



PRÁCTICA 1 FLUIDOS:

ANÁLISIS DE LA DIFUSIÓN DE NaCl Y ESTIMACIÓN DE VISCOSIDADES
MEDIANTE MODELOS ANALÍTICOS Y NUMÉRICOS

BIOMECÁNICA II: FLUIDOS
INGENIERÍA DE LA SALUD

Sara Gimenez Gomez
26262827R

Tabla de contenido

| | | |
|----|--|----|
| 1. | INTRODUCCIÓN..... | 1 |
| 2. | DETERMINACIÓN DEL INTERCAMBIO DE SALES EN UNA CÉLULA..... | 1 |
| | 2.1 Fracción másica de la sal en función del tiempo | 2 |
| | 2.2 Interpolación | 3 |
| | 2.3 Cálculo modelo de transferencia | 6 |
| | 2.4 Solución analítica vs numérica: | 8 |
| 3. | EVOLUCIÓN DE LA VISCOSIDAD..... | 10 |
| | 3.1 Solución analítica vs numérica | 11 |
| | 3.2 Visualización de resultados en 2D y 3D | 14 |
| | 3.3 Tiempo de vaciado adimensional | 19 |
| | 3.4 Tiempo de vaciado caso real (Viscosímetro de Ostwald) | 20 |
| 4. | Conclusión: | 21 |
| 5. | WEBGRAFÍA:..... | 21 |

1. INTRODUCCIÓN

En esta práctica se estudia el fenómeno de difusión de sales (NaCl) a través de una célula con una membrana semipermeable, utilizando tanto modelos analíticos como numéricos. El objetivo es analizar el comportamiento temporal de la concentración de sal, estimar su fracción másica y estudiar la evolución de la viscosidad.

2. DETERMINACIÓN DEL INTERCAMBIO DE SALES EN UNA CÉLULA

En la primera parte del estudio, se modela el intercambio de NaCl a través de la membrana de una célula. Se parte de los siguientes parámetros conocidos:

- Volumen de la célula: $V=2.32\mu m^3$
- Espesor de la pared impermeable: $h=0.082\mu m$
- Concentración final del medio: $g=9\text{ g/L}$
- Concentración inicial del medio: $g_0=0\text{ g/L}$

Se cuenta además con una tabla de datos experimentales (ver Tabla 1)

| $t \cdot 10^{-5} \text{s}$ | $Y(t)$ |
|----------------------------|---------|
| 0 | 0 |
| 1 | 0.00569 |
| 2 | 0.00774 |
| 3 | 0.00848 |
| 4 | 0.00875 |
| 5 | 0.00885 |
| 6 | 0.00888 |
| 7 | 0.00889 |
| 8 | 0.00890 |
| 9 | 0.00890 |
| 10 | 0.00890 |

Tabla 1: Medidas de concentración de sales en la célula.

2.1 Fracción másica de la sal en función del tiempo

Si vemos la Figura 2 podemos observar una evolución temporal de la concentración de sal, esta sigue una curva característica de un sistema de primer orden ante una entrada constante. Es decir, el sistema alcanza un equilibrio conforme transcurre el tiempo, lo que implica una estabilización de la transferencia de sal. Esto implica

una estabilidad de las concentraciones fuera y dentro de la célula por lo tanto no habría necesidad de más difusión.

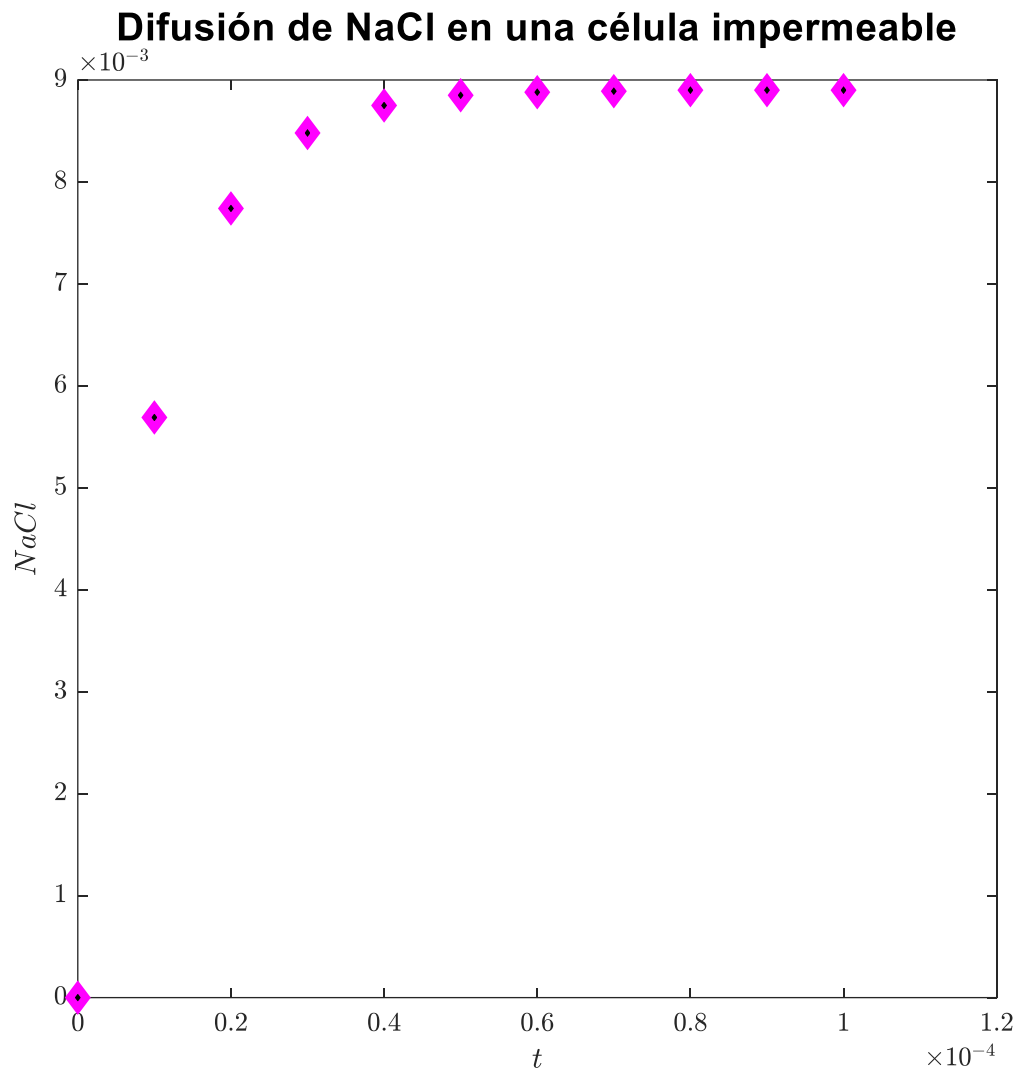


Figura 2: Difusión de sales en una célula impermeable

2.2 Interpolación

Vamos a usar la interpolación para conseguir aquellos datos que no se nos dieron en la Tabla 1, la cual registra los datos experimentales. Gracias a este método, es posible calcular la concentración de sal en $t = 1.5 \times 10^{-5}$ s.

