



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN  
INGENIERÍA

FACULTAD DE QUÍMICA

## PREDICCIÓN DE FLUJO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS A TRAVÉS DE CONTRACCIONES

T E S I S

PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

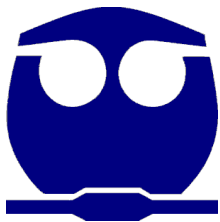
DOCTOR EN INGENIERÍA  
INGENIERÍA QUÍMICA - POLÍMEROS

P R E S E N T A :

JUAN PABLO AGUAYO VALLEJO

TUTOR :

DR. OCTAVIO MANERO BRITO



2010



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 ASIGNADO:**

Presidente: Dr Ángel Enrique Chávez Castellanos

Secretario: Dr. Eduardo Vivaldo Lima

1er Vocal: Dr. Gabriel Ascanio Gasca

1er Suplente: Dr. Carlos Lira Galeana

2do Suplente: Dr. Octavio Manero Brito

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

Facultad de Química, *Universidad Nacional Autónoma de México* &  
Department of Computer Science, *University of Wales Swansea*

**TUTOR DE LA TESIS:**

Dr. Octavio Manero Brito

---

FIRMA

## DEDICATORIA

*A mi increíble hijo, Fernando.*

*A mi esposa, Leticia.*

*A mi sobrina, Mariana.*

*A toda mi familia.*

*A mi madre, Aurora.*

*Y, a mi padre, José.*

*Yo dedico este trabajo, dándoles  
gracias a ellos y a DIOS.*

## Agradecimientos

Deseo expresar mi agradecimiento a mi asesor, el Dr. Octavio Manero, por la guía, apoyo y contribuciones para la realización de este trabajo, así como del Profesor M. F. Webster, de quien sin su ayuda el presente trabajo no hubiera sido posible.

Agradezco especialmente la siempre cordial ayuda del Dr. H. Tammadon-Jahromi.

También expreso mis gracias especiales a Dr. B. Puangkird, J. Banaai, J. Harvey, Dr. H. Matallah, Dr. K. S. Sujata, Dr. F. Belblidia, Dr. I. J. Keshtiban y al Dr. M. Aboubacar, amigos del grupo de Reología Computacional de la *University of Wales Swansea*.

Reconozco y aprecio los comentarios y ayuda del Dr. Ángel Enrique Chávez, Dr. Eduardo Vivaldo, Dr. Carlos Lira y del Dr. Gabriel Ascanio.

Además, deseo expresar mi gratitud al financiamiento de Schlumberger Cambridge Research para la realización de la investigación y del Profesor G. Maitland, Dr. J. P. Crawshaw, Profesor T. N. Phillips, Profesor Malcolm Mackley y del Profesor David Gethin.

- Muchas gracias -

# Índice

	Prólogo	.....	i
	Abstract	.....	ii
CAPÍTULO 1	Introducción	.....	1
CAPÍTULO 2	Ecuaciones Básicas y Reología	.....	7
CAPÍTULO 3	Algoritmos Numéricos	.....	38
CAPÍTULO 4	Modelado Pom-Pom en Canales Planos	.....	55
CAPÍTULO 5	Modelado Pom-Pom en flujos a través de contracciones	.....	72
CAPÍTULO 6	Influencia de la Viscosidad Extensional en el Modelado Pom-Pom	.....	103
CAPÍTULO 7	Caída de Presión en Exceso para Fluidos de Boger	.....	148
CAPÍTULO 8	Modelos Bautista-Manero en Flujos a través de Configuraciones Rectangulares	.....	205
	Conclusiones	.....	228
ANEXO I	Modelo SXPP: información adicional	.....	233
ANEXO II	Líneas de Corriente	.....	240
	Referencias	.....	242
	Lista de Publicaciones	.....	252

# Índice de Figuras

2.1	Representación esquemática del flujo cortante simple.	.....	10
2.2	Representación esquemática del flujo uniaxial.	.....	11
2.3	Molécula idealizada Pom-Pom.	.....	20
2.4	Singularidades en la viscosidad de corte para los modelos SXPP y mXPP: $\beta = 0$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 20$ , $\alpha = 0.3$ .	.....	25
2.5	Ajuste de viscosidad cortante y uniaxial para LDPE; modelo XPP.	.....	28
2.6	Respuesta en flujo cortante y extensional planar, variando $q$ ; $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	32
2.7	Respuesta transitoria en flujos cortante y extensional variando $q$ ; $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	33
2.8	Influencia de $\beta$ y $\varepsilon$ en las funciones materiales SXPP: $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ , $\alpha = 0$ .	.....	36
3.1	Malla de elementos; a) triángulo- $fe$ y subcelda- $fv$ , b) configuración dual de celda media.	.....	52
4.1	Flujo planar; SLFV vs. $fe/fv$ , $Re = 1$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	62
4.2	Flujo planar; SLFV vs. $fe/fv$ , $Re = 1$ , $We = 3$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	64
4.3	Flujo planar; SLFV vs. $fe/fv$ , $Re = 1$ , $We = 3$ , $\beta = 1/9$ , $q = 2$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	65
4.4	Flujo planar; SLFV vs. $fe/fv$ , $Re = 1$ , $We = 3$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	67
4.5	Flujo planar; SLFV vs. $fe/fv$ , $Re = 1$ , $We = 3$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ .	.....	68

4.6	Perfil del esfuerzo polimérico $\tau_{zz}$ : variando $\alpha$ ; $We = 3, \beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2$ .	.....	69
4.7	Dependencia del gradiente de presión con respecto a la elasticidad. $Re = 1, \beta = 1/9, \varepsilon = 1/3,$ $q = 2, \alpha = 0.15$ .	.....	70
4.8	Rapidez de corte en flujo Poiseuille: $We = 3,$ $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15$ .	.....	71
5.1	Representación esquemática de la contracción abrupta 4:1.	.....	80
5.2	Mallados $fe/fv$ (m3) y SLFV (M4); en la zona de la contracción.	.....	82
5.3	Resultados en la línea de simetría a $Re = 0$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15$ ; a) $We = 0.1,$ b) $We = 10$ .	.....	84
5.4	Líneas de contorno de la función corriente al incrementar $We$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15$ ; $Re = 0$ y 1.	.....	86
5.5	Tendencia del vórtice dominante al incrementar $We$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15, Re = 0$ y 1; a) tamaño de celda, b) intensidad.	.....	87
5.6	Contornos de extensión molecular $\lambda$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15, Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	90
5.7	Contornos de esfuerzo $\tau_{xx}$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15; Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	92
5.8	Contornos de esfuerzo $\tau_{xy}$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15; Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	93
5.9	Contornos $N_1$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9,$ $\varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15; Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	94
5.10	Contornos $N_2$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9,$ $\varepsilon = 1/3, q = 2, \alpha = 0.15; Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	95
5.11	Contornos rapidez de deformación $d_{xx}$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9, \varepsilon = 1/3, q = 2,$ $\alpha = 0.15; Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	96



5.12	Contornos rapidez de deformación $d_{xy}$ , incremento en $We$ : $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ , $\alpha = 0.15$ ; $Re = 0$ y $Re = 1$ .	.....	97
5.13	Puntos de observación usados en la contracción 4:1.	.....	99
5.14	Caída de presión vs. $We$ : $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ , $\alpha = 0.15$ ; esquemas SLFV y $fe/fv$ , $Re = 0$ y 1.	.....	100
5.15	Perfiles SXPP vs. $\lambda^2$ XPP en flujo planar (sin contracción) con el esquema $fe/fv$ : $We = 10$ , $Re = 1$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 2$ , $\alpha = 0.15$ ; a) velocidad, b) estiramiento.	.....	101
5.16	Resultados SXPP vs. $\lambda^2$ XPP en la línea de simetría para la contracción abrupta 4:1, con el esquema $fe/fv$ : $We = 10$ , $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $q = 5$ , $\alpha = 0.15$ ; a) velocidad, b) estiramiento.	.....	102
6.1	Esquema de la contracción 4:1 con esquina redondeada.	.....	108
6.2	Mallados no estructurados de elemento finito en la zona de la contracción.	.....	109
6.3	Vórtice dominante, incrementando $We$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; $q = 2, 5, 10, 15$ , a) tamaño de celda, b) intensidad.	.....	114
6.4	Función corriente y datos de Vórtices ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), incrementando $We$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; $q = 2$ y 5.	.....	115
6.5	Función corriente y datos de Vórtices ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), incrementando $We$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; $q = 10$ y 15.	.....	116
6.6	Campos de rapidez de extensión $d_{xx}$ y $d_{xy}$ , $We = 10$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; incrementando $q$ .	.....	118
6.7	Zonas de ablandamiento ( $d_{xx}$ y $I$ ), $We = 10$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; $q = 2$ y 5.	.....	120
6.8	Perfiles a lo largo de la línea de simetría, $We = 10$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; incrementando $q$ .	.....	121

6.9	Perfiles a lo largo del canal de salida, $y = 3$ , $We = 10$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ , incrementando $q$ .	.....	122
6.10	Campos de estiramiento y primer diferencia de esfuerzos normales (polimérica), $We = 10$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; incrementando $q$ .	.....	124
6.11	Campos de estiramiento y primer diferencia de esfuerzos normales (polimérica), $We = 25$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; $q = 2$ y $5$ .	.....	126
6.12	Campos de esfuerzo normal $\tau_{yy}$ y esfuerzo cortante, $We = 10$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; incrementando $q$ .	.....	127
6.13	Caída de presión normalizada vs. $We$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ , $\alpha = 0.15$ ; $q = 2, 5, 10, 15$ .	.....	130
6.14	Propiedades reológicas del modelo SXPP, variando $\alpha$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ y $q = 15$ .	.....	131
6.15	Perfiles a lo largo de la pared de salida, $y = 3$ , incrementando $\alpha$ : $Re = 0$ , $\beta = 1/9$ , $\varepsilon = 1/3$ ; $q = 15$ , $We = 10$ .	.....	132
6.16	Propiedades reológicas de los modelos SXPP y EPTT: variación en $q$ , $\varepsilon$ y $\varepsilon_{PTT}$ , $\beta = 1/9$ , $\alpha = 0.15$ .	.....	135
6.17	Vórtices y líneas de corriente ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), casos I <sub>a</sub> y II, endurecimiento severo.	.....	139
6.18	Vórtices y líneas de corriente ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), casos III y IV, endurecimiento moderado.	.....	140
6.19	Intensidad de vórtice dominante y tamaño de celda, incrementando $We$ ; fluidos con endurecimiento extensional severo y moderado.	.....	141
6.20	Contornos de primera y segunda diferencia de esfuerzos normales ( $N_1, N_2$ ): $\alpha = 0.05$ (Fluido-I <sub>b</sub> ) y $0.15$ (Fluido-I <sub>a</sub> ); $We = 8$ .	.....	143
7.1	Diagrama de a) contracción/expansión 4:1:4, b) 4:1 contracción.	.....	155

7.2	Acercamientos de los mallados contracción/expansión 4:1:4 y contracción 4:1; a) grueso, b) medio, c) refinado.	.....	156
7.3	Caída de presión ( <i>epd</i> ) vs. <i>We</i> (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ y $0.99$ , contracción/expansión 4:1:4; a) axisimétrico, b) planar.	.....	160
7.4	Caída de presión ( <i>epd</i> ) vs. <i>We</i> (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ y $0.99$ , contracción 4:1; a) axisimétrica, b) planar	.....	161
7.5	Niveles de presión alrededor de la contracción/expansión (Oldroyd-B): $\beta = 0.99$ , <i>We</i> = 2 y 3, 4:1:4 axisimétrico, mallado grueso, medio y refinado.	.....	163
7.6	Líneas de contorno de presión alrededor de la contracción/expansión: incrementando <i>We</i> (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , axisimétrico vs. Planar.	.....	164
7.7	Perfil de presión a lo largo de la línea de simetría: incrementando <i>We</i> (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ . 4:1:4 axisimétrico.	.....	165
7.8	Perfil de presión a lo largo de la pared: incrementando <i>We</i> (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico.	.....	166
7.9	Perfil de presión a lo largo de la pared de la restricción (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. Planar.	.....	168
7.10	Superficies de la primer diferencia polimérica de esfuerzos normales, $N_I$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.	.....	169
7.11	Líneas de contorno $\tau_{11}$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.	.....	170
7.12	Líneas de contorno $\tau_{22}$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.	.....	171
7.13	Líneas de contorno $\tau_{12}$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.	.....	172
7.14	Líneas de contorno $d_{11}$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.	.....	173

7.15	Líneas de contorno $\Sigma$ y $\Gamma$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico.	.....	175
7.16	Propiedades reológicas: Oldroyd-B, LPTT, EPTT y SXPP.	.....	177
7.17	Perfil de presión a lo largo de la pared, incrementando $We$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.99$ , 4:1:4 axisimétrico.	.....	178
7.18	Líneas de contorno $\tau_{11}$ , $d_{11}$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.99$ , 4:1:4, axisimétrico.	.....	179
7.19	Presión a lo largo de la pared, incrementando $We$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1 axisimétrico.	.....	182
7.20	Perfiles de Presión [ $p-p_{Newt}$ ] y esfuerzo $\tau_{11}$ a lo largo de la pared, incrementando $We$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1 y 4:1:4 axisimétrico.	.....	183
7.21	Perfiles de presión [ $p-p_{Newt}$ ] y esfuerzo $\tau_{11}$ a lo largo de la pared, incrementando $We$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico y planar.	.....	185
7.22	Función corriente ( $-\psi \times 10^3$ ), incrementando $We$ (Oldroyd-B): 4:1:4 axisimétrico; a) $\beta = 0.99$ , b) $\beta = 1/9$ .	.....	186
7.23	Función corriente ( $-\psi \times 10^3$ ), incrementando $We$ (Oldroyd-B): $\beta = 0.9$ , axisimétrico; a) 4:1:4, b) 4:1.	.....	187
7.24	Caída de presión ( $epd$ ) vs. $We$ : 4:1:4 axisimétrico; a) variación en $\beta$ , b) $\beta = 0.99$ .	.....	189
7.25	Perfil de esfuerzo normal a lo largo de la pared, incrementando $We$ : $\beta = 0.9$ y $0.99$ ; 4:1:4 axisimétrico.	.....	193
7.26	Perfiles [ $p-p_{Newt}$ ] a lo largo de la pared, incrementando $We$ (Oldroyd-B): 4:1:4 axisimétrico; a) representación esquemática, b) $\beta = 1/9$ , c) $\beta = 0.9$ , d) $\beta = 0.99$ .	.....	196
7.27	Caída de presión ( $epd$ ) a diferentes puntos de observación y niveles de elasticidad: $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico.	.....	198

7.28	Caída de presión ( $epd$ ) vs. $We$ (Oldroyd-B): 4:1:4 axisimétrico; variando el esquema numérico y modelo.	.....	202
8.1	Funciones reométricas para los modelos MBM y EPTT.	.....	211
8.2	Líneas de corriente para el modelo MBM en flujo a través de la contracción 4:1.	.....	212
8.3	Respuesta MBM cortante y uniaxial, variando $\eta_0$ : $G_0 = 1, k/\eta_\infty = 0.01, \mu_s = 1/9, \lambda = 0.28$ .	.....	214
8.4	Respuesta MBM cortante y uniaxial, variando $k/\eta_\infty$ : $G_0 = 1, \eta_0 = 8/9, \mu_s = 1/9, \lambda = 0.28$ .	.....	215
8.5	Respuesta MBM cortante y uniaxial, variando $\lambda$ : $G_0 = 1, \eta_0 = 8/9, k/\eta_\infty = 0.01, \mu_s = 1/9$ .	.....	216
8.6	Esquema de la división del dominio en segmentos para el problema en un canal rectangular 1D.	.....	217
8.7	Soluciones a diferentes grados de libertad.	.....	219
8.8	Curvas $Q$ vs. $\Delta p$ para distintos valores de separación ( $H$ ).	.....	220
8.9	Evolución de los perfiles de rapidez de corte y velocidad al incrementar $\Delta p$ .	.....	221

# Índice de Tablas

2.1	Funciones materiales para algunos modelos comunes	.....	35
2.2	Influencia del valor de parámetros adimensionales sobre la viscosidad extensional y cortante	.....	37
5.1	Características de mallado para los esquemas $fe/fv$ y SLFV	.....	81
5.2	Convergencia con el mallado: tamaño de celda del vórtice dominante ( $X$ ), $Re = 0$	.....	88
5.3	Convergencia con el mallado: tamaño de celda del vórtice dominante ( $X$ ), $Re = 1$	.....	89
5.4	Valores de estiramiento ( $\lambda$ ) y primer diferencia de esfuerzos normales ( $N_I$ ) en los puntos seleccionados, $Re=0$ (contracción localizada en $x = 0.0, y = 3.0$ )	.....	98
6.1	Características de los diferentes mallados	.....	110
6.2	Convergencia en términos del tamaño de celda del vórtice dominante ( $X$ ): $0.1 \leq We \leq 25, q = 5$	.....	120
6.3	Parámetros SXPP y EPTT; $\beta = 1/9$	.....	134
7.1	Características de los mallados	.....	157
7.2	Parámetros para el caso con relación de disolvente $\beta = 0.99$	.....	191
8.1	Parámetros del fluido SF1	.....	219

# Prólogo

El presente trabajo trata sobre la simulación de flujo de fluidos no newtonianos a través de geometrías en las que existe un cambio súbito en el área de flujo (contracciones y/o expansiones). Los fluidos no newtonianos son aquellos que no presentan viscosidad constante a temperatura, presión y composición fijas o bien, que presentan propiedades elásticas o de memoria. La evolución de vórtices (zonas de recirculación) al cambiar el flujo o la elasticidad del fluido, una excesiva caída de presión y desarrollo adicional de esfuerzos, son fenómenos que reflejan alejamiento del comportamiento clásico (o newtoniano) de los fluidos. Para las simulaciones se utilizó el programa desarrollado por el grupo de computación y fluidos de la *University of Wales Swansea*, el cual tiene como base el método de elemento y volumen finitos. Se simuló el comportamiento de diversos fluidos utilizando los modelos Pom-Pom, Phan-Thien/Tanner, Oldroyd-B y una modificación del modelo Bautista-Manero. Estos modelos pueden usarse para soluciones poliméricas desde bajas hasta altas concentraciones de disolvente y también ciertas soluciones de tensoactivos. Las geometrías utilizadas son canales de secciones rectangulares y cilíndricas con contracción 4:1 y contracción/expansión 4:1:4. Se prestó atención especial al comportamiento reológico de los modelos para así relacionar su comportamiento en flujo. El modelo Pom-Pom se estudio en canales planos y en contracciones. El fenómeno de caída de presión en exceso se estudia con mayor detalle, pues es un tema que ha mostrado una enorme dificultad tanto en su entendimiento como en su simulación; para esto, el modelo fue principalmente Oldroyd-B. El modelo Bautista-Manero se utilizó para simular fluidos tensoactivos. También se obtuvo la solución en flujo Poiseuille estacionaria para este modelo, utilizando un procedimiento desarrollado por el profesor Ken Walters.

# Summary

This thesis is concerned with the numerical prediction of two-dimensional viscoelastic flows through channels, contractions and contraction/expansion geometries. In this study, a hybrid finite element/finite volume (*fe/fv*) scheme has been employed to solve the governing equations (mass and momentum conservation and constitutive model). The *fe/fv* algorithm employs a time-stepping procedure to evolve to steady-state.

A number of rheological models have been used to simulate desired rheological behaviour. Amongst these are the recent Pom-Pom type models (in particular the eXtended or XPP variants), which are considered as a breakthrough due to their strong physical background and their ability to reproduce qualitatively the response of polymer melts in rheometrical flows. The Phan-Thien/Tanner (PTT) class of models is also employed to compare simulation results for concentrated systems with other models. In addition, for Oldroyd-B, PTT and XPP models, Boger-like response has been represented under increasing levels of solvent within the systems. This has addressed the issue capturing enhanced excess pressure-drops (*epd*) in contraction-type flows, phenomena that appear only in axisymmetric geometries not planar and has constituted a major challenge for to date numerical simulations. A further chapter is included where the recently introduced Bautista-Manero (BM) class of models is considered, to simulate worm-like micellar systems, this is, surfactants solutions. The worm-like micelles can provoke highly viscoelastic effects, similar to those apparent with polymer systems.

Vortex intensity decline is observed for fluids displaying extension softening in 4:1 contraction flows, in sharp and rounded corner. The suppressive effect of inertia in vortex cell-size is also gathered. Through a parameter adjustment in the SXPP model, larger stress and stretch values are observed for fluids with higher degree of extension-hardening and consequently, a reduction in numerical convergence has been found. Similar vortex dynamics trends are followed for fluids (PPT and XPP) with similar rheological properties. Excess pressure-drop over the corresponding Newtonian fluid is observed in small extent in contraction/expansion flows. Axisymmetric flows display much larger stress values than planar flows, which ultimately causes the increasing trend in *epd*. The response of the BM models in planar and contraction flows is gathered and an analytical solution for the steady Poiseuille flow is presented.



# **CAPITULO 1**

## **Introducción**

La simulación por computadora ha sido una de las herramientas más efectivas para predecir la respuesta en flujos simples y complejos. También ha sido invaluable para notar fenómenos que ocurren en estos flujos, que de otra forma sería muy difícil de observar. La Dinámica Computacional de Fluidos (Computer Fluid Dynamics o CFD) es una de las ramas de las ciencias físicas de más rápida evolución. La reología computacional puede ser considerada como parte la de CFD cuando el fluido en cuestión es no newtoniano (complejo); sin embargo, todavía se necesitan importantes mejoras en algoritmos numéricos y, en general, de las herramientas de simulación.

Por otra parte, las nuevas ecuaciones constitutivas que están surgiendo, representan sistemas cada vez más complejos. Entre estos, están sistemas de polímeros fundidos y sistemas micelares (tensoactivos). La representación de moléculas ramificadas de polímero fundido, en flujos cortante y extensional se ha mejorado desde la introducción de los modelos Pom-Pom [1,2]. En contraste, los modelos tipo Bautista-Manero [3,4]

surgieron con el propósito de predecir diversos fenómenos exhibidos por sistemas con formación de micelas tipo gusano.

La simulación de fundidos de polímero es un tema importante en la actualidad. La nueva clase de modelos Pom-Pom, derivados a partir de análisis teóricos, es considerada como punto y aparte en reología, debido a su capacidad de representar de forma cualitativamente satisfactoria la respuesta de algunos sistemas poliméricos monodispersos. Las soluciones y fundidos poliméricos son de gran importancia en la industria de plásticos y pintura, entre otras.

Las soluciones de tensoactivos, capaces de presentar agrupaciones micelares de gran longitud (tamaño), pueden exhibir respuestas reométricas similares a las presentadas por sistemas poliméricos. Estas soluciones micelares son capaces de cambios rápidos en su estructura y por esto, en su comportamiento reológico [5]. Uno de sus usos más importantes es en procedimientos de extracción de crudo, donde sirven como mecanismo de transporte de partículas de cerámica, hacia la formación del pozo, para mantener fracturas (canales hidráulicos) abiertas. Al tener micelas gigantes, el fluido presenta una muy alta viscosidad, por lo que pueden llevar las partículas y, una vez en contacto con el petróleo, las moléculas de tensoactivo pueden aglomerarse en diferentes tipos de micelas, de un tamaño significativamente menor. Lo anterior produce una reducción considerable en la viscosidad e impide el taponamiento de las partículas de cerámica, permitiendo así, que el aceite pueda fluir con mayor facilidad. Para modelar este tipo de soluciones, se requiere que el modelo tome en cuenta la formación y destrucción de estructuras micelares. Recientemente se propusieron los modelos Bautista-Manero [3,4], con el fin de representar dichos sistemas. Esta nueva clase de modelos, está basada en la ecuación Oldroyd-B [6] y además, tienen acoplada una ecuación para la viscosidad, conteniendo parámetros que gobiernan la formación de estructuras.

Para algunos problemas, el mejoramiento tanto de las ecuaciones constitutivas como de los métodos de solución numérica es más que vital. La adecuada representación del fenómeno de caída de presión en exceso es uno de éstos. Dicha caída de presión en exceso se observa en flujos a través de contracción y contracción/expansión de configuración axisimétrica, para fluidos altamente viscoelásticos con viscosidad cortante constante (fluidos de Boger), caída de presión que excede a la mostrada por un sistema equivalente newtoniano. También resulta interesante que esto no ocurre en geometrías de configuración rectangular, en donde no se aprecia diferencia entre la caída de presión de un fluido de Boger y un newtoniano, en condiciones equivalentes. Como se menciona en el capítulo 7, el modelado de este fenómeno requiere de ecuaciones reológicas adecuadas, capaces de predecir valores de viscosidad extensional extremadamente grandes, pero conservando la viscosidad cortante lo más constante posible. El modelo Oldroyd-B, uno de los más sencillos [6], exhibe una viscosidad al corte constante, sin embargo, no existe límite superior en los valores de viscosidad extensional que predice, es decir, esta viscosidad puede aumentar indefinidamente. Aún si con otros modelos se pueden reproducir valores altos, pero delimitados, de la viscosidad extensional, la convergencia en la simulación puede no ser alcanzada; problema que se denomina como *alto número de Weissenberg*. Esto es, el procedimiento de simulación comienza con niveles muy bajos de elasticidad, después, utilizando la solución anterior como condición inicial, se incrementa ligeramente el número de Weissenberg y se realiza la simulación, así hasta que la elasticidad es tal, que no se pueda encontrar una solución convergente. La pérdida de convergencia ocurre frecuentemente a valores de elasticidad moderados.

El presente trabajo trata de la simulación de fluidos viscoelásticos en flujo a través de canal, contracción y contracción/expansión, en configuraciones rectangulares o cilíndricas. Se presta especial atención a relacionar la respuesta en flujo simulada con las propiedades reológicas del fluido. Funciones materiales tales como viscosidad cortante y

extensional pueden ayudar a determinar la naturaleza de la deformación que ocurre en flujos complejos, y esta información puede ser guía para seleccionar las funciones materiales requeridas para estimular alguna respuesta de flujo en particular. Flujos a través de contracción y contracción/expansión son frecuentes en procesos industriales, tales como moldeado por inyección. Estos flujos también han sido utilizados para probar y comparar la eficacia de algoritmos numéricos (benchmark). Con este fin, la dinámica de vórtices, caída de presión y velocidad en la línea central o de simetría son características frecuentemente reportadas en la literatura especializada (ver por ejemplo [7-10]). El flujo a través de contracciones ha sido también sujeto de análisis teóricos como el desarrollado por Binding ([11-14]), que es uno de los estudios más importantes, que bajo ciertas condiciones, permite aproximar la viscosidad extensional mediante información de caída de presión.

Los métodos de elemento finito y volumen finito son algunas de las herramientas más útiles en la simulación numérica. Han probado su capacidad en una variedad de geometrías complejas en muchas áreas, tales como diseño de aviones, ingeniería de reactores y reología computacional. En este estudio, el método empleado consiste en una formulación híbrida de elemento y volumen finitos, algoritmo desarrollado por el grupo de reología computacional de la *University of Wales, Swansea*, Reino Unido.

En el capítulo 2, se presentan las ecuaciones básicas de mecánica de fluidos y reología. Se explican los términos de flujo reométrico, viscosidad cortante y extensional, términos utilizados en gran parte del estudio. Se presenta con cierto detalle el modelo Pom-Pom [1,2] y sus funciones materiales, además de algunas de sus modificaciones. Si se requiere de información reológica adicional, ésta será presentada en los capítulos relevantes, por ejemplo, el modelo Bautista-Manero [3,4] se discute en el capítulo 8.

El capítulo 3 consiste en una breve descripción del algoritmo numérico utilizado, el algoritmo híbrido de elemento finito/volumen finito (*fe/fv*). Este método ha sido

configurado para representar adecuadamente el flujo de fluidos viscoelásticos en geometrías complejas. Además, considera la diferente naturaleza matemática de las ecuaciones que se resuelven (ecuación de momento y modelo reológico). El algoritmo ha probado su capacidad al resolver problemas con los modelos Oldroyd-B y Phan-Thien/Tanner, entre otros (ver [7,8,15,16]).

El modelo Pom-Pom [1,2] en flujo a través de canales rectangulares es considerado en el capítulo 4. El flujo Poiseuille, provocado por presión, es un flujo simple que no presenta puntos singulares en la geometría. Este representa secciones de tubería/canales en prácticamente todos los procesos de flujo. En los procedimientos numéricos, la solución del flujo Poiseuille es necesaria para generar las condiciones de entrada a geometrías complejas.

En el capítulo 5, se presentan las simulaciones de flujo con el modelo Pom-Pom a través de una contracción 4:1 planar, con esquina abrupta. Se reportan resultados de esfuerzo, extensión molecular, rapidez de deformación y dinámicas de vórtices; se incluyen comentarios que relacionen estas respuestas con las funciones materiales del fluido simulado. En los capítulos 4 y 5, se incluye también una comparación entre dos procedimientos numéricos de solución.

El efecto de la viscosidad extensional en el flujo por contracción 4:1 es estudiado en el capítulo 6, donde se presentan diferentes niveles de aumento en la viscosidad extensional mediante ajuste en los parámetros del modelo. Con el fin de obtener simulaciones convergentes a niveles de Weissenberg más altos, la esquina reentrante de la contracción se cambia de abrupta a una con cierta curvatura. De nuevo, se presentan resultados en términos de esfuerzo, dinámica de vórtices, rapidez de deformación y estiramiento molecular; y estos son relacionados con las propiedades del fluido en flujos reométricos. Se incluye una sección en donde se estudia el efecto de singularidades propias del modelo Pom-Pom [1,2] sobre el flujo. También se presenta una comparación

entre resultados con el modelo Pom-Pom y Phan-Thien/Tanner, mostrando ambos modelos, similares propiedades reológicas.

En el capítulo 7 se presenta un estudio del fenómeno de caída de presión en exceso para fluidos de Boger. Los fluidos utilizados presentan un aumento extremo en la viscosidad extensional, y una variación mínima (nula para el modelo Oldroyd-B) en la viscosidad cortante; otra variable es la fracción de disolvente en el sistema. El análisis abarca el flujo por contracción y contracción/expansión, para configuraciones rectangulares y cilíndricas; se presentan comentarios sobre la relación entre la caída de presión, funciones materiales, esfuerzo y rapidez de deformación. El capítulo 7 también muestra la necesidad de adoptar otro punto de vista en el campo de flujo. La observación y verificación de variables a lo largo de la línea central, no proporciona información suficiente para el estudio, debido a que no capta los fenómenos complejos que ocurren en las capas de fluido en contacto con la pared de la restricción. Uno de estos fenómenos permite apreciar la relación que guarda la presión y el esfuerzo en la vecindad de la restricción.

El modelo Bautista-Manero [3,4] es descrito en el capítulo 8, que incluye un análisis de sensibilidad de las funciones reológicas, variando los parámetros propios del modelo. Se reportan resultados de las simulaciones, a través de contracciones 4:1 de configuración rectangular, en términos de la dinámica de vórtices. Para esto, se emplearon fluidos que asemejen el comportamiento reológico de dos fluidos de Phan-Thien/Tanner. Se implementó un esquema de diferencias finitas, para la resolución de flujo Poiseuille estacionario unidimensional en un canal rectangular, con el fin de calcular la caída de presión. Adicionalmente, también se encontró la solución analítica para este problema, solución que está completamente acorde a la obtenida por el procedimiento de diferencias finitas.

## **CAPÍTULO 2**

### **Ecuaciones Básicas y Reología**

Las ecuaciones básicas de mecánica de fluidos que permiten la descripción del movimiento y de la conservación de materia son presentadas en este capítulo. Además, se muestran los modelos reológicos considerados en el presente trabajo. Estos modelos relacionan las fuerzas que actúan sobre un volumen de fluido con sus fuerzas internas. La respuesta del fluido se estudia primero en flujos “simples”, obteniendo de esto las herramientas para analizar flujos más “complejos”. De manera adicional se incluye un breve resumen sobre modelos conocidos como los de Maxwell, Oldroyd-B y Phan-Thien/Tanner. Finalmente se considera con mayor detalle una clase de modelos introducida más recientemente: las ecuaciones Pom-Pom y su respuesta en flujos reométricos.

#### **2.1 Introducción**

La reología es la rama de la física que está enfocada a la descripción y determinación de la deformación de la materia. Comúnmente, los reólogos están interesados sólo en el flujo de fluidos complejos o no newtonianos, los cuales son aquellos cuya viscosi-

dad puede variar aún a condiciones constantes de presión y temperatura. El agua es el clásico ejemplo de un fluido simple, mientras que una pintura, la cual requiere agitación antes de aplicarla a una superficie, es uno de los ejemplos más comunes de un fluido con viscosidad variable.

Un caso especial de fluidos no newtonianos son los llamados materiales viscoelásticos. Para explicar este término es apropiado el definir primero términos más sencillos como *sólidos* y *líquidos*. Si al aplicar una fuerza cortante sobre unidad de área (esfuerzo) un elemento material no cambia su forma de manera continua, es decir, no fluye, sin tomar en cuenta qué tan pequeño sea el esfuerzo aplicado, entonces se dice que el material es un sólido. En cambio, si el material fluye, sin considerar qué tan pequeño es el esfuerzo, entonces se dice que se trata de un líquido<sup>†</sup>. El comportamiento sólido-elástico puede ser representado adecuadamente con la ley de Hooke, en tanto que el comportamiento líquido-viscoso puede ser modelado con la ley de Newton. Un material viscoelástico es aquel que exhibe ambos comportamientos sólido-elástico y líquido-viscoso. Un elemento material presenta propiedades viscoelásticas si, después de que se deja de aplicar un esfuerzo sobre éste, el tiempo en que el fluido alcanza el estado de reposo puede ser observado (medido).

La investigación del presente trabajo se basa en la teoría del continuo, lo cual es una idealización de la materia, en donde la distancia entre las moléculas, y el cambio en propiedades debido a estas longitudes son ignoradas; esto se lleva a cabo considerando un número suficientemente grande de moléculas para que las propiedades promedio representen de manera adecuada el *elemento* de fluido. Para obtener la respuesta del elemento al ser deformado, se aplican los balances diferenciales e integrales de energía, materia y cantidad de movimiento (*leyes de conservación*). Los balances se aplican sobre pequeños volúmenes, suficientemente grandes para satisfacer la teoría del continuo. A este análisis se le denomina *mecánica del medio continuo*. El aproximar la respuesta en flujo

---

<sup>†</sup> Definiciones tomadas de Barnes et al. [18].



de materiales reales, es parte de ambos campos, reología y mecánica del medio continuo. El uso de ecuaciones constitutivas es la conexión fundamental entre estas dos áreas. Estas ecuaciones contienen información específica (esfuerzos internos, presión, extensión molecular, entre otros) de fluidos idealizados.

## **2.2 Flujos reométricos**

El estudio de flujos simples es esencial para relacionar la respuesta del mismo fluido en situaciones de flujo más complicadas. *Flujo cortante simple* y *deformación extensional* son ejemplos de estos flujos simples o *reométricos*.

### **2.2.1 Flujo cortante simple**

Suponiendo que se tiene un fluido contenido entre dos placas planas de extensión infinita, con una separación  $h$ , y que además la placa superior se mueve a velocidad constante  $U$ . Se tiene entonces que, la fuerza cortante por unidad de área (esfuerzo  $\sigma$ ) requerida para mantener la placa con la velocidad constante, es proporcional al gradiente de velocidad (rapidez de corte  $\dot{\gamma}$ ), i.e.

$$\sigma = \eta_s (\dot{\gamma}) \dot{\gamma}. \quad (2.1)$$

Un fluido newtoniano es aquel que presenta un factor de proporcionalidad  $\eta_s$  (*viscosidad* o *resistencia al flujo*) constante. En este tipo de flujo, un volumen de fluido es deformado, perdiendo su forma original; por ejemplo, supóngase que se observa un elemento cúbico de fluido a un tiempo de referencia dado, los ángulos internos del elemento son de  $90^\circ$ . Si tiempo después se observa el mismo elemento, se encontrarán ángulos diferentes (ver Figura 2.1).

