

SIMULACION NUMERICA DE UN FLUJO DE RECUBRIMIENTO  
MEDIANTE EL METODO DE ELEMENTOS FINITOS

María D. Giavedoni

Fernando A. Saita

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria  
Química (INTEC). CONICET - Universidad Nacional del  
Litoral. Santa Fé - Argentina.

RESUMEN

En este trabajo se analiza el flujo estacionario, bidimensional, viscoso y con superficie libre de un fluido Newtoniano e incompresible, que es extraído de un recubridor de ranura por el movimiento de un sustrato.

El conjunto de ecuaciones algebraicas no-lineales resultante de la aplicación del método de elementos finitos se resuelve con el método de Newton. Los resultados obtenidos se comparan con los existentes en la bibliografía.

ABSTRACT

A steady two-dimensional viscous free-surface flow of an incompressible Newtonian fluid, carried out of a narrow slot by a moving substrate, is analyzed in this work.

The set of non-linear algebraic equations that results from the application of the finite element method is solved by Newton iteration. The predictions obtained here are compared with previously reported ones.

## INTRODUCCION

Los flujos de recubrimiento son flujos viscosos en los cuales una película líquida se deposita en forma continua sobre un sustrato, desplazando al aire. En general, se trata de flujos estacionarios y bidimensionales; excepto por una zona próxima a los bordes, y están caracterizados por la presencia de una superficie libre líquido-gas. Algunos procesos gobernados por estos flujos han alcanzado gran perfección tecnológica, fundamentalmente como resultados de numerosos experimentos de prueba y error; sin embargo, no hay en la bibliografía un número significativo de trabajos que traten los flujos de recubrimiento desde el punto de vista fluidodinámico fundamental. El objetivo de este tipo de análisis es obtener una base teórica racional para el posterior desarrollo de la tecnología de recubrimiento.

La mayor dificultad para desarrollar modelos teóricos de estos flujos se debe a la presencia de las interfases aire-líquido cuya posición es de antemano desconocida; es decir, su localización es parte de la solución del problema. Las ecuaciones que gobiernan un flujo de recubrimiento son siempre no-lineales, no sólo por los términos inerciales que pueden ser apreciables, sino también por la presencia de la superficie libre.

En este trabajo se analiza el flujo estacionario, bidimensional, viscoso e incompresible, de un fluido Newtoniano cuando es extraído de una rendija angosta por el movimiento de un sustrato ('slot coating'). Los parámetros característicos de este sistema son el Número Capilar, el Número de Reynolds y el caudal adimensional. Con este objetivo, el sistema de ecuaciones diferenciales (continuidad y Navier-Stokes) y condiciones de contorno que describen el proceso, se transforma en un sistema de ecuaciones algebraicas no-lineales mediante el método de elementos finitos.

El método de elementos finitos es muy conveniente para el análisis de flujos con superficies libres por las razones que se mencionan a continuación: tanto la frontera libre como los dominios irregulares se manejan en forma efectiva mediante la parametrización de la superficie por medio de espinas dorsales ('spines') [1] y por la transformación isoparamétrica de cada elemento del dominio real en un cuadrado de lado unitario; además, las condiciones de contorno complicadas, en particular las que corresponden a la superficie libre, se imponen fácilmente.

El sistema de ecuaciones algebraicas se resuelve con el método de Newton el que, además de converger en forma cuadrática, permite localizar puntos singulares en las familias de soluciones mediante el análisis de la matriz Jacobiana.

Los resultados obtenidos con el código computacional descrito coinciden con los publicados previamente por Saito y Scriven [2]. Actualmente se trata de localizar y analizar la naturaleza de los puntos singulares presentes en las familias de soluciones obtenidas a fin de establecer la estabilidad de una determinada configuración del flujo.

## ECUACIONES Y CONDICIONES DE CONTORNO

La Figura 1 representa un esquema del sistema en estudio.

