida. Se considera, además, la presencia de un surfactante soluble en la fase líquida e insoluble en el gas, que se adsorbe en la interfase alterando sus propiedades fisicoquímicas (tensión superficial, viscosidad interfacial) y modificando, en consecuencia, su comportamiento dinámico.

La formulación matemática completa del problema puede encontrarse en ^[3]. Muy brevemente, las ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica del sistema son las ecuaciones de continuidad y de Navier - Stokes, acopladas a la ecuación de balance de masa del surfactante en la fase líquida. Debido a la presencia de soluto tensioactivo adsorbido en la interfase, la componente normal y tangencial del vector tracción son función de la concentración interfacial local de surfactante adsorbido, a través de la tensión interfacial. La concentración local de surfactante en la superficie libre depende de la convección y difusión interfaciales y del intercambio con la fase a través de un mecanismo de adsorción-desorción. En la Figura 1 se ilustra esquemáticamente el problema resuelto, el sistema coordenado adoptado y las condiciones de contorno impuestas.

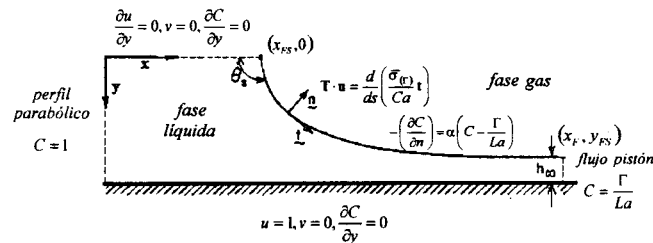


Figura 1: Representación esquemática del problema y sistema coordenado adoptado

DIFICULTADES NUMÉRICAS

Como se mencionó en la introducción, las mayores dificultades que deben enfrentarse para resolver el modelo matemático desarrollado en ^[3], son las siguientes:

- Las ecuaciones de balance de masa de surfactante y de cantidad de movimiento están acopladas no sólo a través del término convectivo, sino, además, por las componentes normal y transversal del vector tracción interfacial. Esta situación requiere concentrar nodos en la interfase para poder así determinar con mayor detalle el comportamiento de las variables interfaciales.
- Para determinados valores de los parámetros adimensionales, en la interfase se desarrollan gradientes de concentración importantes cerca de la línea de simetría. Para resolver adecuadamente estos gradientes es necesario disponer de una gran cantidad de nodos sobre la interfase.
- El proceso de transferencia de masa desde/hacia la fase y hacia/desde la interfase se produce en una capa delgada localizada alrededor de la superficie libre, donde los transportes por adsorción y por difusión tratan de eliminar los gradientes originados por el proceso de convección. La descripción adecuada de lo que ocurre en esta capa requiere refinar en dicha zona.
- Cuando el transporte convectivo es mucho más importante que el transporte difusivo, la condición de contorno impuesta a la concentración de soluto en la fase, lejos de la interfase ($C=1, x=0$), origina oscilaciones en la concentración que indican que esta condición de contorno sólo se satisface a una distancia muy grande del frente. Para eliminar las oscilaciones, es necesario alargar considerablemente el dominio en la dirección x , con el consiguiente incremento de la cantidad de elementos

Los códigos numéricos desarrollados en base a la metodología descrita en la sección anterior, están estructurados de manera que un aumento en la cantidad de elementos próximo a la interfase redunde en un aumento de elementos en todo el dominio, con el consiguiente incremento de la cantidad de grados de libertad del problema, esto causa inconvenientes asociados a la cantidad de memoria RAM necesaria para resolverlo como así también del tiempo de CPU requerido en cada iteración del método de Newton.

Para resolver eficientemente los problemas numérico enumerados, se introdujeron las siguientes modificaciones a la metodología original:

- El refinamiento exclusivo de los elementos próximos a la superficie libre.
- La inclusión de un elemento infinito.

REFINAMIENTO LOCAL

El objetivo es concentrar nodos en la interfase y sus alrededores sin incrementar, innecesariamente, el número total de elementos en la malla. El esquema de refinamiento propuesto está ilustrado en la Figura 2, en la cual se muestra una malla de elementos finitos; la parte situada a la izquierda de la línea roja no ha sido refinada, mientras que la situada a la derecha se ha refinado de la forma propuesta.

