

Universidad Nacional Autónoma de México

Posgrado en Ingeniería

Facultad de Química

**Simulación de Fluidos Viscoelásticos
utilizando Modelos Cinéticos y el Método
de Elemento Espectral**

Tesis

que para obtener el grado de

DOCTOR EN INGENIERIA

presenta

M. en I. René Osvaldo Vargas Aguilar

Tutor Principal: Dr. Octavio Manero Brito

México D.F.

2008



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado

Presidente : Dra. Catalina Elizabeth Stern Forgach

Secretario : Dr. Eduardo Vivaldo Lima

Vocal : Dr. Abraham Medina Ovando

1er. Suplente : Dr. Angel Enrique Chávez Castellanos

2do. Suplente : Dr. Octavio Manero Brito

Juan y Eva
Alejandra
Elizabeth y Juan Carlos
Sergio, Dany y Andy
María de los Angeles

Agradecimientos

En los más de cuatro años que se llevó el hacer esta tesis, sobran los agradecimientos a muchas personas e instituciones que desfilaron durante este tiempo.

A la facultad de Química y al Instituto de Investigaciones en Materiales de la máxima casa de estudios la UNAM. Al departamento de matemáticas de la Universidad de Aberystwyth y la escuela de matemáticas de la Universidad de Cardiff.

A CONACYT por la beca otorgada.

A mi tutor el Dr. Octavio Manero por su asesoría, consejos y ayuda para realizar mis estancias en el Reino Unido.

A mi co-tutor el Dr. Timothy N. Phillips, por su asesoría en el área de reología computacional y seguimiento del trabajo vía electrónica, además de ser una excelente persona.

A mi comité tutorial y jurado el Dr. Enrique Chávez, el Dr. Roberto Zenit, la Dra. Catalina Stern, el Dr. Abraham Medina y el Dr. Eduardo Vivaldo cuyos comentarios y críticas fortalecieron este trabajo.

Al círculo de amigos que siempre ha estado a mi alrededor: Pedro, Hugo, Oscar, Noé y Martín.

A mis amigos y miembros honorables de la comunidad de la ficha: Julio, Amadeo, Jorge y Enrique.

A mis amigos de Aberystwyth y Cardiff: Paul, Joe, Nest, Alison, Roel, Kristien, Keith, Al, Tim, Anna, Claire, Nathan, Vippal, Peter,... por gratificante y divertido el tiempo de mis estancias en Gales.

Al club de frontenis: Ivan, Ulises, el gato, Fernando, Don Gil, Joel, Nacho, Eric, Lic. Victor,...

A mis amigos y compañeros del IIM: Enrique, Blanca, Eduardo, Nacho, Salvador, Selena, Elizabeth, Lupita, Fausto, Karla e Issis.

Y a todas las personas que he olvidando en este momento, muchas gracias. ~

Resumen

En esta tesis se utilizan métodos numéricos robustos para resolver las ecuaciones que modelan el flujo de soluciones poliméricas diluidas alrededor de un cilindro o una esfera. Para la discretización espacial se utiliza el método del elemento espectral y el conjunto de ecuaciones generadas se resuelve de manera iterativa. Para calcular la contribución polimérica al tensor de esfuerzos se usa un método micro-macro, el cual combina una descripción macroscópica de la cinemática con una descripción microscópica para la evolución del esfuerzo. Con la aproximación micro-macro no es necesario una ecuación constitutiva o forma cercana, además es posible utilizar modelos provenientes de teoría cinética con gran flexibilidad. La idea de utilizar simulaciones estocásticas en la dinámica de polímeros para determinar la contribución polimérica al tensor de esfuerzos en lugar de resolver una ecuación constitutiva es debida a Laso y Öttinger. En la descripción microscópica el comportamiento del fluido considera el efecto neto de la dinámica de una colección de moléculas de polímero, las cuales se modelan como objetos mecánicos simples y el esfuerzo en el fluido se determina directamente de la conformación de estos polímeros modelo.

En el caso de utilizar una ecuación constitutiva, ésta se resuelve de manera acoplada con las ecuaciones de continuidad y movimiento. Esto quiere decir que la información del estado del fluido se obtiene simultáneamente. Cuando las ecuaciones se resuelven de manera desacoplada, el esfuerzo se calcula a partir de la velocidad evaluada a un tiempo previo. En las simulaciones numéricas utilizamos un método desacoplado con el cual es posible obtener resultados a mayores números de Weissenberg.

Se resuelven los problemas de Stokes y Navier-Stokes para ser utilizados como precursores de los modelos no newtonianos además de verificar la validez del código computacional. Utilizamos tres modelos cinéticos: Hooke, FENE y FENE-P. Primero se verificó la equivalencia del modelo de Hooke con el modelo de Oldroyd-B, posteriormente se analizan los otros dos modelos cinéticos.

En las simulaciones numéricas se analizan la importancia de la viscoelasticidad, inercia, la relación de viscosidades polímero/disolvente y nivel de extensibilidad de la mancuerna, principalmente.

Abstract

In this thesis robust numerical methods have been applied to simulate the flow of dilute polymeric liquids around a cylinder and a sphere. The spectral element method is used for the spatial discretization and the generated equations are solved iteratively. The polymer contribution to the extra-stress tensor is considered using a micro-macro approach, which combines macroscopic description of the kinematics with a microscopic description for the evolution of the stress. As the micro-macro approach does not require the existence of an equivalent of approximate closed form constitutive equation, it allows for great flexibility in the kinetic theory models that can be used in numerical simulations. The idea of using stochastic simulations of the polymer dynamics to determine the polymeric contribution to the extra-stress tensor rather than solving closed form constitutive equations is due to Laso and Öttinger. In the microscopic approach the flow behavior of the fluid is regarded as the net effect of the dynamics of a large collection of polymer molecules. In this approach, polymer molecules are modelled as relatively simple mechanical objects and the stress in the fluid is determined directly from the configuration of these model polymers.

In the case of using a constitutive equation, it can be solved coupled to the conservation of mass and momentum. This means that all information about the state of the fluid is obtained simultaneously. When the equations are solved uncoupled, the stress is calculated from the velocity on the previous time level. In these simulations we use an uncoupled scheme which is possible to obtain results at higher Weissenberg numbers than the coupled schemes.

As a precursor to the solution of non-Newtonian models, the Stokes and Navier-Stokes equations are solved to show the validity of the code. We use three different kinetic models: Hookean, FENE and FENE-P models. First we validated the Brownian configuration field approach for the Hookean dumbbell model by a comparison with its macroscopic equivalent, the Oldroyd-B model, then we analyzed the other kinetic models.

Numerical simulations are performed to show the influence of the model parameters on the flow such as viscoelasticity, inertia, viscosity ratio polymer/solvent and the non-dimensional maximum extensibility parameter, b .

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Números adimensionales	5
1.2. Ecuaciones constitutivas	6
1.3. Modelos Micro-Macro	8
1.4. Descripción de los métodos numéricos utilizados	9
1.5. Fluidos viscoelásticos alrededor de cilindros y esferas	10
1.6. Código numérico	12
1.7. Justificación	13
1.8. Objetivos	14
1.9. Hipótesis	14
1.10. Organización de la tesis	15
2. Modelado	16
2.1. Ecuaciones de conservación	16
2.1.1. Conservación de masa	16
2.1.2. Conservación de momentum lineal	16
2.1.3. Conservación de momentum angular	17
2.1.4. Ecuación de conservación de energía	17
2.2. Ecuaciones constitutivas	17
2.3. Modelos Macroscópicos	18
2.4. Modelo de Oldroyd B	19
2.5. Variables adimensionales	20
2.5.1. Ecuaciones adimensionales	20

3. Ecuaciones para fluidos viscoelásticos	21
3.1. Ecuaciones constitutivas para modelos de mancuernas	21
3.2. Simulaciones estocásticas	26
3.3. Reducción de varianza	29
3.4. Método de campos de conformación brownianos	31
3.5. Esquema predictor-corrector	33
3.5.1. Nivel Microscópico	36
4. Método del elemento espectral	38
4.1. Introducción	38
4.2. Aproximación espectral	39
4.3. Problema de Sturm-Liouville	40
4.4. Polinomios ortogonales y fórmulas de cuadratura	40
4.4.1. Expansiones en términos de un sistema de polinomios ortogonales	40
4.4.2. Integración de Gauss	42
4.4.3. Integración Gauss-Lobatto	42
4.4.4. Polinomios de Legendre	43
4.5. Discretización del elemento espectral	45
4.5.1. Nivel Macroscópico	45
4.6. Discretización temporal	46
4.7. Discretización espacial	47
5. Resultados	52
5.1. Caso Newtoniano. Problema de Stokes	52
5.2. Resultados para el caso de Navier-Stokes	55
5.3. Comparación de los modelos Oldroyd-B y Hooke	58
5.4. Flujo Poiseuille en un canal rectangular	61
5.5. Modelos FENE y FENE-P	64
5.6. Análisis a alto número de Reynolds	81

5.7. Flujo alrededor de una esfera	84
5.8. Conclusiones	92
5.9. Trabajo futuro	94
A. Derivación de la Ecuación de Fokker-Planck para modelos de mancuernas	95
B. Mancuernas de Hooke en la ecuación de Fokker-Planck	98
C. Equivalencia entre las ecuaciones diferenciales estocásticas y la ecuación de Fokker-Planck	102
D. Ecuación de Poisson (2D)	104
E. Ecuaciones en componentes	108
E.1. Ecuaciones de Stokes para los problemas planar y axisimétrico	108
Bibliografía	109

Índice de figuras

1.1. Efecto Weissenberg, al girar una barra en un recipiente que contiene un líquido no newtoniano el fluido asciende la barra debido a los esfuerzos normales.	2
1.2. Hinchado del extrudido, este fenómeno aparece cuando un fluido no newtoniano es forzado a pasar por un dado o boquilla y al salir el diámetro del fluido es mucho mayor al del dado.	3
1.3. Geometrías de prototipos industriales. G.H. McKinley [73]	4
1.4. Diagrama de flujo global	15
3.1. Modelo de Rouse formado por N cuentas y $N-1$ resortes. El vector conector \mathbf{Q} proporciona la configuración interna de la molécula	22
3.2. El modelo de mancuerna	23
3.3. Modelos de Hooke y FENE	24
3.4. Método de campos de conformación brownianos; grupos locales correlacionados y reducción de varianza	32
4.1. Transformación del dominio físico al computacional	49
4.2. Malla formada por elementos espectrales	50
5.1. Contorno de los esfuerzos, velocidades y líneas de corriente para el problema de Stokes	54
5.2. Malla de trabajo para los problemas del cilindro y la esfera, formada por $K = 20$ elementos espectrales y $N = 6$	55
5.3. Contorno de los esfuerzos, velocidades y líneas de corriente para el problema de Navier-Stokes a un $Re=0.01$	57
5.4. Comparación del arrastre calculado con el Oldroyd-B model y el modelo de mancuernas de Hooke para $We=0.6$, $Re=0.01$, $N=6$ y $\beta = 1/9$. Para el modelo de Hooke $NCF=2000$ y $b=50$	59

5.5.	Contornos de los esfuerzos normales T_{xx} y T_{yy} , esfuerzo cortante T_{xy} . Lado izquierdo las predicciones del modelo de Oldroyd-B y del lado derecho las predicciones del modelo de Hooke. Los resultados mostrados son para $We=0.6$, $NCF=2000$ y $Re=0.01$	60
5.6.	Efecto de la relación de viscosidades β sobre la contribución polimérica al esfuerzo normal T_{xx} y al esfuerzo de corte T_{xy} a la salida del canal. Los resultados mostrados son para $We=1.0$, $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$, utilizando el modelo FENE.	61
5.7.	Efecto de la relación de viscosidades β sobre el perfil de velocidad. Arriba, el perfil completo, abajo, la región central del perfil. Resultados para $We=1.0$, $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$ con el modelo FENE.	62
5.8.	Efecto de la viscoelasticidad en los esfuerzos normal T_{xx} y cortante T_{xy} a la salida del canal. Resultados para $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$ utilizando el modelo FENE.	63
5.9.	Efecto de la viscoelasticidad sobre el perfil de velocidades. Arriba, el perfil completo y abajo, se muestra la región central. Resultados para $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$ utilizando el modelo FENE.	63
5.10.	Fuerza de arrastre sobre el cilindro en función del grado de aproximación del polinomio, para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=50$	64
5.11.	Evolución de arrastre utilizando el modelo FENE cambiando el número de campos brownianos $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $b=50$, para $N_f=100, 500, 1000, 2000$	66
5.12.	Efecto de la viscoelasticidad en la fuerza de arrastre sobre el cilindro, con $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $N=6$ y $b=50$	67
5.13.	Contornos de los esfuerzos y velocidades utilizando el modelo FENE. A la izquierda a $We=0.6$ y del lado derecho a $We=5$. En ambos casos para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$, $N=6$ y $b=50$	68
5.14.	Comparación de los contornos de la primera diferencia de esfuerzos normales $N1$ para el modelo FENE. $We=0.6$ (arriba), $We=3$ (en medio) y $We=5$ (abajo). Para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $b=50$, $N_f = 2000$ y $N=6$	69
5.15.	Comparación del arrastre en el cilindro utilizando los diferentes modelos con $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $b=50$, $We=0.6$ y $N=6$	72

5.16. Comparación del esfuerzo normal T_{xx} en $y = 0$ y en la superficie del cilindro utilizando diferentes modelos. Con los siguientes parámetros $We=0.6$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=50$	73
5.17. Efecto de la elasticidad sobre los esfuerzos para, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $b=50$ y $We=1$	74
5.18. Efecto de la extensión máxima en el arrastre y los esfuerzos, para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $b=50$ y $We=1$	75
5.19. Comparación del arrastre promedio en tiempo (desde $t=1.0$) para el modelo FENE en función del parámetro de extensión finita. $We=1$, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $N_f = 2000$ y $N=6$	76
5.20. Efecto de la relación de viscosidades β sobre la fuerza de arrastre y los esfuerzos utilizando el modelo FENE. $Re=0.01$, $NCF=2000$, $b=50$ y $We=1$	77
5.21. Comparación de las líneas de corriente a diferentes números de Weissenberg utilizando el modelo FENE para el flujo alrededor de un cilindro. La línea sólida es el caso newtoniano y la línea punteada es el caso viscoelástico. Los resultados presentados son para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=50$	79
5.22. Comparación de las líneas de corriente a diferentes números de Weissenberg utilizando el modelo FENE-P para el flujo alrededor de un cilindro. La línea sólida es el caso newtoniano y la línea punteada es el caso viscoelástico. Los resultados presentados son para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=50$,	80
5.23. Comparación de las líneas de corriente a dos valores de viscoelasticidad para $We=0.7$ la línea sólida y $We=2$ la línea punteada. Los resultados para $Re=10$, $NCF=2000$, $\beta =0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE.	81
5.24. Comparación de las velocidades u, v para dos valores de viscoelasticidad, $We=0.7$ la línea sólida y $We=2$ la línea punteada. Los resultados para $Re=10$, $NCF=2000$, $\beta =0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE	82
5.25. Comparación de las líneas de corriente para dos números de Reynolds, $Re=10$ (líneas sólidas) y $Re=20$ (líneas punteadas). Los resultados con $We=0.7$, $NCF=2000$, $\beta =0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE.	82

5.26. Comparación de las velocidades u, v para dos diferentes números de Reynolds, $Re=10$ las líneas sólidas y $Re=20$ las líneas punteadas. Los resultados son para $We=0.7$, $NCF=2000$, $\beta = 0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE.	83
5.27. Influencia del grado del polinomio en el arrastre y de los esfuerzos normales en el eje de simetría y la superficie de la esfera para el modelo FENE. $Re=0.01$, $We=3$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=5$	85
5.28. Influencia del grado del polinomio en el arrastre promedio en tiempo para $Re=0.01$, $We=3$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=5$	86
5.29. Efecto de la viscoelasticidad sobre la fuerza de arrastre y los esfuerzos para el modelo FENE. $Re=0.01$, $NCF=2000$ y $b=5$	87
5.30. Influencia del número de Weissenberg en el arrastre promedio en tiempo para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=5$	88
5.31. Los contornos para los esfuerzos (T_{xx}, T_{yy}, T_{xy}) y las velocidades (u, v) utilizando el modelo FENE (lado izquierdo a $We=1$ y el lado derecho a $We=6$). En ambos casos $Re = 0,01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ and $b=5$	89
5.32. Comparación de los contornos de la primera diferencia de esfuerzos normale $N1$ para el modelo FENE. $We=1$ (arriba) y $We=3.0$ (abajo). Para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $b=5$, $N_f = 2000$ y $N=6$	90
5.33. Comparación de las líneas de corriente a diferentes valores de viscoelasticidad para el flujo alrededor de una esfera utilizando el modelo FENE. La línea sólida es el caso Newtoniano. Línea punteada caso elástico. Los resultados son para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=5$	91

Índice de cuadros

5.1. Arrastre calculado por varios autores	53
5.2. Arrastre sobre la esfera	53
5.3. Fuerza de arrastre sobre el cilindro variando el número de Weissenberg	65

Nomenclatura

a	Diámetro del cilindro o esfera
A	Matriz de esfuerzos
A_N	Operador de Laplace discreto
$A(x, t)$	Término convectivo de la ecuación de Fokker-Planck
b	Extensión máxima de la mancuerna
B_N	Matriz discreta de velocidad
C_N	Operador divergencia aplicado al tensor de esfuerzos
$\underline{\underline{\mathbf{d}}}$	Tensor rapidez de deformación
D_N	Operador divergencia aplicado a la velocidad
D_N^T	Operador discreto del gradiente aplicado a la presión
D_{ij}	Matriz de derivadas
$D(x, t)$	Término difusivo de la ecuación de Fokker-Planck
De	Número de Deborah
\underline{f}	Fuerzas de volumen
F^*	Factor de arrastre adimensional
f^b	Fuerza browniana
f^c	Fuerza intramolecular
f^e	Fuerza externa
f^h	Fuerza hidrodinámica
h	Interpolador lagrangiano
H	Constante característica del resorte
H_N	Operador discreto de Helmholtz
$\underline{\underline{\mathbf{I}}}$	Tensor unitario
K	Número de elementos espectrales
L	Polinomio de Legendre
N	Grado de aproximación del polinomio
NCF	Número de campos de conformación
N_1	Primera diferencia de esfuerzos normales
p	Presión
P	Polinomios de Jacobi
\mathbb{P}_N	Espacio de todos los polinomios de grado $\leq N$
\mathbf{Q}	Vector de conformaciones
r	Coordenada radial
Re	Número de Reynolds
r, z, θ	Coordenadas cilíndricas
t	Tiempo
T	Temperatura absoluta
t_c	Tiempo característico
H_N	Operador discreto de Uzawa
$W(t)$	Proceso Wiener
We	Número de Weissenberg
x, y, z	Coordenadas cartesianas

Griegas

β	Relación de viscosidades disolvente/polímero
δ_{ij}	Delta de Kronecker
ζ	Coefficiente de fricción
η_p	Viscosidad del polímero
η_s	Viscosidad del disolvente
$\underline{\kappa}$	Tensor gradiente de velocidades
λ	Tiempo de relajación
λ_2	Tiempo de retardo
μ	Viscosidad de un fluido newtoniano
ξ, η	Coordenadas en los elementos espectrales
π	3.14159...
ρ	Densidad del fluido
σ	Tensor de esfuerzos total
$\underline{\tau}_p$	Contribución polimérica al tensor de esfuerzos
$\underline{\tau}_s$	Contribución del disolvente al tensor de esfuerzos
ψ	Función de distribución de conformaciones
Ψ	Función de densidad de probabilidad
ω	Función peso
Ω	Dominio computacional

Subíndices

max	Máximo
N	Espacio de funciones discretas
w	Pared

Superíndices

0	Condición inicial
n	Nivel de tiempo
$n - 1$	Nivel de tiempo previo
$n + 1$	Nivel de tiempo nuevo
$\underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{\mathbf{T}}}$	Derivada convectiva superior aplicanda sobre $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$

Capítulo 1

Introducción

πανταρχει. Heráclito

La idea principal de este trabajo es utilizar técnicas numéricas robustas para la simulación del flujo de fluidos poliméricos. Estos fluidos pertenecen a la clase de fluidos viscoelásticos, es decir, fluidos que poseen una memoria de su historia de deformación. Están presentes en muchas aplicaciones, algunos ejemplos son: aceites multigrado, procesamiento de alimentos, fluidos biológicos como sangre, etc. Una revisión del estado del arte para el modelado de fluidos poliméricos se puede ver en [9], así como en el libro de Owens y Phillips [82] que describe las principales técnicas numéricas utilizadas para la simulación de estos modelos.

Las simulaciones numéricas de fluidos viscoelásticos son de importancia práctica en el desarrollo y optimización de técnicas de procesamiento de polímeros. Como la extrusión, el moldeo por inyección, el moldeo por soplado y el mezclado. Sin embargo, en el ambiente industrial de ingeniería estas simulaciones todavía no se llevan a cabo. Las principales razones son la complejidad de **(i)** el comportamiento reológico, el cual se predice con una ecuación constitutiva, **(ii)** la determinación adecuada de sus parámetros y **(iii)** el problema numérico que se genera al acoplar las ecuaciones de conservación y la ecuación constitutiva, lo cual requiere técnicas numéricas sofisticadas. Las primeras simulaciones numéricas en geometrías diferentes a las reométricas utilizando ecuaciones constitutivas fueron desarrolladas a finales de los años setenta. Entonces hace su primera aparición el llamado **Problema numérico a alto número de Weissenberg**. Este problema consiste en la pérdida de conver-



Figura 1.1: Efecto Weissenberg, al girar una barra en un recipiente que contiene un líquido no newtoniano el fluido asciende la barra debido a los esfuerzos normales.

gencia de cualquier método numérico al incrementar el número de Weissenberg, el cual es una medida adimensional de la elasticidad del fluido. Los fluidos para los cuales la ley de Newton es válida se llaman newtonianos y el agua es el ejemplo más importante. Sin embargo, fluidos con microestructura más compleja (soluciones de polímero y fundidos) pueden exhibir otro tipo de características que no se pueden describir con la teoría newtoniana. Uno debe abandonar esta hipótesis y utilizar otra relación constitutiva para el tensor de esfuerzos que generalmente es más complicada. El comportamiento no newtoniano de los líquidos poliméricos está relacionado con su estructura y se manifiesta en un número de fenómenos físicos que no se observan en fluidos newtonianos. Algunos ejemplos son: la reducción de la viscosidad con la rapidez de corte, la aparición de esfuerzos normales en un flujo cortante simple y el hinchado del extrudido; ver [58],[98].

El comportamiento reológico de los fluidos poliméricos es muy complejo y se han generado diversas ecuaciones constitutivas para poder describirlo. La selección de una ecuación constitutiva adecuada es uno de los problemas centrales en reología. La comparación de los resultados calculados, obtenidos después de haber seleccionado una ecuación constitutiva con sus parámetros materiales adecuados, con la medi-

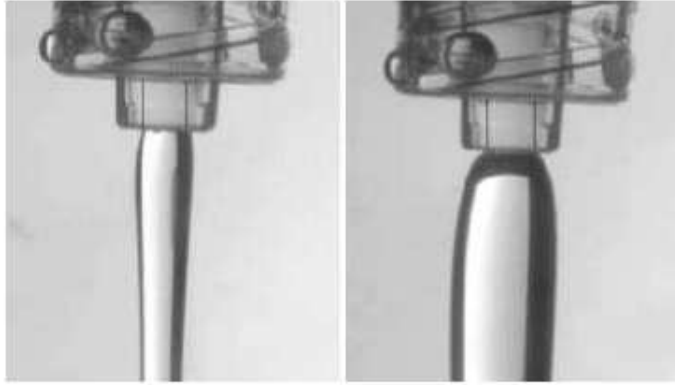


Figura 1.2: Hinchado del extrudido, este fenómeno aparece cuando un fluido no newtoniano es forzado a pasar por un dado o boquilla y al salir el diámetro del fluido es mucho mayor al del dado.

ción de datos (macroscópicos), debe revelar si la ecuación constitutiva es adecuada. En esta tesis, el flujo alrededor de un cilindro en un canal y el flujo alrededor de una esfera se utilizan para probar diferentes ecuaciones constitutivas provenientes de la teoría cinética. Estos problemas fueron seleccionados para evaluar técnicas numéricas (Hassager[47]), particularmente recomendados en el congreso **Cape Cod-meeting** [13] en 1993. El flujo alrededor de un cilindro es el análogo en dos dimensiones del descenso a velocidad constante de una esfera en un tubo cilíndrico, pero en el caso del cilindro tiene la posibilidad de medir la distribución de esfuerzos. Los fluidos viscoelásticos no sólo son utilizados para probar ecuaciones constitutivas, sino también para mejorar la selección de los parámetros del modelo. Generalmente los parámetros se determinan utilizando flujos viscométricos (i.e. flujo cortante simple o flujos extensionales), donde la cinemática es conocida y el esfuerzo se puede medir. La reología de los fluidos se caracteriza por funciones materiales, las cuales se pueden utilizar para ajustar los parámetros de las ecuaciones constitutivas. Se ha encontrado, sin embargo, que las mediciones en flujos extensionales son a menudo imposibles, no realistas o sólo se pueden obtener en un régimen de flujo muy pequeño. Por otro lado, el utilizar únicamente información de flujos cortantes no implica precisión de las predicciones cuantitativas de los flujos complejos, es decir, flujos con mezcla del comportamiento en corte o en extensión. La confrontación de

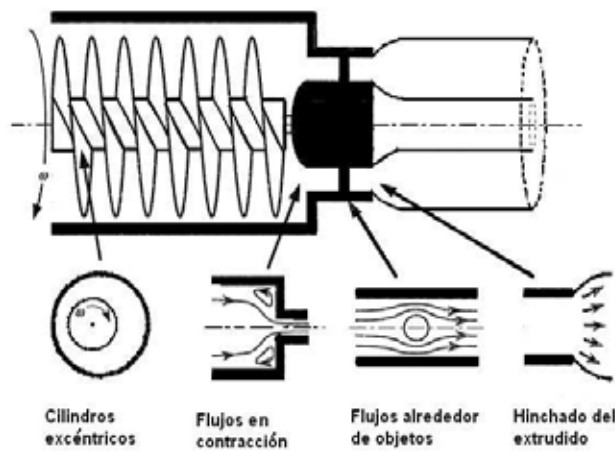


Figura 1.3: Geometrías de prototipos industriales. G.H. McKinley [73]

los resultados obtenidos de las simulaciones con los experimentos se puede realizar con:

Datos globales. Parámetros como: tamaño del vórtice, presión de entrada, (utilizado en la contracción 4:1), caída de presión, o un coeficiente de fricción (utilizado en la caída de esferas en un tubo cilíndrico).

Datos de campos. Métodos de visualización de flujo como trayectorias de líneas de corriente en estado estacionario, patrones birrefringentes (visualización del campo de esfuerzos), o patrones de deformación.

Datos locales. Métodos para medir velocidades y esfuerzos para el cálculo de las variables viscoelásticas.

Se han utilizado diferentes geometrías, ver figura 1.3, para comparar experimentos con simulaciones numéricas de soluciones de polímeros viscoelásticos

Flujos en contracción: Flujos con entrada y salida abrupta. Ejemplo: salida de boquillas.

Flujos con puntos de estancamiento: En particular el flujo planar alrededor de un cilindro confinado, flujo axisimétrico alrededor de una esfera en un tubo cilíndrico y flujos sin fronteras que pasan alrededor de un cilindro o una esfera

Flujo entre dos cilindros excéntricos que giran: Conocido en inglés como *journal bearing*

1.1. Números adimensionales

Es importante definir los siguientes números adimensionales en este punto, ya que son necesarios para las secciones posteriores. Los números adimensionales se utilizan generalmente para caracterizar problemas en ingeniería. Tenemos el número de Reynolds definido como

$$Re = \frac{\rho V L}{\eta} \quad (1.1.1)$$

donde V y L son la velocidad y longitud características del problema, respectivamente. Re caracteriza la importancia de las fuerzas inerciales con respecto a las fuerzas viscosas. Se puede utilizar tanto para fluidos newtonianos como no newtonianos. La viscoelasticidad de un fluido se puede caracterizar por el número de Weissenberg, We , definido como

$$We = \frac{\lambda V}{L} \quad (1.1.2)$$

en donde λ es un tiempo de relajación característico. Se puede interpretar como la relación de los esfuerzos normales y los esfuerzos de corte o como un tiempo característico multiplicado por una rapidez de deformación característica. Para flujos transitorios, se utiliza a menudo el número de Deborah, el cual se define como la relación del un tiempo característico del fluido y un tiempo característico de flujo, t_c :

$$De = \frac{\lambda}{t_c} \quad (1.1.3)$$

1.2. Ecuaciones constitutivas

Los modelos constitutivos para fluidos poliméricos se pueden construir principalmente dentro de dos niveles de descripción: mecánica del medio continuo [8] y teoría cinética [9]. La mecánica del medio continuo desarrolla ecuaciones macroscópicas de estado (también conocidas como ecuaciones constitutivas) que se derivan a partir de principios empíricos o macroscópicos. Los ejemplos más simples de ecuaciones constitutivas son generalizaciones de la ley de Newton con viscosidad dependiente de la rapidez de deformación. Ecuaciones constitutivas más complejas para fluidos viscoelásticos generalmente se expresan en términos de ecuaciones diferenciales parciales o integrales. Los modelos integrales son muy precisos, pero computacionalmente caros ya que se tiene que almacenar toda la historia de deformación. Un buen ejemplo es el modelo K-BKZ (Kaye-Bernstein, Kearsley y Zappas) [82]. Para algunos modelos integrales es posible encontrar su modelo diferencial equivalente. A partir de la aproximación macroscópica se han generado modelos clásicos como el Maxwell convectivo superior (UCM), el modelo de Oldroyd B y el Phan-Thien-Tanner (PTT). Para los modelos UCM y Oldroyd B el comportamiento del fluido se puede modelar con un sistema de resortes y amortiguadores. El modelo PTT se derivó de la teoría de redes, en donde el polímero forma una red con entrecruzamientos de las cadenas [58]. Estos entrecruzamientos permiten la destrucción o formación de cadenas en la red. El modelo de Giesekus [43] contiene características que hacen posible predecir la segunda diferencia de esfuerzos, la cual es una desventaja del modelo de Oldroyd B. Estos modelos constitutivos son descripciones matemáticas de relaciones entre la rapidez de deformación y los esfuerzos resultantes.

La teoría cinética estudia la dinámica de polímeros a partir de una descripción simple de cadenas formadas por resortes y barras. La mecánica estadística provee una ecuación diferencial parcial conocida como ecuación de difusión o ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad de las cantidades microestructurales y el esfuerzo se obtiene como la media de alguna función de estas cantidades. En contraste con la aproximación de mecánica del medio continuo, al utilizar la teoría

cinética permite investigaciones más flexibles dentro de los modelos, lo cual ayuda a obtener mejores predicciones del comportamiento complejo de fluidos poliméricos. En algunos casos, se pueden derivar ecuaciones constitutivas macroscópicas para el esfuerzo partiendo de modelos de teoría cinética. El ejemplo más conocido es la interpretación del modelo de Oldroyd B como una suspensión de mancuernas de Hooke (ver apéndices A y B), es decir, dos cuentas conectadas por un resorte lineal. En esta tesis utilizamos la equivalencia entre el modelo de Oldroyd B y las mancuernas de Hooke en un disolvente Newtoniano para validar las técnicas numéricas utilizadas (ver apéndice C). Las aproximaciones microscópicas y mesoscópicas en donde la dinámica actual del polímero se modela a nivel molecular y el esfuerzo macroscópico se relaciona a cantidades microscópicas, tales como la orientación y la deformación de las moléculas, se usan en los modelos Pom-Pom [72], el modelo de Hooke y los tipo FENE [9]. En general, es muy difícil derivar una ecuación constitutiva para el esfuerzo, que sea estrictamente equivalente a un modelo de teoría cinética, ya que en este sentido los modelos cinéticos serían muy complicados para investigaciones numéricas o analíticas. Por lo tanto, es de gran importancia la construcción de técnicas numéricas eficientes para simular flujos utilizando modelos para los cuales no existe una ecuación constitutiva. El camino más común es utilizar la equivalencia que hay entre las ecuaciones de Fokker-Planck y las ecuaciones diferenciales estocásticas (ver apéndice C). A partir de las ecuaciones diferenciales estocásticas se introduce un gran número de realizaciones pseudoaleatorias de cantidades microestructurales y se resuelve una ecuación diferencial parcial para cada una de las realizaciones que se discretizan utilizando alguna técnica numérica (aproximación micro-macro [80]). Todo esto se acopla con las ecuaciones de continuidad y movimiento para obtener los campos de velocidad y presión, y la versión más eficiente es el método de campos de conformación browniano [50]. Actualmente, la mayoría de las simulaciones numéricas de fluidos viscoelásticos se han realizado utilizando métodos de diferencias finitas, elemento finito y volumen finito para la discretización del espacio físico. Sin embargo los métodos pseudoespectrales y espectrales han sido exitosamente aceptados desde 1987, siendo utilizados principalmente por dos grupos, en Delaware y

en Aberystwyth [41], [83], [88], [100], [101]. En esta tesis utilizamos el método del elemento espectral utilizado por Van Os y Phillips [100] y [101].

1.3. Modelos Micro-Macro

El modelado matemático para líquidos poliméricos involucra un delicado balance entre la selección de las principales características físicas necesarias para modelar y la facilidad para derivar el modelo. Tradicionalmente se utiliza una aproximación proveniente de la mecánica del medio continuo, en la cual el esfuerzo sobre un elemento de fluido macroscópico se relaciona con la deformación por una ecuación constitutiva del tipo integral o diferencial. Aunque la aproximación macroscópica es suficiente para realizar una descripción cualitativa importante de fenómenos de flujo en algunas situaciones, ésta no es capaz de generar una descripción cuantitativa que se pueda comparar con mediciones experimentales u observaciones. En las últimas décadas se han realizado desarrollos significativos en el modelado matemático de líquidos poliméricos. Esto ha sido posible debido al rápido incremento de los recursos computacionales, lo que ha permitido trabajar con niveles más detallados de descripción física [55], [56]. Aproximaciones microscópicas basadas en consideraciones de la teoría cinética se han propuesto para complementar o corregir algunas de las desventajas de la aproximación macroscópica. De esta forma uno puede evitar el uso de una ecuación constitutiva y las dificultades asociadas con las simulaciones numéricas. La aproximación microscópica utiliza modelos de partículas ordinarias que consideran la conformación de los polímeros de tal forma que la contribución polimérica en el tensor de esfuerzos extra se determina a partir de la conformación de grupos de moléculas de polímero modelo en lugar de una ecuación constitutiva. La idea de utilizar simulaciones estocásticas en la dinámica de polímeros para determinar la contribución polimérica en el tensor de esfuerzos extra se debe a Laso y Öttinger [59]. La aproximación combina una descripción macroscópica de la cinemática con una descripción microscópica para la evolución del esfuerzo. Laso y Öttinger [59] nombraron a este método híbrido como CONNFFESSIT del inglés

(*Calculation of Non-Newtonian Flow: Finite Element and Stochastic Simulation Technique*). Este es ahora un miembro de una amplia clase de métodos de simulación conocidos como métodos micro-macro. La aproximación micro-macro tiene una gran flexibilidad para modelos de teoría cinética que se pueden utilizar en las simulaciones numéricas, ya que no requieren la existencia de una ecuación equivalente o forma cercana a una ecuación constitutiva. Además, incorpora otros efectos como polidispersidad e interacciones hidrodinámicas ya que se simula el movimiento de moléculas de polímero individual. Partiendo de una descripción simple de una cadena de polímero en términos de cuentas y resortes, se puede derivar la ecuación de Fokker-Planck o de difusión [9]. La solución de esta ecuación proporciona información de la función de densidad de probabilidad de conformaciones. La solución de la ecuación de Fokker-Planck no siempre es computacionalmente posible. Sin embargo, en los artículos de Lozinski et al. [63] y [64] se tienen ejemplos de situaciones en donde la solución de Fokker-Planck es competitiva con las técnicas estocásticas. Como una alternativa para resolver la ecuación de Fokker-Planck se puede derivar una forma cercana a una ecuación constitutiva recurriendo a una representación dimensional finita de la función de distribución de conformaciones o resolviendo una ecuación diferencial equivalente.