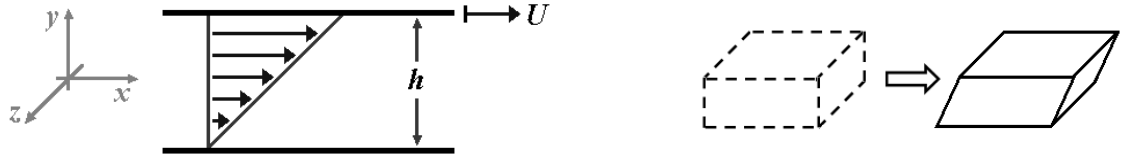


Figura 2.1. Representación esquemática del flujo cortante simple.

El campo de velocidades  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  y el tensor de rapidez de deformación  $\mathbf{d}$  en flujo cortante simple están dados por:

$$\begin{aligned} u(y) &= \dot{\gamma}y \\ v &= 0 \\ w &= 0 \end{aligned} \quad \text{y} \quad \mathbf{d} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Existen otras propiedades que permiten diferenciar entre fluidos newtonianos y no newtonianos, éstas se denominan como primera y segunda diferencia de esfuerzos normales,  $N_1$  y  $N_2$ , respectivamente. Sus magnitudes son cero para fluidos newtonianos, mientras que para los no newtonianos, las definiciones son:

$$N_1(\dot{\gamma}) = \sigma_{xx} - \sigma_{yy} = \psi_1(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}^2, \quad (2.3)$$

$$N_2(\dot{\gamma}) = \sigma_{yy} - \sigma_{zz} = \psi_2(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}^2. \quad (2.4)$$

Normalmente se observa que,

$$N_1 > 0 \quad \text{y} \quad N_1 \gg |N_2|. \quad (2.5)$$

### 2.2.2 Flujo extensional

En este tipo de flujo, el elemento de volumen de fluido es *estirado* en una dirección en particular, y debido a la condición de incompresibilidad, existe una *compresión* en las

otras direcciones. La Figura 2.2 presenta un elemento de volumen cúbico de un fluido a un tiempo de referencia (línea punteada). Después, y a causa de la deformación, el elemento de volumen es extendido en una dirección ( $x$ ), mientras que la compresión ocurre en las otras dos direcciones ( $y, z$ ), preservando el volumen original.

La rapidez de deformación en este flujo extensional es constante y se le denomina rapidez de tensión  $\dot{\epsilon}$ . En este caso, no hay deformación cortante, el volumen mantiene esencialmente los mismos ángulos internos, pero las longitudes son modificadas. El campo de velocidades y el tensor de rapidez de deformación pueden expresarse como:

$$\begin{aligned} u(x) &= \dot{\epsilon} x \\ v(y) &= -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} y \\ w(z) &= -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} z \end{aligned} \quad \text{y} \quad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

La resistencia o *viscosidad extensional* está dada por,

$$\sigma_{xx} - \sigma_{yy} = \sigma_{xx} - \sigma_{zz} = \eta_e (\dot{\epsilon}) \dot{\epsilon}. \quad (2.7)$$

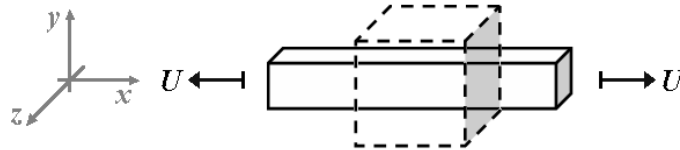


Figura 2.2. Representación esquemática del flujo uniaxial.

Para un fluido newtoniano,  $\eta_e$  es constante a cualquier rapidez de deformación, satisfaciendo además, la siguiente relación:

$$\eta_e = 3\eta_s. \quad (2.8)$$

Adicionalmente, se espera que todos los fluidos, incluyendo aquellos con propiedades viscoelásticas, satisfagan (2.8) a valores bajos de rapidez de deformación, esto es,

$$\eta_e(\dot{\epsilon} \rightarrow 0) = 3\eta_s(\dot{\gamma} \rightarrow 0). \quad (2.9)$$

La relación de Trouton ( $Tr$ ) se define como el cociente de la viscosidad extensional sobre la cortante. Para relacionar  $\dot{\gamma}$  y  $\dot{\epsilon}$  y así evaluar estos dos tipos de viscosidades, Jones et al. [17] propusieron la siguiente definición de la relación de Trouton:

$$Tr = \frac{\eta_e(\dot{\epsilon})}{\eta_s(\dot{\gamma} = \sqrt{3}\dot{\epsilon})}. \quad (2.10)$$

Para fluidos inelásticos  $Tr$  asume un valor constante ( $Tr = 3$ ) a cualquier valor de  $\dot{\epsilon}$ , mientras que para los fluidos viscoelásticos, se espera que se cumpla la relación

$$Tr(\dot{\epsilon} \rightarrow 0) = 3. \quad (2.11)$$

A lo largo de la línea de simetría (línea central) de un flujo a través de una contracción, se presenta el flujo extensional puro, en tanto que cerca de la contracción (fuera de la línea central) se presenta una mezcla donde ocurren ambos tipos de deformación, cortante y extensional. El tipo de flujo extensional que se ha descrito es llamado uniaxial. Existen otros tipos de flujos extensionales como el biaxial y planar, que son muy semejantes (ver ref. [18]). En contracciones de geometría cilíndrica, el flujo extensional en la línea de simetría es uniaxial, mientras que en geometrías rectangulares de dos dimensiones, la extensión que se presenta es planar, donde un elemento de volumen es estirado en una dirección y comprimido en otra, dejando una dirección sin cambio.

Las ecuaciones que describen la extensión planar son similares a las de flujo uniaxial,

$$\eta_e = 4\eta_s \quad (\text{newtoniano}), \quad (2.12)$$

$$\eta_e(\dot{\epsilon} \rightarrow 0) = 4\eta_s(\dot{\gamma} \rightarrow 0) \quad (\text{viscoelástico}), \quad (2.13)$$

$$Tr = \frac{\eta_e(\dot{\epsilon})}{\eta_s(\dot{\gamma} = 2\dot{\epsilon})}, \quad (2.14)$$

$$Tr(\dot{\epsilon} \rightarrow 0) = 4 \quad (\text{viscoelástico}). \quad (2.15)$$

Para una descripción más detallada de estos flujos reométricos, se recomienda consultar referencias como Barnes et al. [18]. De manera adicional, las referencias [19-21] pueden ser útiles como referencias generales del tema de reología.

### 2.3 Ecuaciones constitutivas y ecuaciones básicas

El principio básico de conservación de materia debe ser satisfecho a cada instante en el tipo de flujo considerado. Este principio se expresa matemáticamente mediante la ecuación de conservación de materia (ver [22-24]),

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (2.16)$$

En la ecuación (2.16),  $\rho$  es la densidad del fluido,  $\mathbf{u}$  el vector de velocidades y  $t$ , el tiempo. Para fluidos incompresibles, aún si el flujo depende del tiempo, el balance de materia se reduce a

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.17)$$

La segunda ley de movimiento de Newton puede ser aplicada a un elemento de fluido. Esta ley indica que el cambio de momentum lineal en un sistema es igual a la suma

de las fuerzas que actúan sobre él. Estas fuerzas pueden clasificarse en dos tipos: las que actúan sobre todo el volumen del elemento (“*body forces*”) tales como las fuerzas gravitacionales y electromagnéticas, y las fuerzas internas (“*surface forces*”), debidas a la fricción entre las moléculas de fluido. Estas últimas fuerzas afectan al elemento de fluido a través de su superficie limitante. En forma diferencial, el balance de fuerzas es (ver referencia [25]):

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{F}, \quad (2.18)$$

donde  $p$  es la presión,  $\mathbf{T}$  es el esfuerzo sin la contribución hidrostática\* y representa los fenómenos viscosos/viscoelásticos. Las fuerzas de volumen,  $\mathbf{F}$ , son ignoradas ya que la contribución por gravedad, en los casos aquí tratados, es mucho menos significativa que la contribución debida a otras fuerzas, como la presión o el esfuerzo.

Como se mencionó anteriormente, los fluidos newtonianos presentan una viscosidad constante tanto en flujo cortante como en extensional. Otra característica es que su respuesta a una deformación es instantánea. El modelo general para un fluido newtoniano incompresible es,

$$\mathbf{T} = 2\mu \mathbf{d}. \quad (2.19)$$

La substitución de la ecuación (2.19) en (2.18) produce las ecuaciones de Navier-Stokes. En todos los casos del presente estudio, se consideran únicamente flujos isotérmicos en régimen laminar. En la ecuación (2.19) el tensor de rapidez de deformación es:

$$\mathbf{d} = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^T \right). \quad (2.20)$$

---

\* El tensor  $\boldsymbol{\sigma}$  es llamado el tensor de esfuerzos de Cauchy, y está relacionado con el tensor  $\mathbf{T}$  mediante  $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}$ , donde  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad.

Los modelos reológicos o ecuaciones constitutivas deben satisfacer ciertos criterios básicos para representar matemáticamente de manera adecuada la respuesta del fluido [24,26], estos criterios son,

- *Determinación del esfuerzo*: el esfuerzo de un fluido viscoelástico está determinado por el historial del movimiento de ese cuerpo.
- *Acción local*: el esfuerzo en cualquier punto del fluido está determinado por el historial de deformación de la vecindad (infinitamente pequeña) que rodea dicho punto.
- *Independencia del marco de referencia*: La expresión de las ecuaciones constitutivas debe ser independiente del sistema coordinado.
- *Independencia bajo movimiento de cuerpo rígido*: La ecuación constitutiva debe reflejar la independencia del movimiento absoluto en el espacio; esto es, si las ecuaciones están expresadas correctamente, cualquier movimiento de cuerpo rígido impuesto a todo el fluido no debe afectar la respuesta del material.

### **2.3.1 Modelos Maxwell y Oldroyd-B**

El modelo de Maxwell [27] es considerado como el primer modelo viscoelástico. En forma unidimensional, este modelo puede obtenerse mediante una combinación de un resorte de Hooke y un amortiguador (elemento newtoniano) en serie (ver Barnes et al. [18]).

$$\mathbf{T} + \frac{\mu_0}{G_0} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{T} = 2\mu_0 \mathbf{d}, \quad (2.21)$$

donde  $G_0$  y  $\mu_0$  son el módulo elástico y la viscosidad, respectivamente. El tiempo de relajación para un fluido de Maxwell está definido por  $\lambda = \mu_0/G_0$ .

Aplicando los principios mencionados anteriormente, la ecuación (2.21) puede ser re-escrita como el modelo convectivo superior de Maxwell (UCM),

$$\mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2\mu_0 \mathbf{d}, \quad (2.22)$$

ó bien, como el modelo convectivo inferior (LCM),

$$\mathbf{T} + \lambda \overset{\Delta}{\mathbf{T}} = 2\mu_0 \mathbf{d}, \quad (2.23)$$

donde para un tensor arbitrario  $\mathbf{A}$ , las derivadas convectivas superior- ( $\overset{\nabla}{\mathbf{A}}$ ) e inferior- ( $\overset{\Delta}{\mathbf{A}}$ ) están definidas como

$$\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad (2.24)$$

$$\overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (2.25)$$

El modelo de Maxwell no contiene ningún término que considere la presencia de un disolvente (componente puramente viscoso). Para mejorar esto, se introduce a la ecuación (2.22) un tiempo de retardo,  $\lambda_j$  :

$$\mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2\mu_0 \left( \mathbf{d} + \lambda_j \overset{\nabla}{\mathbf{d}} \right). \quad (2.26)$$

La ecuación (2.26) es conocida como el modelo Oldroyd-B. Sin embargo, el término  $\overset{\nabla}{\mathbf{d}}$  introduce problemas numéricos de discretización, debido a la presencia de derivadas de segundo orden de la velocidad. Para solucionar ésto, el modelo es separado en dos ecua-



ciones diferenciales, una que representa el esfuerzo o contribución polimérica y otra para la contribución del disolvente (fluido newtoniano), esto es,

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\mu_p \mathbf{d}, \quad (2.27)$$

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\mu_s \mathbf{d}, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}, \quad \mu_0 = \mu_s + \mu_p, \quad \text{y} \quad \lambda_J = \frac{\mu_s}{\mu_s + \mu_p} \lambda. \quad (2.29)$$

En las ecuaciones (2.27)-(2.29)  $\boldsymbol{\tau}$  representa el esfuerzo polimérico,  $\mu_p$  la viscosidad polimérica a bajos valores de rapidez de deformación;  $\boldsymbol{\tau}_s$  y  $\mu_s$  son las contribuciones del disolvente. La viscosidad extensional predicha por los modelos de Maxwell y Oldroyd-B tiende a infinito cuando la rapidez de deformación se aproxima a  $1/(2\lambda)$ ; de manera adicional, la viscosidad cortante es constante a cualquier valor de la rapidez de corte y la segunda diferencia de esfuerzos normales es cero, excepto para el modelo convectivo inferior de Maxwell, que predice de forma excesiva a  $N_2$ .

Una mejor predicción de  $N_2$  se logra al usar el operador diferencial convectivo inferior simultáneamente con el convectivo superior. El modelo de Johnson-Segalman introduce un operador que combina dichas derivadas. Sin embargo, la viscosidad extensional sigue con valores indefinidos; dicho modelo es:

$$\mathbf{T} + \lambda \overset{\square}{\mathbf{T}} = 2\mu_0 \mathbf{d}, \quad (2.30)$$

donde el nuevo operador se define, aplicado a un tensor arbitrario, como:

$$\overset{\square}{\mathbf{A}} = \left(1 - \frac{1}{2}\zeta\right) \overset{\nabla}{\mathbf{A}} + \frac{1}{2}\zeta \overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \overset{\nabla}{\mathbf{A}} + \zeta (\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{d}). \quad (2.31)$$

$\zeta$  es el parámetro que controla la proporción de las dos derivadas, y generalmente su valor cae dentro del intervalo  $0 \leq \zeta \leq 2$ , donde  $N_2/N_1 = -\frac{1}{2}\zeta$  y  $\zeta = 0.2$  dan valores razonables de  $N_2$  (ver referencia [26]).

### **2.3.2 Modelo de Phan-Thien/Tanner**

La predicción de valores físicamente no válidos por el modelo de Johnson-Segalman se corrige con el modelo de Phan-Thien/Tanner (PTT) [28]. Este modelo considera la creación y destrucción de uniones o nodos de estructuras. Los fenómenos de adelgazamiento al corte y espesamiento en extensión seguido de adelgazamiento son reproducidos de manera razonable por este tipo de modelos, los cuales pueden ser expresados como:

$$f(\boldsymbol{\tau}) \mathbf{T} + \lambda \overset{\square}{\mathbf{T}} = 2\mu_p \mathbf{d}, \quad (2.32)$$

La función extra,  $f(\boldsymbol{\tau})$ , es,

$$f(\boldsymbol{\tau}) = \begin{cases} e^{\left( \varepsilon_{PTT} \frac{\lambda}{\mu_p} tr(\boldsymbol{\tau}) \right)} & \text{exponencial,} \\ 1 + \varepsilon_{PTT} \frac{\lambda}{\mu_p} tr(\boldsymbol{\tau}) & \text{lineal.} \end{cases} \quad (2.33)$$

La expresión lineal se obtiene a partir de una expansión en series de Taylor del modelo exponencial. Ambos modelos predicen adelgazamiento al corte y espesamiento en la extensión. Se anticipa adelgazamiento en la extensión después del espesamiento sólo en el modelo exponencial, mientras que en la versión lineal, una vez que se alcanza el máximo en viscosidad extensional, este valor se mantiene a valores de rapidez de deformación mayores; sin embargo, para ciertos valores extremos de los parámetros ( $\varepsilon_{PTT} \rightarrow 1$ ) se puede observar un adelgazamiento moderado en extensión aun para la versión lineal.

### **2.3.3 Modelos Pom-Pom**

El modelado reológico de sistemas de polímero fundido ha probado ser una tarea difícil, en particular cuando se trata de representar simultáneamente las propiedades en flujo extensional y cortante. Modelos constitutivos como el de Phan-Thien/Tanner (PTT), Giesekus y el de Kaye-Bernstein-Kearsley-Zapas (K-BKZ) tienen dificultades para representar satisfactoriamente estos sistemas. Empleando una modificación al modelo K-BKZ multimodal, Mitsoulis et al. [29] lograron predecir la dinámica de los vórtices para polietileno fundido de baja densidad (LDPE). Aun cuando los modelos PTT pueden representar una variedad de respuestas en flujos reométricos, el parámetro  $\epsilon_{PTT}$  controla simultáneamente el grado de espesamiento en la extensión y el adelgazamiento al corte, por lo que al ajustar la respuesta extensional de un sistema real, es probable que la viscosidad cortante no sea representada de manera satisfactoria o viceversa (ver Aboubacar et al. [7]).

El modelo Pom-Pom fue introducido por McLeish y Larson [1] para representar sistemas constituidos por moléculas idealizadas de polímero (ver Figura 2.3), y es considerado como un paso relevante en reología. El modelo toma en cuenta la estructura de las cadenas poliméricas, basándose en la teoría del flujo en un tubo formado por las moléculas vecinas (ver [30]). En la teoría de los modelos Pom-Pom, las moléculas de polímero están representadas por un segmento lineal o *esqueleto* (backbone), con el mismo número de brazos,  $q$  (dangling arms), que brotan de ambos extremos del esqueleto. Es importante mencionar que no existe un límite en el número de brazo, al menos no un límite teórico. El arrastre que el sistema ejerce sobre estos brazos provoca el estiramiento del esqueleto. La presencia de los nodos (branching points) donde surgen los brazos, retrasa el movimiento reptante del segmento lineal. Los extremos de los brazos pueden seguir moviéndose y el proceso de retracción de estos brazos ayuda a que la molécula (cadena polimérica) se libere del tubo de restricciones formado por las moléculas vecinas. Esta retracción comienza cuando la molécula alcanza su máxima extensión.

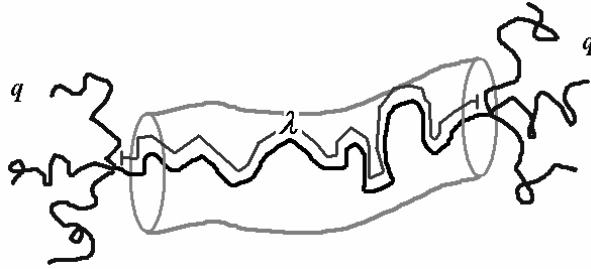


Figura 2.3. Molécula idealizada Pom-Pom.

Los brazos se liberan del tubo de manera gradual por difusión. Una vez que éstos se han relajado, el esqueleto puede entonces, relajarse debido al movimiento de los puntos nodales. La extensión de las cadenas de polímero se representa por el parámetro  $\lambda$ , que es el cociente entre la extensión real y la extensión de equilibrio o reposo,  $\lambda = L_{\text{esqueleto}} / L_{0\text{ esqueleto}}$ .

Un aspecto clave de este nuevo tipo de modelos es la introducción de dos tiempos (en vez de sólo uno) de relajación, uno para el estiramiento y otro para la orientación. El modelo consiste en dos ecuaciones interdependientes. En la formulación original, el hecho de que la molécula alcance una extensión máxima (restricción de extensión finita) introduce una discontinuidad en el gradiente de la viscosidad extensional estacionaria (ver ref. [31]). Además de esto, el modelo sufre de dos problemas importantes, el primero es la predicción de una segunda diferencia de esfuerzos normales nula y la otra, es que la orientación del esqueleto a valores altos de la rapidez de deformación extensional no tiene límite.

Inkson et al. [32] utilizaron un modelo Pom-Pom multimodal; sin embargo, las deficiencias siguieron presentes. Al modificar la evolución de la ecuación de la extensión molecular,  $\lambda$ , Blackwell et al. [33] permitieron el desplazamiento de los puntos nodales. Esto tiene el efecto de atenuar los picos no suaves en  $\eta_e$  [31], no obstante, aún pueden detectarse discontinuidades provocadas por la restricción de la máxima extensión mole-

cular. Con el objetivo de eliminar estas deficiencias en el modelo, Verbeeten et al. [2,34] introdujeron el modelo Pom-Pom extendido (eXtended Pom-Pom o XPP).

La evolución de la contribución polimérica del esfuerzo en la versión extendida de una ecuación (Single eXtended Pom-Pom model o SXPP) es:

$$\lambda_{0b} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + f(\boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\tau} + \frac{\alpha}{G_0} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau} + G_0 [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] \mathbf{I} = 2\lambda_{0b} G_0 \mathbf{d}, \quad (2.34)$$

donde

$$f(\boldsymbol{\tau}) = 2 \frac{\lambda_{0b}}{\lambda_{0s}} \left( 1 - \frac{1}{\lambda} \right) e^{\nu(\lambda-1)} + \frac{1}{\lambda^2} \left( 1 - \frac{\alpha}{3G_0^2} tr(\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) \right). \quad (2.35)$$

Aquí,  $\lambda_{0b} > \lambda_{0s}$  son los tiempos de relajación de la orientación y del estiramiento, respectivamente,  $G_0$  es el módulo de relajación lineal. Note que en la ecuación (2.35), el término  $tr(\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau})$  es la traza de la contracción del tensor extra de esfuerzos, que es un escalar. Para predecir una segunda diferencia de esfuerzos normales distinta de cero,  $N_2$ , Verbeeten et al. [2] incorporaron un parámetro,  $\alpha$ , tipo de Giesekus. Cuando el parámetro de anisotropía se define como cero,  $N_2$  es también cero, y al incrementar  $\alpha$ , esta diferencia de esfuerzos normales se vuelve más significativa. Sin embargo, Clemeur et al. [35] han mostrado que la incorporación de este parámetro produce “defectos numéricos” a ciertos valores de  $\alpha$  y  $q$  (ver sección 6.3.2 para mayores detalles).

Con el modelo SXPP, la extensión de la molécula está en función del tensor extra de esfuerzos

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{1}{3G_0} |tr(\boldsymbol{\tau})|}. \quad (2.36)$$

En la ecuación (2.36), el valor absoluto no está incluido en la formulación SXPP original. Aquí, esta modificación es necesaria para que la solución numérica converja a valores más altos de elasticidad, al evitar problemas cuando  $tr(\boldsymbol{\tau}) < 0$  en flujos complejos (que puede ocurrir sólo numéricamente). El parámetro  $\nu$  en la ecuación (2.35) fue incorporado para remover la discontinuidad en la derivada de la viscosidad extensional. Los autores encontraron que el valor recomendado es inversamente proporcional al número de brazos de la molécula; más precisamente  $\nu = 2/q$ . Finalmente, el componente extra del tensor de esfuerzos puede ser escrito como la suma de las contribuciones polimérica y del disolvente,  $\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau} + 2\mu_s \mathbf{d}$ .

Nótese que en el modelo XPP (2.34), el componente del esfuerzo  $\tau_{zz}$  no es necesariamente cero, aun en flujos bidimensionales; la presencia de este esfuerzo puede implicar resultados distintos en simulaciones 2D y 3D aun cuando en las últimas, el confinamiento en dirección  $z$  sea grande en comparación con las direcciones  $x$  y  $y$ .

### *2.3.3a Modelos Pom-Pom alternativos*

El modelo Pom-Pom original ha atraído la atención de diversos investigadores los cuales, con el fin de mejorar o utilizar el modelo en sus códigos de cómputo, le han hecho modificaciones. Se presentan a continuación algunas de estas versiones, que para este trabajo se consideran relevantes.

#### *-Modelo Doble*

El modelo Pom-Pom extendido doble (Double eXtended Pom-Pom o DXPP) fue introducido simultáneamente junto a la versión de una ecuación SXPP por Verbeeten et al. [2]. En esta forma, en vez de calcular el esfuerzo  $\boldsymbol{\tau}$ , la solución está en términos del tensor de orientación  $\mathbf{S}$ .

El modelo DXPP puede expresarse como,

$$\boldsymbol{\tau} = G_0 (3\lambda^2 \mathbf{S} - \mathbf{I}), \quad (2.37)$$

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} + f(\mathbf{S})\mathbf{S} + \frac{\alpha - 1}{3\lambda_{0b}\lambda^2} \mathbf{I} + \frac{3\alpha\lambda^2}{\lambda_{0b}} \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{0}, \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \lambda = \lambda \mathbf{d} : \mathbf{S} - \frac{(\lambda - 1)}{\lambda_{0s}} e^{\nu(\lambda - 1)}, \quad (2.39)$$

$$f(\mathbf{S}) = 2\mathbf{d} : \mathbf{S} + \frac{1}{\lambda_{0b}\lambda^2} \left[ 1 - \alpha - 3\alpha\lambda^4 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) \right], \quad (2.40)$$

donde  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad y, al igual que en el modelo SXPP,  $\nu = 2/q$ . La principal diferencia en DXPP, con respecto a la versión SXPP, es que la extensión molecular se calcula a partir de una ecuación diferencial parcial. Debido a que ambos modelos surgieron a partir de las mismas suposiciones, las soluciones utilizando el modelo SXPP o el DXPP deben arrojar las mismas soluciones. La diferencia en la obtención de ambos modelos, es que la versión de una ecuación toma ventaja del hecho de que a cualquier tiempo y en cualquier flujo, la traza del tensor de orientación es cero, por lo que la ecuación para el estiramiento toma una forma algebraica.

*- Modelo  $\lambda^2$ XPP*

Con el fin de implementar el modelo XPP en un simulador con métodos espectrales, van Os y Phillips [36] propusieron una modificación al modelo extendido. Esto resultó en un modelo que es una combinación entre el doble y el de una ecuación, con el tensor de esfuerzos a resolver, no el de orientación. El modelo consiste en las ecuaciones (2.53)-evolución del esfuerzo y (2.54)-función extra, del modelo SXPP; para calcular la exten-

sión de la molécula, estos autores utilizaron la ecuación del modelo DXPP, pero en términos del tensor  $\boldsymbol{\tau}$  (ver sección 5.3.3 para más detalles de este modelo),

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \lambda = \frac{1}{3\lambda G_0} \mathbf{d} : \boldsymbol{\tau} - \frac{\lambda - 1}{\lambda_{0s}} e^{\nu(\lambda-1)}. \quad (2.41)$$

*- Modelo extendido Pom-Pom modificado*

Verbeeten et al. [37] implementaron los comentarios de van Meerveld [38] para mejorar su modelo. La modificación consistió en reemplazar el término  $(1-1/\lambda)$  en la ecuación (2.35) con  $(1-1/\lambda^2)$ . Con esta nueva versión modificada (modified eXtended Pom-Pom o mXPP), no se anticipa la obtención de valores del esfuerzo polimérico sin sentido físico ( $tr(\boldsymbol{\tau}) < 0$ ). La evolución del esfuerzo está dada por la ecuación (2.34), el valor absoluto en la ecuación (2.36) para la extensión molecular ya no es requerido, y la función extra es ahora,

$$f(\boldsymbol{\tau}) = 2 \frac{\lambda_{0b}}{\lambda_{0s}} \left( 1 - \frac{1}{\lambda^2} \right) e^{\nu(\lambda-1)} + \frac{1}{\lambda^2} \left( 1 - \frac{\alpha}{3G_0^2} tr(\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) \right). \quad (2.42)$$

Sin embargo, como se mencionó anteriormente, el parámetro  $\alpha$  puede introducir singularidades analíticas para valores de anisotropía elevados y un número grande de brazos  $q$ . El problema de las singularidades está presente en ambos modelos, SXPP y mXPP y es una consecuencia directa de la incorporación del parámetro de Giesekus,  $\alpha$ . Este tema se trata con mayor detalle en la sección 6.3.2 para el modelo SXPP, así como la influencia de este defecto en los flujos en contracción. La misma respuesta anormal, en flujo cortante simple, está presente para ambos modelos, SXPP y mXPP, como se observa en la Figura 2.4, donde se puede observar un incremento súbito en la viscosidad cortante cuando el valor adimensional de la rapidez de deformación está cerca de  $\lambda_{0b} \dot{\gamma} \approx 13$ .



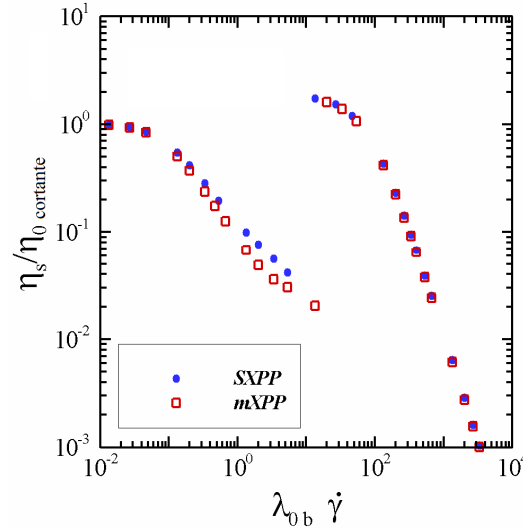


Figura 2.4. Singularidades en la viscosidad de corte para los modelos SXPP y mXPP:  $\beta = 0$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 20$ ,  $\alpha = 0.3$ .

- Variante SXPP semi-lineal

El objetivo es el de obtener un equivalente a la versión lineal del modelo de Phan-Thien/Tanner (LPTT). Con este fin, y para simplificar el análisis, el parámetro de anisotropía,  $\alpha$ , se fija como cero; al hacer ésto, la función extra del modelo SXPP se vuelve función directa del estiramiento,  $\lambda$ , únicamente. No obstante, sigue siendo función del esfuerzo por la funcionalidad que guarda  $\lambda$ . Mas aún, los términos eliminados al hacer  $\alpha = 0$  permiten que la función extra sea dependiente de manera explícita de la traza del tensor de esfuerzos,  $tr(\boldsymbol{\tau})$ , que entonces, puede ser considerado como una variable.

Utilizando la regla de la cadena del cálculo diferencial:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{\tau})}{\partial tr(\boldsymbol{\tau})} = \frac{\partial f(\boldsymbol{\tau})}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial tr(\boldsymbol{\tau})}. \quad (2.43)$$

Para simplificar la notación,  $tr$  denotará a  $tr(\boldsymbol{\tau})$ . Expandiendo en series de Taylor:

$$f(tr) = f(tr \rightarrow 0) + \left. \frac{\partial f}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial tr} \right|_{tr \rightarrow 0} tr + O(tr^2). \quad (2.44)$$

Evaluando las derivadas requeridas:

$$\frac{\partial f}{\partial \lambda} = \frac{2}{\lambda^3} \left( \frac{[2\lambda(\lambda-1) + q] e^{q \frac{2(\lambda-1)}{\lambda_{0b} \lambda}} - 1}{q \lambda_{0s}} \right), \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial tr} = \frac{1}{6G_0 \sqrt{1 + \frac{1}{3G_0} tr}}, \quad (2.46)$$

nótese que  $tr(\boldsymbol{\tau}) \rightarrow 0 \Rightarrow \lambda \rightarrow 1$ , entonces,

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \lambda} \right|_{\lambda \rightarrow 1} = 2 \left( \frac{\lambda_{0b}}{\lambda_{0s}} - 1 \right) \quad y \quad \left. \frac{\partial \lambda}{\partial tr} \right|_{tr \rightarrow 0} = \frac{1}{6G_0}. \quad (2.47)$$

Finalmente, la función extra linealizada es:

$$f(\boldsymbol{\tau}) \approx 1 + \frac{1}{3G_0} \left( \frac{\lambda_{0b}}{\lambda_{0s}} - 1 \right) tr(\boldsymbol{\tau}). \quad (2.48)$$

Si la ecuación (2.48) es usada en vez de (2.35), se tiene entonces una aproximación semi-lineal del modelo SXPP ( $\lambda$  es aún no lineal). Desafortunadamente, la dependencia con el número de brazos,  $q$ , se ha perdido en el proceso de linealización. En este caso, el único parámetro que controla el grado de espesamiento en la extensión es  $\lambda_{0b}/\lambda_{0s} = 1/\varepsilon$ . Este nuevo modelo, puede ser utilizado para emular la respuesta de la

versión lineal del modelo Phan-Thien/Tanner. Si el mismo procedimiento se aplica a la versión mXPP, la función extra resultante es similar:

$$f(\boldsymbol{\tau}) \approx 1 + \frac{1}{3G_0} \left( 2 \frac{\lambda_{ob}}{\lambda_{os}} - 1 \right) tr(\boldsymbol{\tau}). \quad (2.49)$$

Cabe mencionar que si bien estos modelos fueron creados para representar moléculas ideales, se pueden utilizar para representar sistemas poliméricos reales, es decir, si se tiene un conjunto de parámetros de cualquiera de las versiones Pom-Pom, que aproximen las respuestas reométricas de un líquido real, entonces es de esperar que la respuesta en flujos complejos será más semejante a la del fluido real conforme el grado en que los parámetros Pom-Pom escogidos se ajusten a las funciones materiales reales. Para que la representación del modelo al fluido real sea adecuada, se utilizan versiones multimodales (varios conjuntos de parámetros de un modelo para un solo fluido, es decir, varios valores de  $\beta$ ,  $\varepsilon$ ,  $q$  y demás cantidades en la misma simulación), por ejemplo, Inkson et al. [32] y Verbeeten et al. [2,34,37,39] simularon el comportamiento de diversos fundidos de polietileno, utilizando modelos Pom-Pom. Sin embargo, aún cuando en el presente trabajo solo se usan versiones unimodales, y no se pretende hacer ninguna comparación cuantitativa con experimentos, existe la posibilidad de que los parámetros (fijos) Pom-Pom aquí usados, puedan representar algún fluido real, siempre y cuando las mediciones reométricas del fluido concuerden con las predichas por el modelo. Con el objetivo de mostrar la capacidad del modelo Pom-Pom para ajustar sistemas poliméricos reales, se presenta en la Figura 2.5 el ajuste del modelo a datos experimentales de LDPE a 170 °C, estas gráficas fueron tomadas de Verbeeten et al. [37]. En esta figura se observa el buen ajuste que se puede lograr con el modelo SXPP, tanto en viscosidad cortante como en viscosidad uniaxial.

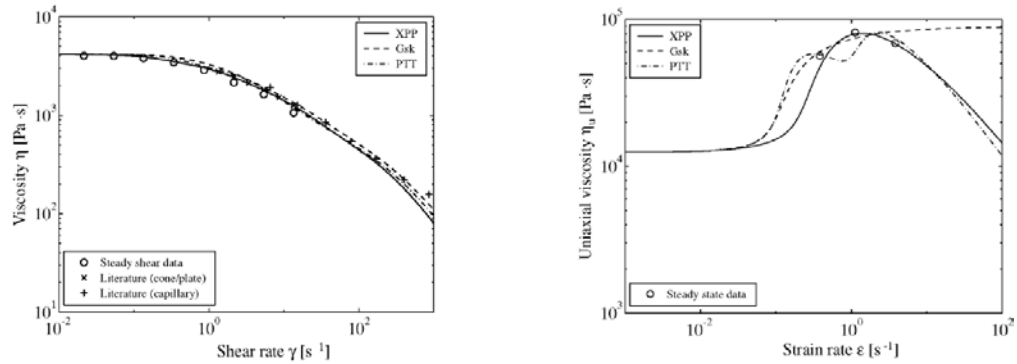


Figura 2.5. Ajuste de viscosidad cortante y uniaxial para LDPE; modelo XPP.