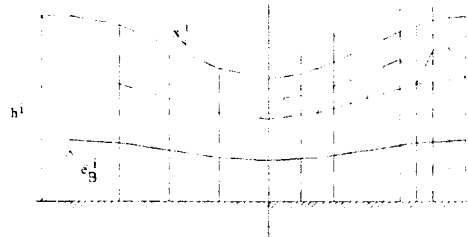


Figura 2: Esquema de refinamiento propuesto

El proceso esquematizado en la figura puede repetirse obteniéndose distintos grados de refinamiento, tal como se ilustra en la Figura 3. A cada una de estas mallas se les asigna un número que indica el grado de refinamiento respecto de la malla original. Así, por ejemplo, grado cero designa la malla base (lado izquierdo Figura 2) y grado uno la malla refinada una vez (lado derecho Figura 2). En la Tabla I se muestran las características de tres mallas correspondientes al problema descrito en [3]. Puede apreciarse que si bien el número de elementos adyacentes a la interfase se multiplica por 9 al pasar de la malla base (grado 0) a una refinada (grado 2), el número total de elementos sólo se multiplica por 4. Es importante tener en cuenta que para obtener el mismo número de nodos en la interfase con la metodología original, se deberían tener 945 elementos.

Tabla I

Grado de refinamiento	Total de elementos	Total de nodos	Total grados de libertad	Elem junto a la interfase.	Nodos junto a la interfase
0	105	534	1688	25	51
1	180	984	3038	75	151
2	455	2534	7738	225	451
Cód original	945	4588	14808	225	451

Los valores presentados en la tabla, surgen de considerar que todos los elementos adyacentes a la superficie libre tienen el mismo grado de refinamiento, pero este proceso puede aplicarse, sin inconvenientes, a elementos seleccionados arbitrariamente, de manera que cada elemento de la malla original tiene asociado un número (1, 2, 3, ...) que indica el grado de refinamiento de este elemento en la malla modificada, el que responde, por ejemplo, al gradiente de alguna variable del problema que se analiza. Antes de explicar como se construyen los nuevos elementos, vamos a recordar, como está parametrizada la superficie libre en la metodología original. La técnica desarrollada por Kistler y Scriven², entre otros, parametriza a la interfase por medio de spines ubicados convenientemente a lo largo de la misma, con independencia del sistema coordenado convencional; los spines son rectas

(podrían ser curvas) que pasan por un punto base $\bar{x}_B^{(i)}$ y tienen una dirección $\bar{e}^{(i)}$ tal como puede verse en la figura 2, a la izquierda de la línea roja. La distancia entre el punto base y el punto definido por la intersección entre el spine y la superficie libre define la coordenada local de la interfase $[h^{(i)}]$. Además la posición de los nodos interiores viene dada por las proporciones fijas w^j sobre cada coordenada local $[h^{(i)}]$, ajustando de esta manera la malla a la forma de la interfase en cada iteración del método de Newton, empleado para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas no-lineales provenientes de la discretización. Los elementos que forman la malla son cuadrángulos con dos lados rectos, determinados por los spines, y dos lados curvos, conformales a la superficie libre.

Para obtener un grado de refinamiento igual 1, cada elemento adyacente a la superficie libre se subdivide en cuatro subelementos de la forma que se muestra en la figura 2. Hay que recordar que la actualización de la superficie libre está dada por la coordenada local $[h]$, y esta coordenada es actualizada a través de la condición cinemática [3]. Por lo tanto, y considerando que se utiliza interpolación mixta es necesario que las coordenadas de todos los nodos que se mueven en el ajuste de la interfase descansen sobre spines cuya coordenada local $[h]$ pueda ser calculada en la interfase. De esta forma, la única subdivisión posible es la indicada en la figura 2. Como puede verse, se crean dos nuevos spines entre los spines originales que son equidistantes entre sí; es decir, los puntos bases y los versores dirección están dados por (Figura 3)

$$\begin{aligned} \bar{x}_B^{(k)} &= \frac{1}{3}(\bar{x}_B^{(i+1)} + \bar{x}_B^{(i)}) & \bar{x}_B^{(k+1)} &= \frac{2}{3}(\bar{x}_B^{(i+1)} + \bar{x}_B^{(i)}) \\ \bar{e}^{(k)} &= \frac{\bar{e}^{(i)} + \frac{1}{2}\bar{e}^{(i+1)}}{|\bar{e}^{(i)} + \frac{1}{2}\bar{e}^{(i+1)}|} & \bar{e}^{(k+1)} &= \frac{\frac{1}{2}\bar{e}^{(i)} + \bar{e}^{(i+1)}}{|\frac{1}{2}\bar{e}^{(i)} + \bar{e}^{(i+1)}|} \end{aligned} \quad (1)$$

Así se tienen definidos los puntos o nodos necesarios para subdividir al elemento. Teniendo en cuenta que en el esquema numérico se usa una interpolación mixta, es necesario definir nodos en los puntos intermedios de los lados del elemento, como así también en el punto central del mismo.