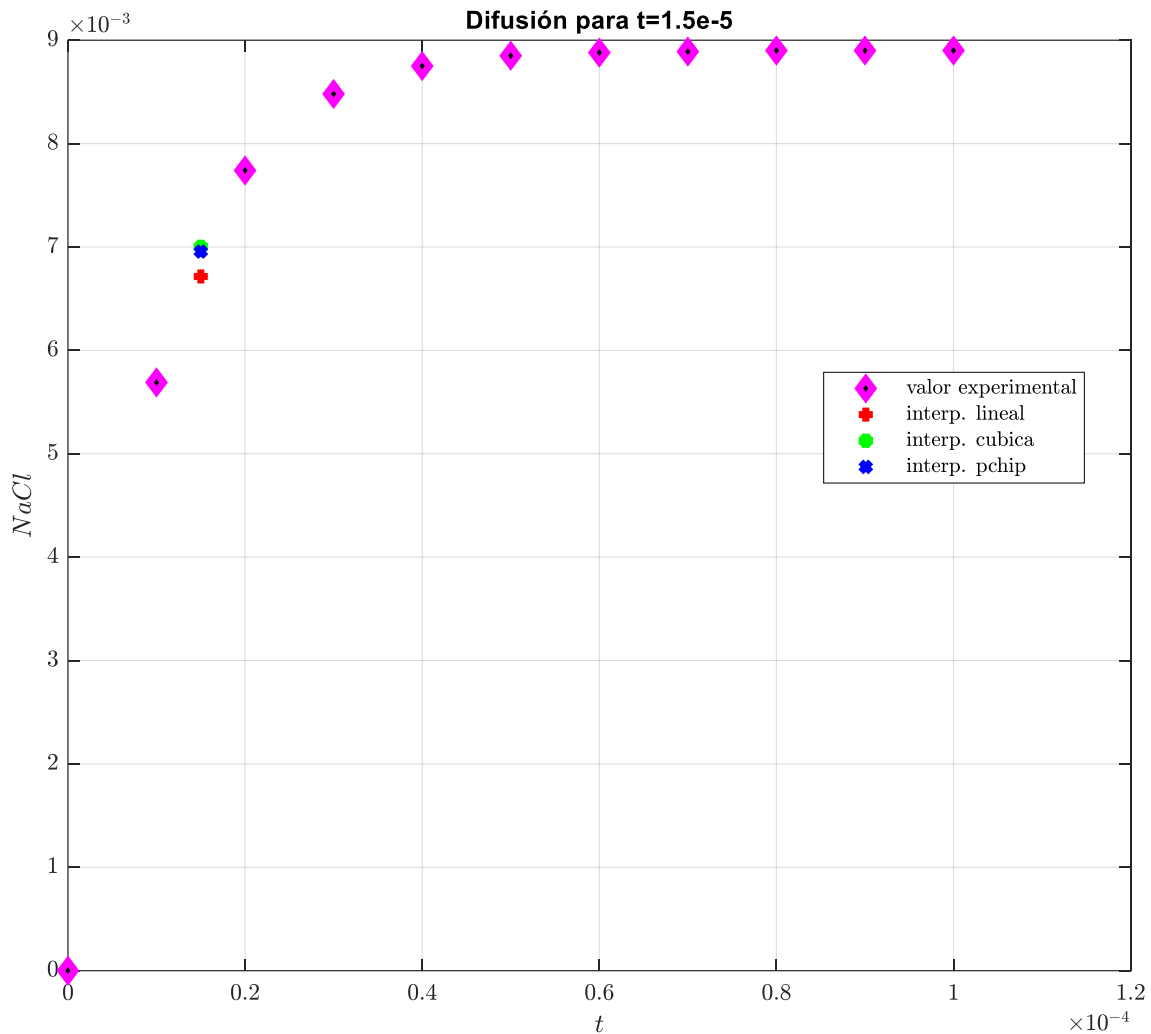


Figura 3: Interpolación para un $t=1.5 \text{ e-}5$ con distintos métodos en MATLAB

Se han aplicado distintos métodos de interpolación, como se muestra en la Figura X:

- **Interpolación cúbica (spline):** Utiliza polinomios cúbicos ajustados en todos los puntos. Puede generar oscilaciones si los datos están muy espaciados.
- **Interpolación PCHIP:** También cúbica por tramos, pero prioriza la preservación de la forma de los datos y evita oscilaciones.
- **Interpolación lineal:** Es sencilla, rápida y adecuada para este caso donde la difusión es de primer orden sin oscilaciones.

Los resultados obtenidos muestran que la interpolación lineal se ajusta mejor a los datos esperados para este sistema. Como comparación, si asumimos que la interpolación lineal representa el valor "real" en $t = 1.5 \times 10^{-5}$ s, podemos calcular el error absoluto de las demás técnicas respecto a esta.

