INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Responsable: Dr. Ing. Pablo Gamazo (Centro Universitario Regional Litoral Norte, Universidad de la República. Uruguay)
Asistente: Ing. Lucas Bessone (Universidad Tecnológica Nacional, Regional Concordia)

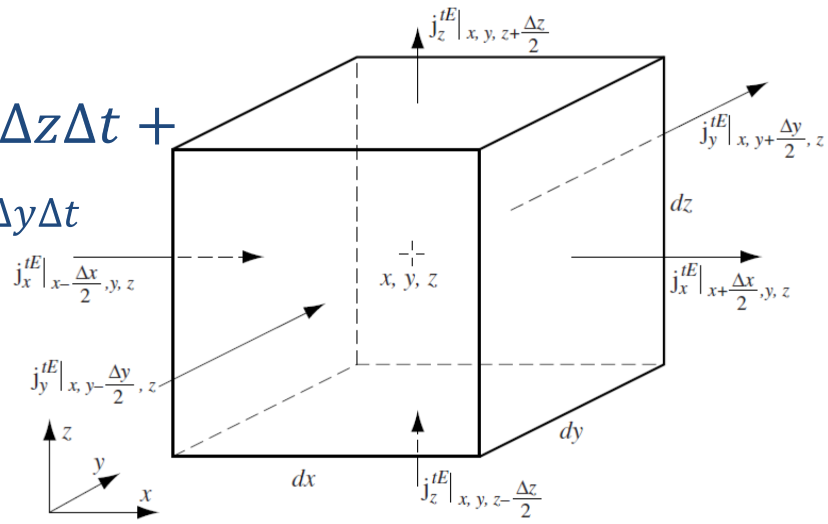
Ecuaciones de conservación

- Masa
- Energía
- Soluto
- Cantidad de movimiento

Ecuación de balance general

$$\Delta\, almacenamiento = Entradas\ - Salidas$$

$$\Delta M \Delta x \Delta y \Delta z = -\left(\mathbf{j}_{x(x+\Delta x)} - \mathbf{j}_{x(x)}\right)\Delta y \Delta z \Delta t + -\left(\mathbf{j}_{y(y+\Delta y)} - \mathbf{j}_{y(y)}\right)\Delta x \Delta z \Delta t - \left(\mathbf{j}_{z(z+\Delta z)} - \mathbf{j}_{z(z)}\right)\Delta x \Delta y \Delta t$$



dividimos por $\Delta x \Delta y\ \Delta z\ \Delta t$

$$\frac{\Delta M}{\Delta t} = -\frac{\mathbf{j}_{x(x+\Delta x)} - \mathbf{j}_{x(x)}}{\Delta x} + \cdots$$

límite $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t \to 0$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{j}_x}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{j}_y}{\partial y} - \frac{\partial \mathbf{j}_z}{\partial z}$$

divergencia: $\frac{\partial \mathbf{j}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{j}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{j}_z}{\partial z} = \nabla \cdot \mathbf{j}$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}$$

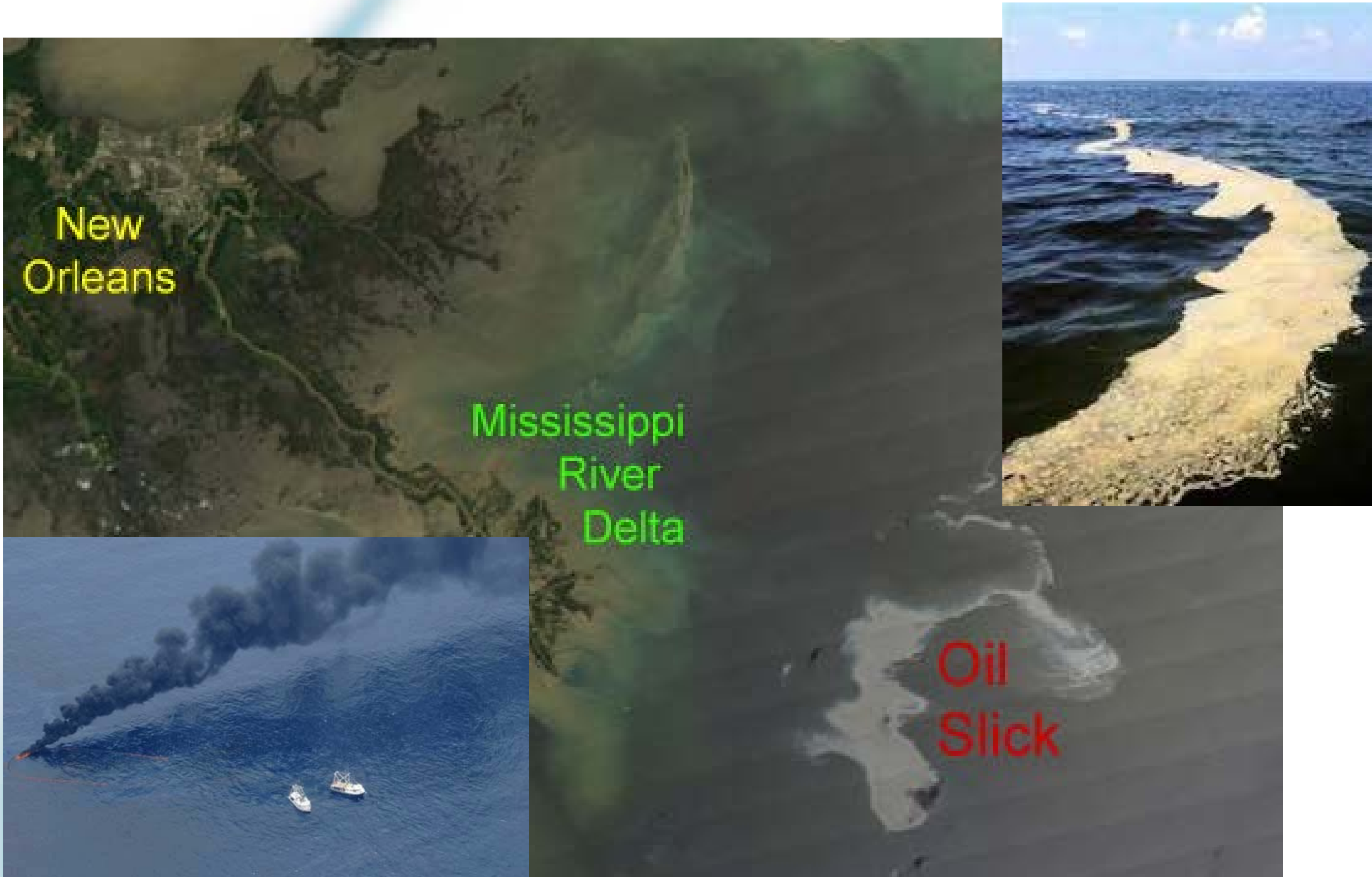
Ecuación general de transporte (ecuación de advección difusión)