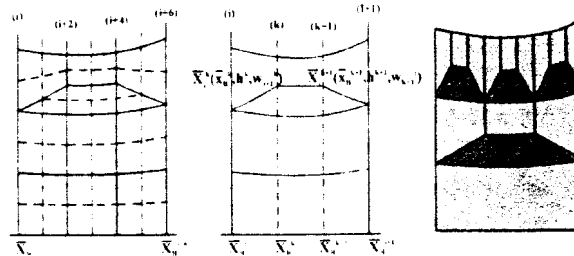


Figura 3: Definición de puntos bases y versores para los spines nuevos

En la figura 3, se indican en color azul los elementos que involucran tres spines y en color rojo los que involucran siete, por lo tanto, cuando se calculan las derivadas de los residuos respecto a los parámetros $[h]$, aparece una diferencia fundamental entre estos dos tipos de elementos. Si localmente los nodos son numerados en forma creciente de abajo hacia arriba y de izquierda a derecha, las coordenadas de cada nodo para los elementos azules dependen de $(h^1, h^1, h^1, h^2, h^2, h^2, h^3, h^3, h^3)$, mientras que para los rojos $(h^1, h^2, h^3, h^4, h^4, h^4, h^7, h^6, h^5)$

En la figura 4 se muestra el perfil de velocidad interfacial correspondiente a una malla refinada y otra sin refinar; consiguiendo el objetivo de amortiguar las oscilaciones presentes en la discretización original. Es de hacer notar, que para determinados juegos de parámetros, si las variables interfaciales presentan oscilaciones como las mostradas, el método de Newton no converge, siendo así evidente la necesidad de este refinamiento.

CONDICIONES DE CONTORNO EN EL INFINITO

Las condiciones de contorno impuestas en el plano de entrada (Figura 1) implican que aguas arriba, lejos de la burbuja, el movimiento del líquido es unidimensional y la concentración de surfactante disuelto en la fase líquida no está afectada por la presencia de la fase gas.

En el plano de salida, se supone que se ha formado una película líquida de espesor uniforme, siendo el flujo rectilíneo. Además, la concentración de soluto en la fase y en la interfase ha alcanzado el equilibrio. Estas condiciones de contorno se imponen en forma débil.

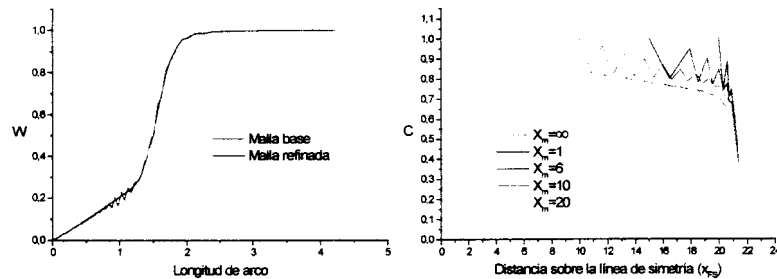


Figura 4: Perfiles de velocidad interfacial Figura5: Concentración sobre la línea de simetría

Para determinar la localización del plano de salida, se realizaron pruebas numéricas para $Ca = 1$ y distintos valores de los parámetros correspondientes a la transferencia de masa y se observó, que aún en los casos en que la fase y la interfase no estén en equilibrio, las pendientes de las curvas de concentración de surfactante prácticamente no varían con la localización de x_F , a partir de un determinado valor de esta variable. La selección del valor indicado para el número Capilar se hizo considerando que al incrementar el capilar, la interfase necesita una distancia mayor para relajarse.