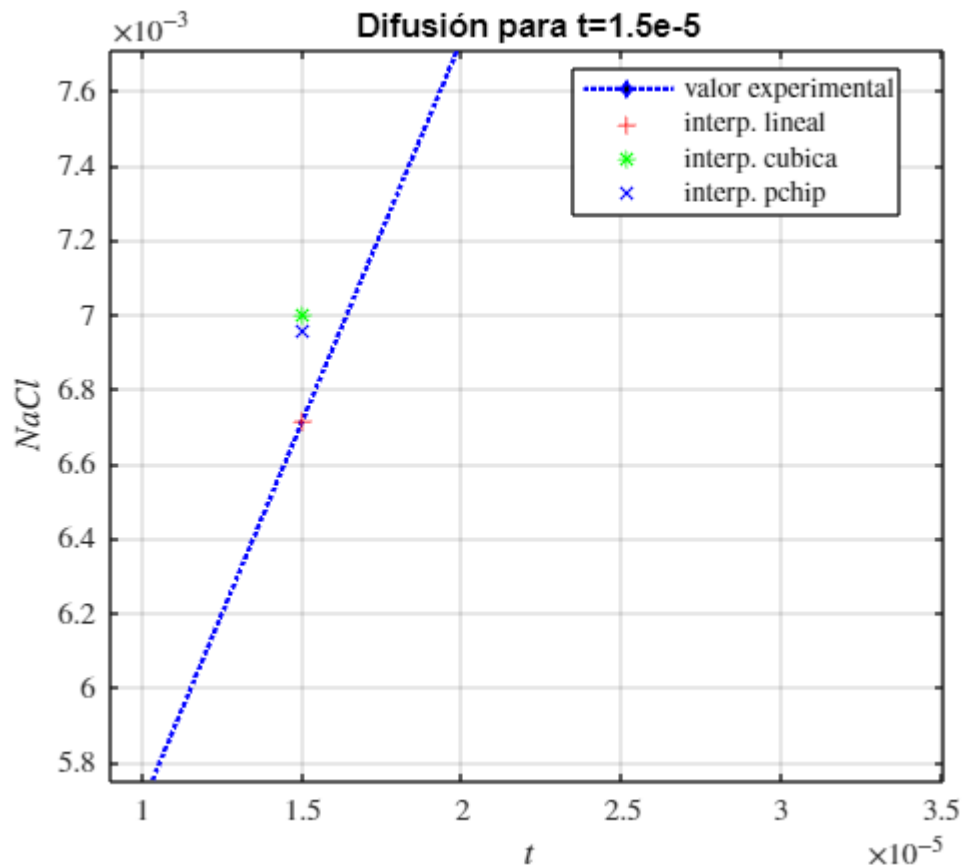


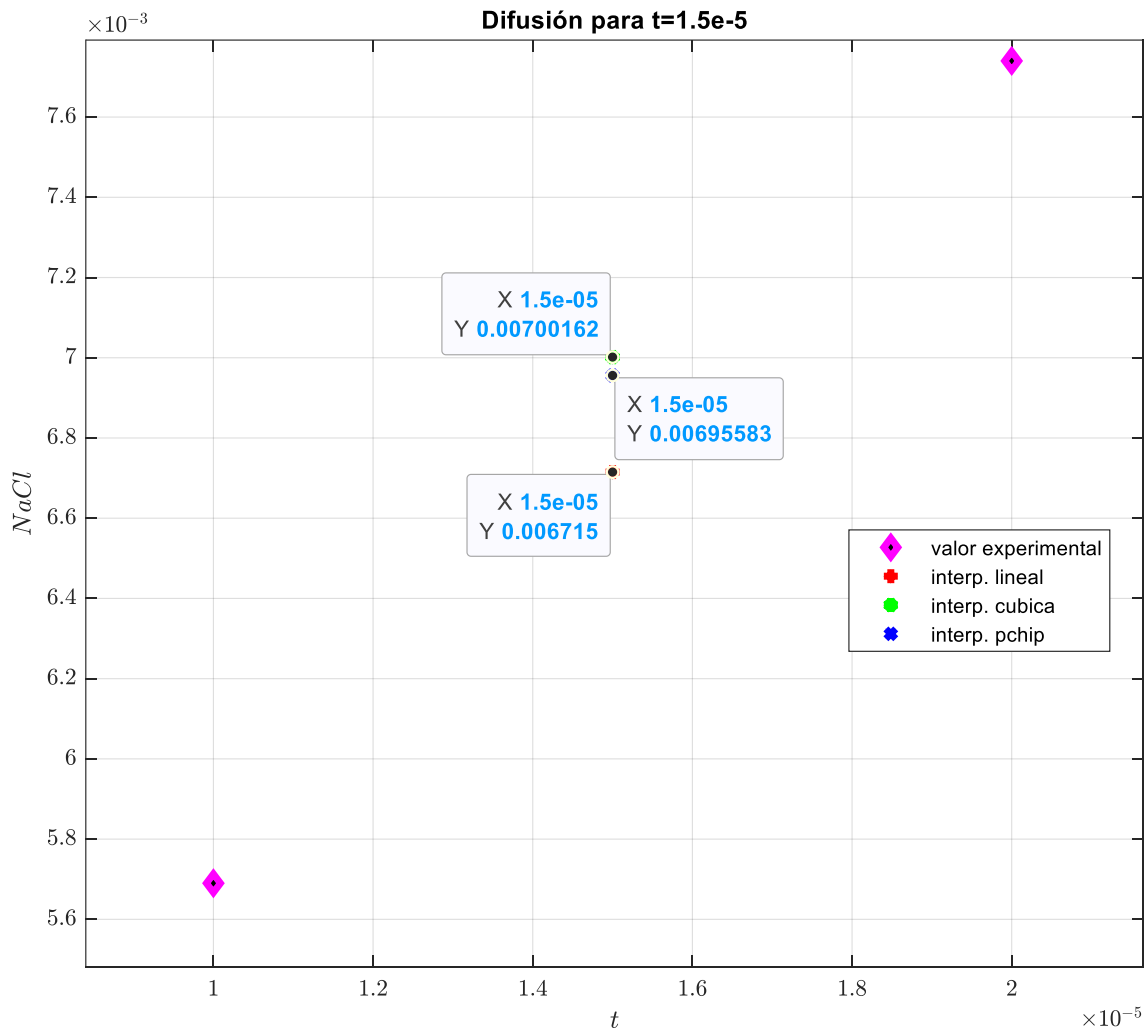
Figura 4: Ampliación de la Figura 3

Se unieron los puntos experimentales de la difusión, el programa suele hacerlo de manera lineal, por este motivo el ajuste lineal es perfecto, pero esto no implica que sea el mejor. Se hizo una ampliación, visible en la Figura 4, para poder confirmar la gran diferencia que existía entre las que usaban interpolación cúbica frente a la lineal. Creo que para estos datos que presentan cierta curvatura, aunque no oscilación con estas aproximaciones cúbicas conseguiríamos mejores resultados. Figura 4: Ampliación de la Figura 3

Por lo tanto, si hiciéramos el error absoluto de las distintas interpolaciones frente a la línea, pues entre las cúbicas considero que no hay casi diferencia obtendríamos para un $t = 1.5 \times 10^{-5}$ los siguientes valores:

```
Lineal: error absoluto = 0.00000e+00, error relativo = 0.00%
Spline: error absoluto = 2.86619e-04, error relativo = 4.27%
PCHIP: error absoluto = 2.40828e-04, error relativo = 3.59%
```

Para acabar de responder a este apartado se dan los valores de cada interpolación para el tiempo a estudio.



En el punto 1.5 del eje x, en orden descendente encontramos la interpolación cúbica seguida de la interpolación por pchip y por último la lineal.

2.3 Cálculo modelo de transferencia

Sobre el ejemplo con el que estamos trabajando para describir la evolución de la concentración de sales en el interior de una célula esférica de Volumen $V = 2,32 \mu\text{m}^3$, rodeada por una pared de espesor $h = 0,082 \mu\text{m}$ que permite la difusión másica pero no el flujo convectivo. Esta célula se encuentra inmersa en un medio acuoso con una concentración de sal constante de $Y_0 = 9\text{g/L}$, mientras que el instante inicial de esta concentración en el interior $Y_i(0) = 0$.

Con esta información partimos de la ecuación de conservación para la transferencia de masa:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_c} \rho Y_i dV + \int_{S_c} \rho Y_i \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \int_{S_c} D \nabla Y_i dS + \int_{V_c} w dV$$

Bajo las siguientes suposiciones:

- El fluido está en reposo.

- No hay generación ni eliminación de sales por reacción química.
- El gradiente de concentración se encuentra en la pared de la célula.
- Mantenemos el modelo esférico

Por lo que nos vamos a encontrar con la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_c} \rho Y_i dV = \int_{S_c} D \nabla Y_i dS$$

Si integramos obtendremos:

$$\frac{d}{dt} \rho Y_i \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) = D \frac{Y_o - Y(t)}{h} 4\pi R^2$$

Ordenamos hasta que conseguimos una Ecuación Diferencial de orden I :

$$\frac{dY}{dt} = \frac{3D}{hR} (Y_o - Y)$$

Marcamos las condiciones iniciales para poder resolver la ecuación diferencial:

$$\begin{cases} t = 0 \\ Y(0) = 0 \end{cases}$$

La solución queda de la siguiente forma:

$$Y(t) = Y_o (1 - e^{-\frac{3D}{hR} t})$$

Necesitamos calcular el coeficiente de difusión másica (D), en MATLAB usaremos la función polifit. Conseguimos despejar la incógnita D para tener la siguiente ecuación:

$$D = -\ln\left(\frac{Y_o - Y_i}{Y_o}\right) \frac{hR}{3t}$$

Se representa y analiza el logaritmo de la diferencia de sal, donde el numerador me va indicando la diferencia entre la salida y la entrada.