1.4. Descripción de los métodos numéricos utilizados

Debido a la no linealidad de los fluidos viscoelásticos, la simulación numérica continúa siendo un reto en términos de precisión, estabilidad, convergencia y la necesidad de recursos computacionales. Las técnicas numéricas para las ecuaciones constitutivas viscoelásticas diferenciales se han desarrollado en dos aspectos. Uno enfocado en los métodos adecuados para integrar las ecuaciones constitutivas, las cuales están clasificadas como hiperbólicas con respecto a las variables del esfuerzo, estos son: el método de Petrov-Galerkin de líneas de corriente (SUPG) desarrollado y modificado por Crochet y Legat [28], Fan y Crochet [32]. El método de Galerkin discontinuo

(DG) de Fortin [36] y el método de integración de líneas de corriente (SI) de Luo y Tanner [66]. El otro aspecto se enfoca al tratamiento adecuado de las ecuaciones de momento y continuidad. La teoría acepta que el campo de velocidades tiene un carácter elíptico y, junto con la presión, genera un problema de tipo silla. Este argumento estimula al esfuerzo para estabilizar esquemas numéricos permitiendo que muchos algoritmos sean estables y convergentes como son los siguientes: La formulación de la ecuación de momento elíptica explícitamente (EEME), desarrollado por King et al. [57], y complementada por Lunsmann et al. [65]. La formulación del esfuerzo elástico-viscoso separado (EVSS), desarrollado por Rajagopalan et al. [89], y la formulación adaptada (AVSS o DEVSS).

Algunas variantes de los métodos mencionados generan fusiones o mezclas de éstos como es el caso de adaptar el EVSS con el de líneas de corriente SUPG para la misma ecuación constitutiva UCM, resultando así métodos como (AVSS/SUPG) de Sun y Tanner [96], Warichet y Legat [103], y el (AVSS/SI) a través de integración de líneas de corriente. La mayoría de los métodos tienen una solución estable hasta un $We=2$. Debido a su fácil aplicación y flexibilidad, los métodos EVSS y DEVSS son populares, DEVSS tiene ventajas sobre EVSS ya que no requiere separar el esfuerzo dentro de la ecuación constitutiva.

1.5. Fluidos viscoelásticos alrededor de cilindros y esferas

El flujo alrededor de objetos circulares es un problema clásico en la mecánica de fluidos newtonianos, en particular, a alto número de Reynolds donde se observan los vórtices de Von-Kármán. El flujo alrededor de un cilindro tiene dos características importantes: (i) los elementos materiales que se mueven cerca de la línea central tienen una historia de deformación, con una subsecuente fuerte compresión, alto corte y una fuerte extensión, y (ii) la ausencia de singularidades geométricas, como aquellas que dificultan los cálculos en los flujos en contracción. Es por ésto que estos flujos son buenos candidatos para la prueba de ecuaciones constitutivas. La literatura

sobre fluidos viscoelásticos alrededor de objetos circulares se discute a continuación. Se ha encontrado que para soluciones poliméricas el efecto de la viscoelasticidad en el campo de velocidades influye por: **(i)** la posición de las paredes, **(ii)** por el grado de viscoelasticidad del fluido (caracterizado por el número de Weissenberg) y **(iii)** por la importancia relativa de la inercia (caracterizado por el número de Reynolds). En el caso del flujo de un fluido viscoelástico alrededor de un cilindro sin fronteras (con una corriente uniforme, es decir, con un campo de velocidades uniforme lejos del cilindro) los experimentos revelan, como se podía esperar, solo un pequeño efecto en las líneas de corriente Manero y Mena [70], Mena y Caswell [76]. Las líneas de corriente se desvían de la simetría antes y después del cilindro. De los resultados experimentales, Manero y Mena [70] concluyeron que la dirección del corrimiento depende del valor del número de We : el corrimiento ocurre después del cilindro cuando $We < 1$ o antes del cilindro si $We > 1$. Una gran variedad de estudios numéricos se ha enfocado al problema del flujo planar a través de un cilindro para una corriente uniforme. Pilate y Crochet [87] aplicaron un modelo para un fluido de segundo orden a bajos números de Deborah ($0 < De < 1$) y bajos números de Reynolds ($0.1 < Re < 100$). Townsend [99] consideró dos modelos de Oldroyd (uno con viscosidad constante, un fluido elástico, y otro para un fluido viscoelástico con adelgazamiento al corte) a bajos números de Deborah. Ambos estudios revelan un pequeño desplazamiento de las líneas de corriente como es observado experimentalmente por Manero y Mena [70]. Chilcott y Rallison [25] utilizaron un modelo de mancuernas elásticas con viscosidad constante (FENE-P) a número de Reynolds cercanos a cero y a elevados números de Deborah ($De=8$). Ellos no reportaron resultados de las líneas de corriente.

El problema de la esfera que desciende a lo largo de la línea central de un cilindro también se ha estudiado mucho, tanto experimental como numéricamente; revisiones detalladas se pueden encontrar en [17] y [24]. En mecánica de fluidos newtonianos este flujo se ha utilizado para medir la viscosidad de un fluido en un **viscosímetro de caída de esfera** midiendo la velocidad de descenso de la esfera. En mecánica de fluidos no newtonianos se trata de utilizar el movimiento transitorio del descen-

so de una esfera como una medida del carácter reológico de fluidos viscoelásticos en un flujo no homogéneo (ver, Becker et al. [6]). La dinámica asociada con el movimiento del fluido impacta en muchas operaciones industriales, las cuales tienen que ver con procesos de separación y procesamiento de materiales [23], [45]. Este problema también es popular para la evaluación de técnicas numéricas (Debae et al. [29], Lunsman et al. [65], Zheng et al. [106]), después de ser otro de los problemas seleccionados por la comunidad reológica (Hassager [47]). En 1993 (Brown y McKinley [13]), mostraron con este problema el importante progreso obtenido con las técnicas numéricas para las simulaciones viscoelásticas. El coeficiente de arrastre para el descenso de la esfera utilizando la ecuación de Maxwell convectiva superior (UCM) se pudo calcular con una variedad de métodos coincidiendo hasta cuatro cifras decimales.

Estudios experimentales que han trabajado con soluciones poliméricas reportan datos de la velocidad terminal de la esfera, calculan el coeficiente de arrastre además de probar diferentes ecuaciones constitutivas, Mena et al. [77]. También es muy estudiado el efecto de la proximidad de las paredes, Sigli y Countanceau [92], así como la importancia de la inercia utilizando varios modelos viscoelásticos Zheng et al. [107]. Se han presentado fenómenos inesperados tales como: la región agotada, estela negativa, discontinuidad en la velocidad, los cuales dificultan obtener resultados reproducibles [2], [10], [22], [26], [30], [42], [49], [78], [79].

1.6. Código numérico

En el capítulo 5 se presentan los resultados obtenidos con un código numérico desarrollado en el lenguaje de programación FORTRAN. Este código es un software en desarrollo en el cual varios investigadores han colaborado trabajando en la incorporación de diferentes modelos como: el modelo de UCM, el modelo PTT, el modelo Pom-Pom simple y extendido, y en donde incluimos los modelos cinéticos, bajo la asesoría del Dr. Timothy Phillips de la Escuela de Matemáticas de la Universidad de Cardiff, UK.

En la generación de las mallas se utilizó el paquete Gambit, el cual está incluido dentro del paquete comercial de dinámica de fluidos, FLUENT. Para la visualización de datos se utilizó también un paquete comercial llamado Tecplot. Todas las simulaciones se llevaron a cabo en una laptop pentium 4, a 3.06GHz y 500MB en RAM. Se utilizó el compilador g77 de GNU FORTRAN, el cual es libre y se puede bajar de www.cygwin.com y se puede trabajar en plataformas Linux y Windows.

1.7. Justificación

La dinámica no lineal de un fluido viscoelástico se ha investigado experimentalmente en 3 problemas seleccionados: (i) flujo rotacional entre discos paralelos coaxiales; (ii) entrada del flujo a través de una contracción axisimétrica abrupta; (iii) Flujo alrededor de objetos a) descenso de una esfera en un contenedor cilíndrico; b) flujo alrededor de un cilindro circular confinado en un canal rectangular. Estas geometrías de prueba sirven como prototipos de flujos complejos que típicamente se encuentran en la industria. Así es posible hacer comparaciones de las predicciones numéricas con medidas experimentales más precisas.

En la mayoría de los problemas seleccionados hay poco conocimiento, aún cualitativamente, acerca de la evolución de los fluidos viscoelásticos cuando se incrementa el nivel de viscoelasticidad. Los problemas numéricos están asociados con la formación de capas límite que se desarrollan con los fluidos viscoelásticos, o con el comportamiento extraño de las ecuaciones constitutivas resultado de la presencia de puntos singulares, discontinuidades de las fronteras y puntos de estancamiento en el dominio computacional. La solución requiere un desarrollo conjunto de cada una de las áreas de mecánica de fluidos viscoelásticos, el trabajo teórico necesario para el desarrollo de ecuaciones constitutivas, además de métodos numéricos robustos que permitan las soluciones convergentes a altos niveles de viscoelasticidad, preservando las características del problema original y finalmente, hacer experimentos precisos para la evaluación de los campos de velocidad y esfuerzos en el dominio de flujo.

1.8. Objetivos

1. Desarrollar un método de simulación de fluidos viscoelásticos alrededor de un cilindro y de una esfera.
2. Utilizar el método de elementos espectrales para la discretización de las ecuaciones de conservación.
3. Utilizar una técnica de simulación Browniana para el cálculo del esfuerzo polimérico.

1.9. Hipótesis

Con el uso de métodos espectrales para la discretización de las ecuaciones de conservación y utilizando un método desacoplado para evaluar la contribución polimérica a través de ecuaciones diferenciales estocásticas, se podrán realizar simulaciones a niveles de elasticidad mucho mayor a los obtenidos por los métodos acoplados, los cuales siguen siendo un problema abierto. Además se utilizarán diferentes modelos provenientes de la teoría cinética.

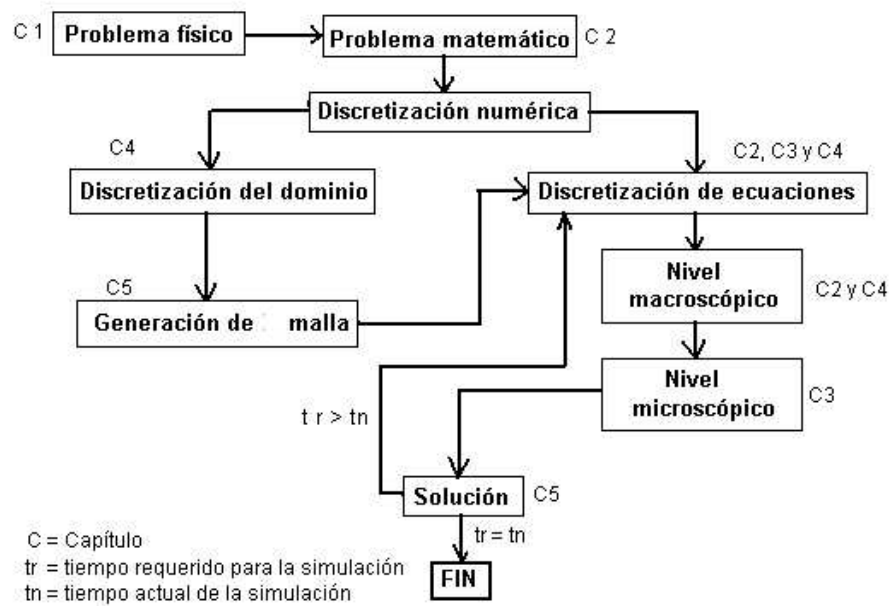


Figura 1.4: Diagrama de flujo global

1.10. Organización de la tesis

En el capítulo 2 se describe las ecuaciones de conservación, algunos números adimensionales además del modelo de Oldroyd-B. El capítulo 3 explica como se calcula el esfuerzo de una disolución polimérica utilizando modelos de teoría cinética. Se describe el método de campos de conformación brownianos y el esquema predictor-corrector utilizado para integrar las ecuaciones diferenciales estocásticas. El capítulo 5 es el de resultados, conclusiones y trabajo futuro. Se incluyen 5 apéndices que demuestran la equivalencia entre la ecuación de Fokker-Planck y las ecuaciones diferenciales estocásticas, la equivalencia del modelo de Hooke con el modelo de Oldroyd-B, un ejemplo del método espectral y las ecuaciones en componente en coordenadas cartesianas y cilíndricas. El diagrama de flujo global para la simulación se muestra en la figura 1.4.

Capítulo 2

Modelado

Alles sollte so einfach wie möglich,
aber nicht einfacher sein. *Einstein*

2.1. Ecuaciones de conservación

2.1.1. Conservación de masa

Sean $\rho(x, t)$ y $\underline{v}(x, t)$ la densidad y el campo de velocidades, respectivamente, en un punto material de la coordenada x al tiempo t . El principio de conservación de masa se puede expresar de la siguiente forma

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \underline{v} = 0, \quad (2.1.1)$$

donde D/Dt es la derivada material y $\nabla \cdot$ la divergencia. Generalmente, los líquidos se consideran incompresibles. Esta ecuación generalmente se conoce como **ecuación de continuidad**. Si el fluido es incompresible, la densidad es constante y la ecuación (2.1.1) se reduce a

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0, \quad (2.1.2)$$

2.1.2. Conservación de momentum lineal

La ecuación vectorial de movimiento proviene del principio de conservación de momentum lineal:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{f}}, \quad (2.1.3)$$

donde $\underline{\underline{f}}$ son las fuerzas de volumen, y $\underline{\underline{\sigma}}(x, t)$ es el tensor de esfuerzos.

2.1.3. Conservación de momentum angular

El principio de conservación de momentum angular requiere que el tensor de esfuerzos de Cauchy sea simétrico.

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^T. \quad (2.1.4)$$

2.1.4. Ecuación de conservación de energía

Cuando tenemos un medio compresible o problemas dependientes de la temperatura, la densidad son variables dependientes. Las ecuaciones termodinámicas de estado y la ecuación de energía proporcionan una relación entre la densidad, la energía interna y la temperatura del medio. En este trabajo se considera únicamente fluidos incompresibles, con condiciones isotérmicas.

2.2. Ecuaciones constitutivas

El tensor de esfuerzos de Cauchy se puede separar en dos contribuciones:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{\mathbf{I}}} + \underline{\underline{\mathbf{T}}},$$

en donde p es la presión, $\underline{\underline{\mathbf{I}}}$ es el tensor unitario y $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$ es el tensor de esfuerzos viscoelástico.

Las ecuaciones de conservación presentadas en la sección anterior no son suficientes para determinar las variables desconocidas correspondientes al flujo.

Para un sistema de coordenadas cartesianas, hay tres ecuaciones de campo, pero tenemos seis variables desconocidas: presión, dos componentes de la velocidad, y tres componentes independientes de los esfuerzos, por lo que se necesita cerrar el sistema para resolver las ecuaciones. Por lo tanto, se necesita una ecuación constitutiva,

la cual relaciona la historia de deformación en un punto material con el tensor de esfuerzos viscoelástico, $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$.

2.3. Modelos Macroscópicos

Las ecuaciones que gobiernan un flujo isotérmico incompresible de un fluido viscoelástico comprenden las ecuaciones de conservación de masa y momentum junto con una ecuación reológica de estado la cual relaciona el esfuerzo con la deformación, también conocida como ecuación constitutiva. Recientemente, sin embargo, aproximaciones microscópicas basadas en las consideraciones de teoría cinética se han propuesto para solucionar algunos detalles de la aproximación macroscópica. La formulación matemática de la ley de conservación de masa para un fluido isotérmico incompresible es

$$\nabla \cdot \underline{\mathbf{u}} = 0 \quad (2.3.1)$$

donde $\underline{\mathbf{u}}$ es el campo de velocidades. La conservación de momentum es

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{\mathbf{u}}}{\partial t} + \underline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \underline{\mathbf{u}} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{T}}} \quad (2.3.2)$$

donde ρ es la densidad del fluido, p es la presión, y $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$ es el tensor de esfuerzos viscoelástico. Es común expresar el tensor de esfuerzos viscoelástico de una solución polimérica como la suma de la contribución del disolvente, $\underline{\underline{\tau}}_s$, y una contribución polimérica, $\underline{\underline{\tau}}_p$. La contribución del disolvente está dada por la ecuación constitutiva para un fluido newtoniano

$$\underline{\underline{\tau}}_s = 2\eta_s \underline{\underline{\mathbf{d}}}, \quad (2.3.3)$$

donde $\underline{\underline{\tau}}_s$ es la viscosidad del disolvente y $\underline{\underline{\mathbf{d}}}$ es el tensor rapidez de deformación, dado por

$$\underline{\underline{\mathbf{d}}} = \frac{1}{2} \left(\nabla \underline{\mathbf{u}} + (\nabla \underline{\mathbf{u}})^T \right). \quad (2.3.4)$$

Con esta descomposición el tensor de esfuerzos viscoelástico, la ecuación de momentum 2.3.2 toma la forma

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \underline{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}_p + \eta_s \nabla^2 \underline{u}. \quad (2.3.5)$$

La contribución polimérica en el tensor de esfuerzos extra se puede calcular utilizando una ecuación constitutiva o a través de simulaciones estocásticas.

2.4. Modelo de Oldroyd B

Uno de los modelos considerados en esta tesis es el modelo de Oldroyd B. Este modelo se puede derivar tanto de consideraciones de mecánica del medio continuo como a partir de una descripción microscópica equivalente de la dinámica de polímeros, en términos de un grupo de mancuernas de Hooke (ver apéndice B). El modelo de Oldroyd B se puede expresar como

$$\underline{\underline{\mathbf{T}}} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\underline{\underline{\mathbf{T}}}} = 2\eta \left(\underline{\underline{\mathbf{d}}} + \lambda_2 \overset{\nabla}{\underline{\underline{\mathbf{d}}}} \right), \quad (2.4.1)$$

donde λ_1 y λ_2 son los tiempos de relajación y retardo característicos del fluido, respectivamente, y η es la viscosidad cortante. El $\overset{\nabla}{\underline{\underline{\mathbf{T}}}}$ es la derivada convectiva superior de $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$ definida como

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\mathbf{T}}}} = \frac{\partial \underline{\underline{\mathbf{T}}}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{\underline{\mathbf{T}}} - \underline{\underline{\mathbf{T}}} \cdot \nabla \underline{u} - (\nabla \underline{u})^T \cdot \underline{\underline{\mathbf{T}}} \quad (2.4.2)$$

Escribiendo $\underline{\underline{\mathbf{T}}} = 2\eta_s \underline{\underline{\mathbf{d}}} + \underline{\underline{\tau}}_p$ podemos mostrar que $\underline{\underline{\tau}}_p$ satisface la ecuación constitutiva de Maxwell convectiva superior (UCM)

$$\underline{\underline{\tau}}_p + \lambda_1 \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}_p} = 2\eta_p \underline{\underline{\mathbf{d}}} \quad (2.4.3)$$

donde $\underline{\underline{\tau}}_p$ es la contribución polimérica en la viscosidad. Si $\underline{\underline{\tau}}_s + \underline{\underline{\tau}}_p = \underline{\underline{\tau}}$, entonces

$$\underline{\underline{\tau}}_s = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \underline{\underline{\tau}}, \quad \underline{\underline{\tau}}_p = \left(1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) \underline{\underline{\tau}} \quad (2.4.4)$$

De aquí en adelante, eliminamos el subíndice de $\underline{\underline{\tau}}_p$, así que denotamos $\underline{\underline{\tau}}$ como el esfuerzo polimérico.

2.5. Variables adimensionales

En este trabajo todas las ecuaciones se expresan de forma adimensional. Las longitudes se harán adimensionales con una escala de longitud L , la velocidad con \underline{U} , el tiempo con L/\underline{U} , la presión y el esfuerzo con $(\eta\underline{U})/L$, tal que

$$x^* = \frac{x}{L}, \quad \underline{u}^* = \frac{\underline{u}}{\underline{U}}, \quad t^* = \frac{Ut}{L}, \quad p^* = \frac{Lp}{\eta\underline{U}}, \quad \underline{\underline{\tau}}^* = \frac{L\underline{\underline{\tau}}}{\eta\underline{U}} \quad (2.5.1)$$

Como se mencionó anteriormente, la viscosidad es la suma de su contribución polimérica η_p , y su contribución viscosa η_s . El número de Reynolds, Re , el número de Weissenberg, We , y el parámetro que relaciona las viscosidades β se definen por

$$Re = \frac{\rho\underline{U}L}{\eta}, \quad We = \frac{\lambda\underline{U}}{L}, \quad \beta = \frac{\eta_s}{\eta_p} \quad (2.5.2)$$

2.5.1. Ecuaciones adimensionales

En esta tesis las ecuaciones de movimiento se trabajarán en coordenadas cartesianas en dos dimensiones con componentes (x, y) , y en coordenadas cilíndricas con componentes (z, r, θ) . Los problemas definidos para el primer sistema son conocidos como planares. Como no hay dependencia con la coordenada θ , el sistema es axisimétrico o eje simétrico. Ambos sistemas de coordenadas se describen en el apéndice E. Las ecuaciones de continuidad, movimiento y el modelo de Oldroyd-B en forma adimensional generan el siguiente sistema de ecuaciones

$$\nabla \cdot \underline{u}^* = 0 \quad (2.5.3)$$

$$Re \left(\frac{\partial \underline{u}^*}{\partial t^*} + \underline{u}^* \cdot \nabla \underline{u}^* \right) = -\nabla p^* + \beta \nabla^2 \underline{u}^* + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}^* \quad (2.5.4)$$

$$\underline{\underline{\tau}}^* + We \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}^* = 2(1 - \beta) \underline{\underline{d}}^* \quad (2.5.5)$$

el cual se reduce a las ecuaciones del modelo de UCM cuando $\beta = 0$.

Capítulo 3

Ecuaciones para fluidos viscoelásticos

*Mountains trembled in the presence of the Lord,
the One of Sinai in the presence of the Lord,
the God of Israel. Judges 5:5*

3.1. Ecuaciones constitutivas para modelos de mancuernas

Hay muchas formas de obtener ecuaciones constitutivas para materiales poliméricos. Una aproximación simple es modelar las cadenas poliméricas como mancuernas. Para la derivación detallada de la ecuación constitutiva en modelos de mancuernas ver Bird et al. [9]. En esta sección, se describen las principales características del modelo elástico de mancuernas que es esencial para diferenciar los tres modelos utilizados en este trabajo.

Este modelo de mancuernas supone que las cadenas largas de polímeros están disueltas en un disolvente newtoniano. Hay otros modelos que consideran muchas cuentas y barras unidas conocidos como la cadena de Kramers, que tiene uniones universales en las cuentas y sirve para modelar moléculas flexibles. El modelo de la cadena de Rouse tiene muchas cuentas y resortes, figura 3.1. Este es sólo otra versión de la cadena de Kramers, en el cual muchas de las cuentas y barras se reemplazaron por resortes entrópicos. En ambos modelos se supone que las moléculas de polímero son cuentas punto-masa y el disolvente es un continuo que se comporta como un líquido

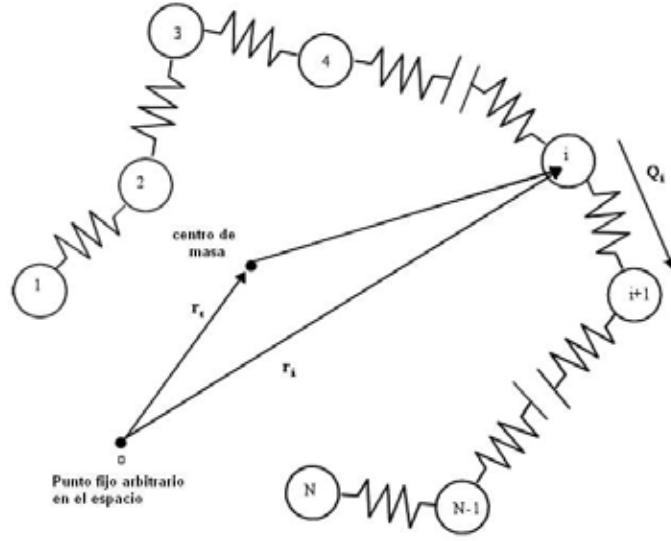


Figura 3.1: Modelo de Rouse formado por N cuentas y $N-1$ resortes. El vector conector \mathbf{Q} proporciona la configuración interna de la molécula

newtoniano. En este trabajo nos concentramos en el modelo de mancuernas elásticas. El modelo de mancuernas más simple supone que las moléculas de polímero son dos cuentas unidas por un resorte como se muestra en la figura 3.2. Las cuentas se etiquetan como $\mathbf{1}$ y $\mathbf{2}$, y el vector conector, \mathbf{Q} , el cual define todas las conformaciones de la molécula de polímero. Cada una de las cuentas experimenta cuatro tipos de fuerzas: Intramolecular ($\mathbf{F}^{(c)}$), hidrodinámica ($\mathbf{F}^{(h)}$), browniana ($\mathbf{F}^{(b)}$) y fuerzas externas ($\mathbf{F}^{(e)}$). Si se desprecia el término inercial de la ecuación de balance de fuerza, la ecuación de movimiento es

$$\mathbf{F}^{(c)} + \mathbf{F}^{(h)} + \mathbf{F}^{(b)} + \mathbf{F}^{(e)} = \underline{0} \quad (3.1.1)$$

La ecuación de continuidad para la función de distribución de conformaciones, ψ , se escribe como (Bird et al.[9])

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \langle \dot{\mathbf{Q}} \rangle \psi \right) \quad (3.1.2)$$

donde el símbolo $\langle \cdot \rangle$ representa un promedio en el espacio, $\langle \dot{\mathbf{Q}} \rangle$, es la rapidez de cambio en el espacio del vector conector \mathbf{Q} . Suponiendo que la distribución de conformaciones es independiente de la posición de las mancuernas en el espacio, entonces

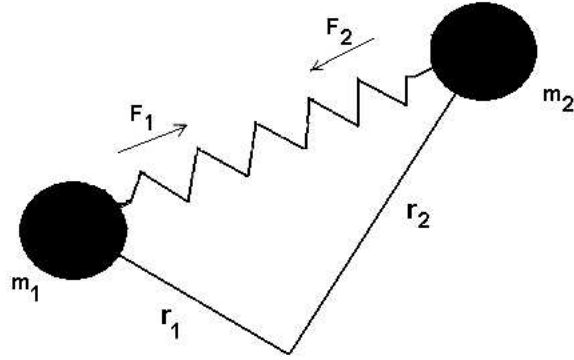


Figura 3.2: El modelo de mancuerna

la función de distribución espacial de conformaciones ψ se puede factorizar como

$$\Psi = n\psi(\mathbf{Q}, t) \quad (3.1.3)$$

donde n es el número de mancuernas por unidad de volumen. La función de distribución $\psi(Q, t)$ satisface la condición de normalización que es

$$\int \psi(\mathbf{Q}, t) d\mathbf{Q} = 1 \quad (3.1.4)$$

La fuerza intramolecular se representa por el resorte entre las cuentas cuya fuerza $\mathbf{F}^{(c)}$ está dada en términos del vector extremo-extremo \mathbf{Q} por, $\mathbf{F}^{(c)} = H\mathbf{Q}$, donde H es una constante característica del resorte. El resorte más simple es el resorte de Hooke, que tiene un módulo constante. Para esta expresión, la fuerza intramolecular es directamente proporcional a la longitud de las mancuernas; y como resultado, las mancuernas se pueden estirar indefinidamente como se indica en la figura 3.3.

Una descripción más realista de la fuerza intramolecular que incorpora una extensión finita para la mancuerna, se obtiene al introducir el módulo para una mancuerna elástica no lineal con extensión finita (FENE), proveniente de la ley de Warner (Bird et al. [9]),

$$\mathbf{F}^c = \frac{H\mathbf{Q}}{1 - \frac{Q^2}{Q_0^2}} \quad (3.1.5)$$

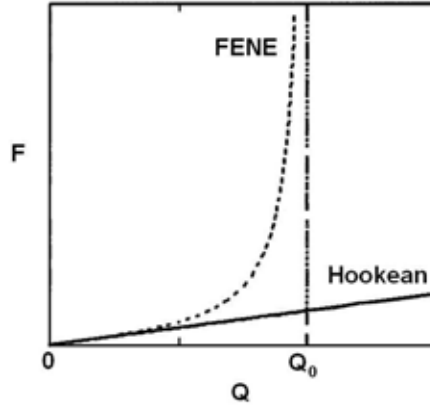


Figura 3.3: Modelos de Hooke y FENE

donde la longitud máxima de la mancuerna está dada por Q_0 . En el límite $Q_0 \rightarrow \infty$, el resorte FENE se reduce al resorte de Hooke.

La fuerza hidrodinámica, $\mathbf{F}^{(h)}$, es la fuerza de resistencia experimentada por las cuentas al moverse a través de la solución. Una expresión simple se obtiene de la ley de Stokes modificada, $\mathbf{F}^{(h)} = -\zeta \cdot (\langle \dot{r}_\mu \rangle - v)$, donde ζ es el coeficiente de fricción, $\langle \dot{r}_\mu \rangle$ es la velocidad promedio de la cuenta en el espacio y el subíndice μ indica el número de la cuenta, $\mu = 1, 2$. La fuerza de arrastre es proporcional a la diferencia entre, $\langle \dot{r}_\mu \rangle$, y la velocidad promedio del disolvente, v .

La fuerza browniana, $\mathbf{F}^{(b)}$, proviene de las fluctuaciones térmicas en el líquido y también contribuye al esfuerzo. La fuerza browniana es una función fluctuante. Sin embargo, el promedio de esta función está bien definido. Para los modelos FENE y FENE-P (-P aproximación de Peterlin, se explica más adelante), $\mathbf{F}^{(b)}$ es isotrópico con un coeficiente constante, kT , multiplicando el término del gradiente,

$$\mathbf{F}^{(b)} = -kT \frac{\partial \ln \psi}{\partial r_\mu} \quad (3.1.6)$$

donde k es la constante de Boltzmann, y T es la temperatura absoluta. La ecuación anterior supone equilibrio en el espacio de momentum, es decir, la influencia del campo de flujo en la distribución de la velocidad es ignorado.

La fuerza externa $\mathbf{F}^{(e)}$, proviene de un campo externo aplicado, como las fuerzas gravitacional y eléctrica. Aquí las fuerzas externas se desprecian.

Para obtener la expresión del tensor de esfuerzos, seguimos la derivación de Kramers (Bird et al. [9]). En un plano arbitrario moviéndose a la velocidad del fluido v , la contribución de las mancuernas al esfuerzo es de la siguiente manera (i) en ambos lados hay tensión y compresión debido a la transmisión de momentum a través del conector; (ii) las cuentas por sí mismas pueden cruzar el plano arbitrario y traer consigo cierta cantidad de movimiento angular. La contribución polimérica resultante al tensor de esfuerzos $\underline{\underline{\tau}}_p$ en forma dimensional se relaciona a la conformación molecular $\mathbf{Q}\mathbf{Q}$ por la ecuación de Kramers

$$\underline{\underline{\tau}}_p = -nH_0\langle\mathbf{Q}\mathbf{Q}\rangle + nkT\underline{\underline{\mathbf{I}}} \quad (3.1.7)$$

El tensor de extensión molecular $\mathbf{Q}\mathbf{Q}$ se hace adimensional con respecto a la longitud de equilibrio característica cuadrática media, $\mathbf{Q}_c^2 \equiv kT/H(b/b + 4)$ para el modelo de FENE-P, y así que la $tr\langle\mathbf{Q}\mathbf{Q}\rangle \equiv 3$. Aquí, \mathbf{Q}_0 representa la extensión máxima dimensional y $b = H\mathbf{Q}_0^2/kT$. La contribución polimérica a la viscosidad en el límite de rapidez de corte cero se escribe como $\eta_p = B\lambda nkT$, donde el parámetro $B \equiv b/(b+5)$ para el modelo de FENE-P y $B \equiv b/(b+2)$ para el modelo de FENE. El tensor de esfuerzos polimérico lo hacemos adimensional con respecto a la viscosidad de la disolución $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ y la escala de tiempo característica del flujo t_c . Introducimos el número de Weissenberg y obtenemos una expresión compacta para $\underline{\underline{\tau}}_p$

$$\underline{\underline{\tau}}_p = -\frac{1-\beta}{We} \left[\frac{1}{B} \langle\mathbf{Q}\mathbf{Q}\rangle - \underline{\underline{\mathbf{I}}} \right] \quad (3.1.8)$$

Para los modelos tipo FENE, es usual introducir la aproximación de Peterlin a través del promedio de $\langle\mathbf{Q}^*\mathbf{Q}^*\rangle$, es decir un promedio de grupo. Bird et al. [9] proponen el modelo FENE-P (Peterlin), donde la fuerza del conector está dada por

$$F^c = \frac{H\mathbf{Q}}{1 - \left\langle \frac{\mathbf{Q}^2}{\mathbf{Q}_0^2} \right\rangle} \quad (3.1.9)$$

y donde $\langle\cdot\rangle$ denota el promedio en el espacio de conformaciones, definido para cualquier función $f(\mathbf{Q})$ por

$$\langle f(\mathbf{Q}) \rangle = \int_{R^3} f(\mathbf{Q}) \psi(\mathbf{Q}, t) d\mathbf{Q} \quad (3.1.10)$$

Muchas otras simplificaciones del modelo FENE han sido propuestas en la literatura, tales como FENE-CR en 1988 de Chilcott y Rallison [25], y los modelos FENE- P^2 , FENE-L y FENE-LS de Lielens et al. [61]-[62].

3.2. Simulaciones estocásticas

Muchos modelos provenientes de teoría cinética para líquidos poliméricos en flujos homogéneos se pueden formular matemáticamente en términos de ecuaciones tipo Fokker-Planck para la función de densidad de probabilidad, $\Psi(x, t)$, en este caso de conformaciones

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ A(x, t) \Psi(x, t) \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} : \left\{ D(x, t) \Psi(x, t) \right\}, \quad (3.2.1)$$

donde x es un vector d -dimensional el cual describe la microestructura, $A(x, t)$ es un vector d -dimensional (término convectivo) que define la contribución determinista al modelo, y $D(x, t)$ es una matriz simétrica $d \times d$ definida positiva conocida como el tensor de difusión que define la contribución estocástica al modelo.

La ecuación de Fokker-Planck describe la evolución de la densidad de probabilidad para un proceso estocástico asociado con una ecuación diferencial estocástica. Pertenece a una variedad de sistemas dependientes del tiempo en donde la parte aleatoria tiene un papel importante en teoría cinética de líquidos poliméricos.