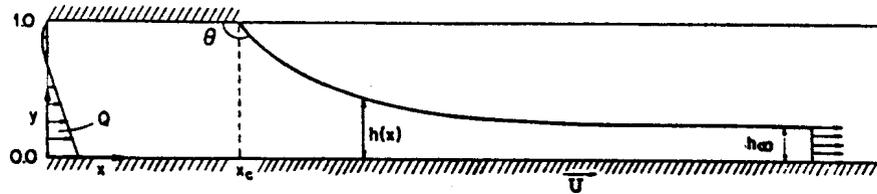


Figura 1: Representación esquemática del recubridor de ranura.

Las ecuaciones que describen el proceso (continuidad y Navier-Stokes) en su forma adimensional son:

$$\nabla \cdot \underline{V} = 0 \quad (1)$$

$$\text{Re } \nabla \cdot \underline{V}\underline{V} - \nabla \cdot \underline{T} + \text{St } \underline{j} = \underline{0} \quad (2)$$

donde  $\underline{T} = -p\underline{I} + (\underline{V}\underline{V} + (\nabla\underline{V})^T)$ . Las condiciones de contorno necesarias para resolverlas implican,

$$x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad u = -3(1-2Q)y(1-y)+1-y \quad (3)$$

$$v = 0 \quad (4)$$

$$x = x_F, \quad 0 \leq y \leq h_\infty, \quad \underline{n} \cdot \underline{T} = \underline{0} \quad (5)$$

$$y = 1, \quad 0 \leq x \leq x_c, \quad \underline{V} = \underline{0} \quad (6)$$

$$y = 0, \quad 0 \leq x \leq x_F, \quad u = 1 \quad (7)$$

$$v = 0 \quad (8)$$

$$x_c \leq x \leq x_F, \quad y = h(x), \quad \underline{n} \cdot \underline{T} = \text{Ca}^{-1} \underline{d}\underline{t}/\underline{d}s - \underline{n} \cdot p_a \quad (9)$$

$$\underline{n} \cdot \underline{V} = 0 \quad (10)$$

Las escalas empleadas en la adimensionalización son: la velocidad del sustrato (U) para la velocidad, el ancho de la ranura (d) para la longitud y la fuerza viscosa ( $\mu U/d$ ) para la presión.  $\text{Re} = \rho U d / \mu$  es el Número de Reynolds,  $\text{St} = \rho g d^2 / (\mu U)$  es el Número de Stokes y  $\text{Ca} = \mu U / \sigma$  es el Número Capilar;  $p_a$  es la presión en la fase gaseosa,  $\underline{t}$  y  $\underline{n}$  son los versores tangente y normal a la superficie libre, respectivamente.

#### METODO NUMERICO

Las ecuaciones (1) y (2) con las condiciones de contorno (3)-(10) se reducen a un sistema de ecuaciones algebraicas mediante el método de elementos finitos. Debido a la no linealidad de las ecuaciones que proviene de los términos inerciales cuando Re es apreciable y siempre por la presencia de la superficie libre, cuya localización no se conoce a priori, es necesario emplear un proceso iterativo que converja a la solución del problema y que requiere de una primera aproximación adecuada tanto en el campo de velocidad como de la localización y forma de la superficie libre. Como la forma del dominio se modifica de una

iteración a otra es necesario que los elementos en los que se divide el mismo se modifiquen consecuentemente.

En el método que se sigue en este trabajo la superficie libre se localiza a lo largo de líneas rectas ('spines') que se ubican arbitrariamente para ajustar en forma automática la forma de la superficie libre de una iteración a otra [1]. Cada 'spine' está definido por un punto base  $x_i^1$  y un vector  $e^1$  para indicar su dirección; la distancia  $h^1$  localiza la posición de la interfase a lo largo del spine  $i$ .