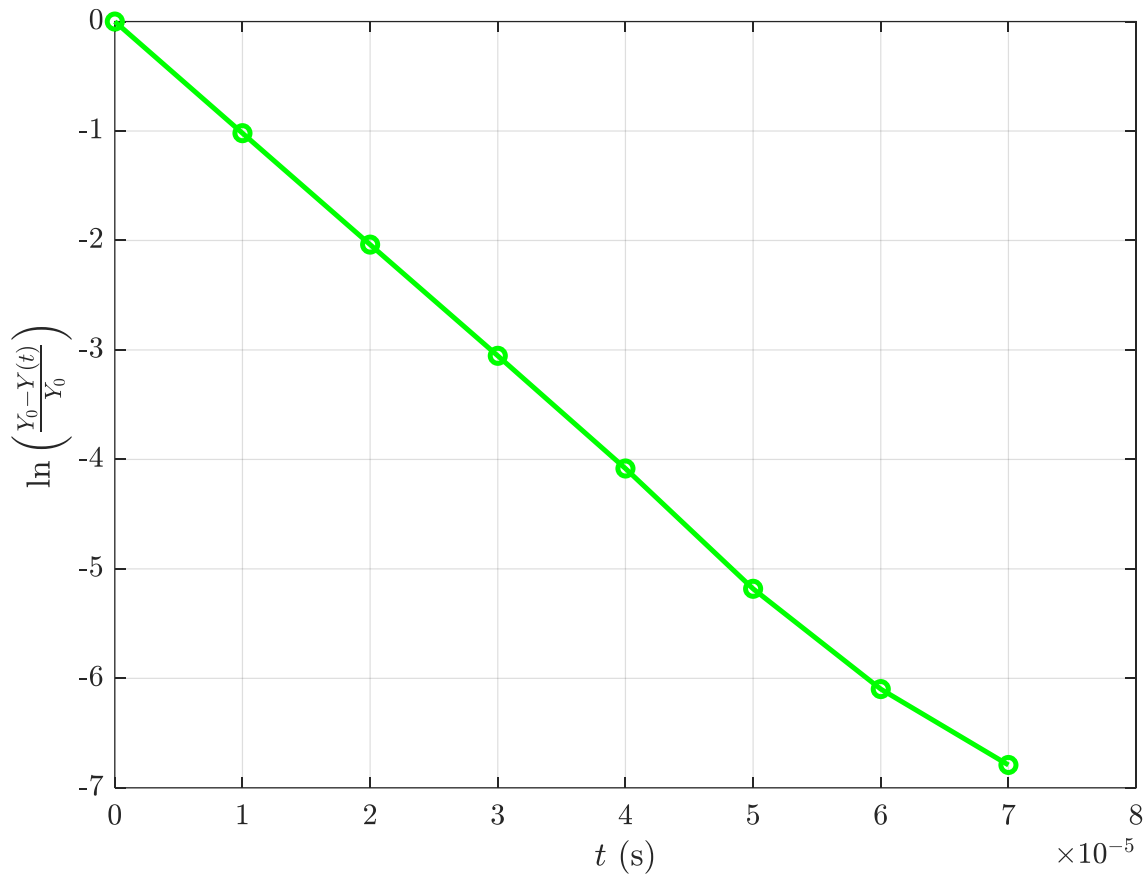


Figura 5: Logaritmo de la diferencia de sal respecto al tiempo

El logaritmo de la diferencia de sal decrece linealmente con el tiempo. Usando esta información que va a ser multiplicada por las constantes del sistema obtendremos un valor de $D = 2.2896 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$.

2.4 Solución analítica vs numérica:

Una vez realizado todos los cálculos, se utilizó una solución analítica para evaluar la validez del modelo propuesto. Esta solución se muestra en verde en la figura 6, representando el comportamiento teórico esperado.

Por otro lado, se incorpora en la misma gráfica la solución magenta, de color magenta, obtenida con un mayor número de puntos. Aunque ambas soluciones han usado diferentes formulaciones, visiblemente ambas se aproximan bastante bien.

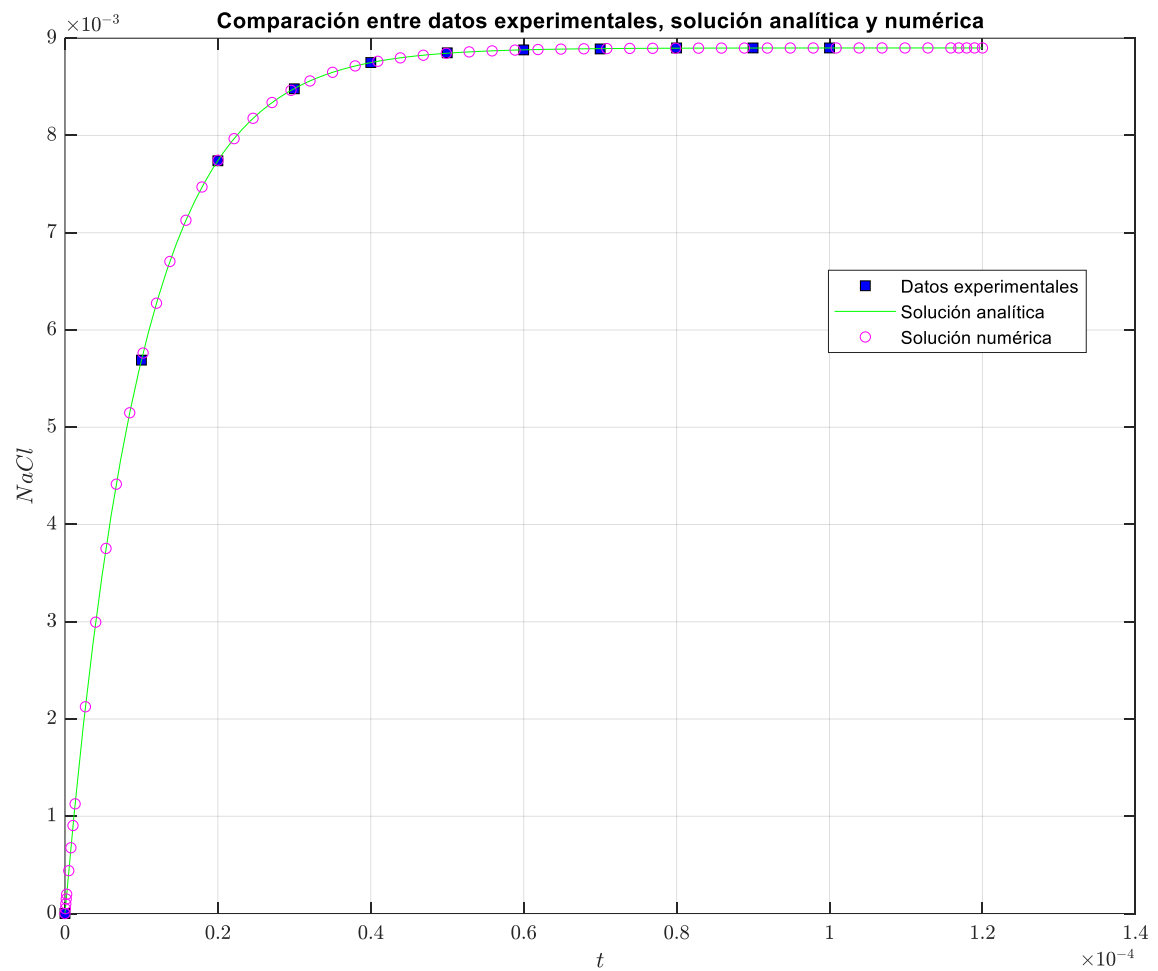


Figura 6: Solución analítica y numérica para la difusión

Sin embargo para evaluar mejor las diferencias entre las curvas calculadas se incluye en la Figura 7 el error entre ambas soluciones.

