

Simulación de Flujos Bifásicos
Dr. Roberto Zenit
IIM-UNAM

1. Descripción del proyecto

Por medio del presente documento, se le solicita el recurso de horas de supercomputador de la UNAM para complementar un estudio sobre la interacción entre una burbuja y una pared inclinada. Hasta la fecha se ha realizado una amplia serie de experimentos en el Instituto de Investigación en Materiales de la UNAM, los cuales han arrojado datos de gran interés. Sin embargo, para poder comprender el fenómeno completamente es necesario conocer el campo de velocidad del fluido alrededor de las burbujas en el momento de interacción con la pared. Llevar a cabo mediciones experimentales para este estudio es prácticamente imposible. Por ello, hemos pensado en realizar un estudio numérico complementario utilizando CFD (computational fluid dynamics).

El proyecto, realizado en cooperación con el doctor Dominique Legendre del IMFT (Instituto de Mecánica de Fluidos de Toulouse) estudia la interacción entre una burbuja de número de Reynolds alto y número de Weber moderado con una pared inclinada. En particular, se encontró la existencia de un ángulo crítico de inclinación de la pared, para el cual se observa un cambio drástico de comportamiento de las burbujas (Tsao and Koch,1997). Cuando el ángulo de inclinación (definido como el ángulo entre la dirección tangencial de la pared y la horizontal) es menor al ángulo de transición, la burbuja impacta la pared, rebota repetidamente pero eventualmente se desliza contra la pared con una velocidad constante. Por el contrario, para ángulos superiores al crítico, la amplitud de los rebotes se estabiliza y la burbuja continúa ascendiendo, rebotando con una amplitud constante a lo largo de la pared. Con el fin de explicar la física que controla esta interacción se llevaron a cabo experimentos para un gran rango de condiciones físicas. En resumen, se usaron 5 líquidos, mezclas de agua con glicerina, por los cuales el ángulo de transición varía entre 55° por el agua y 70° por una mezcla de 20-80% en masa de glicerina con agua. Así mismo, se estableció una parte significativa de la física del fenómeno.

Para aclarar los avances del proyecto, dividiremos el estudio del fenómeno en tres partes:

- Deslizamiento de la burbuja contra la pared
- Transición de régimen
- Rebote periódico de la burbuja

Pudimos explicar y reproducir teóricamente el deslizamiento de la burbuja contra la pared por medio de la teoría de los flujos potenciales adaptados. Con respecto al ángulo de transición, se encontró un número de Weber crítico, que representa la razón entre las fuerzas de superficie y las fuerzas inerciales de la burbuja. Finalmente desarrollamos un

modelo teórico que toma en cuenta la fuerza de sustentación generada por la estela sobre la burbuja y con el cual pudimos reproducir las particularidades del comportamiento tangencial de la burbuja en régimen de rebote.

Para completar los avances del proyecto, se requiere simulaciones numéricas por varias razones. Ante todo las simulaciones de casos equivalentes a los datos experimentales en término de números adimensionales permitirían validar las condiciones de frontera y la capacidad de modelar las inclinaciones del código numérico JADIM (detallado más adelante). Además, la teoría de flujos potenciales así como el modelo de fuerza de sustentación desarrollados para explicar la física del modelo, se basan hipótesis que solo se pueden comprobar numéricamente (se requiere conocer datos de presión, velocidad y localización de interfaz). Otro punto de interés de los datos numéricos es su capacidad a variar y controlar los parámetros físicos del problema, tales como las viscosidades, la tensión superficial, el diámetro o la resolución espacial y temporal, con una precisión inalcanzable experimentalmente. Así, con base a la validación del código, se podrá simular un rango extenso de situaciones de interacción entre una burbuja y pared, necesario para avanzar en el entendimiento de la física y generar modelos simples sumamente útiles por las simulaciones de flujos multifásicos.

A pesar de los avances alcanzados en el proyecto, se necesita una variación importante de los parámetros físicos para establecer la física y desarrollar modelos válidos por este mismo rango de condiciones. En esas condiciones, el primer punto que se está desarrollando es la obtención teórica del ángulo de transición a partir de la teoría de los flujos potenciales. Efectivamente, debido a que aquella teoría establece el campo de velocidades en el líquido del cual deduce la fuerza resultante aplicada sobre la burbuja, necesitamos comparar el campo de velocidad teórico con el numérico. El siguiente punto, trata de una manera muy común de modelar la interacción entre una burbuja y una pared que se llama el coeficiente de restitución: la tasa de la velocidad de la burbuja después y antes del contacto. Numerosas publicaciones reportan la evolución de aquel parámetro con el número de Stokes por la interacción de una burbuja con paredes horizontales y verticales. Sin embargo no hemos encontrado artículos tratando el efecto de una pared inclinada. Por lo tanto, la variación del coeficiente de restitución con el número de Stokes requiere una variación de parámetros físicos difícil de obtener experimentalmente pero que se podría validar y completar numéricamente.

2. Avances de la parte numérica del proyecto

Después de una primera fase de aprendizaje del código JADIM en el IMFT (Toulouse, Francia) durante todo el semestre 2015-1, éste se instaló en dos computadoras del laboratorio de Reología del Instituto de Investigación en Materiales de la UNAM. Desde un punto de vista técnico, el código numérico JADIM está paralelizado y por lo tanto permite acelerar el cálculo de las simulaciones dividiendo el número de mallas entre el número de núcleos disponibles en una computadora. Sin embargo, debido a las

limitaciones de desempeño de las computadoras que disponemos en el laboratorio, resulta impráctico generar la base de datos requeridos para el proyecto en un período razonable de tiempo.