## 2.4 Expresiones adimensionales

Las ecuaciones básicas del flujo de fluidos pueden ser expresadas en forma adimensional, en términos de una longitud característica  $L$  (unitaria), de una escala de velocidad  $U$  (dos veces la velocidad media<sup>†</sup> - tomando un flujo unitario en la mitad del canal), la escala de tiempo es  $L/U$ , y la escala de presión y esfuerzo es  $\mu U/L$ . El parámetro  $\mu = \mu_s + \mu_p$  es la viscosidad total, definida como la suma de la contribución del disolvente y de la parte no newtoniana.

Con el fin de mantener similitud entre las formas adimensionales de los modelos de Oldroyd-B y SXPP, se escoge al parámetro  $\lambda_{0b}$  como el tiempo de relajación para los modelos Pom-Pom; definiendo así, a la viscosidad polimérica (no newtoniana) como  $\mu_p = G_0 \lambda_{0b}$ .

Con estas definiciones, el grupo de números y parámetros adimensionales  $Re$ ,  $We$ ,  $\beta$  y  $\varepsilon$  están dados por,

<sup>†</sup> Un flujo unitario correspondería al flujo en un canal de una unidad de separación entre las paredes.

$$Re = \rho \frac{UL}{\mu}, \quad We = \lambda_{0b} \frac{U}{L}, \quad \beta = \frac{\mu_s}{\mu_s + \mu_p}, \quad \varepsilon = \frac{\lambda_{0s}}{\lambda_{0b}}, \quad (2.50)$$

entonces, las ecuaciones pueden ser expresadas como<sup>‡</sup>

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.51)$$

$$Re \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \beta \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2.52)$$

$$We \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + f(\boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\tau} + \frac{\alpha We}{1-\beta} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau} + \frac{1-\beta}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] \mathbf{I} = 2(1-\beta) \mathbf{d}, \quad (2.53)$$

donde  $f(\boldsymbol{\tau})$  y  $\lambda$  están dados por

$$f(\boldsymbol{\tau}) = \frac{2}{\varepsilon} \left( 1 - \frac{1}{\lambda} \right) e^{\nu(\lambda-1)} + \frac{1}{\lambda^2} \left[ 1 - \frac{\alpha}{3} \left( \frac{We}{1-\beta} \right)^2 tr(\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) \right], \quad (2.54)$$

y

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{1}{3} \left( \frac{We}{1-\beta} \right) |tr(\boldsymbol{\tau})|}, \quad (2.55)$$

respectivamente. El tensor de esfuerzo extra,  $\mathbf{T}$ , es

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d}. \quad (2.56)$$

Nótese que fijando  $\alpha = 0$  y  $f(\boldsymbol{\tau}) = 1$  en la ecuación (2.53), se obtiene el modelo Oldroyd-B, y si además  $\beta = 0$ , se llega al modelo convectivo superior de Maxwell.

<sup>‡</sup> La ecuación (2.52) es la forma adimensional de la ecuación (2.18), ver además (2.56).

El cociente de viscosidades,  $\beta$ , es una medida indirecta de la concentración de partículas poliméricas en el sistema. Estas moléculas de polímero son las responsables de la naturaleza viscoelástica del sistema. En el grado en que  $\beta$  tienda a la unidad, el sistema es más diluido, mientras que  $\beta=0$  es el caso límite inferior, en donde no hay disolvente, es decir, el sistema está constituido exclusivamente de polímero fundido.

El parámetro  $\varepsilon$ , el cociente de tiempos de relajación (estiramiento/orientación), es inversamente proporcional al peso molecular de entrelazamiento de los segmentos lineales de las moléculas (esqueletos). Valores de  $\varepsilon$  acercándose a la unidad corresponden a moléculas con segmentos lineales relativamente cortos comparados con brazos largos que retrasan la dinámica del movimiento, y valores cercanos a cero, corresponden a moléculas con esqueletos más grandes.

El número de brazos libres  $q$ , tiene un efecto en el entrelazamiento del sistema. Entre mayor número de brazos, la extensión de la molécula puede alcanzar valores más grandes. De hecho, para el modelo original Pom-Pom, la máxima extensión de la molécula,  $\lambda_{max}$ , es exactamente igual a  $q$ .

## **2.5 Funciones materiales**

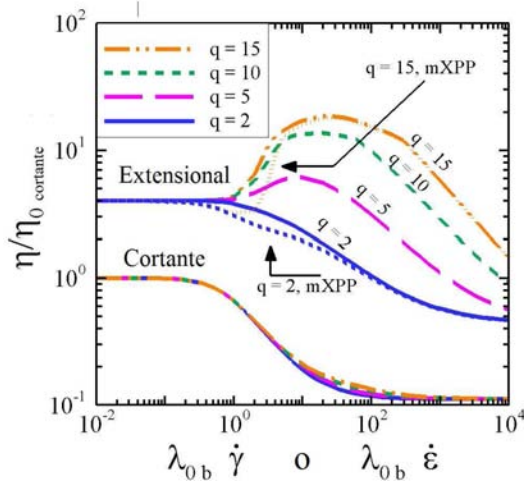
El modelo Pom-Pom de una ecuación o SXPP, representa a un fluido con los fenómenos de adelgazamiento al corte (shear-thinning) y espesamiento/adelgazamiento en extensión (extension-hardening/softening). El caso base de parámetros utilizados a lo largo del estudio es  $\beta=1/9$ ,  $\varepsilon=1/3$ ,  $q=2$  y  $\alpha=0.15$ . Esta selección da como resultado un fluido con adelgazamiento al corte pronunciado; en flujo extensional, se tiene endurecimiento débil, seguido por ablandamiento pronunciado. Además del caso base, se considera la variación del número de brazos. La Figura 2.6 presenta la respuesta en flujos reométricos del modelo SXPP. El caso base puede identificarse con la línea  $q=2$ . A la relación

de disolvente escogida,  $\beta = 1/9$ , el incrementar el número de brazos tiene un efecto poco significativo en la viscosidad cortante, y una influencia importante en flujo extensional. Al incrementar el número de brazos de  $q = 2$  a 15, el valor máximo de la viscosidad extensional se incrementa aproximadamente una década en la gráfica logarítmica. Este pico ocurre alrededor de valores adimensionales de la rapidez de extensión de 10 a 20 unidades para  $q \geq 5$ . La razón de Trouton planar (Figura 2.6b) refleja el incremento de la viscosidad extensional, pero con el efecto combinado del adelgazamiento al corte, esta relación ( $Tr$ ) aumenta en más de una década en su valor más alto. El efecto de incrementar el número de brazos es poco significativo sobre el coeficiente de la primer diferencia de esfuerzos normales,  $\psi_1$ , para valores en la rapidez de corte bajos a moderados ( $\dot{\gamma} < 5$ ). Para deformaciones superiores, esta variación en  $q$  resulta en aumento de  $\psi_1$  (Figura 2.6c). El mismo ajuste en el número de brazos (de 2 a 15) provoca un incremento significativo en la extensión de la molécula; este efecto se vuelve aparente con deformaciones mayores a 0.5 unidades (Figura 2.6d).

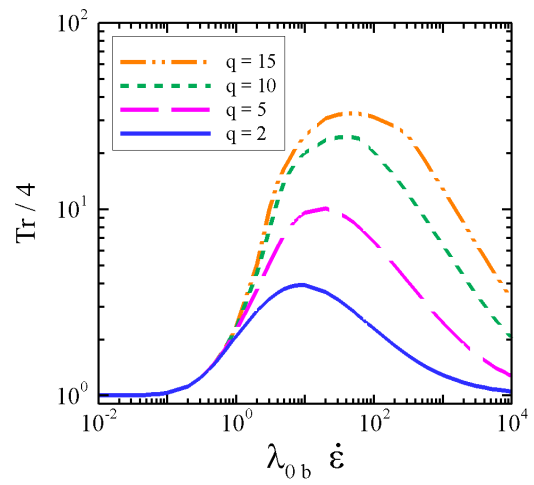
Considerando la respuesta en flujo extensional de la variante mXPP, se pueden notar algunas diferencias con el modelo SXPP. Si se observa el intervalo  $[10^0, 10^1]$  en  $\dot{\epsilon}$ , para el caso  $q = 2$  (mXPP), el ablandamiento en extensión empieza antes que para el modelo SXPP; y aún cuando se notan diferencias en la rapidez de decaimiento en  $\eta_e$  a valores más altos de la rapidez de extensión, la reducción en la viscosidad extensional de ambos modelos es similar. Al aumentar el número de brazos, la versión mXPP presenta la disminución en  $\eta_e$  a valores moderados de la rapidez de deformación, seguido por un espesamiento extensional rápido, que al final, sigue el comportamiento del modelo SXPP en cuanto al espesamiento/ablandamiento.

La evolución transitoria de la viscosidad y de la extensión molecular en flujos cortante y extensional es mostrada en la Figura 2.7. La solución es generada desde reposo

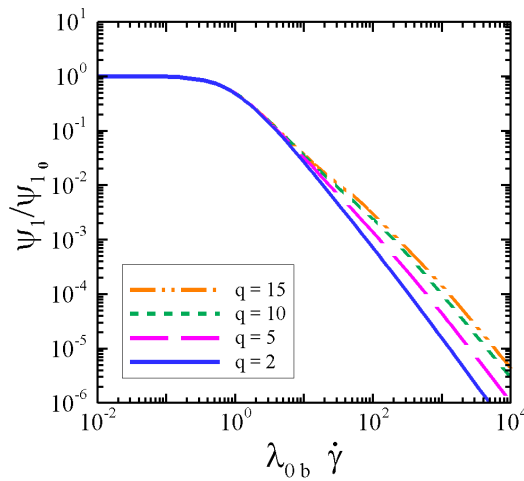
a) Viscosidad cortante y planar



b) Relación de Trouton planar



c) Coeficiente de la primera diferencia de esfuerzos normales



d) Extensión molecular del esqueleto

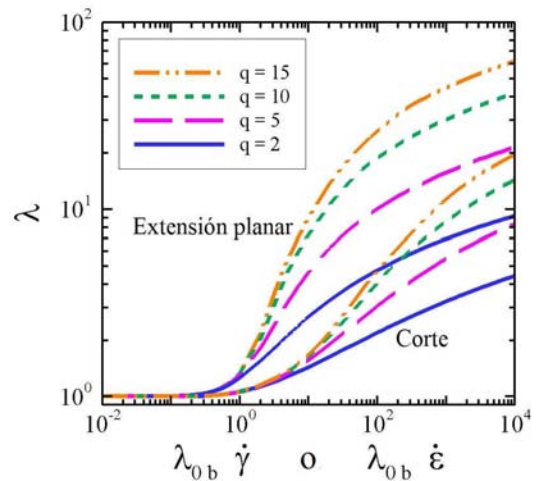
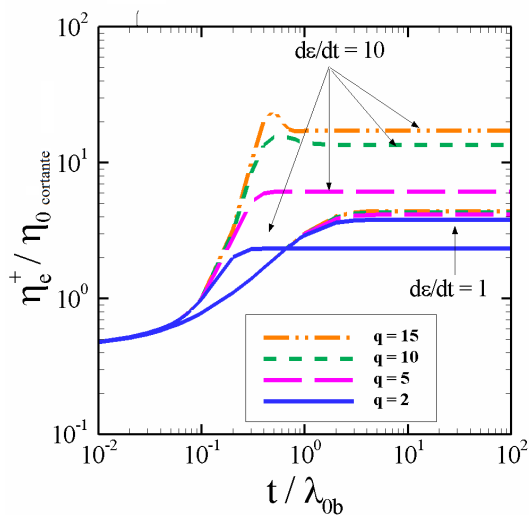


Figura 2.6. Respuesta en flujo cortante y extensional planar, variando  $q$ ;  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ .

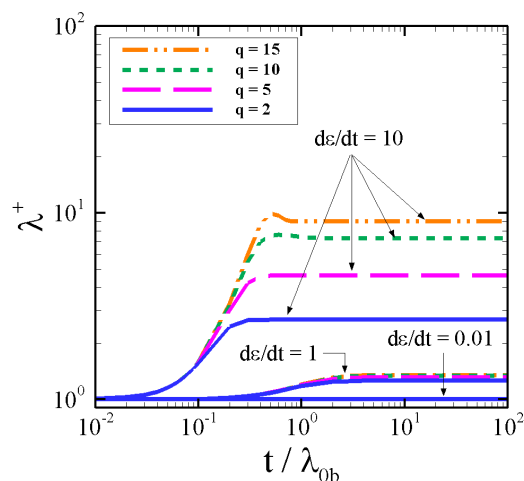
hasta el estado estacionario. El tiempo se escala con el parámetro  $\lambda_{0b}$ . Las viscosidades transitorias (planar y cortante) son escaladas con la viscosidad cortante a rapidez de de-



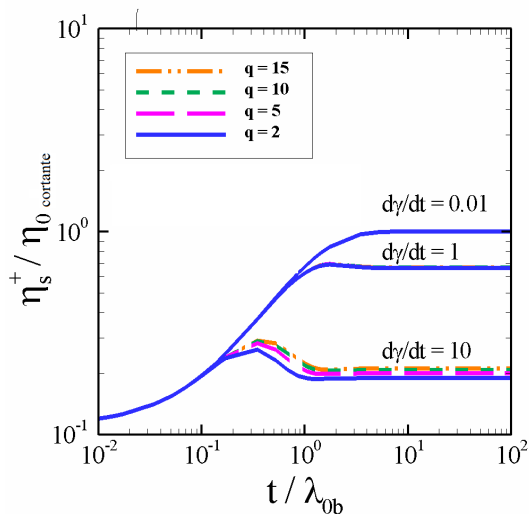
a) Viscosidad transitoria planar



b) Extensión molecular en flujo planar



c) Viscosidad cortante transitoria



d) Extensión molecular en flujo cortante

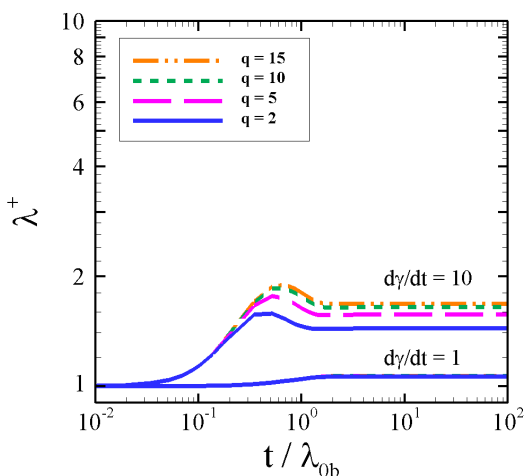


Figura 2.7. Respuesta transitoria en flujos cortante y extensional variando  $q$ ;  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ .

formación tendiente a cero a estado estacionario,  $\eta_0$ . Estas variables ( $\eta_e$ ,  $\eta_s$ ,  $\lambda$ )<sup>§</sup> alcanzan su valor estacionario más rápido en cuanto más grande sea la rapidez de defor-

<sup>§</sup> En este estudio, la viscosidad extensional se representa como  $\eta_e$  en ambos flujos, planar y uniaxial.

mación ( $\dot{\epsilon}$  o  $\dot{\gamma}$ ). Además, la extensión molecular para niveles de  $\dot{\epsilon}$  y  $\dot{\gamma}$  de 0.01 y 1, no presentan ningún máximo. Conforme se incrementa la rapidez de deformación, el máximo en  $\lambda$  se vuelve más evidente. El aumento en el número de brazos, también tiene este efecto. Cabe mencionar que en flujos a través de contracciones y/o expansiones, aún en régimen permanente, hay efectos transitorios de tipo lagrangiano, de los que no se anticipa que sean significativos en la zona de la contracción, aún si el fluido está sujeto a una rapidez de deformación de gran magnitud; esto es debido al corto tiempo de residencia que las partículas o elementos de fluido pasan en la zona de la restricción. En contraste, al considerar el canal de salida, se observan valores de rapidez de deformación considerables, y los tiempos de residencia son suficientemente largos para permitir que el fluido alcance valores de viscosidad de estado estacionario a una distancia no tan lejana de la contracción. Por ejemplo, en el caso de una contracción 4:1, se alcanzan en la pared del canal de salida valores estacionarios de viscosidad a unas tres unidades de longitud después de la esquina de la contracción; esto se discutirá con mayor detalle en el capítulo 6, en especial se recomienda ver la Figura 6.9.

Estas funciones materiales fueron generadas al resolver las ecuaciones del modelo en flujos extensional (planar) y en cortante simple, sujetas a la condición inicial  $\tau_{ij} = 0$  cuando  $t = 0$ .

Para flujo cortante transitorio:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \tau_{xx} &= 2\tau_{xy}\dot{\gamma} - \frac{\alpha}{\lambda_{0b}G_0}(\tau_{xx}^2 + \tau_{xy}^2) - \frac{1}{\lambda_{0b}}f(\boldsymbol{\tau})\tau_{xx} - \frac{G_0}{\lambda_{0b}}[f(\boldsymbol{\tau}) - 1], \\
 \frac{d}{dt} \tau_{yy} &= -\frac{\alpha}{\lambda_{0b}G_0}(\tau_{yy}^2 + \tau_{xy}^2) - \frac{1}{\lambda_{0b}}f(\boldsymbol{\tau})\tau_{yy} - \frac{G_0}{\lambda_{0b}}[f(\boldsymbol{\tau}) - 1], \\
 \frac{d}{dt} \tau_{zz} &= -\frac{\alpha}{\lambda_{0b}G_0}\tau_{zz}^2 - \frac{1}{\lambda_{0b}}f(\boldsymbol{\tau})\tau_{zz} - \frac{G_0}{\lambda_{0b}}[f(\boldsymbol{\tau}) - 1], \\
 \frac{d}{dt} \tau_{xy} &= \tau_{yy}\dot{\gamma} - \frac{\alpha}{\lambda_{0b}G_0}\tau_{xy}(\tau_{xx} + \tau_{yy}) - \frac{1}{\lambda_{0b}}f(\boldsymbol{\tau})\tau_{xy} + G_0\dot{\gamma}.
 \end{aligned} \tag{2.57}$$

Y para flujo extensional planar:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tau_{xx} &= 2\dot{\epsilon}(\tau_{xx} + G_0) - \frac{\alpha}{\lambda_{0b} G_0} \tau_{xx}^2 - \frac{1}{\lambda_{0b}} f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{xx} - \frac{G_0}{\lambda_{0b}} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1], \\ \frac{d}{dt} \tau_{yy} &= -2\dot{\epsilon}(\tau_{yy} + G_0) - \frac{\alpha}{\lambda_{0b} G_0} \tau_{yy}^2 - \frac{1}{\lambda_{0b}} f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{yy} - \frac{G_0}{\lambda_{0b}} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1], \\ \frac{d}{dt} \tau_{zz} &= -\frac{\alpha}{\lambda_{0b} G_0} \tau_{zz}^2 - \frac{1}{\lambda_{0b}} f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{zz} - \frac{G_0}{\lambda_{0b}} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

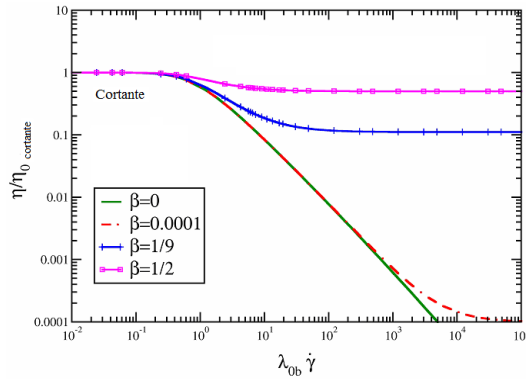
La respuesta dinámica es la solución de los sistemas (2.57) y (2.58) a algún valor fijo de rapidez de deformación,  $\dot{\gamma}$  o  $\dot{\epsilon}$ , según corresponda. Se pueden emplear procedimientos numéricos típicos como el de Euler o Runge-Kutta para resolver estos sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Entonces, la viscosidad transitoria se obtiene de la solución de (2.57) o (2.58), y aplicando las ecuaciones (2.1) o (2.7) (dependiendo si es flujo extensional o cortante). El valor estacionario para cada tipo de deformación es el valor (estable) de la solución a tiempos suficientemente grandes. Para finalizar, la Tabla 2.1 muestra las expresiones de las funciones materiales para algunos modelos utilizados comúnmente. Las expresiones para el modelo SXPP son para el caso  $\alpha = 0$ , por simplicidad. Adicionalmente, la Figura 2.8 y la Tabla 2.2 resumen la influencia de los parámetros adimensionales sobre la reología del modelo SXPP, con cero anisotropía.

Tabla 2.1. Funciones materiales para algunos modelos comunes

	$\eta_s(\dot{\gamma})$	$\Psi_1(\dot{\gamma})$	$\eta_e(\dot{\epsilon})$
UCM	$\mu_0$	$2\mu_0\lambda$	$\frac{2\mu_0}{1-2\lambda\dot{\epsilon}} + \frac{\mu_0}{1+\lambda\dot{\epsilon}}$
Oldroyd-B	$\mu_0$	$2\mu_0(\lambda - \lambda_j)$	$\frac{2\mu_p}{1-2\lambda\dot{\epsilon}} + \frac{\mu_p}{1+\lambda\dot{\epsilon}} + 3\mu_s$
SXPP	$\frac{G_0 \lambda_{0b}}{f(\boldsymbol{\tau})^2} + \mu_s$	$\frac{2 \lambda_{0b}^2 G_0}{f(\boldsymbol{\tau})^3}$	$\frac{3G_0}{[\lambda_{0b} \dot{\epsilon} + f(\boldsymbol{\tau})][ -2 \lambda_{0b} \dot{\epsilon} + f(\boldsymbol{\tau})]} + 3\mu_s$

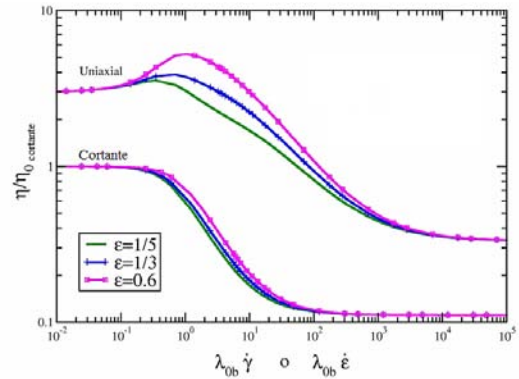
**Variación del parámetro  $\beta$**

*a) Viscosidad cortante*

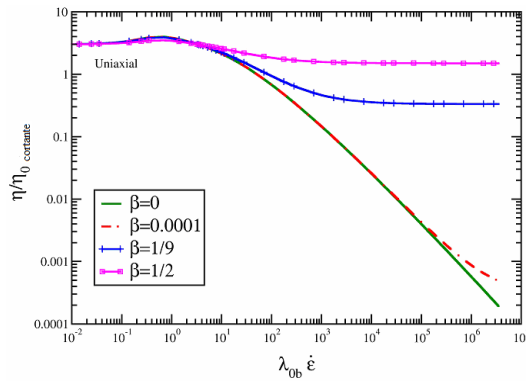


**Variación del parámetro  $\varepsilon$**

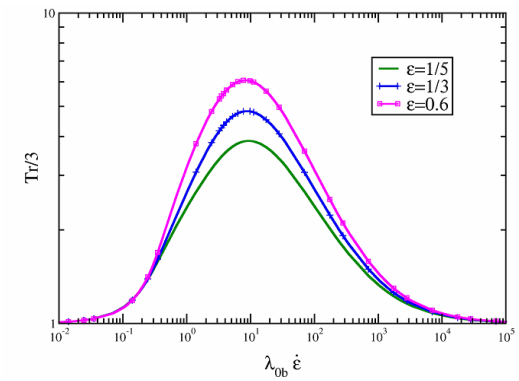
*b) Viscosidad cortante y uniaxial*



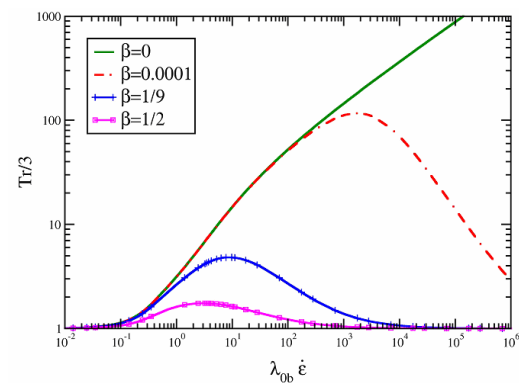
*c) Viscosidad uniaxial*



*d) Relación de Trouton uniaxial*



*e) Relación de Trouton uniaxial*



*f) Coeficiente de la 1ª diferencia de esfuerzos normales*

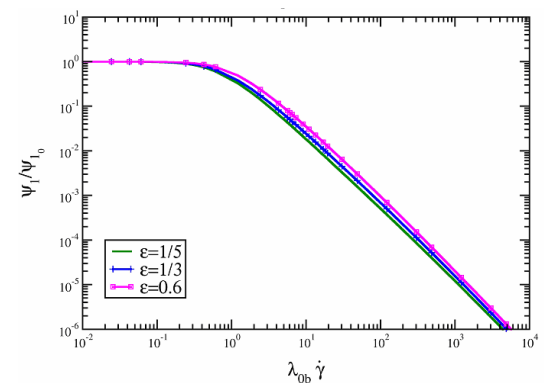


Figura 2.8. Influencia de  $\beta$  y  $\varepsilon$  en las funciones materiales SXPP:  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0$ .

Tabla 2.2. Influencia del valor de parámetros adimensionales sobre la viscosidad extensional y cortante

<b><i>Incrementando:</i></b>	<b><math>\eta_s</math></b>	<b><math>\eta_e</math></b>
<b><math>\beta = \mu_s / \mu_T</math></b>	Reduce el nivel de adelgazamiento, aumentando el valor de la segunda región newtoniana	Importante reducción del nivel de ablandamiento, al incrementar el valor de la segunda región newtoniana
<b><math>\varepsilon = \lambda_{0s} / \lambda_{0b}</math></b>	Pequeño incremento en la región de adelgazamiento	Efecto apreciable en la zona de incremento extensional, no tan significativo como $q$
<b><math>q</math></b>	No tiene efecto significativo	Incremento pronunciado en el nivel de endurecimiento

## CAPÍTULO 3

### Algoritmos Numéricos

El procedimiento numérico empleado en este estudio es un algoritmo híbrido que consiste en resolver las ecuaciones de continuidad y movimiento, con el método de elemento finito (Finite Element Method o FEM), mientras que la ecuación constitutiva se resuelve vía el método de volumen finito (Finite Volume Method o FVM). Ambos métodos han sido aplicados exitosamente de manera separada a una gran variedad de problemas de dinámica computacional de fluidos (CFD). El algoritmo híbrido utilizado toma ventaja de ambos métodos, produciendo un esquema elemento/volumen finitos de solución de alto orden estable (hybrid finite element/volume scheme o *fe/fv*).

El esquema numérico fue desarrollado previamente en el *Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics* (INNFM), por el grupo de reología computacional de la *University of Wales Swansea*. En este estudio, éstos han sido extendidos al incorporar las ecuaciones constitutivas SXPP, mXPP, y Bautista-Manero modificado.

### 3.1 Introducción

El modelado numérico ha progresado de manera extraordinaria con los modernos desarrollos de procesadores de cómputo. Hoy en día, es posible resolver sistemas consistentes de cientos de ecuaciones en cuestión de minutos. En cuanto a problemas CFD, tres métodos han sido aplicados de manera exitosa a una variedad de problemas que involucran geometrías simples y complejas. Estos métodos son: *diferencias finitas*, *elemento finito* y *volumen finito* (para problemas con fluidos viscoelásticos ver [40-42]). En el campo de reología computacional, los tres métodos han sido adaptados para resolver un gran número de ecuaciones constitutivas para el esfuerzo, y se han probado como invaluable para el análisis de problemas de flujo.

El método de diferencias finitas fue el primero en surgir, y aún cuando es generalmente sencillo de implementar, el tratar con geometrías y condiciones de frontera complejas puede hacer que el esquema pierda precisión y la discretización se puede volver muy complicada. Esto ha dado origen a la técnica de mapeo conformacional. Los métodos de elemento y volumen finitos son usados de manera común en mallas no uniformes, permitiendo la simulación de geometrías complejas con un reducido número de ecuaciones cuando se compara con el producido por el método de diferencias finitas.

Los métodos FEM y FVM son generalmente referenciados como un mismo tipo de algoritmo. En ambos, el dominio del problema se divide en un número finito de subdominios (elementos o volúmenes) no traslapados. Las ecuaciones del modelo son aplicadas entonces a cada uno de estos subdominios, y las incógnitas se aproximan mediante funciones de *forma* (shape functions) y valores nodales sobre todos los elementos o volúmenes. Estas funciones de forma son generalmente polinomios de bajo orden. Las ecuaciones que describen el problema son multiplicadas con funciones de ponderación e integradas sobre el dominio, produciendo así, un sistema de ecuaciones algebraicas, en las que los valores de las incógnitas son buscados en los puntos nodales.

El esquema híbrido empleado en este estudio consiste en la combinación de los procedimientos de elemento y volumen finitos. La aproximación FEM es utilizada para resolver la ecuación de movimiento; para el término de tiempo, se utiliza un procedimiento basado en una formulación semiimplícita de Taylor-Galerkin. La condición de incompresibilidad es forzada a través de un procedimiento fraccionado denominado corrección en presión, dando como resultado un algoritmo de tres etapas. La técnica FVM es usada para la discretización espacial de la ecuación constitutiva. La malla de volúmenes es formada mediante particiones de cada elemento triangular, al conectar los nodos, tanto en los vértices del triángulo como en nodos a mitad de cada lado del triángulo. La precisión del método se obtiene mediante un tratamiento consistente de los términos de fuente y flux de la ecuación constitutiva. Los residuales de estos términos son distribuidos en los vértices de cada celda de volumen finito mediante el uso de esquemas de distribución de fluctuaciones (fluctuation distribution o FD). La estabilidad en términos del alcance de soluciones a altos números de Weissenberg es mejorada con la aproximación de celda dual media (MDC) para la evaluación de términos de flux y fuente.

La base de la implementación del método de elemento finito es el algoritmo Taylor-Galerkin de corrección de presión (algoritmo TGPC), propuesto por Townsend y Webster [43] para simular el flujo de fluidos puramente viscosos y viscoelásticos. La idea principal es el resolver las ecuaciones constitutivas con un algoritmo adecuado. Como el método FVM es usualmente superior al FEM para este propósito, el algoritmo híbrido de elemento/volumen finito surge como una alternativa eficaz para este tipo de simulaciones. Donea [44] fue el primero en trabajar con esquemas de Taylor-Galerkin para problemas de convección-difusión, con una discretización temporal basada en procedimientos de Euler, leapfrog y Crank-Nicolson. Temam [45] y Chorin [46] propusieron los primeros esquemas de corrección de presión para flujos de fluidos viscosos incompresibles. Versiones de segundo orden fueron introducidas por van Kan [47], a través de diferencias finitas y discretización temporal de Crank -Nicolson.



La combinación de estas ideas aplicadas al método de elemento finito es la base del algoritmo propuesto por Townsend y Webster [43]. Hawken et al. [48] mejoraron el esquema al utilizar una discretización temporal semiimplícita, en vez de la forma explícita original. Carew et al. [49] y Baloch et al. [50] utilizaron estas ideas para simular el flujo de fluidos viscoelásticos. Los aspectos principales del procedimiento de elemento finito de Galerkin (ver por ejemplo [51-53]) se discuten a continuación. Además, se considera un breve repaso del procedimiento de volumen finito [22,54].

En los capítulos 4 y 5, las soluciones obtenidas mediante el algoritmo *fe/fv* en flujos a través de canales y contracciones son comparadas con datos calculados con un método semilagrangiano de volumen finito (semi-Lagrangian finite volume o SLFV), el cual es un procedimiento únicamente de volumen finito implementado por el grupo de dinámica de fluidos de *Cardiff University*; detalles de este método pueden encontrarse en las referencias [55,56].

### ***3.1.1 Método de elemento finito de Galerkin***

El método de elemento finito consiste en separar el dominio (geometría) sobre el cual el problema será resuelto, en un número finito de elementos (malla). Esta geometría puede ser simple o compleja. Considérese por ejemplo el problema definido por la ecuación de Poisson independiente del tiempo,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x). \tag{3.1}$$

Las incógnitas son interpoladas por funciones adecuadas, típicamente polinomios de primer o segundo órdenes. Los residuales del problema son ponderados y calculados en cada uno de los elementos que contribuyen al dominio original.

$$u(x) = \sum_i^m \phi_i(x) u_i, \tag{3.2}$$

donde  $nt$  es el número total de nodos en un elemento;  $\phi_i(x)$ , las funciones de prueba y  $u_i$ , el valor de las incógnitas en los nodos. Si las funciones  $w_j(x)$  son las funciones de ponderación, la substitución de (3.2) en (3.1) da

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\phi_i(x) u_i] w_j(x) d\Omega_e = \int_{\Omega_e} f(x) w_j(x) d\Omega_e. \quad (3.3)$$

En el caso del método de Galerkin, las funciones de ponderación son iguales a las funciones de prueba, esto es  $w_j(x) = \phi_j(x)$ . Entonces, mediante integración por partes,

$$\left. \frac{\partial \phi_{i(x)}}{\partial x} \phi_{j(x)} \right|_{\Gamma_e} - u_i \int_{\Omega_e} \frac{\partial \phi_{i(x)}}{\partial x} \frac{\partial \phi_{j(x)}}{\partial x} d\Omega_e = \int_{\Omega_e} f(x) \phi_{j(x)} d\Omega_e. \quad (3.4)$$

Donde  $\Omega$  es el volumen (dominio) de la geometría y el subíndice  $e$  hace referencia a un elemento. Sumando todas las contribuciones ensambladas sobre el dominio del problema ( $\Omega = \sum_e \Omega_e$ ), el término evaluado en la frontera ( $\Gamma_e$ ) de los elementos se cancela para aquellos elementos que no estén ubicados en la frontera del dominio y es cero en aquellas secciones de la frontera donde el valor de la variable de solución ha sido previamente especificado. Este es un caso común en el presente estudio, donde por lo general el perfil de velocidades es impuesto en las fronteras. En notación matricial, el sistema completo de ecuaciones que surgen de (3.4) puede ser expresado como

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{b}, \quad (3.5)$$

la matriz-columna  $\mathbf{u}$  contiene los valores nodales;  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{b}$  son definidos como

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_i(x)}{\partial x} \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} d\Omega, \quad b_j = \int_{\Omega} f(x) \phi_j(x) d\Omega, \quad (3.6)$$

que pueden ser evaluados ya sea de forma analítica o numérica. El ensamblado de cada uno de los elementos en un sistema global debe contener las condiciones de frontera especificadas. Como en este ejemplo los valores de la solución son conocidos, los valores nodales en ambos lados del dominio (frontera  $\Gamma$ ) son substituidos directamente en las posiciones correspondientes en las matrices  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{b}$  y eliminados de  $\mathbf{u}$ . La solución del problema (3.5) requiere de procedimientos algebraicos. Dependiendo del número de elementos/nodos y de la complejidad de las funciones de forma (prueba), estos procedimientos pueden ser directos o iterativos.

