

ESTUDIO NUMÉRICO DEL EFECTO DE AGENTES TENSIOACTIVOS SOBRE EL PROCESO DE INESTABILIDAD DE RAYLEIGH EN CAPILARES

Diego M. Campana[†], José Di Paolo^{††}, Carlos M Corvalán^{††} y Fernando A. Saita[†]

[†] Grupo de Dinámica Interfacial
INTEC, Universidad Nacional del Litoral, CONICET
Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina
e-mail: dimaca@hotmail.com, web: <http://www.intec.ceride.gov.ar>

^{††} Grupo de Biomecánica Computacional
Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Entre Ríos
CC 47, Suc. 3 (3100) - Paraná, Entre Ríos, Argentina.
e-mail: biomecanica@fi.uner.edu.ar, web: <http://www.fi.uner.edu.ar>

Key words: Inestabilidad de Rayleigh, elementos finitos, tensión superficial, surfactante, vías aéreas pulmonares, método de los spines.

Abstract. *Este trabajo presenta los resultados de un nuevo modelo 3D axisimétrico para la simulación de problemas de inestabilidad capilar en tubos y en presencia de un surfactante insoluble en la fase líquida. Para ello, se resolvieron en forma numérica las ecuaciones de Navier-Stokes y una ecuación de transporte de masa sobre la interfase, utilizando una combinación de técnicas eficiente basadas en el método de elementos finitos. Los resultados permiten una clara visualización de los complejos mecanismos que se producen a nivel de la fase e interfase. Se investigó el efecto de retardo que produce el surfactante en la formación de puentes líquidos para un amplio rango del parámetro elástico superficial, comparando los resultados con los obtenidos mediante modelos simplificados y ecuaciones evolutivas. Se encontró que estos últimos predicen tiempos de cierre menores, con una diferencia en el orden del 20% frente a los nuevos resultados. La realización de este trabajo permitió evaluar por primera vez la magnitud de este error. Por otro lado, este modelo permitirá el estudio de otra serie de problemas (inestabilidad capilar en el recubrimiento de filamentos, chorros de fluido, etc.), donde las condiciones de los parámetros invalidan los modelos simplificados.*

1 INTRODUCCIÓN

Una película anular de fluido depositada en forma uniforme sobre el interior de las paredes de un tubo de pequeño diámetro, puede experimentar un proceso de inestabilidad debido a la acción de fuerzas capilares (tensión superficial en la interfase). Este es un fenómeno similar al que produce la rotura de un jet de fluido en un arreglo de gotas, el cual fue estudiado inicialmente por Rayleigh¹ y que actualmente lleva su nombre. Dependiendo de ciertos factores como la longitud de onda de la perturbación y la cantidad de fluido presente, se pueden producir tres situaciones: (i) la inestabilidad puede amortiguarse y desaparecer, (ii) puede evolucionar para formar onduloides estables o bien (iii) puentes líquidos que bloquean la luz del tubo. Al tiempo necesario para la formación del puente líquido, desde el estado inicial no perturbado, se lo conoce como “tiempo de cierre” y es una variable fuertemente influenciada por el espesor de la película y por las fuerzas presentes en la interfase. Es claro que cuando se produce el cierre, se interrumpe el flujo en el tubo hasta que algún mecanismo rompa el puente líquido. Existen varios ejemplos de flujos bifásicos donde comúnmente aparecen estas estructuras, como en procesos de recuperación asistida de petróleo^{2,3} o el transporte de gases a través de las vías aéreas pulmonares de los seres vivientes^{4,5,6}. Por otro lado, existen algunos agentes o compuestos químicos, que alteran las propiedades interfaciales y afectan considerablemente la escala de tiempo de la inestabilidad; son los denominados “surfactantes”. A veces, ellos son incluidos en el proceso para lograr determinado comportamiento y otras veces son impurezas de difícil eliminación del sistema.

El modelado de estos problemas implica resolver las ecuaciones de transporte de masa y cantidad de movimiento en la fase fluida, de transporte de surfactante en la fase e interfase, el balance de tensiones en la interfase, una ecuación de estado superficial, condiciones de contorno e iniciales, etc. Por otro lado, la interfase se desplaza modificando el dominio físico a medida que progresa la inestabilidad, siendo entonces su forma desconocida a priori (problema de frontera libre). Estos modelos, en general, carecen de solución analítica.

Utilizando aproximaciones basadas en la teoría de lubricación y otras simplificaciones, los modelos se pueden reducir a la solución de una ecuación evolutiva para la forma de la interfase o superficie libre. Este ha sido el enfoque principalmente adoptado en el pasado y hasta la actualidad, el cual limita la validez de las soluciones a cierto rango de espesores de fluido y también de los parámetros adimensionales. La solución fuera de este rango tendrá un error implícito que no ha sido evaluado, mientras que al desprestigiar cambios en una de las dimensiones del problema (radial) se hace imposible analizar aspectos interesantes del campo de flujo.

El objetivo de este trabajo consiste en resolver un modelo 3D aximétrico que permita estudiar la inestabilidad de una película de espesor arbitrario depositada en un tubo capilar, considerando la presencia (en la interfase) de un surfactante insoluble en la fase. Mediante los resultados se pretende analizar en detalle el campo de flujo bidimensional desarrollado y evaluar la magnitud del error que se comete al predecir los tiempos de cierre con los modelos simplificados y ecuaciones evolutivas.

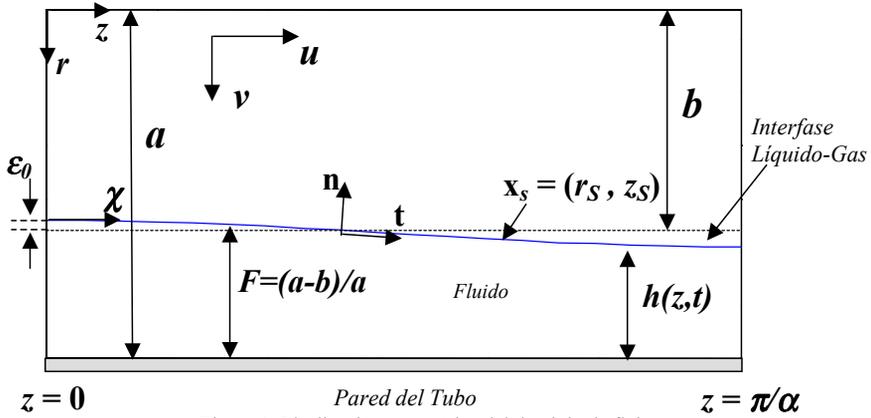


Figura 1: Idealización geométrica del dominio de flujo.