Difusión
Advección
Dispersión

Números adimensionados

Transporte

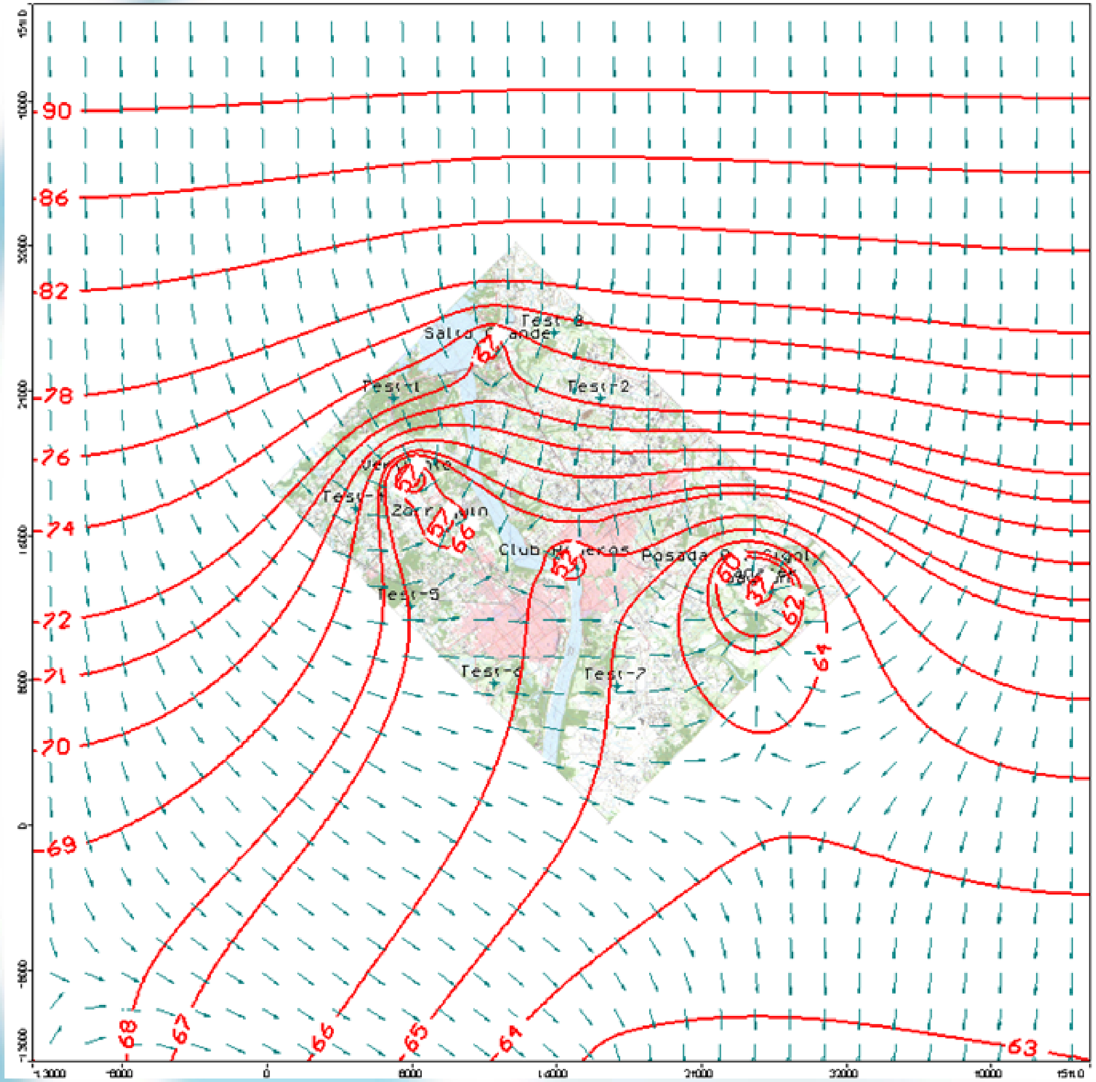
Se observan en diferentes medios



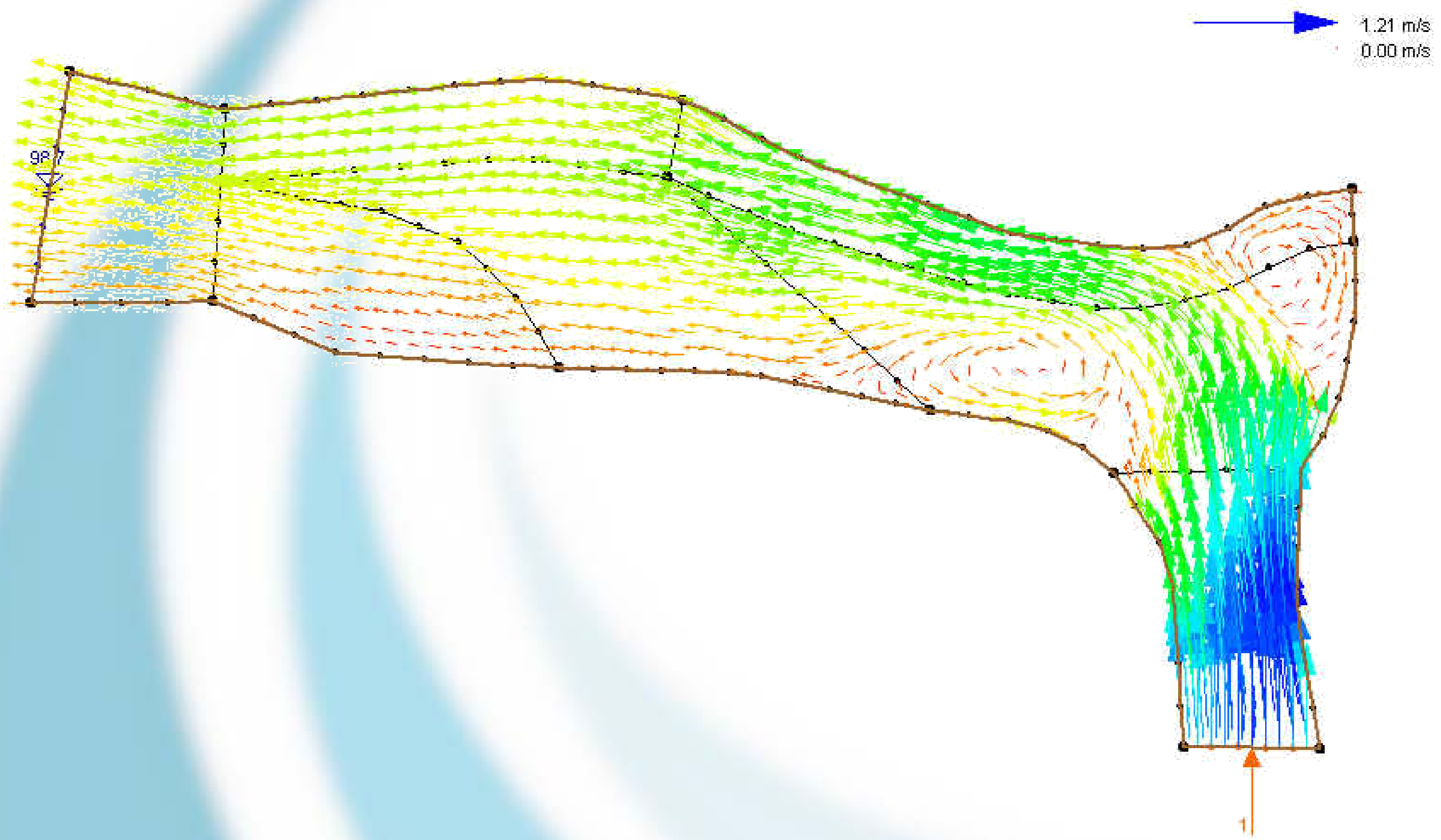
Flujo de fluido

- Se debe obtener antes de estudiar el transporte
- Objetivo: Cálculo del **campo de velocidades** del fluido
- Ecuaciones: Siempre son dos
  - **Continuidad** (=**Conservación de masa de fluido**)
    - Con frecuencia, es suficiente
  - Ecs de **conservación de la cantidad de movimiento**. Ecs. de Navier Stokes, que se puden simplificar a:
    - Darcy para medios porosos
    - Manning en régimen uniforme

Campo de velocidades



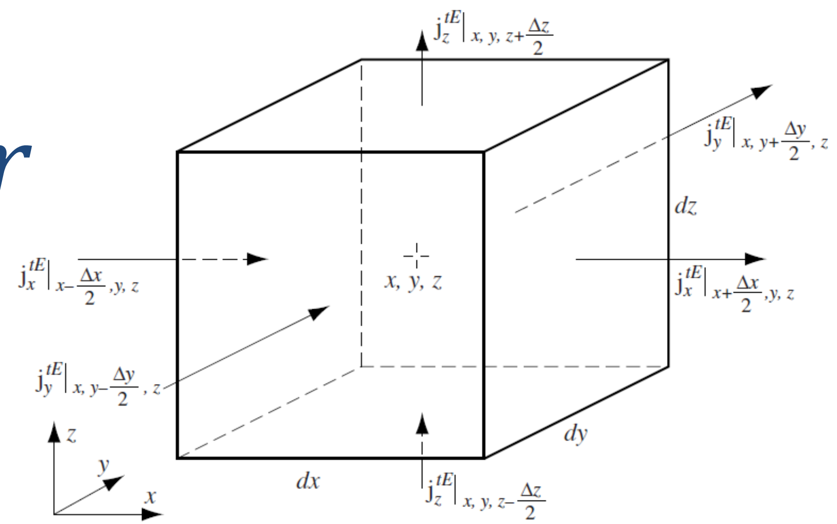
Campo de velocidades



Ecuación de balance general

$$\Delta almacenamiento = Entradas\ - Salidas$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} + r$$



