

SIMULACION DE LA EVOLUCION Y GENERACION DE INTERFACES EN GRADIENTES DOBLE DIFUSIVOS

Luis CARDON, Miguel CONDORI *, Alejandro HERNANDEZ *
INENCO, Universidad Nacional de Salta
Buenos Aires 177, 4400 Salta

Ty NEWELL †
Department of Mechanical and Industrial Engineering
University of Illinois
1206 W. Green, Urbana, Illinois 61801

Resumen

Se estudia la simulación numérica de la evolución y generación de interfaces convectivo-difusivas en sistemas doble difusivos. Se describe la simulación de experimentos con pozas de laboratorio. Difusión y balances globales modelizan los gradientes y capas convectivas respectivamente. Un modelo de renovación (burst model) describe la dinámica de las interfaces convectivo-difusivas. Su parámetro gobernante, la razón de estabilidad $R_p = \frac{\beta d S / dz}{\alpha d T / dz}$, decide la dirección del movimiento de la interface. También decide si los gradientes crecen o se erosionan y si el debilitamiento de un gradiente es suficiente para su ruptura. Se presenta la simulación del rompimiento de un gradiente débil en un tanque de 0.23m de profundidad con solución de Cl_2Ca . Inicialmente difunde sal isotérmicamente, luego se calienta el fondo, aumentando la inestabilidad en la zona débil, finalmente el gradiente se rompe creándose una capa convectiva que luego crece. La simulación predice la localización de las interfaces con un margen de error del 10%.

MODELO MATEMATICO

Zona de Gradiente

En la zona de gradiente el transporte de calor y sal está gobernado por ecuaciones de tipo difusión. Si ϕ es el escalar transportado (T temperatura o S concentración) y κ_ϕ su difusividad tendremos

*Becario del CONICET

†On Fullbrigh Fellowship at UNSa

dos ecuaciones del tipo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \kappa_{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + G \quad (1)$$

donde t es el tiempo y z la longitud. El término de generación G atañe solo a la ecuación de difusión de calor y permite considerar la radiación absorbida que es una función de la profundidad. En los cálculos presentados es cero. Los perfiles iniciales de salinidad y temperatura son tomados como condiciones iniciales. Cada ecuación requiere dos condiciones de borde que pueden ser de tipo Dirichlet o Neumann.

Zona Convectiva

En las zonas convectivas se utiliza la aproximación usual para masas fluidas; los movimientos convectivos producen suficiente mezclado como para que la propiedad (temperatura o salinidad) sea uniforme. Los balances de energía y sal están dados por

$$\rho c_p V \frac{dT}{dt} = -kA \frac{dT}{dz} \quad (2)$$

$$V \frac{dS}{dt} = \kappa_S A \frac{dS}{dz} \quad (3)$$

Zonas de Borde

La superficie de la poza y el fondo se modelan como condiciones de Dirichlet, de Neuman, o mixtas. En el caso de una poza típica se requieren modelar flujos de calor. En la superficie pueden considerarse efectos convectivos y evaporativos y en el fondo absorción de radiación y pérdidas por el suelo. Estas características no se usaron en el ejemplo presentado. En los experimentos de laboratorio generalmente no se miden los flujos en fondo y superficie, sino sus temperaturas. Esta condición se modela como condición de Dirichlet con variación temporal y está dada por

$$T(x = 0 \text{ o } x = l) = f(t) \quad (4)$$

Zona de Interface

Las interfaces entre zonas convectivas y difusivas presentan un comportamiento complejo. En contraposición con la zona de gradiente, en donde el modelo diferencial unidimensional detalla suficientemente la física local, en las adyacencias de ésta zona el problema está descrito por las ecuaciones de Navier Stokes en tres dimensiones. Su inclusión va mas allá de los propósitos de este tipo de programa. Es posible salvar este inconveniente acudiendo a modelos de tipo mecanicista. Se implementó aquí el modelo de White y Newell [1], y White [2] que se describirá con cierto detalle.