La ecuación de Fokker-Planck es un concepto fundamental y crucial en diferentes campos de la ciencia [91]:

- En la teoría de los procesos de Markov, donde es referida como un caso de la ecuación de Kolmogorov hacia adelante.
- En la teoría del movimiento browniano de partículas en un campo externo conocida como la ecuación de Klein-Kramers.

- En teoría cinética de polímeros en donde es conocida como ecuación de difusión.

La ecuación de Fokker-Planck para el modelo de mancuernas es, (ver derivación en apéndice A).

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \left\{ [\underline{\kappa} \cdot \mathbf{Q}] \psi - \frac{2kT}{\zeta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi - \frac{2}{\zeta} F^c \psi \right\} \right) \quad (3.2.2)$$

Donde $\underline{\kappa}$ es el tensor gradiente de velocidades.

Hay una importante equivalencia entre las ecuaciones de Fokker-Planck y las ecuaciones diferenciales estocásticas de la forma

$$dX(t) = A(X(t), t)dt + B(X(t), t)dW(t), \quad (3.2.3)$$

donde $X(t)$ es un proceso estocástico d-dimensional y $W(t)$ es un proceso de Wiener con las siguientes propiedades:

1. $W(0)=0$ con probabilidad 1,
2. Para $0 \leq s < t$, el vector aleatorio $W(t) - W(s)$ tiene componentes normalmente distribuidos con media cero y varianza $t - s$, es decir, $W(t) - W(s) \sim N(0, \sqrt{t - s})$,
3. Para $0 \leq s < t < u < v$, $W(t) - W(s)$ y $W(v) - W(u)$ son vectores aleatorios independientes.

Se puede demostrar (ver apéndice C) que sí A y B en (3.2.3) satisfacen las condiciones de Lipschitz en un espacio determinado y las condiciones de crecimiento son lineales al infinito entonces (3.2.3) tiene una solución única que es un proceso de Markov con la función de densidad de probabilidad que satisface (3.2.1) con,

$$D(X, t) = B(X, t)B^T(X, t). \quad (3.2.4)$$

El tratamiento matemático riguroso de las ecuaciones de la forma (3.2.3) desarrollado por Itô, ver [4], [38], [80]. Esta teoría es complicada, pero para nuestros propósitos es

suficiente con entender (a un nivel intuitivo) la solución de $X(t)$ de (3.2.3) cuando el límite $\Delta t \rightarrow 0$ del proceso estocástico discreto $X_n = X(t_n)$, con $t_n = n\Delta t$, $n = 1, 2, \dots$, que satisface la ecuación

$$X_{i+1} = X_i + A(X_i, t_i)\Delta t_i + B(X_i, t_i)\sqrt{\Delta t_i}\Delta W_i, \quad (3.2.5)$$

donde ΔW_n son vectores aleatorios d -dimensionales mutuamente independientes que tienen una distribución de probabilidad $N(0, 1)$. Estrictamente hablando, bajo ciertas condiciones para A y B , el esquema discreto (3.2.5) se conoce como el método explícito de Euler-Murayama, el cual converge a la solución de (3.2.5).

La ecuación diferencial estocástica equivalente a la ecuación de Fokker-Planck (3.2.2) está dada por (detalles de su derivación se encuentran en el apéndice C):

$$d\mathbf{Q}(t) = \left([\underline{\kappa}(t) \cdot \mathbf{Q}(t)] - \frac{1}{2\lambda} F^{(c)} \right) dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dW(t) \quad (3.2.6)$$

La equivalencia entre las ecuaciones de Fokker-Planck y las ecuaciones diferenciales estocásticas, además de la discretización del tipo (3.2.5), ha abierto un camino para la aplicación de simulaciones estocásticas (dinámica browniana) a modelos de la teoría cinética de líquidos poliméricos. Para realizar estas simulaciones, se necesita un gran número de realizaciones pseudoaleatorias X_n^m , $m = 1, \dots, M$ (de las variables aleatorias X_n al tiempo t_n) se introducen a una ecuación del tipo (3.2.5), las cuales se resuelven por medio de números pseudoaleatorios ΔW_n^m , $m = 1, \dots, M$. Esta técnica ha sido ampliamente utilizada desde 1970 para varios modelos en flujos homogéneos (ver [80]), siendo una técnica flexible y robusta.

En 1993 iniciaron los métodos que combinan técnicas de dinámica browniana en el cálculo de esfuerzo polimérico (con una discretización de las ecuaciones de conservación) para simular flujos complejos descritos por modelos de teoría cinética. En el caso de las discretizaciones con elemento finito para las ecuaciones de conservación, Laso y Öttinger [59] llamaron a este método híbrido CONNFFESSIT (Calculation of Non-Newtonian Flow: Finite Elements and Stochastic Simulation Technique), es conocido ahora como aproximación micro-macro. Para cada incremento en el tiempo,

el algoritmo original procede de la siguiente manera:

1. Utilizando la aproximación actual para el esfuerzo polimérico como un término fuente en la ecuación de momentum, las ecuaciones de conservación se resuelven por métodos comunes para actualizar los campos de velocidad y presión.
2. Con el campo de velocidad actualizado, éste impulsa a las moléculas modelo a través del dominio de flujo. Esto se logra integrando la ecuación diferencial estocástica asociada con los modelos de teoría cinética a lo largo de las trayectorias de las partículas.
3. El esfuerzo polimérico dentro de un elemento se determina a partir de las conformaciones de las moléculas de polímero en ese elemento.

El modelo original de la aproximación micro-macro ha sufrido varias modificaciones debido a las siguientes deficiencias. La primera, las trayectorias de un gran número de mancuernas se tienen que determinar. Segunda, las moléculas de polímero modelo se tienen que ajustar de acuerdo a la residencia en los elementos finitos que comprende la discretización del dominio computacional para determinar el esfuerzo polimérico local del elemento. Tercero, el esfuerzo calculado puede ser discontinuo y generar problemas cuando sea diferenciado para formar el término fuente en la ecuación de momentum. En subsecuentes desarrollos de la técnica estos aspectos han sido resueltos [37], [50], [74], [75].

3.3. Reducción de varianza

Para reducir el ruido estadístico en una simulación estocástica sin incrementar el número de trayectorias se utilizan técnicas de reducción de varianza. Mechior y Öttinger [74], [75] proponen métodos de reducción de varianza en el contexto de los métodos micro-macro basados en la importancia de las estrategias de muestreo y la idea de las variables de control. La importancia en el muestreo es introducir una tendencia que genera un mayor peso para las realizaciones que hacen una contribución

substantial al promedio. La tendencia se construye a partir de una solución aproximada de una ecuación diferencial estocástica para un proceso estocástico modificado que da un mayor peso a las realizaciones [74]. En la segunda aproximación, basada en las variables de control [75], la idea es encontrar una variable aleatoria que posea las mismas fluctuaciones que la variable aleatoria de interés, pero con una media cero. Así, cuando la variable de control se substraer de la variable original entonces la media permanece sin cambios mientras que las fluctuaciones se han reducido. Bonvin y Picasso [12] aplicaron una técnica de reducción de varianza, es decir, el método de variables de control, para reducir el nivel de ruido en las simulaciones basadas en campos de conformación brownianos. Chauvière [19] desarrolló un método eficiente para resolver ecuaciones estocásticas, el cual describe la evolución de los campos de conformación.

Una aproximación alternativa es utilizar grupos de mancuernas correlacionadas. La idea es que las mancuernas correspondientes a cada elemento material experimentan la misma fuerza browniana. Para precisar, el mismo grupo inicial de polímeros modelo dentro de cada elemento material permite utilizar la misma secuencia de números aleatorios. La evaluación de la divergencia del esfuerzo en la ecuación de momentum involucra la diferencia entre los esfuerzos y permite cancelar fluctuaciones y reducir la varianza. El método de campos de conformación Browniano de Hulsen et al. [50] y el método de la partícula lagrangiana de Harlin et al. [46] y de Gallez et al. [37] son ejemplos de métodos de simulación de reducción de varianza basados en la idea de grupos locales de polímeros modelo correlacionados. Estas técnicas no sólo reducen las fluctuaciones espaciales al calcular los campos de velocidad y de esfuerzos, sino que también requieren la generación de pocos números aleatorios. Esto reduce el costo computacional asociado con las técnicas de simulación estocásticas.

En el método de la partícula lagrangiana [46], la ecuación diferencial estocástica se integra al considerar un gran número de mancuernas en cada partícula lagrangiana. En cada intervalo de tiempo, la conformación de cada mancuerna se determina resolviendo la ecuación estocástica a lo largo de la trayectoria de la partícula utilizando el campo de velocidades obtenido de simulaciones de las ecuaciones de conservación.

El esfuerzo polimérico se asocia con cada partícula y entonces se aproxima tomando un promedio del grupo de todas las mancuernas. La implementación de esta idea en el contexto del método de partícula lagrangiana se complementa especificando las mancuernas correspondientes en cada partícula lagrangiana, las cuales tienen la misma conformación inicial y experimentan las mismas fuerzas brownianas.

3.4. Método de campos de conformación brownianos

Una poderosa extensión de las técnicas de reducción de varianza para el cálculo de fluidos viscoelásticos es el concepto de campos de conformación brownianos (Hulsen et al. [50]) que soluciona el problema de seguir la trayectoria de las partículas. Este es un eficiente método de reducción de la varianza y se podría considerar como una implementación euleriana de la idea de los grupos locales correlacionados. El método se genera a partir de la aproximación estándar micro-macro y se basa en la evolución de un gran número de campos continuos de conformación en lugar de utilizar partículas específicas discretas definidas por su vector de conformaciones. Las mancuernas con la misma conformación inicial experimentan las mismas fuerzas brownianas en el dominio de flujo y se combinan para formar un campo de conformaciones. El esfuerzo polimérico se describe por medio de la evolución de un grupo de campos de conformación en lugar de la evolución de grupos locales de polímeros modelo. El método provee también una representación espacial suave del campo de configuración, la cual se puede diferenciar para formar el término fuente en la ecuación de momentum.

La idea de los campos de conformación se basa en que el mismo grupo inicial de mancuernas se utiliza en cada uno de los elementos en lugar de grupos independientes, y la misma secuencia de números aleatorios se usa para construir las trayectorias de varios grupos de mancuernas, entonces la correlación de los grupos se ve reflejado en las fronteras de los elementos con historias de flujo muy similares (ver figura 3.4). Una considerable reducción de la varianza debe resultar a partir de la can-

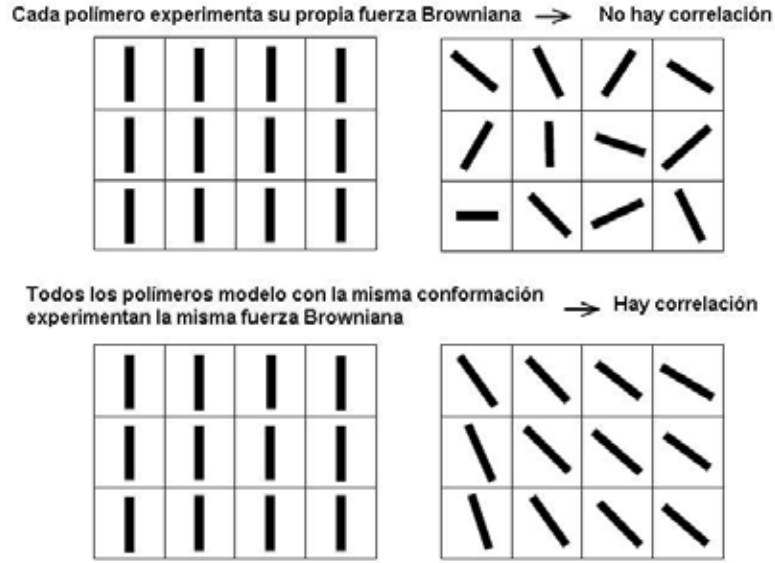


Figura 3.4: Método de campos de conformación brownianos; grupos locales correlacionados y reducción de varianza

relación de las fluctuaciones cuando se calcula la divergencia del tensor de esfuerzos en la ecuación de balance de momentum. Un grupo de N_f campos de conformación $\mathbf{Q}_j(x, t)$, $j = 1, \dots, N_f$ se introduce al sistema. Inicialmente estos campos son espacialmente uniformes y su valor es independientemente muestreado a partir de la función de distribución de equilibrio del modelo de mancuernas. La evolución del campo de conformaciones está gobernada por la siguiente ecuación diferencial estocástica

$$d\mathbf{Q}_j(t) = \left(-\underline{u}(x, t) \cdot \nabla \mathbf{Q}_j(x, t) + \underline{\kappa}(x, t) \cdot \mathbf{Q}_j(x, t) - \frac{1}{2\lambda} F(\mathbf{Q}_j) \right) dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dW_j(t) \quad (3.4.1)$$

Esta ecuación es similar a (3.2.6) excepto por un término adicional que incluye la convección de los campos de conformación por el flujo. Notar que $dW(t)$ depende únicamente del tiempo y tiene un valor constante en todo el dominio y los gradientes espaciales de los campos de conformación son bien definidos y suaves. Este procedimiento para determinar la contribución polimérica al tensor de esfuerzos viscoelástico es equivalente a seguir a las moléculas individuales de polímero modelo. En cada punto (x, t) un grupo de vectores de conformaciones se genera y experimenta

la misma historia en términos cinemáticos, pero con diferentes procesos estocásticos. Los valores locales del tensor de esfuerzos extra $\tau(x, t)$ se determinan a partir de ecuación de Kramers:

$$\underline{\underline{\tau}}(x, t) = \frac{\eta_p}{\lambda} \left(-\underline{\underline{\mathbf{I}}} + \left(\lim_{N_f \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{N_f} \mathbf{Q}_j(x, t) \otimes \mathbf{Q}_j(x, t) \right) \right) \quad (3.4.2)$$

donde el símbolo \otimes denota producto exterior de dos vectores. El fluido está inicialmente en reposo, por lo que en equilibrio, el tensor de esfuerzos extra debe ser cero. Cada componente de los campos de conformación inicial $\mathbf{Q}_m(x, t_0)$ satisface una ley normal escalar espacial independiente con media cero y varianza de la unidad, por lo tanto

$$\lim_{N_f \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{N_f} \mathbf{Q}_j(x, t) \otimes \mathbf{Q}_j(x, t) = \underline{\underline{\mathbf{I}}} \quad (3.4.3)$$

En la práctica, se tiene que truncar la suma (3.4.2) para evaluar el esfuerzo viscoelástico utilizando un número finito de campos de conformación. Para N_f suficientemente grande, el teorema del límite central cita que el error estadístico del esfuerzo extra es proporcional a $1/\sqrt{N_f}$, lo cual significa que la convergencia numérica hacia la solución libre de ruido es del orden de $O(1/\sqrt{N_f})$. Esto significa que la ecuación (3.4.1) se tiene que resolver muchas veces, típicamente para $N_f = O(10^3)$, para obtener soluciones con bajo nivel de ruido y ésto explica el porqué la aproximación microscópica es computacionalmente cara.

3.5. Esquema predictor-corrector

Una ruta para construir métodos de integración más eficientes para ecuaciones diferenciales estocásticas está inspirado en los esquemas predictor-corrector clásicos, los cuales se recomiendan cuando se requieren soluciones muy precisas para las ecuaciones (ver Öttinger [80]). Una ventaja importante de los métodos del tipo predictor-corrector es que la diferencia entre el predictor y el corrector provee información acerca de los errores locales en cada paso, lo cual se puede utilizar para hacer más rápidas las simulaciones. Estos esquemas pueden ser vistos como los primeros

pasos de una solución iterativa de ecuaciones implícitas. En esta sección se implementa un esquema de primer orden predictor-corrector para el modelo FENE y se modificará para el modelo de FENE-P.

El paso inicial de un esquema de primer orden predictor-corrector para un modelo de mancuernas es obtener una aproximación $\bar{\mathbf{Q}}^{n+1}$ utilizando el predictor

$$\bar{\mathbf{Q}}(t_{j+1}) = \mathbf{Q}(t_j) + \left[\underline{\kappa}(t_j)\mathbf{Q}(t_j) - \frac{1}{2\lambda}F(\mathbf{Q}(t_j)) \right] \Delta t_j + \sqrt{\frac{\Delta t_j}{\lambda}} \Delta W(t_{j+1}) \quad (3.5.1)$$

el cual es similar a la ecuación (3.2.5) con un esquema tipo Euler. El vector $\bar{\mathbf{Q}}^{n+1}$ es el predictor de \mathbf{Q}^{n+1} , y éste se corrige utilizando el corrector en el siguiente paso de este procedimiento iterativo

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(t_{j+1}) = & \mathbf{Q}(t_j) + \left[\frac{1}{2}\kappa(t_{j+1})\bar{\mathbf{Q}}(t_{j+1}) + \frac{1}{2}\kappa(t_j)\mathbf{Q}(t_j) \right] \\ & - \frac{1}{2\lambda} \left[\frac{1}{2}F(\bar{\mathbf{Q}}(t_{j+1})) + \frac{1}{2}F(\mathbf{Q}(t_j)) \right] \Delta t_j \\ & + \sqrt{\frac{\Delta t_j}{\lambda}} \Delta W(t_{j+1}) \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Se debe de tener cuidado debido a la singularidad en la ley del resorte en el modelo FENE. Para cualquier incremento de tiempo, si el esquema de Euler se aplica para las mancuernas tipo FENE existe cierta probabilidad de que la extensión máxima permitida sea rebasada. Öttinger [80] propone dos soluciones para evitar este problema. La primera es rechazar los valores que exceden la extensión máxima. Pero es algo delicado con un incremento de tiempo finito tener una extensión muy cercana al máximo valor permitido de b , ya que teniendo una deformación grande el desplazamiento resultaría al siguiente incremento de tiempo. Por lo tanto, Öttinger sugiere descartar todas las posibilidades en donde el valor sea mayor al requerido.

$$\mathbf{Q}^2 > \left(1 - \sqrt{\frac{\Delta t}{\lambda}} \right) b \frac{k_B T}{H} \quad (3.5.3)$$

Con esta restricción, los efectos del flujo no se toman en cuenta y así se obtiene un algoritmo débil de primer orden. Los incrementos de tiempo se deben seleccionar

pequeños para que no haya cambios bruscos en las conformaciones en presencia de flujo. La segunda posibilidad de evitar conformaciones que no tienen significado físico, y lo que Öttinger propone en este caso es un algoritmo implícito, en donde también se puedan utilizar incrementos grandes de tiempo. Este algoritmo es similar al esquema predictor-corrector utilizado para el modelo FENE-P, y se utilizará para comparar ambos modelos. Se considera un algoritmo semiimplícito, en el cual el único término no lineal es la ley de fuerza del resorte y será tratado implícitamente, mientras que los términos lineales se tratan con el esquema predictor-corrector (3.5.1) y (3.5.2),

$$\bar{\mathbf{Q}}(t_{j+1}) = \mathbf{Q}(t_j) + \left[\kappa(t_j) \mathbf{Q}(t_j) - \frac{1}{2\lambda} \frac{\mathbf{Q}(t_j)}{1 - \mathbf{Q}^2(t_j)/b} \right] \Delta t_j + \sqrt{\frac{\Delta t_j}{\lambda}} \Delta W(t_{j+1}), \quad (3.5.4)$$

y

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{1}{4\lambda} \frac{\Delta t_j}{1 - \mathbf{Q}^2(t_{j+1})/b} \right] \mathbf{Q}(t_{j+1}) &= \mathbf{Q}(t_j) + \frac{1}{2} \left[\kappa(t_{j+1}) \bar{\mathbf{Q}}(t_{j+1}) + \kappa(t_j) \mathbf{Q}(t_j) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2\lambda} \frac{\mathbf{Q}(t_j)}{1 - \mathbf{Q}^2(t_j)/b} \right] \Delta t_j \\ &\quad + \sqrt{\frac{\Delta t_j}{\lambda}} \Delta W(t_{j+1}). \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

La dirección de $\mathbf{Q}(t_{j+1})$ es el lado derecho de (3.5.5), mientras que la longitud de $\mathbf{Q}(t_{j+1})$ se puede determinar formando una ecuación cúbica a partir de (3.5.5) en $\mathbf{Q}(t_{j+1})$. Tenemos que la longitud de $\mathbf{Q}(t_{j+1}) = x$ y la longitud del vector el lado derecho de (3.5.5) es una L arbitraria, entonces

$$\left[1 + \frac{1}{4\lambda} \frac{\Delta t_j}{1 - \mathbf{Q}^2(t_{j+1})/b} \right] x = L, \quad (3.5.6)$$

es decir

$$g(x) := x^3 - Lx^2 - \left[1 + \frac{1}{4\lambda} \right] bx + Lb = 0. \quad (3.5.7)$$

Ahora si $L = 0$ entonces $x = 0$ es una solución. Para $L > 0$, $g(0) > 0$ y $g(\sqrt{b}) < 0$ y por lo tanto hay una solución en el intervalo $[0, \sqrt{b}]$. Ya que $g(x) \rightarrow +\infty, -\infty$

cuando $x \rightarrow +\infty, -\infty$, existen soluciones en los intervalos $(-\infty, 0)$ y (\sqrt{b}, ∞) . Por lo tanto, la ecuación cúbica en $Q(t_{j+1})$ tiene una solución única en $[0, \sqrt{b}]$.

Para el modelo FENE-P en la expresión de Kramers (3.4.2) para el esfuerzo polimérico se multiplica por el factor $\frac{b+d}{b}$, donde d es la dimensión del espacio de conformaciones. También se necesita una modificación para la expresión de Kramers en el modelo FENE debido a que la varianza del campo de conformaciones en equilibrio es $\sqrt{\frac{b}{b+d+2}}$. Por lo tanto, la expresión de Kramers (3.4.2) se multiplica por el factor $\frac{b+d+2}{b}$ para el modelo de FENE.

3.5.1. Nivel Microscópico

La discretización temporal de la ecuación de evolución de conformaciones de las mancuernas se lleva a cabo utilizando el esquema Euler-Murayama con un tiempo estocástico $\Delta s = \Delta t/M$, donde $M \geq 1$. En el intervalo de tiempo $[t_n, t_{n+1}]$, se inicia el esquema en $\mathbf{Q}_i^{n,0} = \mathbf{Q}_i^n$ y después se resuelve la ecuación diferencial estocástica siguiente:

$$\mathbf{Q}_i^{n,m} = \mathbf{Q}_i^{n,m-1} + \left(\kappa^n \mathbf{Q}_i^{n,m-1} - \frac{1}{2\lambda} F(\mathbf{Q}_i^{n,m-1}) \right) \Delta s + \sqrt{\frac{\Delta s}{\lambda}} \Delta W_i^m, \quad (3.5.8)$$

para $m = 1, \dots, M$. Finalmente, utilizamos $\mathbf{Q}_i^{n+1} = \mathbf{Q}_i^{n,m}$ para calcular la contribución polimérica del tensor se esfuerzos extra en el nuevo intervalo de tiempo t^{n+1} , antes de pasar a la etapa macroscópica

$$\underline{\underline{\tau}}^{n+1} = \frac{\eta_p}{\lambda} \left(-\underline{\underline{\mathbf{I}}} + \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \mathbf{Q}_i^{n+1} \otimes F(\mathbf{Q}_i^{n+1}) \right) \quad (3.5.9)$$

Los componentes para el incremento de los procesos Wiener, $\Delta W_i^m = W_i^m - W_i^{m-1}$, en donde ΔW_i^m son todas la variables aleatorias independientes valuadas-reales con media 0 y varianza uno. Por lo tanto, la simulación se puede llevar a cabo tan pronto como las variables aleatorias requeridas sean generadas en la computadora. Ahora, como las máquinas son deterministas, es decir las computadoras generan únicamente *números pseudoaleatorios*, por lo tanto, el generar números aleatorios independientes en una computadora es una difícil área de estudio. Öttinger comenta

a cerca de los generadores de números aleatorios en [80]. Los números aleatorios para las simulaciones de esta tesis se producen por un generador de números aleatorios Gaussiano RANGLS desarrollado por Öttinger [80] y lo único que requiere es una **semilla** para iniciar la secuencia.

Capítulo 4

Método del elemento espectral

Estoy preparado para lo peor,
pero espero lo mejor. *Disraeli*

4.1. Introducción

El método de elementos espectrales (MEE) es una técnica de residuos ponderados de alto orden (tipo-p) para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales.

$$\mathcal{L}(u) = f \in \Omega, \quad (4.1.1)$$

Aquí \mathcal{L} es un operador diferencial continuo definido positivo y $f \in C^0$ combina la generalidad de las técnicas de elemento finito (tipo-h) con la rápida convergencia de los métodos espectrales [15], [31]. El tratamiento de geometrías complejas Ω con los métodos espectrales se realiza a través de la descomposición de dominio.

El dominio computacional se divide en K elementos $\Omega^k \in \Omega$ del tipo espectral, en cada uno de los cuales las variables se aproximan por expansiones polinomiales de productos tensoriales de enésimo orden. Se utilizan operadores variacionales y cuadraturas numéricas tipo Gauss se utilizan para generar un conjunto de ecuaciones discretas $Au = f$, utilizando así métodos iterativos rápidos [15]. Este tipo de discretización produce algoritmos numéricos que se han probado tanto en procesadores en serie como en paralelo, computacionalmente eficientes, [53]. Se ha demostrado [69] que la convergencia de la aproximación espectral hacia la solución

exacta es exponencial, en donde la convergencia se logra incrementando el grado de aproximación del polinomio N , manteniendo el número de elementos K fijos.

Las limitaciones del método del elemento espectral es su falta de flexibilidad con respecto a la generación de mallas para geometrías complejas y la capacidad de refinamiento local. Estas limitaciones son temas de investigación dentro de las áreas de generación de mallas, refinamiento de malla adaptable y el tratamiento de fronteras móviles. Las ideas básicas del método del elemento espectral se enfocan en la descomposición del dominio, el cual consiste de elementos idénticos, así que la descomposición del dominio debe satisfacer ciertas propiedades que son comunes en los elementos espectrales. Ver ejemplo en apéndice D.

4.2. Aproximación espectral

La aproximación espectral de la solución de un problema diferencial se considera como la expansión finita de las funciones propias de un problema de Sturm-Liouville. Muchas aproximaciones numéricas se basan en la expansión de una función u en términos de una secuencia infinita de funciones ortogonales ϕ_k :

$$u = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k \phi_k \quad (4.2.1)$$

La aproximación más común son las funciones que se desarrollan con series de Fourier. El método de Fourier es espectralmente preciso: éste representa una excelente aproximación de la función aún si la serie es truncada después de unos cuantos términos. Las funciones propias de un problema de Sturm-Liouville singular tienen precisión espectral en la expansión de cualquier función suave. El comportamiento en las fronteras no se tiene que restringir ya que las funciones propias de los problemas más comunes de Sturm-Liouville son polinomios ya que son extensiones naturales del sistema de Fourier para la aproximación de funciones no periódicas.

4.3. Problema de Sturm-Liouville

El problema de Sturm-Liouville es un problema de valores propios en el intervalo $(-1, 1)$, de la forma

$$-(pu')' + qu = \lambda wu, \quad (4.3.1)$$

con las condiciones de frontera adecuadas para u . Los coeficientes p , q y w son funciones reales valuadas definidas como:

- p es continuamente diferenciable, estrictamente positiva en $(-1, 1)$, y continua en $x = 1$,
- q es continua, no negativa y limitada en $(-1, 1)$,
- La función peso w es continua, no negativa e integrable sobre $(-1, 1)$.

La precisión espectral se garantiza únicamente cuando el problema es singular, es decir, cuando p se desvanece en las fronteras.

4.4. Polinomios ortogonales y fórmulas de cuadratura

Los polinomios ortogonales constituyen la base de los métodos espectrales en donde, la teoría básica se describe a continuación. Más detalles se pueden encontrar en [15], [53], [69], [82], [97].

4.4.1. Expansiones en términos de un sistema de polinomios ortogonales

Tenemos que $w(x)$ es una función positiva en $(-1, 1)$. Consideramos el espacio $L_w^2(-1, 1)$ de las funciones v tal que

$$\|v\|_w = \int_{-1}^1 |v(x)|^2 w(x) dx, \quad (4.4.1)$$

es finito. El producto interno asociado es

$$(u, v)_w = \int_{-1}^1 u(x)v(x)w(x)dx, \quad (4.4.2)$$

suponemos que $\{p_k\}_{k=0,1,\dots}$ es un sistema de polinomios algebraicos (donde el grado de $\{p_k\}$ es igual a k) y son mutuamente ortogonales en $L_w^2(-1, 1)$ en términos del sistema $\{p_k\}$:

$$P_N u = \sum_{k=0}^N u_k p_k$$

donde

$$u_k = \frac{1}{\|p_k\|_w^2}$$

Debido a la ortogonalidad de p_k , $P_N u$ es la proyección ortogonal en $L_w^2(-1, 1)$ de u sobre el espacio \mathbb{P}_N de todos los polinomios de grado $\leq N$, es decir

$$(P_N u, v)_w = (u, v)_w \quad \text{para todo } v \in \mathbb{P}_N$$

El teorema de Weierstrass implica que el sistema $\{p_k\}$ está completo en $L_w^2(-1, 1)$ así que para todo $u \in L_w^2(-1, 1)$ tenemos

$$\|u - P_N u\|_w \rightarrow 0 \quad \text{cuando } N \rightarrow \infty.$$

Los polinomios ortogonales con respecto a la función peso $w(x) = (1-x)^{J_\alpha}(1+x)^{J_\beta}$ con algún $J_\alpha, J_\beta > -1$ se conocen como polinomios de Jacobi, generalmente se denotan como $P^{J_\alpha, J_\beta}(x)$ y normalizando $P^{J_\alpha, J_\beta}(1) = \binom{k+J_\alpha}{k}$.

Los polinomios de Jacobi alternativamente se definen también como las funciones propias del problema singular de Sturm-Liouville:

$$-((1-x)^{1+J_\alpha}(1+x)^{1+J_\beta}u')' = \lambda_k(1-x)^{J_\alpha}(1+x)^{J_\beta}u,$$

con $\lambda_k = k(k+J_\alpha+J_\beta+1)$. La importancia de los polinomios de Jacobi en los métodos numéricos radica en el hecho de que las expansiones infinitas de funciones continuas en términos de éstas garantiza la convergencia espectral, la cual es más

rápida que cualquier potencia de N . De manera formal se puede demostrar que para cualquier función $u(x) \in L_w^2(-1, 1)$ tal que su m -ésima derivada $u^{(m)}(x)$ está en el mismo espacio que

$$\|u - P_N u\|_w \leq C^{N-m} (\|u^{(m)}\|_w + \|u\|_w),$$

donde $C > 0$ depende únicamente de m .

En el caso en que $w = 1$ y $J_\alpha = J_\beta = 0$ los polinomios de Jacobi se conocen como polinomios de Legendre.

4.4.2. Integración de Gauss

Tenemos que x_1, \dots, x_N son las raíces del N -ésimo polinomio ortogonal p_N y tenemos que w_1, \dots, w_N son las soluciones del sistema lineal

$$\sum_{j=1}^N (x_j)^{k-1} w_j = \int_{-1}^1 x^{k-1} w(x) dx, \quad k = 1, \dots, N,$$

Entonces, $w_j > 0$ para $j = 1, \dots, N$ y

$$\sum_{j=1}^N p(x_j) w_j = \int_{-1}^1 p(x) w(x) dx, \quad (4.4.3)$$

para todos los polinomios $p(x) \in \mathbb{P}_{2N-1}$. Los números positivos w_j se llaman pesos de la cuadratura. La regla de cuadratura es óptima en el sentido de que no es posible encontrar $x_j, w_j > 0, j = 1, \dots, N$ tal que (4.4.3) es válida para todos los polinomios $p(x) \in \mathbb{P}_{2N}$.

Las raíces que además corresponden a los puntos de colocación están todas en el interior del intervalo $(-1, 1)$. La integración Gauss-Lobatto incluye estos puntos, por lo tanto las condiciones de frontera se pueden incluir en ambos puntos terminales.

4.4.3. Integración Gauss-Lobatto

Tenemos que $-1 = x_0, x_1, \dots, x_N = 1$ son las raíces del polinomio $q(x) = p_{N+1}, ap_N + bp_{N-1}$ donde los números a y b son escogidos para que $q(\pm 1) = 0$ y luego w_0, \dots, w_N son las soluciones del sistema lineal.

Entonces, $w_j > 0$ para $j = 1, \dots, N$ y

$$\sum_{j=0}^N (x_j)^k w_j = \int_{-1}^1 x^k w(x) dx,$$

Entonces,

$$\sum_{j=0}^N p(x_j) w_j = \int_{-1}^1 p(x) w(x) dx, \quad (4.4.4)$$

para todos los polinomios $p(x) \in \mathbb{P}_{2N-1}$.

Utilizaremos la integración Gauss-Lobatto sólo si $w = 1$, es decir, con los polinomios de Legendre, por lo que ésta se conoce comúnmente como integración Gauss-Lobatto-Legendre (GLL). Al igual que el caso de integración GL, se pueden introducir polinomios de Legendre para interpolación, $h_i(x) \in \mathbb{P}_N$, $i = 0, \dots, N$ tal que $h_i(x_j) = \delta_{ij}$, $i, j = 0, \dots, N$, y en la matriz de diferenciación $D_{ij} = h'_i(x_j)$. Las fórmulas y el código en FORTRAN para calcular x_j , w_j y D_{ij} correspondientes a los polinomios de Legendre se pueden encontrar en [15].

4.4.4. Polinomios de Legendre

Los polinomios de Legendre son las funciones propias de un problema singular de Sturm-Liouville

$$((1-x^2)L'_k(x))' + k(k+1)L_k(x) = 0 \quad (4.4.5)$$

que es el problema de Sturm-Liouville (4.3.1), con

$$\begin{aligned} p(x) &= (1-x^2) \\ q(x) &= 0, \\ w(x) &= 1. \end{aligned}$$

Los polinomios satisfacen la siguiente relación de recurrencia

$$L_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1} x L_k(x) - \frac{k}{k+1} L_{k-1}(x), \quad (4.4.6)$$

donde $L_0(x) = 1$ y $L_1(x) = x$

La relación para las derivadas es

$$(1 - x^2)L'_k(x) = kL_{k-1}(x) - kxL_k(x), \quad (4.4.7)$$

donde

$$L'_k(\pm 1) = (\pm 1)^k \frac{k(k+1)}{2}. \quad (4.4.8)$$

Los pesos se pueden expresar en términos de los nodos. Para el caso de Legendre-Gauss-Lobatto: $x_0 = -1$, $x_N = 1$, x_j ($j=1, \dots, N-1$) que son los ceros de L'_N :

$$w_j = \frac{2}{N(N+1)} \frac{1}{[L'_N(x_j)]^2} \quad j = 0, \dots, N \quad (4.4.9)$$

La rutina utilizada para calcular los puntos Legendre-Gauss-Lobatto se tomó de [15].