Se aplicará la ecuación de balance general a la conservación de masa de soluto

Procesos involucrados

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} + r$$

- Almacenamiento

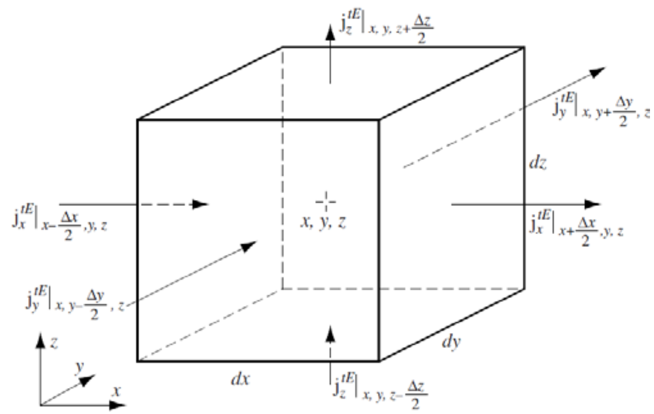
- Difusión
- Advección
- Dispersión

- Fuentes
- Desintegración
- Adsorción

Almacenamiento

Variación de cantidad de masa de soluto en el volumen de control

$$\frac{\partial M}{\partial t}$$



Su expresión depende de las unidad en que se trabaja la concentración

Cuando el volumen de control coincide con el del fluido y no es compresible:

$$\frac{\partial c}{\partial t}$$

c [M(soluto)/m^3 (fluido)];

(M= Kg o moles)

Otras formas de expresar la concentración:

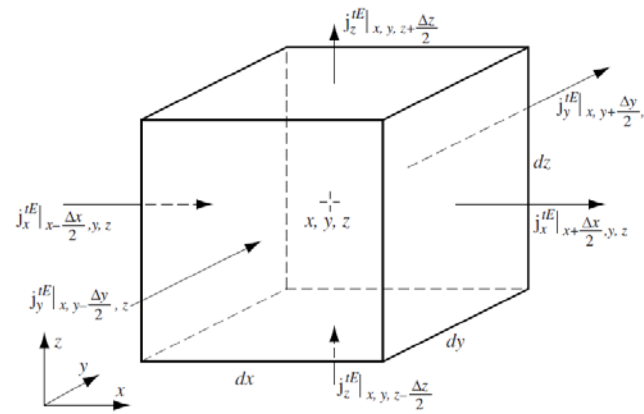
c [M (soluto)/kg (fluido)]
w [kg(soluto)/kg (fluido)]

OJO: Puede cambiar la cantidad del “solvente” en el volumen de control

Almacenamiento

Variación de cantidad de masa de soluto en el volumen de control

$$\frac{\partial M}{\partial t}$$



Medio poroso:

(volumen de control no coincide con el del fluido)

$$\frac{\partial \phi c}{\partial t}$$

ϕ fracción volumétrica [m^3 (fluido)/m^3 (medio)] (c en [X/m^3(fluido)])

Fluido compresible:

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t}$$

ρ densidad [kg (fluido)/m^3 (fluido)] (c en [X/kg (fluido)])

Observación:
Todas las relaciones termodinámicas en química del agua (ley de acción de masa, etc.) utilizan la **molalidad** (mol soluto/kg solvente)como medida de concentración.

Procesos involucrados

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} + r$$

- Almacenamiento

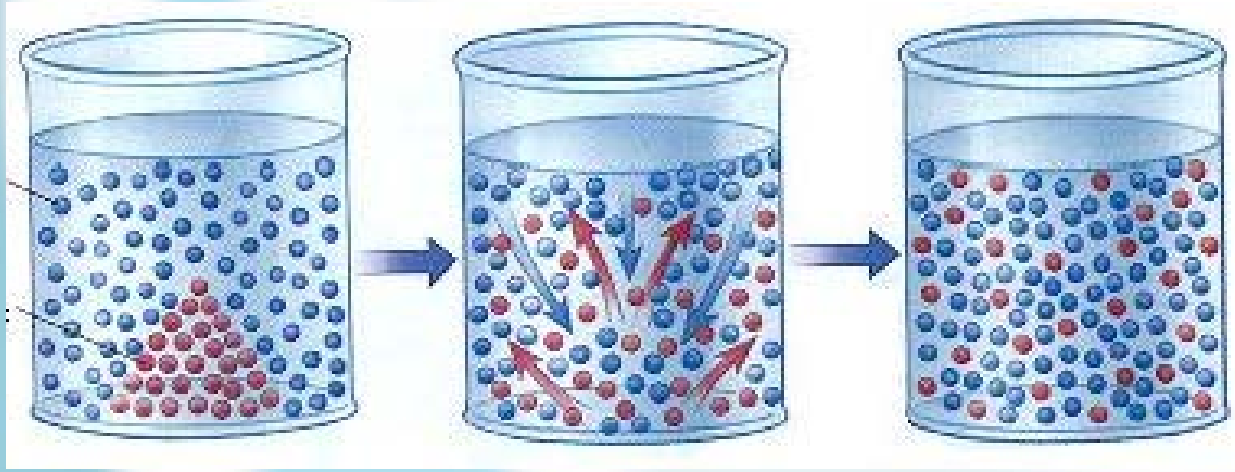
- Difusión
- Advección
- Dispersión

- Fuentes
- Desintegración
- Adsorción

Difusión

- flujo neto de soluto desde las zonas donde hay mucho hacia las zonas donde hay poco:
    - expansión y dilución

- Resulta de los movimientos de tipo browniano (al azar) de las partículas (átomos, moléculas). Ej: gota de tinta en agua.



Difusión

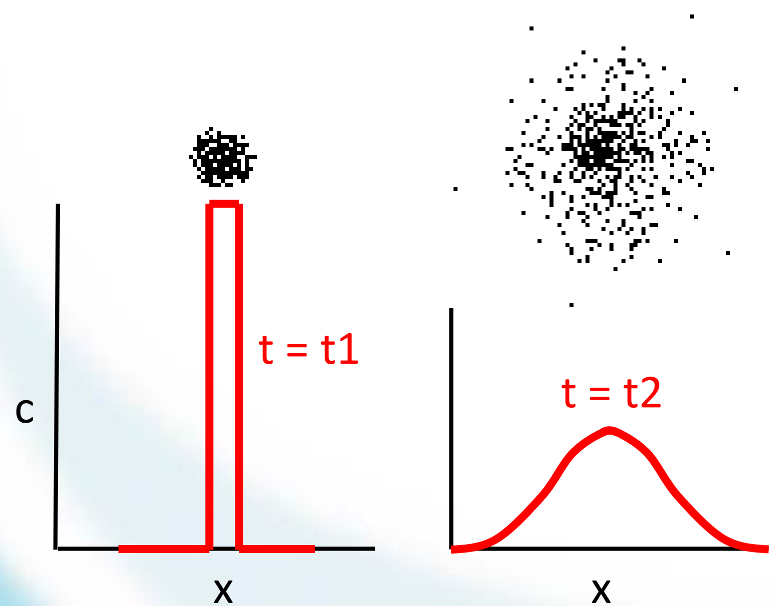
Ley de Fick

Adolf Fick
(1829–1901)

- Médico alemán
- Descubrió analogía entre la difusión de calor en sólidos y de solutos en líquidos

$$j = -D\frac{\partial c}{\partial x}$$

Coeficiente de difusión



Difusión

Ley de Fick

El flujo másico es proporcional al gradiente de concentración.

$$\mathbf{j_D} = -\mathbf{D}\nabla c \qquad [\mathrm{M\ L^{-2}\ T^{-1}}]$$

La constante de proporcionalidad es el coeficiente de difusión molecular D_0

$$\mathbf{D}_0 = D_0\mathbf{I} = D_0\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad [\mathrm{L^2\ T^{-1}}]$$

Difusión

Lasaga A. C. (1998) Kinetic Theory in the Earth Sciences. Princeton Univ. Press.