Este modelo se basa en el hecho de que la inestabilidad convectiva (local) tiene una cierta frecuencia natural. La remoción de fluido inestable se hace mediante un mecanismo similar al de plumas o burbujas que crecen localmente en forma dispersa sobre o debajo de la interface. El modelo supone que estos "estallidos" o remociones se confunden en uno solo en toda la superficie de la interface. Luego de un estallido la interface permanece estanca hasta que se hace nuevamente suficientemente inestable para recomenzar el ciclo. Luego de una remoción, los perfiles de la propiedad (sal o temperatura) son como los mostrados en la figura 1. Con el tiempo la difusión

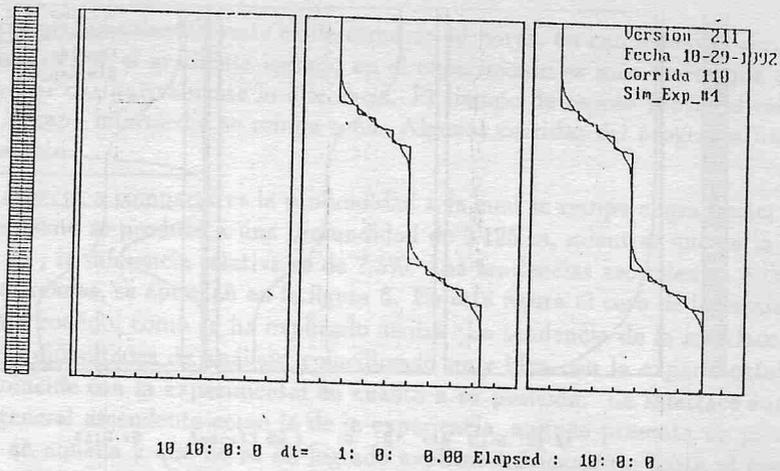


Figura 3: Estados inicial y antes de producirse la ruptura.

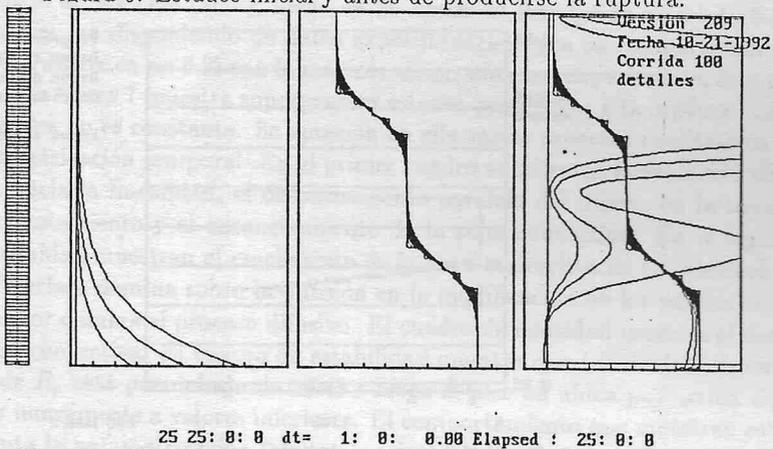


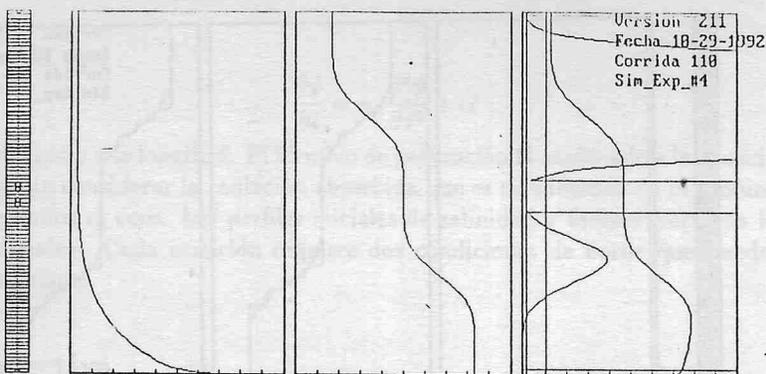
Figura 4: Estados superpuestos antes de producirse la ruptura.

de tiempo y el tiempo transcurrido, que tiene dos escalas; el cero de la primera es el comienzo de la simulación, luego cuando se crea la capa convectiva interna se reestablece el cero.

La figura 3 muestra los perfiles iniciales. Estos se suavizan por difusión, llegando al estado mostrado superpuesto en la misma figura antes de iniciar el calentamiento, 10 horas después de iniciada la simulación. La función $T(x = l) = f(t)$ aproximadamente incrementa la temperatura en 10 C/hr durante 4 horas, luego la deja constante en 45 C .

Los perfiles recalculados cada hora se muestran superpuestos en la figura 4. En ésta figura se muestra también cómo la inestabilidad crece al descender R_p . El R_p crítico se alcanza 3 horas después de comenzado el calentamiento. La figura 5 muestra el estado inmediato posterior a la ruptura. En las figuras mostradas puede observarse que el R_p descende por debajo del valor crítico en las adyacencias de los bordes del tanque apenas iniciado el calentamiento. No se generaron las capas convectivas que allí corresponden debido a una razón práctica: una vez creada una interface, el modelo de remoción controla el paso de tiempo de la simulación y estando éste en el orden de los minutos, o segundos, demora notablemente la observación de la ruptura interior del gradiente, fenómeno de interés.

