

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

En este apartado se van a tratar de una manera teórica elementos que han sido necesarios aplicar para la realización de este manual. Estos conocimientos se han adquirido durante todo el proceso de investigación

2.1. La turbulencia homogénea

La mención a la turbulencia es continua en este documento, por lo que aquí se intenta presentar un breve resumen de los principios de la turbulencia.

2.1.1. Formulación estadística de las ecuaciones de Navier-Stokes. Las ecuaciones de Reynolds.

La turbulencia suele ser estudiada de forma estadística según el procedimiento utilizado por Osborne Reynolds(1895) basado en descomponer la velocidad y la presión instantánea de un fluido U_i , de la siguiente forma:

$$U_i(\mathbf{x}, t) = \bar{U}_i(\mathbf{x}, t) + u_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.1)$$

$$P_i(\mathbf{x}, t) = \bar{P}_i(\mathbf{x}, t) + p_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.2)$$

Donde $\bar{U}_i$ y $\bar{P}_i$ son la velocidad y la presión medias y p_i y u_i fluctuaciones, de tal suerte que la media de las fluctuaciones es nula.

$$\langle u_i(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad \langle p_i(\mathbf{x}, t) \rangle = 0. \quad (2.3)$$

Por esta razón para la caracterización de las fluctuaciones se usa su desviación típica definida como:

$$u'_i(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\langle u_i^2 \rangle} \quad (2.4)$$

Si recordamos las ecuaciones de Navier-Stokes, para conservación de la masa y la conservación de la cantidad de movimiento en un fluido incompresible:

$$\frac{\partial U_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial s_{i,j}}{\partial x_j} \quad (2.6)$$

En la anterior ecuación aparece un término $s_{i,j}$ denominado tensor de velocidades de deformación y cuya definición es:

$$s_{i,j} = \rho\nu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.7)$$

Cuando un proceso se mantiene estadísticamente estacionario, podemos prescindir de la dependencia con el tiempo de las variables ya que se tiene en cuenta a la hora de la toma de datos. De esta forma, si sustituimos las variables definidas al principio en estas dos ecuaciones, llegamos a las ecuaciones de Reynolds, denominadas como Problema de Cierre de la Turbulencia y donde se presenta un nuevo término llamado Tensor de Esfuerzos de Reynolds $\langle u_i u_j \rangle$ que requiere nuevas ecuaciones para su resolución:

$$\frac{\partial \bar{U}_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x} \langle u_i u_j \rangle = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \nabla^2 \bar{U}_i \quad (2.9)$$

2.1.2. Resolución del problema de cierre

En la actualidad, la rápida evolución de los equipos informáticos está como ya se comentó en el capítulo anterior, aumentando las posibilidades de los cálculos numéricos. Por lo tanto aparecen diversas formas de resolver numéricamente el problema de cierre cuando el estudio de un flujo turbulento deja de ser trivialmente sencillo.

El modelo K- ϵ

La relación que existe entre la energía cinética media y la turbulenta se puede introducir como:

$$\frac{1}{2} \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \rangle = \frac{1}{2} \langle (\mathbf{U} + \mathbf{u}') \cdot (\mathbf{U} + \mathbf{u}') \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{U} \cdot \mathbf{U} + \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}' \rangle \quad (2.10)$$

Según Boussinesq el término antes introducido se puede definir como:

$$\langle u'_i \cdot u'_j \rangle = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \nu_T \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.11)$$

Este método de cierre, se basa en la asignación a ν_T del valor

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.12)$$

Donde k representa la energía cinética turbulenta y ϵ la tasa de disipación turbulenta. El problema se cerraría integrando el problema inicial junto con dos fórmulas, una para k y otra para ϵ , si bien es cierto que se necesitan ciertos parámetros adicionales que solo el contraste con la experiencia es posible obtener.

Ecuaciones para los esfuerzos aparentes de Reynolds (RESM)

Este método de mayor carga computacional que el anterior, añade al problema inicial seis ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, una por cada una de las seis componentes independientes del tensor de esfuerzos aparentes de Reynolds.

Simulación numérica directa (DNS)

En ella, se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes no promediadas. Es un método muy costoso hablando en términos computacionales y por ello suele ser usado en conjunto con métodos espectrales, que simplifican las ecuaciones.