DIFUSIÓN EN GASES

	D (cm^2/s)
CO2 en aire	0.17 (17ºC, 1atm)
H2 en O2	0.80 (17ºC, 1atm)

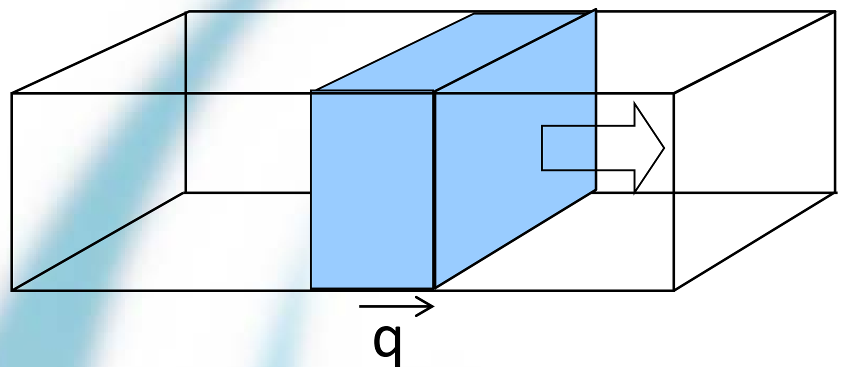
DIFUSIÓN EN AGUA (25ºC)

	D ($x10^{-5}$ cm^2/s)		D ($x10^{-5}$ cm^2/s)
Cl^-	2.03	Na^+	1.33
$SO4^{2-}$	1.07	Mg^{2+}	0.705
$HCO3^-$	1.18	Ca^{2+}	0.793
$HPO4^{2-}$	0.734	K^+	1.960
$CO3^{2-}$	0.955	$NH4^+$	1.980
$PO4^{3-}$	0.612		

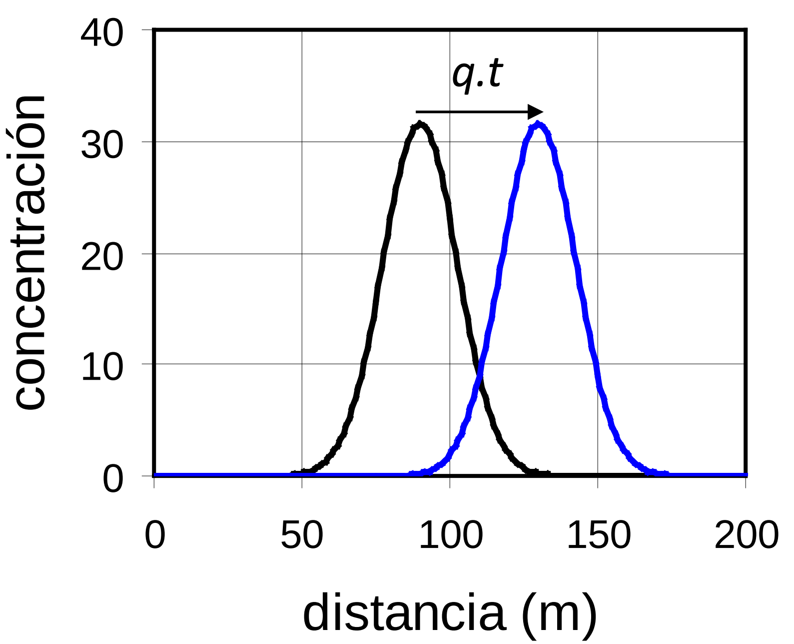
DIFUSIÓN EN SÓLIDOS

	D (cm^2/s, 700ºC)		
Ag en Ag	$5.0x10^{-11}$	Fe en Fe2O3	$5.4x10^{-19}$
Au en Au	$6.0x10^{-11}$	O^{2-} en MgAl2O4	$2.0x10^{-24}$
C en α-Fe	$1.1x10^{-6}$	O^{2-} en ortoclasa	$8x10^{-14}$
Na en NaCl	$3.0x10^{-9}$	Na en ortoclasa	$1.3x10^{-11}$
Cl en NaCl	$6.3x10^{-10}$	K en ortoclasa	$7.7x10^{-15}$
Fe en FeS	$4.5x10^{-8}$	Rb en ortoclasa	$1.5x10^{-15}$
(‖ al eje c)		O^{2-} en albita $3.8x10^{-14}$	
Fe en FeS	$2.0x10^{-8}$	Na en albita $1.2x10^{-10}$	
($\perp$ al eje c)		O^{2-} en anortita	$1.8x10^{-13}$
Mg en MgO	$2.2x10^{-18}$		

Advección



flujo de soluto 'arrastrado' por el fluido



$$\mathbf{j}_{adv} = \mathbf{q}c \qquad [M\ L^{-2}\ T^{-1}]$$

Evalúa el flujo másico debido al arrastre producido por el fluido

Dispersión

Mecanismo de transporte causado por las diferencias de la velocidad respecto a la media del fluido.

Depende de la escala a la que se modela el fenómeno

Efecto Expansión (aumento de la zona contaminada) y dilución (reducción de conc. max,.)

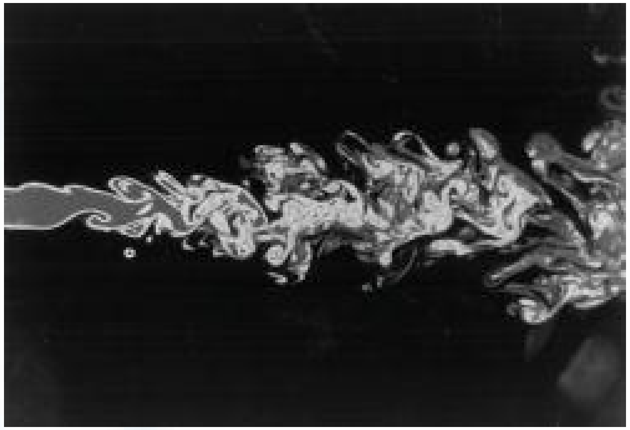
Varios fenómenos originan dispersión:

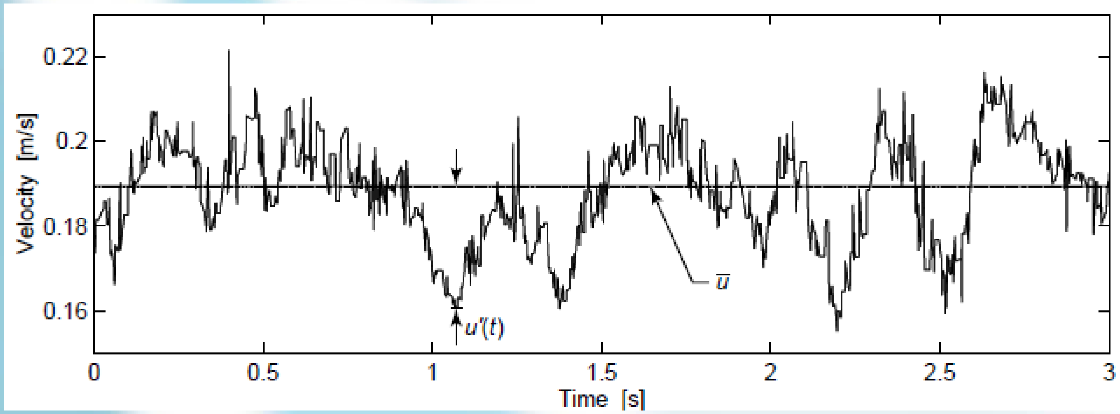
- Turbulencia
- Perfiles de velocidad no uniformes
- Heterogeneidad

Transporte

Dispersión turbulenta:

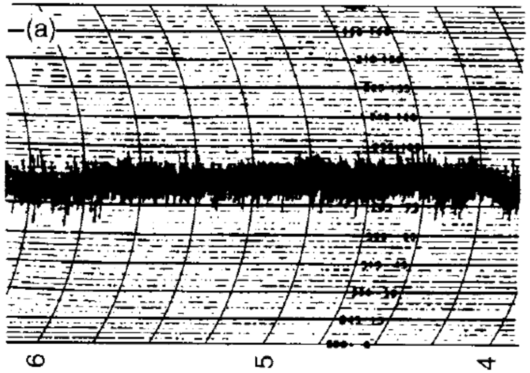
Mecanismo de transporte causado por las fluctuaciones de la velocidad respecto a la media del fluido.