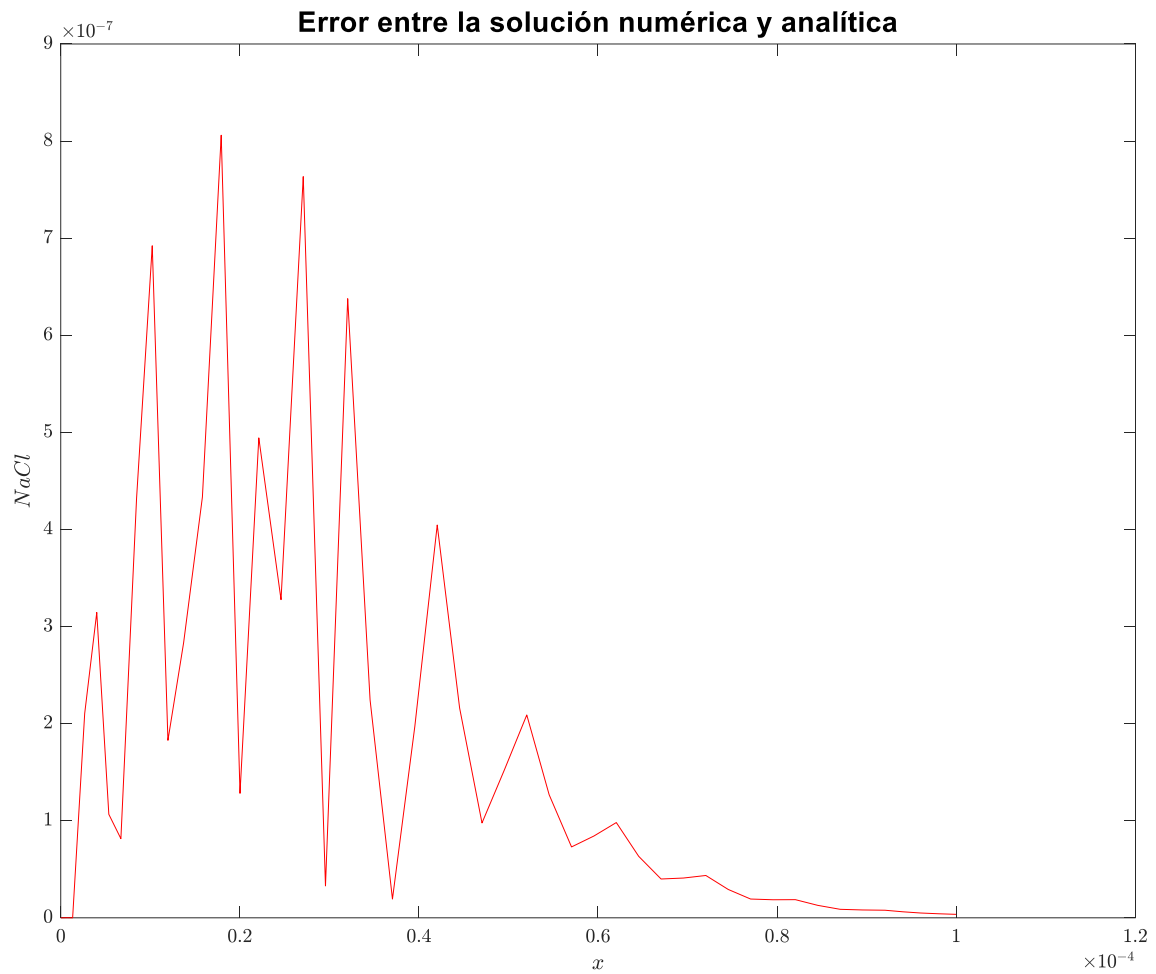


Figura 7: Error entre solución analítica y numérica

El error se da en torno a 10^{-7} . Esto indica una excelente concordancia entre ambas aproximaciones. La introspección visual queda confirmada.

3. EVOLUCIÓN DE LA VISCOSIDAD

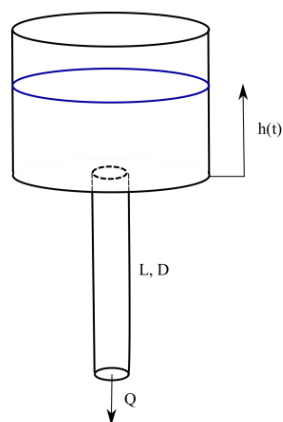


Ilustración 1: Esquema de un viscosímetro de embudo

Estudiamos el viscosímetro de la Ilustración . Se usa Hagen-Poiseuille para modelar el vaciado del depósito. Se sabe que se tiene una ecuación a resolver del tipo:

$$A \frac{dh}{dt} = -\frac{\pi D^4}{128\mu} \rho g (L + h)$$

Cuyas condiciones iniciales se pondrán en:

$$\begin{cases} t = 0 \\ h = h_0 \end{cases}$$

Esta ecuación es recomendable a dimensionarla para poder conseguir una ecuación sencilla.

$$\frac{d\eta}{d\tau} = -(\alpha + \eta)$$

$$\begin{cases} \tau = 0 \\ \eta = 1 \end{cases}$$

Donde:

$$\eta = \frac{h}{h_0}, \quad \tau = \frac{t}{tc}, \quad tc = \frac{A128L\mu}{\pi D^4 \rho g}, \quad \alpha = \frac{L}{h_0}$$

Con todo esto conseguimos escribir la solución como:

$$\eta = (\alpha + 1)e^{-\tau} - \alpha$$

Con todo esto ya podemos dar una solución numérica del ejercicio.

3.1 Solución analítica vs numérica

Se resolvió la ecuación diferencial para varios valores de $\alpha \in \{1,5,10,15,20,25,100\}$, tanto de forma analítica como numérica (usando ode45 en Matlab). En la figura 8 se ve estos resultados:

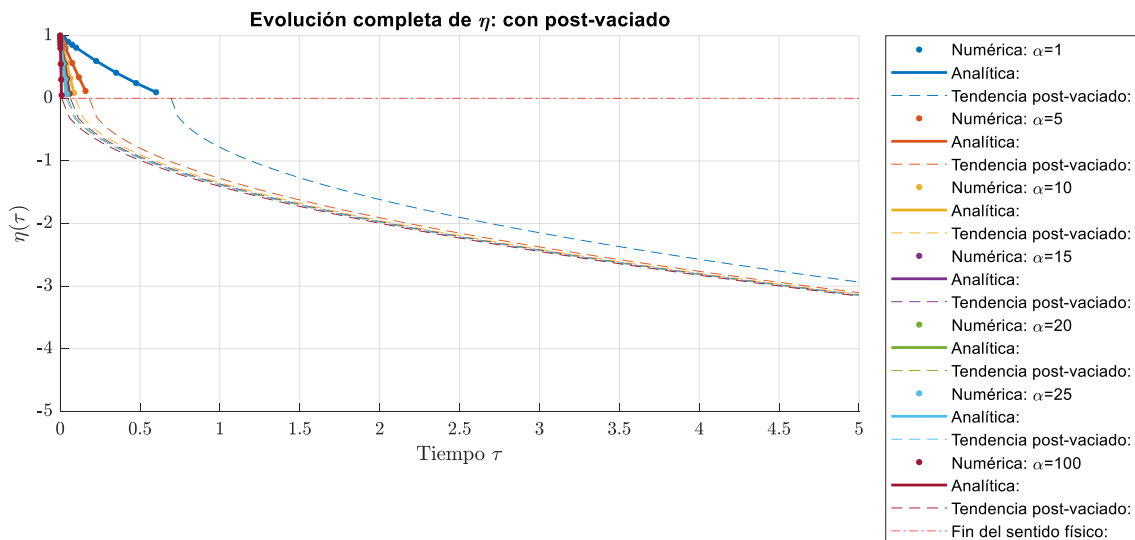


Figura 8: Evolución completa del vaciado incluyendo valores sin sentido físico

El parámetro α actúa como una tasa de decaimiento. Cuanto mayor es α , más rápido decrece. Observando $\alpha = 100$, η cae abruptamente hacia valores muy negativos en poco tiempo; en contraposición para $\alpha = 1$ tenemos una caída más lenta y suave. Todas coinciden que, para valores altos del tiempo, todas las curvas se estabilizan en una región negativa.

Además en la misma figura 8 podemos ver que la solución numérica y analítica coinciden prácticamente a la perfección. Esto es así porque la ecuación diferencial ordinaria de primer orden hallada en apartados anteriores es bastante simple y lineal.