Una vez formada la capa convectiva interior, el R_p comparado con $\tau^{-1/2}$ indica crecimiento o erosión del gradiente. Esto es mostrado por los picos de R_p en los bordes de la capa convectiva.



17 13: 0:13 dt= 0: 0: 1.00 Elapsed : 0: 0:13

Figura 5: Estado posterior a la ruptura.

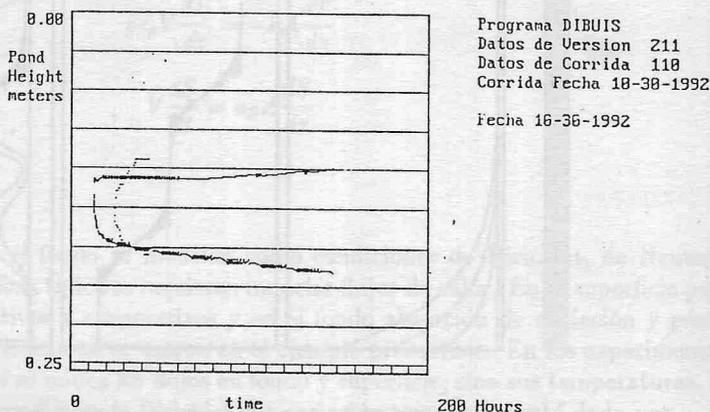


Figura 6: Evolución temporal de la posición de las interfaces.

Si el pico está a la izquierda de la línea de R_p neutro (~ 10.48) en el gráfico de R_p , el gradiente se erosiona, si el pico cae a la derecha de la misma línea el gradiente crece. La figura 6 muestra la evolución temporal de la posición de las interfaces que limitan la capa convectiva interior. Para la interface inferior se aprecia una tendencia descendente- es decir que acrecienta la capa convectiva- durante toda la simulación. La interface superior sube durante las primeras 10 horas después de la generación para luego oscilar alrededor de una posición fija durante las siguientes 60 horas, después de las cuales vuelve a subir mientras dura la simulación. El comportamiento mostrado en esta figura es siempre coherente con los valores observados para los picos de R_p .

Comparación con los Resultados Experimentales

Se comparan los resultados de la simulación con los de una experiencia de laboratorio similar a la que se describe en detalle en [4]. El primer aspecto interesante del proceso predicho por el programa es la hora a la cual se produce la ruptura del gradiente. En la simulación se produce 3 horas después del calentamiento, con un error de una hora, ya que este es el paso de tiempo empleado en esta etapa de la simulación. En la experiencia la ruptura ocurre 7 horas después de comenzado el calentamiento. Debe notarse que en la experiencia, el tiempo que el tanque

permanece en reposo sin calentamiento es de cerca de 40 horas, en cambio en la simulación sólo de 10. Esto implica que el gradiente logrado en el experimento es más fuerte que el simulado. Esto puede explicar cualitativamente la diferencia. El tiempo de reposo previo al calentamiento determina que la capa intermedia se rompa o no. Algunas corridas del programa han mostrado este comportamiento.

El segundo aspecto a comparar es la profundidad a la cual se rompe el gradiente; en la simulación, el rompimiento se produce a una profundidad de 0.125 m, mientras que en la experiencia lo hace a 0.135 m, la diferencia relativa es de 7.3%. Las tendencias ascendentes o descendentes de las interfaces creadas, se aprecian en la figura 6. En esta figura el cero de la escala de tiempo experimental está corrido, como se ha explicado arriba. La tendencia de la interface inferior no presenta mayores dificultades de análisis, coincidiendo muy bien con la experimental. También esta interface coincide con la experimental en cuanto a su posición. La interface superior tiene una tendencia general ascendente como la de la experiencia, aunque presenta un pico temprano que no aparece en aquella y que no se ha logrado explicar teóricamente hasta el momento. La simulación muestra un estacionamiento en la posición a mayor profundidad que el experimental, siendo la diferencia de un 11% (2cm), luego de 80 horas de simulación esta interface comienza nuevamente a crecer, no disponiendo de datos experimentales para su comparación. La posición máxima alcanzada difiere en un 6 % con la máxima alcanzada en el experimento, ésta mucho antes que la simulada. La figura 7 muestra superpuestos estados posteriores a la ruptura. La parametrización de los perfiles no es constante. Se aprecian en ella varios aspectos cualitativos -al no estar indicada la parametrización temporal-. En el primer cuadro se muestra la evolución de los perfiles de temperatura hacia la linealidad, el desplazamiento paralelo del mismo en la zona convectiva mostrando su calentamiento y el ensanchamiento de la zona convectiva. En el segundo cuadro los perfiles de salinidad muestran el crecimiento de la capa convectiva en su interface inferior. El descenso de la interface domina sobre la difusión en la modificación de los perfiles, en cambio en el gradiente superior domina el proceso difusivo. El cuadro de densidad muestra el descenso de la misma en la capa convectiva. El cuadro de estabilidad muestra que la interface superior primero crece, - el pico de R_ρ está por debajo de 10.48 - luego el pico se ubica por arriba de R_ρ neutro para luego pasar nuevamente a valores inferiores. El comportamiento que muestran estos gráficos, teniendo en cuenta la parametrización temporal, coincide bien con el comportamiento mostrado en la figura 6.