Simulación de la escala grande (LES)

Este procedimiento es parecido al K- ϵ , pero con un tratamiento más adecuado dependiendo del tamaño de las escalas. Consiste en aplicar un filtro espacial a las ecuaciones de Navier-Stokes, de manera que en las ecuaciones resultante estén recogidos íntegramente los aspectos tridimensionales y no estacionarios de las escalas grandes, mientras que los efectos de las escalas pequeñas aparecen promediados en una serie de términos, que constituyen el denominado tensor de esfuerzos de Leonard, que deben especificarse adicionalmente para cerrar el problema.

Este es un método que en la actualidad está ganando mucho terreno y su mayor logro consiste en separar las escalas pequeñas (más fácilmente caracterizables y por tanto con modelados más exactos) de las escalas grandes, más energéticas. Con ello se consigue un ahorro computacional muy grande al no entrar en detalle en las escalas pequeñas. En contra, aun es un método muy reciente y aunque para el cálculo de velocidades tiene un comportamiento excelente, en el cálculo de concentraciones, no se ha logrado un ajuste todavía que le haga competente frente a otros métodos.

2.2. Fundamentos del Electrospray

El electrospray es un método que en la actualidad está siendo ampliamente estudiado por tener unas aplicaciones muy variadas, y unas modalidades que pueden llegar a sorprender por su curiosidad, como crear gotas de un líquido que rodean a otro o a un gas...

2.2.1. Explicación práctica

En todo el estudio que se presenta, se ha usado como base el electrospray. El uso que se le ha dado es ante todo experimental, sin entrar en lo teórico, pues no es el fin de la investigación. No obstante a continuación se dan unas pinceladas sobre cómo hacer electrospray.

El electrospray consta de dos electrodos que se disponen enfrentados. En principio, no importa la polaridad que se les de a tales electrodos. Uno de los electrodos, generalmente el que se conecta a tierra, es una placa plana metálica con o sin orificio. La razón de que en algunos casos tenga este orificio es para que una vez que el electrospray es creado, las gotas puedan atravesar y ser proyectadas. Este será nuestro caso, ya que una vez creadas las gotas, queremos introducirlas en un flujo turbulento.

El otro electrodo es una aguja o conducto, donde se crean los chorros. Por estas agujas, que se encuentran a un alto potencial, circula un caudal impuesto de un líquido más o menos viscoso que es el que hemos tenido que elegir previamente.

Para crear esta diferencia de potencial se requiere una fuente de intensidad capaz de generar un alto voltaje, que dependiendo del líquido puede variar entre 2kV y 10kV. El potencial no solo depende del líquido, sino que también de la distancia que se haya puesto de separación entre electrodos.

Para conseguir el caudal preciso, lo más sencillo es el uso de una jeringa cargada con el líquido requerido, impulsada por una bomba de jeringa. El uso de la jeringa es posible porque en general las aplicaciones del electrospray son de bajo caudal.

2.2.2. Tamaños de Partículas Trabajando con Electrospray

En la elaboración de este trabajo se han supuesto ciertas particularidades en el uso de electrosprays. Las explicaciones que a continuación se hacen provienen del estudio realizado por A.M. Gañán-Calvo, J. Dávila y A. Barrero en 1995 sobre el tamaño de gotas en electrosprays

Este estudio que es eminentemente experimental, deduce que los líquidos con relativa alta viscosidad y conductividad presentan diferente comportamiento

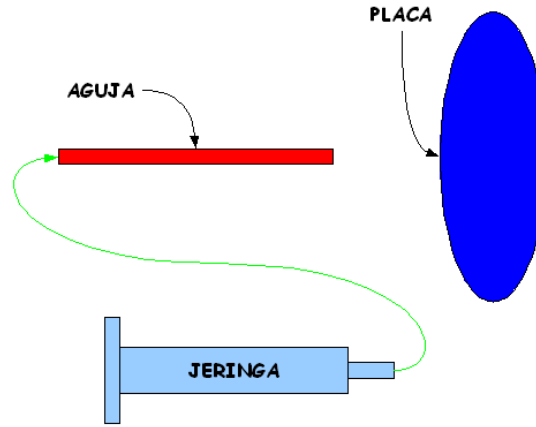


Figura 2.1: Esquema del electrospay

a otros de menos tanto conductividad como viscosidad.