Sin embargo cabe destacar que a partir de los valores donde la altura (η) < 0 , físicamente deja de tener sentido pues se están calculando valores del post vaciado. A continuación en la Figura 9 se muestra dicha evolución pero hasta que la altura es 0. Además así se ven mejores los tiempos de vaciado los cuales se quisieron mostrar con una línea vertical en verde para luego usando las herramientas de Matlab mostrarlas mejor.

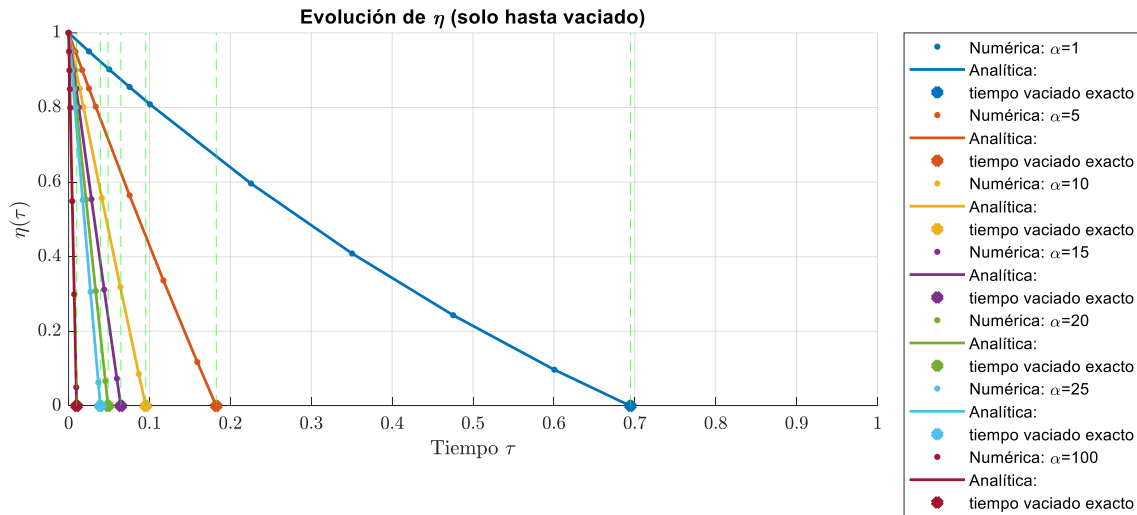




Figura 9: Evolución válida del vaciado junto con sus tiempos de vaciados

También son visibles en la figura 9 los tiempos de vaciado los cuales según el Alpha creciente serán mayores los tiempos que se necesitan para vaciarse.

En orden creciente de estos tiempos para sus respectivos Alpha son:

Para alpha = 1, el tiempo de vaciado es: 0.6946 segundos

Para alpha = 5, el tiempo de vaciado es: 0.1825 segundos

Para alpha = 10, el tiempo de vaciado es: 0.0954 segundos

Para alpha = 15, el tiempo de vaciado es: 0.0646 segundos

Para alpha = 20, el tiempo de vaciado es: 0.0488 segundos

Para alpha = 25, el tiempo de vaciado es: 0.0392 segundos

Para alpha = 100, el tiempo de vaciado es: 0.0100 segundos

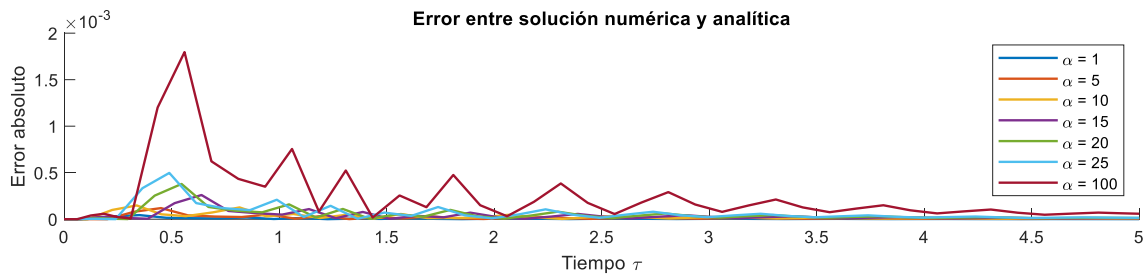


Figura 9: Error absoluto entre solución analítica y numérica.

Hacemos una diferencia absoluta, por eso el eje y es positivo a pesar de que nuestras soluciones se mueven en el rango de los valores negativos, entre las soluciones calculadas y vemos que obtenemos un error de orden 10^{-3} , casi que son coincidentes y verifica que el método numérico está funcionando correctamente.

3.2 Visualización de resultados en 2D y 3D

Se graficaron superficies y contornos utilizando meshgrid, surf y contour en Matlab.

En la Figura 10 se muestra el gráfico de contorno de la solución analítica, donde se observa como varía la altura relativa del fluido en función del tiempo adimensional y del parámetro geométrico α . Se aprecia que, para valores mayores de α (mayor longitud o menor altura inicial), la evolución de η es más lenta, lo que indica un vaciado más progresivo.

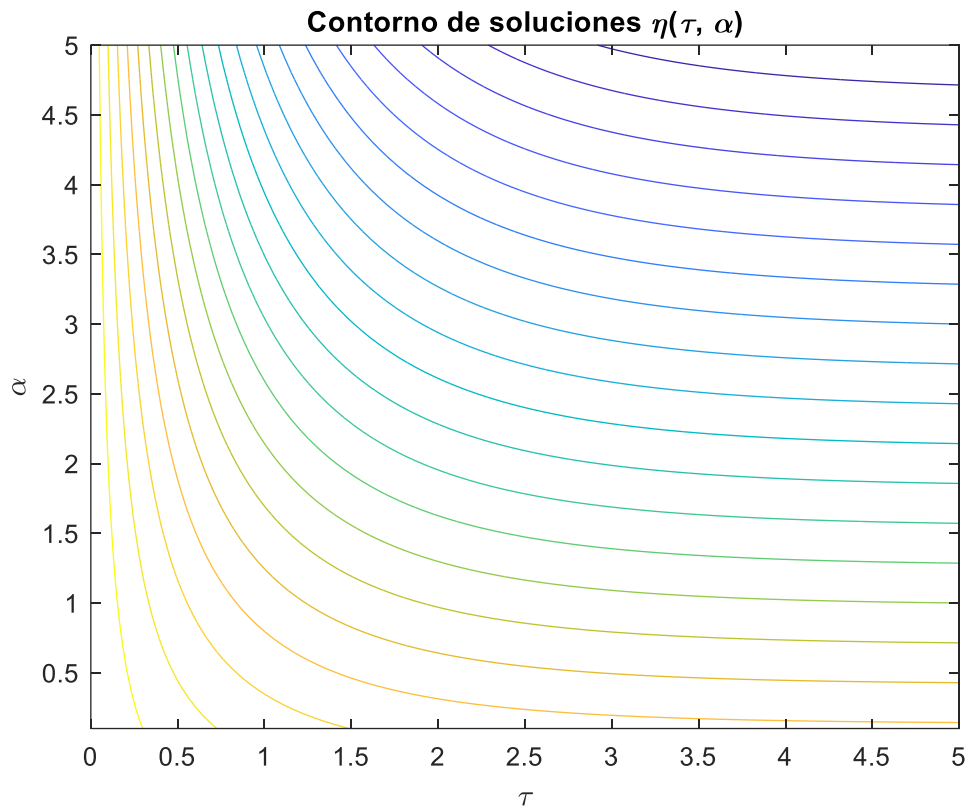


Figura 10: Contorno de soluciones

Esto es coherente con el modelo teórico del viscosímetro. Ya que un aumento de α implica una mayor resistencia al flujo.