2 MODELO

Para la simulación del problema de inestabilidad capilar en tubos de pequeño diámetro, se ha propuesto la idealización geométrica (cilíndrica y axisimétrica) mostrada en la Figura 1. En ella se representa una película de fluido uniforme de radio b (línea de trazos negra), la cual está depositada sobre la pared interior de un tubo cilíndrico de radio a . El espesor relativo de esta película con respecto al radio del tubo se denomina F . La película está en contacto con un gas que llena la luz interior del tubo y así aparece una interfase líquido-gas. Esta interfase está parametrizada mediante una función altura $h(z, t)$ y en la Figura 1 se muestra en línea azul un caso donde ha sido perturbada mediante una función senoidal de amplitud ϵ_0 .

Para este problema se definen las siguiente escalas características y variables adimensionales:

$$\text{Longitud} \rightarrow a \Rightarrow r = r^* / a; z = z^* / a$$

$$\text{Velocidad} \rightarrow F^3 \sigma_c / \mu \Rightarrow u = u^* \mu / (F^3 \sigma_c); v = v^* \mu / (F^3 \sigma_c); t = t^* F^3 \sigma_c / (a \mu) \quad (1)$$

$$\text{Presión} \rightarrow \sigma_c / \mu \Rightarrow p = p^* \mu / \sigma_c$$

En (1), los asteriscos representan las variables dimensionales y t es el tiempo, σ_c una tensión superficial característica del problema y μ la viscosidad del fluido. Las ecuaciones de flujo gobernantes para este problema, considerando el fluido incompresible y newtoniano, son el balance de masa o continuidad y el balance de cantidad de movimiento, que en variables adimensionales toman la siguiente forma

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$Re \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} - \dot{\mathbf{x}}) \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (3)$$

$$\mathbf{T} = -p / Ca \mathbf{I} + (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$$

Dado que el dominio de flujo se deforma durante la evolución, las ecuaciones (2) y (3) están expresadas en formulación euleriana-lagrangiana arbitraria (ALE). Así, además de los efectos convectivos del flujo, en (3) se agrega el efecto del desplazamiento de las coordenadas o $\dot{\mathbf{x}}$. Como el radio del tubo es pequeño, se pueden despreciar los efectos gravitatorios. De acuerdo con las variables definidas en (1), aparecen dos números adimensionales

$$Re \equiv (\rho a \sigma F^3) / \mu^2 \quad (4)$$

$$Ca \equiv F^3$$

En (4), Re es un número de Reynolds modificado que tiene en cuenta la relación entre las fuerzas de inercia, viscosas y de tensión superficial. Por otro lado, Ca es el número capilar que representa una relación de fuerzas viscosas frente a las de tensión superficial. Las ecuaciones (2) y (3) representan un sistema no-lineal dependiente del tiempo, que requiere condiciones de contorno e iniciales para su solución. Como condición inicial, se aplica una perturbación de tipo senoidal sobre la forma de la interfase

$$h(z,0) = F [1 + \varepsilon_0 \cos(\alpha z)] \quad (5)$$

En (5), $\alpha = 2\pi a / \lambda$ es el número de onda de la perturbación y λ su longitud de onda. Por razones de simplicidad, sólo se modela media longitud de onda y por lo tanto se aplican condiciones de contorno de simetría en los extremos $z=0$ y $z=\pi/\alpha$ para todo instante temporal

$$u = 0 ; \quad \frac{\partial v}{\partial z} = 0 ; \quad \frac{\partial h}{\partial z} = 0 \quad (6)$$

Sobre la pared del tubo se utilizan condiciones de no deslizamiento ($u=v=0$), mientras que se considera a la interfase como un superficie material. Por lo tanto, el fluido no puede atravesarla y esto se puede expresar mediante la ecuación cinemática siguiente

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})_S = \mathbf{n} \cdot \dot{\mathbf{x}}_S \quad (7)$$

En este trabajo se supone que las tensiones normales se encuentran en equilibrio con la tensión superficial, mientras que los esfuerzos tangenciales se equilibran sólo con los gradientes de concentración de un surfactante insoluble. Esto implica la suposición adicional que el surfactante no introduce efectos de viscosidad de corte y de dilatación importantes. De esta forma, la ecuación de balance de tensiones en la superficie libre queda expresada como

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = \frac{1}{Ca} [\sigma(2H)\mathbf{n} + \nabla_s \sigma] \quad (8)$$

En (8), H representa la curvatura media y ∇_s es el operador gradiente superficial, con el cual se calculan variaciones espaciales con respecto a las coordenadas interfaciales.

Debido a que la tensión superficial es una función de la concentración local de surfactante sobre la superficie libre, se debe establecer esta funcionalidad. En este trabajo, se consideran sólo pequeñas variaciones alrededor del estado inicial o de equilibrio y por lo tanto se utiliza una relación lineal, del tipo

$$\begin{aligned}\sigma &= \sigma_0 - N_E (\rho^s - 1) \\ \sigma_0 &= \sigma_m / \sigma_c \\ N_E &= \frac{\rho_m^s}{\sigma_c} \left(\frac{\partial \sigma^*}{\partial \rho^{s*}} \right)_{\rho_m^s}\end{aligned}\tag{9}$$

En (9), σ_m es la tensión superficial (dimensional) uniforme sobre la interfase en el estado inicial no perturbado, cuando la concentración (dimensional) de surfactante es uniforme y vale $\rho^{s*} = \rho_m^s$. Así, aparece un nuevo parámetro adimensional que se llamará número elástico N_E e indica cuán importantes son las variaciones de tensión superficial con respecto a las de concentración; este número representa la pendiente de la curva $\sigma = f(\rho^s)$ en el entorno de $\rho^s = 1$. Utilizando la ecuación de estado (9) para la superficie libre, el balance de tensiones se puede escribir nuevamente como

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{Ca} [\sigma(2H)\mathbf{n} - N_E \nabla_s \rho^s]\tag{10}$$

Finalmente, para cerrar el sistema de ecuaciones se debe calcular la distribución de concentración de surfactante durante la evolución. Para ello, se resuelve una ecuación de balance de masa para la especie superficial en cuestión, que de acuerdo a la formulación del problema tiene la siguiente forma

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \rho^s}{\partial t} \right)_{\mathbf{x}_{fs}} - \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla_s \rho^s + \rho^s \mathbf{v}_{(n)} \cdot (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) + \nabla_s \cdot (\rho^s \mathbf{v}^s) - \frac{1}{Pe_s} \nabla_s^2 \rho^s &= 0 \\ Pe_s &= a \sigma_c F^3 / (D_s \mu)\end{aligned}\tag{11}$$

Así, aparece otro parámetro adimensional del modelo, el número de Péclet superficial (Pe_s), que relaciona las magnitudes del transporte de masa convectivo frente al difusivo (D_s indica la difusividad superficial del surfactante). Dado que se considera al surfactante insoluble, en (11) no se tiene en cuenta el intercambio de especies con la fase líquida.