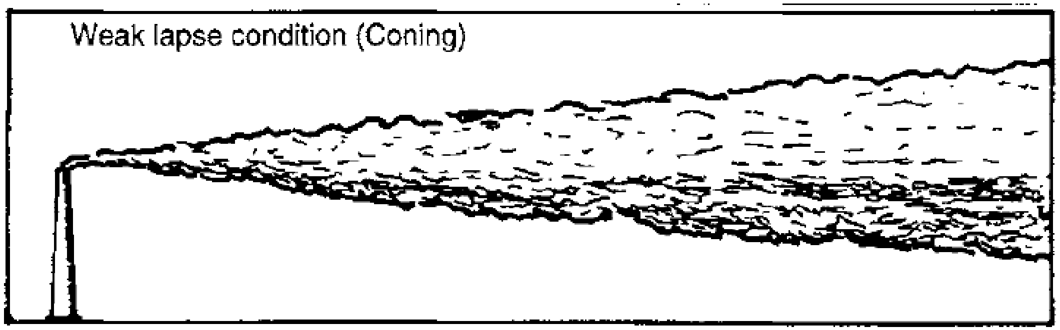


Dispersión

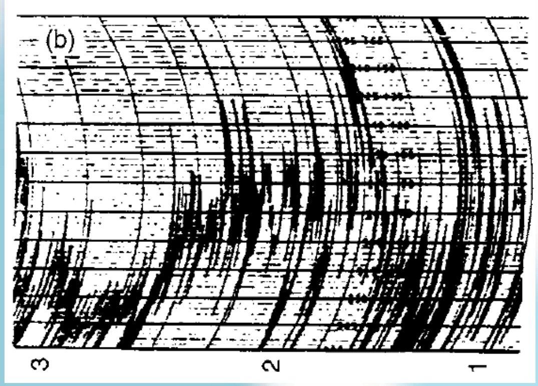
Turbulencia mecánica



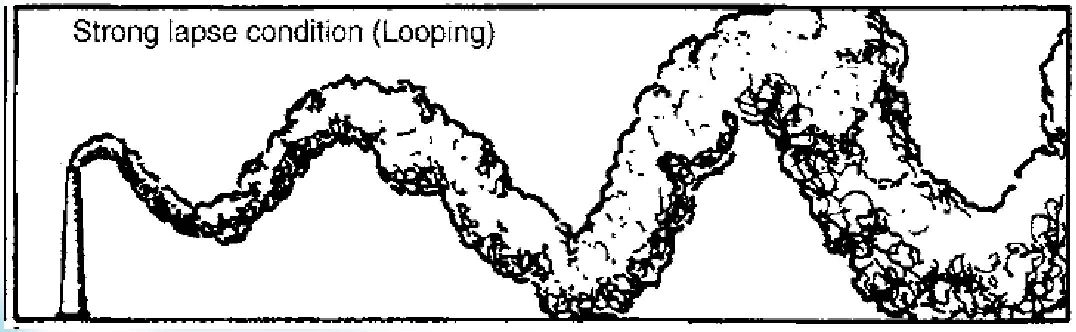
Variaciones en la dirección del viento



Turbulencia térmica

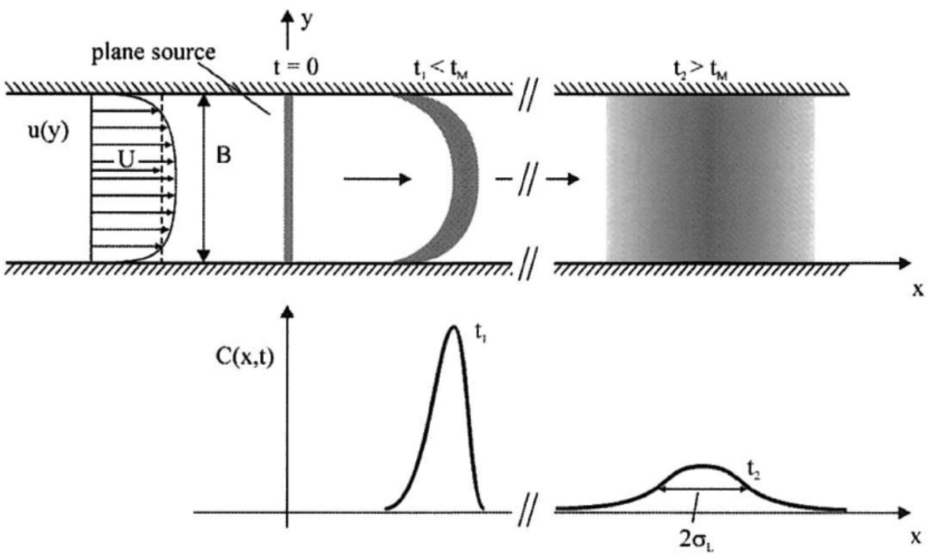


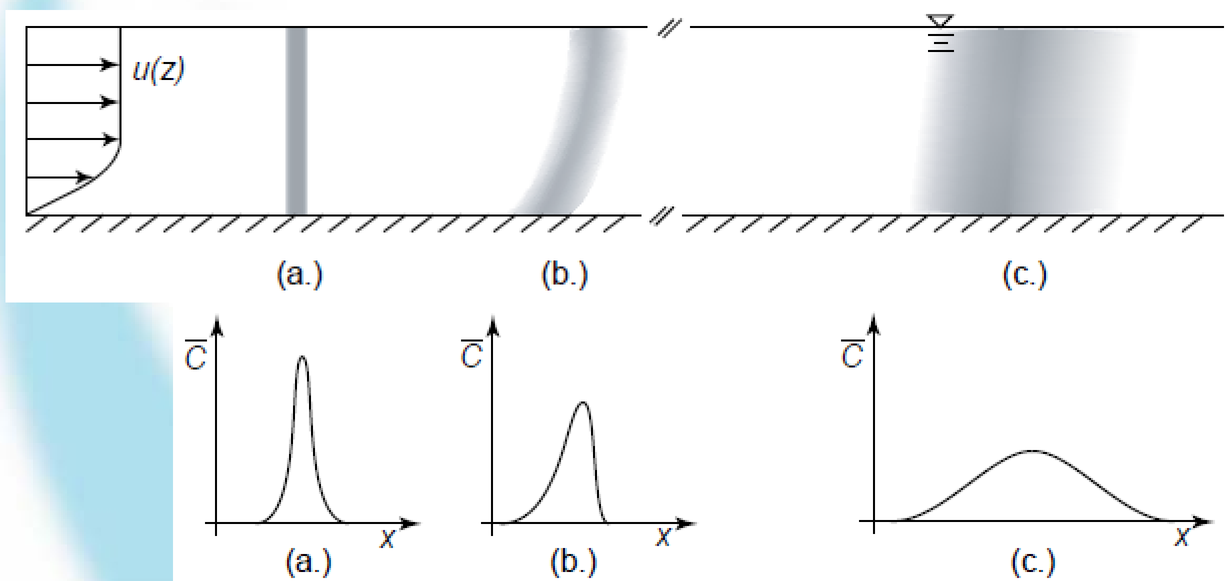
Variaciones en la dirección del viento



Dispersión

Mezcla transversal

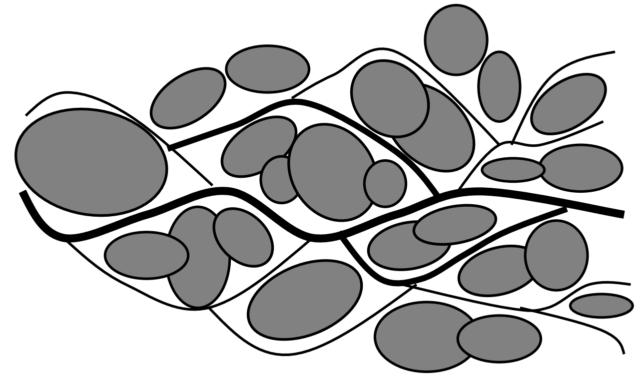


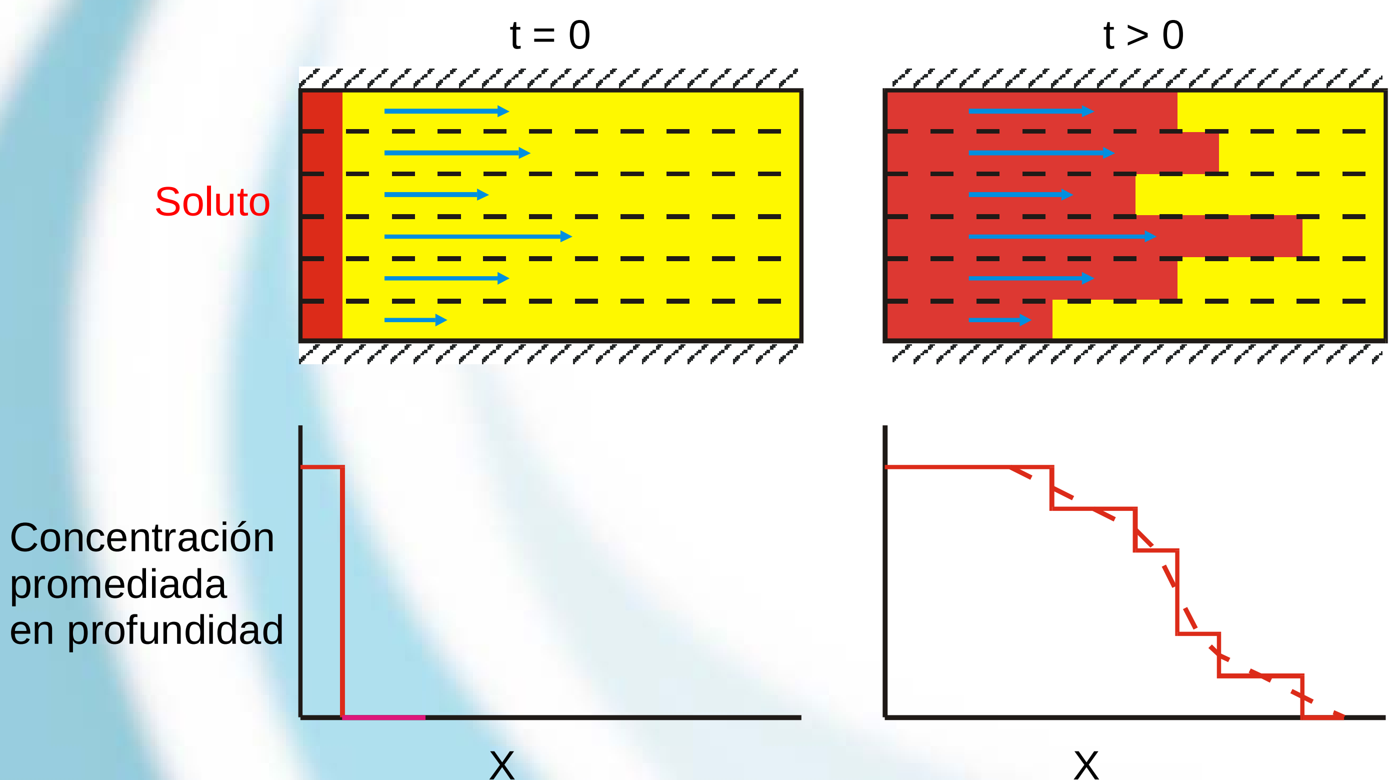


Dispersión

Heterogeneidad

La dispersión en medios porosos es causada por la heterogeneidad en la velocidad del agua





¿De qué depende la dispersión?

- Dispersión turbulenta
  - Magnitud de la turbulencia (tamaño de los remolinos)
- Dispersión debida a heterogeneidad
  - Magnitud de la heterogeneidad (varianza y escala de heterogeneidad)
- En ambos casos:
  - D proporcional a la velocidad (La constante de proporcionalidad es la dispersividad)
  - Proporcional al gradiente de concentraciones
  - Anisótropo. Existe dispersión longitudinal (típicamente muy superior a la transversal)