Las funciones se aproximan utilizando los polinomios interpoladores de Lagrange basados en los puntos Gauss-Lobatto. El polinomio $I_N u$ el cual interpola una función dada u en los puntos Gauss-Lobatto se representa como

$$I_N u(x) = \sum_{j=0}^N u_j h_j(x), \quad (4.4.10)$$

en donde los coeficientes de Lagrange h_j están dados por

$$h_j(x) = -\frac{(1-x^2)L'_N(x)}{N(N+1)L_N(x_j(x-x_j))}. \quad (4.4.11)$$

Estos polinomios obedecen la siguiente relación $h_i(x_j) = \delta_{ij}$. Las derivadas de los interpoladores en los nodos se pueden calcular utilizando

$$(I_N u)'(x_i) = \sum_{j=0}^N D_{i,j} u_j. \quad (4.4.12)$$

donde $D_{i,j} = h'_j(x_i)$. Los elementos de $D_{i,j}$ están dados por

$$\begin{aligned}
D_{ij} &= \frac{L_N(x_i)}{L_N(x_j)} \frac{1}{x_i - x_j} \quad i \neq j, \\
&= -\frac{N(N+1)}{4} \quad i = j = 0 \\
&= \frac{N(N+1)}{4} \quad i = j = N \\
&= 0 \quad \text{de otro modo}
\end{aligned}$$

4.5. Discretización del elemento espectral

4.5.1. Nivel Macroscópico

La discretización temporal del término convectivo en la ecuación de momentum se lleva a cabo utilizando el método de Runge-Kutta de cuarto orden que se explicará posteriormente. Se resolverá un problema de Stokes generalizado para determinar los campos de presión y velocidad y se sumará la contribución polimérica en el tensor de esfuerzos como término fuente en la ecuación de momentum, la cual se determina utilizando una aproximación del promedio conocida como la expresión de Kramers, explicada en secciones anteriores.

$$\underline{\underline{\tau}} = \frac{\eta_p}{\lambda} \left(-\underline{\underline{\mathbf{I}}} + \langle \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \otimes F(\underline{\underline{\mathbf{Q}}}) \rangle \right). \quad (4.5.1)$$

Basado en un promedio aritmético sobre el total de las configuraciones de las mancuernas, donde el símbolo \otimes denota el producto exterior de dos vectores. Por lo tanto, en cada incremento de tiempo uno debe de resolver el siguiente problema generalizado de Stokes

$$\nabla \cdot u^{n+1} = 0 \quad (4.5.2)$$

$$\rho \left(\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + u^n \cdot \nabla u^n \right) = -\nabla p^{n+1} + \eta_s \nabla^2 u^{n+1} + \nabla \cdot \tau^n \quad (4.5.3)$$

La solución de este problema sirve para determinar la presión y velocidad para el nuevo incremento del tiempo.

4.6. Discretización temporal

La discretización de la derivada material de la velocidad en la ecuación de momentum y el esfuerzo en la ecuación diferencial estocástica se obtendrán utilizando el siguiente esquema (ver Maday et al. [69], y van Os y Phillips [101]).

Primero, la derivada material de una función G se aproxima como

$$\frac{DG}{Dt} = \frac{\partial G}{\partial t} + u \cdot \nabla G \approx \frac{1}{2\Delta t} \left(3G^{n+1} - 4\bar{G}(t^{n+1}) + \bar{\bar{G}}(t^{n+1}) \right) \quad (4.6.1)$$

El siguiente procedimiento se repite dos veces para encontrar el valor de las aproximaciones $\bar{G}(t^{n+1})$ y $\bar{\bar{G}}(t^{n+1})$ que son las soluciones al tiempo $t = t^{n+1}$ del problema convectivo únicamente.

La aproximación

$$\frac{\partial \bar{G}}{\partial t} = -u^* \cdot \nabla \bar{G}, \quad t \in [t^n, t^{n+1}], \quad \text{con} \quad \bar{G}(x, t^n) = G^n(x), \quad (4.6.2)$$

y

$$\frac{\partial \bar{\bar{G}}}{\partial t} = -u^* \cdot \nabla \bar{\bar{G}}, \quad t \in [t^{n-1}, t^{n+1}], \quad \text{con} \quad \bar{\bar{G}}(x, t^{n-1}) = G^{n-1}(x), \quad (4.6.3)$$

donde u^* es una aproximación de segundo orden para la velocidad al tiempo $n + 1$,

$$u^* = \frac{t - t^{n-1}}{\Delta t} u^n + \left(1 - \frac{t - t^{n-1}}{\Delta t} \right) u^{n-1} \quad (4.6.4)$$

Para resolver el problema de valor inicial, se utiliza el método de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4). En el método RK4, se requiere que el incremento de tiempo sea asociado con las iteraciones del RK4. Este incremento de tiempo h se define como $h = \Delta t/M$, donde M es el número de iteraciones del RK4, y $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Para un sistema cartesiano de dos dimensiones, únicamente el problema convectivo para una función G en dirección x , la definimos \bar{G}_{xx} , es

$$\frac{\partial \bar{G}_{xx}}{\partial t} = -u^* \frac{\partial \bar{G}_{xx}}{\partial x} - v^* \frac{\partial \bar{G}_{xx}}{\partial y} = f(t, x, G_{xx}) \quad (4.6.5)$$

Los valores intermedios para el primer paso del RK4 con un valor inicial $G_0 = G_{xx}(t^n)$ son:

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t^n, tk_1) = -u^* \frac{\partial tk_1}{\partial x} - v^* \frac{\partial tk_1}{\partial y}, \quad tk_1 = G_0, \\
k_2 &= f(t^n + \frac{h}{2}, tk_2) = -u^* \frac{\partial tk_2}{\partial x} - v^* \frac{\partial tk_2}{\partial y}, \quad tk_2 = G_0 + k_1 \frac{h}{2}, \\
k_3 &= f(t^n + \frac{h}{2}, tk_3) = -u^* \frac{\partial tk_3}{\partial x} - v^* \frac{\partial tk_3}{\partial y}, \quad tk_3 = G_0 + k_2 \frac{h}{2}, \\
k_4 &= f(t^n, tk_4) = -u^* \frac{\partial tk_4}{\partial x} - v^* \frac{\partial tk_4}{\partial y}, \quad tk_4 = G_0 + k_3 \frac{h}{2},
\end{aligned}$$

Lo cual genera una solución intermedia en el tiempo $t = n + h$,

$$\bar{G}_{xx}(t^n + h) = G_0 + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (4.6.6)$$

Este valor se utiliza como el valor inicial en el siguiente incremento del RK4. Después de M incrementos se obtiene la solución para $\bar{G}(t^{n+1})$. Repetimos el procedimiento para obtener $\bar{\bar{G}}(t^{n+1})$.

4.7. Discretización espacial

El método del elemento espectral [53] se aplica a la formulación débil (formulación aproximada) de las ecuaciones semidiscretas (4.5.2)-(4.5.3). Se seleccionan espacios adecuados para las funciones de las variables dependientes. La velocidad selecciona un subespacio cuyos elementos satisfacen las condiciones de frontera para la velocidad prescritos, \mathcal{V} , de $[H^1(\Omega)]^2$ donde

$$H^1(\Omega) = \{f: \text{Si } f \text{ es medible y } Df \in L^2(\Omega)\} \quad (4.7.1)$$

y

$$L^2(\Omega) = \{f: \text{Si } f \text{ es medible y } \int_{\Omega} |f|^2 d\Omega < \infty\} \quad (4.7.2)$$

Los espacios apropiados para la presión y el esfuerzo son $\mathcal{P} = [L^2(\Omega)]$ y $\mathcal{T} = [L^2(\Omega)]_s^4$, respectivamente. La formulación débil de (4.5.2) y (4.5.3) es:

encontrar $(u^{n+1}, p^{n+1}) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$, tal que

$$d(u^{n+1}, q) = 0, \quad \forall q \in \mathcal{P}, \quad (4.7.3)$$

$$\beta a(u^{n+1}, v) + \frac{Re}{\Delta t} b(u^{n+1}, v) - d^*(p^{n+1}, v) = -c(\tau^n, v) + (g^n, v) \quad \forall v \in \mathcal{V}, \quad (4.7.4)$$

en donde las formas bilineales $a(\cdot, \cdot)$, $b(\cdot, \cdot)$, $d(\cdot, \cdot)$ and $d^*(\cdot, \cdot)$ están definidas por

$$\begin{aligned} a(u, v) &= \int_{\Omega} \nabla u : \nabla v d\Omega, \\ b(u, v) &= \int_{\Omega} u \cdot v d\Omega, \\ c(\tau, v) &= \int_{\Omega} \tau : \nabla v d\Omega, \\ d(u, q) &= \int_{\Omega} \nabla \cdot u q d\Omega, \\ d^*(p, v) &= \int_{\Omega} p \nabla \cdot v d\Omega \end{aligned} \quad (4.7.5)$$

y $g^n = \rho(u^n \Delta t - u^n \cdot \nabla u^n)$. Las formas bilineales $a(\cdot, \cdot)$, $b(\cdot, \cdot)$, $c(\cdot, \cdot)$, $d(\cdot, \cdot)$ y $d^*(\cdot, \cdot)$ inducen a los operadores lineales $A : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}'$, $B : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}'$, $C : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{V}'$ y $D^* : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{P}'$ definidos por

$$\begin{aligned} [Au, v] &= a(u, v), \quad \forall u, v \in \mathcal{V}, \\ [Bu, v] &= b(u, v), \quad \forall u, v \in \mathcal{V}, \\ [C\tau, v] &= c(\tau, v), \quad \forall \tau \in \mathcal{T}, \quad \forall v \in \mathcal{V}, \\ [Du, q] &= d(u, q), \quad \forall u \in \mathcal{V}, \quad \forall q \in \mathcal{P}, \\ [D^*p, v] &= d^*(p, v), \quad \forall p \in \mathcal{P}, \quad \forall v \in \mathcal{V}, \end{aligned}$$

Utilizando esta notación, el problema dual (4.7.3)- (4.7.4) es

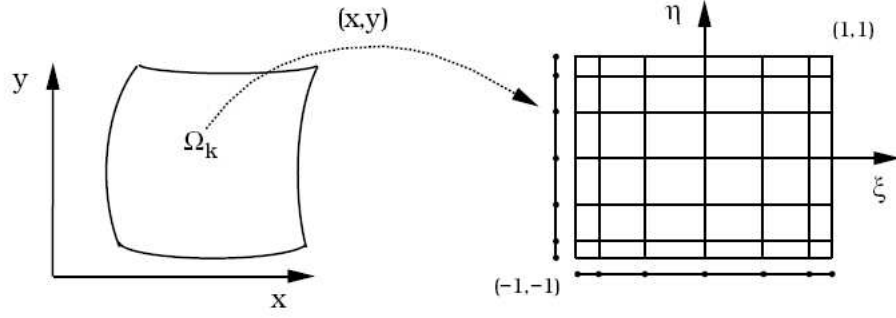


Figura 4.1: Transformación del dominio físico al computacional

$$Du^{n+1} = 0, \quad \text{en } \mathcal{P}', \quad (4.7.6)$$

$$\left[\beta A + \left(\frac{Re}{\Delta t} \right) B \right] u^{n+1} - D^* p^{n+1} = -C\tau^n + g^n, \quad \text{en } \mathcal{V}'. \quad (4.7.7)$$

En el método del elemento espectral, se construyen aproximaciones de dimensiones finitas para estos operadores. La discretización espacial del dominio físico Ω , involucra dividir el dominio en elementos espectrales que no se traslapan o sobreponen Ω_k , $1 \leq k \leq K$, así que $\bigcup_{k=1}^K \Omega_k = \Omega$. Denotamos $\mathbb{P}_N(\Omega_k)$ como el espacio de todos los polinomios sobre Ω_k de grado $\leq N$, por lo que definimos

$$P_N(\Omega) = \{ \phi : \phi|_{\Omega_k} \in \mathbb{P}_N(\Omega_k) \} \quad (4.7.8)$$

Cada uno de los elementos espectrales es trazado dentro de un elemento $D = [-1, 1] \times [-1, 1]$, donde cada punto $(\xi, \eta) \in D$ se asocia con un punto $(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)) \in \Omega_k$ por una técnica desarrollada por Gordon y Hall [44], como se muestra en la figura 4.1.

Las variables dependientes se aproximan en D utilizando interpoladores de Lagrange de grado N en las dos direcciones espaciales, basados en los puntos Gauss-Lobatto-Legendre. Todo esto genera una malla Gauss-Lobatto-Legendre dentro de los elementos espectrales. La figura 4.2 muestra la malla de los elementos espectrales para los casos del cilindro o la esfera con $K = 20$ y el grado de aproximación del polinomio de $N = 6$ dentro de cada elemento.

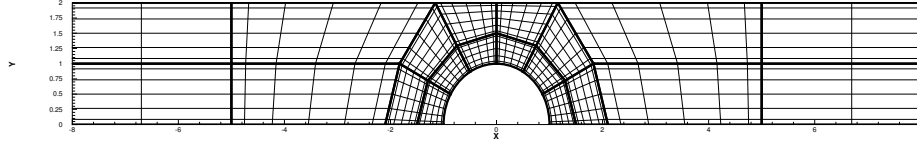


Figura 4.2: Malla formada por elementos espectrales

Los espacios de aproximación discretos deben de satisfacer una condición de compatibilidad, conocida como la condición LBB, para garantizar que el problema está bien definido. Para los elementos espectrales Maday y Patera [69] demostraron que la condición LBB se satisface cuando el espacio de aproximación para la velocidad es el espacio de polinomios $P_N(\Omega)$, y el espacio de aproximación para la presión es $P_{N-2}(\Omega)$. Se utiliza una regla de cuadratura para integrar las velocidades, al igual que las presiones. El esfuerzo se aproxima por polinomios en el espacio $P_N(\Omega)$ también, con la diferencia que permite que los componentes del esfuerzo sean discontinuos entre las fronteras de los elementos. Gerritsma y Phillips [40] han demostrado que es una condición suficiente para estabilidad del problema de Stokes correspondiente. Las representaciones de la velocidad y el esfuerzo son

$$u_N^k(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N u_{i,j}^k h_i(\xi) h_j(\eta), \quad (4.7.9)$$

$$\tau_N^k(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \tau_{i,j}^k h_i(\xi) h_j(\eta) \quad (4.7.10)$$

donde los interpoladores de Lagrange $h_i(\xi)$ se definen como

$$h_i(\xi) = -\frac{(1 - \xi^2)L'_N(\xi)}{N(N+1)L_N(\xi_i)(\xi - \xi_i)}. \quad (4.7.11)$$

Los interpoladores satisfacen la propiedad de la delta de Kronecker $h_i(\xi_m) = \delta_{im}$.

La representación de la presión es

$$p_N^k(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} p_{i,j}^k \bar{h}_i(\xi) \bar{h}_j(\eta) \quad (4.7.12)$$

en donde los interpoladores de Lagrange $\bar{h}_i(\xi)$ se definen como:

$$\bar{h}_i(\xi) = -\frac{(1 - \xi_i^2)L'_N(\xi)}{N(N+1)L_N(\xi_i)(\xi - \xi_i)}, \quad 1 \leq i \leq N-1. \quad (4.7.13)$$

La discretización utilizando elementos espectrales de la formulación débil (se refiere a la formulación aproximada del sistema de ecuaciones) obtenemos el siguiente problema discreto:

$$D_N u_N^{n+1} = 0 \quad (4.7.14)$$

$$\left[\beta A_N + \left(\frac{Re}{\Delta t} \right) B_N \right] u_N^{n+1} - D_N^T p_N^{n+1} = -C_N \tau_N^n + g_N^n \quad (4.7.15)$$

donde D_N y C_N son el operador divergencia discreto aplicado a la velocidad y al esfuerzo, respectivamente, D_N^T es el operador discreto gradiente aplicado a la presión, A_N es el operador de Laplace discreto, B_N es la matriz discreta de la velocidad, y g_N representa la forma discreta del lado derecho de (4.7.7). Eliminando la velocidad de este sistema y utilizando (4.7.15) lleva a la siguiente ecuación para la presión

$$D_N H_N^{-1} D_N^T p_N^{n+1} = -D_N H_N^{-1} (g_N - C_N \tau_N^n), \quad (4.7.16)$$

donde

$$H_N = \beta A_N + \frac{Re}{\Delta t} B_N, \quad (4.7.17)$$

es el operador discreto de Helmholtz. El operador $U_N = D_N H_N^{-1} D_N^T$ se conoce como el operador de Uzawa [39]. Simplificando, la ecuación para la presión se puede escribir como

$$U_N p_N^{n+1} = b_N, \quad (4.7.18)$$

donde b_N es el lado derecho de (4.7.17). El operador de Uzawa se invierte utilizando el método del gradiente conjugado preconditionado [53].

Capítulo 5

Resultados

Todo hábito hace nuestra mano más ingeniosa
y nuestro genio más torpe. *Nietzsche*

5.1. Caso Newtoniano. Problema de Stokes

Como precursores para los modelos no newtonianos, las ecuaciones de Stokes y Navier Stokes se resolvieron para verificar la validez del código computacional. El caso de Stokes se resuelve directamente ya que no incluye la parte convectiva, por lo que el proceso de solución no requiere la parte temporal. Esto también, implica que se puede encontrar una solución muy precisa, es decir, la que se obtiene utilizando mallas muy finas.

La solución utilizando elementos espectrales para determinar el arrastre se obtiene de la integración del esfuerzo total sobre la superficie de la esfera. El arrastre sobre la esfera, F , se describe en la siguiente ecuación

$$F = -2\pi a^2 \int_0^\pi \left\{ \left(-p + 2\beta \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xx} \right) \cos \theta + \left(\beta \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \tau_{xy} \right) \sin \theta \right\} \sin \theta d\theta \quad (5.1.1)$$

La cantidad de interés es el factor de arrastre adimensional F^* definido como la relación entre el arrastre experimentado por una esfera y el arrastre que experimentaría la misma esfera en un fluido newtoniano en un medio infinito, de acuerdo a la siguiente ecuación

Tesis	5.9474
Lunsmann et al. [65]	5.9472
Owens y Phillips [82]	5.9474

Cuadro 5.1: Arrastre calculado por varios autores

N	K	Arrastre
6	8	5.992313
7	8	5.973093
8	8	5.959748
9	8	5.952638
10	8	5.949442
5	20	5.947216
6	20	5.947395
7	20	5.947388

Cuadro 5.2: Arrastre sobre la esfera

$$F^* = \frac{F}{6\pi\eta Ua} \quad (5.1.2)$$

Comparamos el factor de arrastre F^* con la solución obtenida utilizando polinomios de grado $N = 7$ y el número de elementos espectrales ($K = 20$) resultando $F^* = 5.947388$, el cual es un buen valor comparado con el obtenido por B. Gervang et al. [41], Lunsmann et al. [65] y Owens y Phillips [82], ver tabla 5.1. Las líneas de contorno de los esfuerzos, de las velocidades y de las líneas de corriente se muestran en la figura 5.1. Se puede observar que los perfiles con prácticamente simétricos, lo que era de esperarse.

Los resultados de la tabla 5.2 muestran la convergencia del método para evaluar el arrastre en la superficie de la esfera. Esto se obtiene al incrementar el grado de aproximación N , para $K = 8$ y $K = 20$.

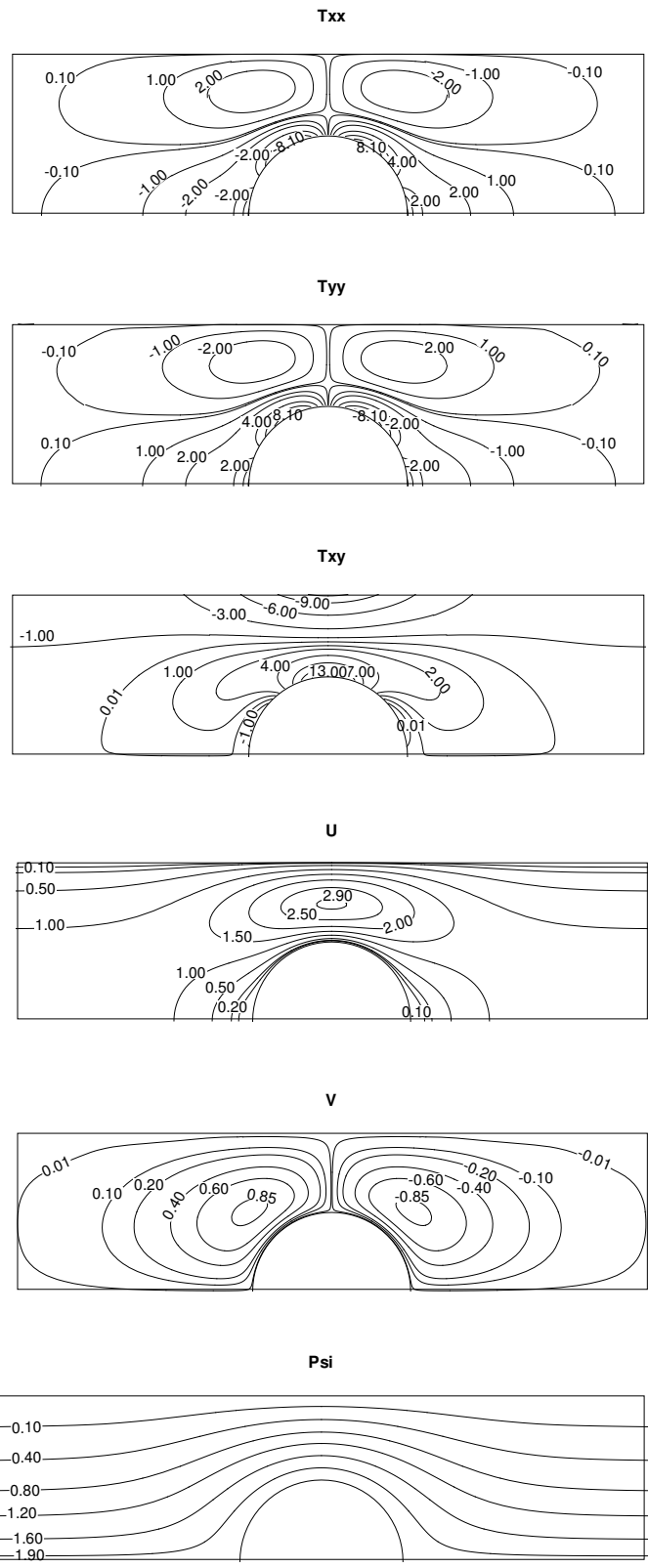


Figura 5.1: Contorno de los esfuerzos, velocidades y líneas de corriente para el problema de Stokes

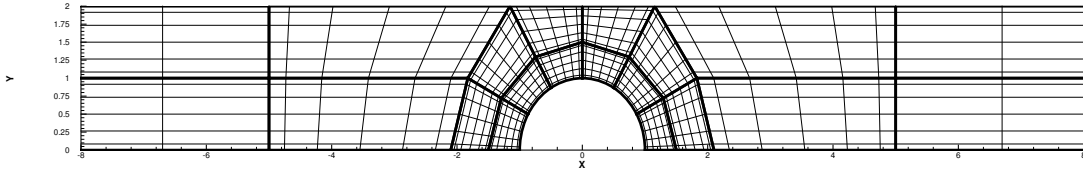


Figura 5.2: Malla de trabajo para los problemas del cilindro y la esfera, formada por $K = 20$ elementos espectrales y $N = 6$.

5.2. Resultados para el caso de Navier-Stokes

El otro problema considerado en este trabajo es el flujo alrededor de un cilindro confinado, en donde el radio del cilindro es el doble que el del canal. Este problema es fundamental, ya que es más complicado que el descenso de la esfera en un tubo debido a que para la misma relación R/h , el flujo planar alrededor del cilindro sufre una mayor contracción y extensión que el caso axisimétrico, es decir, el de la esfera. El dominio computacional es 25 unidades en la región anterior al cilindro y 25 unidades en la región posterior al cilindro, así que la suposición de flujo completamente desarrollado a la entrada y salida es válida. Una buena descripción de estos problemas (flujo alrededor de cilindros y esferas) se puede encontrar en el libro de Owens y Phillips [82].

La malla típica para este problema se muestra en la figura 5.2. en donde los elementos espectrales utilizados son $K = 20$ y el grado de aproximación espectral es $N = 6$. El incremento para el tiempo es $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. El problema convectivo se resuelve con el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

La fuerza de arrastre adimensional para el cilindro se calcula con la siguiente expresión

$$F = 2 \int_0^\pi \left\{ \left(-p + 2\beta \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xx} \right) \cos \theta + \left(\beta \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \tau_{xy} \right) \sin \theta \right\} d\theta \quad (5.2.1)$$

donde F^* se hizo adimensional con $(\eta U)/a$

El valor del arrastre para el problema de Navier-Stokes se compara con el resultado

publicado por Hulsen et al. [50]. Para un número de Reynolds $Re=0.01$, ellos encontraron que el arrastre era $F^* = 132.3584$, y el nuestro de $F^* = 132.3507$ lo cual es muy favorable. Las figuras de los contornos de los esfuerzos, las velocidades y las líneas de corriente se muestran en la figura 5.3.

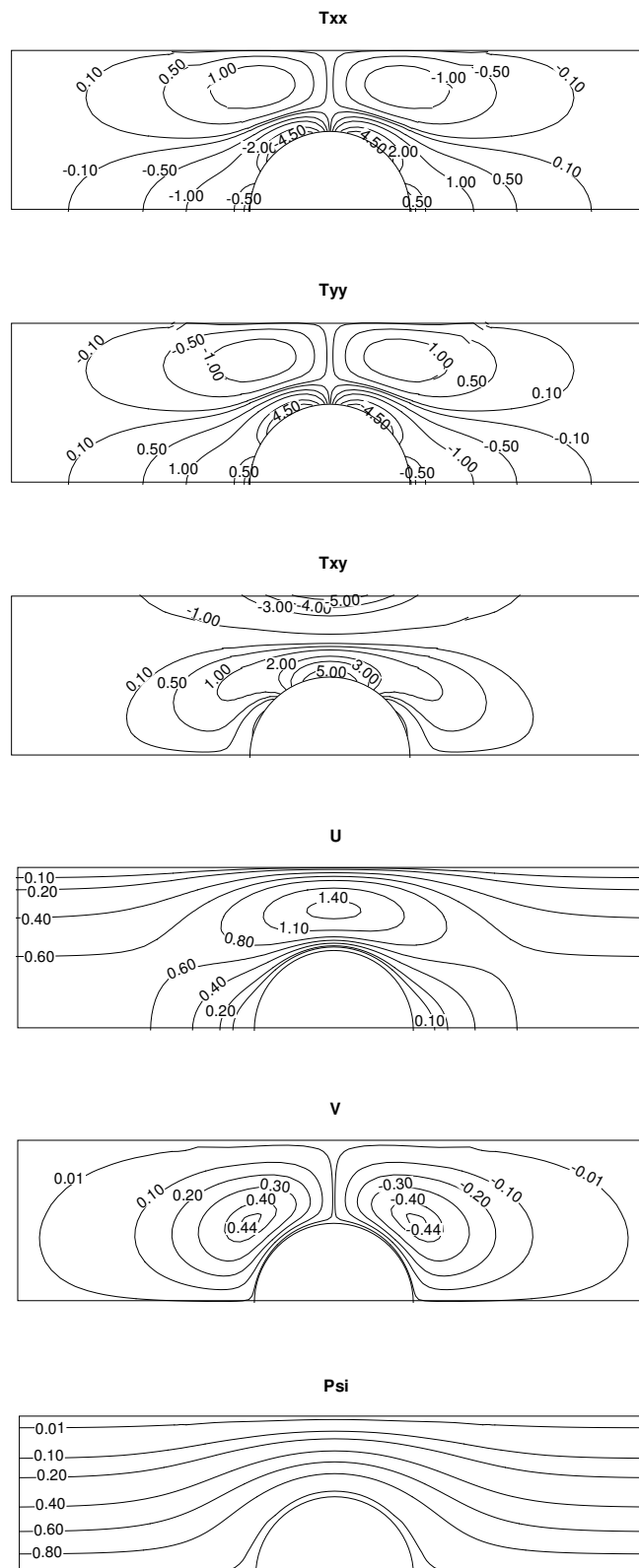


Figura 5.3: Contorno de los esfuerzos, velocidades y líneas de corriente para el problema de Navier-Stokes a un $Re=0.01$

5.3. Comparación de los modelos Oldroyd-B y Hooke

El primer conjunto de resultados compara las predicciones macroscópicas utilizando el modelo de Oldroyd-B con las predicciones micro-macro equivalentes basadas en la evolución de campos de conformaciones browniano utilizando mancuernas de Hooke. Esta comparación se lleva a cabo para validar la equivalencia matemática entre la aproximación micro-macro del modelo de mancuernas de Hooke con el modelo macroscópico de Oldroyd-B. La comparación de la evolución del arrastre para ambos modelos se muestra en la figura 5.4 (superior), utilizando los siguientes parámetros: $We=0.6$, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $N=6$ y para el modelo de Hooke el número de campos de conformación $NCF = 2000$. Existe una gran aproximación con ambos modelos particularmente cuando se alcanza el estado estacionario, se confirma la validez de la aproximación micro-macro. La figura 5.4 (inferior) se muestra el valor del arrastre promedio en tiempo para $t \geq 3$, es decir, para cada intervalo de tiempo sumamos el valor del arrastre con los valores previos hasta ese tiempo y dividimos este valor entre el número de intervalos de tiempo alcanzados hasta ese punto, así obtenemos el arrastre promedio en tiempo. Con este procedimiento eliminamos las fluctuaciones en tiempo para el arrastre y se muestra la convergencia con ambos modelos.

Además de la comparación del arrastre, que es un indicador macroscópico de la calidad del algoritmo numérico. También se demuestra que los campos globales generados por los dos modelos tienen una excelente aproximación cuantitativa como se muestra en la figura 5.5, en donde se comparan los contornos de los componentes del esfuerzo viscoelástico a la misma altura del dominio computacional.

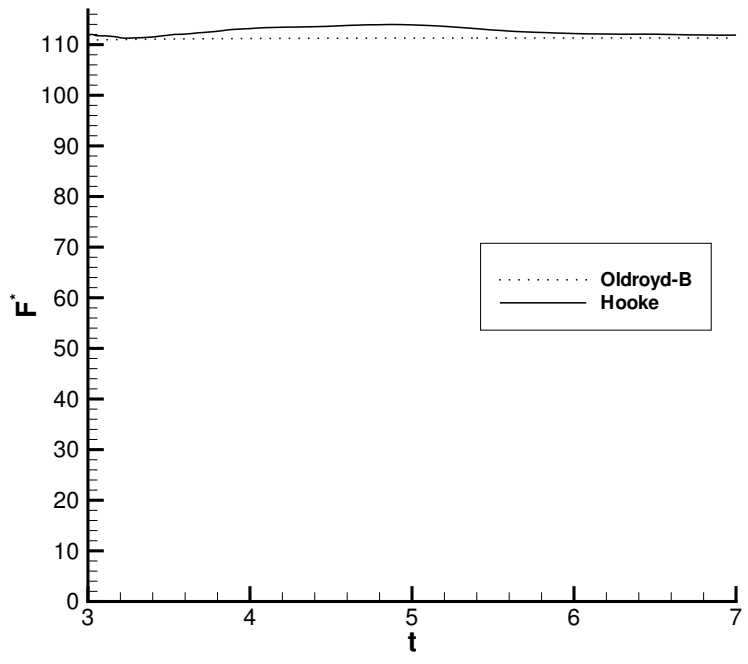
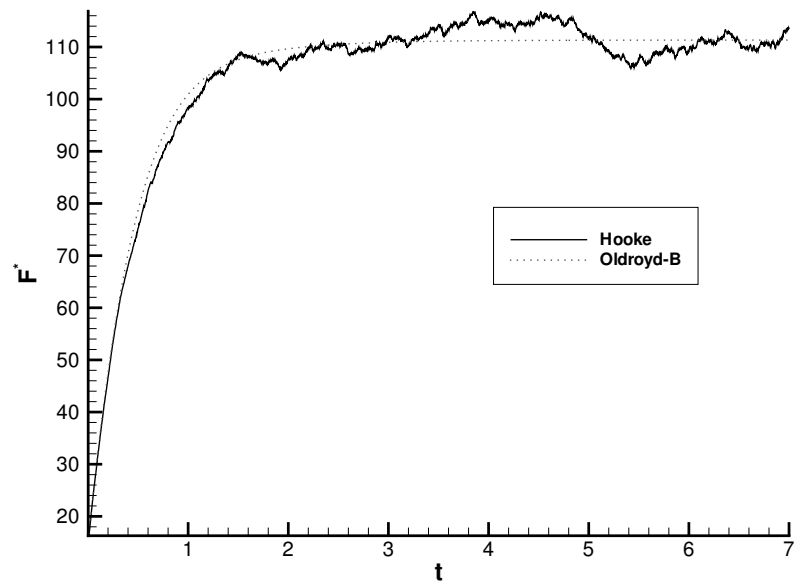


Figura 5.4: Comparación del arrastre calculado con el Oldroyd-B model y el modelo de mancuernas de Hooke para $We=0.6$, $Re=0.01$, $N=6$ y $\beta = 1/9$. Para el modelo de Hooke $NCF=2000$ y $b=50$

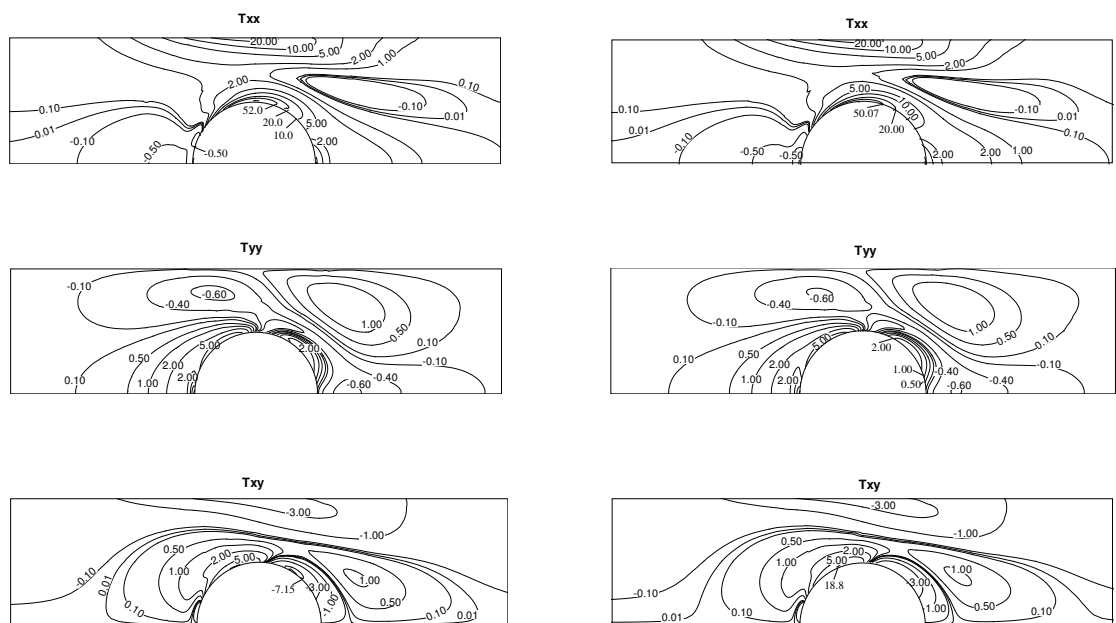


Figura 5.5: Contornos de los esfuerzos normales T_{xx} y T_{yy} , esfuerzo cortante T_{xy} . Lado izquierdo las predicciones del modelo de Oldroyd-B y del lado derecho las predicciones del modelo de Hooke. Los resultados mostrados son para $We=0.6$, $NCF=2000$ y $Re=0.01$

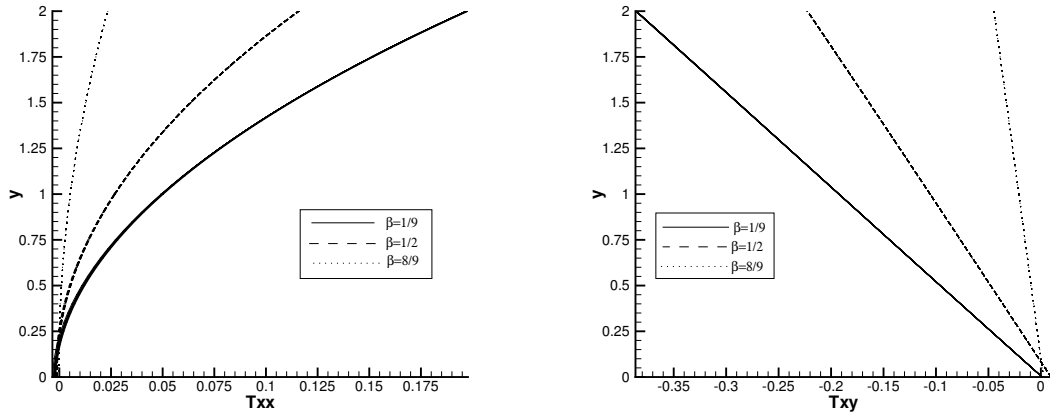


Figura 5.6: Efecto de la relación de viscosidades β sobre la contribución polimérica al esfuerzo normal T_{xx} y al esfuerzo de corte T_{xy} a la salida del canal. Los resultados mostrados son para $We=1.0$, $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$, utilizando el modelo FENE.