3 TÉCNICA NUMÉRICA UTILIZADA

El sistema de ecuaciones (2) a (11) está fuertemente acoplado y es altamente no lineal. La dependencia temporal aparece no sólo a través de las derivadas locales de la velocidad y concentración de surfactante, sino también en la condición cinemática de la superficie libre.

Dado que el sistema carece de solución analítica, se resolvió en forma numérica utilizando el método de elementos finitos (MEF) en formulación de Galerkin, para discretizar las derivadas espaciales. Se utilizó la formulación mixta, y se interpolaron con funciones de forma bicuadráticas la velocidad y las coordenadas, mientras que se usaron funciones bilineales para la presión. La interfase se parametrizó a través de una función altura $h(z,t)$ y la misma se discretizó con el método de los spines^{7,8}, generando así un nuevo conjunto de incógnitas h^i ; luego, estas incógnitas ingresan al sistema de ecuaciones global y se resuelven en forma simultánea con el resto de las variables (velocidad, presión, concentración, etc.). Cabe mencionar que tanto para interpolar la función $h(z,t)$ como la concentración de surfactante ρ^s , se utilizaron especializaciones unidimensionales (válidas sobre la interfase) de las funciones bi-cuadráticas mencionadas anteriormente.

Para la integración temporal se utilizó un esquema predictor-corrector de segundo orden, discretizando las derivadas temporales con la regla del trapecio (corrector) y utilizando el método de Adams-Bashforth como predictor⁹. Todo el proceso de discretización, tanto espacial como temporal, resulta en un sistema algebraico de ecuaciones no lineales para cada paso de tiempo discreto. Este sistema se resuelve dentro de un esquema de iteraciones de Newton, el cual trabaja en forma simultánea sobre todas las incógnitas del problema (velocidad, presión, altura de interfase y concentración de surfactante).

La selección del paso temporal se realizó en forma automática con el método de Crisfield, el cual ajusta el paso de tiempo de tal forma que las iteraciones de Newton necesarias para la convergencia se mantengan alrededor de un valor deseado. Típicamente, este número se estableció en 2 y el error máximo en la actualización de la solución fue en todos los casos de 10^{-6} .

La utilización de este conjunto de técnicas está basada en estudios previos de los autores^{10,11}, en los cuales se evaluaron diferentes alternativas del MEF apropiadas para este tipo de problemas, desde el punto de vista de la calidad de resultados y eficiencia computacional.

4 RESULTADOS

4.1 Validación del modelo

Para la validación del modelo, se utilizaron resultados de: (i) teoría de estabilidad lineal¹² y (ii) mediciones experimentales del radio interfacial en función del tiempo¹³, ambos considerando la tensión superficial en la interfase constante (libre de surfactantes).

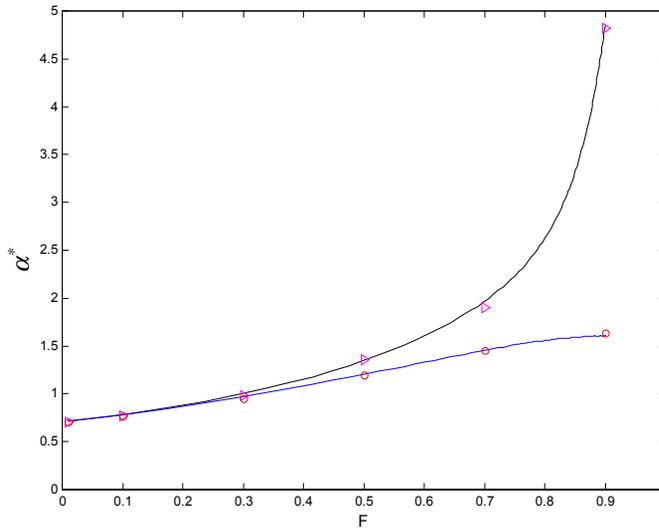


Figura 2: Resultados comparativos con la teoría de estabilidad lineal. La curva azul (negra) corresponde a los resultados analíticos para $Re=0$ ($Re \rightarrow \infty$), mientras que los círculos rojos (triángulos magenta) son los resultados obtenidos con nuestro código.

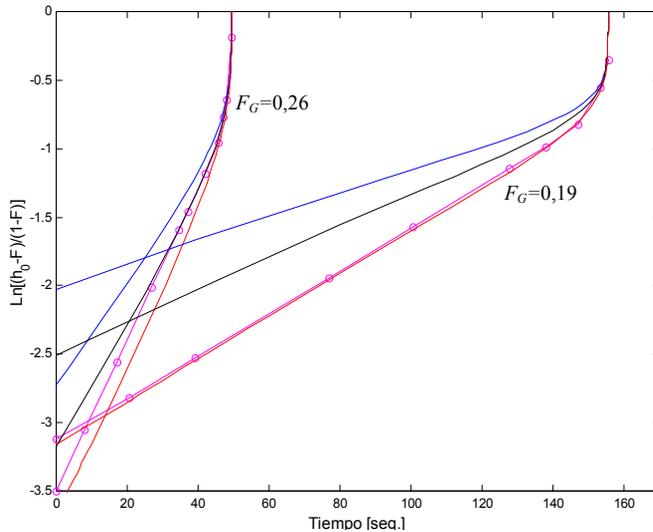


Figura 3: Resultados comparativos con experimentos. Azul $\rightarrow F = F_G(1 - 0,05)$, Negro $\rightarrow F = F_G$, Rojo $\rightarrow F = F_G(1 + 0,05)$, Línea + círculos \rightarrow mediciones experimentales.

Goren¹² resolvió el problema para el límite de perturbaciones infinitesimales sobre el estado de equilibrio. Sus resultados son exactos en los límites de $Re=0$ y $Re\rightarrow\infty$ y así halló expresiones analíticas para la velocidad de crecimiento exponencial de la interfase. Los resultados de este trabajo muestran que para cada espesor inicial de fluido F existe una longitud de onda α^* (de la perturbación inicial) que produce una velocidad de crecimiento máxima.

Utilizando nuestro modelo computacional, se realizaron experimentos numéricos perturbando la interfase con una amplitud muy pequeña ($\varepsilon_0=10^{-3}$ o 10^{-4}) y calculando el valor de la velocidad de crecimiento exponencial. Así, la comparación de nuestros resultados con los teóricos se muestra en la Figura 2, donde se puede apreciar una excelente concordancia.