  - Existen efectos de escala

Expresión matemática

Se aplica la Ley de Fick

$$\mathbf{j}_{dis} = -\mathbf{D}_{dis} \nabla c \leftarrow$$

Gradiente de concentración

$$\nabla c = \begin{pmatrix} \partial c / \partial x \\ \partial c / \partial y \\ \partial c / \partial z \end{pmatrix}$$

$\uparrow$

Tensor de dispersión (matriz)

- 1D $\mathbf{D}_{dis} = \alpha_L v_x$

α_L = Dispersividad longitudinal (m)
α_T = Dispersividad transversal (m)
v_x = velocidad lineal (m/s)

- 2D $$\mathbf{D}_{dis} = \begin{pmatrix} \dfrac{\alpha_L v_x^2 + \alpha_T v_y^2}{|\mathbf{v}|} & \dfrac{(\alpha_L - \alpha_T) v_x v_y}{|\mathbf{v}|} \\ \dfrac{(\alpha_L - \alpha_T) v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & \dfrac{\alpha_L v_y^2 + \alpha_T v_x^2}{|\mathbf{v}|} \end{pmatrix}$$

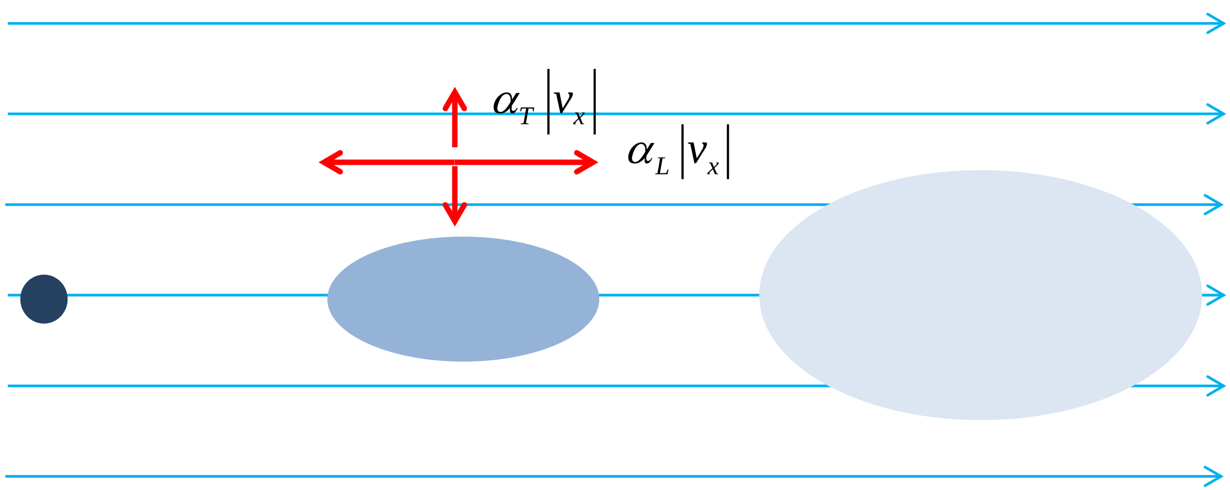
Dispersión

- 2D

α_L = Dispersividad longitudinal (m)
α_T = Dispersividad transversal (m)
v_x = velocidad lineal (m/s)

Si v_y=0

$$\mathbf{D}_{dis} = \begin{pmatrix} \alpha_L |v_x| & 0 \\ 0 & \alpha_T |v_x| \end{pmatrix}$$