Se usa interpolación mixta, es decir, las funciones base para la presión son polinomios de menor orden que los usados para la velocidad. En este trabajo se emplean elementos cuadriláteros y funciones base bicuadráticas  $\phi^i$  para la velocidad  $V$  y elementos cuadriláteros de cuatro nodos y funciones base bilineales  $\psi^j$  para la presión  $p$ :

$$\underline{V} = \sum_{i=1}^I \underline{v}^i \phi^i(\xi, \eta), \quad p = \sum_{j=1}^J p^j \psi^j(\xi, \eta) \quad (11)$$

Las funciones base  $\phi^i(\xi, \eta)$  y  $\psi^j(\xi, \eta)$  se construyen en un sistema coordenado cartesiano fijo  $(\xi, \eta)$  sobre un cuadrado de lado unitario que mapea todos los elementos del dominio real a través de una transformación isoparamétrica.

En la superficie libre las únicas funciones básicas no nulas son las asociadas con los nodos de la superficie libre, que es una curva en la cual  $\eta=1$ , en consecuencia

$$\underline{x}_{SL} = \sum_{k=1}^K \underline{x}^k(h) \phi^k(\xi, \eta=1) \quad (12)$$

El conjunto de ecuaciones algebraicas que resulta de aplicar el método de elementos finitos (Galerkin) con las expansiones dadas en (11) y (12) está compuesto por  $I$  residuos de la componente  $x$  del balance de cantidad de movimiento,  $I$  residuos de la componente  $y$  del balance de cantidad de movimiento,  $J$  residuos de la ecuación de continuidad y  $K$  residuos de la ecuación cinemática (ecuación (10)). Sobre estas ecuaciones se imponen las condiciones de contorno (3)-(9).

El sistema completo de ecuaciones se resuelve simultáneamente para obtener la forma y localización de la superficie libre y los campos de velocidad y presión, usando el método de Newton. La mayor dificultad para aplicar este método consiste en la evaluación de las derivadas de los residuos con respecto a los parámetros de la superficie libre, dicha dificultad se reduce considerablemente por el empleo de la transformación isoparamétrica que origina integrales de los residuos sobre el cuadrado unitario  $\xi-\eta$  para cada elemento. Una vez calculada la matriz jacobiana  $J$ , el método de Newton permite actualizar los coeficientes de las expansiones (11) y (12) a través de la solución del sistema lineal

$$J \cdot \Delta \underline{X} = - \underline{R}(\underline{X}_n) \quad (13)$$

donde  $\underline{X} = \{u_1, \dots, u_I, v_1, \dots, v_I, p_1, \dots, p_J, h_1, \dots, h_K\}$  y  $\Delta \underline{X} = \underline{X}_{n+1} - \underline{X}_n$  es el cambio computado en los coeficientes entre la iteración  $n$  y  $n+1$ .

El proceso iterativo continúa hasta que  $\|\Delta X\| \leq 10^{-5}$ .

Para que el método de Newton converja es necesario disponer de una adecuada estimación de la solución, para lo cual se usa continuación de primer orden en los parámetros característicos del sistema; de esta manera se obtiene las distintas familias de soluciones. El paso del parámetro se ajusta automáticamente de modo que la convergencia se alcance, como máximo, en cinco iteraciones [3]. El signo del determinante de la matriz Jacobiana se computa en cada etapa del proceso de continuación con el objeto de detectar posibles singularidades [4].

### RESULTADOS

Los resultados que se reportan en esta sección forman parte de los primeros que se obtuvieron con el código computacional desarrollado. Se trabajó con 16 elementos, 85 nodos de velocidad, 27 de presión y 13 para la superficie libre, siendo 210 el número total de grados de libertad.