La explicación a esta diferencia en el comportamiento se basa en cómo el líquido es acelerado por la tensión tangencial que produce el campo eléctrico. Un líquido viscoso transmite de una manera más eficiente dichas tensiones tangenciales a lo largo de todo el cono de inyección. De esta manera el perfil de velocidades del cono es plano y las cargas eléctricas libres son expulsadas hacia el exterior con una velocidad del orden de $Q/[\pi R^2(x)]$.

Si hablamos de líquidos de menor viscosidad, hay que tener en cuenta la menor eficacia en la transmisión de esfuerzos en su seno. De esta forma se crea una capa límite de velocidades de espesor menor al radio del cono de inyección. Por tanto, como la velocidad de esta capa límite y la del centro del cono son diferentes, sería lógico pensar que las cargas eléctricas se dirijan hacia el exterior de forma menos eficiente y más desordenada que en el caso anterior.

Los parámetros que gobiernan la aceleración del líquido y por tanto la corriente necesaria para crear el electrospay y los tamaños de gota resultante son:

$$\delta_\mu \delta^{1/3} \sim \left[\frac{\gamma^3 \epsilon_0^2}{\mu^3 K^2 Q} \right]^{1/3} \quad \delta_\mu \sim \left[\frac{\gamma^2 \epsilon_0 \rho}{\mu^3 K} \right]^{1/3} \quad \delta = \frac{Q}{Q_0} = \frac{\gamma \epsilon_0}{\rho K Q}$$

Las variables y ecuaciones que aparecen en este apartado del trabajo contienen ciertas constantes que serán definidas a continuación. Q representa el

caudal de fluido de trabajo. Relacionado con el caudal, se puede calcular previamente a cualquier experimento el mínimo caudal con el que se puede conseguir un chorro estable de electrospray. Este caudal mínimo que ha sido estudiado teóricamente y ajustado de manera experimental según los parámetros de conductividad y viscosidad es $Q_{min} \sim \beta^{1/2} Q_0$. El resto de variables denominadas $K, \mu, \gamma y \epsilon_0$ son respectivamente la conductividad eléctrica, viscosidad, tensión superficial gas-líquido y la permisividad del vacío.

Los líquidos que en el trabajo se han usado para introducirse en el túnel del viento son sobre todo glicerina diluida en agua, etilen-glicol y aceite de girasol. Para estos líquidos nos encontramos con un $\delta_\mu \delta^{1/3} \leq 0(1)$. Este parámetro nos da una idea de lo alta o no que es su viscosidad y conductividad.

Un apartado especial merece β ; ésta representa la relación permisividad en vacío-Líquido. Inicialmente era la alta β (que implica una alta polaridad) la característica divisoria en el comportamiento de los líquidos. Es en el estudio de A.M. Gañan-Calvo, J. Dávila y A. Barrero (1995) donde se evidencia la existencia de líquidos como el aceite de girasol que no son polares pero muy viscosos, en los que la corriente derivada de hacer electrospray es más parecida a la de los líquidos polares, hizo pensar que era otra u otras las propiedades que físicas las que producían esta diferencia de comportamiento, como ya se han comentado.

Las fórmulas que gobiernan dichos líquidos, aproximadas de manera experimental son:

$$I/I_0 = 6,2 \left[Q/(\beta - 1)^{1/2} Q_0 \right]^{1/2} - 2,0 \quad (2.13)$$

$$d/(\beta - 1)^{1/3} d_0 = 1,6 \left[Q/(\beta - 1)^{1/2} Q_0 \right]^{1/3} - 1,0 \quad (2.14)$$

Donde

$$I_0 = (\epsilon_0 \gamma^2 / \rho)^{1/2} \quad Q_0 = \gamma \epsilon_0 / (\rho K) \quad d_0 = [\gamma \epsilon_0^2 (\rho K^2)]^{1/3}$$

Atendiendo a estas fórmulas, esta teoría, que resultó ser muy ajustada, predecía que para el ethylene-glycol, se tendría un caudal mínimo para realizar electrospray de cerca de algo más que 0,7 ml/h. con un diámetro de 6,57 micrometros. Tal y como se ve en la figura 2.2 Los resultados iniciales son bastante

ajustados a la realidad. Nuestro caso, que a continuación se presenta, es ligeramente diferente al resultado teórico, que se debe a que el líquido no se puede introducir en ninguno de los dos grupos anteriormente descrito, encontrándose en un punto medio. De todas formas presenta una idea sobre el orden de magnitud de los tamaños.