Dispersión

- 3D

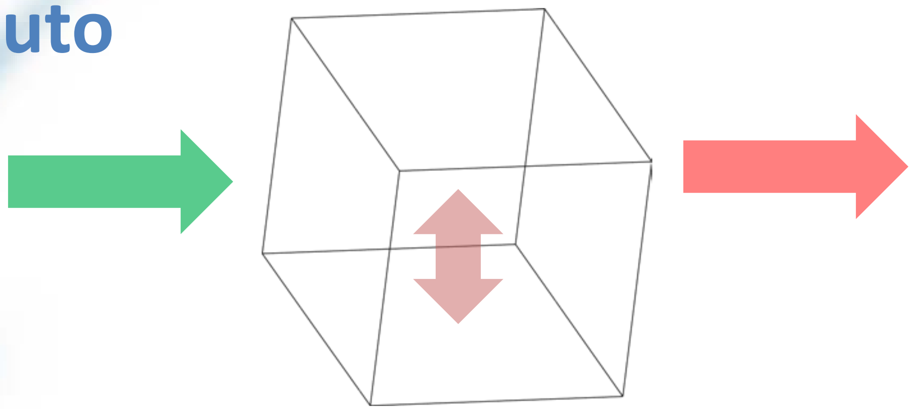
$$\mathbf{D}_{dis} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha_L v_x^2 + \alpha_T\left(v_y^2 + v_z^2\right)}{|\mathbf{v}|} & \frac{(\alpha_L - \alpha_T) v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & \frac{(\alpha_L - \alpha_T) v_x v_z}{|\mathbf{v}|} \\ \frac{(\alpha_L - \alpha_T) v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & \frac{\alpha_L v_y^2 + \alpha_T\left(v_x^2 + v_z^2\right)}{|\mathbf{v}|} & \frac{(\alpha_L - \alpha_T) v_y v_z}{|\mathbf{v}|} \\ \frac{(\alpha_L - \alpha_T) v_x v_z}{|\mathbf{v}|} & \frac{(\alpha_L - \alpha_T) v_y v_z}{|\mathbf{v}|} & \frac{\alpha_L v_z^2 + \alpha_T\left(v_x^2 + v_z^2\right)}{|\mathbf{v}|} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\mathbf{D}^{disp} = \alpha_t |\mathbf{v}| \mathbf{I} + \left(\alpha_l - \alpha_t\right) \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}^{tr}}{|\mathbf{v}|}}$$

$$\mathbf{I} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} ; \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}$$

Ecuación transporte

Balance de soluto



Variación de almacenamiento = Entradas - Salida

$$\frac{MS^{t+\Delta t} - MS^{t}}{\Delta t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}$$

Masa de soluto: $MS = \phi c$

$$\frac{\partial \phi c}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) - \nabla \mathbf{q}c$$

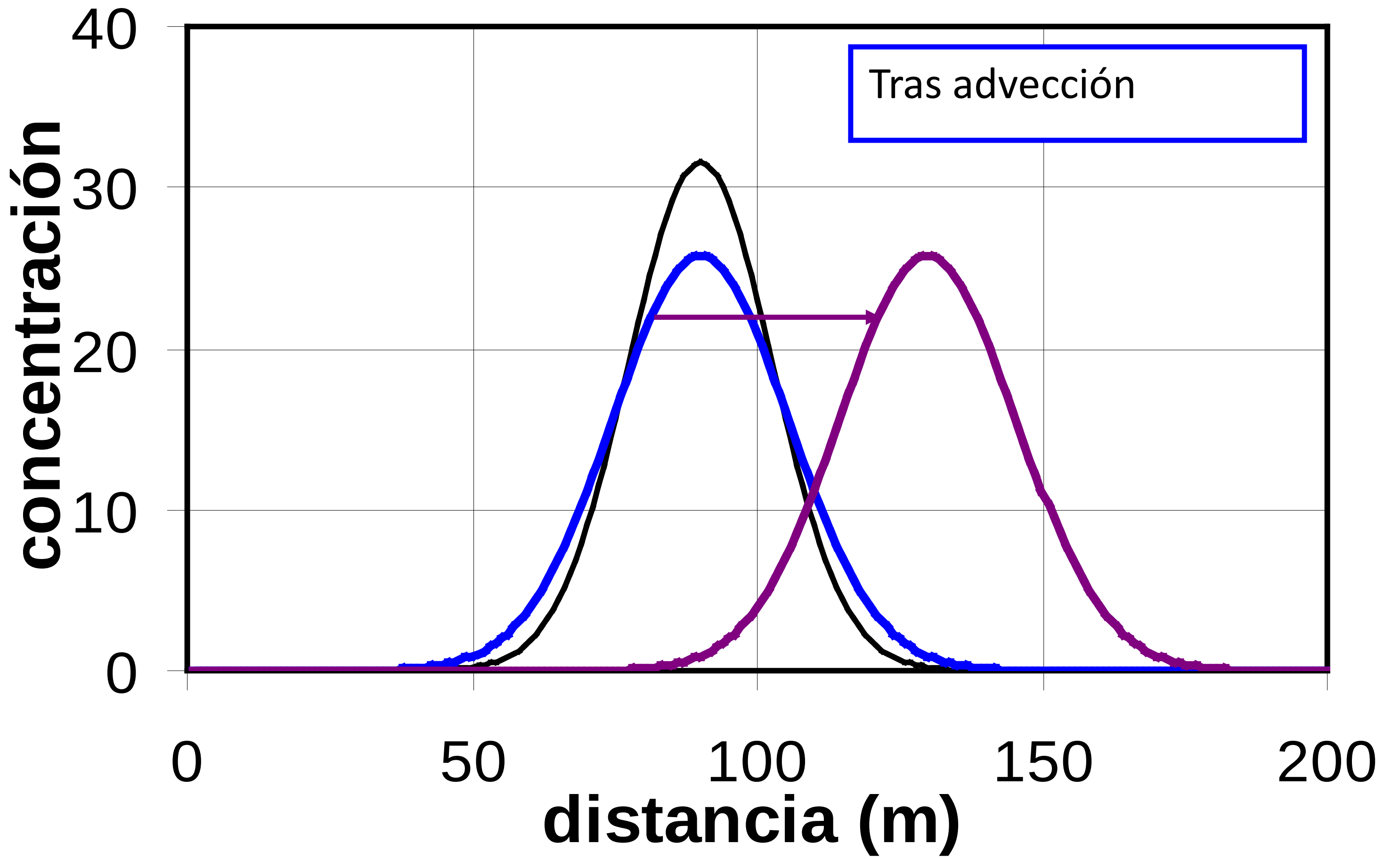
$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_{dif} + \mathbf{D}_{disp}$$

difusión   dispersión

Gobierna el transporte de solutos (ecuación de advección difusión)

Solución pulso

$$\frac{\partial \phi c}{\partial t} = \boxed{\nabla(\mathbf{D}\nabla c)}\boxed{-\nabla \mathbf{q}c}$$



Ecuación transporte

$$\frac{\partial \phi c}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) - \nabla q c$$

Recordar que en realidad es $\frac{D}{\phi}$

Suponiendo constante ϕ

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(\mathrm{D}\nabla c) - \nabla \mathbf{v} c$$

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{q}}{\phi}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(\mathrm{D}\nabla c)$$

ecuación en derivadas parciales parabólica

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \mathbf{v} c$$

ecuación en derivadas parciales hiperbólica

$$\left(\mathrm{D}\nabla(\nabla c) = \mathrm{D}\nabla^2 c = \mathrm{D}\Delta c\right)$$

Derivada total

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x}\underbrace{\frac{dx}{dt}}_{= v_x} + \frac{\partial c}{\partial y}\underbrace{\frac{dy}{dt}}_{= v_y} + \frac{\partial c}{\partial z}\underbrace{\frac{dz}{dt}}_{= v_z}$$

$$\mathbf{v} = \left(v_x, v_y, v_z\right)$$

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla c$$

$$\nabla c = \left(\frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y}, \frac{\partial c}{\partial z}\right)$$

Ecuación transporte

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(D\nabla c) - \nabla \mathbf{v} c$$

Fluido incompresible

$\nabla \mathbf{v} = 0$

$\nabla \mathbf{v} c = \mathbf{v} \nabla c$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(D\nabla c) - \mathbf{v} \nabla c$$

Derivada total

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla c$$

$$\boxed{\frac{dc}{dt} = \nabla(D\nabla c)}$$

Ecuación transporte

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(\mathrm{D}\nabla c) - \nabla \mathbf{v}c$$

Adimensionalizando la ecuación

$$c = \mathbf{C}c^*$$

$$t = \mathbf{T}t^*$$

$$\mathrm{D} = \mathbf{D}\mathrm{D}^*$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{V}\mathbf{v}^*$$

$$\nabla = \frac{1}{\mathbf{L}}\nabla^*$$

$$\frac{\mathbf{C}}{\mathbf{T}}\frac{\partial c^*}{\partial t^*} = \frac{\mathbf{DC}}{\mathbf{L}^2}\nabla^*(\mathrm{D}^*\nabla^* c^*) - \frac{\mathbf{VC}}{\mathbf{L}}\nabla^*\mathbf{v}^* c^*$$