5.4. Flujo Poiseuille en un canal rectangular

Se considera un canal bidimensional con un campo de velocidades tipo Poiseuille dado por $u(u_x, 0)$, con $u_x = \frac{3}{16}(4 - y^2)$, donde $h = 2$. Por lo tanto tenemos la máxima velocidad en $y = 0$. Después de cada incremento de tiempo, se consideran los valores de la penúltima línea de puntos de la malla Gauss-Lobatto, es decir, justo antes de la salida. Estos valores se consideran como los nuevos valores de entrada para la siguiente iteración. En las paredes se imponen las condiciones sin deslizamiento. La malla para el canal plano consiste en cuatro elementos espectrales, dos elementos para la sección transversal y dos elementos de largo. El primer cálculo se realiza variando la relación de viscosidades figuras 5.6 y 5.7. Cuando β se incrementa, el fluido es más diluido, y el perfil tiende al newtoniano, similar al comportamiento newtoniano y los esfuerzos en la figura 5.6 tienden a ser más pequeños ya que la contribución polimérica es menor. La influencia de la viscoelasticidad al variar el número de Weissenberg, los esfuerzos son mayores figura 5.8 y el perfil de velocidades tiende a ser más plano, ver figura 5.9.

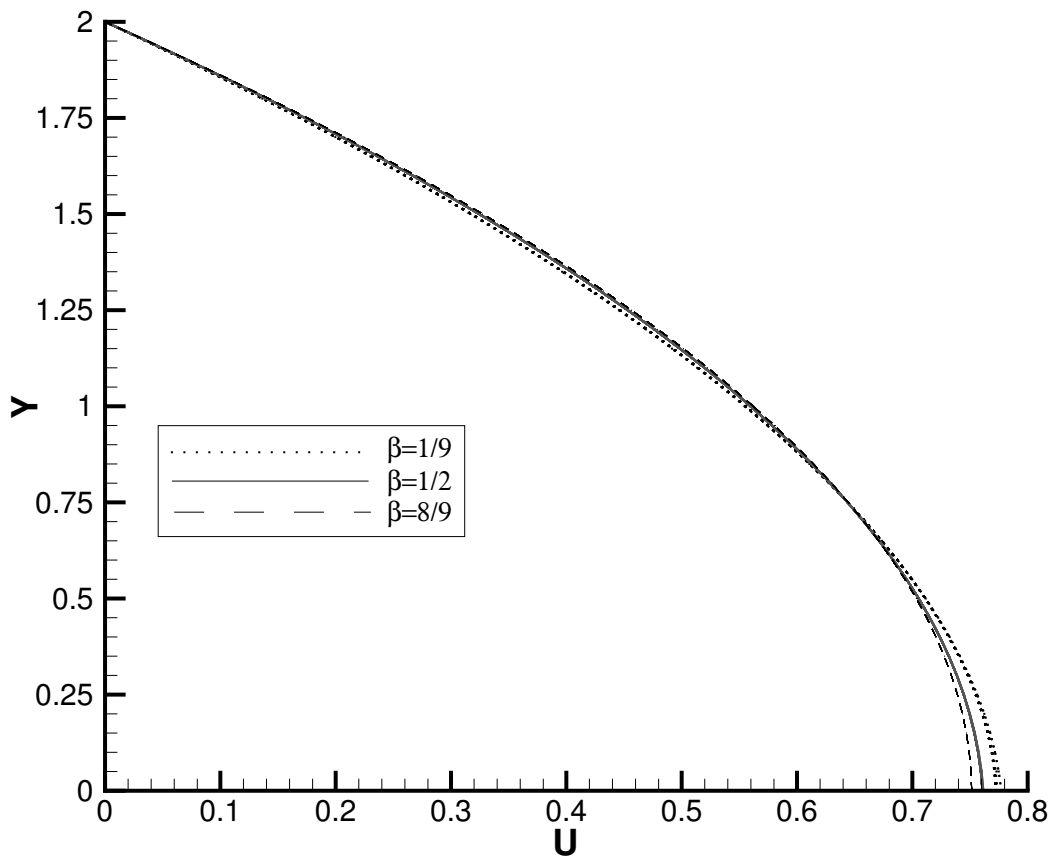


Figura 5.7: Efecto de la relación de viscosidades β sobre el perfil de velocidad. Arriba, el perfil completo, abajo, la región central del perfil. Resultados para $We=1.0$, $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$ con el modelo FENE.

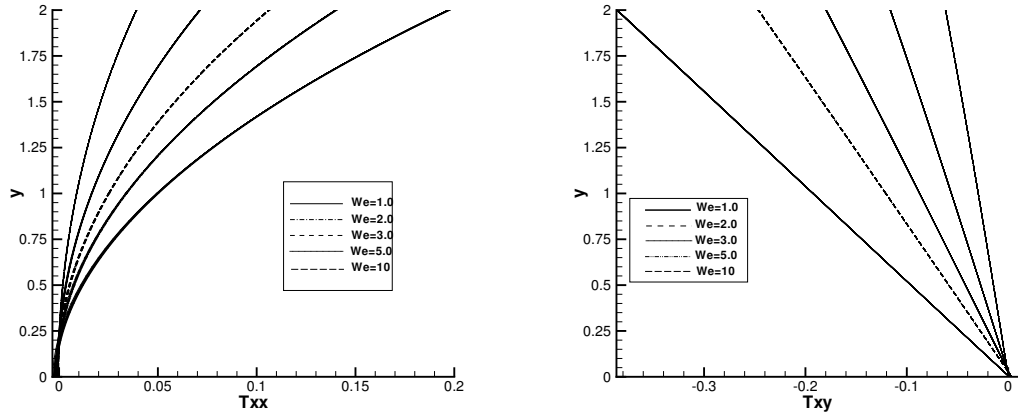


Figura 5.8: Efecto de la viscoelasticidad en los esfuerzos normal T_{xx} y cortante T_{xy} a la salida del canal. Resultados para $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$ utilizando el modelo FENE.

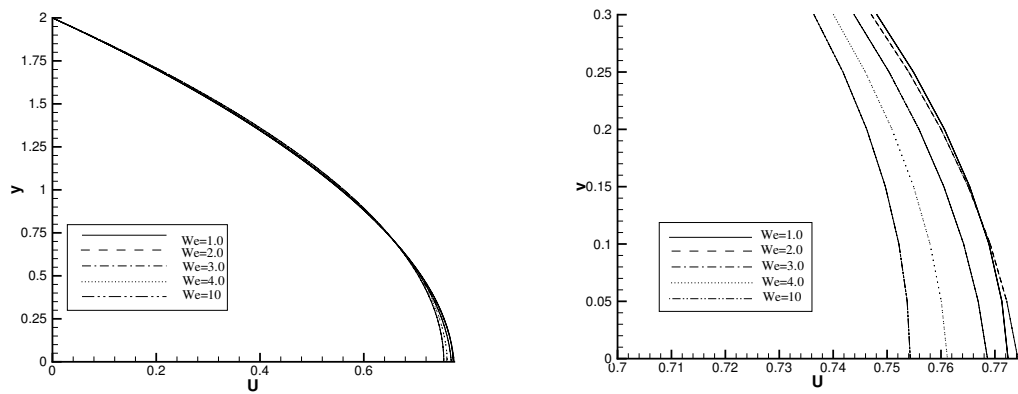


Figura 5.9: Efecto de la viscoelasticidad sobre el perfil de velocidades. Arriba, el perfil completo y abajo, se muestra la región central. Resultados para $NCF=2000$, $Re=0.01$ y $b = 50$ utilizando el modelo FENE.

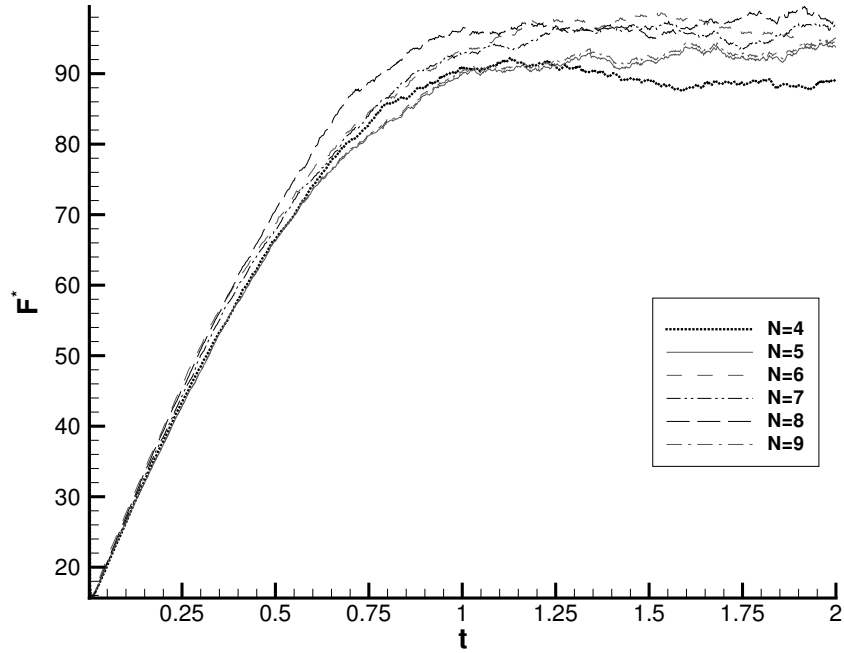


Figura 5.10: Fuerza de arrastre sobre el cilindro en función del grado de aproximación del polinomio, para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=50$.

5.5. Modelos FENE y FENE-P

Nuestro estudio de los modelos tipo FENE inicia en la influencia de los parámetros de discretización para la evolución de arrastre con $We=1.0$, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$ y $b=50$. La fuerza de arrastre sobre la superficie del cilindro en función del grado del polinomio, N , en estas simulaciones el número de elementos espectrales se mantiene constante, $K=20$. En la figura 5.10 se observa, que una buena aproximación se obtiene para $N > 4$. Las líneas correspondientes a $N = 5$ y $N = 9$ en ambos casos tienen la misma semilla para la generación de números pseudoaleatorios, por lo que se obtienen los mismos resultados. La gran diferencia en el caso de $N = 9$ es que toma mucho más tiempo para llevar a cabo los cálculos.

La figura 5.11. (superior) muestra la influencia del número de campos de conformación, N_f , para la evolución de la fuerza de arrastre utilizando diferentes valores de $N_f = 100, 500, 1000, 2000$. Es fácil observar que, incrementando el número de campos de conformación reduce las fluctuaciones temporales en el arrastre como era de

We	Arrastre
0.6	107.6528
1.0	96.4207
2.0	77.8543
3.0	74.9829
4.0	70.7530
5.0	64.3565
6.0	65.8450

Cuadro 5.3: Fuerza de arrastre sobre el cilindro variando el número de Weissenberg

esperarse ya que el error disminuye a razón de $1/N_f$. Se observan mejores resultados para la predicción del arrastre en función de la parte microscópica en donde hay una pequeña diferencia al aumentar el número de campos de 1000 a 2000. También en La figura 5.11. (inferior) se muestra el arrastre promedio en tiempo en donde se ve claramente la convergencia del arrastre al aumentar el número de N_f .

La dependencia de la evolución de la fuerza de arrastre con el número de Weissenberg se muestra en la figura 5.12 (superior), para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$ y $b=50$. Observamos que incrementando la viscoelasticidad las fluctuaciones sobre el arrastre decrecen. De acuerdo con la ecuación 3.4.1 el término estocástico es menor y las fluctuaciones también. Los valores del arrastre en la parte transitoria y estacionaria decrecen de manera monótona al incrementar el número de Weissenber hasta $We=5$, después hay un pequeño incremento de $We=5$ a $We=6$, lo cual ha sido comprobado por varios investigadores [5], [35], [68], [103]. Los valores del estado estacionario para el arrastre se muestran en la tabla 5.3. En la figura 5.12 (inferior), se muestra el valor del arrastre promedio en tiempo para $t \geq 1$ al incrementar el We .

La comparación de los contornos de los componentes del esfuerzo viscoelástico, de las velocidades y de las líneas de corriente para dos valores de elasticidad $We=0.6$ y $We=5$ se muestran en la figura 5.13. Los componentes de la velocidad indican que hay un incremento en el gradiente de velocidades en la parte frontal del cilindro lo cual produce una mayor deformación en esa región. Los contornos para la primera diferencia de esfuerzos normales N1 ($T_{xx} - T_{yy}$) a tres diferentes números de Weissenberg se muestran en la figura 5.14.

En la figura 5.15 (superior) se compara la evolución del arrastre utilizando los mo-

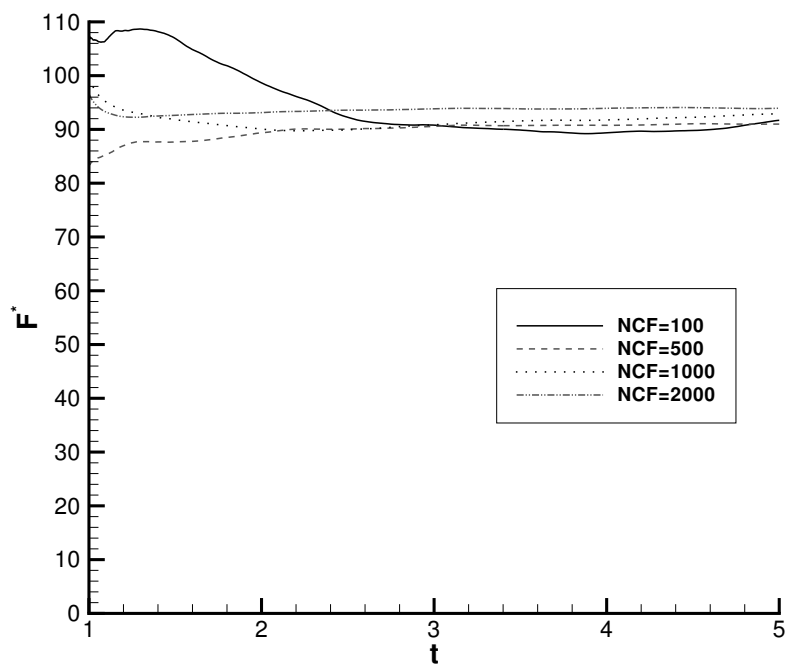
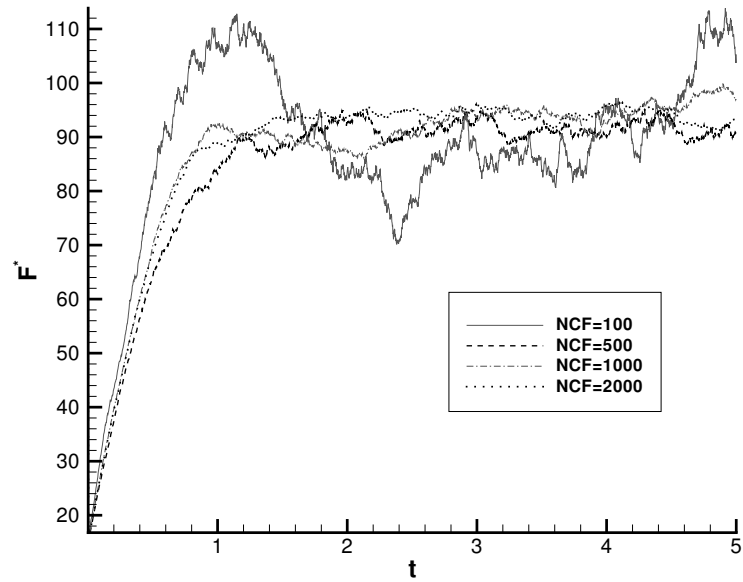


Figura 5.11: Evolución de arrastre utilizando el modelo FENE cambiando el número de campos brownianos $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $b=50$, para $N_f=100, 500, 1000, 2000$

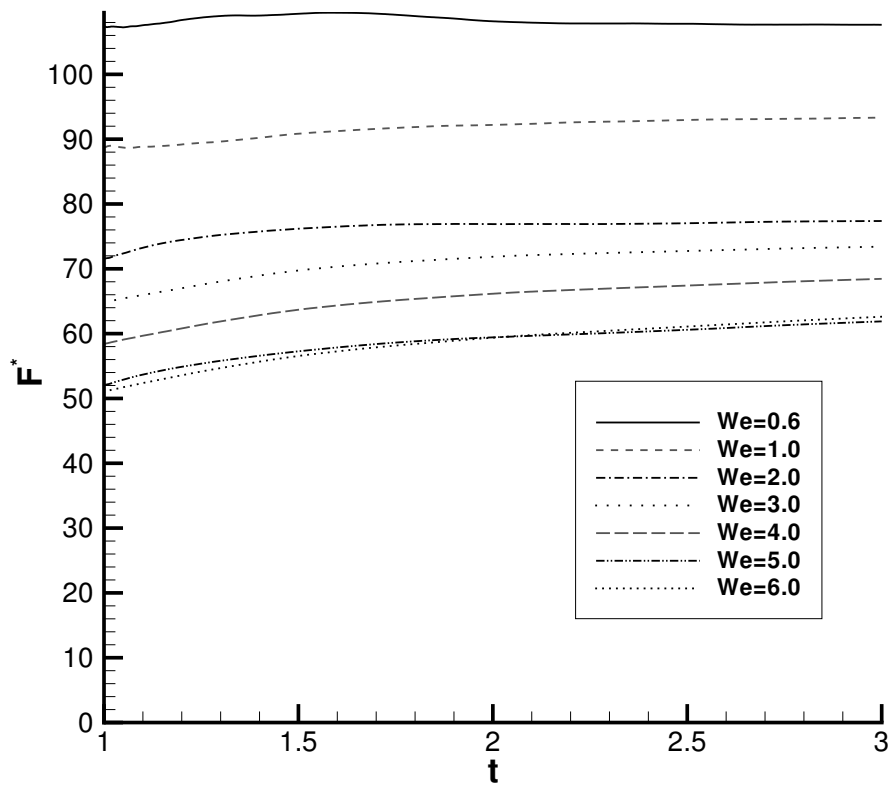
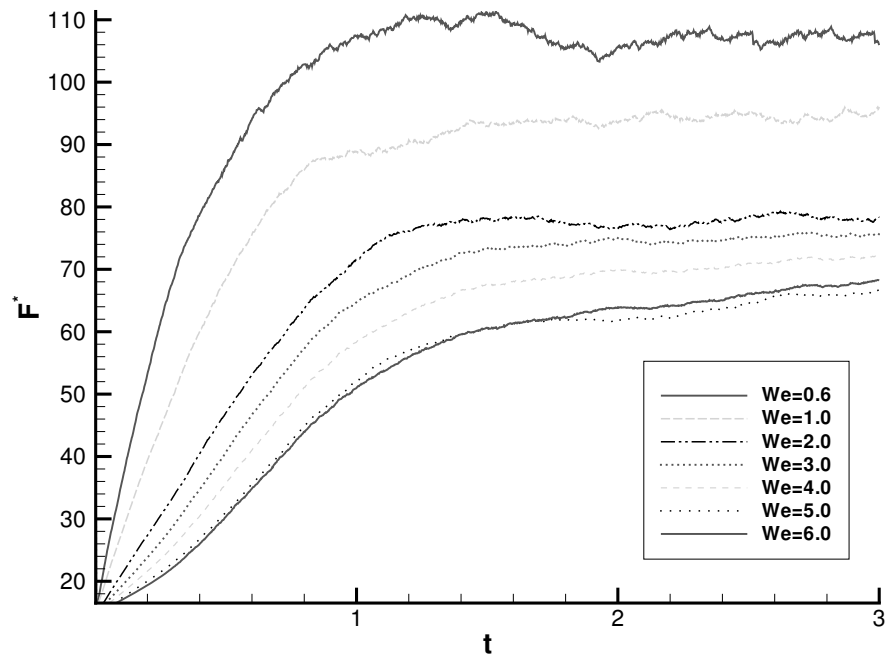


Figura 5.12: Efecto de la viscoelasticidad en la fuerza de arrastre sobre el cilindro, con $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $N=6$ y $b=50$.

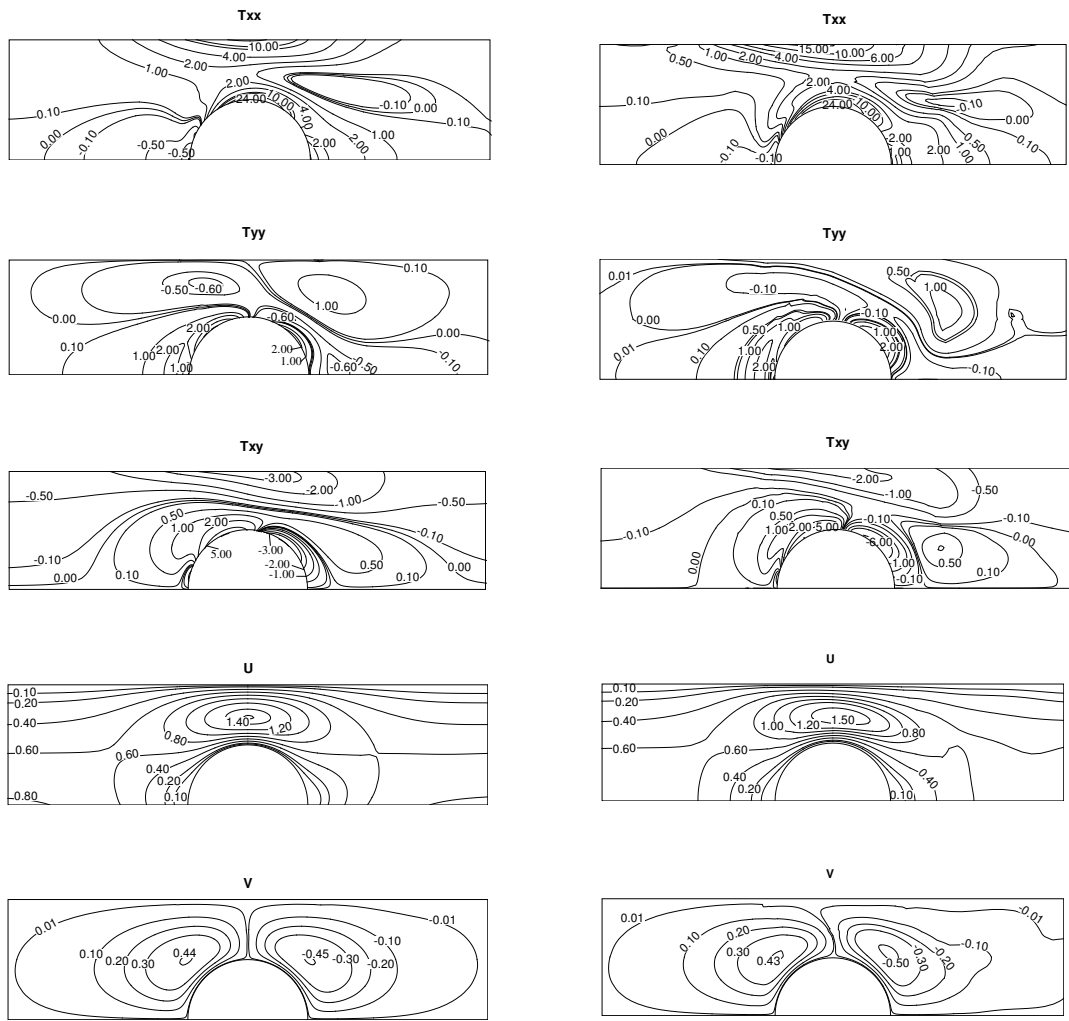


Figura 5.13: Contornos de los esfuerzos y velocidades utilizando el modelo FENE. A la izquierda a $We=0.6$ y del lado derecho a $We=5$. En ambos casos para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$, $N=6$ y $b=50$.

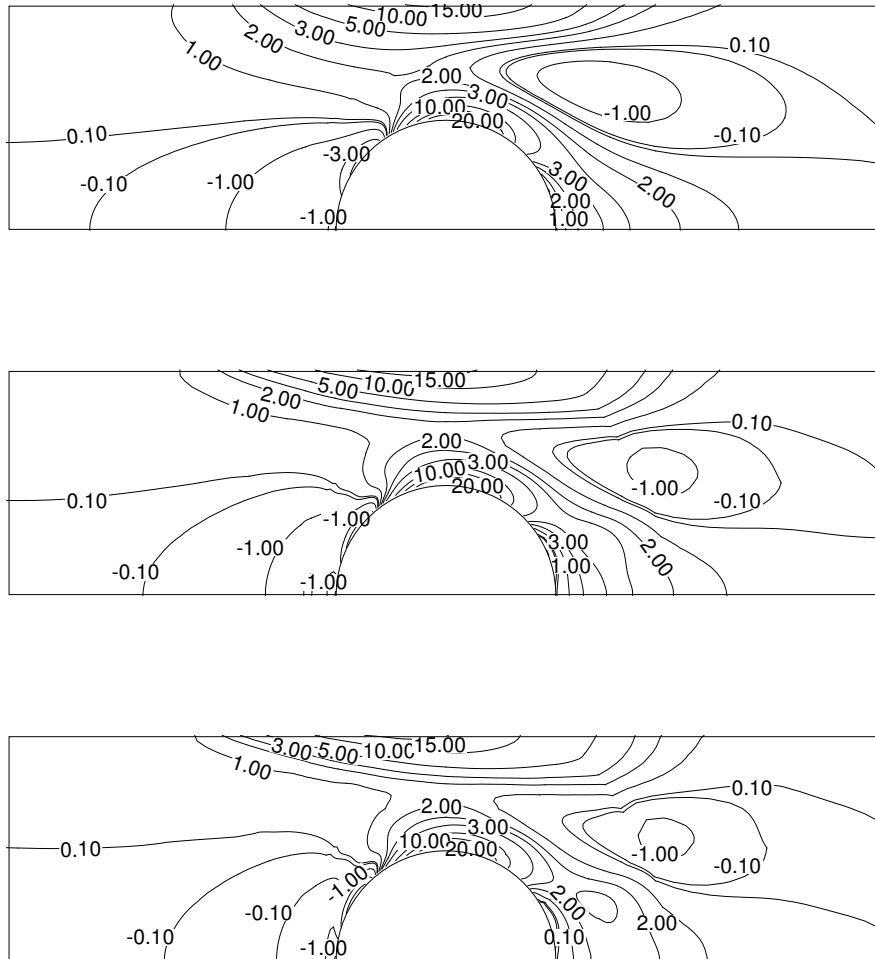


Figura 5.14: Comparación de los contornos de la primera diferencia de esfuerzos normales N_1 para el modelo FENE. $We=0.6$ (arriba), $We=3$ (en medio) y $We=5$ (abajo). Para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $b=50$, $N_f = 2000$ y $N=6$

delos de Hooke, Oldroyd-B, FENE y FENE-P. Como se puede observar, los modelos de Hooke, Oldroyd-B y FENE presentan valores similares y el modelo FENE-P difiere de éstos. Estas predicciones fueron realizadas para $We=0.6$, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$ y $b=50$. Se esperaba que los modelos FENE y FENE-P tuvieran valores muy similares pero lo cierto es que el modelo FENE-P es una pobre aproximación del modelo FENE. Esta diferencia también se ha visto en otros trabajos [88]. También en la figura 5.15 (inferior) se muestra el arrastre promedio en tiempo para los tres modelos cinéticos y el modelo de Oldroyd-B en donde es fácil observar la buena aproximación entre los modelos de Hooke y FENE con el modelo de Oldroyd-B. Es común encontrar en la literatura gráficos compuestos de valores del esfuerzo normal T_{xx} tomados del eje de simetría y de la superficie del cilindro, en la figura 5.16 se muestra la comparación de los tres modelos cinéticos junto con el modelo de Oldroyd B, se observa que la aproximación del modelo de Hooke con el modelo de Oldroyd B es muy cercana y difieren por muy poco como era de esperarse, los modelos FENE y FENE-P tienen valores menores ya que están restringidos por la extensión máxima de las mancuernas, para los modelos tipo FENE el modelo de Oldroyd-B se puede recuperar en el límite cuando $b \rightarrow \infty$.

La diferencia en las predicciones de los modelos FENE y FENE-P se observa claramente en la figura 5.17, en donde los componentes del esfuerzo polimérico se analizan alrededor del cilindro y en el eje de simetría para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $N_f = 2000$ y $b=50$. La influencia del número de Weissenberg en estos perfiles se muestra en esta figura. El componente axial T_{xx} domina a los otros componentes del esfuerzo sobre la superficie del cilindro. Desde $We=0.6$, el esfuerzo axial comienza a disminuir a medida que aumenta el We . Este comportamiento es más acentuado para el modelo FENE-P que para el modelo FENE. El valor máximo de T_{xx} en la estela es pequeño con poca influencia del We a comparación con el máximo sobre el cilindro. Aunque el modelo FENE-P es una buena aproximación del modelo FENE para flujos estacionarios, algunos autores han encontrado grandes diferencias (ver Herrchen y Öttinger [48] y Keunings [54]). La aproximación de Peterlin cambia radicalmente las propiedades estadísticas de las bases de la teoría cinética y el resultado es imparcial

de la dinámica de flujo [54]. Una consecuencia directa es que las mancuernas para el modelo FENE-P se pueden deformar más allá de su extensión máxima, ya que se toma el promedio de $\langle \mathbf{Q}^2 \rangle$. Por lo tanto, hay grandes diferencias entre los modelos FENE y FENE-P cuando simulan fluidos viscoelásticos.

El efecto del parámetro adimensional de extensión máxima para la mancuerna, b , en el arrastre sobre el cilindro y en los esfuerzos se analiza en la figura 5.18. Para valores pequeños de b las fluctuaciones en el arrastre aumentan, debido a que la extensibilidad es pequeña y la tensión entre las cuentas es grande, lo que produce fuerte efectos no lineales; estas fluctuaciones también pueden significar rotaciones y vibraciones debidas al flujo. Valores pequeños de b hace que la cadena sea más rígida por lo tanto los esfuerzos son mayores incidiendo en el régimen no lineal de deformación. El valor de $b = 5$ produce una una respuesta elástica del sistema, similar a las curvas de inicio de flujo en un reómetro. Analizando el esfuerzo en la superficie del cilindro y en el eje de simetría figura 5.18, observamos que a valores grandes de extensibilidad el esfuerzo tiende al caso límite, es decir, al modelo de Hooke. En la figura 5.19 se muestra el valor del arrastre promedio en tiempo para $t \geq 1$, en donde se observa que el arrastre es poco sensible a los cambios de extensión de las mancuernas.