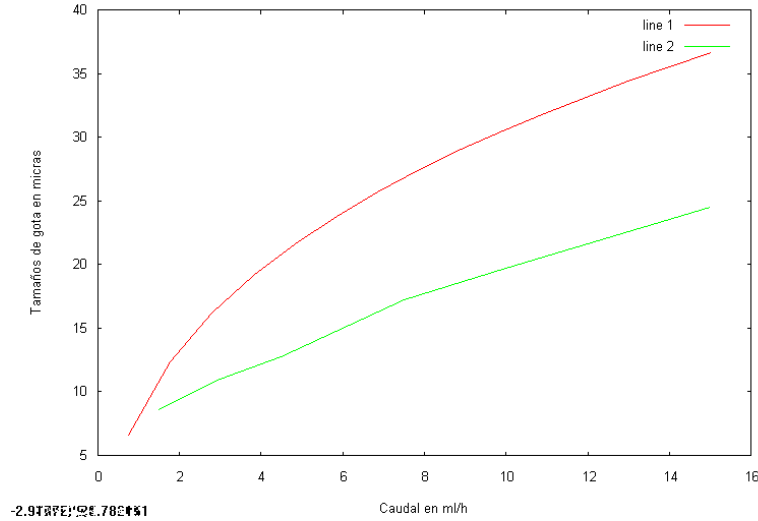


Figura 2.2: Diferencias entre la teoría y la práctica.

2.3. La acumulación y velocidad de sedimentación de partículas pesadas

En esta sección se hace referencia directa a lo que se ha intentado presentar en el capítulo primero como introducción. Para ello hemos de tener en cuenta que existen tres términos que se repetirán mucho en este apartado:

- **Velocidad terminal.**- Es aquella que tiene una partícula pesada en un líquido estático, cuando está cayendo y las dos fuerzas que actúan son la gravedad y la resistencia aerodinámica. Ésta sería la llamada ley de resistencia aerodinámica de Stokes y matemáticamente se expresaría:

$$(\rho_{particula} - \rho_{fluido}) \frac{\pi l^3}{6} g = \frac{1}{2} \rho_{fluido} V_{particula} \frac{\pi l^2}{4} C_D \quad (2.15)$$

- **Velocidad de sedimentación.**- Que normalmente implica un promedio de las velocidades verticales que tienen las partículas que se encuentran en un flujo turbulento, donde por tanto no se puede establecer una ecuación de igualdad sino una estadística.
- **Acumulación de partículas.**- que representa como su nombre indica la propia acumulación, pero que en flujos turbulentos tiene la particularidad de que aunque normalmente los flujos turbulentos se han explicado como perfectos mezcladores, en ciertas ocasiones puede darse justo el caso contrario y es que sean perfectos separadores.

El comportamiento de partículas en un flujo isotrópico, homogéneo y turbulento ha sido bastante investigado como lo demuestran por ejemplo los estudios de Snyder y Lumley (1971), Maxey y Riley (1983), Lázaro y Lasheras (1992), Schreck y Kleis (1993), Kulick, Fessler y Eaton (1994), Crowe, Troutt y Chung (1996) y en particular el de Aliseda, Cartellier, Hainaux y Lasheras (2002) que ha servido de base para la realización de este trabajo.

Como la estructura turbulenta más importante en la velocidad de sedimentación de una partícula son los vórtices, hay que entender bien la interacción de dichos vórtices con la velocidad de una partícula. Esta interacción se ha modelado en trabajos como el de Wang y Maxey, cuando se cumplen ciertas características, como:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{S_t} [U - V + \tilde{V}_T] \quad (2.16)$$

Estas características son que como ocurre con un aerosol en la atmósfera el $Re \ll 1$ y $\rho_{particula}/\rho_{aire} \gg 1$ y por tanto en la ley de Stokes se simplifican los cálculos ya que las fuerzas de resistencia aerodinámica y las aceleraciones se cancelan por la alta diferencia de densidades. Siendo:

- $\tilde{V}_T = V_T/U_o$
- $S_t = \tau_p U_o/L_o$
- $V \equiv$ velocidad de la partícula.
- $U \equiv$ velocidad del flujo portador en el punto concreto donde se encuentra la partícula.