Multiplicando por $\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{VC}}$

$$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{VT}}\frac{\partial c^*}{\partial t^*} = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{VL}}\nabla^*(\mathrm{D}^*\nabla^* c^*) - \nabla^*\mathbf{v}^* c^*$$

$$\frac{1}{Co} \qquad \frac{1}{Pe}$$

Ecuación transporte

$$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{VT}}\frac{\partial c^*}{\partial t^*} = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{VL}}\nabla^*(\mathrm{D}^*\nabla^* c^*) - \nabla^*\mathbf{v}^* c^*$$

$$Pe = \frac{\mathbf{VL}}{\mathbf{D}}$$

Número de Peclet: Compara la advección con la difusión-dispersión

Pe>1 Domina la advección

Pe<1 Domina la difusión-dispersión

Si la dispersión es mucho mayor a la difusión $D_{dif} \gg D_{disp}$

$$\mathrm{D}=\mathrm{D}_{dif} + \mathrm{D}_{disp} \approx \mathrm{D}_{disp} = v\alpha_L$$

$$Pe = \frac{\mathbf{VL}}{\mathbf{V}\alpha_L} = \frac{\mathbf{L}}{\alpha_L}$$

Ecuación transporte

$$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{VT}}\frac{\partial c^*}{\partial t^*} = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{VL}}\nabla^*(\mathrm{D}^*\nabla^* c^*) - \nabla^* \mathbf{v}^* c^*$$

$$Co = \frac{\mathbf{VT}}{\mathbf{L}}$$

1D $$T_{r\mathbf{L}} = \frac{\mathbf{L}}{\mathbf{V}}$$

Tiempo de residencia en una longitud L

$$Co = \frac{\mathbf{VT}}{\mathbf{L}} = \frac{\mathbf{T}}{T_{r\mathbf{L}}}$$

Número de Courant: Compara el tiempo característico con el “tiempo de residencia advectivo” en la longitud característica

Co>1

El tiempo característico es mayor al tiempo de residencia en la longitud característica
(El fenómeno en **L** es más rápido que **T**, ”se escapa”)

Co<1

El tiempo característico es menor al tiempo de residencia en la longitud característica
(El fenómeno en **L** es más lento que **T**, ”no se escapa”)

Ecuación transporte

$$\frac{\mathbf{C}}{\mathbf{T}}\frac{\partial c^*}{\partial t^*} = \frac{\mathbf{DC}}{\mathbf{L}^2}\nabla^*(\mathrm{D}^*\nabla^* c^*) - \frac{\mathbf{VC}}{\mathbf{L}}\nabla^*\mathbf{v}^* c^*$$

Multiplicando por $\frac{\mathbf{L}^2}{\mathbf{DC}}$

$$\frac{\mathbf{L}^2}{\mathbf{DT}}\frac{\partial c^*}{\partial t^*} = \nabla^*(\mathrm{D}^*\nabla^* c^*) - \frac{\mathbf{VL}}{\mathbf{D}}\nabla^*\mathbf{v}^* c^*$$

$$\frac{1}{Fo} \qquad Pe$$

$$Fo = \frac{\mathbf{DT}}{\mathbf{L}^2}$$

Número de Fourier: es la relación entre la propagación por difusión y la capacidad de almacenamiento

Recordando que **D** es $\frac{D}{\phi}$:

$$Fo = \frac{DT}{\phi \mathbf{L}^2} = \frac{DT/\mathbf{L}}{\phi \mathbf{L}}$$

Fo>1

La variación de almacenamiento por difusión en la longitud característica se desarrolla en un tiempo menor al característico ("**L** se llena en menos de **T**")

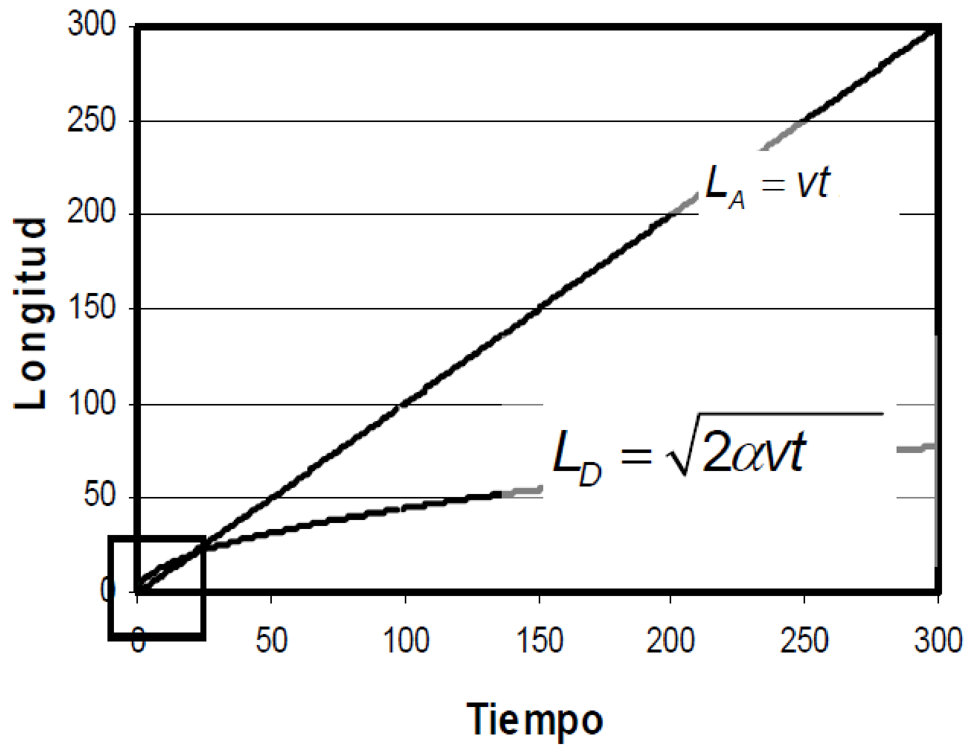
Fo<1

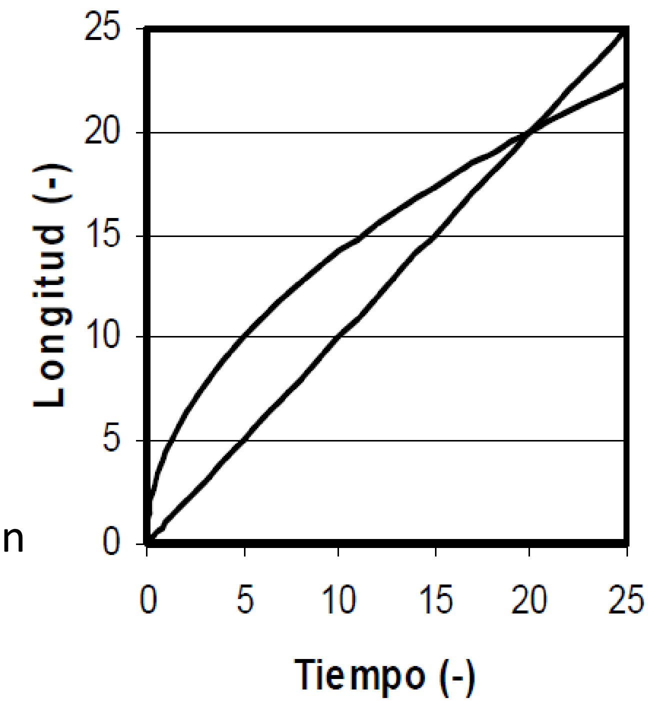
La variación de almacenamiento por difusión en la longitud característica se desarrolla en un tiempo mayor al característico ("**L** no se llena en **T**")

Ecuación transporte

$$Co = \frac{\mathbf{VT}}{\mathbf{L}}$$

$$Fo = \frac{\mathbf{DT}}{\mathbf{L}^2}$$





A distancias y tiempos pequeños domina la difusión (dispersión).
A escalas grandes, domina la advección