El próximo paso en la validación fue comprobar el comportamiento del modelo cuando los efectos no lineales dominan la evolución. Goldsmith y Mason¹³ realizaron mediciones experimentales del radio interfacial a diferentes instantes, $h_0=h(0,t)$, durante la evolución de la inestabilidad. En la Figura 3 se muestran los resultados comparativos de sus experimentos y nuestro modelo computacional. Las mediciones experimentales del espesor inicial F_G tienen una incertidumbre de $\pm 5\%$ y por lo tanto, además de obtener resultados para $F=F_G$, también se presentan para los espesores comprendidos en los extremos de ese rango. Como se puede ver, los resultados de este modelo coinciden bien con las mediciones, dentro del error experimental.

Los resultados anteriores muestran que el modelo funciona en forma apropiada y por lo tanto la validación fue satisfactoria.

4.2 Resultados con surfactante

Los trabajos donde se ha estudiado el fenómeno de inestabilidad de Rayleigh en capilares y en presencia de surfactante, fueron principalmente orientados al modelado del cierre de vías aéreas pulmonares). Halpern y Grotberg⁶ extendieron el modelo de Gauglitz y Radke³, para simular la elasticidad de los conductos pulmonares y la presencia de surfactante, mientras que Otis y col⁵ realizaron un trabajo similar sobre el modelo de Johnson y col⁴. En ambos casos, se aplicaron hipótesis simplificatorias (espesor delgado, teoría de lubricación, capa límite, etc) que resultaron en ecuaciones evolutivas para la forma de la interfase en función del tiempo. Mientras que en el modelo de Halpern y Grotberg se despreciaron los efectos de inercia, en el de Otis y col. se tienen en cuenta de manera aproximada. Puesto que uno de los objetivos de este trabajo es comparar el error cometido con los modelos simplificados, se tomarán como referencia los resultados de Otis y col., ya que las características de su modelo extienden su rango de validez a espesores de fluido mayores.

De esta forma, para condiciones de los parámetros típicas de un bronquiolo pulmonar⁵, se tiene: $\rho=1000$ Kg/m³, $\mu=10^{-3}$ Pa s, $\sigma_c=0,072$ N/m, $\sigma_m=0,02$ N/m, $a=2,5 \cdot 10^{-4}$ m, $b=2,0 \cdot 10^{-4}$ m, $D_S=10^{-8}$ m²/s y $L=0,015$ m (longitud promedio del conducto que coincide con la longitud de onda λ utilizada). Estos parámetros físicos resultan en los siguientes valores de los números adimensionales: $Re=144$, $Pe_s=14400$, $F=0,2$, $wno=1,047$ y $\sigma_0=0,28$. Nótese que a pesar de haber tomado un valor muy elevado para la difusividad superficial (D_S), la escala de velocidad

del problema determina que los efectos de difusión del surfactante sean despreciables frente a la magnitud del transporte convectivo.

El número elástico N_E se utilizará como parámetro variable, con el objetivo de analizar la influencia de la elasticidad del surfactante sobre el sistema. Por otro lado, todos los resultados se obtuvieron aplicando una perturbación de la forma (5), con $\varepsilon_{\sigma}=10^{-3}$, sobre el estado de equilibrio inicial

En la Figura 4 se presentan gráficas de líneas de corriente en diferentes instantes de la evolución, cuando $N_E=10^{-6}$, resultados que prácticamente coinciden con los correspondientes a $N_E=0$ (situación sin surfactante). La perturbación inicial establece un radio interfacial menor en la región de $z=0$ y dado que esto aumenta la curvatura azimutal, se genera una disminución de la presión allí. El líquido comienza a desplazarse lentamente de acuerdo con el gradiente de presión actuante, lo que aumenta aún más la curvatura y la diferencia de presión a medida que se acumula fluido en el lóbulo. Este proceso continua hasta que se dispara el cierre del capilar. El efecto elástico del surfactante es tan pequeño que prácticamente no tiene influencia sobre el sistema. En la Figura 5 se muestran curvas de concentración, tensión superficial, velocidad tangencial y tensiones de corte para instantes de tiempo equivalentes a la Figura 4. Se puede apreciar que la concentración de surfactante aumenta en forma marcada en la región de $z=0$, debido a la combinación de los fenómenos de convección y disminución de área (o radio) que provoca la formación del lóbulo. Además, el bajo número elástico desacopla las variaciones de concentración con la tensión superficial, que se mantiene prácticamente constante para toda la evolución (ver la escala de σ en la gráfica). También se puede apreciar que durante todo el proceso, la velocidad tangencial es negativa, lo que indica que su dirección es contraria a la del vector tangente a la interfase (ver Figura 1) y los esfuerzos de corte son de muy bajo orden como consecuencia del reducido valor de N_E . El tiempo de cierre dimensional calculado para este caso es $t_C^* = 85ms$, lo que muestra la pequeña escala temporal del fenómeno.

En las Figuras 6 y 7 se presentan resultados para el caso $N_E=10^{-3}$. Para facilitar la comparación, se han seleccionado instantes de tiempo donde el radio de la interfase coincide en forma aproximada con los mostrados en la Figura 4. La primera observación importante es que el aumento de N_E no afecta la forma de la interfase y se pueden encontrar instantes de tiempo donde la misma es equivalente. Al observar el campo de flujo (líneas de corriente) comparativamente con $N_E=10^{-6}$, no se aprecian cambios significativos; sin embargo, el tiempo en que se desarrolla la inestabilidad aumentó en forma notable. A partir de una distribución inicialmente uniforme de surfactante, se producen mecanismos similares a los comentados anteriormente, que determinan un aumento progresivo de la concentración de surfactante en el lóbulo en formación. Sin embargo, el mayor efecto elástico del surfactante produce cambios más importantes en la tensión superficial, aún cuando los gradientes de concentración son menores que en el caso anterior (ver Figuras 7 y 5). Debido a estos gradientes de tensión superficial, aparecen esfuerzos tangenciales mayores en la superficie libre, que contribuyen a reducir las velocidades tangenciales (en un 20%, aproximadamente). Estos efectos son los responsables del aumento en el tiempo de cierre, que para este caso es $t_C^* = 120ms$.