Las soluciones numéricas existentes en la bibliografía del problema fluidodinámico (Giavedoni y Saita⁴), indican que es suficiente ubicar el plano de entrada a una distancia aproximadamente igual a $1.25d$, para garantizar el desarrollo del flujo 1-D delante de la interfase líquido-gas. Cuando las ecuaciones hidrodinámicas están acopladas al balance de masa de surfactante, y para valores altos del número de Péclet, las soluciones correspondientes a la concentración de soluto en la fase, presentan oscilaciones. Cuando el transporte convectivo es importante, las líneas de isoconcentración en la región anterior a la burbuja, son aproximadamente paralelas a la pared sólida; cuando el Ca es pequeño, la recirculación del flujo, determina la existencia de un gradiente de concentración en la dirección y , existiendo una zona de concentración baja cerca de la línea de simetría. La difusión en la dirección normal a la placa es el único mecanismo que puede restituir el valor de equilibrio pero, cuando el transporte convectivo es importante, la distancia necesaria para que esto ocurra es muy grande, y si la condición de contorno ($C = 1$) se localiza antes, se producen oscilaciones.

Los estudios numéricos realizados para determinar la longitud x_{FS} , se resumen en la Figura 5, donde se muestra la concentración de soluto en la línea de simetría para distintos valores de esta variable y para $Pe = 100$; es fácil ver que se necesita una distancia muy grande para conseguir una solución libre de oscilaciones, lo que representa un incremento importante en el costo computacional. Para eliminar las oscilaciones con un costo computacional razonable, en este trabajo se implementó un elemento infinito

como el descrito por Zienkiewicz y Morgan⁵, únicamente para la variable C . Este elemento convierte un dominio infinito en uno finito, a través de un mapeo conveniente de coordenadas. Para lograrlo se define la siguiente transformación de coordenadas:

$$x = \bar{N}_p^e(\xi)x_p + \bar{N}_Q^e(\xi)x_Q \quad (2)$$

donde

$$\bar{N}_p^e(\xi) = -\frac{1-\xi}{\xi} \quad \bar{N}_Q^e(\xi) = 1 + \frac{1-\xi}{\xi} \quad (3)$$

Estas funciones bases cumplen con $\bar{N}_p^e + \bar{N}_Q^e = 1$, y fueron elegidas para que en $\xi = 1$, $x = x_p$, en $\xi = 0$, $x = \infty$ y en $\xi = 0.5$, $x = x_Q$. Por lo tanto el cambio de coordenadas para x , resulta

$$x = \frac{1-2\xi}{\xi}(x_Q - x_p) + x_Q \quad (4)$$

El aporte de este elemento infinito, está pensado como una contribución en la frontera de las condiciones de contorno ubicadas en el infinito. Por lo tanto es preciso definir el valor de la variable en los nodos intermedios (interpolación bi-cuadrática). Por tal motivo, se consideró que el valor de la variable C en esos nodos, es tal que $\partial C/\partial x$ evaluada en los nodos comunes a los elementos finito e infinito coincidan.

El resultado correspondientes a la implementación del elemento infinito se muestra en la Figura 5, mostrando como el perfil de concentraciones de soluto sobre la línea de simetría ajusta al perfil de $x_{FS} = 20$ pero sin las oscilaciones presentes con anterioridad.

CONCLUSIÓN

Las modificaciones propuestas en este trabajo a la metodología numérica desarrollada en la Universidad de Minnesota para analizar flujos con superficie libre, muestran ser muy adecuadas para considerar aquellas situaciones en las cuales se necesita refinar localmente cerca de la superficie libre, como ocurre, por ejemplo, cuando existen agentes tensioactivos en el sistema. Además, la implementación del elemento infinito, acota la extensión del dominio, mejorando el ancho de banda de la matriz jacobiana, optimizando el tiempo de iteración en el método de Newton.

REFERENCIAS

- [¹] **Kistler, S.F.** *The fluid mechanics of curtain coating and related viscous free surface flows with contact lines*, Ph. D. Thesis, University of Minnesota, 1983.
- [²] **Kistler, S.F. y L.E. Scriven**, *Coating Flows*, En Computational Analysis of Polymer Processing; Eds. Pearson, J.R.A. y S.M. Richardson; Applied Science Publishers: London, New York, 1984; Cap 8.
- [³] **M. Severino, M. D. Giavedoni y F. A. Saita**, *Efectos de los surfactantes sobre el desplazamiento líquido-gas entre placas planas. Análisis numérico*. Trabajo propuesto para ser presentado en ENIEF 2000.
- [⁴] **Giavedoni, M.D. y F.A. Saita**, *The Axisymmetric and plane cases of a gas phase steadily displacing a Newtonian liquid. - A simultaneous solution of the Navier Stokes equations*. Physics of Fluids 9, 1997, págs. 2420-2428.
- [⁵] **Zienkiewicz, O. C., Morgan, K.** *Finite element and approximation*. John Wiley & Sons, Inc. New York, 1983