### ***3.1.2 Método de volumen finito***

Con la técnica de volumen finito, en vez de resolver la forma diferencial de las leyes de conservación, se considera la forma integral. Este es el caso de la ecuación constitutiva, que se integra sobre los sub-dominios- $f_v$ , lo cual puede ser considerado como una subclase de problemas de elemento finito con funciones unitarias de ponderación,  $w(x) = 1$ . Considerando una ecuación constitutiva general

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \zeta \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega} \mathbf{q} \, d\Omega, \quad (3.7)$$

donde  $\zeta$  es la cantidad que se “conserva” tal como cantidad de materia, momentum o energía,  $\mathbf{f}$  es el flux separado en una parte convectiva y una difusiva,  $\mathbf{n}$  es un vector normal unitario apuntando hacia fuera de la superficie  $\Gamma$  que envuelve el volumen  $\Omega$  y  $\mathbf{q}$ , el término fuente o fuerzas volumétricas.

Los valores medios en una celda- $f_v$  son definidos como,

$$\zeta_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \zeta \, d\Omega_i. \quad (3.8)$$

Entonces, aplicando (3.7) sobre un volumen finito, con valores medios  $\zeta_i$  y  $q_i$ , se tiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \zeta_i + \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_k \int_{\Gamma_k} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n}_k d\Gamma_k = q_i, \quad (3.9)$$

donde  $k$  es el número de *caras* de la celda- $fv$  y  $\Gamma_k$  es el área de estas caras. Una ventaja de la técnica FVM es que las variables en forma integral son conservadas de forma natural sobre el dominio completo y sobre cada una de las celdas- $fv$ .

Utilizando procedimientos numéricos de integración, los valores medios pueden ser aproximados mediante

$$\int_{\Omega_i} \zeta(x) d\Omega_i \approx \sum_{i=0}^{nc} \varphi_i \zeta_i(x), \quad (3.10)$$

donde  $\varphi_i \geq 0$  son ponderaciones, y  $nc$  es el número de nodos del procedimiento de integración. Las integrales de superficie se calculan como

$$\int_{\Gamma_k} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n}_k d\Gamma_k \approx \sum_k F_k. \quad (3.11)$$

En esta expresión,  $F_k$  es la aproximación de  $\mathbf{f} \cdot \mathbf{n}_k$  y  $k$  es el número de caras de la celda- $fv$ .

El uso de estas aproximaciones sobre cada volumen finito, con el ensamble representando el dominio total del problema, constituyen la forma discretizada de la ecuación (3.7). Esto genera el sistema algebraico de ecuaciones a resolver, de manera similar a la aproximación de elemento finito, dada por la ecuación (3.5).

### 3.2 Especificación del problema

El modelo para el flujo isotérmico de un fluido viscoelástico e incompresible con cero fuerzas volumétricas está especificado por las ecuaciones de continuidad y de momentum (en forma adimensional)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.51)$$

$$Re \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \beta \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (2.52)$$

Adicionalmente, se debe incluir una ecuación constitutiva para tomar en cuenta la respuesta de un fluido en particular. La forma adimensional del modelo Oldroyd-B es

$$We \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau} = 2(1 - \beta) \mathbf{d}. \quad (3.12)$$

Si se especifican otros modelos, entonces (3.12) es reemplazada por el modelo seleccionado. Por ejemplo, en el caso particular del modelo eXtendido Pom-Pom (SXPP), se deben utilizar las ecuaciones (2.53)-(2.55).

Deben indicarse las condiciones iniciales y de frontera apropiadas para especificar correctamente el problema en cuestión. En general, las condiciones de frontera pueden ser mixtas,

$$\mathbf{u}_{\Gamma_1} = \mathbf{g}_1, \quad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_2} = \mathbf{g}_2, \quad \boldsymbol{\tau}_{\Gamma_3} = \mathbf{g}_3, \quad (3.13)$$

donde  $\Gamma_{k=1,2,3}$  son secciones que no se traslapan de la frontera  $\Gamma$  envolviendo el dominio  $\Omega$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de esfuerzos de Cauchy, ver ecuación (2.1), y  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal saliente de la frontera. En este estudio sólo se consideran flujos 2D, especificando la condición de adherencia (velocidad cero) en las paredes de la frontera. Para la en-

trada y salida de flujo en el dominio, se imponen perfiles de velocidad del modelo Oldroyd-B, con canales de entrada y salida suficientemente largos para obtener flujo completamente desarrollado, aun si se trata de otro modelo constitutivo. De manera adicional, el esfuerzo en la entrada debe ser especificado.

La simulación a bajos niveles de elasticidad (bajos valores del número de Weissenberg), típicamente  $We = 0.1$ , empieza desde condiciones de reposo. Entonces, se sigue la estrategia de continuación en números de  $We$  con el fin de alcanzar soluciones a altos valores de elasticidad. Esta estrategia consiste en que una vez alcanzada la solución a cierto  $We$ , se utiliza la solución como estado inicial para empezar la simulación a un número de Weissenberg más alto. Las condiciones iniciales pueden expresarse como

$$\mathbf{u}_{(x,t_0)} = \mathbf{u}^0_{(x)}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u}^0 = 0, \quad \mathbf{T}_{(x,t_0)} = \mathbf{T}^0_{(x)}, \quad (3.14)$$

En las que el superíndice “0” indica evaluación al tiempo  $t = t_0$ .

### 3.3 Discretización temporal

Las bases del procedimiento de avance en el tiempo están en la expansión en series de Taylor. La precisión se mejora con la aproximación de dos pasos de Lax-Wendroff, que puede explicarse mediante un problema unidimensional como,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(u) = 0. \quad (3.15)$$

Aquí,  $x$  y  $t$  son variables independientes de espacio y tiempo, respectivamente.  $u(x,t)$  es el campo escalar de la variable dependiente.

El procedimiento de dos pasos de Lax-Wendroff, en un paso de tiempo  $t \in [t^n, t^{n+\frac{1}{2}}]$  y  $t \in [t^n, t^{n+1}]$ , es

$$u^{n+\frac{1}{2}} = u^n + \frac{1}{2} \Delta t \left[ -\frac{\partial}{\partial x} f(u) \right]^n, \quad (3.16)$$

$$u^{n+1} = u^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \Delta t \left[ -\frac{\partial}{\partial x} f(u) \right]^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.17)$$

En estas ecuaciones y en el resto del capítulo, los términos con  $n$  indican la evaluación a un tiempo dado.

Siguiendo las ideas de van Kan [47], una aproximación de  $O(\Delta t^2)$ , puede derivarse al aplicar estos esquemas predictivo-(3.16)/correctivo-(3.17) a la ecuación de momentum. En forma adimensional, ver ecuación (2.52)<sup>‡</sup>, esto da,

$$\cdot \text{ paso 1: } \quad \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}^n = \frac{\Delta t}{2Re} \left[ \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d}) - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p \right]^n, \quad (3.18)$$

$$\cdot \text{ paso 2: } \quad \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n = \frac{\Delta t}{Re} \left[ \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d}) - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p \right]^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.19)$$

El término de presión ( $\nabla p^{n+\frac{1}{2}}$ ) en la ecuación (3.19) es aproximado por

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \theta p^{n+1} + (1-\theta) p^n, \quad (3.20)$$

---

<sup>‡</sup> La ecuación (2.52) puede expresarse también como  $Re \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d})$ .

Si en la ecuación (3.20), el parámetro de ponderación se fija a  $\theta = \frac{1}{2}$  (Crank-Nicolson) el error por la discretización temporal es  $O(\Delta t^2)$ ; de otra forma, el error es  $O(\Delta t)$ . La ecuación (3.19) puede ser reescrita como,

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n = \frac{\Delta t}{Re} \left[ (\nabla \cdot [\boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d}] - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} - \theta \nabla p^{n+1} - (1-\theta) \nabla p^n \right]. \quad (3.21)$$

Con el fin de implementar la restricción de incompresibilidad de la ecuación (2.51), se introduce una variable auxiliar  $\mathbf{u}^*$ , con la propiedad de que la divergencia de esta variable es distinta a cero (solenoidal o non-divergence-free), satisfaciendo

$$\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n = \frac{\Delta t}{Re} \left[ (\nabla \cdot [\boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d}] - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} - \nabla p^n \right]. \quad (3.22)$$

Substrayendo (3.22) de (3.21) y definiendo  $q^{n+1} = p^{n+1} - p^n$ , la velocidad al siguiente paso de tiempo es

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^* = \theta \frac{\Delta t}{Re} \nabla q^{n+1}. \quad (3.23)$$

Tomando ventaja del hecho que  $\mathbf{u}^{n+1}$  obedece a la ecuación (2.51), el incremento en presión en el paso de tiempo puede obtenerse a través de la divergencia de la ecuación (3.23),

$$\nabla^2 q^{n+1} = \frac{Re}{\theta \Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (3.24)$$

siendo  $\nabla^2 q = \nabla \cdot \nabla q$ .

Hawken et al. [48] presentaron un esquema más estable al adoptar una separación de Crank-Nicolson para la variable tiempo en los términos difusivos, manteniendo los otros



en forma explícita. En este caso particular y debido a la especificación de las condiciones de frontera, sólo el término  $\nabla \cdot \mathbf{d}$  es afectado. Entonces, las etapas de la discretización temporal pueden expresarse como<sup>§</sup>:

• *Etapa 1a:*

$$\begin{aligned} \frac{2Re}{\Delta t} [\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}^n] = & (\nabla \cdot [\boldsymbol{\tau} + 2\beta \mathbf{d}] - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^n + \beta [\nabla \cdot \mathbf{d}]^{n+\frac{1}{2}} - \\ & \nabla (p^n + \theta_1 [p^n - p^{n-1}]), \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{2We}{\Delta t} [\boldsymbol{\tau}^{n+\frac{1}{2}} - \boldsymbol{\tau}^n] = & (-We \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} + 2[1 - \beta] \mathbf{d} - \boldsymbol{\tau} + \\ & We [(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u}])^n. \end{aligned} \quad (3.26)$$

• *Etapa 1b:*

$$\begin{aligned} \frac{Re}{\Delta t} [\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n] = & (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} + \nabla \cdot \left( 2\beta \left[ \frac{\mathbf{d}^* + \mathbf{d}^n}{2} \right] \right) - \\ & \nabla (p^n + \theta_1 [p^n - p^{n-1}]), \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{We}{\Delta t} [\boldsymbol{\tau}^{n+1} - \boldsymbol{\tau}^n] = & (-We \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} + 2[1 - \beta] \mathbf{d} - \boldsymbol{\tau} + \\ & We [(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u}])^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

• *Etapa 2:*

$$\nabla^2 (p^{n+1} - p^n) = \frac{Re}{\theta_2 \Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.29)$$

<sup>§</sup> Las ecuaciones para el esfuerzo están escritas para el modelo Oldroyd-B, ver ecuación (3.12).

. *Etapas 3:*

$$\frac{2 Re}{\Delta t} (\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}^*) = -\theta_2 \nabla (p^{n+1} - p^n). \quad (3.30)$$

Esta estructura de tres etapas debe ser resuelta en cada paso de tiempo,  $[t^n, t^{n+1}]$  hasta que se alcance la convergencia en el estado estacionario.

### 3.4 Discretización espacial

El esquema numérico empleado es híbrido; en particular, la discretización espacial para la velocidad y la presión es a través de elemento finito de Galerkin, mientras que en las ecuaciones para el esfuerzo, (3.26) y (3.28), se utilizó un esquema de volumen finito.

#### 3.4.1 Esquema de elemento finito

En este esquema, los componentes escalares de la velocidad y la presión son aproximados por

$$u(x, t) = \phi_j(x) U_j(t), \quad p(x, t) = \psi_j(x) P_j(t), \quad (3.31)$$

en donde  $U_j(t)$ ,  $P_j(t)$  son valores nodales de la velocidad y presión; las funciones  $\phi_j(x)$  forman un conjunto base de funciones cuadráticas por secciones para la velocidad, y  $\psi_j(x)$  forman una base de funciones lineales para la presión. En esta implementación de elemento finito se utilizan elementos triangulares, con la velocidad calculada tanto en los nodos ubicados en los vértices como en los de medio segmento, y la presión sólo se calcula en los nodos de los vértices. El triángulo exterior en la Figura 3.1a representa un elemento finito. Los triángulos de menor área se forman a partir de los vértices

y de los nodos a medio segmento, y cada uno forma una celda de volumen finito. El problema completamente discretizado puede expresarse en notación matricial como,

• *Etapa 1a*

$$\left( \frac{2Re}{\Delta t} \mathbf{M} + \frac{1}{2} \beta \mathbf{S} \right) [\mathbf{U}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}^n] = \left( -[\beta \mathbf{S} + Re \mathbf{N}(\mathbf{U})] \mathbf{U} - \mathbf{B} \mathbf{T} \right)^n + \mathbf{L}^T \mathbf{P}^n. \quad (3.32)$$

• *Etapa 1b*

$$\left( \frac{Re}{\Delta t} \mathbf{M} + \frac{1}{2} \beta \mathbf{S} \right) [\mathbf{U}^* - \mathbf{U}^n] = \left( -[\beta \mathbf{S} + Re \mathbf{N}(\mathbf{U})] \mathbf{U} - \mathbf{B} \mathbf{T} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{L}^T \mathbf{P}^n. \quad (3.33)$$

• *Etapa 2*

$$\mathbf{K} (\mathbf{P}^{n+1} - \mathbf{P}^n) = -\frac{Re}{\theta_2 \Delta t} \mathbf{L} \mathbf{U}^*. \quad (3.34)$$

• *Etapa 3*

$$\frac{Re}{\Delta t} \mathbf{M} (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n) = \frac{1}{2} \mathbf{L}^T (\mathbf{P}^{n+1} - \mathbf{P}^n). \quad (3.35)$$

En las ecuaciones (3.32) y (3.33) el parámetro de ponderación  $\theta_1$  se ha ajustado a cero.

$\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{T}$ , y  $\mathbf{P}$  son los vectores nodales de solución para la velocidad, esfuerzo y presión.

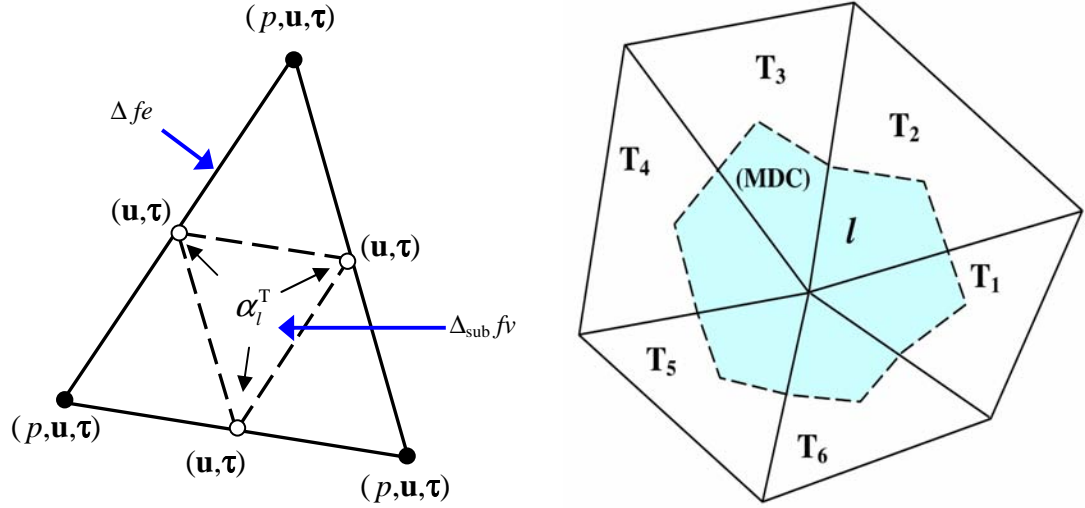


Figura 3.1. Malla de elementos; a) triángulo- $fe$  y subcelda- $fv$ , b) configuración dual de celda media.

Las funciones de forma de ponderación pueden ser manipuladas para dar los términos en notación matricial,

$$M_{ij} = \int_{\Omega} \phi_i \phi_j d\Omega, \quad K_{ij} = \int_{\Omega} \frac{\partial \psi_i}{\partial x} \frac{\partial \psi_j}{\partial x} d\Omega, \quad S_{ij} = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} d\Omega,$$

$$B_{ij} = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \phi_j d\Omega, \quad (L_k)_{ij} = \int_{\Omega} \psi_i \frac{\partial}{\partial x_k} \phi_j d\Omega, \quad (3.36)$$

$$N_{ij}(\mathbf{U}) = \int_{\Omega} \phi_i \left( \phi_k U_k \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \phi_k V_k \frac{\partial \phi_j}{\partial y} + \phi_k W_k \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right) d\Omega,$$

### 3.4.2 Esquema de volumen finito

Con el fin de representar de manera consistente problemas de flujo con el método de volumen finito, se requiere hacer una separación o distribución apropiada de los residuales de flux ( $\mathbf{R}$ ) y de fuente ( $\mathbf{Q}$ ) en los vértices de cada triángulo- $fv$ . Con los métodos

celda-vértice, las variables nodales están localizadas en los vértices de cada triángulo- $fv$ . Los valores para cualquier otra posición deben calcularse por interpolación; en contraste, valores de rapidez de variación (o fluctuaciones) de las variables de flujo, se integran sobre cada celda- $fv$  (integrales de volumen o fluxes de superficie). Esto implica que la fluctuación está localizada en el centro de la celda (cell-centered) y debe ser adecuadamente distribuida a los vértices. El algoritmo híbrido  $fe/fv$  utilizado en este estudio, utiliza procedimientos de distribución de la fluctuación para lograr este objetivo.

La malla de volumen finito se genera al hacer particiones en los nodos de segmento medio de un triángulo- $fe$ ; esta partición genera cuatro triángulos- $fv$  por cada elemento finito (ver Figura 3.1a). El tipo de algoritmo- $fv$  empleado es un esquema celda-vértice, el cual obtiene valores de esfuerzo en cada nodo, similar al tratamiento de la velocidad en el esquema de elemento finito.

La ecuación constitutiva, tal como (3.12) puede ser reescrita para la implementación FV en términos del flux y la fuente,

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\tau} = -\mathbf{R} + \mathbf{Q}, \quad (3.37)$$

con expresiones para el flux ( $\mathbf{R}$ ) y términos fuente ( $\mathbf{Q}$ )

$$\mathbf{R} = \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}, \quad (3.38)$$

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{We} (2[1-\beta] \mathbf{d} - \boldsymbol{\tau}) + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (3.39)$$

La integración de las ecuaciones (3.37)-(3.39) para cada componente escalar del esfuerzo  $\tau$ , produce los residuales, que deben ser evaluados en las celdas- $fv$  y/o en la celda dual media (MDC) asociados con cada nodo  $l$  dado (Figura 3.1b). La celda dual media

para cualquier nodo se forma al tomar un tercio de cada celda- $f_v$  que contenga dicho nodo,

$$\int_{\hat{\Omega}_l} \frac{\partial}{\partial t} \tau \, d\Omega = - \int_{\Omega_T} R \, d\Omega + \int_{\hat{\Omega}_l} Q \, d\Omega. \quad (3.40)$$

La discretización temporal se presenta en las ecuaciones (3.26) y (3.28), etapas 1a y 1b, respectivamente. La proporción de la contribución al vértice  $l$  de la celda de cada celda- $f_v$  ( $T$ ) a partir de la evaluación de las integrales de flux y fuente es controlada con los coeficientes de distribución ( $\alpha_l^T$ , ver Chandio [22] y Chandio et al. [57]). La actualización para el nodo  $l$  se construye al sumar las contribuciones del volumen de control  $\Omega_l$ , formado por todos los triángulos- $f_v$  compartiendo dicho nodo. Para ésto, Aboubacar et al. [58,59] propusieron un esquema generalizado de ponderación de área, de la forma

$$\left[ \sum_{\forall T_l} \delta_T \alpha_l^T \Omega_T + \sum_{\forall MDC_l} (1-\delta_T) \hat{\Omega}_l^T \right] \frac{\Delta \tau_l^{n+1}}{\Delta t} = \sum_{\forall T_l} \delta_T \alpha_l^T b^T + \sum_{\forall MDC_l} (1-\delta_T) b_l^{MDC} \quad (3.41)$$

en la cual,  $b^T = (-R_T + Q_T)$ ,  $b_l^{MDC} = (-R_{MDC} + Q_{MDC})^l$ . Aquí,  $\Omega_T$  es el área del triángulo- $f_v$   $T$ .  $\hat{\Omega}_l^T$  es la contribución de área del mismo triángulo a la celda dual media. En la ecuación (3.41), el parámetro  $\delta_T$  controla el balance entre las contribuciones de la celda dual media y el triángulo  $T$ . Todo esto forma la base de las discretizaciones  $fe$  y  $f_v$  utilizadas.

## CAPÍTULO 4

### Modelado Pom-Pom en Canales Planos\*

Este capítulo trata la simulación numérica de flujo en estado estacionario, de materiales viscoelásticos, utilizando dos esquemas numéricos distintos: el algoritmo híbrido de elemento/volumen finito ( $fe/fv$ ) y un tratamiento semilagrangiano de volumen finito (SLFV). Se considera en particular el modelo Pom-Pom extendido de una ecuación o SXPP, presentando una comparación de los resultados arrojados por ambos esquemas. La solución se obtiene cuando la simulación a régimen transitorio alcanza un valor estacionario. El algoritmo de elemento finito puro, basado en ponderación de área, es un esquema basado en el centro de la celda (cell-centered scheme) de tipo semilagrangiano. Requiere que los volúmenes finitos de la malla sean rectangulares. En el caso del algoritmo híbrido, las ecuaciones de momento y continuidad son resueltas vía un procedimiento en etapas de Taylor-Galerkin con corrección de presión (parte de elemento finito), mientras que para la ecuación constitutiva, un algoritmo vértice-celda (cell-vertex)

---

\* Material de este capítulo ha sido adaptado para el artículo “Modelling pom-pom type models with high-order finite volume schemes” de M. Aboubacar, J. P. Aguayo, P. M. Phillips, T.N. Phillips, H. R. Tamdoun-Jahromi, B. A. Snigirev and M. F. Webster, publicado en *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **126** (2005) 207-220.

de volumen finito. Para esto, las combinaciones en las discretizaciones de flux y celda-media-dual se basan en esquemas de distribución de la fluctuación (upwinding) y tratamiento adecuado de los términos de tiempo. Para la implementación  $fe/fv$  se utilizan elementos y volúmenes triangulares, ya sean regulares o irregulares. Se muestran los resultados comparativos entre ambos métodos, resaltando los aspectos novedosos del modelo Pom-Pom que no presenta el modelo Oldroyd-B.

## **4.1 Introducción**

Se hace la comparación entre dos algoritmos estables de volumen finito para resolver problemas viscoelásticos, en específico del modelo Pom-Pom: un algoritmo híbrido de elemento finito/volumen finito y un esquema semilagrangiano de volumen finito. La solución en estado estacionario se obtiene mediante evolución de la respuesta en el tiempo.

Para la discretización de las ecuaciones de movimiento con el algoritmo híbrido  $fe/fv$ , se emplea una formulación Taylor-Galerkin semiimplícita. La incompresibilidad se impone mediante un algoritmo de corrección de presión. El esquema puro de elemento finito se basa en un procedimiento de Euler hacia atrás y los términos convectivos de la ecuación constitutiva y de momentum, son tratados con un paso semilagrangiano.

En la implementación del algoritmo híbrido, la discretización de las ecuaciones de conservación se hace a través de un procedimiento de elemento finito, y la ecuación constitutiva mediante una técnica de volumen finito. El mallado para el método de volumen finito se construye al dividir cada triángulo de elemento finito usando nodos en los vértices y puntos medios de los lados de cada triángulo, generando así cuatro celdas triangulares de volumen.



La aproximación resultante es similar a los llamados subelementos de esfuerzo  $4 \times 4$ , introducidos por Marchal y Crochet [60]. Con el fin de prevenir oscilaciones en el campo de velocidades, la discretización en el contexto del método híbrido de elemento finito requiere aproximaciones compatibles para la velocidad y el esfuerzo extra. Aquí, la correcta distribución en cada vértice de las celdas de volumen finito, de los residuales de flux y fuente, se impone mediante esquemas de distribución-fluctuación. Una característica conveniente de los esquemas FD es que la conservación de los términos convectivos se satisface en cada volumen de control. El método es de segundo orden de precisión en las coordenadas espaciales, esto mediante el uso de esquemas de baja difusión B (LDB schemes). La estabilidad, en términos de alcanzar altos niveles de elasticidad ( $De$  o  $We$ ) en las soluciones, se mejora al tomar en cuenta las contribuciones de términos fuente y flux, basados en el método de celda dual media (MDC). Esto es fundamental para desarrollar un método estable y para obtener soluciones (convergentes) en flujos complejos.

El método de volumen finito utilizado, consiste en un tratamiento semilagrangiano de los términos convectivos. Está basado en el esquema SIMPLER, mejorado para incluir ecuaciones constitutivas. Para las ecuaciones de conservación, se utiliza una ponderación de segundo orden para el área, desarrollada por Phillips y Williams [56]. Una variante de este esquema ha sido exitosamente aplicada a flujos complejos [61].

Al resolver problemas de flujo con el modelo Oldroyd-B, Aboubacar y Webster [59] demostraron que el método híbrido es de segundo orden en precisión en coordenadas espaciales. La estabilidad en términos del número de Weissenberg de ambos esquemas se ha mostrado para el inicio súbito de flujo (transitorio) de un fluido Oldroyd-B en un canal plano, la precisión de la resolución en el tiempo ha sido comparada con la solución analítica de Waters y King [62].

Algunos años atrás, ha surgido una nueva clase de ecuaciones constitutivas, capaces de describir el comportamiento de sistemas de polímero fundido. Estos modelos están basados en los desarrollos de Doi y Edwards [30], donde se describen las limitaciones que tiene el movimiento de una molécula de polímero al encontrarse dentro de un *tubo*, formado por el entrelazamiento de las moléculas vecinas. El modelo de convección-reptante doble de Ianniruberto y Marrucci [63], el modelo Pom-Pom de McLeish y Larson [1] y las modificaciones subsecuentes propuestas por Verbeeten et al. [2] son ejemplos de modelos derivados del trabajo de Doi y Edwards.

Estos modelos incorporan dos aspectos importantes no presentes en los modelos fenomenológicos. El primer aspecto es que vía los mecanismos de relajación propuestos, los modelos incluyen el hecho de que la reología de fundidos poliméricos depende de la estructura molecular de dichos polímeros. El segundo aspecto es la introducción de un espectro de relajación a tomarse en cuenta, llevando a un sistema de dos ecuaciones diferenciales parciales, una de orientación y otra del estiramiento.

El estiramiento de la molécula y la fricción de Rouse han sido incluidas en el modelo DCR (una versión multimodal del modelo convection-constraint release ‘CCR’-version o CCR). La introducción del mecanismo CCR [64] significó un avance importante, ya que resuelve el problema del adelgazamiento al corte excesivo predicho por el modelo Doi-Edwards, problema que se presenta a valores altos de rapidez de corte. Incluso, una versión a DCR bimodal puede exhibir, aunque sea en bajo grado, el fenómeno de espesamiento al corte (incremento en la viscosidad o shear-thickening) [65]. El modelo Pom-Pom surgió para representar una molécula idealizada de polímero, compuesta por una sección lineal o esqueleto con el mismo número de brazos,  $q$ , colgando en ambos extremos del esqueleto. En la formulación original, se consideran tres variables dinámicas: el tensor de orientación del esqueleto ( $\mathbf{S}$ ), estiramiento del esqueleto ( $\lambda$ ), y la retracción de brazos ( $Sc$ ). Esta retracción ocurre cuando la molécula alcanza su estiramiento máximo (igual al número de brazos,  $q$ ), siendo esto una abrupta restricción a

la elongación de la molécula<sup>†</sup>, que provoca una discontinuidad en la viscosidad extensional a estado estacionario (ver [1,32,33,66]). El hecho de que los tiempos de relajación para la orientación y el estiramiento estén desacoplados es una característica clave de esta clase de modelos.

Es muy significativo que con una topología molecular simple, con una implementación unimodal, el modelo ha sido capaz de predecir cualitativamente viscosidades transitorias (en flujos cortante y extensional), para el polietileno IUPAC A de baja densidad.

El modelo Pom-Pom original presenta tres problemas importantes: discontinuidad en la viscosidad extensional en estado estacionario, la ecuación para la orientación no está correctamente limitada y el modelo predice que la segunda diferencia de esfuerzos normales en flujo cortante es nula. Pese a una variedad de modificaciones (versión multimodal [32], dinámica más complicada del arrastre de los brazos [33], modificaciones del tiempo de relajación de la orientación para permitir la retracción así como el estiramiento [67]), estos problemas persistieron. Verbeeten et al. [2] propusieron una versión extendida del modelo con los siguientes ajustes: primero, la orientación del esqueleto no cumple más con la teoría para polímeros lineales de Doi y Edwards, segundo, la restricción abrupta de la extensión finita es descartada. Siguiendo a Inkson et al. [32], los parámetros del modelo ya no son obtenidos de datos moleculares, sino ajustados a partir de datos experimentales. Adicionalmente, los autores incorporaron al modelo un parámetro tipo Giesekus,  $\alpha$ , que permite que el modelo incluya cierto efecto de relajación anisotrópica. Con estas modificaciones, el denominado modelo Pom-Pom extendido predijo cuantitativamente la reología de un fundido de LDPE. En este trabajo, se utiliza principalmente el modelo SXPP.

---

<sup>†</sup> Una restricción de extensión finita también está presente en el modelo DCR, sin embargo, se definió asegurando una respuesta sin picos.

## 4.2 Flujo Poiseuille planar

Al resolver problemas a régimen transitorio se deben imponer condiciones de frontera dependientes del tiempo que sean adecuadas, por lo que al no contar con alguna solución analítica para esta clase de modelos, se utiliza la solución para modelos Maxwell/Oldroyd-B obtenida por Waters y King [62].

En el presente trabajo, a un flujo dado, la solución estacionaria para el modelo SXPP se obtiene al usar la solución Oldroyd-B (al mismo flujo) como condición de frontera a la entrada de la geometría (velocidad y esfuerzo extra). La condición de adherencia es impuesta en las paredes y condiciones de frontera naturales a la salida o descarga de la geometría. La solución a altos números de Weissenberg se alcanza mediante la técnica de continuación en el número de elasticidad. Se supone que a cierta distancia lejos de la entrada, los perfiles de velocidad y esfuerzo que se han desarrollado, son ya los propios del modelo SXPP, en vez de los de la solución Oldroyd-B. Para esto es necesario que las geometrías tengan dominios suficientemente largos.

Se emplean geometrías con mallados estructurados  $20 \times 60$  en dominios computacionales de  $[0,16] \times [0,2]$  en ambos esquemas de solución,  $fe/fv$  y SLFV. El tamaño de paso es típicamente de  $\Delta t = 10^{-3}$ . Para este caso de flujo planar, no hay *esquinas* ni otro tipo de singularidades. Se imponen condiciones de simetría en la línea central ( $\partial/\partial y|_{y=0} = 0$ ), permitiendo así resolver el problema sólo para la mitad del canal. Los cálculos se hacen adicionalmente en otro mallado estructurado de  $40 \times 60$ , para asegurar que se ha obtenido convergencia espacial. El tiempo de computo máximo fue de alrededor de 10 min en plataformas PC/Unix, incluyendo un ordenador Intel Pentium 4 (2.5 GHz, 512 MB) y una estación de trabajo Compaq XP1000 (500 MHz, 256 MB).

#### ***4.2.1 Influencia del incremento en el número de Weissenberg***

Con el fin de estudiar la influencia del número de Weissenberg en la velocidad, esfuerzo y estiramiento molecular, los otros parámetros del modelo SXPP son fijados en los valores  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$  y  $\alpha = 0.15$ . Se impone cierta inercia al fijar el número de Reynolds con un valor unitario ( $Re = 1$ ). La Figura 4.1 demuestra el efecto de incrementar el  $We$  en las simulaciones obtenidas con ambos esquemas.

Para este fluido que presenta el fenómeno de adelgazamiento al corte (reducción de viscosidad al incrementar la rapidez de deformación), la velocidad máxima es menor que para un fluido Oldroyd-B (0.75) con el mismo flujo volumétrico. Estos valores máximos se sitúan en el centro del canal (línea de simetría) y, para el caso  $We = 1$  es de 0.725 para el esquema  $fe/fv$  y 0.727 para el esquema SLFV. Los valores se reducen a 0.663 y 0.660, respectivamente, cuando el Weissenberg se incrementa a  $We = 10$ . Para este nivel de elasticidad y con el mallado refinado, los máximos de ambos métodos son 0.663 ( $fe/fv$ ) y 0.660 (SLFV). La diferencia entre los máximos calculados con ambos esquemas es menor al 0.5 %.

Debido a que en la línea central, la rapidez de corte (gradiente de velocidad) es cero, el estiramiento de la molécula adquiere su valor de equilibrio ( $\lambda = 1$  - sin estiramiento). La extensión de la molécula alcanza el valor máximo en el fluido en contacto con la pared, posición en la que la rapidez de corte también alcanza su valor más grande. El estiramiento molecular máximo se incrementa con  $We$  (a una elasticidad adimensional de diez, los extremos son 1.436- $fe/fv$  y 1.432-SLFV).

La contribución polimérica  $\tau_{xx}$  del tensor de esfuerzo extra empieza a crecer para luego relajarse al incrementar  $We$ . El componente  $\tau_{xy}$  es casi lineal a  $We = 1$ , y para los tres niveles de elasticidad mostrados, este componente del esfuerzo mantiene su forma lineal cerca de la línea central, donde el estiramiento del esqueleto está cercano al valor

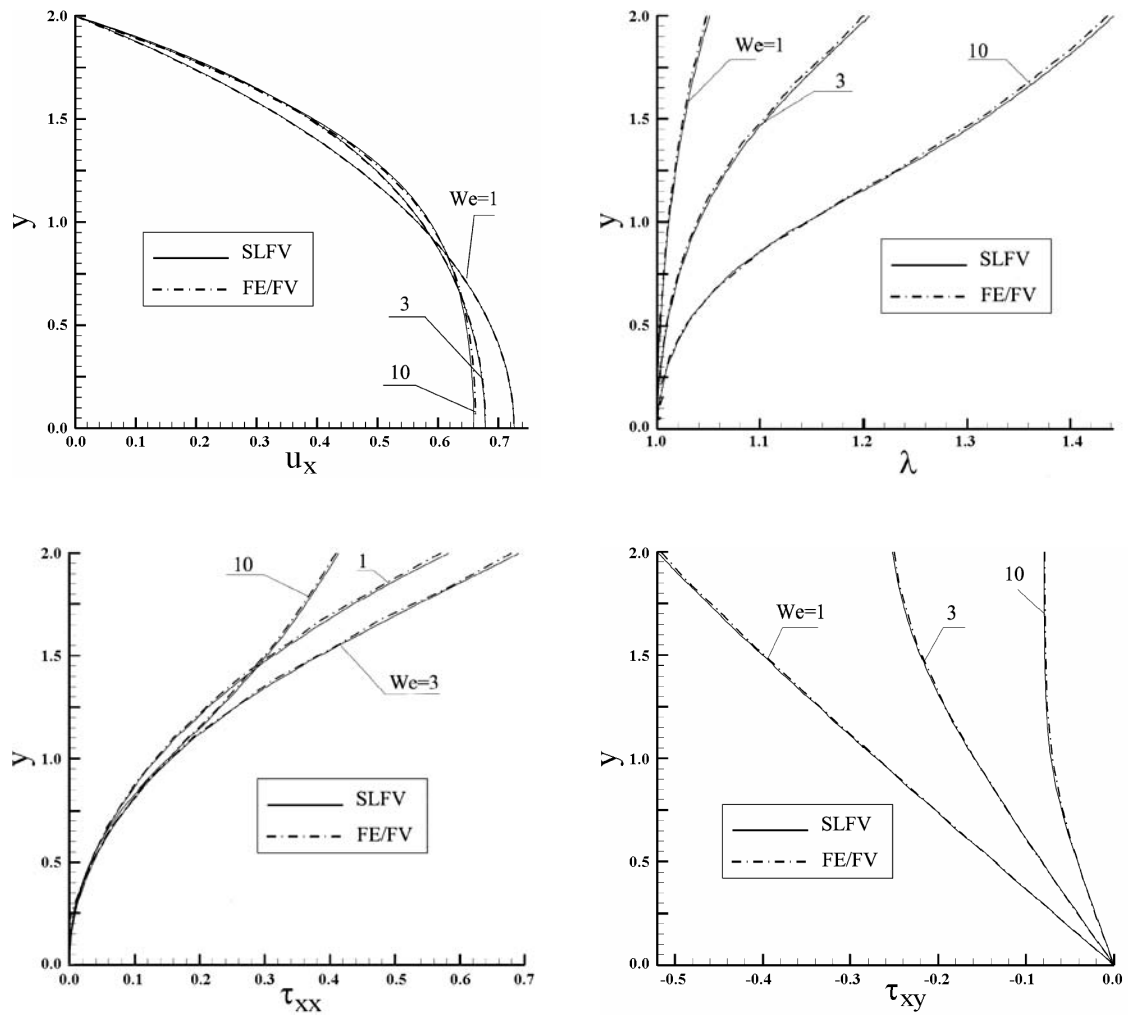


Figura 4.1. Flujo planar; SLFV vs.  $fe/fv$ ,  $Re = 1$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ .

unitario (valor de equilibrio). Los resultados arrojados por ambos esquemas numéricos son acordes entre ellos (ver Figura 4.1).