La Figura 2(a,b, y c) muestra la dependencia de la forma de la superficie libre y del campo de velocidad con el Número Capilar. Se observa que a medida que el Ca aumenta, el ángulo de separación  $\theta$  disminuye y la curvatura media de la interfase aumenta. Así para  $Ca = 0,1$ ,  $\theta = 123^\circ$  (Figura 2c) el espesor de la superficie libre disminuye gradualmente, mientras que para  $Ca = 1,0$  (Figura 2a) el elevado valor de la curvatura media de la interfase cerca del punto de separación produce la invasión del 'slot' por el líquido. Además, cuando los valores de Ca aumentan —y consecuentemente la curvatura media de la superficie libre— la película de líquido alcanza el espesor final a una menor distancia de la ranura. El campo de velocidad presenta una zona de recir-

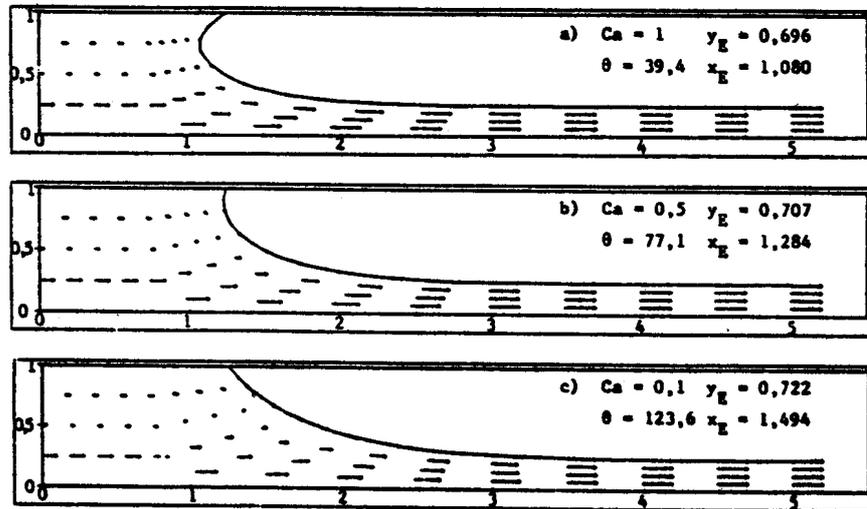


Figura 2: Dependencia de la forma de la superficie libre y del campo de velocidad con el Número Capilar.  $x_E$ ,  $y_E$  son las coordenadas del punto de estancamiento.  $Re=3,0$   $Q=0,25$ .

culación del fluido que es de extensión semejante en los tres casos que se muestran en la figura.

La disminución del caudal adimensional  $Q$  produce una disminución del ángulo de contacto  $\theta$  y el aumento de la curvatura media de la superficie libre como indica la Figura 3(a,b); es decir, la disminución de  $Q$  produce efectos análogos a los que ocurren cuando aumenta el Número Capilar (ver Figura 2).

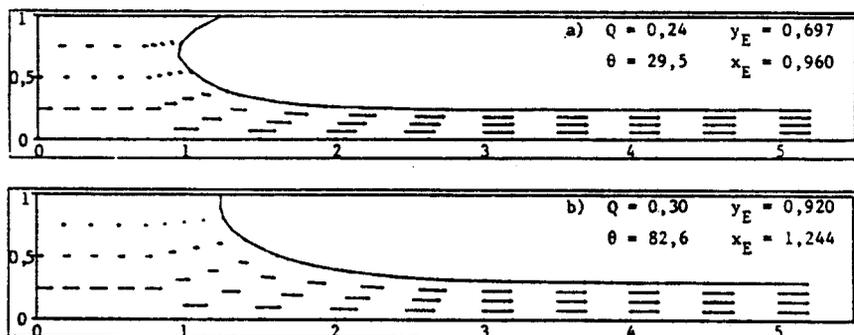


Figura 3: Dependencia de la forma de la interfase y del campo de velocidad con el caudal adimensional.  $Re=5,0$   $Ca=1,0$ .