- U_o y L_o la velocidad y tamaño característicos de la partícula.
- $V_T \equiv$ velocidad terminal en líquido estático.

Tradicionalmente, se ha pensado en las grandes escalas de las estructuras turbulentas como las responsables de todos los movimientos y comportamientos que afectan a una partícula en un determinado flujo, pero en estudios más específicos sobre el tema que nos atañe como es el de Wang y Maxey (1993) se ha visto que las escalas disipativas de Kolmogorov, representan un papel muy importante. Esto, solo implicaría un pequeño ajuste de la aproximación tradicional, no la negación de esta. De hecho la velocidad de sedimentación puede ser un 50 % mayor que la velocidad terminal.

Por supuesto cualquier efecto que tenga un flujo sobre una determinada partícula es debido a la viscosidad del flujo portador, pero si por éste fuera, las partículas seguirían su trayectoria, por tanto el otro parámetro importante que entra en juego es la inercia. Así y sabiendo que la velocidad de sedimentación es mayor a la terminal, se antoja que las razones por las que esto ocurre son dos:

1. Una inercial que provoca que de modo similar a una centrifugadora, la partícula se coloque en el borde de los vórtices turbulentos. En el momento en que la partícula posee cierta velocidad, existe la posibilidad de que salga despedida de la estructura turbulenta. Ese punto suele ser el de velocidad vertical negativa, es decir, con dirección de la gravedad. Por tanto se ve que la velocidad está favorecida en estos puntos primero por su velocidad terminal y segundo por la velocidad que el vórtice le imprime al actuar como centrifugadora. Todo esto hace que justo bajo el vórtice, la velocidad de sedimentación de una partícula sea muy superior a la media en el resto del campo de análisis.
2. Otra por la cual se ha demostrado que la mayor concentración de partículas se da justo debajo de estas estructuras turbulentas. En concordancia con lo anterior este punto se puede entender como el punto en el que todas las partículas (en realidad no todas, sino la mayoría) se bajan de la "noria" que es el vórtice. En este punto, cabe destacar que este fenómeno de alta concentración provoca una disminución en algún lugar. Dávila y Hunt (2001), cuantificaron estas zonas para unas condiciones concretas (bajos números de Froude de la partícula) enunciando que cuando la velocidad terminal de la partícula es menor a la máxima velocidad vertical de los vórtices, hay regiones de un ancho $\tilde{W}_e \propto \tilde{R}_\nu F_p / V_T$ que son difíciles de alcanzar por dichas partículas. Siendo F_p el número de Froude de la

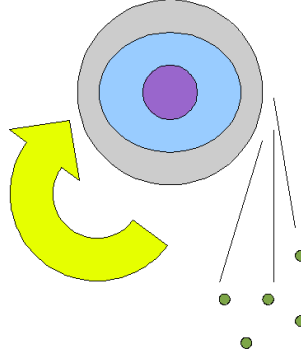


Figura 2.3: Esquema de la alta concentración en un vórtice

partícula, V_T su velocidad terminal y $\tilde{R}_v$ el radio característico del vórtice. Estas regiones, se especificaron como el centro del vórtice y la zona baja de éste, justo después de la zona de alta concentración

A este respecto, en el estudio de Aliseda, Cartellier, Hainaux y Lasheras (2002) se propone que la velocidad de sedimentación de una partícula se tome como la suma de la velocidad terminal, más un término asociado a la velocidad del cluster:

$$V_z = V_{terminal} + V_{cluster} \quad (2.17)$$

Los cluster son zonas de alta concentración de partículas y que en su estudio se modelan como una partícula del orden del tamaño característico del propio cluster, previamente estudiado, en rango viscoso ($Re \sim 10$) y con una densidad:

$$\rho_{cluster} = (1 - C) \rho_{flujos} + C \rho_{particula}. \quad (2.18)$$

Así finalmente cuantifican esta velocidad del cluster ayudándose de la ecuación 2.3, siendo $V_{cluster}$

$$V_{cluster} = \frac{K_T}{18} \frac{\rho_{particula}}{\rho_{aire}} \frac{g}{\nu_{aire}} C \cdot l^2 \quad (2.19)$$

Siendo una expresión que como resulta de sus experimentos depende linealmente de la concentración volumétrica de partículas (C) y K_T , que es el factor de forma, para partículas esféricas es igual a 1.