#### 4.2.2 Influencia del cociente de viscosidades

La Figura 4.2 muestra la influencia del cociente de viscosidades  $\beta$  (disolvente/total) en los perfiles de velocidad, estiramiento y esfuerzo polimérico ( $\tau_{xx}$  y  $\tau_{xy}$ ). Los

sistemas con alto contenido polimérico corresponden a bajos valores de  $\beta$ , mientras que soluciones diluidas o con menor grado de entrelazamiento corresponde a valores altos de  $\beta$  (cercaos a la unidad). El valor más pequeño de  $\beta$  en donde se asegura un incremento monótono en el esfuerzo cortante, en función de la rapidez de corte, es  $\beta = 1/9$  para el modelo de Johnson-Segalman. Aunque este límite inferior no es válido para el modelo Oldroyd-B, que es un caso particular del modelo de Johnson-Segalman, este valor es comúnmente adoptado en simulaciones numéricas de prueba (Benchmark numerical simulations). Es importante notar que, para hacer comparaciones con los llamados fluidos de Boger, el valor de  $\beta$  debe tomarse de al menos 0.9. En esta sección se utilizan valores de  $\beta$  entre 0.1 y 0.5.

Al decrecer el valor de  $\beta$ , el perfil de velocidades se aplanan en la región cercana a la línea de simetría. Esta respuesta pudo anticiparse si se asocia el decrecimiento de  $\beta$  con el aumento en el tiempo de relajación de la orientación,  $\lambda_{ob}$ , por las definiciones  $\beta$  y  $\mu_p$  utilizadas en este trabajo. Valores altos de  $\beta$  representan sistemas más diluidos, por lo que la magnitud del esfuerzo polimérico es menor. Por la misma razón, se observa reducción del esfuerzo y del estiramiento al aumentar la cantidad de disolvente. La diferencia entre los resultados de ambos esquemas numéricos es mínima (ver Figura 4.2).

#### ***4.2.3 Influencia del cociente de tiempos de relajación***

El cociente de tiempos de relajación estiramiento/orientación,  $\varepsilon$ , está relacionado con el grado de entrelazamiento de las moléculas del sistema, donde valores altos del parámetro  $\varepsilon$  corresponden a sistemas poliméricos con menor nivel de entrelazamiento. Para el caso con menor entrelazamiento,  $\varepsilon \rightarrow 1$ , los fenómenos de relajación de la orientación y estiramiento ocurren de manera simultánea, mientras que para  $\varepsilon \rightarrow 0$ , la relajación de la orientación es mucho más lenta que el estiramiento, por lo que

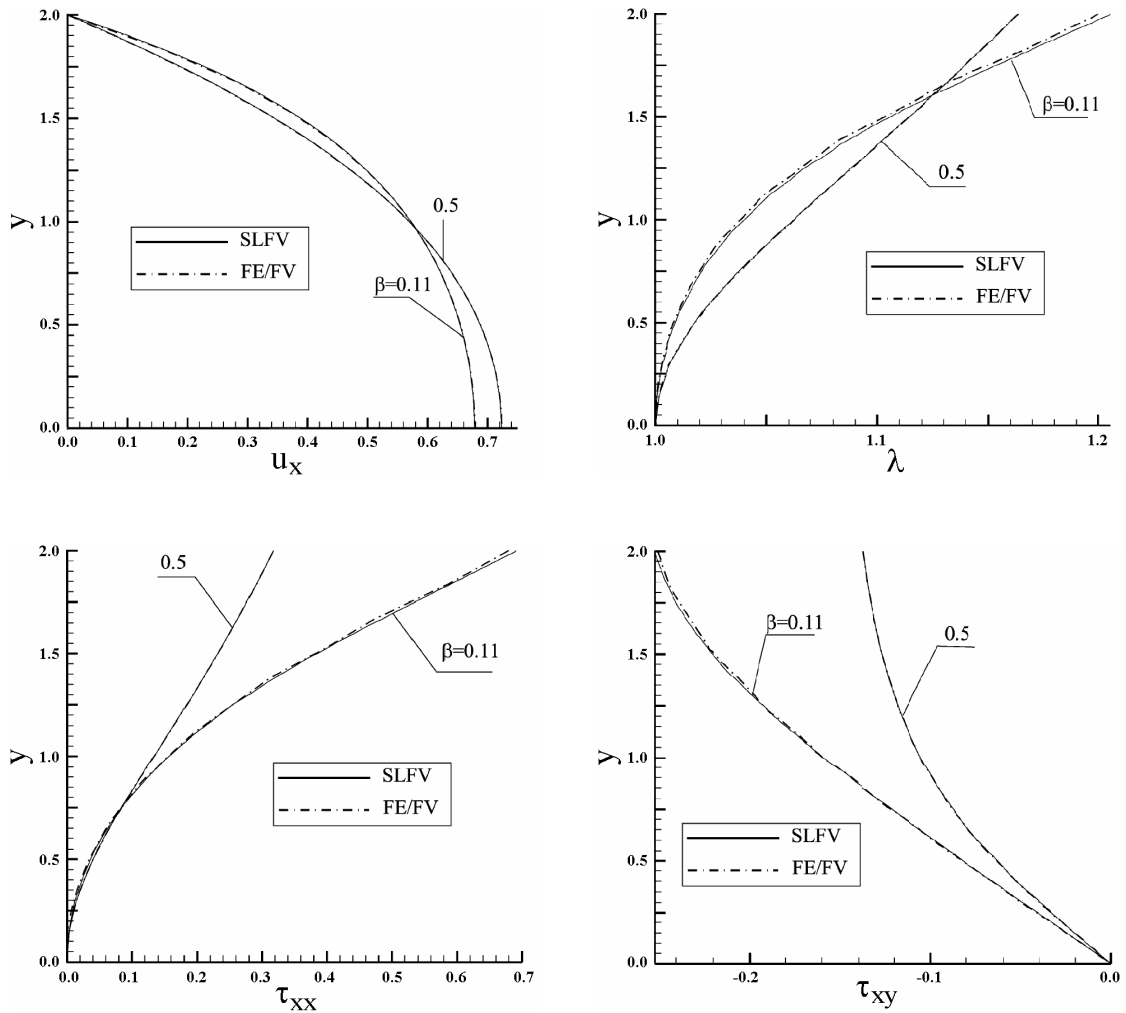


Figura 4.2. Flujo planar; SLFV vs.  $fe/fv$ ,  $Re = 1$ ,  $We = 3$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ .

el sistema se puede considerar como altamente entrelazado. La influencia de  $\varepsilon$  sobre los perfiles de velocidad, extensión molecular y contribución polimérica  $\tau_{xx}$  y  $\tau_{xy}$  del esfuerzo extra se presenta en la Figura 4.3. De esta figura se puede observar que la disminución de  $\varepsilon$  “aplana” el perfil de velocidad, sin embargo, de  $\varepsilon = 0.2$  a  $0.6$  el efecto es casi imperceptible. La elongación y los componentes poliméricos del esfuerzo reflejan un aumento significativo en magnitud si  $\varepsilon$  se incrementa, efecto que se nota más en posiciones cercanas a la pared. De nuevo, el grado de reproducibilidad con



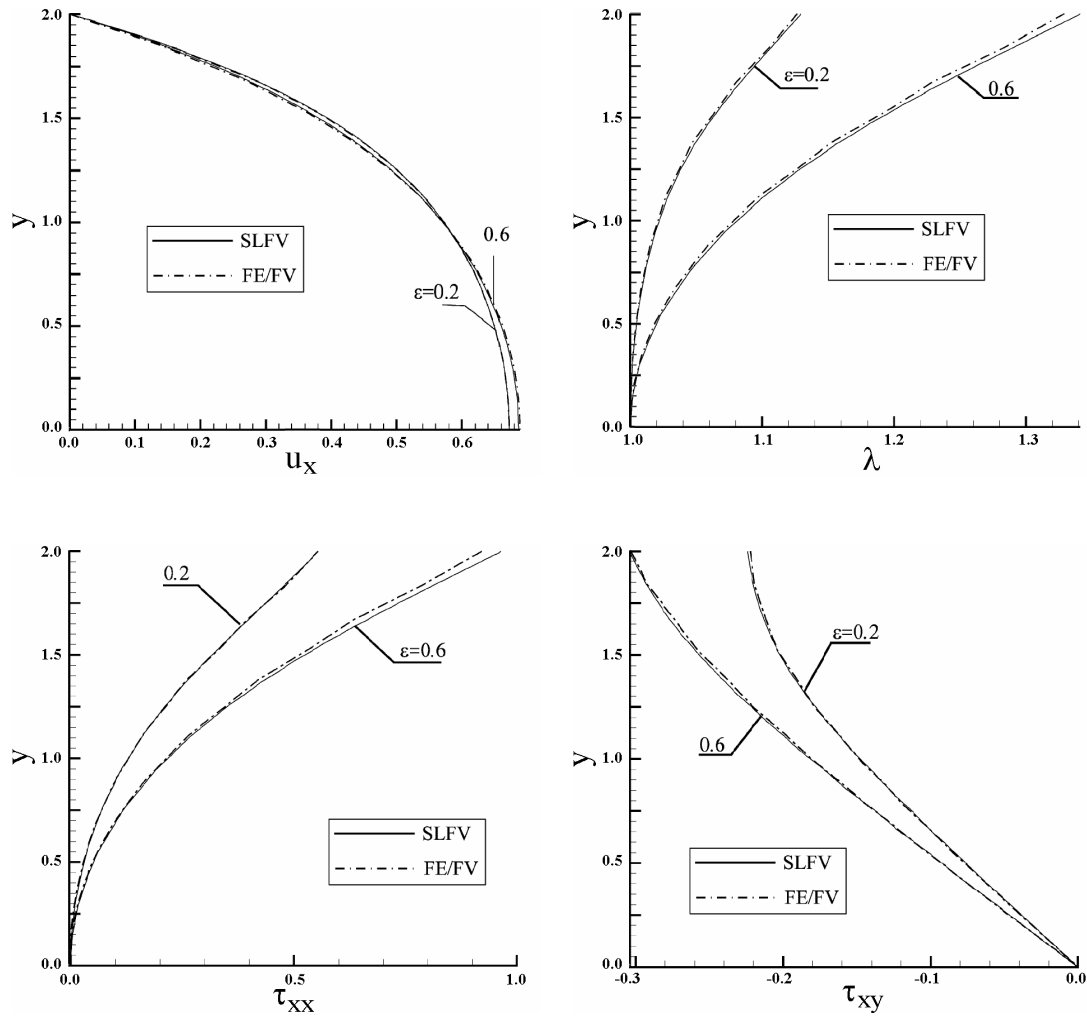


Figura 4.3. Flujo planar; SLFV vs.  $fe/fv$ ,  $Re = 1$ ,  $We = 3$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ .

ambas implementaciones numéricas es muy bueno, con pequeñas diferencias cerca de la pared para el caso  $\varepsilon = 0.6$ .

#### 4.2.4 Influencia del número de brazos

La influencia del número de brazos en los perfiles de velocidad, elongación y contribuciones poliméricas al esfuerzo extra ( $\tau_{xx}$  y  $\tau_{xy}$ ) se muestra en la Figura 4.4. Al va-

riar el número de brazos ( $q$ ) unidos en ambos extremos de la molécula Pom-Pom se debe afectar el nivel de entrelazamiento del sistema. Sin embargo, para los valores  $\varepsilon$  y  $\beta$  seleccionados,  $q = 2$  a 5 parece tener poco efecto en las variables mostradas en la Figura 4.4. El estiramiento molecular ( $\lambda$ ) es ligeramente mayor, según lo reportado por ambos esquemas. No se aprecia efecto sobre el perfil de velocidades; se observan mínimas diferencias cerca de la pared para los componentes  $\tau_{xx}$  y  $\tau_{xy}$ .

#### **4.2.5 Influencia de la anisotropía**

Para observar el efecto que tiene la anisotropía sobre las variables de flujo, se varía el parámetro tipo Giesekus,  $\alpha$ . Los resultados para ambos esquemas están reportados en forma gráfica en la Figura 4.5. Como se explicó anteriormente, este parámetro fue introducido en las versiones extendidas del modelo Pom-Pom.

Si  $\alpha$  se fija en cero, la segunda diferencia de esfuerzos normales en flujo cortante ( $N_2$ ) es también igual a cero, lo que significa que el segundo y tercer componentes de esfuerzos extra ( $\tau_{yy}$  y  $\tau_{zz}$ ) son iguales entre sí y no necesariamente cero. Los resultados numéricos de ambos esquemas confirman esto, además de que no se detectan diferencias con éstos para los valores escogidos ( $\alpha = 0$  y 0.15) al cambiar el procedimiento de solución.

La Figura 4.6 exhibe el efecto que ejerce este parámetro sobre el componente  $\tau_{zz}$ , solamente para la solución  $fe/fv$ . Es importante mencionar que aún en este flujo 2D,  $\tau_{zz}$  es diferente de cero y que sólo cuando  $\alpha \neq 0$  los valores de  $\tau_{yy}$  y  $\tau_{zz}$  difieren.

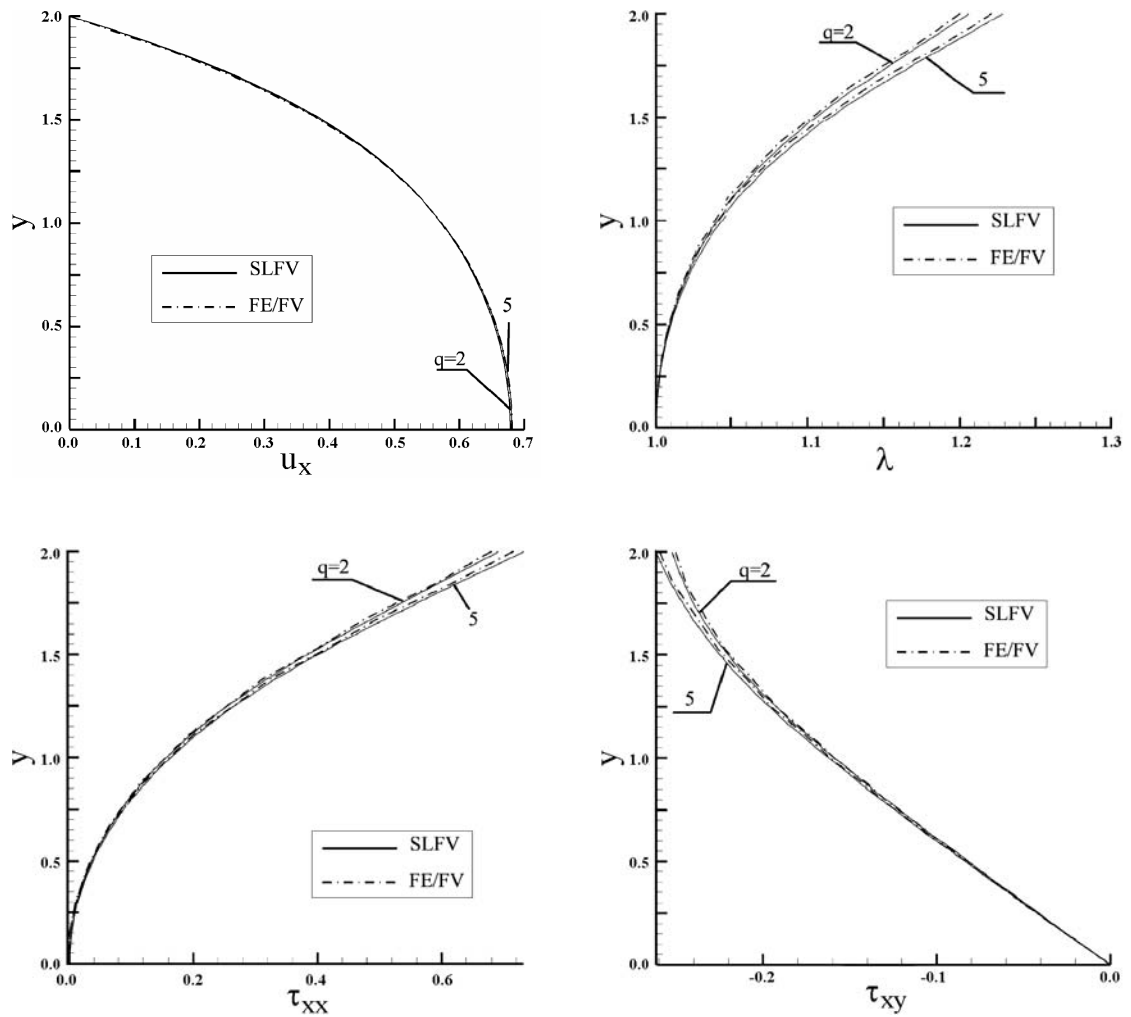


Figura 4.4. Flujo planar; SLFV vs.  $fe/fv$ ,  $Re = 1$ ,  $We = 3$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ .

Los modelos como Oldroyd-B y Phan-Thien/Tanner en flujo Poiseuille predicen  $\tau_{xx} \neq 0$  y  $\tau_{yy} = \tau_{zz} = 0$ . Otro aspecto a destacar es que  $\alpha$  no tiene efecto sobre  $\tau_{yy}$ , por lo que toda su influencia la ejerce sobre  $\tau_{zz}$ . Como se puede observar, el aumento del parámetro de anisotropía se refleja en un decremento en la magnitud de la componente  $\tau_{zz}$  del esfuerzo extra.

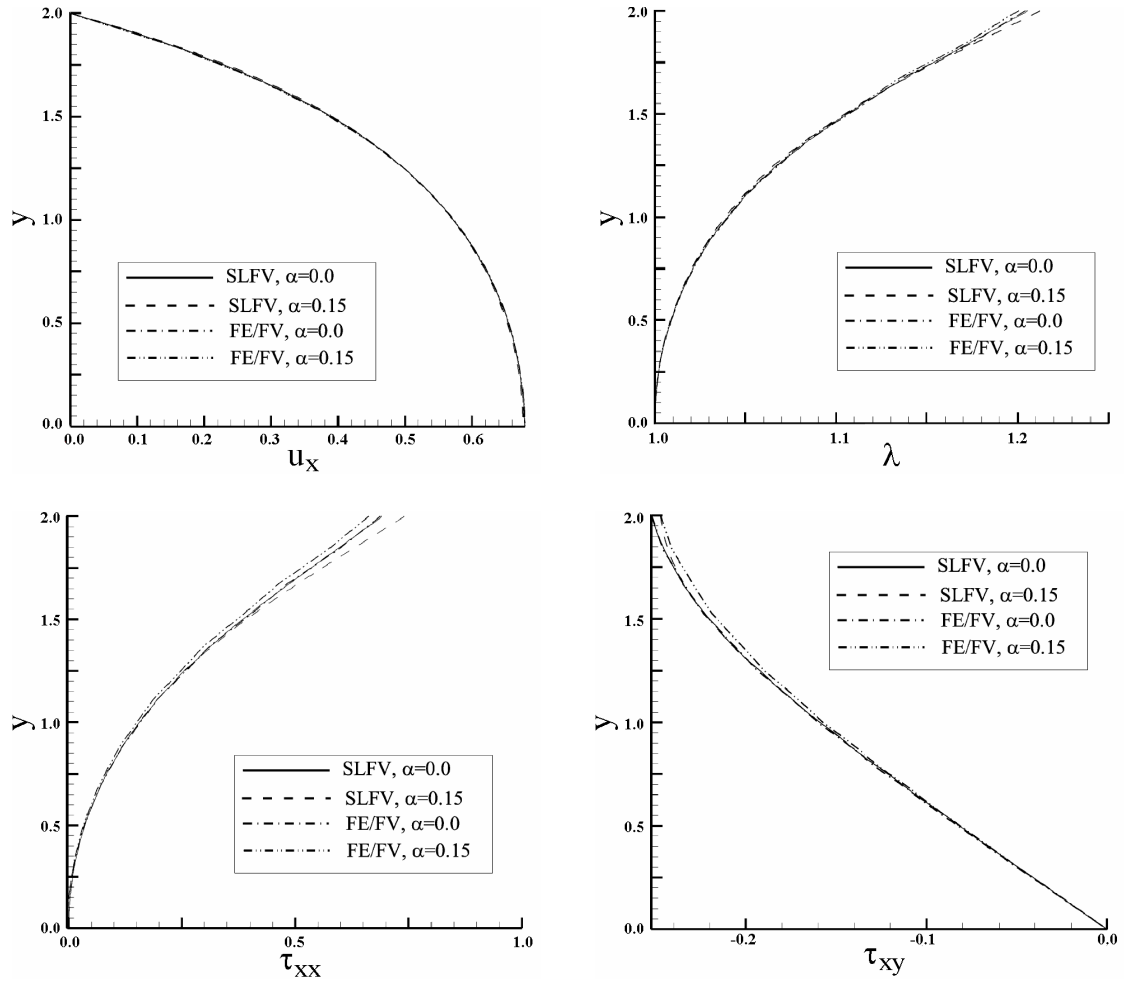


Figura 4.5. Flujo planar; SLFV vs. fe/fv,  $Re = 1$ ,  $We = 3$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ .

#### 4.2.6 Gradiente de presión y rapidez de corte

Se presenta en la Figura 4.7 el gradiente de presión<sup>‡</sup>  $\nabla p$  en función del número de Weissenberg, para el caso  $Re = 1$ ,  $q = 2$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\beta = 1/9$  y  $\alpha = 0.15$ . Debido a que el modelo SXPP representa un fluido con adelgazamiento al corte, el gradiente de presión

<sup>‡</sup> Equivalente en este problema a la caída de presión/longitud del canal.

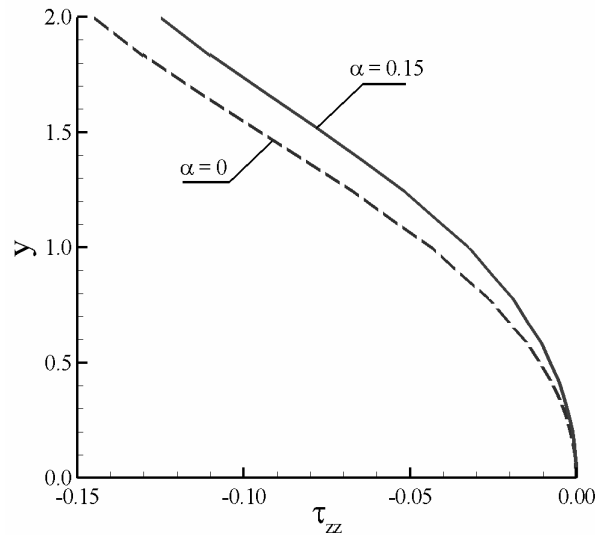


Figura 4.6. Perfil del esfuerzo polimérico  $\tau_{zz}$ ; variando  $\alpha$ ,  
 $We = 3$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ .

disminuye al aumentar la elasticidad, para el intervalo de  $We$  considerado. Cualquier diferencia entre los resultados de ambos esquemas numéricos no es significativa.

La Figura 4.8 muestra el efecto que guardan  $We$ ,  $\beta$ ,  $\varepsilon$  y  $q$  sobre la rapidez de corte  $\dot{\gamma}$  bajo las condiciones de flujo Poiseuille estacionario. Estos perfiles de  $\dot{\gamma}$  son calculados únicamente con el esquema  $fe/fv$ . Si el fluido fuese newtoniano, la variación de la rapidez de corte respecto a la coordenada-  $y$  sería una línea recta.

Esta respuesta newtoniana es esperada para el modelo SXPP a bajos valores de rapidez de deformación ( $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ ) o bien a bajos valores de  $We$ . Debe notarse que en la línea de simetría se cumple  $\dot{\gamma} = 0$ , mientras que su valor máximo ocurre en la pared de la geometría. Al incrementar el nivel de elasticidad, el adelgazamiento al corte reduce la viscosidad del fluido, produciendo una zona de valores de rapidez de corte relativamente bajos, alrededor de la línea central. A valores muy grandes de elasticidad, el perfil de  $\dot{\gamma}$

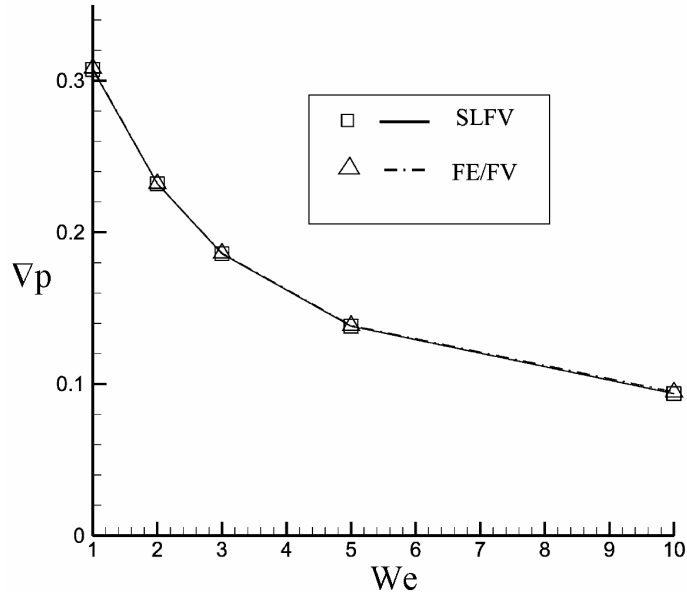


Figura 4.7. Dependencia del gradiente de presión con respecto a la elasticidad.  $Re = 1$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ .

tiende a recuperar su forma lineal, correspondiente a la segunda región newtoniana (ver Figura 2.5). El efecto de “adicionar” más disolvente al sistema (de  $\beta = 1/9$  a  $1/2$ ) resulta en un perfil *más lineal* al mismo nivel de elasticidad ( $We = 3$ ). Anteriormente se mostró que  $\varepsilon$  y  $q$  tienen poco efecto sobre la velocidad, por lo que su impacto sobre la rapidez de corte es insignificante.

### 4.3 Conclusiones

En este capítulo se presentaron resultados de la simulación numérica del flujo Poiseuille planar. Para esto se utilizaron dos esquemas numéricos: un algoritmo híbrido de elemento/volumen finito, *fe/fv* y una implementación basada exclusivamente en el método de volumen finito, SLFV. El modelo utilizado es la versión Pom-Pom extendida de

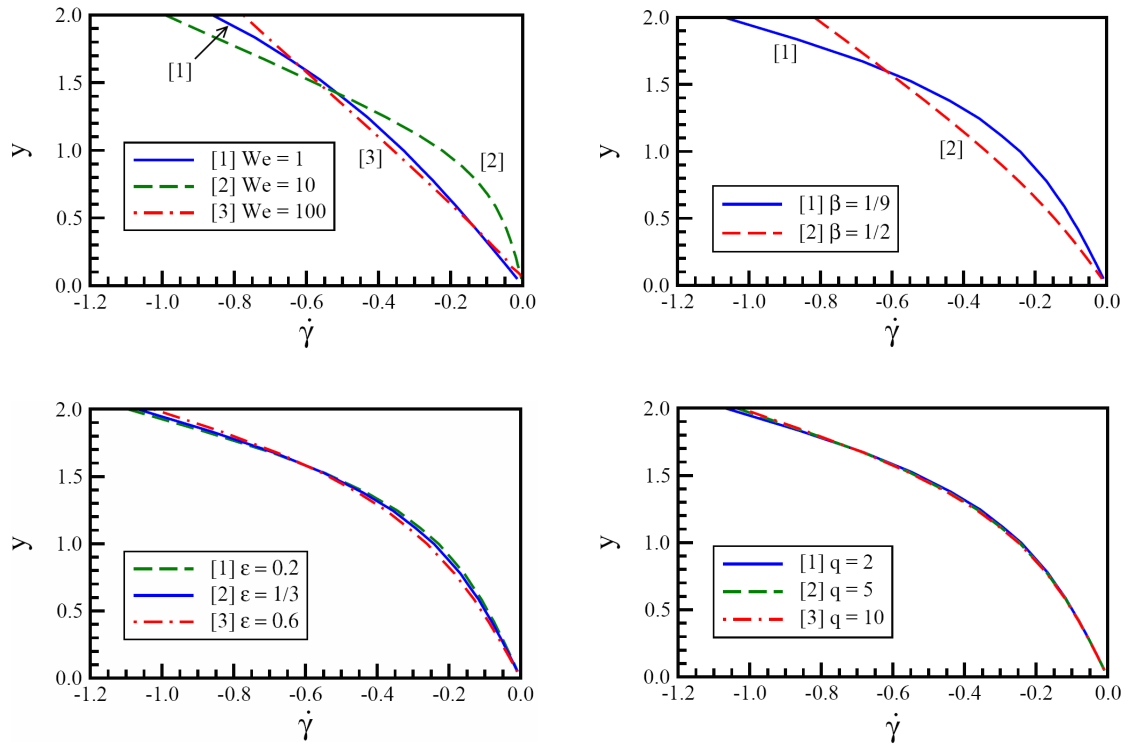


Figura 4.8. Rapidez de corte en flujo Poiseuille:  $We = 3$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\epsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ .

una ecuación o SXPP, clase de modelos pensados para moléculas ramificadas de polímero. Se generaron los perfiles de estado estacionario (velocidad, extensión molecular y contribución polimérica al esfuerzo extra). Estos perfiles pueden utilizarse como condiciones de frontera a la entrada de sistemas con geometrías complejas.

Los modelos Pom-Pom consideran dos tiempos de relajación, uno para la orientación y otro para la elongación molecular. A diferencia de los modelos de Maxwell/Oldroyd-B, no se ha encontrado solución analítica para las ecuaciones que describen el flujo Poiseuille del modelo SXPP. En estudios previos [58], el desempeño de ambos esquemas numéricos se ha evaluado para el flujo Poiseuille de un fluido Oldroyd-B. En este capítulo se ha mostrado el excelente grado de comparación entre los resultados de ambos esquemas numéricos ( $fe/fv$  y SLFV) para el modelo SXPP, esto variando un número de parámetros.

## CAPÍTULO 5

### Modelado Pom-Pom en flujos a través de contracciones\*

En el capítulo anterior se resolvió el flujo Poisuille estacionario para el modelo extendido Pom-Pom de una ecuación (SXPP). Los algoritmos de solución fueron dos procedimientos de evolución en el tiempo, uno consiste en un algoritmo híbrido de elemento/volumen finito ( $fe/fv$ ), y otro consistiendo puramente en un método semilagrangiano de volumen finito (SLFV). En este capítulo, el modelo SXPP se resuelve con los mismos algoritmos, utilizando esta vez, geometrías planas con contracciones abruptas 4:1. Se presentan gráficos mostrando la formación y evolución de vórtices, además de otras variables de flujo, esto para dos niveles de inercia y una variedad grados de elasticidad. La comparación del desempeño de ambos algoritmos se analiza una vez más, enfocando dicho análisis en las nuevas características introducidas por esta clase especial de mode-

---

\* El material de este capítulo ha sido adaptado para el artículo “The numerical prediction of planar viscoelastic contraction flows using the pom–pom model and higher-order finite volume schemes” de J. P. Aguayo, P. M. Phillips, T.N. Phillips, H. R. Tamaddon-Jahromi, B. A. Snigerev and M. F. Webster, publicado en *Journal of Computational Physics* **220** (2007) 586-611.



los reológicos. Se presenta también, una alternativa a la versión de dos ecuaciones del modelo Pom-Pom, la versión lambda cuadrada Pom-Pom ( $\lambda^2$ XPP), la cual se compara con la versión SXPP.

## 5.1 Introducción

En este capítulo se presentan predicciones de flujo de fundidos poliméricos, usando un modelo extendido Pom-Pom (XPP), a través de una contracción plana 4:1. Esta clase de modelos fue introducida por McLeish y Larson [1]; son una extensión del modelo cinético de tubo de Doi y Edwards para polímeros fundidos con moléculas entrelazadas. La formulación original del modelo Pom-Pom presenta tres desventajas importantes: la viscosidad extensional no es continua, no hay límites para la orientación y además predice una nula segunda diferencia de esfuerzos normales en flujo cortante,  $N_2$ . Verbeeten et al. [2] introdujeron dos versiones extendidas del modelo Pom-Pom con el fin de superar las desventajas mencionadas. Estas versiones fueron denominadas modelos Pom-Pom “extendidos” de una y dos ecuaciones (Double eXtended Pom-Pom o DXPP). Su principal diferencia radica en la ecuación para calcular el estiramiento molecular,  $\lambda$ : en la versión doble o DXPP,  $\lambda$  se obtiene mediante la evolución en el tiempo, a través de una ecuación diferencial parcial, mientras que para la versión SXPP,  $\lambda$  se calcula mediante una ecuación algebraica. Esta nueva clase de modelos reconoce la dependencia que guarda el comportamiento reológico con la estructura del polímero.

En general se aprecian comportamientos significativamente diferentes en la respuesta al flujo entre soluciones diluidas y concentradas de polímero. Cuando las soluciones diluidas presentan viscosidad cortante constante, estas se denominan fluidos de Boger, los cuales, aún siendo la concentración tan baja para no causar variaciones en la viscosidad cortante, presentan fenómenos viscoelásticos importantes. Dos ejemplos típicos de diferentes respuestas en función de la concentración de material polimérico son la res-

puesta de vórtices y caída de presión; en ambos ejemplos, la dependencia con las propiedades reométricas es evidente.

La dinámica de crecimiento de vórtices en flujos a través de contracciones ha sido estudiada extensamente; esto para una variedad de cocientes de contracción ( $\hat{\beta}$ ) en configuraciones con simetría planar y radial. Sin embargo, esta respuesta no ha sido explicada correctamente en términos de las funciones materiales o reométricas. El trabajo experimental de Nguyen y Boger [68] mostró que para poliacrilamida (PAA) en un disolvente altamente viscoso, sin adelgazamiento ni espesamiento al corte (esto es, un fluido de Boger), el tamaño de las celdas del vórtice (vortex cell-size) se incrementa al incrementar la elasticidad, para una variedad de cocientes de contracción en flujos axisimétricos. Estos autores fueron capaces de correlacionar el tamaño de celda con definiciones adecuadas de elasticidad, rapidez de deformación y cociente de contracción.