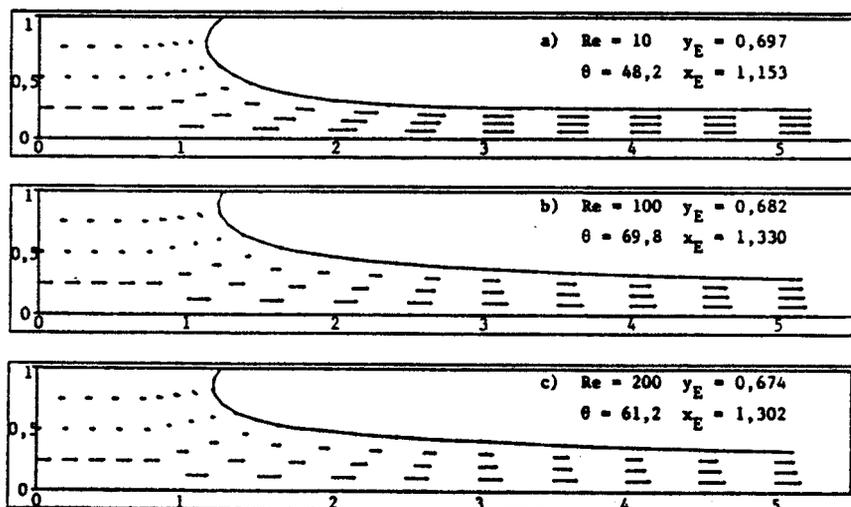


Figura 4: Dependencia de la forma de la superficie libre y del campo de velocidad con el Número de Reynolds.  $Ca=1,0$   $Q=0,25$ .

El aumento del Número de Reynolds produce, primero, ( $0 < Re < 70$ ) un aumento del ángulo de separación y una disminución de la curvatura media de la interfase; pero luego ( $Re > 70$ ), el ángulo de contacto  $\theta$  disminuye. Este efecto se puede observar en la Figura 3(a,b y c), de donde también resulta que a medida que el Número de Reynolds aumenta el flujo se hace unidimensional a mayores valores de  $x$ .

#### CONCLUSION

Se ha desarrollado un código computacional que permite analizar problemas de flujo de fluidos con superficie libre en forma eficiente. Dicha eficiencia está basada en modernas técnicas de análisis numérico que incluyen el uso del método de elementos finitos y una adecuada parametrización de las fronteras libres que permite incluir los parámetros que definen el dominio computacional como variables adicionales. De esta forma puede aplicarse sobre el sistema de ecuaciones gobernantes (ecuaciones de flujo mas ecuaciones que determinan el dominio) un proceso iterativo global que al alcanzar convergencia determina simultáneamente las variables de flujo como también la localización de la interfase líquido-gas. Es de hacer notar que los resultados aquí presentados coinciden con los publicados en [2].

A través del cómputo del signo del determinante de la matriz Jacobiana se han localizado puntos singulares. Actualmente se está trabajando para determinar su naturaleza; es decir, verificar si se trata de puntos de retorno, puntos de bifurcación o una combinación de ambos y luego determinar las ramas de soluciones secundarias en el espacio de los parámetros del modelo.

Se pretende también obtener soluciones dentro del rango de los números adimensionales para el cual no existen resultados publicados en la bibliografía; el objetivo es que los mismos cubran las condiciones de operación típicas de los procesos industriales de recubrimiento y para los cuales no existen predicciones teóricas.

Finalmente, a mediano plazo se intentará analizar algunos procesos donde no sólo aparecen interfases líquido-gas sino que también, producto de deformaciones elásticas, se producen interfases líquido-sólido cuya posición no es conocida de antemano.

#### REFERENCIAS

- [1] Kistler, S., The Fluid Mechanics of Curtain Coating and Related Viscous Free Surface Flows with Contact Lines. Ph.D. Thesis, Universidad de Minnesota, 1983.
- [2] Saito, H. y Scriven L.E., Study of coating flow by the finite element method, J. Comput. Phys., 42, 53-76, 1981.
- [3] Saita, F.A., Automatic stepsize control in parameterized process, enviado a Comp. and Chem. Engng.
- [4] Rheinboldt, W.C., Numerical continuation methods for finite element applications, en Formulations and Computational Algorithms in Finite Element Analysis, ed. por Bathe, K.J.; Oden, T. y Wunderlich, W., 1978.