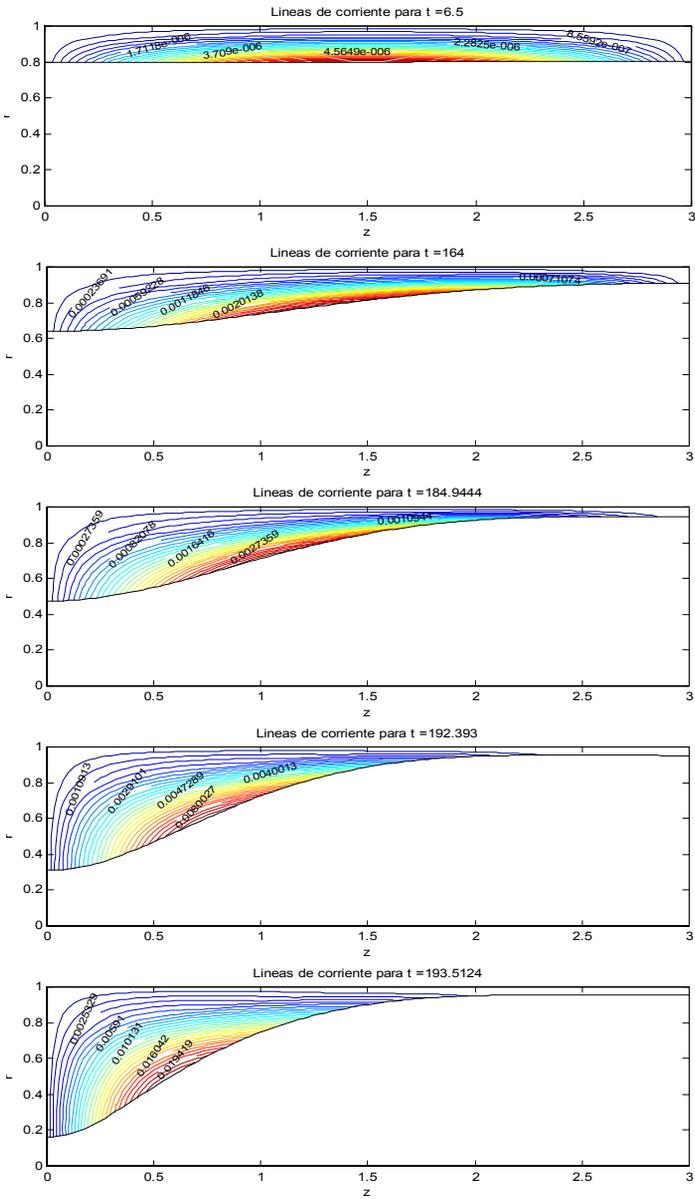


Figura 4: Líneas de corriente para $N_E=10^{-6}$.

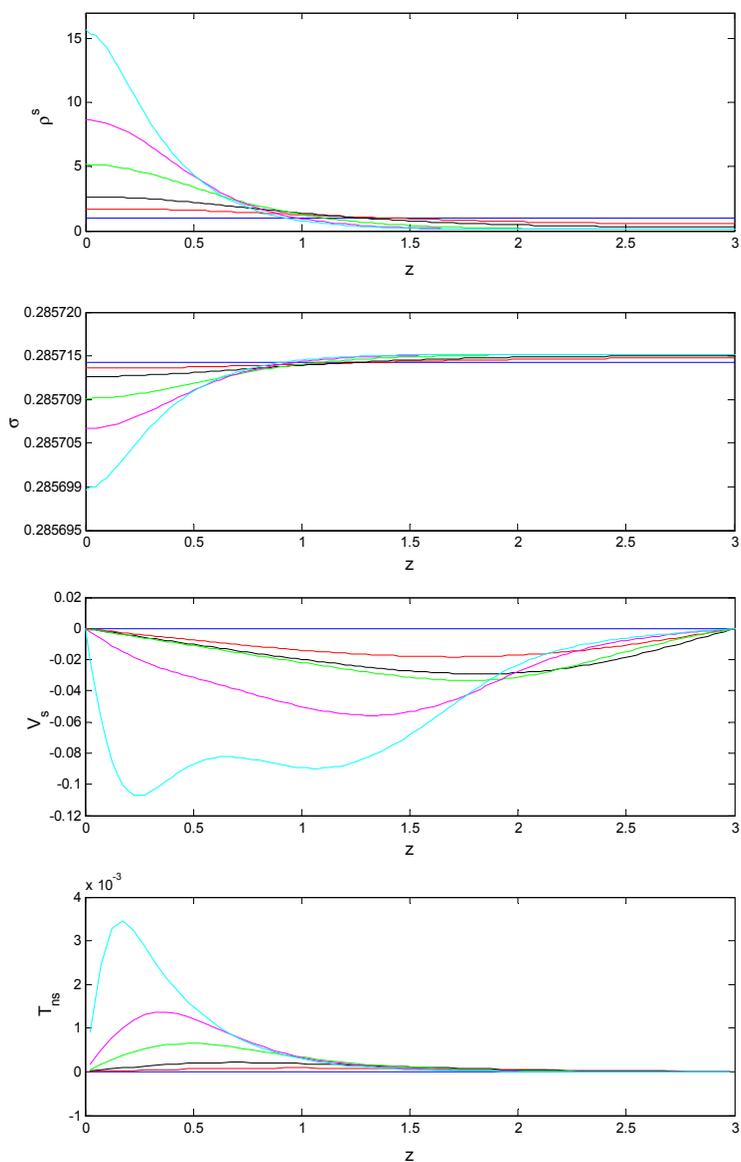


Figura 5: $N_E=10^{-6}$. Curvas de concentración (ρ^s), tensión superficial (σ), velocidad tangencial (V^s) y tensiones de corte (T_{ns}) en la interfase para $t= 6,5$ (azul), $t= 146$ (rojo), $t= 164$ (negro), $t= 185$ (verde), $t= 192,4$ (magenta) y $t= 193,5$ (cian).