Estas relaciones se han obtenido realizando numerosas experimentaciones para llegar a la conclusión de que existe una clara dependencia de la fracción volumétrica con la velocidad de sedimentación y de la concentración de partículas con la propia acumulación de éstas. De hecho sería posible pensar en una correlación entre la formación de tales cluster (que recordemos que son la zona de alta concentración espacial de partículas) con la velocidad de sedimentación, aunque aparecen ciertas dudas.

- Por un lado, que en los flujos de turbulencia isotrópa, donde los vórtices son espacialmente aleatorios, se produzcan los mismos efectos que como se comentó anteriormente ocurre en un vórtice horizontal cuando se sabe que aunque la mayor concentración se da en la zona baja de los vórtices y en este caso no sean todos vórtices horizontales.
- Por otro lado, que cerca de los vórtices, según el estudio de Dávila y Hunt (2001), se pueden dar casos de "overshooting" o rebote mediante los cuales una partícula cambia bruscamente su trayectoria al encontrarse con un vórtice. Esto concuerda con otros estudios en los que se dice que las partículas no son capaces de "sentir" a otras partículas a menos que estas otras turben el flujo portador. Igualmente la partícula no se ve afectada ante los vórtices hasta que estos no varían el flujo, de ahí que el cambio de dirección sea tan brusco y pueda verse como un rebote.
- Otro fenómeno analizado en el estudio de S. Gosh, Dávila, Hunt, Srdic, Fernando y Jonas, (2005) es que la turbulencia como tal es un proceso no estacionario, es decir, la estructuras turbulentas se crean y destruyen continuamente. Una cierta partícula, puede ser capaz de ver un vórtice como algo que siempre existe, si su tiempo de residencia en su interacción con él es lo suficientemente pequeño, pero el caso contrario también es posible. En los casos de número de Stokes $S_t \ll 1$ y $S_t \gg 1$, puede ocurrir que se forme un vórtice que atrape a las partículas en su interior y no las deje escapar, con lo que la anterior teoría de los vórtices verticales también falla. Es más puede ocurrir incluso, y esto tampoco explica el fenómeno de acumulación y velocidad de sedimentación, que estando estas partículas dentro del vórtice, a partir de cierto tamaño todas salgan disparadas.

El estudio de Aliseda, Cartellier, Hainaux y Lasheras (2002), referencia además la velocidad de sedimentación con el número de Stokes, y similarmente a lo ocurrido en simulación numérica en el trabajo de Wang y Maxey (1993) indica que la variación de la velocidad de sedimentación respecto al número de Stokes es similar en todo el rango de tamaños. Además aparece el mismo máximo en

los dos estudios cuando el número de Stokes es de orden unidad, lo que apoya la teoría de como se vio en el capítulo 1 (ver 1.3) se define el número de Stokes en términos de la escala disipativa de Kolmogorov. De todas formas el parecido comentado, es mas bien cualitativo, ya que en las simulaciones numéricas no se tuvieron en cuenta que las partículas de tamaño mayor y un número de Stokes alto no responden a la turbulencia por la alta inercia y por los bajos tiempos de interacción, mientras que en las partículas pequeñas ocurre lo contrario. Pero se llega a la conclusión de que cuanto menor sea la fracción volumétrica, más se parecen cuantitativamente ambos resultados.

Estudios previos con una introducción monodispersa de partículas en el flujo portador, tal y como se pretendía en este estudio, muestran que existe una diferencia de acumulación de partículas si la comparación se realiza cuando el número de Stokes es de orden unidad y cuando es muy diferente, aunque a medida que aumenta la concentración esta diferencia parece debilitarse. Pero he aquí otra de las ventajas de la introducción de concentraciones monodispersas y es que la acumulación se hace más evidente que en el caso polidisperso, ya que la distribución espacial de los cluster es menor.

Es de señalar que los estudios realizados hasta el momento, se hacen en condiciones de turbulencia muy específica y a números de Reynolds moderados, con lo que queda la duda de que todos los resultados sean después extrapolables a flujos más reales.