Al estudiar la contrastante respuesta de dos fluidos de Boger con la misma viscosidad, Boger et al. [69] concluyeron que para estudiar la dinámica de vórtices en contracciones circulares, la información de propiedades de flujo cortante no es suficiente para correlacionar esta respuesta. Los fluidos con semejante viscosidad cortante fueron poliacrilamida en jarabe de maiz y una solución de poli-isobutileno/polibuteno (PIB/PB). Conclusiones como ésta hicieron que las investigaciones posteriores se enfocaran a estudiar la influencia de la viscosidad extensional en el desarrollo de vórtices. Al observar el flujo de polietileno de baja densidad (LDPE) y de fundidos de poliestireno (PS), a dos diferentes temperaturas para provocar variaciones de las propiedades reométricas, White y Baird [70,71] concluyeron que el adelgazamiento al corte debe ser considerado junto a los fenómenos extensionales; tal conclusión fue obtenida del hecho de que viscosidades extensionales similares (comparadas a las de LDPE) pueden obtenerse con el fundido PS a flujos volumétricos altos y aún así, no se presenta la misma dinámica de vórtices. Raiford et al. [72] encontraron que la inercia suprime el crecimiento de los vórtices para un

fluido con adelgazamiento al corte (poli-isobutileno en tetradecano – PIB/C14); la geometría utilizada es una contracción con simetría radial.

Byars et al. [73] hicieron notar que la viscosidad extensional en una contracción axisimétrica está lejos de alcanzar su valor de estado estacionario, aún cuando el flujo sí alcanza el régimen permanente; esto es debido a que el flujo es transitorio en el sentido lagrangiano, por la presencia del cambio de área transversal de flujo. Entonces, la rapidez de desarrollo de esfuerzos extensionales debe ser tomada en cuenta. Por otro lado, el análisis de Binding [11,12], basado en ideas de Cogswell, consideró ambas viscosidades, extensional y cortante (representándolas mediante leyes de potencia), y su efecto en la dinámica de vórtices en flujo a través de contracciones. Este análisis ha sido útil para obtener la viscosidad extensional mediante datos de presión de entrada a la contracción (ver referencia [74]) para fluidos con adelgazamiento al corte, aunque no para fluidos de Boger. También ha sido usado para calcular tamaños de celdas de vórtice (ver [75]). Sin embargo, Maia [13] y Maia y Binding [14] observaron diferencias significativas de los resultados del análisis de Binding con respecto a datos experimentales.

Rothstein y McKinley [76] estudiaron el flujo a través de geometrías axisimétricas con contracción/expansión. Estos autores asociaron la presencia de vórtices en el borde de la contracción (lip vortices) a  $\hat{\beta} = 2$  con flujo dominado por deformación cortante, esto para una solución de poliestireno (PS/PS); además, relacionaron la presencia de vórtices dominantes (salient vortices), a cocientes de contracción mayores, con efectos extensionales dominantes. Esta transición no fue detectada para un fluido de Boger PIB/PB, donde se observaron vórtices de borde para cocientes de contracción menores a ocho. En conclusión, Rothstein y McKinley propusieron que la transición de vórtices de borde a vórtices dominantes puede estar relacionada con un cociente de esfuerzos normales,  $\mathfrak{N}$ , (deformación cortante/extensional, ver [76]). Estos autores explicaron sus resultados, refiriéndose a los diferentes valores que adquiere este cociente de esfuerzos normales, para las soluciones poliméricas que investigaron. Encontraron que valores al-

tos de  $\mathfrak{N}$  para una solución y cociente de contracción dados, están relacionados con la presencia de vórtices de borde.

Al cambiar la geometría de flujo, de contracciones con sección transversal circular a rectangular, se ha encontrado un efecto inhibitor en los vórtices dominantes para fluidos de Boger. Esto no es el caso para soluciones poliméricas con adelgazamiento al corte, donde se puede observar crecimiento de vórtices en ambas geometrías [42]. Otro fenómeno importante en flujos a través de contracciones es el incremento en la caída de presión (enhanced pressure-drop), arriba de la esperada para un fluido no viscoelástico. Esto parece estar directamente relacionado con crecimiento en los vórtices [42]. Dicha respuesta ha sido extremadamente difícil de simular; en el capítulo 7 se tratará este problema a profundidad.

Se puede encontrar una revisión muy completa de trabajos, tanto experimentales como de simulación, del tema de flujos a través de contracciones, en el texto de Owens y Phillips [41] y en el artículo de Walters y Webster [42]. La contracción 4:1 ha sido ampliamente utilizada como problema modelo o de prueba, para evaluar la precisión y estabilidad de los diferentes esquemas numéricos. Para un fluido newtoniano, se ha encontrado experimentalmente que cocientes mayores a 4:1 no presentan cambios significativos en las características de flujo. Esto no es el caso para fluidos elásticos (ver referencia [42]).

Purnode y Crochet [77], mediante la simulación numérica de un solo modo de la modificación de Peterlin al modelo de resorte elástico no lineal de extensión finita (FENE-P), lograron predecir los resultados experimentales de Evans y Walters [78,79] para flujos de soluciones acuosas de poli(acrilamida) (endurecimiento moderado en extensión y adelgazamiento al corte) a través de contracciones rectangulares. En la referencia [77], se presentan líneas de corriente tanto de experimentos como de simulaciones mostrando, en general, características de vórtice (de borde y dominantes) semejantes, aunque sin

poder reproducir el flujo de manera correcta. Esta discrepancia en el cálculo de flujos, tal vez pueda ser explicada por el hecho de que las simulaciones representan geometrías bidimensionales, mientras que los experimentos fueron llevados a cabo en geometrías reales; otra posible causa de discrepancia es la capacidad limitada del modelo FENE-P para representar adecuadamente la reología de las soluciones PAA. El método numérico utilizado para las simulaciones está basado en el esquema de elemento finito, propuesto por Marchal y Crochet [60,80].

Con un esquema de volumen finito, basado en el método SIMPLER, Yoo y Na [81] observaron crecimiento de vórtices de borde para un fluido Oldroyd-B al incrementar la elasticidad; este crecimiento fue tanto en tamaño como en intensidad. Cambios en vórtices dominantes fueron difíciles de detectar. En su trabajo se encontró que la inercia ejerce un efecto inhibitor del crecimiento de vórtices, y aún con esto, se observaron vórtices de borde. Carew et al. [49] reportaron la presencia de vórtices de borde para dos fluidos lineales de Phan-Thien/Tanner (LPTT); para esto, los autores utilizaron un método basado en la técnica de elemento finito. El grado de endurecimiento extensional fue controlado con el parámetro  $\varepsilon_{PTT}$ ;  $\varepsilon_{PTT} = 0.02$  corresponde a un fluido con un endurecimiento en flujo extensional significativo, mientras que  $\varepsilon_{PTT} = 0.25$  presenta un débil endurecimiento. Ninguno de estos fluidos presenta adelgazamiento extensional. Se escogió una relación de disolvente de  $\beta = 1/9$  (baja contribución del disolvente a la solución); el número de Reynolds se fijó con valor unitario. Para el fluido LPTT con fuerte incremento en la viscosidad, se observó un incremento en el vórtice de borde al incrementar el Weissenberg; este incremento continúa hasta que se convierte en un solo vórtice (dominante). En el caso LPTT ( $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ ), no se reporta ningún vórtice de borde. Alves et al. [82] utilizando el modelo convectivo superior de Maxwell (UCM), Phillips y Williams [83], Aboubacar y Webster [59] y Xue et al. [84] con el modelo Oldroyd-B, todos basados en la técnica de volumen finito, reportan conclusiones similares sobre la actividad de vórtices de borde. Sin embargo, la capacidad del procedimiento numérico para detectar

estos vórtices de borde, depende del refinamiento del mallado; curiosamente, mallados finos no siempre son capaces de detectar este fenómeno, mientras que es más fácil si se utilizan mallados más gruesos (ver referencia [59]).

Con el modelo Pom-Pom original, Bishko et al. [66] simularon el flujo transitorio de un fundido polimérico en una contracción 4:1 rectangular; el método numérico fue un elemento finito lagrangiano. Se observó crecimiento del vórtice dominante al incrementar el número de brazos  $q$  y el nivel de elasticidad. Verbeeten et al. [37] simularon el flujo transitorio de un fundido de LDPE en una contracción 3.29:1 utilizando la versión extendida Pom-Pom modificada (modified eXtended Pom-Pom o mXPP) y el modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner (EPTT), ambos de forma multimodal. El uso del modelo mXPP fue necesario con el fin de mejorar la estabilidad. Comparaciones contra perfiles experimentales de velocidad y esfuerzo resultaron excelentes. El método utilizado por estos autores fue de elemento finito, basado en el método discontinuo de Galerkin (DG) y separación discreta elástica-viscosa del esfuerzo (DEVSS). Sirakov et al. [85] estudiaron la respuesta del modelo XPP en una contracción 3D. Los resultados numéricos fueron probados contra información experimental de LDPE fundido, reportando errores dentro del 15% para tamaño de celda de vórtices. Las deficiencias numéricas del procedimiento de elemento finito usado fueron atenuadas al ajustar  $\alpha = 0$  y de forma adicional, modificaron el término de la raíz cuadrada para el cálculo del estiramiento,  $\lambda$ . Esta modificación introduce un cambio “suave” cuando la traza del esfuerzo,  $Tr(\boldsymbol{\tau})$ , induzca indeterminaciones; con esto, en vez de que  $\lambda$  alcance valores complejos cuando la traza de  $\boldsymbol{\tau}$  sea suficientemente negativa, la extensión molecular tendrá un valor de cero. Si se utilizara el valor absoluto del término dentro del símbolo de raíz cuadrada, el cambio de positivo a negativo en  $\lambda$  introduciría una singularidad. Sirakov et al. presentaron una función que elimina dicha singularidad. Es de notar, que esto solo es un artificio numérico, ya que se ha encontrado que en flujo a través de contracciones, el valor

mínimo que alcanza  $\lambda$  es de uno. El resultado de esta modificación es un modelo con resultados casi idénticos a los expuestos por el modelo SXPP.

Las soluciones numéricas de este capítulo se obtienen empleando dos esquemas numéricos, un algoritmo híbrido elemento/volumen finito (*fe/fv*) y un esquema basado únicamente en volumen finito (SLFV). Aboubacar et al. [58] reportaron que el algoritmo híbrido es estable en el inicio de flujo (transitorio) Poiseuille de un fluido Oldroyd-B. Este esquema se describe en el capítulo 3 y en la referencia [59], y el algoritmo SLFV en [55,61]. La solución con ambos métodos en estado estacionario en flujos a través de canales planos se obtuvo en el capítulo 4, y los resultados son perfectamente comparables entre sí. Aquí, ambos esquemas se prueban en una geometría compleja, la contracción 4:1, utilizando el modelo cinético de un fluido polimérico con bajo contenido de disolvente; la comparación en este capítulo está en términos del número de Weissenberg para el esfuerzo, extensión molecular, caída de presión y dinámica de vórtices dominantes. Las simulaciones se generaron para dos niveles de inercia ( $Re = 0$  y  $Re = 1$ )<sup>†</sup>. Los dos esquemas utilizan algoritmos de separación de tiempo (time-splitting) para que la solución evolucione hacia el estado estacionario.

## 5.2 Especificación del problema

Se considera el flujo viscoelástico a través de una contracción abrupta 4:1 plana; aún cuando la geometría no es tan compleja, el tipo de flujo sí lo es, debido a que exhibe regiones con deformaciones cortante y extensional de manera simultánea. Se esperan valores altos de rapidez de corte en las capas de fluido cercanas a la pared, mientras que a lo largo de la línea central (o plano central) cerca del cambio de diámetro, se presenta deformación puramente extensional (ver en la Figura 5.1 un diagrama de esta geometría). Son abundantes las referencias bibliográficas que observan con interés la dinámica

---

<sup>†</sup> Niveles extremadamente bajos de inercia se aproximan aquí al ajustar  $Re = 0$ .

de vórtices, caída de presión en la contracción, máximo en la velocidad de la línea central, el problema del alto número de Weissenberg y cómo son afectadas estas variables por las funciones materiales, tales como viscosidades cortante y extensional; para mayor detalle, referirse a [41]. Bajo condiciones de flujo reptante, los vórtices pueden tomar formas distintas (ver el trabajo de Boger [86] y de Evans y Walters [78,79]). Para fluidos con adelgazamiento al corte, el tamaño de celda tiende a crecer junto con la elasticidad. En la referencia [78] no se observó ningún vórtice de borde, para una solución acuosa de 1% poliacrilamida. Esto está de acuerdo a los resultados numéricos obtenidos por Alves et al. [87].

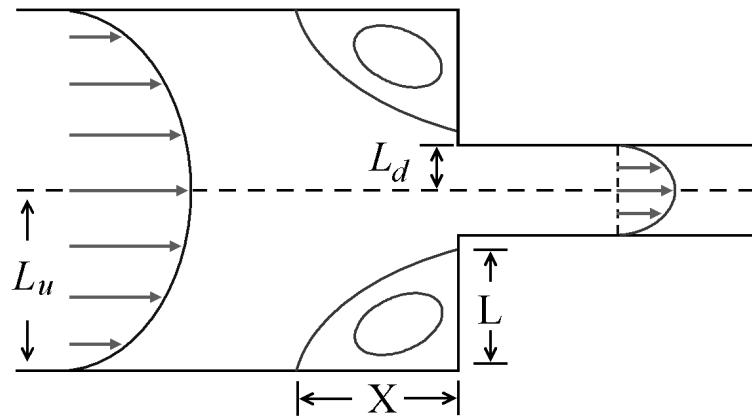


Figura 5.1. Representación esquemática de la contracción abrupta 4:1.

El perfil de velocidad del flujo transitorio de un fluido Oldroyd-B en un canal plano es impuesto como condición de frontera en la entrada. La longitud de la sección de entrada es lo suficientemente grande para que la solución Oldroyd-B evolucione a la solución Pom-Pom deseada. Se especifican condiciones naturales de frontera para la velocidad y el esfuerzo extra en la salida del dominio; la condición de adherencia se aplica sobre las paredes de la geometría.



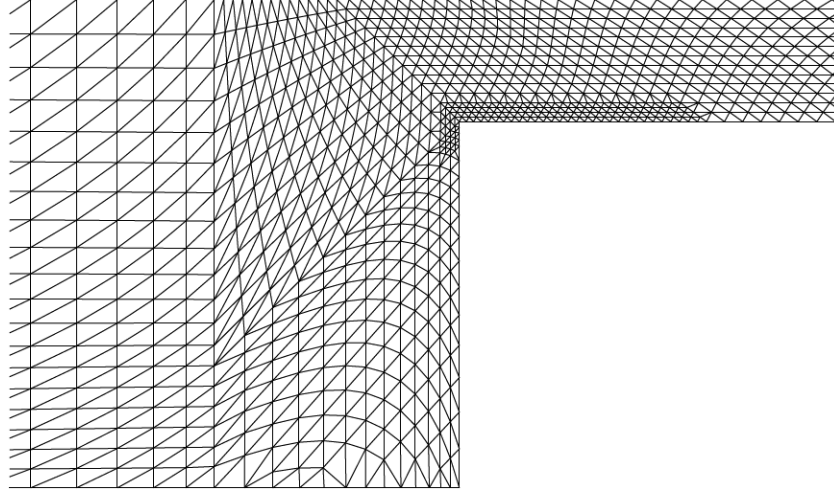
Los dos métodos de volumen finito descritos anteriormente son utilizados para resolver este problema de flujo a través de una contracción 4:1. La comparación del desempeño de ambos esquemas está en términos de la dinámica de vórtices y variables de flujo (velocidad en la línea central, esfuerzo normal, extensión de la molécula y presión). La convergencia en cuanto coordenadas espaciales se asegura mediante el uso de una serie de mallados, incrementando su grado de refinamiento al reducir el tamaño promedio de los elementos.

La Tabla 5.1 reporta los grados de libertad y el tamaño mínimo ( $R_{min}$ ) de elemento de cada mallado. El algoritmo  $fe/fv$  puede utilizar mallados triangulares estructurados o desordenados, mientras que la implementación SLFV emplea mallados cuadrículados estructurados no uniformes. El tamaño de los elementos de volumen se reduce en posiciones previas a la contracción y después se incrementa, con el objetivo de tener mayor refinamiento en la sección del cambio abrupto de diámetro. La Figura 5.2 muestra los mallados más refinados (m3 para  $fe/fv$  y M4 para SLFV). La contracción está localizada en  $x = 0$  para todos los mallados. Las longitudes de las secciones de entrada y salida son respectivamente  $49L_d$  y  $27.5L_d$  (ver figura 5.1).

Tabla 5.1. Características de mallado para los esquemas  $fe/fv$  y SLFV

	<i>Mallado</i>	<i>Elementos/ volumenes</i>	<i>Nodos</i>	<i>Grados de libertad (u, p, τ)</i>	<i>R<sub>min</sub></i>
<i>fe/fv</i>	<i>m1</i>	980	2105	13193	0.0243
	<i>m2</i>	1542	3279	20543	0.0190
	<i>m3</i>	2987	6220	38937	0.0063
<i>SLFV</i>	<i>M1</i>	2240		26880	0.1000
	<i>M2</i>	3200		38400	0.0900
	<i>M3</i>	3600		43200	0.0800
	<i>M4</i>	7200		86400	0.0400

*a) Mallado desordenado (m3)*



*b) Mallado estructurado (M4)*

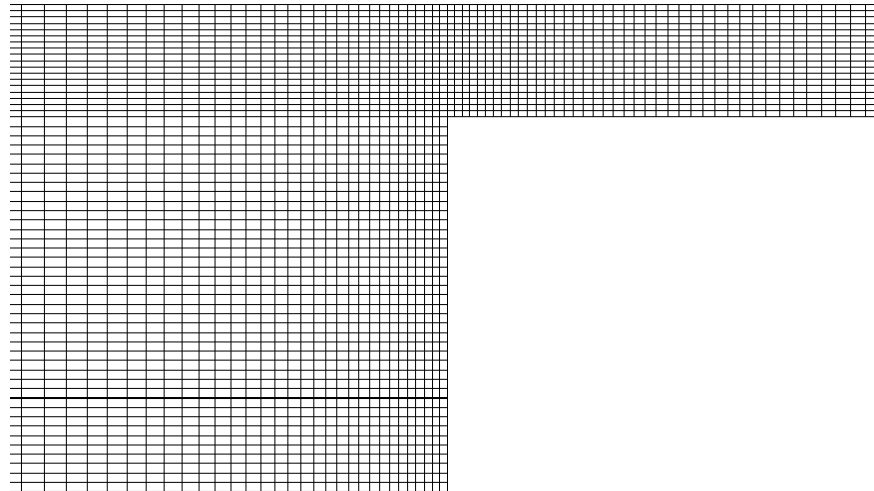


Figura 5.2. Mallados  $fe/fv$  (m3) y SLFV (M4); en la zona de la contracción.

La evolución hacia el estado estacionario se detiene cuando la norma  $L_2$  relativa a la diferencia máxima entre dos pasos sucesivos de tiempo cae debajo de  $10^{-7}$ . La solución a altos números de Weissenberg se obtiene mediante la técnica de continuación en el parámetro elástico, empezando desde  $We = 0.1$ , seguido típicamente por  $We = 0.5, 1, 3, 10, 15, 20, \dots$ , hasta que se pierda la convergencia.

### 5.3 Resultados numéricos

Los resultados presentados en este capítulo se han calculado para un conjunto de parámetros SXPP base (a menos que se indique lo contrario):  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$  y  $\alpha = 0.15$ . El fluido representado por este juego de parámetros es pseudoplástico y un moderado nivel de endurecimiento en extensión seguido por reducción en la viscosidad uniaxial. Se consideran dos niveles de inercia ( $Re \rightarrow 0$  y 1) y el intervalo de números de Weissenberg de los resultados es de  $0 \leq We \leq 60$ <sup>‡</sup>. El nivel de inercia  $Re = 1$ , aunque puede parecer insignificante para otro tipo de sistemas, en el caso de polímeros es generalmente más que suficiente para observar los efectos de los términos convectivos de la ecuación de movimiento en la solución del sistema, dentro del régimen laminar.

#### 5.3.1 Convergencia y dinámica de vórtices

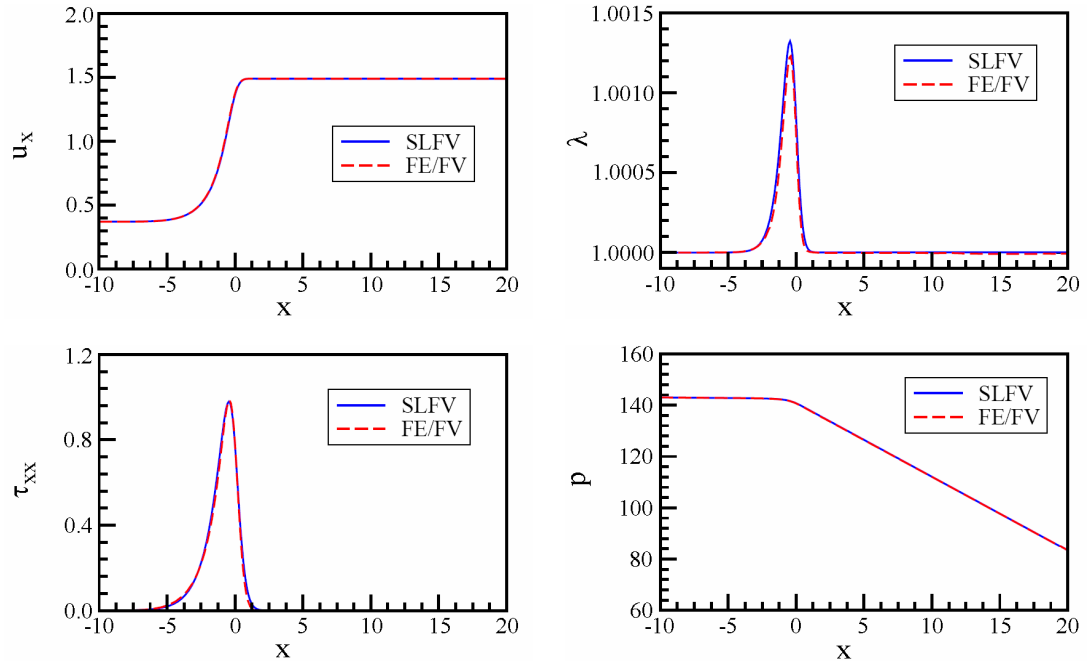
La Figura 5.3 presenta la velocidad ( $u_x$ ) en la línea (plano) central, la extensión molecular ( $\lambda$ ), el componente  $xx$  del esfuerzo ( $\tau_{xx}$ ) y la presión ( $p$ ) para  $We = 0.1$  y  $We = 10$ . La velocidad en la línea central presenta un pequeño máximo cuando  $We = 10$ , el cual es difícil de detectar si  $We = 0.1$ . El efecto que tiene el incrementar la elasticidad del fluido (a través del número de Weissenberg), se refleja en el incremento de la distancia requerida para la relajación del esfuerzo  $\tau_{xx}$  de la molécula, después de la contracción. Nótese que para  $We = 10$ , este esfuerzo normal no ha recuperado su valor de flujo totalmente desarrollado en la línea central ( $\tau_{xx} = 0$ ) aún veinte unidades después de la contracción, mientras que a  $We = 0.1$ , esto ocurre aproximadamente tres unidades después de la restricción.

El incremento en elasticidad reduce la caída de presión de 145 a 23 unidades, aproximadamente; esta respuesta se debe al fenómeno de adelgazamiento al corte (la

---

<sup>‡</sup> Resultados para  $We > 20$  son exclusivamente para el algoritmo  $fe/fv$ .

a) Perfiles en la línea central,  $We$  bajo



b) Perfiles en la línea central,  $We$  alto

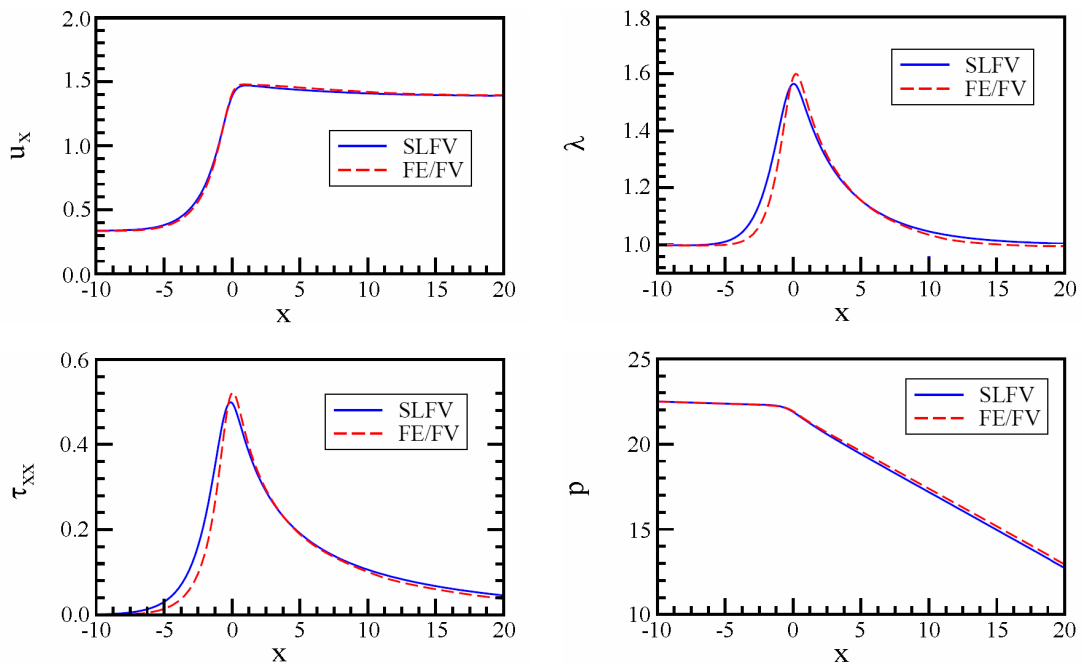


Figura 5.3. Resultados en la línea de simetría a  $Re = 0$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ; a)  $We = 0.1$ , b)  $We = 10$ .

presión en la salida se impone como cero). La reducción en el valor máximo de  $\tau_{xx}$  al incrementar la elasticidad se relaciona con la reducción de viscosidad extensional, esta reducción de viscosidad es más apreciable para  $We \geq 5$ . El esquema  $fe/fv$  predice máximos ligeramente mayores y abruptos en  $\lambda$  y  $\tau_{xx}$  que aquellos calculados con el esquema SLFV, para  $We = 10$ ; sin embargo, los resultados de ambos algoritmos guardan un alto grado de semejanza.

En la Figura 5.4 se muestran líneas de contorno de la función de corriente (stream function) para  $Re = 0$  y  $1$ , cubriendo niveles de elasticidad dentro del intervalo  $0.1 \leq We \leq 60$ . Las flechas dibujadas en el inciso “a” de la misma figura indican la dirección de las partículas en la zona de vórtice. En esta sección se presta atención al tamaño normalizado de celda  $X$  de los vórtices, tomada paralela a la línea de simetría (ver Figura 5.1); la normalización se realiza con la altura del canal de entrada ( $2L_u$ ).

Para flujo reptante, el tamaño del vórtice crece gradualmente junto con la elasticidad (Figura 5.5a). Bishko et al. [66] reportaron también esta respuesta con el modelo Pom-Pom original. Al incrementar la inercia del sistema ( $Re = 1$ ), la respuesta es opuesta. Aboubacar et al. [7,8] obtuvieron una tendencia similar en esta geometría, esto para un fluido PTT con  $\varepsilon_{PTT} = 0.25$  (fluido con comportamiento extensional semejante al caso base usado aquí). En ninguno de los dos esquemas se obtuvieron vórtices de borde. Estos resultados son también consistentes con los reportados por Carew et al. [49] para el modelo lineal PTT con  $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ , y con los de Bishko et al. [66] para el modelo original Pom-Pom.

Contrario al incremento en la intensidad de vórtice y en el tamaño de celda para flujo reptante, se observa reducción en ambas magnitudes al incrementar la elasticidad, para el caso  $Re = 1$ ; excepto por un pequeño incremento hasta  $We = 0.5$ , la tendencia muestra un decaimiento monótono. Por ejemplo, considerando el nivel  $We = 20$ , el

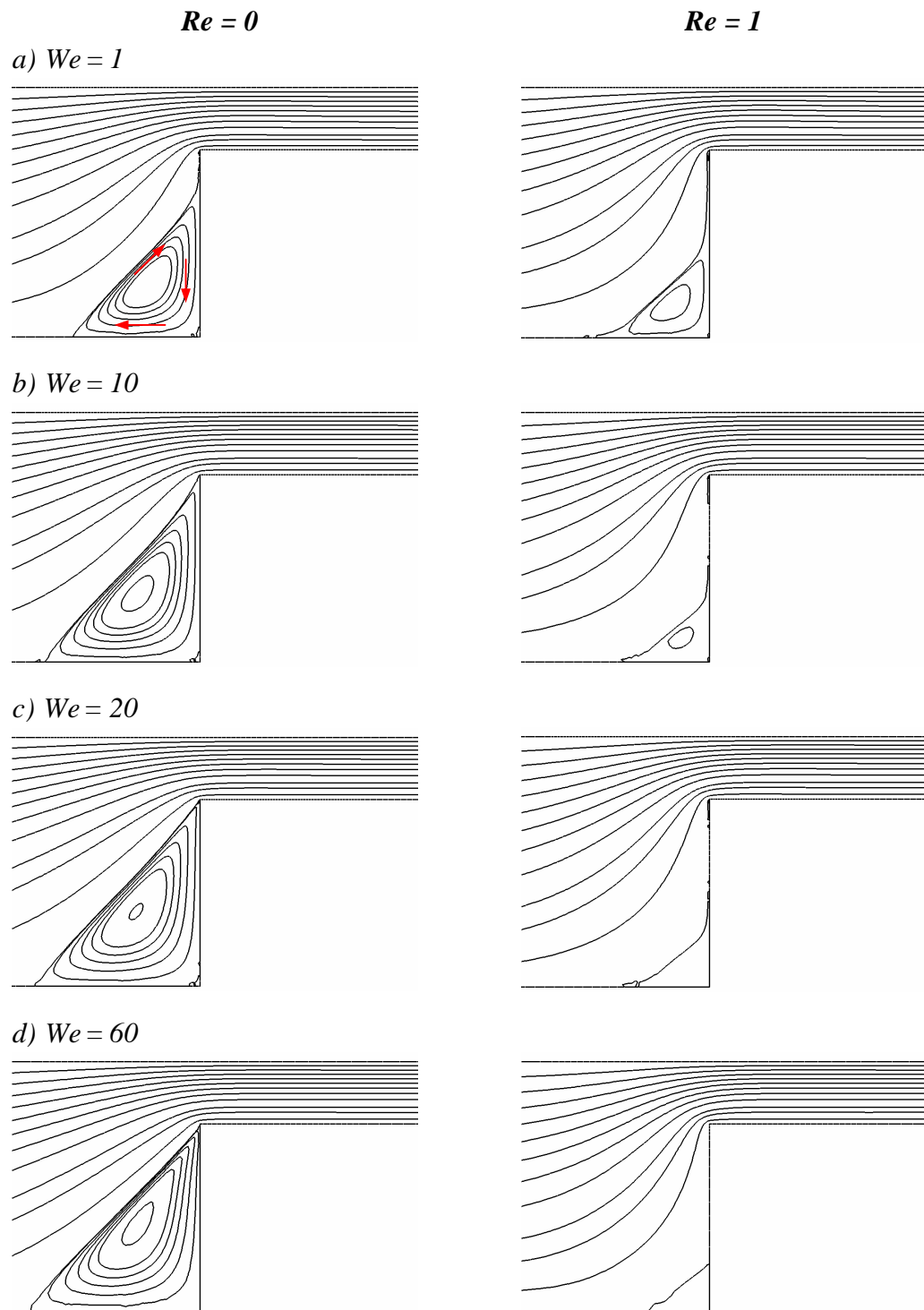
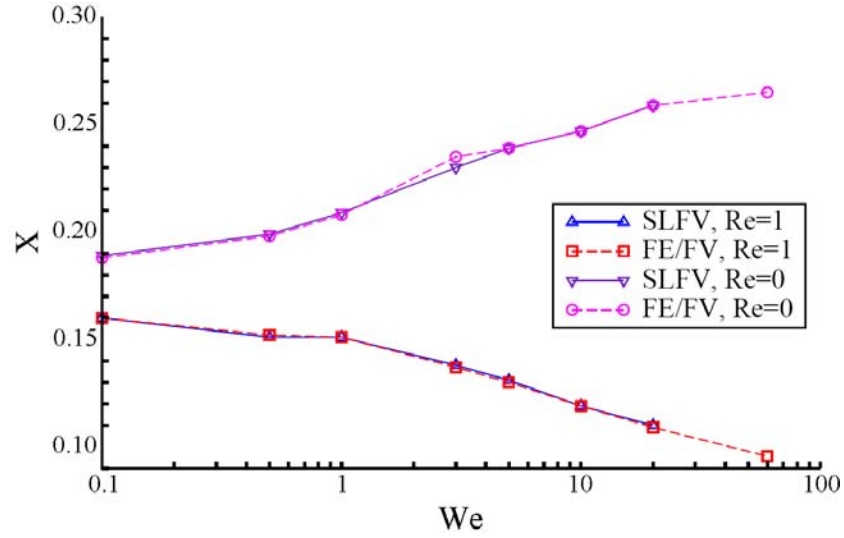


Figura 5.4. Líneas de contorno de la función corriente al incrementar  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $1$ .

a) Tamaño de celda



b) Intensidad

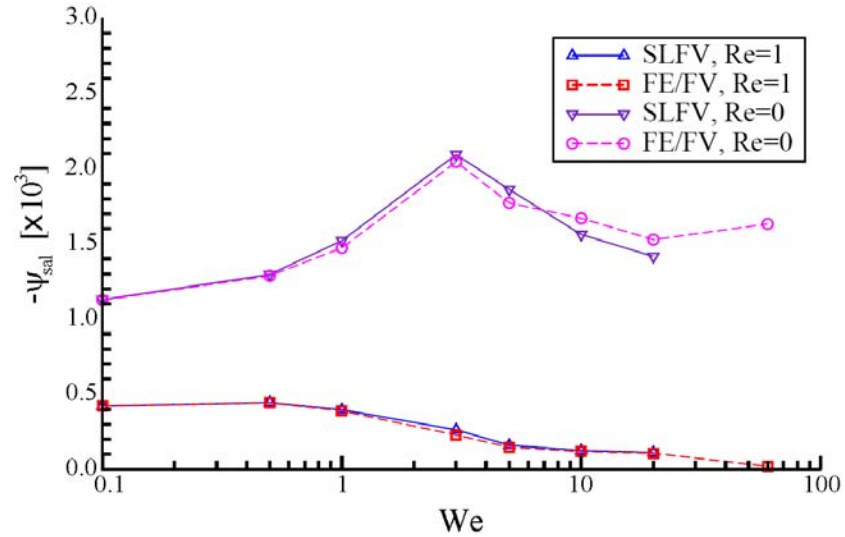


Figura 5.5. Tendencia del vórtice dominante al incrementar  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ,  $Re = 0$  y  $1$ ; a) tamaño de celda, b) intensidad.

efecto inhibitor de vórtice a  $Re = 1$  reduce la intensidad alrededor de un 90%, al compararse con el caso  $Re = 0$ . Los dos esquemas de volumen finito presentan resultados muy similares, sólo con pequeñas diferencias en la intensidad para flujo reptante. Las Tabla

5.2 y Tabla 5.3 presentan información acerca de la convergencia con el grado de refinamiento del mallado, en el intervalo  $0.1 \leq We \leq 20$ , con  $Re = 0$  y 1, respectivamente.