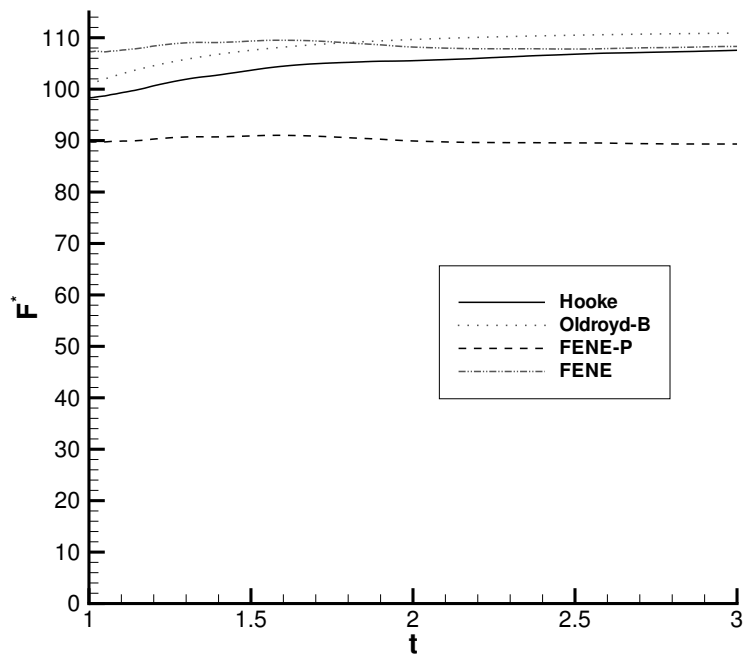
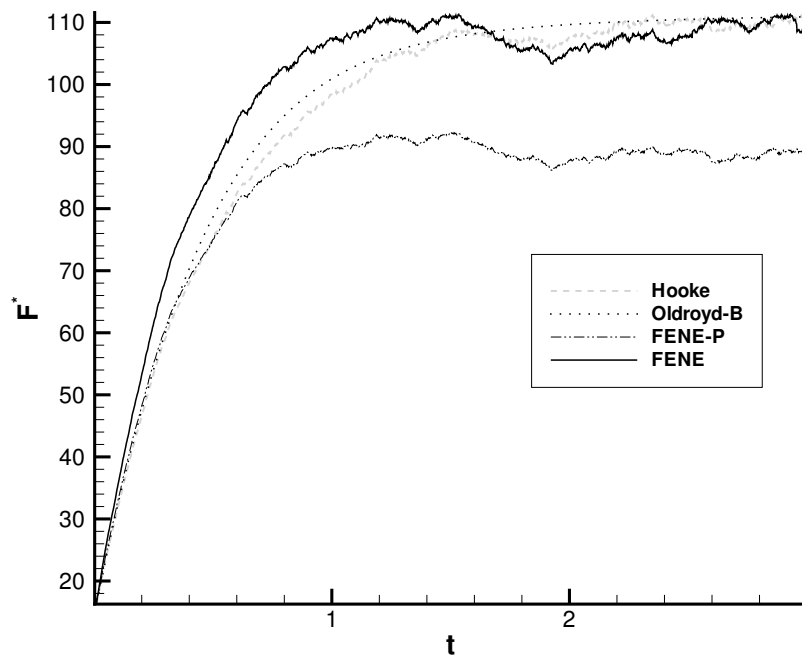


Figura 5.15: Comparación del arrastre en el cilindro utilizando los diferentes modelos con $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $b=50$, $We=0.6$ y $N=6$

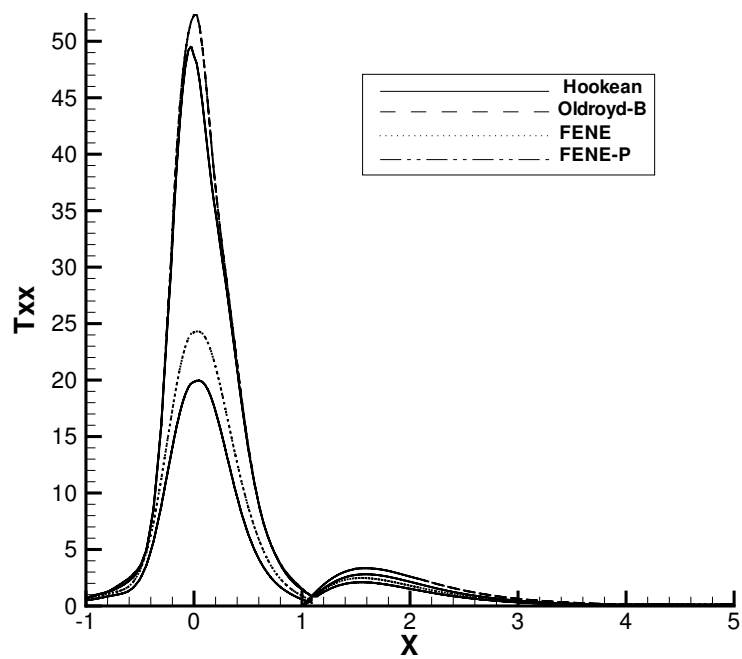


Figura 5.16: Comparación del esfuerzo normal T_{xx} en $y = 0$ y en la superficie del cilindro utilizando diferentes modelos. Con los siguientes parámetros $We=0.6$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=50$

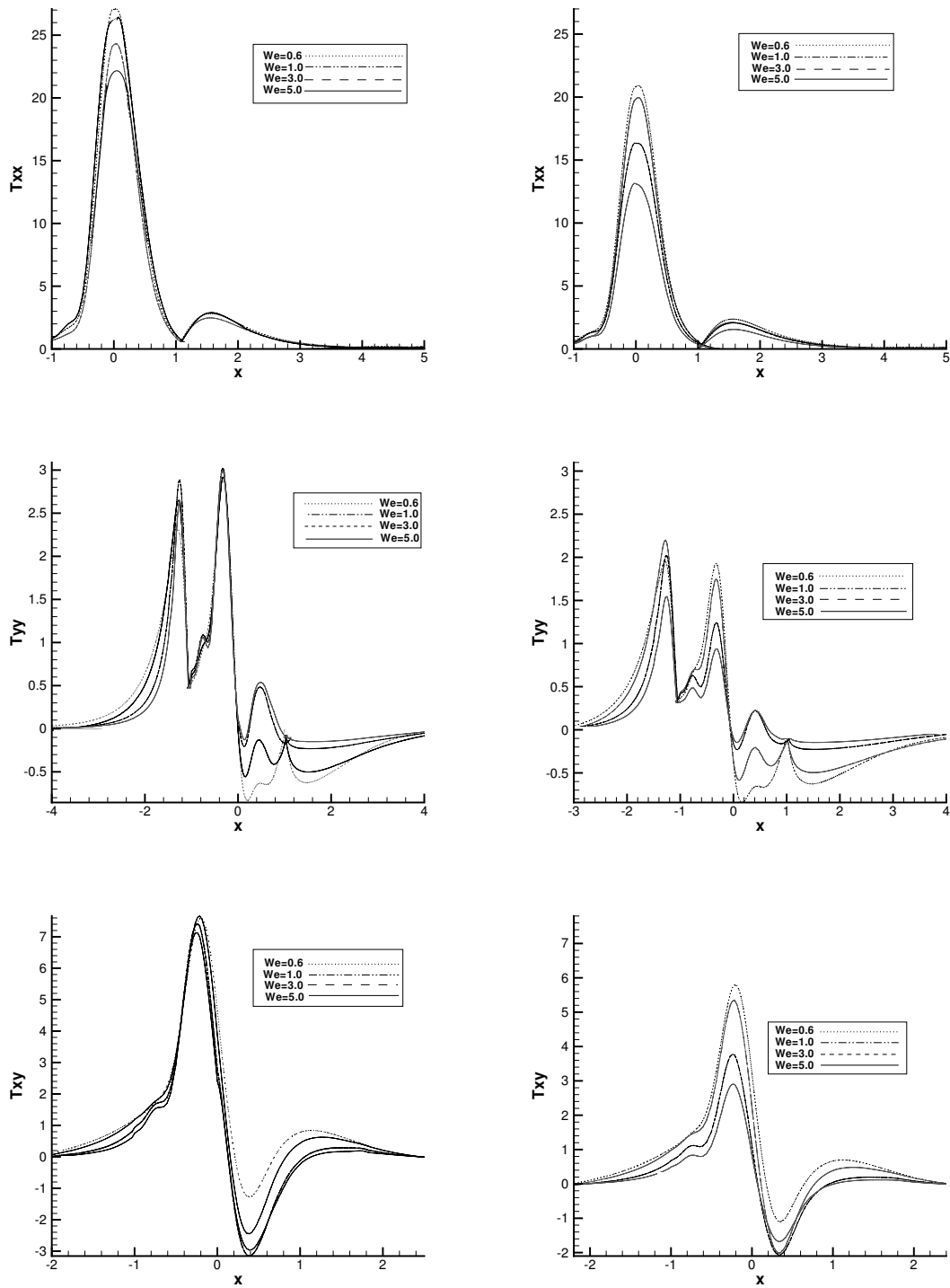


Figura 5.17: Efecto de la elasticidad sobre los esfuerzos para, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $b=50$ y $We=1$

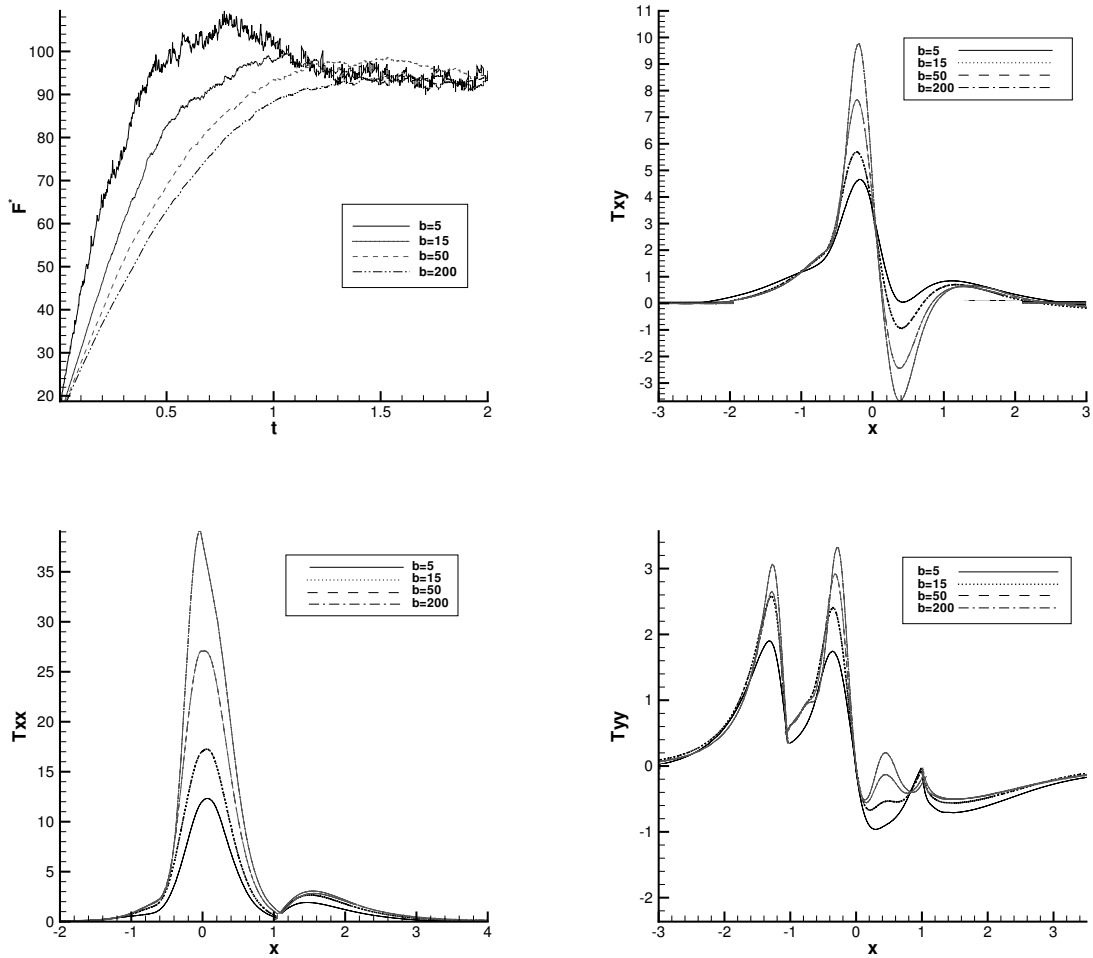


Figura 5.18: Efecto de la extensión máxima en el arrastre y los esfuerzos, para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$, $b=50$ y $We=1$

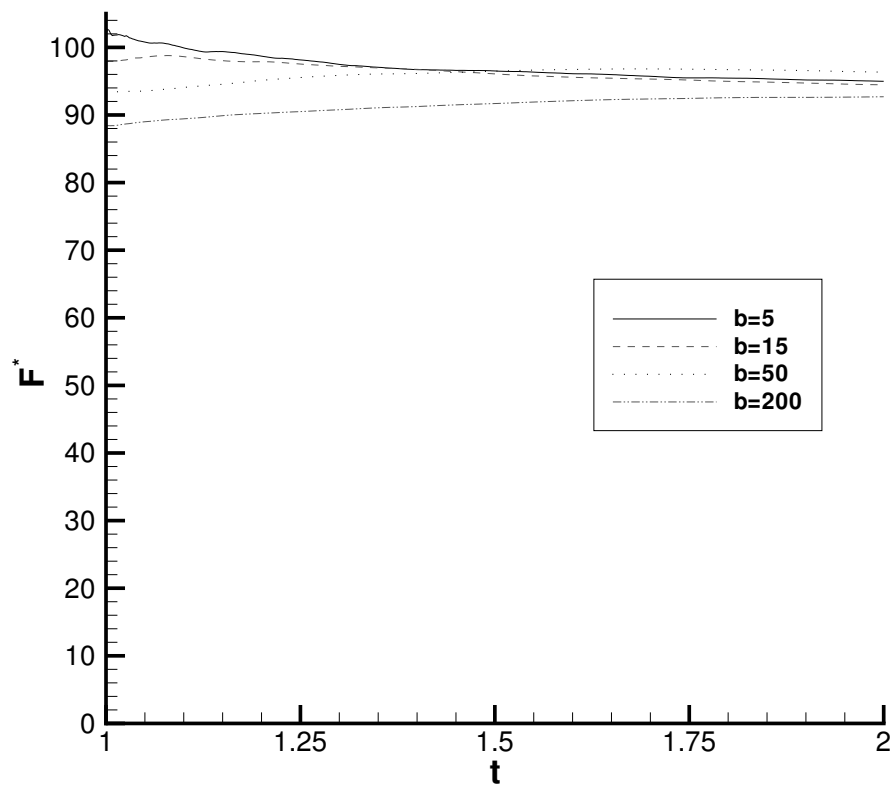


Figura 5.19: Comparación del arrastre promedio en tiempo (desde $t=1.0$) para el modelo FENE en función del parámetro de extensión finita. $We=1$, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $N_f = 2000$ y $N=6$

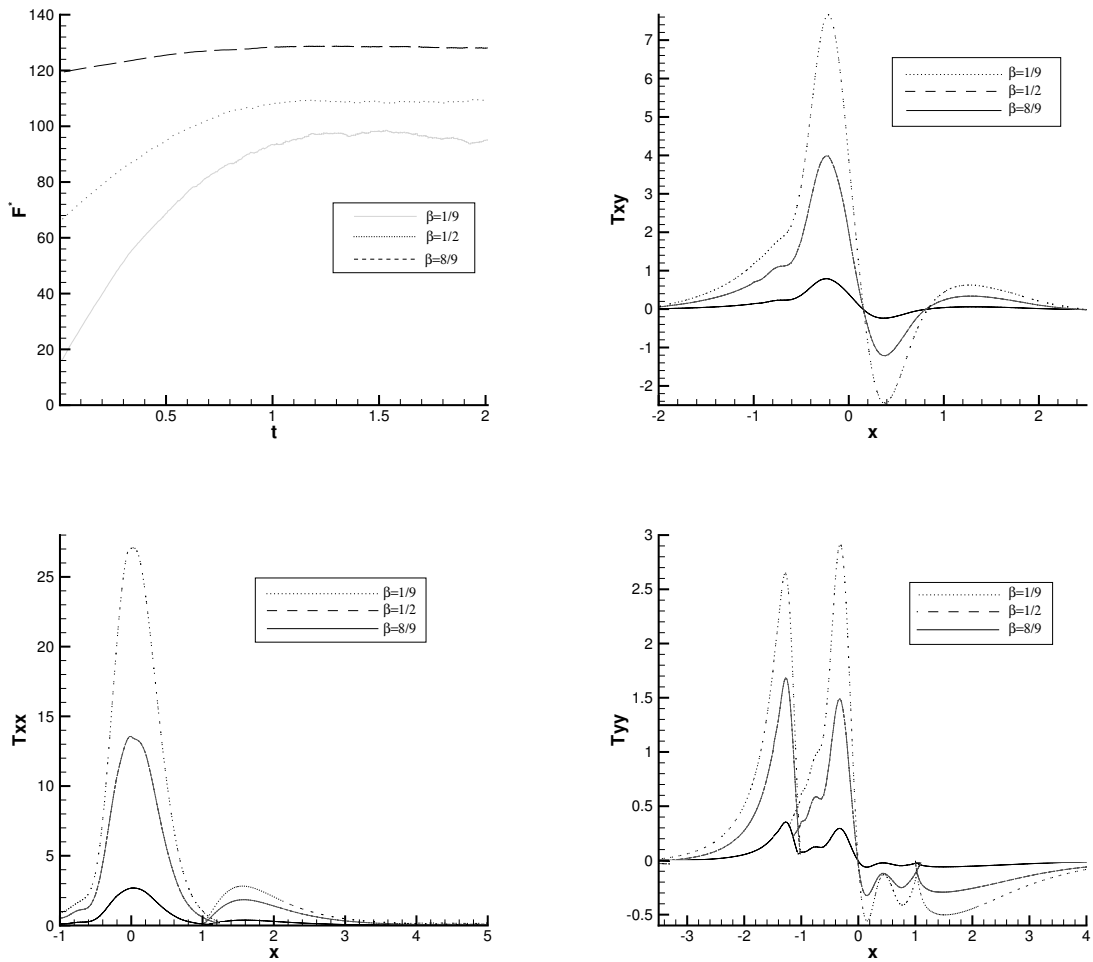


Figura 5.20: Efecto de la relación de viscosidades β sobre la fuerza de arrastre y los esfuerzos utilizando el modelo FENE. $Re=0.01$, $NCF=2000$, $b=50$ y $We=1$

El efecto de la relación de viscosidades, β , se muestra en la 5.20. Como era de esperarse, el arrastre se aproxima al valor newtoniano así como los esfuerzos poliméricos desminuyen a valores grandes de β , (solución más diluida). Ya que los esfuerzos calculados representan la contribución polimérica al tensor de esfuerzos, un valor grande de β corresponde a una mayor contribución al tensor de esfuerzos por parte del disolvente.

Respecto a las líneas de corriente, Mena y Caswell [76] presentan un análisis para un fluido Oldroyd-B alrededor de un cilindro, resolviendo la ecuación de Oseen lejos del cilindro y utilizando la solución de Stokes cerca del cilindro. Mena y Caswell [76] predicen que el efecto de la viscoelasticidad cambia las líneas de corriente antes del cilindro. Pilate y Crochet [87] llevaron a cabo simulaciones numéricas utilizando el método de diferencias finitas con un fluido de segundo orden y encontraron que la viscoelasticidad reduce el coeficiente de arrastre a números de Reynolds muy bajos, lo cual está en acuerdo con Mena y Caswell [76]. Trabajos experimentales para el flujo lento utilizando soluciones de poliacrilamida en agua o mezclas de agua/glicerol alrededor de un cilindro, Manero y Mena [70] demostraron experimentalmente que para números de Deborah $De < 1$ existe un corrimiento de las líneas de corriente en la región posterior del cilindro, mientras que para $De > 1$ el corrimiento se observa anterior al cilindro, para el caso de un flujo sin efectos de las fronteras. Las líneas de corriente obtenidas por Pilate y Crochet [87] indican que la viscoelasticidad se manifiesta con el corrimiento después del cilindro.

En las figuras 5.21-5.22 se muestran los resultados de las líneas de corriente para un fluido newtoniano a $Re = 0,01$ comparando éstas con los modelos FENE y FENE-P al mismo Reynolds con una relación de viscosidades $\beta = 1/9$ para diferentes números de Weissenberg desde $We=1$ hasta $We=8$. En ellas se observa que para el modelo FENE a $We=1$ el corrimiento es posterior al cilindro. El mismo comportamiento reporta Alves et al. [1]. Aumentando la elasticidad, las líneas de corriente cambian antes y después del cilindro, teniendo mayor efecto en la región posterior. Haciendo el mismo análisis pero ahora utilizando el modelo FENE-P, la elasticidad tiene poco efecto sobre las líneas de corriente.

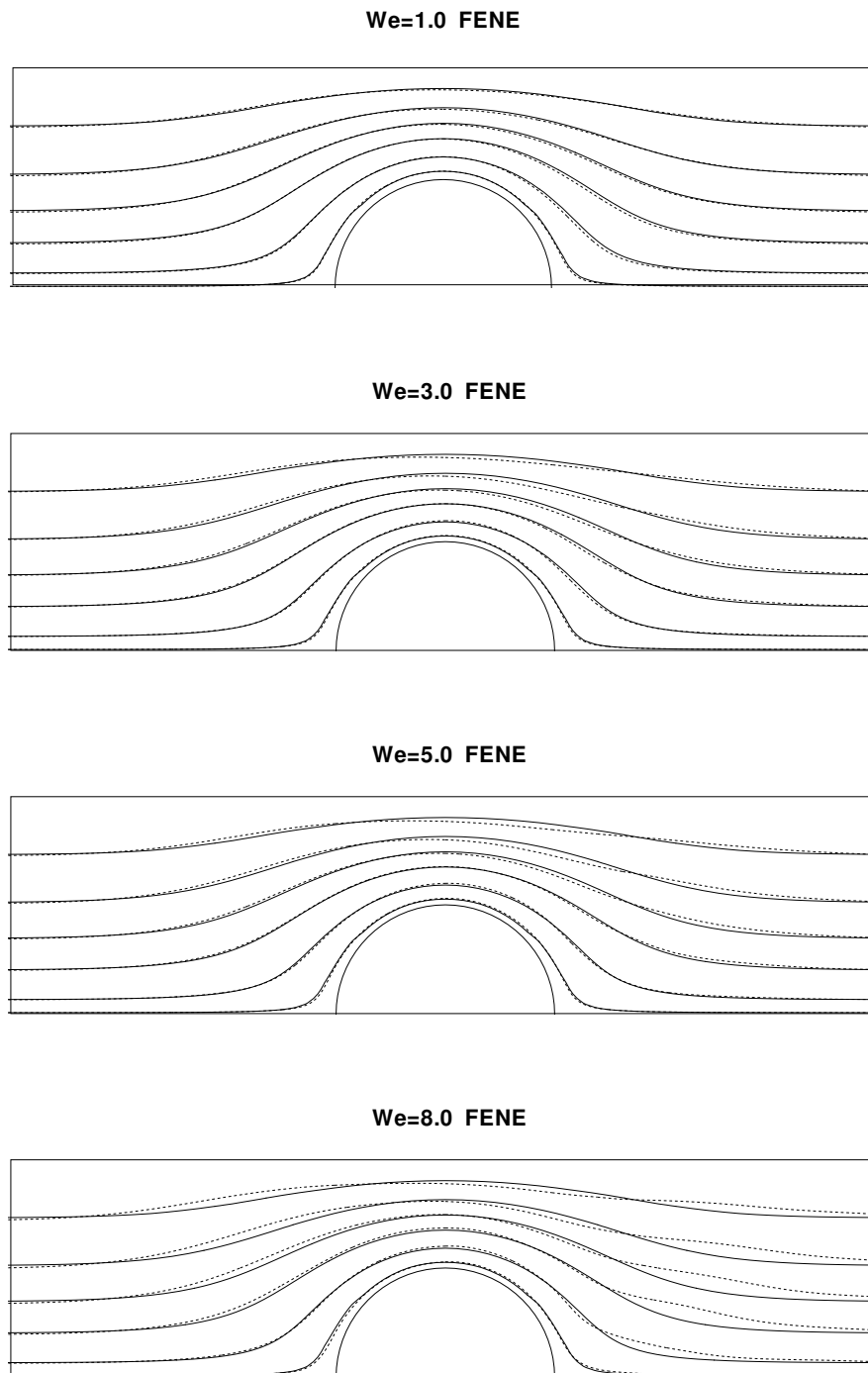


Figura 5.21: Comparación de las líneas de corriente a diferentes números de Weissenberg utilizando el modelo FENE para el flujo alrededor de un cilindro. La línea sólida es el caso newtoniano y la línea punteada es el caso viscoelástico. Los resultados presentados son para $Re=0.01, NCF=2000, \beta = 1/9$ y $b=50$.

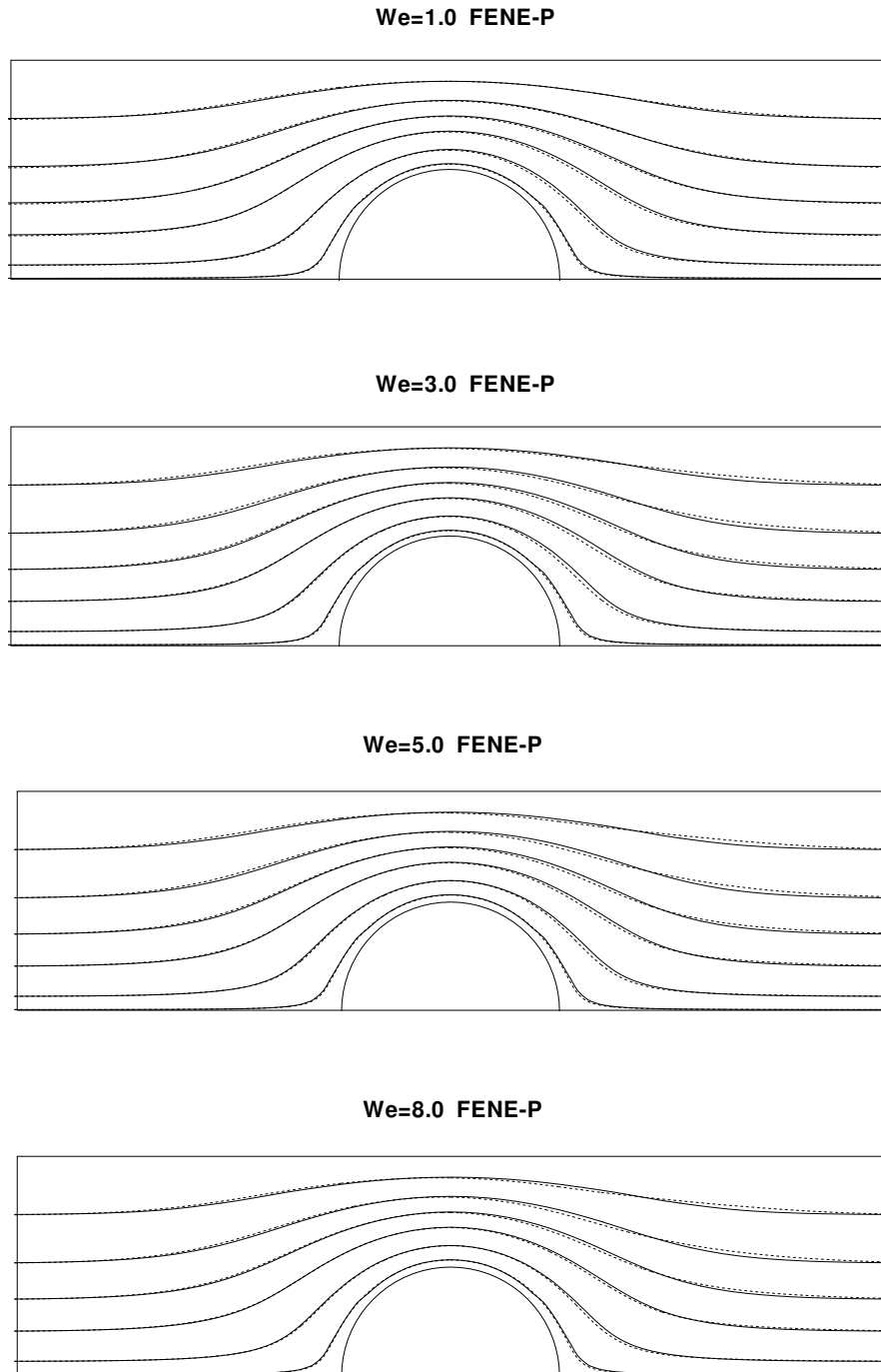


Figura 5.22: Comparación de las líneas de corriente a diferentes números de Weissenberg utilizando el modelo FENE-P para el flujo alrededor de un cilindro. La línea sólida es el caso newtoniano y la línea punteada es el caso viscoelástico. Los resultados presentados son para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=50$,

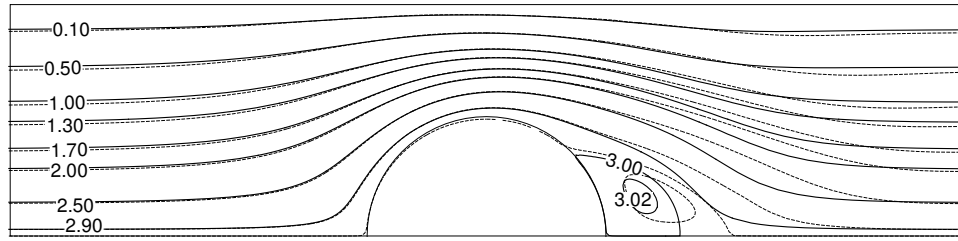


Figura 5.23: Comparación de las líneas de corriente a dos valores de viscoelasticidad para $We=0.7$ la línea sólida y $We=2$ la línea punteada. Los resultados para $Re=10$, $NCF=2000$, $\beta = 0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE.

5.6. Análisis a alto número de Reynolds

Ahora procedemos a evaluar el efecto de la inercia en el flujo planar alrededor del cilindro. Este estudio ya ha sido realizado en un medio infinito por Matallah et al. [71]. Pilate and Crochet [87] trabajaron con un fluido de segundo orden a un número de Reynolds $Re=10$, predicen un flujo secundario o vórtice después del cilindro. Este resultado concuerda con los resultados experimentales de James y Acosta [51].

Se utiliza la misma geometría pero ahora el perfil de velocidades es $u=1.5(1-y^2/4)$, para tener las mismas condiciones que Hu et al. [105], con $Re=10$, $We=0.7$, $\beta = 0.59$ y $b=100$. Se compararon las líneas de corriente y las velocidades u y v a dos diferentes valores de elasticidad para $We=0.7$ y $We=2$. Como resultado principal se obtiene el mismo vórtice que Hu et al. [105] a $We=0.7$. Al incrementar la viscoelasticidad a $We=2$ las líneas de corriente y las velocidades cambian en ambas direcciones, teniendo un mayor efecto después del cilindro. El tamaño del vórtice aumenta considerablemente en la dirección del flujo (ver las figuras 5.23-5.24).

Si se incrementa ahora el número de Reynolds de $Re=10$ a $Re=20$ con $We=0.7$, las líneas de corriente cambian con el aumento de la inercia y el vórtice incrementa su tamaño en dirección normal al flujo, ver figura 5.25. En el caso de las velocidades el efecto convectivo se manifiesta antes y después del cilindro, figura 5.26. Para valores altos de Reynolds, el efecto convectivo inicia su propagación antes del cilindro.

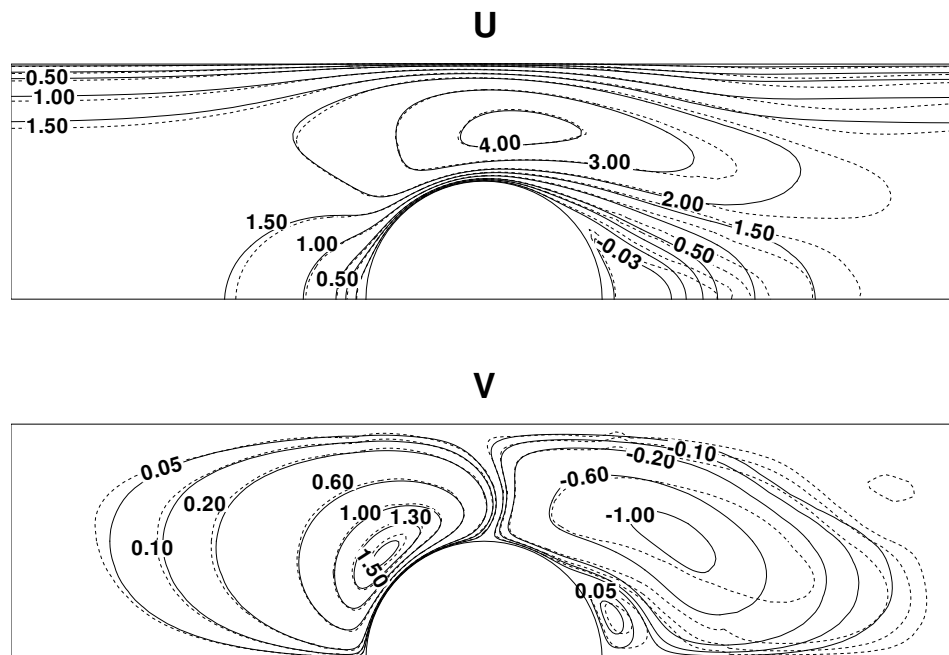


Figura 5.24: Comparación de las velocidades u, v para dos valores de viscoelasticidad, $We=0.7$ la línea sólida y $We=2$ la línea punteada. Los resultados para $Re=10$, $NCF=2000$, $\beta=0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE

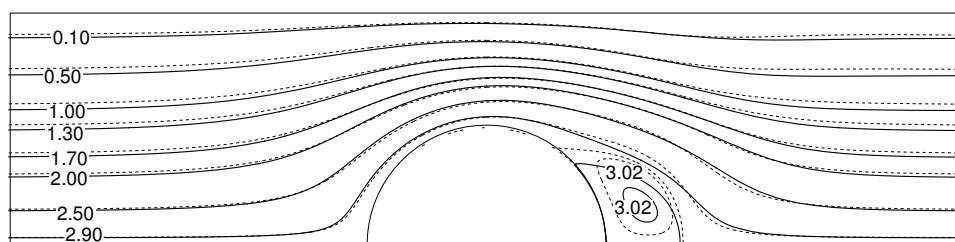


Figura 5.25: Comparación de las líneas de corriente para dos números de Reynolds, $Re=10$ (líneas sólidas) y $Re=20$ (líneas punteadas). Los resultados con $We=0.7$, $NCF=2000$, $\beta=0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE.

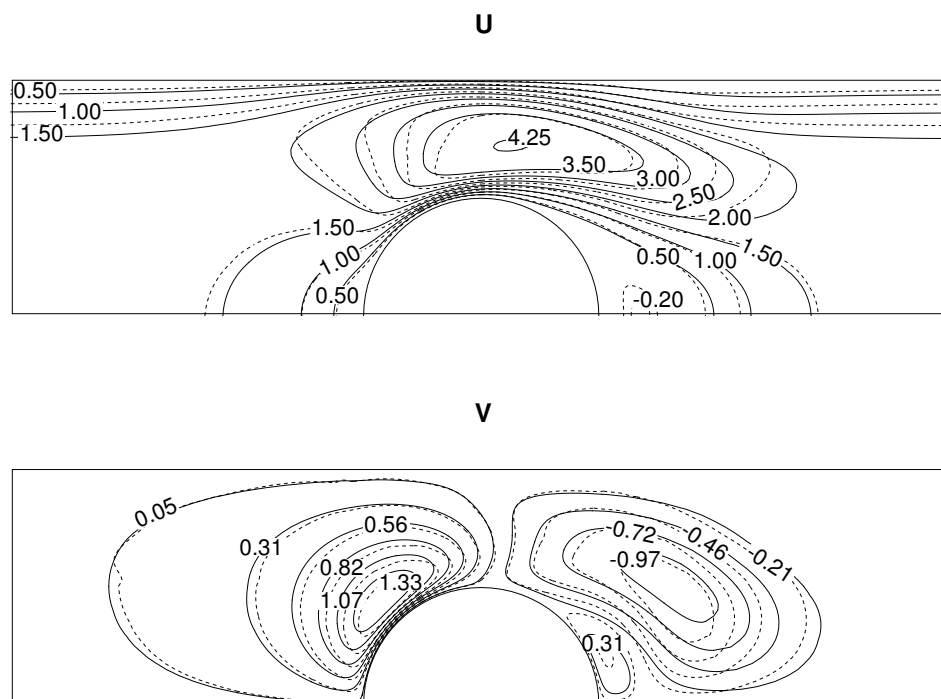


Figura 5.26: Comparación de las velocidades u, v para dos diferentes números de Reynolds, $Re=10$ las líneas sólidas y $Re=20$ las líneas punteadas. Los resultados son para $We=0.7$, $NCF=2000$, $\beta = 0.59$ y $b=100$ utilizando el modelo FENE.

5.7. Flujo alrededor de una esfera

En la última parte de este trabajo, el esquema numérico se amplía para tratar problemas de flujo uniforme alrededor de una esfera en un cilindro utilizando el modelo FENE. Se demuestra la convergencia con el refinamiento de la malla utilizando los siguiente parámetros: $We=3$, $Re=0.01$, $\beta = 1/9$ y $b=5$. Para todos los casos el número de campos de conformación se fija en $N_f = 2000$. El campo de velocidades a la entrada corresponde a un flujo uniforme, es decir, $u = 1$ y $v = 0$. La evolución del arrastre y los componentes de la contribución polimérica al tensor de esfuerzos viscoelástico alrededor de la esfera y sobre el eje de simetría se muestran en la figura 5.27 en función del grado de aproximación del polinomio, N . La evolución del arrastre promedio en tiempo en función del grado del polinomio se muestra en la figura 5.28. En la figura se observa que hay poca diferencia en el arrastre promedio en tiempo a diferentes valores de N , lo cual parece converger para grados de aproximación bajos, pero hay una gran diferencia en los componentes del esfuerzo polimérico alrededor de la esfera y en el eje de simetría. En particular, T_{xx} está sobreevaluado para valores pequeños de N . Claramente al refinar la malla genera predicciones más precisas de estas cantidades aunque en el arrastre no hay cambios significativos.