Se debe señalar que la situación simulada no corresponde totalmente a la experiencia en algunos aspectos. Entre ellos, no se consideró el calentamiento que sufre la superficie superior de la poza debido al ambiente a temperatura inicialmente superior. Se observó en algunos de los experimentos una fuerte evaporación en la superficie del tanque la cual reconcentró la capa superficial, situación no simulada. Destacamos también que en la simulación analizada no se han tenido en cuenta las capas convectivas superior e inferior que evidentemente deben formarse, como lo muestran los muy bajos R_ρ en sus inmediaciones y el perfil inestable de densidad visto en las figuras. Mencionamos también el atraso frente a la experiencia que surge de imponer las temperaturas tomadas de ésta como condiciones de borde.

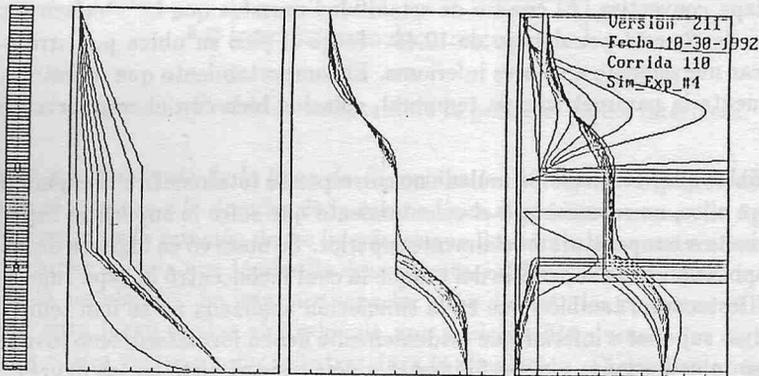
Conclusiones

Se realizó un programa para la simulación de fenómenos difusivos en pozas, con particular énfasis en la simulación de las interfaces convectivo-difusivas propias de gradientes doble difusivos. Para ello se usó un modelo de remoción (Burst model) Algunas de las capacidades del programa se muestran en este trabajo, entre ellas la simulación de experiencias de laboratorio en tanques pe-

queños. La comparación con los resultados experimentales es satisfactoria, aunque no se modelaron todos los aspectos del problema. Algunas de las capacidades del programa, ya implementadas no fueron validadas todavía, entre ellas las que describen capas múltiples, capas en los bordes, propiedades de otras soluciones, y propiedades variables. En experiencias preliminares se simulon pozos con la configuración típica, a escala real y a escala de laboratorio, incluyendo calentamiento radiativo. Si bien no se hizo una evaluación crítica de éstos resultados, también mostraron comportamientos físicamente realistas. Queda por hacer una comparación completa y rigurosa con los resultados experimentales de [4]

Referencias

- [1] M. J. Witte and T.A. Newell *Simulation of the Growth and Erosion of a Double Diffusive "Diffusive" Interface*. ASME Winter Annual Meeting, paper Nbr 87-WA/HT-21, Massachusetts, 1987.
- [2] M. J. Witte *Thermal burst modeling of a double-diffusive "diffusive" interface*. PhD Thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1989.
- [3] F. Zangrando *Observation and analysis of a full-scale experimental salt gradient solar pond*. PhD Thesis, University of New Mexico, Albuquerque, New Mexico, 1979.
- [4] V. Passamai et al. *Estudio experimental de la aparición y crecimiento de capas convectivas en sistemas doble difusivos*. Se presenta en esta reunión.



.1017169 3525132:39: 6 dt= 0: 1: 10.00 Elapsed : 119:32: 6
 .1014216