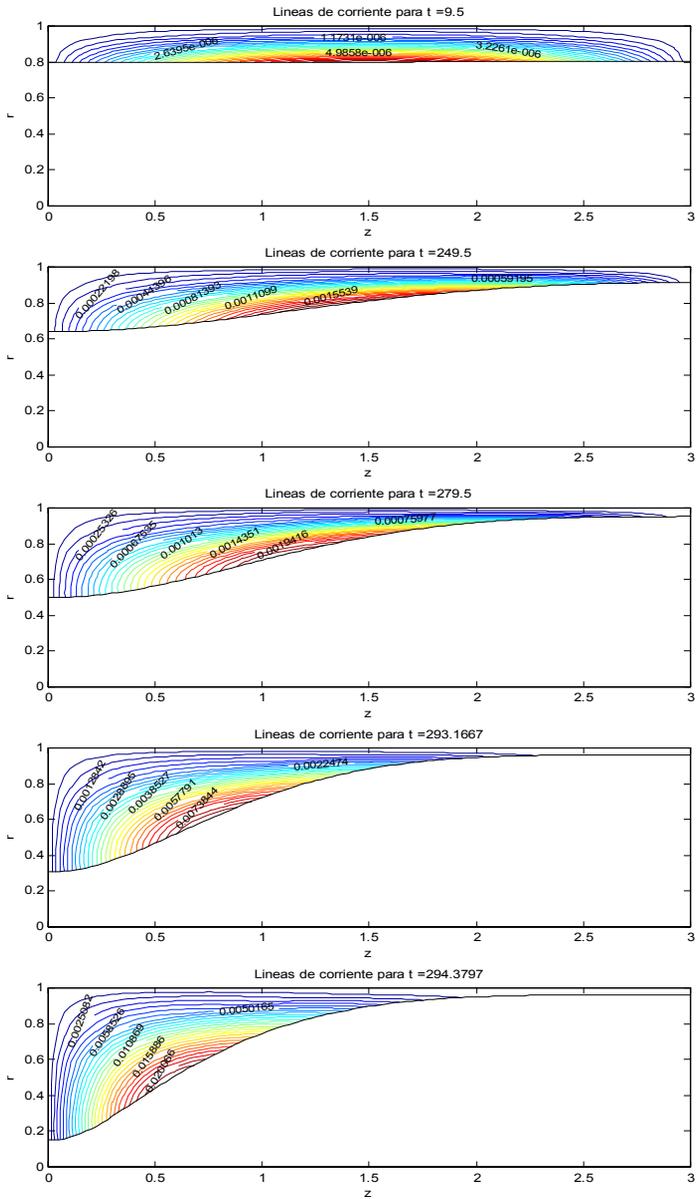


Figura 6: Líneas de corrientes para $N_E=10^{-3}$.

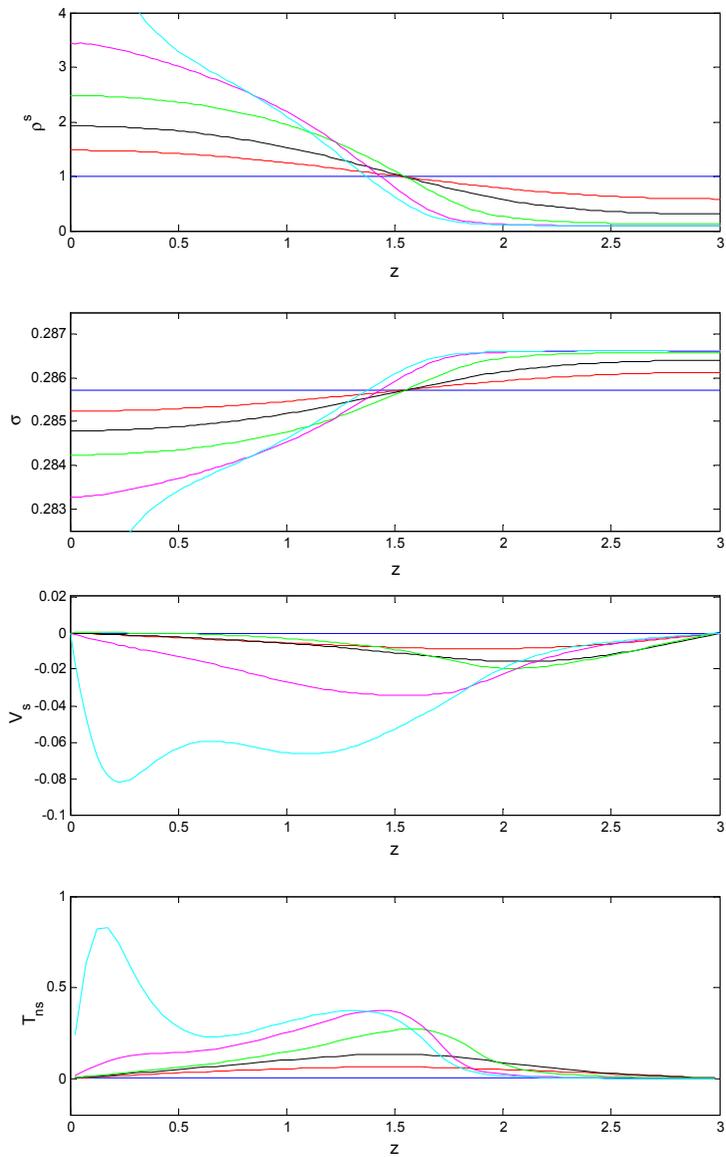


Figura 7: $N_E=10^{-3}$. Curvas de concentración (ρ^s), tensión superficial (σ), velocidad tangencial (V_s) y tensiones de corte (T_{ns}) en la interfase para $t = 9,5$ (azul), $t = 219,5$ (rojo), $t = 249,5$ (negro), $t = 279,5$ (verde), $t = 293$ (magenta) y $t = 294,4$ (cian).

Por último, se presentan resultados con $N_E=10^{-1}$ en las Figuras 8 y 9. Al observar las líneas de corriente, se aprecia que el campo de flujo cambia en forma muy notable, ya que existe un desplazamiento superficial de líquido en dirección contraria al del gradiente de presión. Este efecto es muy importante porque invierte el sentido de la convección de surfactante con respecto a los casos anteriores: ahora, el flujo convectivo en la interfase tiende a compensar (disminuir) los gradientes de concentración producidos por la deformación interfacial (variaciones del área). Por ello, en la Figura 9 se aprecia que los cambios de concentración son un orden de magnitud menor que los vistos en la Figura 7. No obstante, dado que el efecto elástico es mucho mayor, estos pequeños cambios modifican significativamente la tensión superficial.

En la Figura 9 se puede notar un aumento significativo de las tensiones tangenciales, que resulta en el cambio de sentido de las velocidades en la interfase (una magnitud positiva de V_S indica que el vector velocidad tiene componente positiva en la dirección z). De esta forma, el tiempo de cierre vuelve a aumentar hasta $t_c^* = 340ms$.