Para el modelo SXPP, los mallados de las geometrías tienen que ser suficientemente refinados para obtener soluciones a número de Weissenberg altos. Esto difiere de los modelos como Oldroyd-B, donde la convergencia falla a valores moderados de  $We$  (típicamente  $\approx 3$ ) si el mallado es demasiado fino.

Tabla 5.2. Convergencia con el mallado: tamaño de celda del vórtice dominante ( $X$ ),  $Re = 0$

$We$	$f_e/f_v$			SLFV	
	$m1$	$m2$	$m3$	$M3$	$M4$
<b>0.1</b>	0.185	0.188	0.188	0.189	0.189
<b>1</b>	0.206	0.208	0.208	0.209	0.209
<b>5</b>	0.236	0.239	0.239	0.239	0.239
<b>10</b>	0.242	0.247	0.247	0.247	0.247
<b>20</b>	0.255	0.259	0.259	0.259	0.260

### 5.3.2 Campos de extensión molecular, esfuerzo y rapidez de deformación

Siguiendo el trabajo de Bishko et al. [66], la sección de entrada a la contracción (no a la geometría) puede ser dividida en dos regiones en donde la molécula es relativamente libre de extensión, y una tercer región donde la extensión es significativa. Estas zonas “sin estiramiento” están localizadas cerca de la línea central y en la región del vórtice. La tercer zona es una zona que forma una banda entre las otras dos, en la cual el fluido se mueve hacia el canal de salida, atravesando la contracción. Es posible reconocer esta característica en el flujo reptante si se ve la Figura 5.6 para el intervalo de  $We$  cubierto. Se detectan zonas de mayor deformación cerca de la esquina reentrante y a lo largo del fluido sobre la pared del canal de salida.



Tabla 5.3. Convergencia con el mallado: tamaño de celda del vórtice dominante ( $X$ ),  $Re = 1$

$We$	$f_e/f_v$			SLFV			
	$m1$	$M2$	$m3$	$M1$	$M2$	$M3$	$M4$
<b>0.1</b>	0.163	0.160	0.160	0.162	0.161	0.161	0.160
<b>1</b>	0.153	0.151	0.151	0.153	0.152	0.151	0.151
<b>5</b>	0.133	0.130	0.130	0.134	0.133	0.131	0.131
<b>10</b>	0.122	0.119	0.119	-	-	0.119	0.119
<b>20</b>	0.113	0.109	0.109	-	-	0.110	0.110

La extensión molecular se incrementa con el número de Weissenberg. Los efectos extensionales dominan en la región banda. Nótese que para  $We = 20$  y  $60$ , la extensión molecular sobrepasa el número de brazos de la molécula, en una pequeña zona en la esquina entrante, rompiendo así la restricción de extensibilidad  $\lambda \leq q$ ; la rigidez de esta restricción en la formulación original del modelo Pom-Pom es la causa de los problemas de discontinuidad y cambios no suaves en los perfiles obtenidos con el modelo. Como se mencionó anteriormente, las versiones Pom-Pom extendidas eliminaron esta desventaja. En Figura 5.7 y Figura 5.8 se muestran las gráficas de contorno para la parte polimérica del esfuerzo extra, en particular  $\tau_{xx}$  y  $\tau_{xy}$ , respectivamente. En general se observa reducción en ambas magnitudes cuando la elasticidad ( $We$ ) se incrementa. Esto es consistente con los resultados numéricos obtenidos por van Os y Phillips [36] y con los presentados en el capítulo anterior. El decaimiento en  $\tau_{xy}$  es más apreciable en la región banda, donde la extensión domina sobre la deformación cortante.

El incremento en el número de Weissenberg, que implica un incremento en el nivel de elasticidad, también se manifiesta como un mayor tiempo de relajación, es decir, cada vez se requiere de un mayor tiempo de residencia para que se manifiesten las propiedades de estado estacionario, esto explicaría el por qué de las reducciones de los esfuerzos al incrementar  $We$ , manteniendo un mismo flujo en cada simulación.

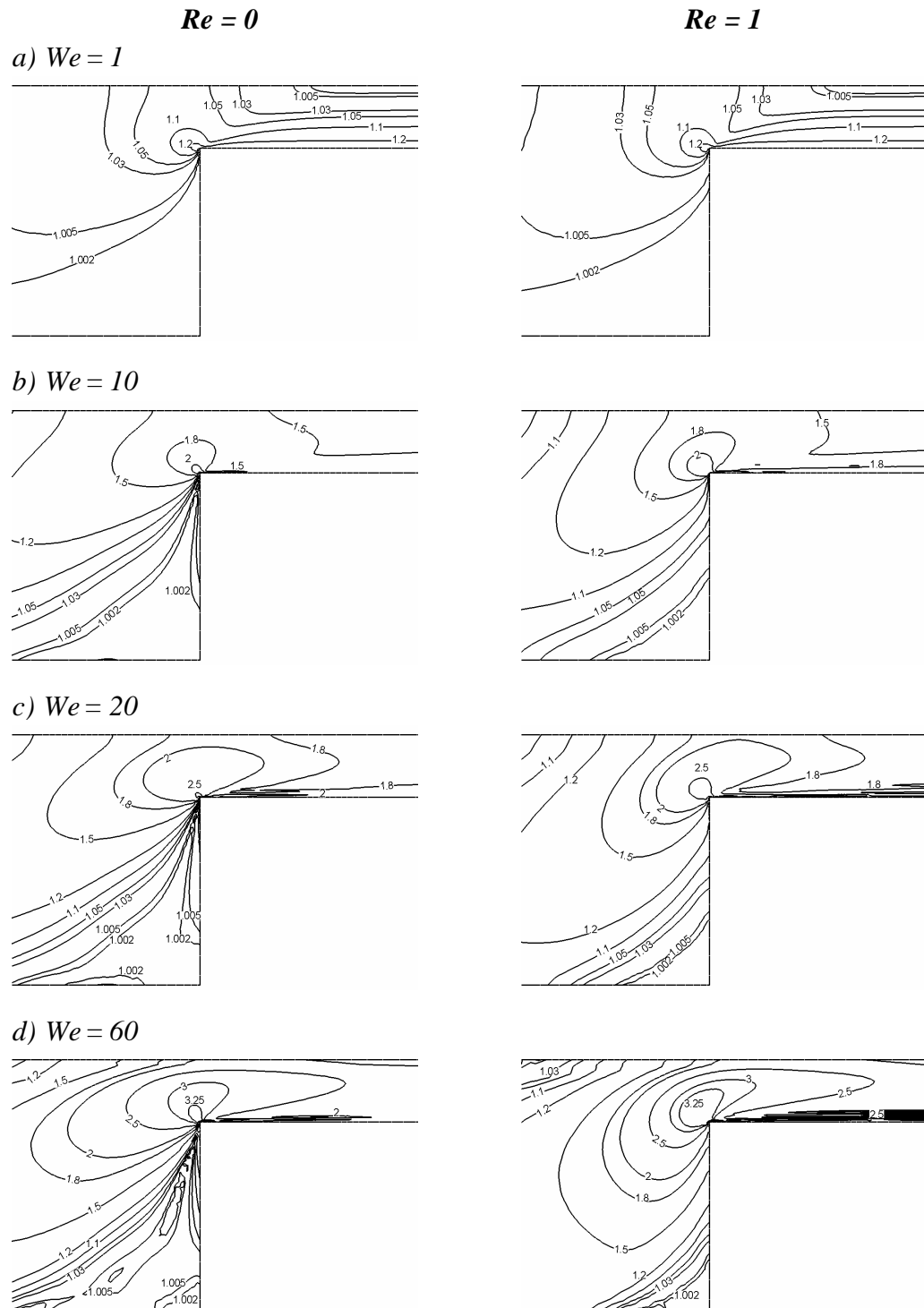


Figura 5.6. Contornos de extensión molecular  $\lambda$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ,  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .

La primera diferencia de esfuerzos poliméricos normales,  $N_1$ , sigue tendencias similares a aquellas exhibidas por  $\tau_{xx}$ , con una reducción neta en magnitud al incrementar la elasticidad del fluido. Tal respuesta puede ser atribuida al decaimiento de la viscosidad extensional del fluido Pom-Pom modelado. Las líneas de contorno se muestran en la Figura 5.9. Debido a que en este estudio, el parámetro de anisotropía se fija como  $\alpha = 0.15$ , se obtiene una segunda diferencia de esfuerzos,  $N_2$ , distinta a cero aún en regiones dominadas claramente por deformación cortante (ver Figura 5.10). Hay cierta semejanza entre el campo  $N_2$  con el crecimiento y curvatura de los vórtices al incrementar  $We$ , esto para los dos niveles de inercia manejados aquí. Esta respuesta ha sido detectada previamente por Aboubacar et al. [7], al trabajar con fluidos EPTT.

El componente extensional del tensor de rapidez de deformación,  $d_{xx}$ , exhibe dos regiones de valores extremos: un máximo positivo localizado justo antes de la contracción a lo largo de la línea de simetría, y otro con valores de mayor magnitud, pero negativos, en la sección anterior a la esquina entrante. Como se observa en la Figura 5.11, el efecto de inercia y elasticidad no es significativo en el perfil  $d_{xx}$ ; sólo se aprecia un efecto pequeño en la zona del vórtice, donde la magnitud de este componente del tensor de deformación es cercana a cero. Valores extremos en  $d_{xy}$  están localizados en la zona cercana a la esquina de la contracción. Para este componente cortante, se distinguen dos regiones en las cuales se detecta cierta influencia de la elasticidad: la primera es la zona- $d_{xy}$  negativa situada justo antes de la esquina entrante (región entre las dos líneas de contorno donde  $d_{xy} = 0$  en la Figura 5.12); ahí se observa una reducción en tamaño, pero sólo para el caso sin inercia. La otra zona en donde existe cierta influencia de  $We$  se localiza arriba de la pared del canal de salida, en donde también se detecta una reducción en este componente (cortante) del tensor de rapidez de deformación; sin embargo, en este caso la variación se puede observar a ambos valores del número de Reynolds.

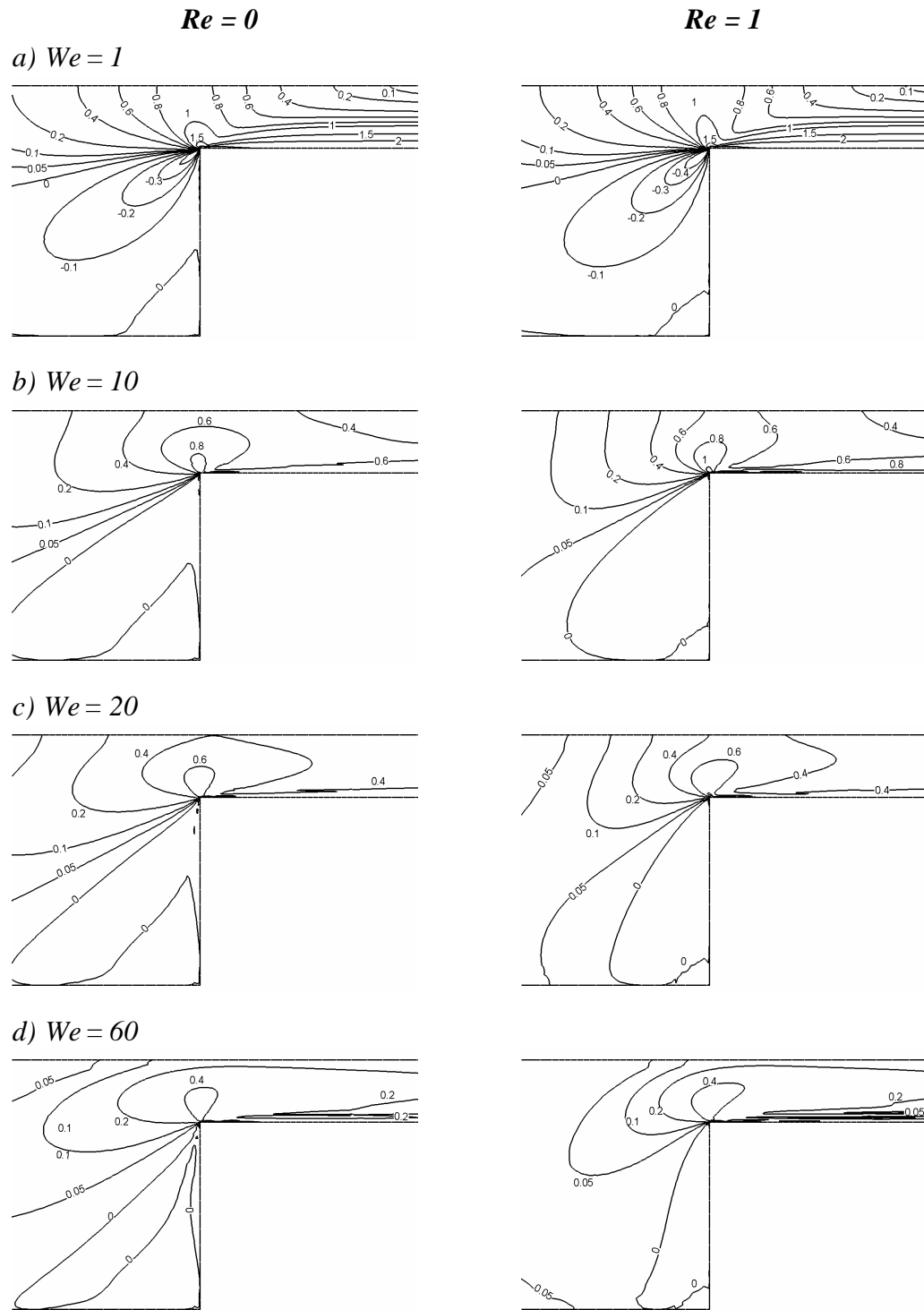


Figura 5.7. Contornos de esfuerzo  $\tau_{vx}$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .

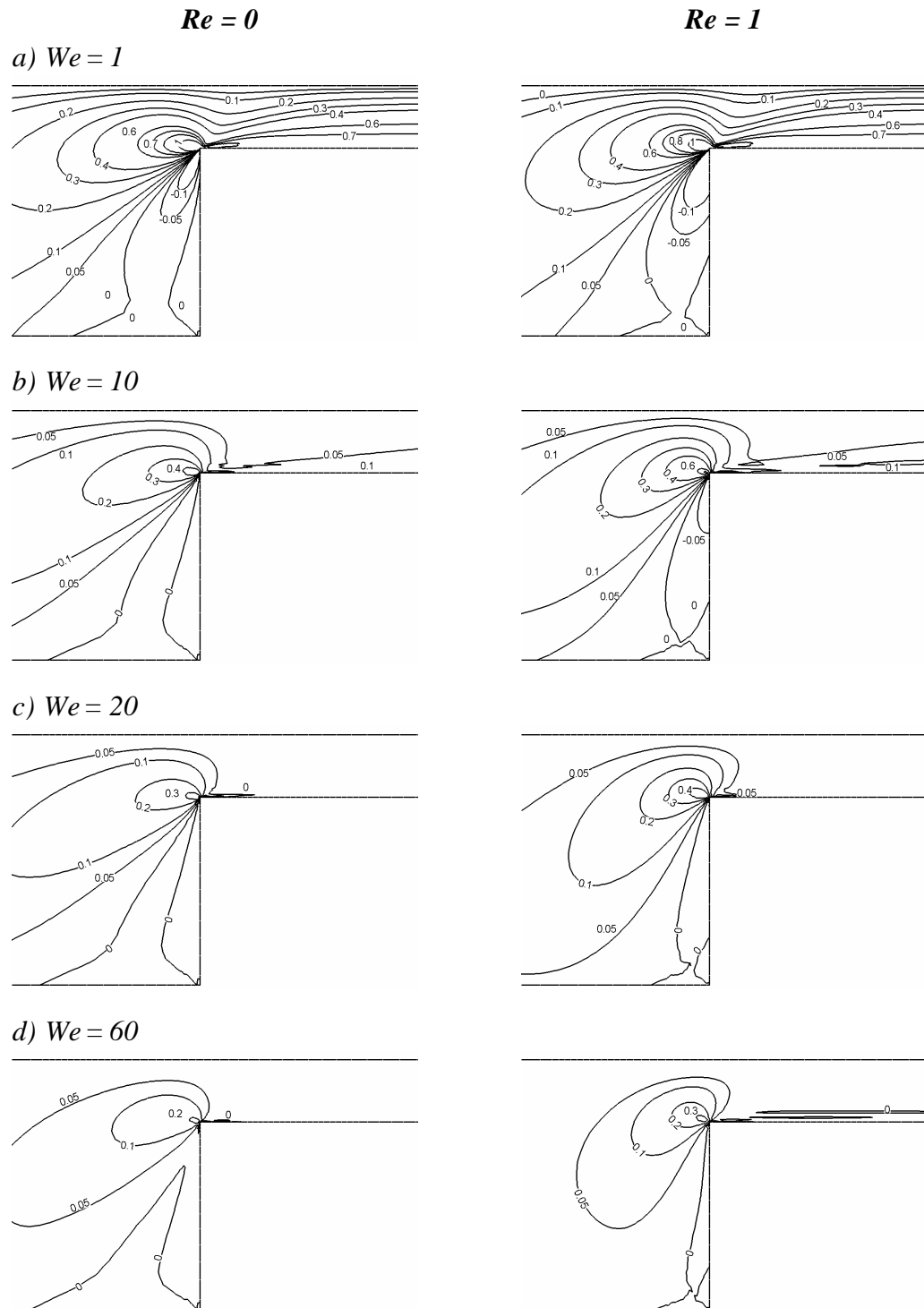


Figura 5.8. Contornos de esfuerzo  $\tau_{xy}$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .

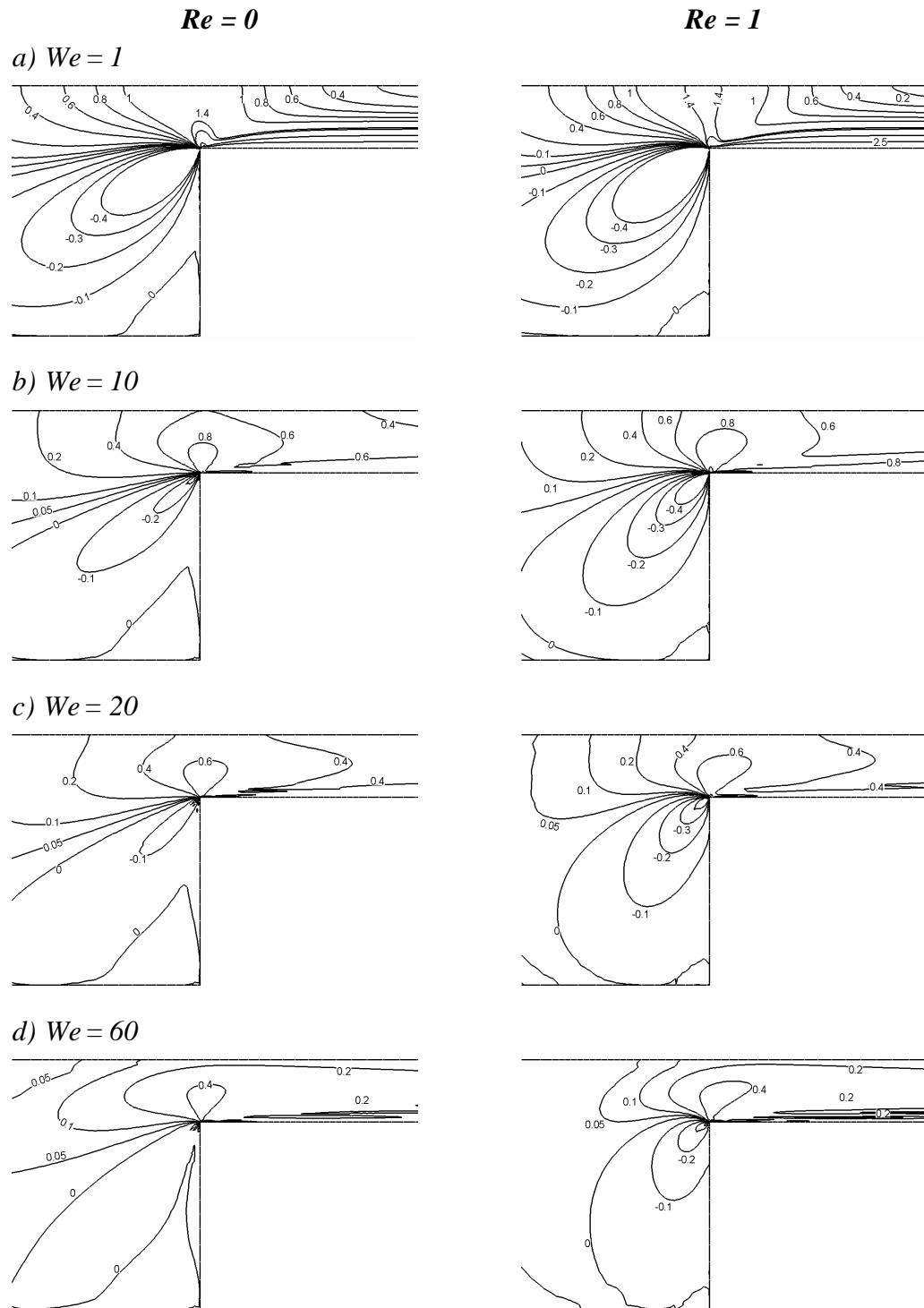


Figura 5.9. Contornos  $N_1$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .

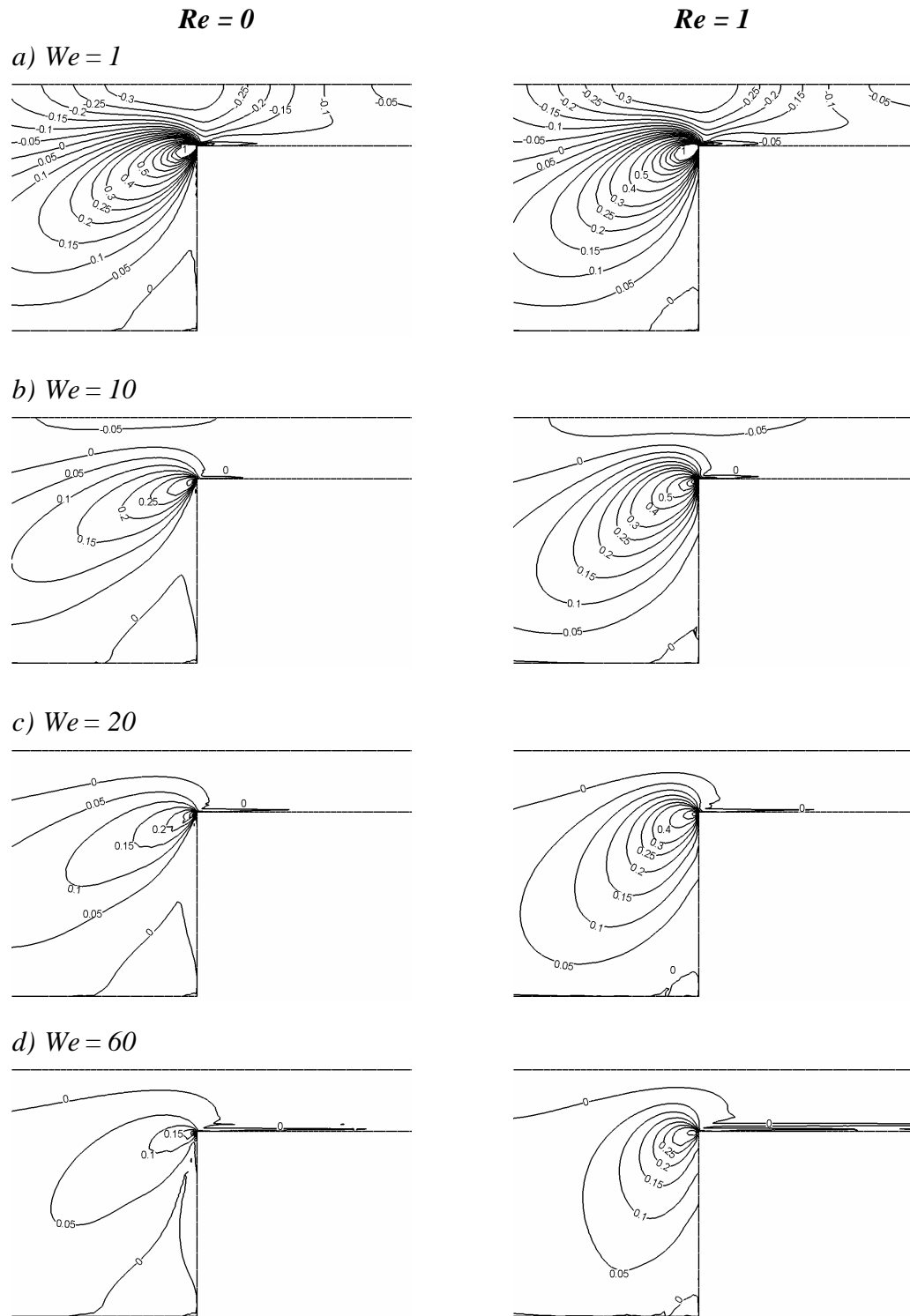


Figura 5.10. Contornos  $N_2$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .

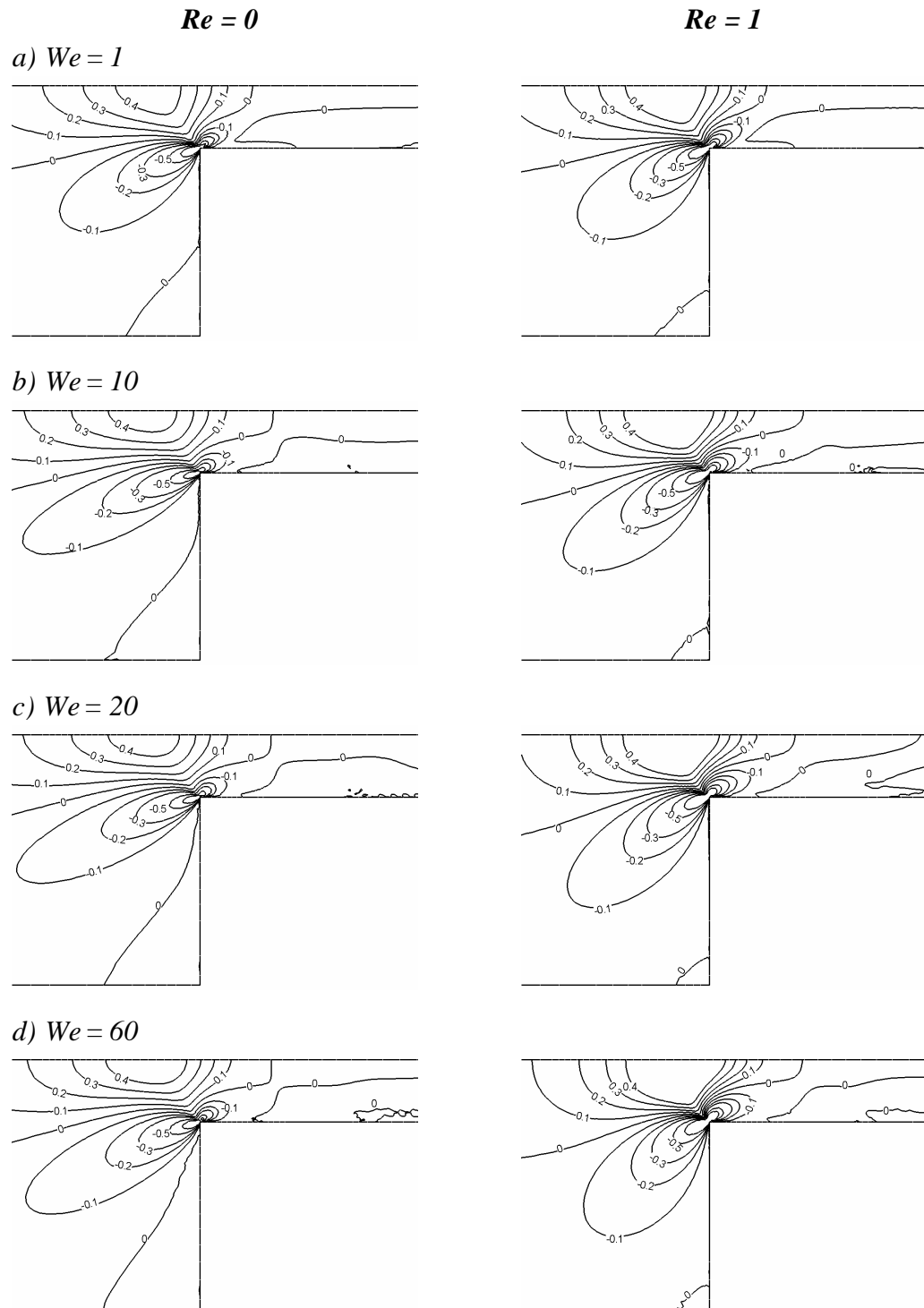


Figura 5.11. Contornos rapidez de deformación  $d_{xx}$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .



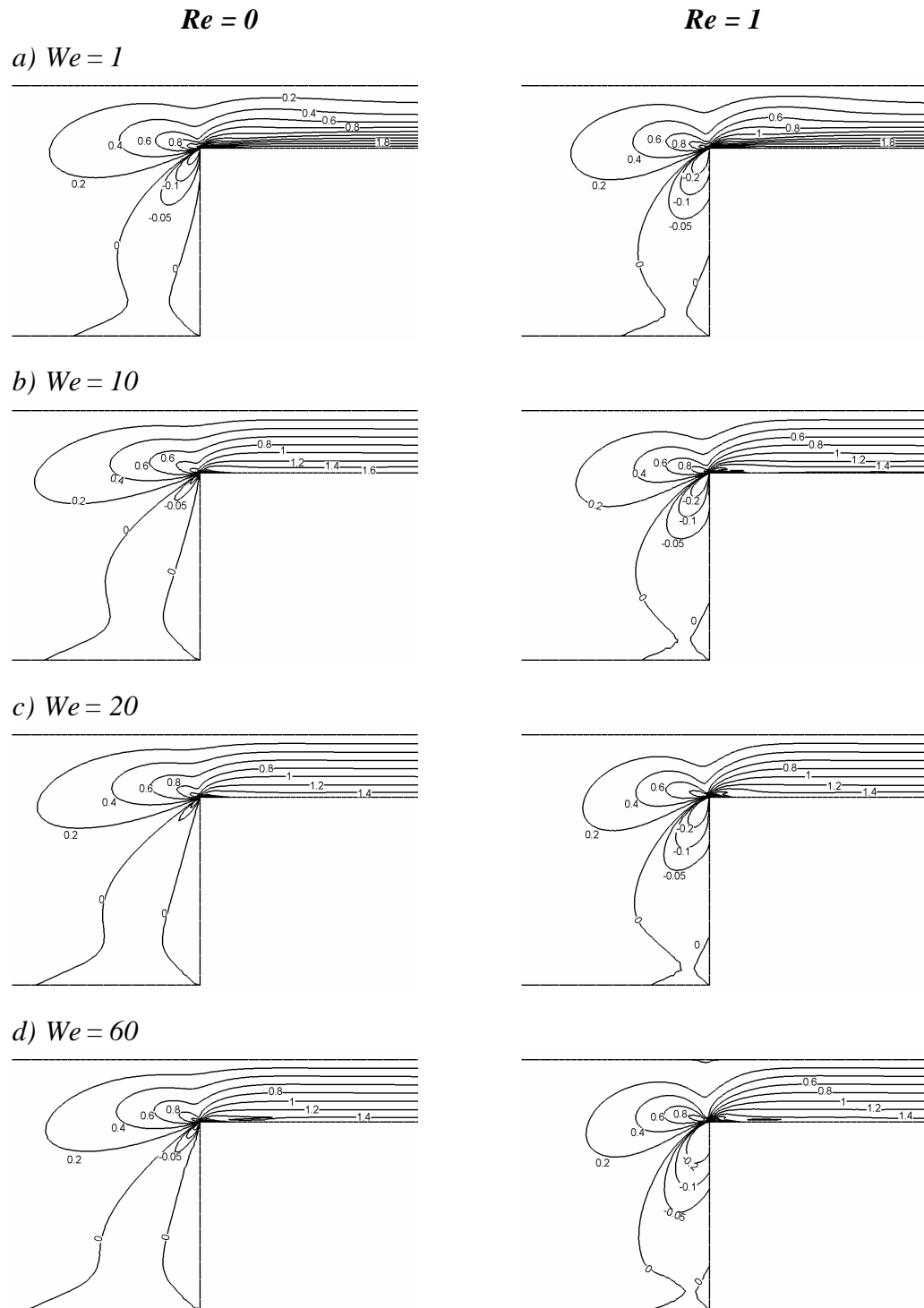


Figura 5.12. Contornos rapidez de deformación  $d_{xy}$ , incremento en  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $Re = 0$  y  $Re = 1$ .

Nótese que las regiones de más alta extensión molecular,  $\lambda$ , de la sección de entrada a la contracción, están localizadas donde ocurren valores máximos del componente  $d_{xx}$  (máximo negativo en la esquina abrupta). En la Tabla 5.4 se reportan los valores de estiramiento y la primera diferencia de esfuerzos normales en puntos seleccionados (ver Figura 5.13), esto con el fin de permitir una comparación más detallada del desempeño de ambos esquemas numéricos empleados aquí.

Tabla 5.4. Valores de estiramiento ( $\lambda$ ) y primer diferencia de esfuerzos normales ( $N_1$ ) en los puntos seleccionados,  $Re=0$  (contracción localizada en  $x = 0.0, y = 3.0$ )

<i>Puntos muestra</i>	<i>We</i>	<i>f<sub>e</sub>/f<sub>v</sub></i>			<b>SLFV</b>		
		<i>1</i>	<i>10</i>	<i>20</i>	<i>1</i>	<i>10</i>	<i>20</i>
<b>A</b> ( $x = 19.9, y = 3.78$ )	$\lambda$	1.01	1.16	1.35	1.01	1.18	1.35
	$N_1$	0.13	0.22	0.2	0.14	0.23	0.2
<b>B</b> ( $x = 19.9, y = 3.50$ )	$\lambda$	1.05	1.5	1.72	1.06	1.55	1.7
	$N_1$	0.76	0.53	0.37	0.81	0.58	0.37
<b>C</b> ( $x = 9.99, y = 3.78$ )	$\lambda$	1.05	1.49	1.65	1.06	1.55	1.71
	$N_1$	0.76	0.52	0.34	0.8	0.57	0.37
<b>D</b> ( $x = -1.94, y = 3.07$ )	$\lambda$	1.01	1.26	1.45	1.01	1.36	1.55
	$N_1$	0.24	0.21	0.18	0.25	0.27	0.2
<b>E</b> ( $x = -2.00, y = 2.07$ )	$\lambda$	1.01	1.23	1.41	1.01	1.26	1.39
	$N_1$	-0.23	0.04	0.02	-0.19	0.03	0.05

### 5.3.3 Caída de presión y un modelo Pom-Pom alternativo

Se muestra en la Figura 5.14 la caída de presión como función del número de Weissenberg para dos niveles de inercia. Esta variable se normaliza mediante la caída de presión newtoniana con la misma viscosidad a cero rapidez de corte ( $\eta_0$ ) que el fluido viscoelástico, ambos con el mismo flujo. Debido a que el fluido SXPP seleccionado presenta adelgazamiento al corte,  $\Delta p / \Delta p_{newt}$  decae monótonamente con el incremento en elasticidad, pareciendo alcanzar un valor asintótico en  $We = 20$ . Este decaimiento es menos

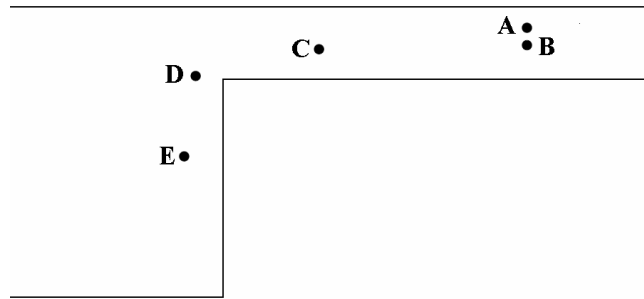


Figura 5.13. Puntos de observación usados en la contracción 4:1.

abrupto (ligeramente) para  $Re = 1$ . No se detecta diferencia alguna entre ambas soluciones con los algoritmos  $fe/fv$  y SLFV.