En la figura 5.29 se muestra la influencia del número de Weissenberg en la evolución del arrastre y en los componente de la contribución polimérica al tensor de esfuerzos viscoelástico alrededor de la esfera y sobre el eje de simetría. Hay una reducción en el arrastre y una relajación de los esfuerzos al aumentar el We . Este comportamiento es similar al observado en el problema del cilindro. La evolución del arrastre promedio en tiempo se muestra en la figura 5.30, en donde se mantiene constante el valor al llegar al estado estacionario para $t \geq 1$. La influencia de la viscoelasticidad en los contornos de los componentes de la contribución polimérica al tensor de esfuerzos viscoelástico se muestra en la figura 5.31. En esta figura, los contornos de los componentes corresponden a $We=1$ y $We=5$. Los esfuerzos normales y el esfuerzo cortante se relajan al incrementar el número de Weissenberg. También se muestran los contornos de la primera diferencia de esfuerzos normales a dos valores de We ,

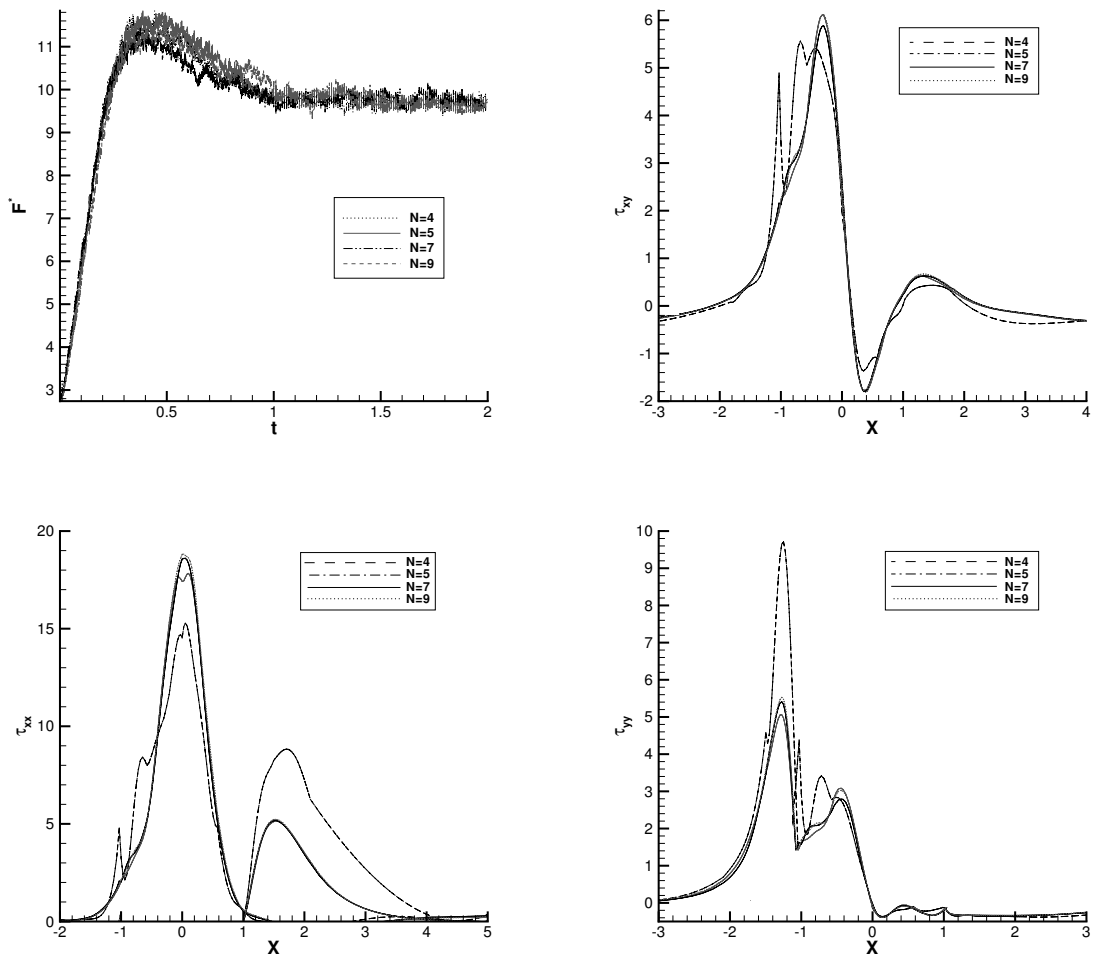


Figura 5.27: Influencia del grado del polinomio en el arrastre y de los esfuerzos normales en el eje de simetría y la superficie de la esfera para el modelo FENE. $Re=0.01$, $We=3$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=5$.

ver figura 5.32.

Finalmente, la influencia de la viscoelasticidad en las líneas de corriente se muestra en la figura 5.33, en donde el cambio de las líneas de corriente se manifiesta antes y después de la esfera al aumentar la viscoelasticidad.

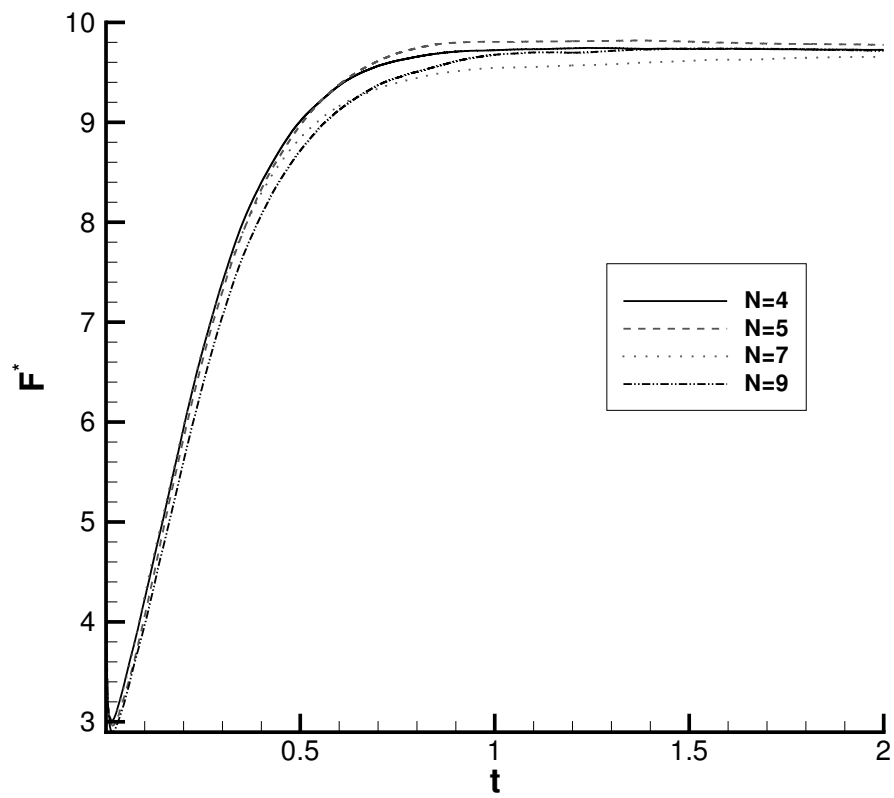


Figura 5.28: Influencia del grado del polinomio en el arrastre promedio en tiempo para $Re=0.01$, $We=3$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=5$.

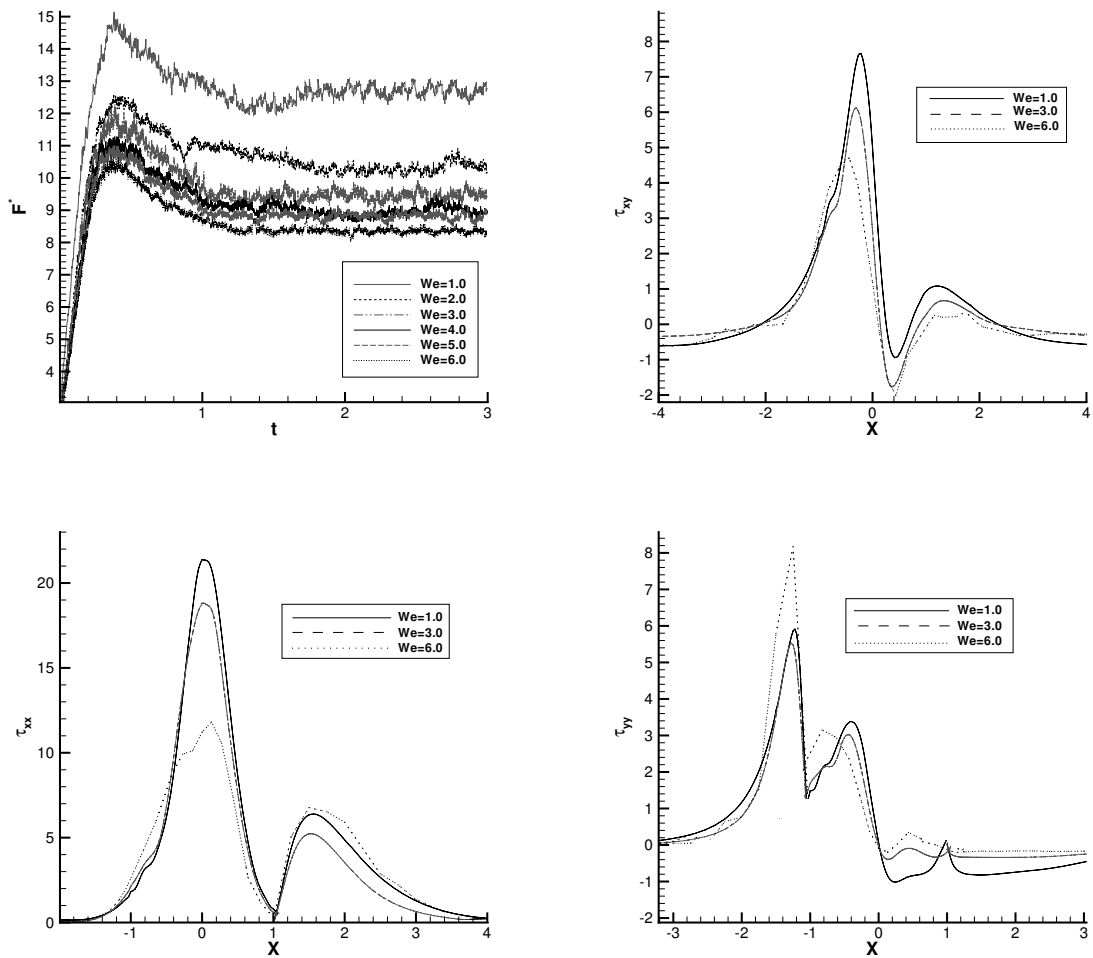


Figura 5.29: Efecto de la viscoelasticidad sobre la fuerza de arrastre y los esfuerzos para el modelo FENE. $Re=0.01$, $NCF=2000$ y $b=5$.

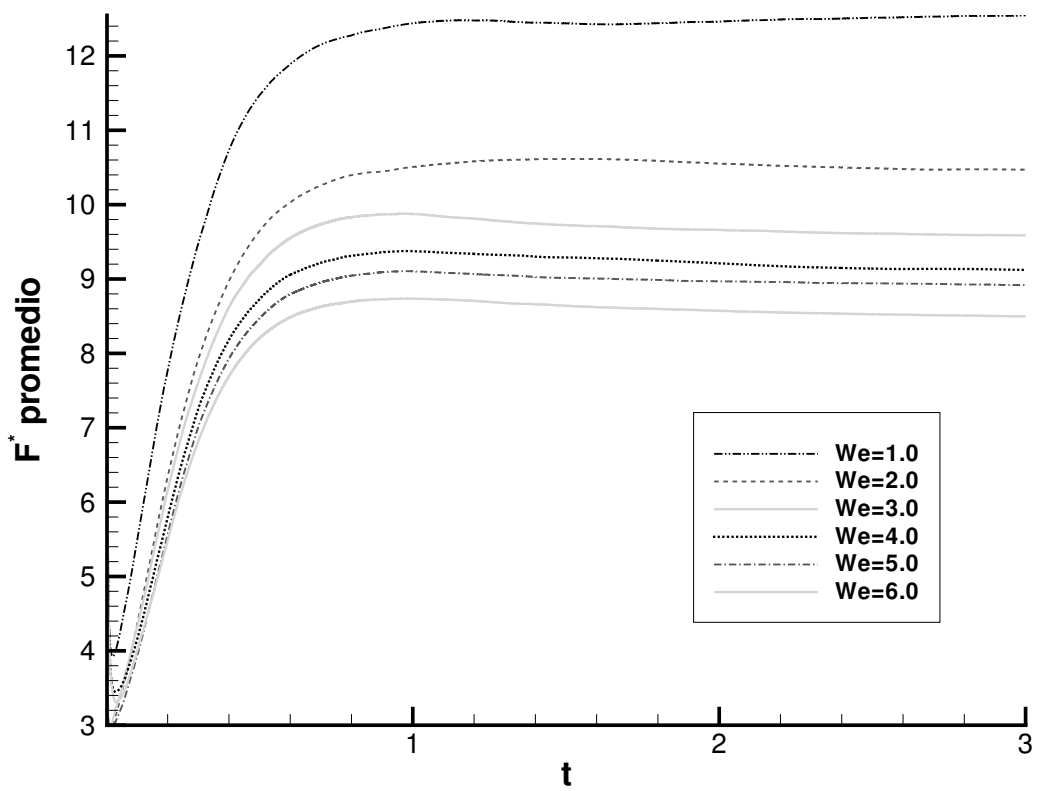


Figura 5.30: Influencia del número de Weissenberg en el arrastre promedio en tiempo para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $NCF=2000$ y $b=5$.

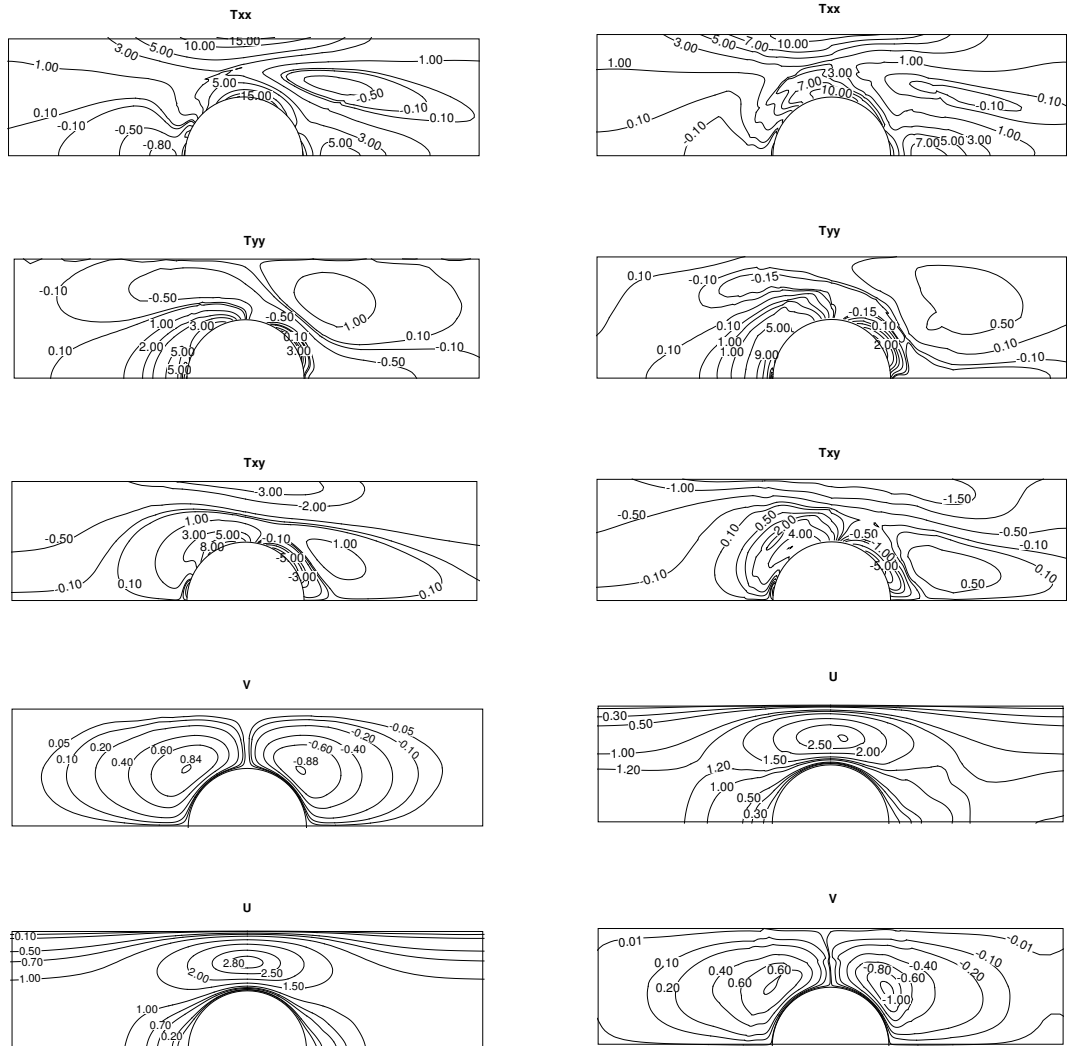


Figura 5.31: Los contornos para los esfuerzos (T_{xx}, T_{yy}, T_{xy}) y las velocidades (u, v) utilizando el modelo FENE (lado izquierdo a $We=1$ y el lado derecho a $We=6$). En ambos casos $Re = 0,01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ and $b=5$.

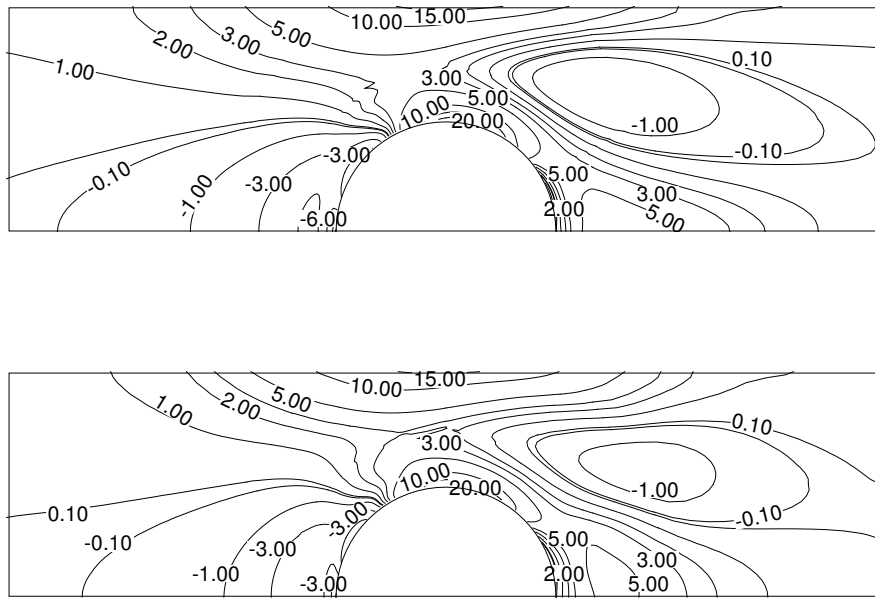


Figura 5.32: Comparación de los contornos de la primera diferencia de esfuerzos normale N_1 para el modelo FENE. $We=1$ (arriba) y $We=3.0$ (abajo). Para $Re=0.01$, $\beta = 1/9$, $b=5$, $N_f = 2000$ y $N=6$

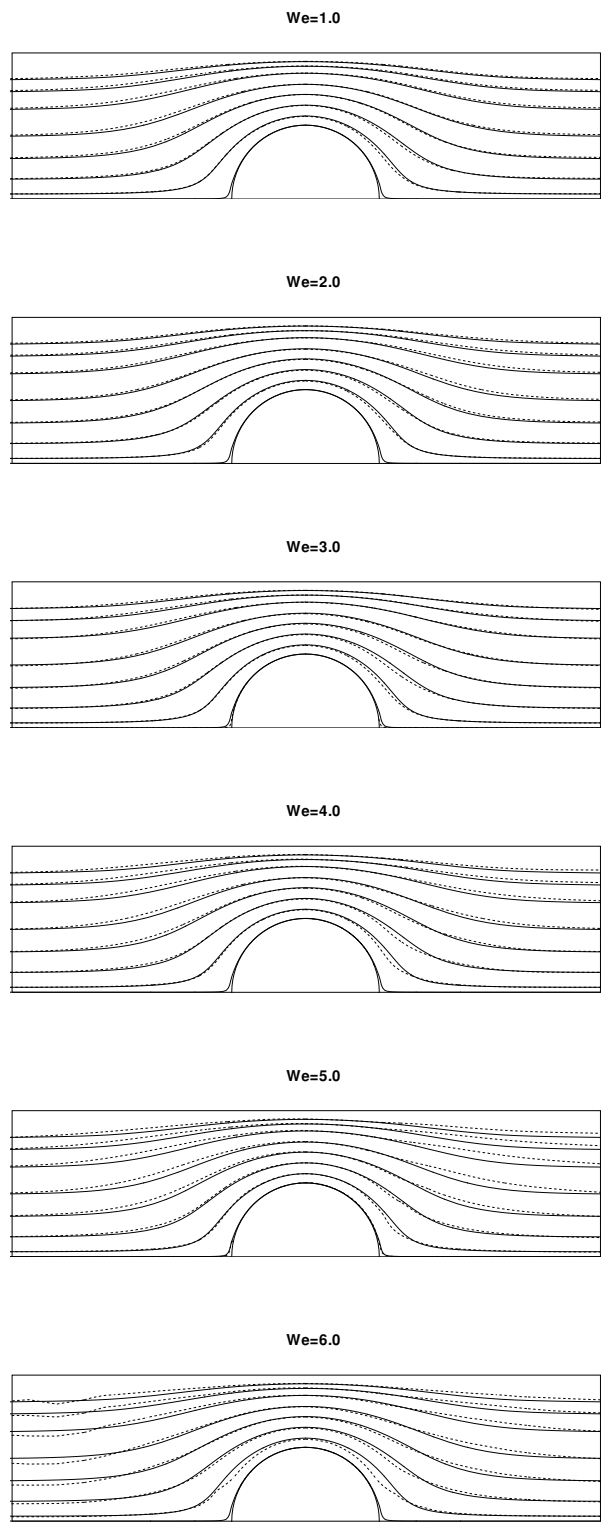


Figura 5.33: Comparación de las líneas de corriente a diferentes valores de viscoelasticidad para el flujo alrededor de una esfera utilizando el modelo FENE. La línea sólida es el caso Newtoniano. Línea punteada caso elástico. Los resultados son para $Re=0.01$, $NCF=2000$, $\beta = 1/9$ y $b=5$.

5.8. Conclusiones

En este trabajo, se desarrollaron simulaciones numéricas de soluciones poliméricas diluidas con el método de elemento espectral y utilizando el método de campos de conformación browniana. Las simulaciones se emplearon para predecir el flujo de fluidos viscoelásticos alrededor de un cilindro o una esfera trabajando con los modelos cinéticos Hooke, FENE y FENE-P. Para validar el método de campos de conformación browniana utilizando el modelo de Hooke se comparó con el modelo macroscópico Oldroyd-B que es matemáticamente equivalente, se obtuvieron excelentes resultados con estas dos diferentes pero equivalentes aproximaciones.

Previamente se resolvieron los problemas de Stokes y Navier-Stokes para evaluar la convergencia del método y comparar principalmente la fuerza de arrastre en la superficie en la superficie de la esfera y el cilindro usualmente reportados en la literatura.

Posteriormente se realizó una serie de cálculos con el modelo FENE para verificar la convergencia del método a través del refinamiento de la malla modificando el grado de aproximación del polinomio y el número de campos de conformación browniana. Se investigó la influencia sobre los perfiles de los componentes del tensor viscoelástico y de las líneas de corriente de: el número de Weissenberg, el número de Reynolds, el parámetro microestructural de extensión máxima de las mancuernas y la relación de viscosidades sobre el arrastre, principalmente.

El arrastre disminuye al incrementar el número de Weissenberg debido a que dominan los esfuerzos de corte a los esfuerzos de extensión alrededor del cilindro, generando una relajación de los esfuerzos al incrementar el número de Weissenberg.

El efecto sobre el arrastre en estado estacionario al incrementar el parámetro de extensión finita es despreciable, pero hay grandes diferencias en la parte transitoria, como era de esperarse a extensiones grandes los modelos cinéticos FENE y FENE-P se aproximan al modelo de Hooke. Aumentando la relación de viscosidades, β , el arrastre se aproxima al valor newtoniano y los esfuerzos disminuyen a medida que $\beta \rightarrow 1$.

Se encontró que hay una gran diferencia entre el modelo FENE y el modelo FENE-P, el modelo FENE-P es una mala aproximación del modelo FENE ya que éste al tomar el promedio de $\langle Q^2 \rangle$ modifica las propiedades estadísticas del modelo FENE, y se ve reflejada en las predicciones de los componentes del tensor polimérico y en las líneas de corriente.

En el caso de las líneas de corriente para el flujo alrededor de un cilindro hay cambios antes y después del cilindro al aumentar el número de Weissenberg, pero este cambio es mucho mayor después del cilindro. Debido al efecto convectivo hay cambio en las líneas de corriente antes y después del cilindro al aumentar el número de Reynolds. Se verificó la formación de un flujo secundario o vórtice detrás del cilindro al aumentar el número de Reynolds, lo cual ya había sido reportado experimentalmente. Este vórtice crece en dirección normal al flujo al aumentar la inercia y en dirección del flujo al aumentar la elasticidad.

El algoritmo numérico se modificó para trabajar con flujos axisimétricos para investigar el flujo de un fluido tipo FENE alrededor de una esfera en un cilindro. Al igual que el problema del cilindro, se muestra que los esfuerzos se relajan al incrementar el número de Weissenberg y el arrastre disminuye. Las líneas de corriente cambian después de la esfera a valores bajos de We , pero al incrementar el We hay cambios antes y después de la esfera.

En general, este método permite utilizar diferentes modelos de teoría cinética, es convergente y estable tanto a niveles altos de viscoelasticidad como de inercia.

5.9. Trabajo futuro

El trabajo futuro que se puede hacer como continuación sería:

- La utilización de una malla movable para trabajar el problema transitorio del descenso de una esfera en un tubo cilíndrico, antes de que ésta llegue a su estado estacionario. En este caso se evaluaría la respuesta viscoelástica del sistema.
- Se puede incorporar el uso de variables de control en la técnica browniana para disminuir el nivel de fluctuaciones o ruido del sistema. Esto se hace sin aumentar el número de campos de conformación brownianos.
- Estudiar el efecto de la longitud máxima variable en el modelo de la mancuerna.
- Utilizar modelos de viscosidad variable.
- Utilizar el modelo para trabajar con burbujas, utilizando diferentes formas de mallas y la condición de deslizamiento.

Apéndice A

Derivación de la Ecuación de Fokker-Planck para modelos de mancuernas

La posición y la orientación de una sola mancuerna se especifica por x_1, y_1, z_1 , y x_2, y_2, z_2 los centros de masa de las cuentas. Este conjunto de seis coordenadas se puede representar como un solo "punto del sistema" en un espacio de configuración de seis dimensiones. Para una disolución que contiene una gran número de mancuernas, la rapidez de cambio de los puntos del sistema dentro de un hipercubo de volumen $\Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \Delta z_2$ es

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, r_2, t) \Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \Delta z_2 \quad (\text{A.0.1})$$

donde Ψ es la función de distribución de conformaciones. La rapidez a la cual el sistema de puntos entra al hipercubo es

$$\begin{aligned} & (\dot{x}_1 \Psi)|_{x_1} \Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \Delta z_2 \\ & - (\dot{x}_1 \Psi)|_{x_1 + \Delta x_1} \Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \Delta z_2 \\ & + 10 \text{ terminos adicionales en las otras cinco coordenadas} \end{aligned}$$

Las dos expresiones anteriores se pueden igualar y dividir entre $\Delta x_1 \Delta y_1 \Delta z_1 \Delta x_2 \Delta y_2 \Delta z_2$; y obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r_1, r_2, t) &= \frac{(\dot{x}_1\Psi)|_{x_1} - (\dot{x}_1\Psi)|_{x_1-\Delta x_1}}{\Delta x_1} \\
&+ \frac{(\dot{y}_1\Psi)|_{y_1} - (\dot{y}_1\Psi)|_{y_1-\Delta y_1}}{\Delta x_1} \\
&+ \frac{(\dot{z}_1\Psi)|_{z_1} - (\dot{z}_1\Psi)|_{z_1-\Delta z_1}}{\Delta z_1} \\
&+ \frac{(\dot{x}_2\Psi)|_{x_2} - (\dot{x}_2\Psi)|_{x_2-\Delta x_2}}{\Delta x_2} \\
&+ \frac{(\dot{y}_2\Psi)|_{y_2} - (\dot{y}_2\Psi)|_{y_2-\Delta y_2}}{\Delta x_2} \\
&+ \frac{(\dot{z}_2\Psi)|_{z_2} - (\dot{z}_2\Psi)|_{z_2-\Delta z_2}}{\Delta z_2}
\end{aligned}$$

En el límite de $\Delta x_1, \Delta y_1, \text{etc.} \rightarrow 0$, obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\left(\frac{\partial \dot{x}_1 \Psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \dot{y}_1 \Psi}{\partial y_1} + \frac{\partial \dot{z}_1 \Psi}{\partial z_1}\right) - \left(\frac{\partial \dot{x}_2 \Psi}{\partial x_2} + \frac{\partial \dot{y}_2 \Psi}{\partial y_2} + \frac{\partial \dot{z}_2 \Psi}{\partial z_2}\right) \\
&= -\left(\frac{\partial}{\partial r_1} \cdot \dot{r}_1 \Psi\right) - \left(\frac{\partial}{\partial r_2} \cdot \dot{r}_2 \Psi\right) \tag{A.0.2}
\end{aligned}$$

la cual se conoce como *ecuación de continuidad* para Ψ , debido a su similitud con la ecuación de continuidad en hidrodinámica. Si

$$r_c = \frac{1}{2}(r_1 + r_2) \quad \text{y} \quad \mathbf{Q} = r_2 - r_1$$

tenemos que

$$r_1 = r_c - \frac{\mathbf{Q}}{2}, \quad r_2 = r_c + \frac{\mathbf{Q}}{2}$$

$$\dot{r}_1 = \dot{r}_c - \frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}, \quad \dot{r}_2 = \dot{r}_c + \frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}, \quad \frac{\partial r_c}{\partial r_1} = \frac{1}{2} = \frac{\partial r_c}{\partial r_2},$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial r_1} = -1, \quad \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial r_2} = 1,$$

lo que permite representar las derivadas.

$$\frac{\partial}{\partial r_1} = \frac{\partial r_c}{\partial r_1} \frac{\partial}{\partial r_c} + \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial r_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r_c} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \tag{A.0.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial r_2} = \frac{\partial r_c}{\partial r_2} \frac{\partial}{\partial r_c} + \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial r_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r_c} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \tag{A.0.4}$$

Ahora de la ecuación A.0.2

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r_c} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\right)\left(\dot{r}_c - \frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}\right)\Psi - \left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r_c} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\right)\left(\dot{r}_c + \frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}\right)\Psi \\
&= -\left(\frac{1}{2}\frac{\partial \dot{r}_c}{\partial r_c} - \frac{\partial \dot{r}_c}{\partial \mathbf{Q}} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r_c}\left(\frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial \dot{r}_c}{\partial r_c} + \frac{\partial \dot{r}_c}{\partial \mathbf{Q}}\right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r_c}\left(\frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\left(\frac{\dot{\mathbf{Q}}}{2}\right)\right)\Psi \\
&= -\left(\frac{\partial \dot{r}_c}{\partial r_c} + \frac{\partial \dot{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{Q}}\right)\Psi \\
&= -\left(\frac{\partial}{\partial r_c}(\dot{r}_c \Psi)\right) - \left(\Psi \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}(\dot{\mathbf{Q}} \Psi)\right) \tag{A.0.5}
\end{aligned}$$

con la suposición de un flujo homogéneo

$$\dot{r}_c = v_0 + [\kappa \cdot r_c],$$

donde v_0 es la velocidad inicial y κ es el gradiente de velocidades, lo que significa que

$$\left(\frac{\partial}{\partial r_c}(\dot{r}_c \Psi)\right) = 0,$$

entonces la ecuación A.0.5 se puede representar como

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}(\dot{\mathbf{Q}} \psi)\right). \tag{A.0.6}$$

Cuando el campo de velocidades homogéneo es dependiente del tiempo se describe en terminos de $\kappa(t)$ y $\dot{\mathbf{Q}}$. La manera en la cual la función de distribución cambia con el tiempo está gobernada por una ecuación diferencial parcial de segundo orden conocida con la ecuación de difusión o de Fokker-Planck,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\left\{[\kappa \cdot \mathbf{Q}]\psi - \frac{2kT}{\varsigma}\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\psi - \frac{2}{\varsigma}F^c\psi\right\}\right) \tag{A.0.7}$$

Apéndice B

Mancuernas de Hooke en la ecuación de Fokker-Planck

En los capítulos anteriores se mencionó que se puede derivar una ecuación constitutiva a partir de un modelo molecular, que en este caso consiste en una suspensión de mancuernas de Hooke en un disolvente newtoniano. Esta ecuación constitutiva es el modelo de Oldroyd B, derivado por Oldroyd [82] en 1950, en el cual la relación esfuerzo/deformación se escribe en forma tensorial, cumpliendo ciertos criterios de admisibilidad, y generalizando una ecuación viscoelástica lineal. Las ecuaciones constitutivas tipo Oldroyd son de las más simples para el modelamiento del comportamiento de disoluciones poliméricas diluidas bajo ciertas condiciones de flujo, considerando que la ley de fuerza de Hooke es el más simple para los modelos de mancuernas. Si sustituimos la ley de fuerza de las mancuernas de Hooke en la ecuación de Fokker-Planck A.0.7 obtenemos

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \left\{ [\kappa \cdot \mathbf{Q}] \psi - \frac{2kT}{\zeta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi - \frac{2}{\zeta} H \mathbf{Q} \psi \right\} \right) \quad (\text{B.0.1})$$

Ahora derivamos la ecuación constitutiva para el modelo de Oldroyd B. Si multiplicamos la ecuación A.0.6 por $\mathbf{Q}\mathbf{Q}$ e integramos en todo el espacio de conformaciones obtenemos

$$\int \mathbf{Q}\mathbf{Q} \frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{Q} = - \int \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} (\dot{\mathbf{Q}} \psi) \right) \mathbf{Q}\mathbf{Q} d\mathbf{Q} \quad (\text{B.0.2})$$

Como $\mathbf{Q}\mathbf{Q}$ es independiente del tiempo podemos escribir

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{Q}\mathbf{Q} \psi d\mathbf{Q} = - \int \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} (\dot{\mathbf{Q}} \psi \mathbf{Q}\mathbf{Q}) \right) d\mathbf{Q} + \int \left(\dot{\mathbf{Q}} \psi \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) d\mathbf{Q} \quad (\text{B.0.3})$$

El primer término del lado derecho se puede transformar en una integral de superficie utilizando el teorema de la divergencia de Gauss. La integral de superficie es cero ya que la función de distribución se desvanece en la superficie. Por lo tanto

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle = \left\langle \left(\dot{\mathbf{Q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle$$

Ahora insertando la ecuación de movimiento en una mancuerna de Hooke y la ecuación anterior obtenemos para $\dot{\mathbf{Q}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \left\langle \left([\kappa \cdot \mathbf{Q}] \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle - \frac{2kT}{\zeta} \left\langle \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \ln \psi \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle \\ &\quad - \frac{2}{\zeta} \left\langle \left(H\mathbf{Q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.0.4})$$

Promediando el segundo término tenemos que

$$\begin{aligned} &\int \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \ln \psi \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \psi d\mathbf{Q} \\ &= \int \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \psi \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) d\mathbf{Q} \\ &= \int \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \psi \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) d\mathbf{Q} - \int \psi \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) d\mathbf{Q} \\ &= \underbrace{\int_{\text{superficie}} \left(n \cdot \psi \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) dS}_{\text{integral de superficie es 0}} - \left\langle \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle \end{aligned}$$

ahora en la ecuación B.0.4

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle &= \left\langle \left([\kappa \cdot \mathbf{Q}] \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle + \frac{2kT}{\zeta} \left\langle \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle \\ &\quad - \frac{2}{\zeta} \left\langle \left(H\mathbf{Q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q}\mathbf{Q} \right) \right\rangle \\ &= \left\langle \left([\kappa \cdot \mathbf{Q}] 2\mathbf{Q} \right) \right\rangle + \frac{4kT}{\zeta} - \frac{4}{\zeta} \langle H\mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle \end{aligned}$$

Esto se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - \{ \kappa \cdot \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle \} - \{ \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle \cdot \kappa^T \} = \frac{4kT}{\zeta} - \frac{4}{\zeta} \langle H\mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle = \langle \overset{\nabla}{\mathbf{Q}\mathbf{Q}} \rangle \quad (\text{B.0.5})$$

La cantidad $\langle \overset{\nabla}{\mathbf{Q}\mathbf{Q}} \rangle$ se llama derivada convectiva superior de $\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle$. Ahora relacionamos los parámetros en este modelo que se derivó a partir de las consideraciones de teoría cinética, con las del modelo de Oldroyd-B derivadas de mecánica del medio continuo. La ecuación constitutiva de Oldroyd es

$$\tau + \lambda_1 \overset{\nabla}{\tau} = 2\eta_0(d + \lambda_2 \overset{\nabla}{d}) \quad (\text{B.0.6})$$

donde τ es el tensor de esfuerzos extra y η_0 es la viscosidad a corte cero. Separamos el tensor de esfuerzos en contribución del disolvente y contribución polimérica

$$\tau = \tau_p + 2\eta_s d, \quad \text{donde} \quad \overset{\nabla}{\tau} = \overset{\nabla}{\tau}_p + 2\eta_s \overset{\nabla}{d},$$

y donde τ_p es el esfuerzo viscoelástico, y λ_1 y λ_2 son los tiempos característicos de relajación y de retardo respectivamente para el fluido. Las viscosidades del polímero y del disolvente suma la viscosidad a corte cero, $\eta_0 = \eta_p + \eta_s$. Por lo tanto

$$\tau_p + 2\eta_s d + \lambda_1 \overset{\nabla}{\tau}_p + 2\lambda_1 \eta_s \overset{\nabla}{d} = 2\eta_0(d + \lambda_2 \overset{\nabla}{d}),$$

es decir

$$\tau_p + \lambda_1 \overset{\nabla}{\tau}_p = 2d(\eta_0 - \eta_s) + 2\overset{\nabla}{d}(\lambda_2 \eta_0 - \lambda_1 \eta_s).$$

Si tomamos $\lambda_1 \eta_s = \lambda_2 \eta_0$ para eliminar $\overset{\nabla}{d}$, y como $\eta_0 = \eta_p + \eta_s$, obtenemos

$$\tau_p + \lambda_1 \overset{\nabla}{\tau}_p = 2\eta_p d. \quad (\text{B.0.7})$$

ahora

$$d = -\frac{\overset{\nabla}{I}}{2}, \quad \tau_p = H \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - kTI, \quad \overset{\nabla}{\tau}_p = H \langle \overset{\nabla}{\mathbf{Q}\mathbf{Q}} \rangle - kT \overset{\nabla}{I},$$

asi que en B.0.7

$$H \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - kTI + \lambda_1 H \langle \overset{\nabla}{\mathbf{Q}\mathbf{Q}} \rangle - \lambda_1 kT \overset{\nabla}{I} = -\eta_p \overset{\nabla}{I},$$

lo cual se reduce a

$$\langle \overset{\nabla}{\mathbf{Q}\mathbf{Q}} \rangle = \frac{kT}{\lambda_1 H} \overset{\nabla}{I} + \frac{kT}{H} \overset{\nabla}{I} - \frac{\eta_p}{\lambda_1 H} \overset{\nabla}{I} - \frac{\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle}{\lambda_1} \quad (\text{B.0.8})$$

Comparando los términos en $\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle$ y $\overset{\nabla}{I}$ en B.0.8 y B.0.5 observamos que

$$\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle : -\frac{1}{\lambda_1} = -\frac{4H}{\zeta},$$

$$\overset{\nabla}{I} : -\frac{4kT}{\zeta} = \frac{kT}{\lambda_1 H},$$

lo cual proporciona el tiempo característico de relajación del fluido,

$$\lambda_1 = \frac{\zeta}{4H} \quad (\text{B.0.9})$$

Ahora si comparamos el término en $\overset{\nabla}{I}$ en B.0.8 y B.0.5 tenemos

$$\overset{\nabla}{I} : \frac{kT}{H} = \frac{\eta_p}{\lambda_1 H},$$

sustituyendo en B.0.9 para λ_1 ,

$$\eta_p = \frac{kT\zeta}{4H}.$$

Observamos que B.0.5 es equivalente a la ecuación UCM en la siguiente forma

$$\tau_p + \left(\frac{\zeta}{4H}\right)\overset{\nabla}{\tau}_p = 2\left(\frac{kT\zeta}{4H}\right)d$$

Lo cual demuestra que el modelo de manguernas de Hooke es equivalente al modelo de Oldroyd-B.