5 DISCUSIÓN

Los resultados mostrados en la sección anterior permitieron validar el modelo y explorar el comportamiento del sistema en función de las características del surfactante (número elástico). Se pudo apreciar que a medida que este efecto se vuelve más importante, el cierre del capilar se retarda como consecuencia de los esfuerzos de corte que actúan en la interfase. En la Figura 10 se presenta la relación entre el tiempo de cierre para un N_E dado (t_2) y el correspondiente a $N_E=10^{-6}$ (t_1), obtenidos con nuestro código numérico y con el modelo simplificado de Otis y col.⁵. Para facilitar la comparación, t_1 corresponde en ambos casos al resultado de Otis y col. (≈ 65 ms). De su observación, resulta claro que ambos modelos son capaces de captar el comportamiento no-lineal. A bajos N_E el surfactante prácticamente no altera el sistema, debido a que las tensiones de corte interfaciales son despreciables. Luego, en el rango de N_E comprendido entre 10^{-3} y 10^{-2} aproximadamente, se observan las mayores variaciones en la relación de tiempos de cierre. Esto coincide con los profundos cambios observados en el flujo de la fase e interfase (Figuras 8 y 9), ya que los efectos elásticos del surfactante producen tensiones tangenciales significativas, disminuyendo el flujo neto de líquido que es desplazado hacia el lóbulo principal. A partir de $N_E=10^{-1}$, el tiempo de cierre se hace independiente del parámetro elástico porque se produce un efecto de “saturación”: los gradientes de concentración generados por la deformación interfacial son rápidamente reducidos por la convección que provocan las tensiones tangenciales. Así se logra mantener aproximadamente constantes los esfuerzos de corte, que para $N_E=1$ son prácticamente iguales a los de la Figura 9.

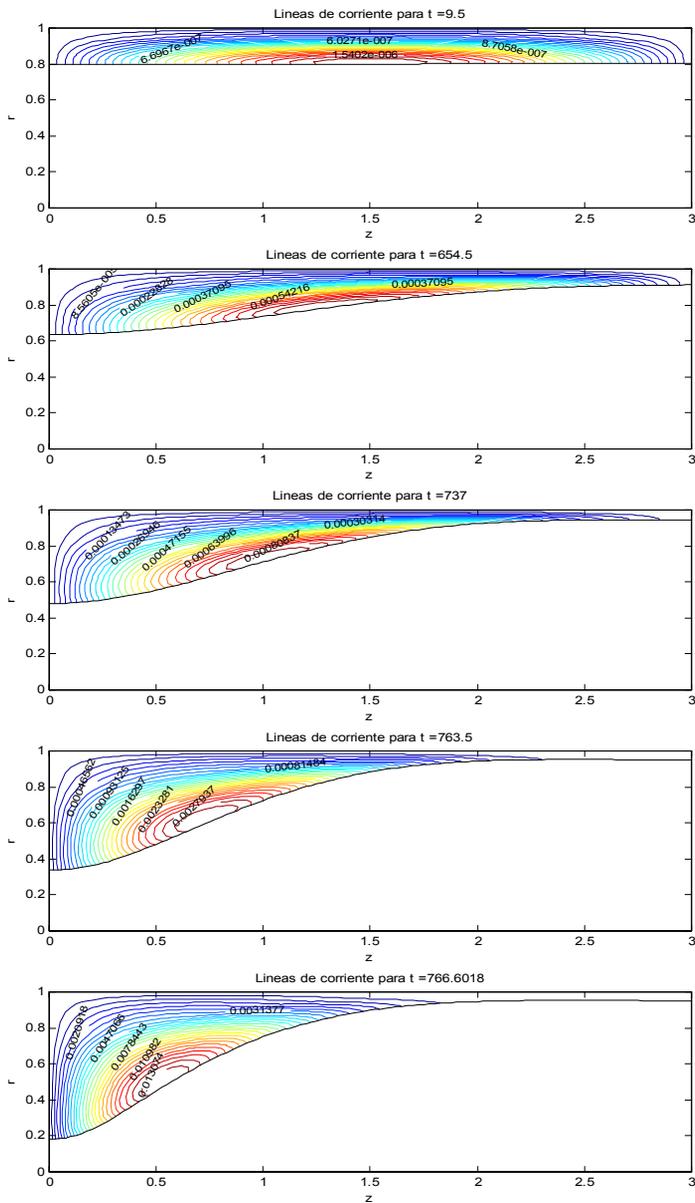


Figura 8: Líneas de corrientes para $N_x=10^{-1}$.

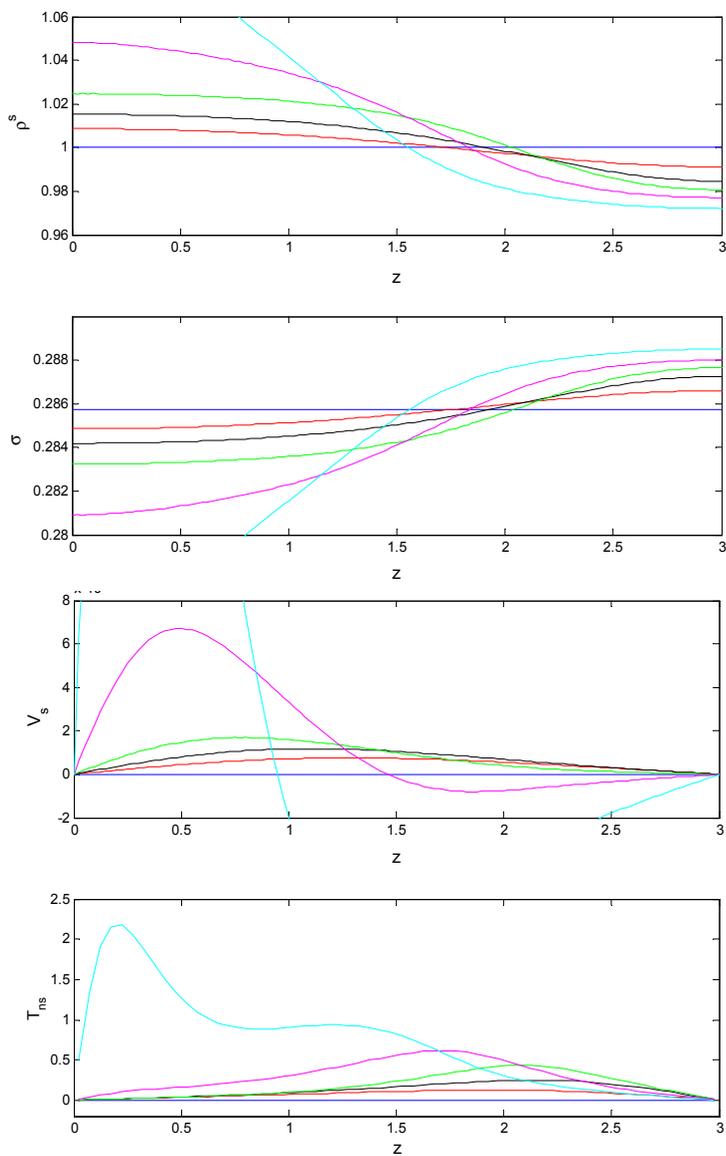


Figura 9: $N_E=10^{-1}$. Curvas de concentración (ρ^S), tensión superficial (σ), velocidad tangencial (V_s) y tensiones de corte (T_{ns}) en la interfase para $t=9,5$ (azul), $t=579,5$ (rojo), $t=654,5$ (negro), $t=737$ (verde), $t=763,5$ (magenta) y $t=766,6$ (cian).