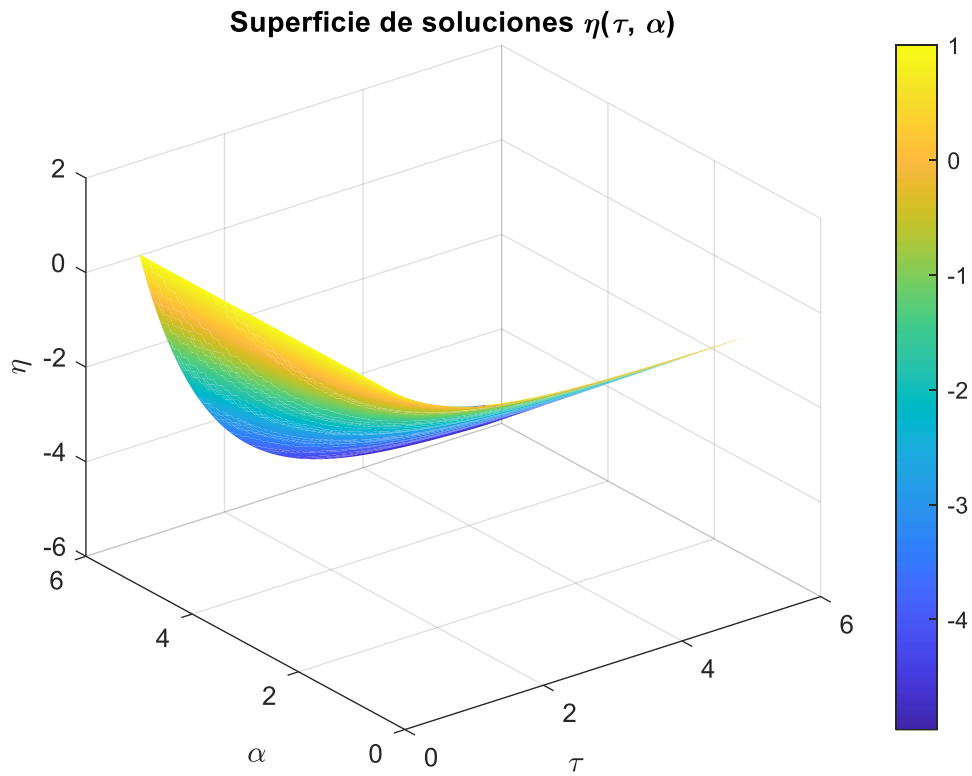


Figura 11: Superficie de soluciones

Para poder hacer un buen análisis de esta superficie tridimensional mostramos diferentes planos que sacamos de esta Figura, para ellos se usó Matlab para ir moviendo los ejes. Si vemos la Figura desde la vista superior, es decir como ejes tendríamos (τ, α) siendo respectivamente las coordenadas x e y. Obtendríamos la Figura:

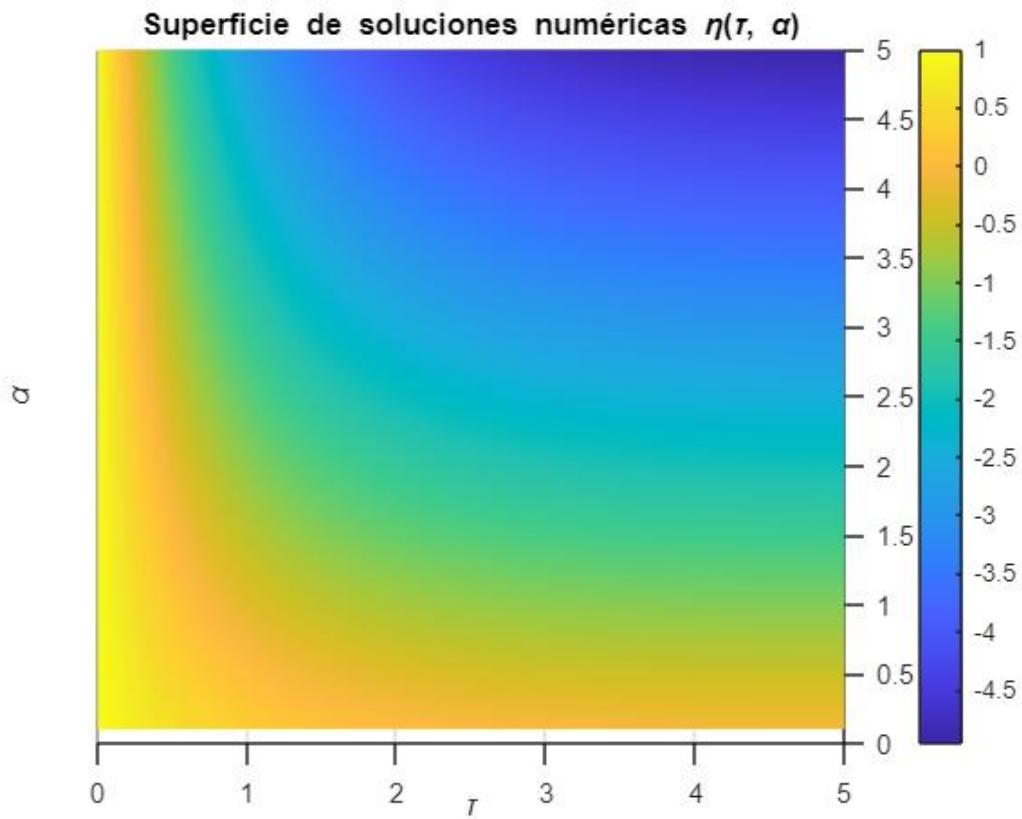


Figura 12: Superficie de soluciones con ejes (τ, α)

Este resultado cuadra con lo que se analizó con la función anterior (Figura 11). Por lo tanto, movemos los ejes para poder identificar más información:

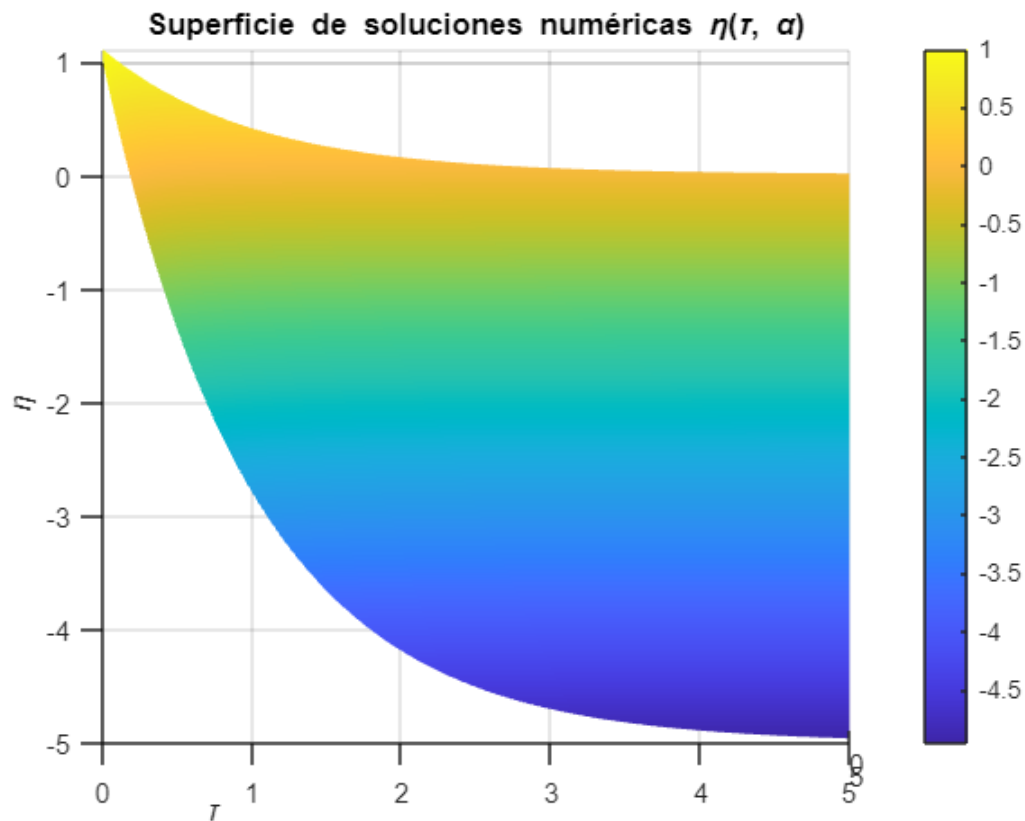


Figura 13: Superficie de soluciones con ejes (τ, η)