Ahora, a partir de la ecuación de Fokker-Planck A.0.7, introducimos la variable adimensional

$$\mathbf{Q}^* = \frac{\mathbf{Q}}{\sqrt{\frac{kT}{H}}}, \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}^*} \frac{\partial \mathbf{Q}^*}{\partial \mathbf{Q}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{kT}{H}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}^*}$$

Si tomamos $\lambda = \zeta/(4H)$, el tiempo de relajación característico del fluido al igual que en B.0.9, y ponemos estas variables adimensionales dentro de A.0.7, obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{Q}^*, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}^*} \{[\kappa \cdot \mathbf{Q}^*] - \frac{1}{2\lambda} F^{(c)*}\} \psi(\mathbf{Q}^*, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}^*} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}^*} \frac{1}{\lambda} \psi(\mathbf{Q}^*, t), \quad (\text{B.0.10})$$

es una forma adimensional de la ecuación de Fokker-Planck. No se utilizará el (*) en la notación.

Apéndice C

Equivalencia entre las ecuaciones diferenciales estocásticas y la ecuación de Fokker-Planck

La ecuación diferencial estocástica asociada con la ecuación de Fokker-Planck (A.0.7) es

$$dX(t) = A(X(t), t)dt + B(X(t), t)dW(t), \quad (\text{C.0.1})$$

donde la matriz de difusión

$$D(x, t) = B(X(t), t)dW(t), \quad (\text{C.0.2})$$

y el proceso estocástico $W(t)$ es un proceso Wiener multidimensional. Los componentes de $W(t)$ son procesos Wiener independientes, es decir, son procesos Gaussianos con media cero y covarianza $\langle W(t)W(t') \rangle = \min(t, t')I$. Para más detalles ver [80].

Teorema Si las funciones A y B en $\mathbb{R}^d \times T$ satisfacen las condiciones de Lipschitz

$$|A(x, t) - A(y, t)| \leq c|x - y| \quad (\text{C.0.3})$$

$$|B(x, t) - B(y, t)| \leq c|x - y|$$

y las condiciones de crecimiento lineal

$$|A(x, t)| \leq c(1 + |x|), \quad (\text{C.0.4})$$

$$|B(x, t)| \leq c(1 + |x|),$$

para todo $x \in \mathbb{R}^d$, $t \in T$, para alguna constante c entonces la única solución de la ecuación diferencial estocástica C.0.1 es un proceso de Markov. Si A y B son funciones continuas, el generador infinitesimal de este proceso de Markov está dado por el operador diferencial de segundo orden, \mathcal{L}_t , el cual define el lado derecho de la ecuación de Fokker-Planck, es decir.

$$\mathcal{L}_t = -\frac{\partial}{\partial X}\{A(x,t)\} + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x} : \{D(x,t)\}. \quad (\text{C.0.5})$$

Por lo tanto en el caso de la forma adimensional de la ecuación de Fokker-Planck para los modelos de mancuernas B.0.10 y C.0.1 tenemos,

$$\begin{aligned} X(t) &= Q(t), \\ A(Q(t), t) &= \{[\kappa \cdot Q] - \frac{1}{2\lambda}F^{(c)}\} \end{aligned} \quad (\text{C.0.6})$$

y

$$D(Q(t), t) = \frac{1}{\lambda}I$$

Ahora la ecuación diferencial estocástica equivalente a la ecuación de Fokker-Planck A.0.7 está dada por

$$dQ(t) = \left([\kappa(t) \cdot Q(t)] - \frac{1}{2\lambda}F^{(c)}\right)dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}}dW(t) \quad (\text{C.0.7})$$

Apéndice D

Ecuación de Poisson (2D)

Las ideas fundamentales del método del elemento espectral lo ilustramos con la ecuación de Poisson en dos dimensiones, Ω , con condiciones homogéneas de Dirichlet en las fronteras, $\partial\Omega$

$$-\nabla^2 u = f \in \Omega, \quad (\text{D.0.1})$$

$$u = 0 \quad \text{sobre} \quad \partial\Omega, \quad (\text{D.0.2})$$

La discretización se basa en la idea de Rayleigh-Ritz para generar la llamada **forma débil**. El procedimiento es multiplicar la ecuación D.0.1 por una función prueba arbitraria, (v) , e integrar por partes sobre el dominio, Ω , obtenemos

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dA = \int_{\Omega} f u dA + \oint_{\partial\Omega} v \frac{\partial u}{\partial \hat{n}} ds, \quad \forall v, \quad (\text{D.0.3})$$

La forma débil D.0.3 es una formulación alternativa de la forma fuerte D.0.1. El término débil se refiere al hecho de que D.0.3 permite una gran variedad de soluciones así que ∇^2 no existe en todos lados.

El último término en D.0.3 se determina especificando las condiciones de Neumann o Dirichlet en las fronteras de Ω . Especificando condiciones de frontera de Neumann se obtiene una contribución en el segundo término del lado derecho. Por otro lado, si el valor de la función (u) se impone en la frontera, entonces de acuerdo con el procedimiento de discretización de Rayleigh-Ritz, no hay necesidad de evaluar la respuesta variacional de los puntos en la frontera con respecto a la función prueba y (v) será cero en esos puntos. Ahora, para las condiciones de Dirichlet el término de frontera en la ecuación D.0.3 no contribuye en el segundo término del lado derecho y la forma débil de la ecuación D.0.1 es

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dA = \int_{\Omega} f v dA \quad (\text{D.0.4})$$

para todas las funciones (v) con $v = 0$ sobre $\partial\Omega$.

El siguiente paso en la discretización del método de elementos espectrales es dividir el dominio, Ω , en K elementos disjuntos, que no se sobreponen, los cuales son cuadriláteros.

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^K \Omega_k \quad (\text{D.0.5})$$

El sistema discreto correspondiente a D.0.4 se obtiene por el trazado de cada elemento, Ω_k , a un dominio de referencia sobre el cual se lleva a cabo la integración utilizando la cuadratura Gauss-Lobatto-Legendre. Posteriormente se suman las contribuciones de cada elemento. Si definimos

$$a^k(u, v) = \int_{\Omega_k} \nabla u \cdot \nabla v dx dy \quad (\text{D.0.6})$$

y

$$(f, v)^k = \int_{\Omega_k} f v dx dy \quad (\text{D.0.7})$$

entonces D.0.4 tiene la forma

$$\sum_{k=1}^K a^k(u, v) = \sum_{k=1}^K (f, v)^k \quad (\text{D.0.8})$$

Las integrales en D.0.6 se pueden escribir con respecto al trazado de los elementos espectrales (forma bilineal), $(x, y) \in \Omega_k \rightarrow (\eta, \xi) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$, como

$$a^k(u, v) = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \bar{\nabla} u^k(\eta, \xi) \cdot \bar{\nabla} v^k(\eta, \xi) |J^k(\eta, \xi)| d\eta d\xi \quad (\text{D.0.9})$$

donde

$$\bar{\nabla} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \hat{i} + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \hat{j}, \quad (\text{D.0.10})$$

y

$$J = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right), \quad (\text{D.0.11})$$

De la misma forma, D.0.7 se puede escribir con las nuevas variables

$$(f, v)^k = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f^k(\eta, \xi) v^k(\eta, \xi) |J^k(\eta, \xi)| d\eta d\xi. \quad (\text{D.0.12})$$

Como ya se había descrito anteriormente, productos tensoriales de los polinomios de expansión se utilizan para aproximar la solución sobre cada elemento

$$u^k(\eta, \xi) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N u_{ij}^k h_i(\eta) h_j(\xi). \quad (\text{D.0.13})$$

donde u_{ij}^k es el valor de (u) en los puntos (η_i, ξ_j) dentro del elemento espectral trazado, Ω_k , y h_i es el interpolador de Lagrange de grado N a través de los puntos Gauss-Lobatto-Legendre. La selección de los puntos Gauss-Lobatto-Legendre se hace por dos razones. La primera, es debido a que iniciamos la discretización con la forma débil de la ecuación D.0.3 y únicamente necesitamos imponer continuidad de (u) a través de las fronteras. Esto va acompañado de una forma natural por la selección de los puntos Gauss-Lobatto y los interpoladores de Lagrange. Segunda, las propiedades de ortogonalidad de los polinomios de Lagrange preservan la simetría de la forma autoadjunta de la ecuación D.0.1. Generalmente en las técnicas de solución variacional de Galerkin las funciones prueba, (v) , se seleccionan a partir de las bases utilizadas para aproximar la solución D.0.13 de manera que son diferentes de cero es sólo un punto de los puntos de colocación global. Esto es necesario para preservar la simetría en el sistema de discretización. Por estas razones las funciones prueba se seleccionan por ser

$$v^k(\eta, \xi) = h_p(\eta) h_q(\xi), \quad p, q \in (0, \dots, N) \quad (\text{D.0.14})$$

Si la expansión D.0.13 y las funciones prueba D.0.14 se introducen en la integral D.0.9 y realizamos la cuadratura de Gauss-Lobatto, entonces $\forall p, q \in (0, \dots, N)$ y tenemos

$$\begin{aligned} a_{pq}^k &= \sum_{m=0}^N [h'_p(\eta_m)(\eta_x^2 + \eta_y^2)_{m,q} |J(\eta_m, \xi_q)| w_m w_q [\sum_{i=0}^N u_{iq}^k h'_i(\eta_m)]] \\ &+ \sum_{n=0}^N [h'_q(\eta_n)(\xi_x^2 + \xi_y^2)_{p,n} |J(\eta_p, \xi_n)| w_p w_n [\sum_{j=0}^N u_{pj}^k h'_j(\eta_n)]] \\ &+ \sum_{j=0}^N [h'_q(\eta_j)(\eta_x \xi_x + \eta_y \xi_y)_{p,j} |J(\eta_p, \xi_j)| w_p w_j [\sum_{i=0}^N u_{ij}^k h'_i(\eta_p)]] \\ &+ \sum_{i=0}^N [h'_p(\eta_i)(\eta_x \xi_x + \eta_y \xi_y)_{i,q} |J(\eta_i, \xi_q)| w_i w_q [\sum_{j=0}^N u_{ij}^k h'_j(\eta_q)]] \\ &= \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N A_{pqij}^k u_{ij}^k, \end{aligned} \quad (\text{D.0.15})$$

donde w_i son los pesos asociados con la regla de cuadratura. Para completar la discretización, D.0.13 y D.0.14 se insertan en D.0.12 y se realiza nuevamente la

cuadratura $\forall p, q \in (0, \dots, N)$

$$\begin{aligned}
(f, v)_{pq}^k &= \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N f^k(\eta_i, \xi_j) h_p(\eta_i) h_q(\xi_j) |J(\eta_i, \xi_j)| w_i w_j \\
&= \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N B_{pqij}^k f_{ij}^k
\end{aligned} \tag{D.0.16}$$

El sistema toma la forma

$$\sum_{k=1}^K \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N A_{pqij}^k u_{ij}^k = \sum_{k=1}^K \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N B_{pqij}^k f_{ij}^k \tag{D.0.17}$$

Todos los q, p se ensamblan o reúnen por la eliminación de los nodos correspondientes, debido a las condiciones de frontera y considerando las contribuciones de los renglones y columnas correspondientes a los nodos globales que están en las interfaces o que se comparten con otros elementos. Este procedimiento de ensamble a menudo se refiere como una suma "dura" en el contexto de los elementos numéricos. Gracias a las propiedades ortogonales de los polinomios de Legendre la matriz A es simétrica definida positiva lo cual permite el uso del algoritmo gradiente conjugado para resolver el sistema. El algoritmo requiere evaluaciones sucesivas del producto Au , el cual puede costar $O(KN^4)$ operaciones. Pero se puede reducir el costo a $O(KN^3)$ utilizando un mejor procedimiento de la factorización del producto tensorial [53].

Apéndice E

Ecuaciones en componentes

Las ecuaciones de componentes en coordenadas cartesianas se muestran a continuación. Se considera $u = (u_x, u_y, u_z) = (u_x, u_y, 0)$ y tomamos $u_x = u$ y $u_y = v$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{E.0.1})$$

$$Re\left(\frac{\partial u}{\partial t} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \beta\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \beta\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (\text{E.0.2})$$

$$Re\left(\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x}\right) = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \beta\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \beta\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial P}{\partial y} \quad (\text{E.0.3})$$

E.1. Ecuaciones de Stokes para los problemas planar y axisimétrico

Para el caso axisimétrico se considera $u = (u_r, u_\theta, u_z) = (u_r, 0, u_z)$ y tomamos $u_r = v$, $u_z = u$, $r = y$, $z = x$ para comparar las ecuaciones e identificar fácilmente los términos extras al utilizar coordenadas cilíndricas.

Planar	Axisimétrico
$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{v}{y} = 0$
$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{xy}}{\partial y}$	$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{xy}}{\partial y} + \frac{T_{xy}}{y}$
$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial T_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yy}}{\partial y} + \frac{T_{yy} - \tau_{\theta\theta}}{y}$	$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial T_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yy}}{\partial y} + \frac{T_{yy} - \tau_{\theta\theta}}{y}$
$T_{xx} = 2\eta\frac{\partial u}{\partial x}$	$T_{xx} = 2\eta\frac{\partial u}{\partial x}$
$T_{xy} = \eta\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)$	$T_{xy} = \eta\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)$
$T_{yy} = 2\eta\frac{\partial v}{\partial y}$	$T_{yy} = 2\eta\frac{\partial v}{\partial y} \quad T_{\theta\theta} = 2\eta\frac{v}{y}$

(E.1.1)

Bibliografía

- [1] M.A. Alves, F.T. Pinho, P.J. Oliveira. The flow of viscoelastic fluid past a cylinder: finite-volume high-resolution methods. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 97:207-232 (2001)
- [2] V. D. Ambeshkar, R. A. Mashelkar. On the role of stress-induced migration on time dependent terminal velocities of falling spheres. *Rheol. Acta* 29 (1990) 31-42
- [3] M. T. Arigo, D. Rajagopalan, N. Shapley, G. H. McKinley. The sedimentation of a sphere through an elastic fluid. 1. Steady motion. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 60:225-257 (1995)
- [4] L. Arnold. *Stochastic Differential Equations: Theory and Applications*. Wiley-Interscience, New York London Sydney Toronto 1974
- [5] F.P.T. Baaijens., S.H.A. Selen, H.P.W. Baaijens, G.W.M. Peters, and H.E.H. Meijer. Viscoelastic flow past a confined cylinder of a low density polyethylene melt. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 68:173-203 (1997)
- [6] L.E. Becker, G.H. McKinley, H.K. Rasmussen, and O. Hassager. The unsteady motion of a sphere in a viscoelastic fluid. *Journal of Rheology*, 38:377-403, (1994)
- [7] P. Biller and F. Petruccione. The flow of dilute polymer solutions in confined geometries: a consistent numerical approach. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 25:347-364 (1987)
- [8] R. B. Bird, C. F. Curtiss, R.C. Armstrong and O. Hassager. *Dynamics of Polymer Liquids*. Vol. 1. John Wiley, New York, 2 edition. 1987
- [9] R. B. Bird, C. F. Curtiss, R.C. Armstrong and O. Hassager. *Dynamics of Polymer Liquids*. Vol. 2. Kinetic Theory. John Wiley, New York, 2 edition. 1987
- [10] C. Bisgaard. Velocity fields around spheres and bubbles investigated by laser-doppler anemometry. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 12:283-302 (1983)
- [11] C. Bodart and M. J. Crochet. The time-dependent flow of a viscoelastic fluid around a sphere. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 54:303-329 (1994)

- [12] J. Bonvin and M. Picasso. Variance reduction methods for CONNFESSIT-like simulations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 84:191-215 (1999)
- [13] R. A. Brown, G. H. McKinley. Report on the VIIIth International workshop on numerical methods in viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 52:407-413 (1994)
- [14] M. B. Bush. On the stagnation flo behind a sphere in a shear-thinning viscoelastic liquid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 55:229-247 (1994)
- [15] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni, T.A. Zang, *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer, Berlin, 1988.
- [16] E.O.A. Carew and P. Townsend. Non-Newtonian flow past a sphere in a long cylindrical tube. *Rheol. Acta* 27 (1988) 125-129
- [17] Caswell, O. Manero, B. Mena. Recent developments on the slow viscoelastic flow past sphere and bubbles. *Rheology reviews 2004*, Binding D. M. and Walters K. (Eds), British Society of Rheology, Aberystwyth, Wales. 197-223 (2004)
- [18] C. Chauvière and R.G. Owens. How accurate is your solution? Error indicators for viscoelastic flow calculations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 95:1-33 (2000)
- [19] C. Chauvière. A new method for micro-macro simulations of viscoelastic flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23: 2123-2140, 2002
- [20] C. Chauvière and A. Lozinski. An efficient technique for simulations of viscoelastic flows, derived from the Brownian configuration field method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24: 1823-1837, 2003
- [21] C. Chauvière and A. Lozinski. Simulation of dilute polymer solutions using a Fokker-Planck equation. *Computers and Fluids*. 33:687-696 (2004)
- [22] Chávez Angel Enrique. The depleted region phenomenon. Department of Mathematics, University of Wales Aberystwyth, UK. October 1997
- [23] R. P. Chhabra. *Bubbles, drops and particles in Non-Newtonian fluids* CRC. Press Boca Raton, FL 1992
- [24] R. P. Chhabra. *Bubbles, drops and particles in Non-Newtonian fluids* CRC. Press Boca Raton. 2nd Edtion, 2002
- [25] M.D. Chilcott, J.M. Rallison. Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 29:381-432 (1988)

- [26] Y. I. Cho, J. P. Hartnett and W. Y. Lee. Non-newtonian viscosity measurements in the intermediate shear rate range with the falling ball viscosimeter. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 15:61-74 (1984)
- [27] W. Cox. *Ordinary Differential Equations*. Computer Science and Applied Mathematics, Aston University, 1991
- [28] M. J. Crochet, V. Legat. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 42:283-(1992)
- [29] F. Debae, V. Legat, and M.J. Crochet. Practical evaluation of four mixed finite element methods for viscoelastic flows. *Journal of Rheology*, 38:421-443 (1994)
- [30] E. Degand, K. Walters. On the motion of a sphere falling through an elastic liquid contained in a tightly-fitting cylindrical container. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 57:103-115 (1995)
- [31] M. O. Deville, P. F. Fisher, E. H. Mund. *High-Order Methods for Incompressible Fluid Flow*. Cambridge, University press. 2002
- [32] Y. Fan , M. J. Crochet. High-order finite element methods for steady viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 57:283-311 (1995)
- [33] Y.R. Fan. A comparative study of the discontinuous Galerkin and continuous SUPG finite element methods for computational of viscoelastic flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 141 (1997) 47-65
- [34] Y.R. Fan, R.I. Tanner, and N. Phan-Thien. Galerkin/least-square finite element methods for steady viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 84:233-256 (1999)
- [35] Y. Fan. Limiting behaviour of the solutions of a falling sphere in a tube filled with viscoelastic fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 110:77-102 (2003)
- [36] M. Fortin, A. Fortin. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 32:295-310 (1989)
- [37] X. Gallez, P. Halin, G. Lielens, R. Keunings, and V. Legat. The adaptive Lagrangian particle method for macroscopic and micro-macro computations of time-dependent viscoelastic flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 180:345-364 (1999)
- [38] T. C. Gard. *Introductions to Stochastic Differential Equations*. Marcel Dekker, New York Basel (Monographs and Textbooks in Pure and Applied Mathematics, vol. 114) (1988)
- [39] M. I. Gerritsma and T. N. Phillips. Spectral Element Methods for axisymmetric Stokes problems. *J. Comput. Phys.*, 164:81-103,(2000)

- [40] M. I. Gerritsma and T. N. Phillips. Compatible spectral approximation for the velocity-pressure-stress formulation of the Stokes problem. *SIAM J.Sci.Comput.*, 20:1530-1550 (1999)
- [41] B. Gervang, A.R. Davies, and T.N. Phillips. On the simulation of viscoelastic flow past a sphere using spectral methods. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 44:281-306 (1992)
- [42] G. Gheissary, B.H.A.A. van den Brule. Unexpected phenomena observed in particle settling in non-newtonian media. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 67:1-18 (1996)
- [43] H. Giesekus. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 11:69-109 (1982)
- [44] W.J. Gordon and C.A. Hall. Construction of curvilinear coordinate systems and application to mesh generation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 7:461-477,1973
- [45] J. Happel and H. Brenner. *Low reynolds numer Hydrodynamics*, Englewood Cliffs, NJ; Prentice Hall,1965.
- [46] P. Halin, G. Lielens, R. Keunings and V. Legat. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 79:387-403 (1998)
- [47] O. Hassanger. Working group on numerical techniques. *Journal of Non-Newtonian Fluid mechanics*, 29: 2-5 (1988)
- [48] M. Herrchen and H. C. Öttinger. A detailed comparison of various FENE dumbbell models. *Journal of Non-Newtonian Fluid mechanics*, 68: 17-42 (1997)
- [49] J.R. Herrera-Velarde, R. Zenit, D. Chehata, B. Mena. The flow of non-Newtonian fluids around bubbles and its connection to the jump discontinuity. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 111:99-109 (2003)
- [50] M. A. Hulsen, A. P. G. van Heel, B.H.A.A. van den Brule. Simulation of viscoelastic flows using Brownian configuration fields. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 70:79-101 (1997)
- [51] D.F. James, A.J. Acosta. On the slow flow of viscoelastic liquids past a circular cylinder. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 42:269-288 (1970)
- [52] H. Jin. A subdomain residual method for a posteriori error estimates of finite element solutions of viscoelastic fluid flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 130 (1996) 93-113
- [53] G.E.M. Karniadakis, S.J. Sherwin, *Spectral/hp Element Methods for CFD*, Oxford University Press, Oxford, 1999

- [54] R. Keunings. On the Peterlin approximation for finitely extensible dumbbells. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 68: 85-100. (1997)
- [55] R. Keunings, A survey of computational rheology, Plenary lecture, Proc. 13th Int. Congr. on Rheology, Binding D. M. et al. (Eds.), British Society of Rheology, Glasgow, Vol. 1:7-14 (2000)
- [56] R. Keunings, Micro-Macro methods for the multi-scale simulation of viscoelastic flow using molecular models of kinetic theory. *Rheology reviews 2004*, Binding D. M. and Walters K. (Eds), British Society of Rheology, Aberystwyth, Wales (2004) 67-98
- [57] R. C. King, M. N. Apelial, R. C. Armstrong, R. A. Brown. Numerical stable element techniques for viscoelastic calculations in smooth and singular geometries. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29:147-216 (1988)
- [58] R.G. Larson. *Constitutive equations for polymer melts and solutions*. Butterworth, Boston, (1988)
- [59] M. Laso and H.C. Öttinger, Calculation of viscoelastic flow using molecular models: The CONNFFESSIT approach. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 47:1-20 (1993)
- [60] M. Laso, M Picasso and H. C. Öttinger, two dimensional, time dependent viscoelastic flow calculations using CONNFFESSIT, *Aiche J.*, 1996
- [61] G. Lielens, P. Halin, I. Jaumain, R. Keunings, and V. Legat. New closure approximation for the kinetic theory of finitely extensible dumbbells. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 76:249-279 (1998)
- [62] G. Lielens, R. Keunings, and V. Legat. The FENE-L and FENE-LS closure approximations to the kinetic theory of finitely extensible dumbbells. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 87:179-196 (1999)
- [63] A. Lozinski and R.G. Owens. A Fokker-Planck simulation of fast flows of concentrated polymer solutions in complex geometries. *J. Rheol.*, 47:535-561 (2003)
- [64] A. Lozinski and R.G. Owens. A fast solver for Fokker-Planck equation applied to viscoelastic flows calculations: 2D FENE model. *J. of Computational Physics*, 189(2):607-625 (2003)
- [65] W. J. Lunsmann, L. Genieser, R. C. Armstrong and R. A. Brown. Finite element analysis of steady viscoelastic flow around a sphere in a tube: calculations with constant viscosity models. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 48:63-99 (1994)
- [66] X. L. Luo, R. I. Tanner. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 21:179-196 (1986)

- [67] X.L. Luo and R.I. Tanner. A streamline element scheme for solving viscoelastic flow problems. Part 1. Differential constitutive equations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 31:179-199 (1989)
- [68] X. L. Luo. Operator splitting algorithm for viscoelastic flow and numerical analysis for the flow around sphere in a tube. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 48:63-99 (1993)
- [69] Y. Maday, A.T. Patera, Spectral element methods for the incompressible Navier-Stokes equations, in: A.K. Noor, J.T. Oden (Eds.), *State of the Art Surveys in Computational Mechanics ASME*, New York, 1989, pp. 71-143
- [70] O. Manero and B. Mena. On the slow flow of viscoelastic liquids past a circular cylinder. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 9:379-387, (1981)
- [71] H. Matallah, P. Townsend, M.F. Webster. Recovery and stress splitting schemes for viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 75:139-166, (1998)
- [72] T.C.B. McLeish and R.G. Larson. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: the pom-pom polymer. *J. Rheol.*, 42:81-110 (1998)
- [73] McKinley G.H. The nonlinear dynamics of the viscoelastic flow in complex geometries. PhD. dissertation. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (USA), 1991
- [74] M. Melchior and H. C. Öttinger. Variance reduced simulations of stochastic differential equations. *J. Chem. Phys.*, 103:9506-9509 (1995)
- [75] M. Melchior and H. C. Öttinger. Variance reduced simulations of polymer dynamics. *J. Chem. Phys.*, 105:3316-3331 (1996)
- [76] B. Mena and B. Caswell. Slow flow of an elastic-viscous fluid past an immersed body. *Chemical Engineering Journal*, 8:125-134 (1974)
- [77] B. Mena, O. Manero, and L.G. Leal. The influence of rheological properties on the slow flow past spheres. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 26:247-275 (1987)
- [78] A.M. Mollinger, E.C. Cornelissen, B.H.A.A. van den Brule. An unexpected phenomenon observed in particle settling: oscillating falling spheres. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 89:389-393 (1999)
- [79] V. Navez, K. Walters. A note on settling in shear-thinning polymer solutions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 67:325-334 (1996)
- [80] H. C. Öttinger. *Stochastic Processes in Polymeric Fluids: Tools and examples for Developing Simulation Algorithms*. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [81] H.C. Öttinger, B.H.A.A. van den Brule and M. A. Hulsen. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 70:255-261 (1997)

- [82] R. G. Owens and T. N. Phillips. Computational Rheology. Imperial College Press, London, 2002
- [83] R. G. Owens, C. Chauviere and T. N. Phillips. A locally-upwinded spectral technique (LUST) for viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 108:49-71 (2002)
- [84] J. Petera. A new finite element scheme using the lagrangian framework for simulation of viscoelastic fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 103:1-43 (2002)
- [85] A. Peterlin. Hydrodynamics of macromolecules in a velocity field with longitudinal gradient. *J. Polym. Sci. B*, 4:287-291,1966
- [86] Petruccione F. and Biller P. A consistent numerical analysis of the tube flow of dilute polymer solutions. *J. Rheol.*, 32 (1988) 1-21
- [87] G. Pilate and M. J. Crochet. Plane flow of a second-order fluid past submerged boundaries. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2:323-341 (1977)
- [88] T. N. Phillips and K. D. Smith. A spectral element approach to the simulation of viscoelastic flows using Brownian Configuration fields. Department of mathematics, University of Wales Aberystwyth, UK. September 2003.
- [89] D. Rajagopalan, Robert C. Armstrong and Robert A. Brown. Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a Newtonian viscosity. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 36:159-192 (1990)
- [90] D. Rajagolapan, M.T. Arigo, and G.H. Mckinley. The sedimentation of a sphere through an elastic fluid. 2. Transient motion. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 65:17-46 (1996)
- [91] Risken H. *The Fokker-Planck Equation*, 2nd Edition. Springer, Berlin Heidelberg New York London Paris Tokyo Hong Kong Barcelona Budapest (Springer Series in Synergetics, Vol 18) 1989
- [92] Sigli D. and Coutanceau M. Effect of the finite boundaries on the slow laminar isothermal flow of a viscoelastic fluid around a spherical obstacle. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2:1-21 (1977)
- [93] A. V. Skorohod. *Lectures on the Theory of Stochastic Processes*. Utrecht, The Netherland 1996
- [94] T. T. Soong. *Random Differential Equations in Science and Engineering*. Academic Press, 1993
- [95] J. Sun and R.I. Tanner. Computation of steady flow past a sphere in a tube using PTT integral model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 54:379-403 (1994)

- [96] J. Sun, N. Phan-Thien, Roger I. Tanner. An adaptive viscoelastic stress splitting scheme and its applications: AVSS/SI and AVSS/SUPG. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 65:75-91 (1996)
- [97] G. SzEgo. *Orthogonal Polynomials*, volume XXIII of American Mathematical Society Colloquium Publications. New York City, U.S.A., 1959.
- [98] R. I. Tanner. *Engineering Rheology*. Claredon Press, Oxford, 1987.
- [99] P. Townsend. A numerical simulation of Newtonian and visco-elastic flow past stationary and rotating cylinder. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 6: 219-243, (1980)
- [100] R.G.M. van Os, M.I. Gerritsma. A variable order spectral element scheme applied to the velocity-pressure-total-stress formulation of the upper convected Maxwell model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 108:73-97 (2002)
- [101] R.G.M. van Os, T.N. Phillips. The prediction of complex flows of polymer melts using spectral elements. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 122:287-301 (2004)
- [102] P. Wapperom, R. Keunings and V. Legat. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 91:273-295 (2000)
- [103] V. Warichet, V. Legat. The consistent streamline-upwind/Petrov-Galerkin method for viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 42:283-299 (1992)
- [104] H.R. Warner. Kinetic theory and rheology of a dilute suspensions of finitely extendible dumbbells. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, 11:379-387, 1972
- [105] Xin Hu, Zhongman Ding, L. James Lee. Simulation of 2D transient viscoelastic flow using the CONNFFESSIT approach. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 127:107-122 (2005)
- [106] R. Zheng, N. Phan-Thien, and R. I. Tanner. On the flow past a sphere in a cylindrical tube: limiting Weissenberg number. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 36:27-49 (1990)
- [107] R. Zheng, N. Phan-Thien, and R. I. Tanner. The flow past a sphere in a cylindrical tube: effects on the inertia, shear thinning and elasticity. *Rheologica Acta*, 30:499-510, (1991)