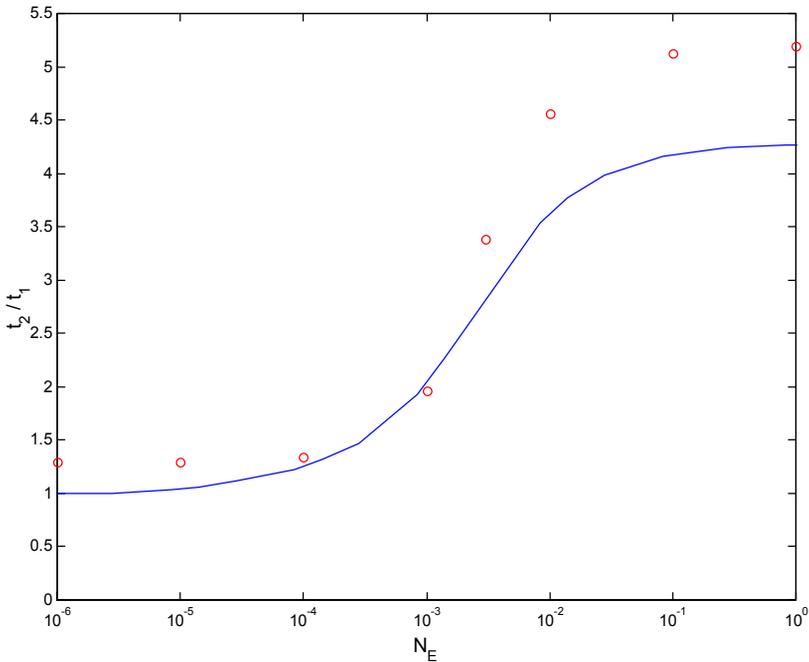


Figura 10: Relación de tiempos de cierre en función de N_E , para el modelo de Otis y col. (curva azul) y el presente (círculos rojos).

En la Figura 10 se aprecia que el modelo simplificado muestra un error relativo importante con el actual, el cual oscila alrededor del 20% para la mayor parte del rango estudiado. Para confirmar estos resultados, se realizaron otras pruebas comparativas utilizando datos de Halpern y Grotberg⁶, ya que estos autores también calcularon tiempos de cierre para diferentes valores del parámetro elástico del surfactante. En este caso, se encontraron diferencias del mismo orden que las obtenidas con Otis y col y aún mayores (20 al 30% en promedio).

Aunque el error relativo de los modelos simplificados es importante, el tiempo de cierre es tan pequeño que sus predicciones son suficientemente precisas. Sin embargo, a medida que aumenta el espesor de fluido, estos modelos pierden validez y el error cometido es mayor. Esta última observación es importante para el estudio de procesos de inestabilidad capilar en el recubrimiento de filamentos o cables, donde el espesor de la película normalmente es del orden del radio y el tiempo característico es mayor. En esas situaciones se deben utilizar aproximaciones 3D aximétricas como la presentada en este trabajo.

6 CONCLUSIÓN

De los resultados anteriores, se puede ver que el nuevo modelo facilita una clara

visualización del campo de flujo, ayudando a comprender los complejos efectos que el surfactante produce a nivel de la interfase y sobre todo en la fase. Allí es donde resulta más valioso, mostrando una gran ventaja sobre los modelos evolutivos simplificados. También se encontraron diferencias relativas importantes en los tiempos de cierre que predicen estos últimos, aún para espesores de fluido relativamente bajos.

A través de este trabajo se ha logrado construir un modelo apropiado para el estudio de problemas de inestabilidad capilar en presencia de surfactantes, que permitirá el análisis de situaciones donde el espesor de líquido es mayor y los modelos simplificados no son válidos.

7 REFERENCIAS

- [1] J. W. Rayleigh, *On the capillary phenomena in jets. Appendix I*, Proc. Roy. Soc. A. **29**, 71 (1879).
- [2] P. S. Hammond, *Nonlinear adjustment of a thin annular film of viscous fluid surrounding a thread of another within a circular cylindrical pipe*. J. Fluid Mech. **137**, 363 (1983).
- [3] P. A. Gauglitz and C. J. Radke, *An extended evolution equation for liquid film breakup in cylindrical capillaries*, Chem. Engng. Sc. **43**, 1457 (1988).
- [4] M. Johnson, R. D. Kamm, L. W. Ho, A. Shapiro, and T. J. Pedley, *The nonlinear growth of surface-tension driven instabilities of a thin annular film*. J. Fluid Mech. **233**, 141 (1991).
- [5] D. R. Otis, M. Johnson, T. J. Pedley and R. D. Kamm, *The role of pulmonary surfactant in airway closure*. J. Appl. Physiol. **59**, 397 (1993).
- [6] D. Halpern and J. B. Grotberg. *Surfactant effects on fluid-elastic instabilities of liquid-lined flexible tubes: a model airway closure*. J. Biomech. Eng. **115**, 271 (1993).
- [7] S. F. Kistler, and L. E. Scriven, *Coating Flows*. J. R. A. Pearson and S. M. Richardson (eds), Computational Analysis of Polymer Processing, Applied Science Publishers, New York (1983).
- [8] M. D. Giavedoni, *A numerical study of the two dimensional behavior of a thin liquid film subject to a vertical oscillation*. Ind. Engng. Chem. Res. **34**, 356 (1995).
- [9] P. M. Gresho, R. L. Lee and R. L. Sani. *On the time-dependent solution of Navier-Stokes equation in two and three dimension*. C. Taylor and K. Morgan (eds), Recent Advances in Numerical Methods in Fluids, Vol. 1, Pineridge Press Limited, Swansea, United Kingdom (1980).
- [10] D. Campana, C. Corvalán y F. Saita. *El método de elementos finitos en la simulación de problemas de inestabilidad capilar. Análisis numérico para la determinación de una estrategia computacional eficiente*. Mecánica Computacional, **XX**, 79-84 (2001).
- [11] D. Campana, *Implementaciones Numéricas Basadas en el Método de Elementos Finitos para el Análisis de Flujos con Interfases Líquido-Gas. Aplicación a Problemas de Inestabilidad Capilar*. Tesis de Magister, Facultad de Ingeniería Química, Univ. Nacional del Litoral, 2001.

- [12] S. Goren. *The instability of an annular thread of fluid*. J. Fluid Mech. **12**, 309 (1962).
- [13] H. L. Goldsmith and S. G. Mason. *The flow of suspensions through tubes. II-Single large tubes*. J. Colloid Science. **18**, 237 (1963).