La primera etapa de la parte numérica del proyecto consiste en construir una red de mallas del espacio 2D adaptada a las simulaciones. Aquel plano tiene que considerar por una parte, la distancia necesaria a la burbuja para pasar de un estado estático inicial a un estado en el cual alcanza su velocidad terminal antes de observar un efecto de la pared. Por otra parte se tiene que establecer cerca de la pared una longitud de malla más pequeña que la distancia mínima entre la interfaz de la burbuja y la pared. De lo contrario obtendríamos numéricamente una coalescencia de la burbuja cuando no es el caso experimentalmente. Después de aquella fase de estudio de tamaños óptimos de mallas, logramos simular el fenómeno con un paso de tiempo del orden de la micro segunda tomando en cuenta aquel tamaño mínimo de malla cerca de la pared. Sin embargo, dado que la duración mínima de un experimento es de 400 ms, se requiere de menos 400000 pasos de tiempos para simular completamente la interacción. El siguiente paso del proyecto numérico, era generar un rango de parámetros físicos ($\mu, \sigma, \rho, D_{eq}$) para obtener simulaciones de la interacción de una burbuja con una pared horizontal generando números adimensionales y trayectorias adimensionales equivalente a los experimentos. Dado que cada simulación requiere varias semanas cada una (con 4 núcleos) varios meses fueron necesarios para acabar aquella etapa y establecer los parámetros físicos adecuados. Recientemente hemos empezado a variar las componentes de la gravedad para simular el cambio de ángulo de inclinación y por lo cual nos confrontamos a una nueva complicación. Al incluir un ángulo de inclinación de la pared, la distancia necesaria para que la burbuja se desarrolle el régimen estacionario de la trayectoria de la burbuja se incrementa significativamente. Por lo tanto, usamos condiciones periódicas sobre ambos lados del área. No obstante, las distancias usadas para las simulaciones de la interacción con pared horizontal resultaron inadecuadas al incluir el ángulo, pues al acercarse de la frontera periódica derecha la burbuja generaba, por periodicidad de las fronteras, velocidades en el líquido en la frontera izquierda del dominio. Por lo tanto este mismo campo de velocidad interactuaba con la burbuja modificando su movimiento inadecuadamente. Por lo tanto tuvimos que incrementar las distancias del dominio lo cual resultó en un tiempo de cálculo mucho más importante por cada simulación, volviendo necesario el acceso a la supercomputadora para alcanzar las metas planteadas.

3. Descripción del programa numérico: JADIM

JADIM VOF es un código numérico de investigación desarrollado por el equipo Jacques Magnaudet y Dominique Legendre en el grupo INTERFACE en el IMFT. El código permite describir de manera precisa los mecanismos físicos presentes en flujos difásicos. JADIM es un instrumento numérico que resuelve las ecuaciones de Navier – Stokes en 3D para fluidos incompresibles y no-estacionarios.

Se usa un método de volúmenes finitos del segundo orden en el espacio y en el tiempo con mallas estructuradas (Esquema Runge-Kutta de tercer orden por la resolución de los términos no-lineales acoplada con un esquema de Crank-Nicolson por las partes semi-explicitas). La presión se calcula a partir de un método de proyección, la ecuación de Poisson se resuelve usando un *solver* disperso directo en 2D (MUMPS) y un *solver* disperso iterativo en 3D (Gradiente conjugado del Jacobiano). El algoritmo de Volume Of Fluid es una aproximación de dos fluidos sin interfaz reconstruido lo cual permite de simular los flujos difásicos con una topología de interfaces complejas.

4. Resultados de productos a obtener

En caso de obtener los recursos de super cómputo, podemos dividir en dos los beneficios generados con un proyecto regular. Primero, en un corto plazo, gracias a un rango extenso de casos simulados se podrían rápidamente producir resultados para dos artículos en revistas indizadas de prestigio en el área de mecánica de fluidos. El primer artículo tratará del comportamiento tangencial de las burbujas con número de Reynolds alto y número de Weber moderado al interactuar con una pared inclinada. Aparte de las teorías descritas anteriormente, el artículo propone una explicación de la física de transición de régimen de movimiento por la cual necesitamos los datos numéricos de los campos de velocidad. Luego, se planea publicar un segundo artículo, siguiendo las investigaciones anteriores del grupo trabajo (Zenit-Legendre) sobre un modelo del coeficiente de restitución de una burbuja impactando una pared que generalizaremos al caso de una pared inclinada. Por ambos casos, los datos experimentales que están ya procesados se complementarían con los datos numéricos. Un aspecto relevante es que no existen publicaciones numérico-experimentales sobre este tema en particular, lo cual hace más atractiva la realización de este proyecto.

En cuanto al segundo beneficio, este proyecto le daría la capacidad al Laboratorio de Reología del IIM de también hacer contribuciones científicas en estudios numéricos. Actualmente, el laboratorio de Reología del Instituto de Materiales está completamente dedicado al estudio experimental de proyectos de mecánica de los fluidos. A pesar de la calidad de los proyectos desarrollados y del número importante de publicaciones generadas, el laboratorio beneficiaría al poder añadir esta nueva manera de hacer investigación. Así, se podría utilizar el código numérico JADIM para muchos otros proyectos. Dentro de las capacidades que se podrían desarrollar se pueden mencionar:

- Generación de diferente estructuras de malla.
- Teoría de la discretización para flujos multifásicos por medio de volúmenes finitos.
- Teoría de la resolución de la evolución del interfaz por VOF o Level set.
- Definición de todos los archivos de entrada para generar un caso.
- Tutoriales de casos pruebas.
- Procesamiento de los archivos de salida.

5. Cantidad de recursos de supercomputo

Horas CPU	Número de nucleos	Memoria
100.000	100	1 To