Si cuadramos los ejes en (τ, η) empezamos a ver como η (altura) disminuye con el τ (tiempo), es bastante coherente con el ejercicio a estudio. El vaciado de un viscosímetro. Sin embargo, nos falta saber cómo se relaciona el parámetro α con todo esto.

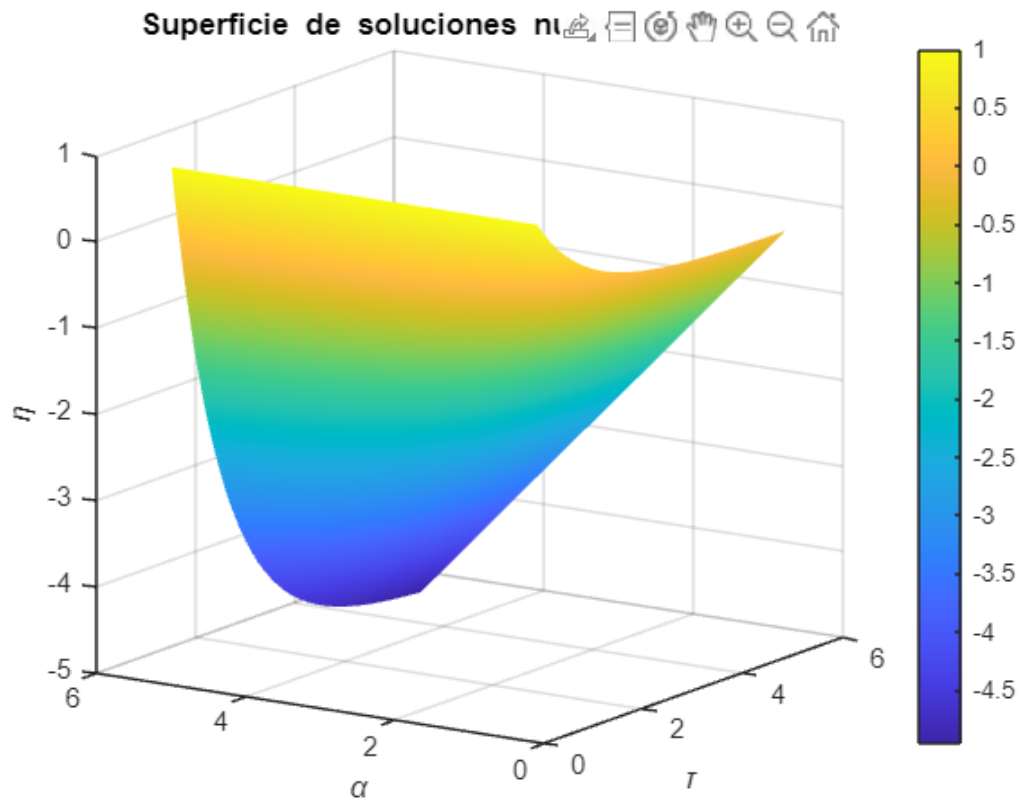


Figura 14: Superficie de soluciones con ejes $((\tau, \eta, \alpha))$

Conforme α aumenta la función η decrece más rápidamente. Esto indica que el viscosímetro se vacía más rápido cuando α es grande. Así es como se relaciona α , η , τ .

En conclusión, el líquido se vacía más rápido con sistemas capilares más delgados, es decir, fluidos menos viscosos o presiones más grandes con un α que favorece un vaciado más eficiente.

3.3 Tiempo de vaciado adimensional

Gracias a que se tenemos la ecuación diferencial adimensionalizada, podemos definir como “vaciado” el momento en el que $\eta(\tau) < 0.001$ para $\alpha = 1$.

Para el problema dado, ya que se halló la ecuación numérica usando Matlab. Podemos también encontrar el requerimiento dado. De esta forma el programa nos informará de que el tiempo adimensional de vaciado es de 0.7737 s

3.4 Tiempo de vaciado caso real (Viscosímetro de Ostwald)

Si contáramos con las características reales de un viscosímetro, como por ejemplo del viscosímetro de Ostwald, comúnmente utilizado en investigación para estudiar la viscosidad, podríamos utilizar sus valores promedio para realizar una estimación más precisa.

- Longitud del capilar: $L = 0.15 \text{ m}$
- Diámetro del capilar : $D = 0.0005 \text{ m}$
- Densidad del agua: $\rho = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
- $g = 9.81 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$
- $A = 0.0003 \text{ m}^2$
- $\mu = 1\text{e-}3 \text{ Pa}\cdot\text{s}$

Estos valores fueron sacados de Bibliografía .

Estos datos se colocarían en el tiempo característico:

$$t_c = \frac{A128L\mu}{\pi D^4 \rho g}$$

Usando la ecuación diferencial en su forma adimensional, se obtuvo un tiempo adimensional de vaciado de 0.7737. Este valor se determinó aplicando la función find de MATLAB sobre la solución numérica. Para obtener el tiempo real de vaciado, basta con multiplicar este valor por el tiempo característico calculado previamente para el sistema con los parámetros reales del viscosímetro de Ostwald. Es decir:

$$tiempo \text{ real} = t_c * 0.7737$$

Estamos hablando de 2313.74 segundos, es decir aproximadamente 38 minutos.

4. Conclusión:

Se ha abordado el análisis teórico y computación del intercambio de sales en una célula junto con un análisis de que interpolación sería mejor en caso de que se necesitara un valor que no está presente en los datos experimentales, concluíamos este apartado diciendo que las sales tienen un comportamiento creciente hasta llegar a un establecimiento donde la célula y el medio estaría equilibrado respecto a el contenido de sales en cada uno, resultado de la difusión temporal que sufre. Además, se consiguió sacar el valor del coeficiente de difusión másica. Por último, se vieron que tanto la solución analítica como la numérica generan una gran aproximación y es casi indiferente que método usar pues los errores eran prácticamente despreciables.

En la segunda parte de la práctica se observó que el parámetro α es el principal motivo por el cual el vaciado es más o menos rápido. Para valores altos de α , vaciado más rápido. Hallar la solución del sistema se podría hacer tanto con la solución numérica como con la solución analítica pues el error entre estos es de un orden pequeño. Con la visualización 2D y 3D se refuerza lo visto anterior y finalmente se aplica la edo adimensional en un caso real del viscosímetro de Ostwald donde se estimula un tiempo de vaciado bastante coherente. Con todo esto se puede concluir que sistemas delgados o con menores viscosidades se vacían más rápido.

5. WEBGRAFÍA:

Bibliografía 1- Contexto del instrumento Ostwald

https://net-interlab.es/viscosimetro-de-ostwald/#Que_es_la_viscosidad_y_cual_es_su_importancia