Con el fin de implementar el modelo DXPP en el código de elemento espectral utilizado por van Os y Phillips [36], los autores se vieron en la necesidad de modificar este modelo. En la versión Pom-Pom extendida de dos ecuaciones, el estiramiento o extensión molecular es descrito por una ecuación diferencial parcial y, en vez de resolver por el esfuerzo extra, esta formulación se resuelve para el tensor de orientación  $\mathbf{S}$ . Después, se debe evaluar una ecuación explícita para extraer  $\boldsymbol{\tau}$ . Mediante un cambio de variable ( $\mathbf{A} = \lambda^2 \mathbf{S}$ ) hecho en el modelo doble, se obtiene un modelo híbrido de los modelos SXPP y DXPP (ver sección 2.3.3). Esta formulación alternativa se implementó en la referencia [36]. En este trabajo, la modificación se le denominó como el modelo  $\lambda^2$ XPP (sección 2.3.3a).

La Figura 5.15 presenta la comparación en las predicciones de velocidad y extensión molecular en flujo Poiseuille, calculada con el esquema numérico  $fe/fv$  para ambos modelos SXPP y  $\lambda^2$ XPP. La comparación se realizó a un nivel de elasticidad alto ( $We = 10$ ), y se puede apreciar que ambos modelos arrojan soluciones tan semejantes que no es posible identificar desviaciones en la gráfica correspondiente.

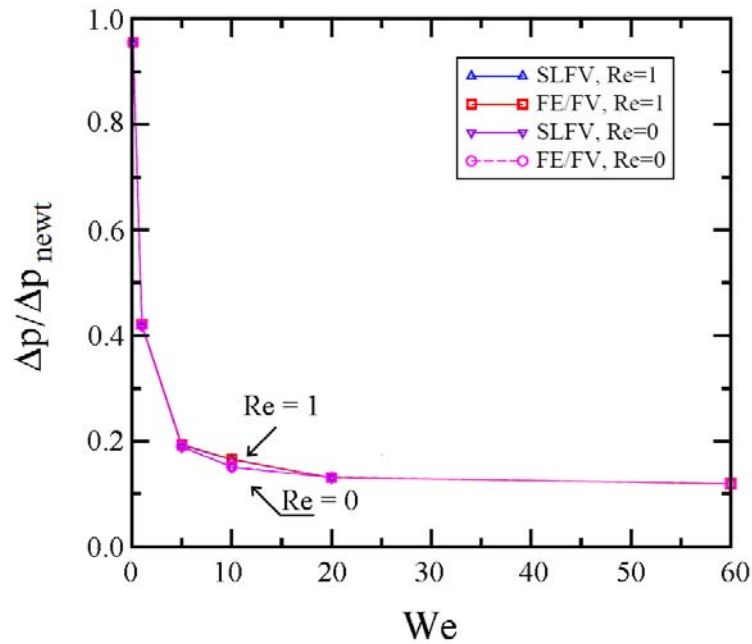


Figura 5.14. Caída de presión vs.  $We$ :  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ; esquemas SLFV y  $fe/fv$ ,  $Re = 0$  y  $1$ .

Para el flujo en la contracción 4:1, los resultados en la línea central (plano de simetría) se muestran en la Figura 5.16. De nuevo, las diferencias entre ambos modelos son imperceptibles, aún en los valores máximos. El esquema numérico utilizado es el híbrido  $fe/fv$ .

## 5.4 Conclusiones

El problema estudiado en este capítulo fue el flujo a través de una contracción abrupta 4:1, de un fluido que exhibe el fenómeno de adelgazamiento al corte y bajo endurecimiento seguido de ablandamiento pronunciado en flujo extensional. La respuesta en flujo complejo en esta geometría se explica en términos de las propiedades reométricas presentadas por el fluido XPP aquí seleccionado.

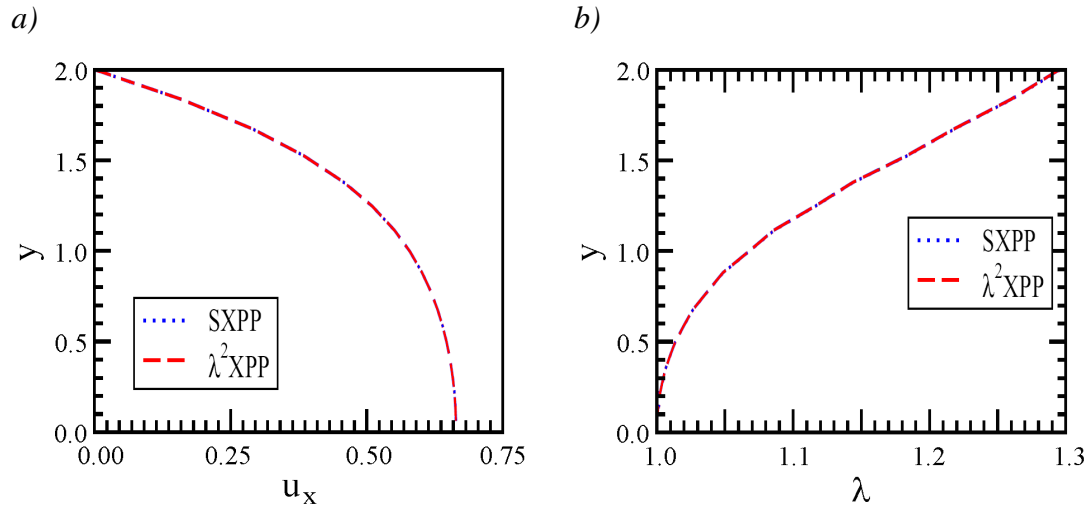


Figura 5.15. Perfiles SXPP vs.  $\lambda^2$ XPP en flujo planar (sin contracción) con el esquema  $fe/fv$ :  $We = 10$ ,  $Re = 1$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 2$ ,  $\alpha = 0.15$ ; a) velocidad, b) estiramiento.

Se presentó la comparación entre dos esquemas de volumen finito contrastantes, ambos aplicados a la solución de este flujo complejo que ha sido extensamente utilizado como de prueba. El primer algoritmo de solución es un esquema híbrido de elemento finito/volumen finito, con tratamiento consistente de los términos fuente y de flux. El segundo es un algoritmo basado únicamente en el método de volumen finito con un tratamiento semilagrangiano de los términos convectivos; las contribuciones de los pasos de tiempo previos son evaluados con un procedimiento de ponderación de área de segundo orden. Se reportó información sobre la convergencia con el grado de refinamiento del mallado, para esto se usaron datos de dinámica de vórtices. Ambos esquemas arrojan resultados altamente acordes entre sí.

Para el caso  $Re = 0$ , el tamaño de celda del vórtice crece al incrementar el número de Weissenberg; de igual manera, la intensidad del vórtice también se incrementa hasta  $We = 3$ , después del cual se observa un decaimiento en intensidad. El efecto de la inercia es opuesto, el tamaño de celda disminuye monótonamente para  $Re = 1$ . Inicialmente,

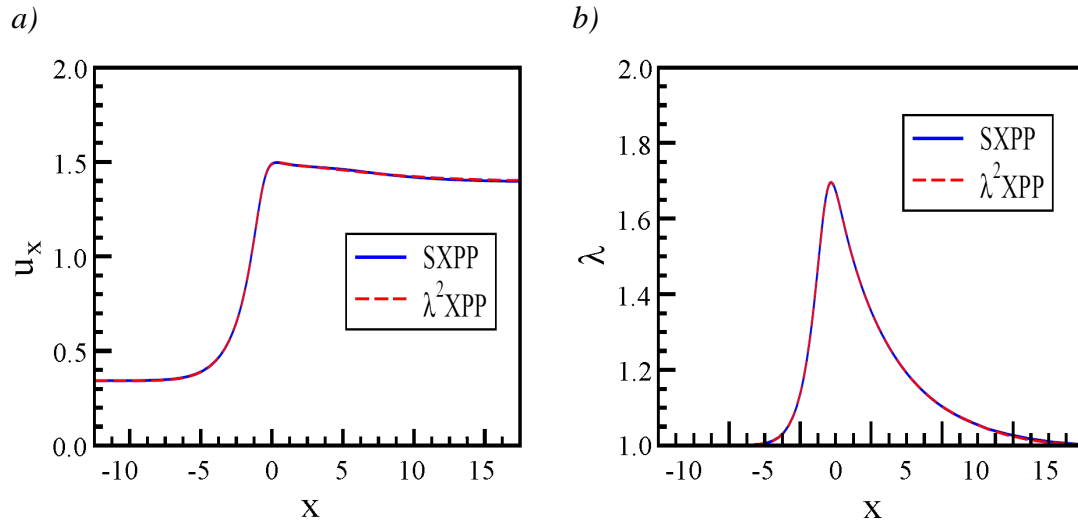


Figura 5.16. Resultados SXPP vs.  $\lambda^2$ XPP en la línea de simetría para la contracción abrupta 4:1, con el esquema  $fe/fv$ :  $We = 10$ ,  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $q = 5$ ,  $\alpha = 0.15$ ; a) velocidad, b) estiramiento.

se observa un muy pequeño incremento de  $We = 0.1$  hasta 0.5, seguido por un decaimiento. La respuesta del modelo SXPP está acorde, de manera cualitativa, con la presentada por el modelo PTT ( $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ ), modelo con propiedades reométricas semejantes, tanto en flujo cortante como extensional; de hecho, los valores de adelgazamiento en ambas deformaciones son prácticamente iguales. Se pudo identificar la zona en donde los efectos extensionales dominan sobre los de corte, esto es en una zona en forma de banda diagonal a la entrada de la contracción. En esta región se espera que la extensión molecular alcance valores relativamente grandes. Bishko et al. [66] fueron los primeros en reconocer estas zonas. Se tiene también una sección de fluido, arriba de la pared del canal de salida, en donde los efectos cortantes dominan y el nivel de deformación extensional es prácticamente nulo.

## CAPÍTULO 6

### Influencia de la Viscosidad Extensional en el Modelado Pom-Pom\*

La clase de modelos Pom-Pom ofrece la ventaja de que al incrementar el número de brazos,  $q$ , unidos al esqueleto de la molécula, la viscosidad extensional,  $\eta_e$ , puede incrementarse considerablemente sin provocar un cambio significativo en la correspondiente viscosidad cortante,  $\eta_s$ . Esto es válido para un cierto intervalo de valores de rapidez de deformación; el tamaño del intervalo es afectado de manera importante por el cociente de viscosidades,  $\beta$ . En este capítulo, se estudia la influencia de la viscosidad extensional en flujo complejo (que involucra tanto deformación extensional como cortante). El problema a resolver es la contracción 4:1 con esquina redondeada. Se presenta de manera adicional, una comparación con la respuesta del modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner (EPTT), modelo del que se utilizaron parámetros que arrojaran semejante

---

\* Material de este capítulo ha sido arreglado para el artículo “Extensional response of the pom-pom model through planar contraction flows for branched polymer melts” por J. P. Aguayo, H. R. Tamaddon-Jahromi y M. F. Webster, y publicado en *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **134** (2006) 105-126.

comportamiento reométrico con los modelos Pom-Pom aquí utilizados. Se investiga la estabilidad del algoritmo híbrido de elemento finito/volumen finito ( $fe/fv$ ) para el modelo Pom-Pom extendido de una ecuación, esto para un intervalo dado de números de Weissenberg,  $We$ . Considerando los valores de rapidez de deformación obtenidos en este tipo de flujo en particular, se pretende hacer distinción en si los fluidos alcanzan la reducción de viscosidad en extensión o sólo el endurecimiento. Esto puede determinarse en función del comportamiento de los vórtices, estiramiento molecular, esfuerzo y caída de presión. Se presta especial atención al parámetro de anisotropía introducido en las versiones extendidas Pom-Pom.

## **6.1 Introducción**

En el capítulo 5, se consideró el flujo de un fluido SXPP a través de una contracción rectangular 4:1 con esquina abrupta. En este capítulo, se extiende el alcance para observar la influencia de la viscosidad extensional en este flujo complejo. La esquina abrupta es substituida por una redondeada, con el fin de incrementar el nivel de elasticidad alcanzado,  $We_{crit}$ . Al hacer esto, es probable que la respuesta extensional pueda estudiarse en un intervalo más amplio de números de Weissenberg.

El algoritmo híbrido de elemento finito/volumen finito ( $fe/fv$ ) utilizado aquí ha sido aplicado con éxito para simular modelos fenomenológicos, en particular, el modelo con viscosidad cortante constante Oldroyd-B y una variedad de versiones del modelo Phan-Thien/Tanner, tanto en flujo Poiseuille transitorio (referencia [58]) como en contracciones cilíndricas y rectangulares 4:1 (referencias [7,8]). La concordancia de resultados numéricos con observaciones experimentales es positiva, de manera cualitativa; en particular se mencionan fenómenos tales como supresión de vórtices para fluidos de Boger



en contracciones rectangulares y crecimiento de vórtices en la contraparte cilíndrica [7]<sup>†</sup>. Esto aplica también a tendencias de dinámica de vórtices en términos de la estructura y tamaño de celda para fluidos con adelgazamiento al corte, con respuesta reométrica comparable a la observada por mezclas de polietileno lineal de baja densidad (LLDPE) y polietileno de baja densidad (LDPE) [88].

Con el fin de obtener comparaciones cuantitativamente favorables con datos experimentales, se deben considerar modelos capaces de representar adecuadamente la respuesta reométrica de fluidos reales. Modelos como PTT, Giesekus y Kaye-Bernstein-Kearsley-Zapas (K-BKZ) son ecuaciones constitutivas fenomenológicas usadas comúnmente para modelar el comportamiento de fundidos poliméricos. La viscosidad extensional en el modelo de Giesekus presenta incremento al elevar la rapidez de extensión hasta que se alcanza un valor asintótico (meseta). Mitsoulis et al. [29] emplearon una modificación multimodal del modelo K-BKZ para simular el flujo de fundido LDPE a través de contracciones. Estos autores predijeron exitosamente el tamaño de celda de vórtice, considerando ambos, rapidez de corte y extensión para hacer su comparación. Los modelos PTT pueden reproducir una variedad de funciones materiales en deformaciones extensionales uniaxiales y planares (ver secciones 2.3.2 y 6.3.3); para esto, se puede variar el parámetro  $\varepsilon_{PTT}$  que controla el nivel de extensión del modelo, sin embargo, esto también significa un cambio en la viscosidad cortante (ver Matallah et al. [89]).

Los modelos Pom-Pom extendidos, propuestos por Verbeeten et al. [2], son capaces de reproducir la respuesta de sistemas de polímeros en flujos reométricos. Estas versiones son derivadas del modelo cinético Pom-Pom, introducido por McLeish y Larson [1]

---

<sup>†</sup> Los fluidos de Boger son sistemas, altamente viscoelásticos, con un contenido tan bajo del componente causante de las propiedades viscoelásticas, que no se detecta ninguna variación de la viscosidad cortante, es decir, esta viscosidad es la del disolvente, y se mantiene como independiente de la rapidez de corte; sin embargo, modelos tales como Oldroyd-B y FENE-CR, que predicen viscosidad cortante constante, se pueden usar para simular fluidos de Boger aún con alto contenido de material viscoelástico, tal como se empleó en la referencia [2].

y está basado en la dinámica de movimiento molecular reptante de una molécula lineal idealizada con el mismo número de brazos unidos en ambos extremos (ver Figura 2.3). Una característica importante del modelo SXPP es la capacidad de incrementar la viscosidad extensional afectando sólo de manera ligera la viscosidad cortante, esto para un intervalo de valores de rapidez de deformación y valores de cocientes de viscosidad,  $\beta$  (ver Figura 2.5).

Inkson et al. [32] encontraron que utilizando una implementación multimodal de la versión Pom-Pom con una distribución razonable de número de brazos, se pueden reproducir las funciones materiales de un fundido LDPE, cubriendo un intervalo de cuatro décadas en valores de rapidez de deformación. Zatloukal [90] obtuvo un ajuste excelente de las viscosidades cortante y extensional en estado estacionario; esto para tres diferentes fundidos poliméricos, siendo LDPE, LLDPE catalizado con metalloceno (mLLDPE) y butiral de polivinilo (PVB). El desempeño del modelo XPP fue probado contra modificaciones a los modelos White-Metzner y Leonov. Bogaerds et al. [91] encontraron que fijando valores bajos del parámetro de anisotropía  $\alpha$ , i.e. teniendo una segunda diferencia de esfuerzos normales en flujo cortante ( $N_2$ ) distinta a cero, se obtiene un efecto estabilizador en flujos Couette y Poiseuille. Existen diferencias significativas entre las respuestas dinámicas de las funciones materiales de los modelos Phan-Thien/Tanner exponencial (EPTT) y XPP. Tanner y Nasserri [92] propusieron una nueva modificación al modelo XPP, la cual reproduce el comportamiento del modelo SXPP; para esta modificación, estos autores ignoraron la anisotropía y el término  $[f(\boldsymbol{\tau}) - 1]\mathbf{I}$  de la ecuación de esfuerzo. El modelo resultante es considerado como una nueva versión Phan-Thien/Tanner y es denominado como el modelo PTT-XPP. Una característica nueva de este modelo es que el adelgazamiento es más lento, o bien está retrasado al compararse con el predicho por la versión XPP.

Bishko et al. [66] simularon el flujo transitorio a través de una contracción 4:1 rectangular, utilizando el modelo original Pom-Pom. Estos autores concluyeron que al incrementar el grado de ramificación de las moléculas, en este caso con el número de brazos  $q$ , se producen vórtices más grandes a un valor de Weissenberg dado. Esta conclusión está acorde a observaciones experimentales, en donde se detectaron vórtices de mayor tamaño para fundidos de polietileno ramificado (que pueden representarse por valores más altos de  $q$ ) que para un sistema lineal del mismo polímero. Clemeur et al. [35] presentaron una versión alternativa a los modelos Pom-Pom, llamado modelo convectivo doble Pom-Pom (Double-Convected Pom-Pom o DCP) y, en un estudio posterior [93], compararon las soluciones numéricas en flujo a través de contracciones rectangulares en términos de mediciones de birrefringencia de un fundido LDPE, obteniendo una comparación cuantitativamente adecuada. Verbeeten et al. [37] reportaron también, comparaciones excelentes con observaciones experimentales para LDPE fundido, en flujo a través de un dispositivo de flujo cruzado (cross-slot device), también lo hicieron para un flujo alrededor de un cilindro [39] y para una contracción 3.29:1 planar [37]. En las referencias [37,39], el método numérico utilizado fue de elemento finito, con la técnica de separación del esfuerzo elástico-viscoso, en combinación con un algoritmo discontinuo de Galerkin (DEVSS/DG). Sin embargo, es necesario indicar que se obtuvieron valores no lógicos del estiramiento molecular  $\lambda$ ; esto ocurrió en los puntos de estancamiento en el flujo alrededor del cilindro y cerca de la esquina abrupta en el flujo por la contracción. La convergencia numérica se mejoró al introducir la versión extendida Pom-Pom modificada (mXPP), modelo que difiere de la versión SXPP únicamente en la función extra  $f(\boldsymbol{\tau})$ , para esto, ver ecuación (2.42).

Las soluciones en estado estacionario para una implementación XPP multimodal en una contracción planar 3D, fueron obtenidas por Sirakov et al. [85]. La comparación, en términos de tamaño de vórtice para el flujo de LDPE fundido, se puede calificar como satisfactoria. Sirakov et al. [85] modificaron el modelo SXPP con el fin de mejorar la

estabilidad; para esto fijaron en cero al parámetro de anisotropía ( $\alpha = 0$ ), y además, propusieron una modificación para la ecuación de la extensión molecular, la cual elimina la posibilidad de error al presentarse valores negativos de  $tr(\boldsymbol{\tau})$ , los cuales ocurren numéricamente con la versión SXPP. Wapperom y Keunings [94] resolvieron el flujo a través de una contracción/expansión para las versiones Pom-Pom integral y diferencial. En su trabajo, se detectaron valores no físicos de la extensión molecular ( $\lambda < 1$ ) cerca de la restricción.

## 6.2 Especificación del problema

El problema considerado aquí es el flujo lento a través de una contracción rectangular 4:1, en donde la esquina entrante presenta cierta curvatura (redondeada). La Figura 6.1 es de una representación esquemática de este flujo complejo en particular. Se presenta también una ampliificación cerca de la zona de la contracción de los tres mallados (con diferente grado de refinamiento) no estructurados con elementos triangulares que se utilizan en el presente trabajo, esto se muestra en la Figura 6.2.

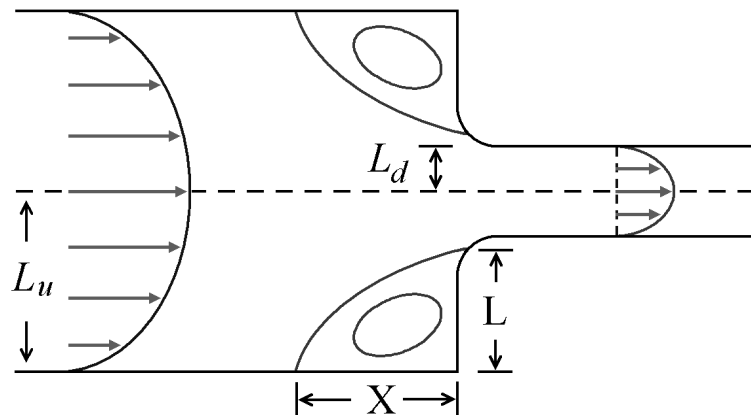
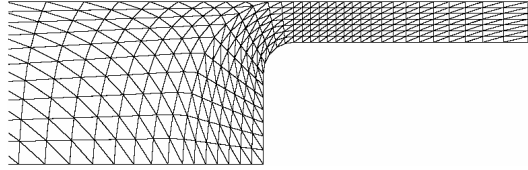
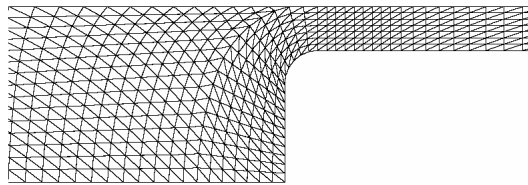


Figura 6.1. Esquema de la contracción 4:1 con esquina redondeada.

*a) Grueso*



*b) Medio*



*c) Fino*

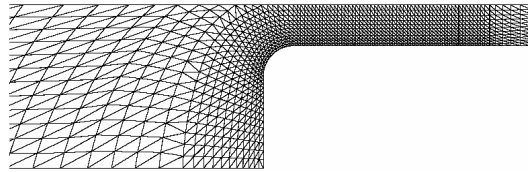


Figura 6.2. Mallados no estructurados de elemento finito en la zona de la contracción.

Las características generales acerca del refinamiento de cada mallado se presentan en la Tabla 6.1. Las longitudes antes y después de la contracción son  $27.5L_d$  y  $49L_d$ , respectivamente (ver Figura 6.1); la curvatura de la esquina re-entrante es de  $\frac{3}{4}L_d$ . La contracción está localizada en  $x = 27.5$  unidades de longitud.

Para especificar las condiciones de frontera al inicio de la geometría, se utiliza la solución transitoria del modelo Oldroyd-B en flujo Poiseuille, teniendo así la solución analítica para la velocidad,  $u_x$ , de Waters y King [62]. La longitud del canal de entrada es lo suficientemente grande para obtener un perfil SXPP completamente desarrollado antes de que el fluido se encuentre en la sección de entrada de la contracción. No existe

hasta el momento solución analítica para el flujo transitorio o estacionario del modelo SXPP (ni para otras versiones Pom-Pom) en flujo Poiseuille. Una manera alternativa de especificar las condiciones de frontera al inicio de la geometría consiste en usar la solución numérica de un perfil completamente desarrollado para un canal con la misma área de flujo (ver capítulo 4 para más detalles). Adicionalmente, se especifica la condición de adherencia a lo largo de las paredes. El esfuerzo a la entrada se obtiene mediante la resolución de la ecuación diferencial ordinaria del flujo a través de un canal (flujo Poiseuille estacionario).

Como se mencionó previamente, la viscosidad extensional se varía ajustando el número de brazos en ambos extremos del esqueleto de la molécula Pom-Pom. Las soluciones se calculan a cuatro diferentes valores de  $q$ , con la notación  $q_i$ , para  $i = \{2,5,10,15\}$ . Los otros parámetros se fijan como  $Re \rightarrow 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$  y  $\alpha = 0.15$ . Nótese que el fluido- $q_2$  corresponde al caso base de este estudio. Se presenta también una sección con resultados variando el parámetro de anisotropía y una comparación entre las soluciones Pom-Pom y EPTT, exhibiendo ambos modelos semejantes niveles de endurecimiento y adelgazamiento extensional. Para poder ajustar la viscosidad extensional del modelo Pom-Pom a la del modelo EPTT, se variaron los parámetros  $q$  y  $\varepsilon$ .

Tabla 6.1. Características de los diferentes mallados

<b><i>Mallado</i></b>	<b><i>Elementos/ volumen</i></b>	<b><i>Nodos</i></b>	<b><i>Grados de libertad (<math>\mathbf{u}, p, \boldsymbol{\tau}</math>)</i></b>	<b><i><math>R_{min}</math></i></b>
<b><i>(4:1)<sub>a</sub></i></b>	1086	2325	14570	0.0296
<b><i>(4:1)<sub>b</sub></i></b>	1626	3433	21502	0.0170
<b><i>(4:1)<sub>c</sub></i></b>	2693	5652	35392	0.0097

Se utilizó la técnica de continuación en números de Weissenberg para obtener niveles de elasticidad altos. Las simulaciones se iniciaron con  $We = 0.1$ , incrementando (típicamente) a  $We = 0.5, 1, 3, 5, 10, 15, 20, \dots$  hasta que se pierda la convergencia cerca del nivel crítico  $We_{crit}$ . El tamaño del celda se reporta ahora en su longitud paralela al flujo ( $X$ ) y perpendicular ( $L$ ). Como criterio para determinar el éxito de un paso de tiempo en la solución transitoria, se utiliza la norma- $L_2$  de dos pasos sucesivos, con una tolerancia de  $10^{-7}$ .

### **6.3 Resultados numéricos**

En el presente capítulo se dividen los resultados numéricos en tres secciones. La primera consiste en los resultados de la influencia al incrementar la viscosidad extensional por medio de incrementos en el número de brazos  $q$ ; los correspondientes resultados se analizan en términos de dinámica de vórtices, esfuerzo y estiramiento molecular. La segunda sección, considera la variación del parámetro de anisotropía, y en la tercera, se presenta la comparación de las predicciones del modelo SXPP con las de dos diferentes fluidos EPTT, ambos modelos con niveles semejantes de endurecimiento extensional y valores máximos de la relación de Trouton. La influencia de  $q$  en la reología del modelo SXPP se puede ver en la sección 2.5.

#### **6.3.1 Influencia de la variación del parámetro $q$ ( $\alpha = 0.15$ )**

Esta sección trata sobre la influencia que produce la variación de la viscosidad extensional en la estructura de flujo. Para cada valor de  $q$  dado, se presentan las líneas de corriente en la zona de vórtices a diferentes niveles de elasticidad ( $We$ ), hasta que se pierda la convergencia numérica, cerca del  $We_{crit}$ . Estas líneas de corriente coinciden en este caso con la trayectoria que trazaría una partícula al fluir.

### 6.3.1a Número crítico de Weissenberg y dinámica de vórtices

Se encontró que al incrementar el grado de endurecimiento en la viscosidad extensional, se produce un decaimiento en el máximo valor de Weissenberg alcanzable por la simulación numérica,  $We_{crit}$ , ver por ejemplo referencias [49,77,95]. Por esto, el decaimiento en  $We_{crit}$  al “adicionar” más brazos en la molécula Pom-Pom puede ser anticipado. Para la selección de valores en este parámetro,  $q = \{2,5,10,15\}$ , los niveles críticos correspondientes son aproximadamente  $We_{crit} = \{60,25,13,12\}$ . En el caso del fluido  $q_2$ , el grado de endurecimiento en viscosidad extensional es prácticamente cero, aunque el ablandamiento es *retrasado* hasta un valor de rapidez de deformación adimensional de 0.2. Este es el fluido con el mayor  $We_{crit}$  (60) obtenido. El caso  $q_5$  muestra un incremento de alrededor de 50% en el máximo de viscosidad extensional, con respecto al fluido  $q_2$ . El nivel crítico de elasticidad se reduce a  $We_{crit} = 25$ . Al seguir los incrementos en los valores máximos de viscosidad extensional  $\eta_e$ , se observa que la reducción en  $We_{crit}$  continua, teniendo que para  $q = 10$  y  $q = 15$ , los valores  $We_{crit}$  son 13 y 12, respectivamente; lo anterior confirma las observaciones previamente mencionadas.

En la Figura 6.3a se presentan los valores simulados del tamaño de celda tanto paralelo al flujo ( $X$ ) como perpendicular ( $L$ ), en función de  $We$ . Sin embargo,  $X$  y  $L$  se hacen adimensionales de manera distinta a la utilizada en el capítulo 5. Aquí, el tamaño de celda se amplifica al multiplicarse por un factor igual a la separación del canal de entrada (dos veces la distancia de la pared a la línea de simetría), esto para facilitar la interpretación de los resultados. La información ( $X$  y  $L$ ) de vórtice se obtiene a partir de las líneas de corriente.

Se puede observar que  $X$  y  $L$  siguen tendencias similares, ambas variables incrementan su valor a mayor nivel de elasticidad. A cualquier  $We$  dado,  $L$  es mayor que  $X$ .

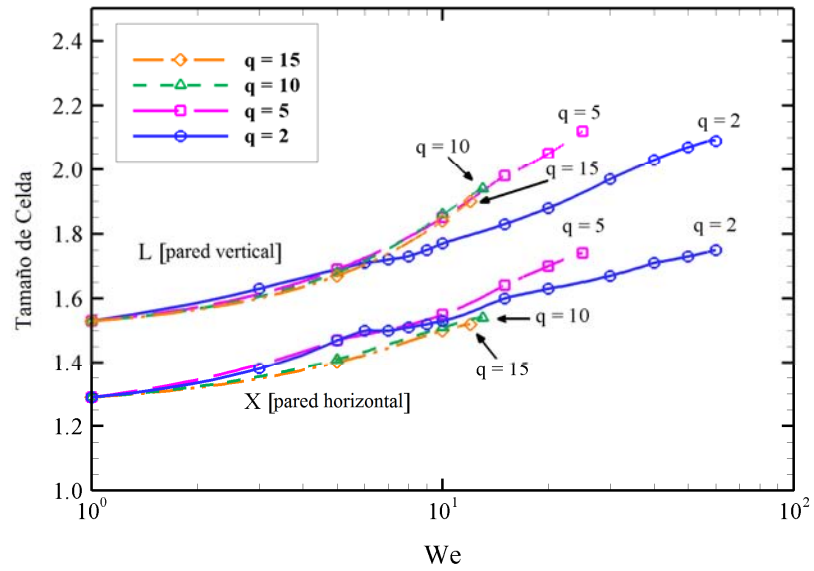


Este crecimiento en  $L$  es muy semejante para los cuatro diferentes valores de  $q$  utilizados, hasta un nivel de elasticidad de  $We = 8$ , punto en el cual el crecimiento de  $L$  para el fluido  $q_2$  empieza a ser menor que el de los otros fluidos con mayores valores de viscosidad extensional ( $q \geq 5$ ). La Figura 6.4 muestra las líneas de corriente para  $q = 2$  y  $q = 5$ , mientras que la Figura 6.5 para  $q = 10$  y  $q = 15$ . En general, se tiene que la línea de corriente que separa el vórtice del flujo a través de la contracción es prácticamente recta. Nótese que en éstos diagramas de líneas de corriente, ambos tamaños de celda están calibrados como en la sección 5.3.1.

El comportamiento de la intensidad de vórtice  $\psi_{sal}$  a diferentes números de Weissenberg se muestra en la Figura 6.3b. La respuesta para  $q = 5, 10$  y  $15$  siguen el mismo crecimiento a valores crecientes de  $We$ . El caso  $q = 2$  sigue la misma tendencia hasta  $We \leq 5$ ; después de este punto, se presenta un decaimiento monótono. Este decaimiento puede ser atribuido al régimen de ablandamiento en la viscosidad extensional ( $\eta_e$ ) que el fluido- $q_2$  experimenta. Para los casos  $q \geq 5$ , esta reducción en la viscosidad no es anticipada.

La viscosidad cortante ( $\eta_s$ ) no puede ser la responsable del comportamiento distinto del fluido  $q_2$ , debido a que esta viscosidad exhibe prácticamente los mismos valores para los distintos fluidos utilizados en esta sección (ver Figura 2.5). La posibilidad de modificar la respuesta en flujo extensional, sin afectar substancialmente la viscosidad de corte, es una característica importante de los modelos Pom-Pom, que no se presenta en otros modelos comúnmente usados como las distintas variantes PTT.

a)



b)

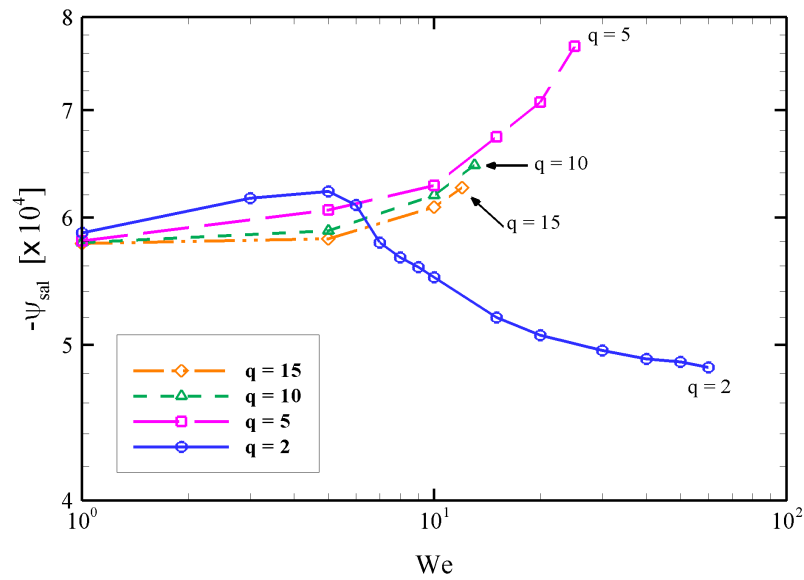


Figura 6.3. Vórtice dominante, incrementando  $We$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $q = 2, 5, 10, 15$ , a) tamaño de celda, b) intensidad.

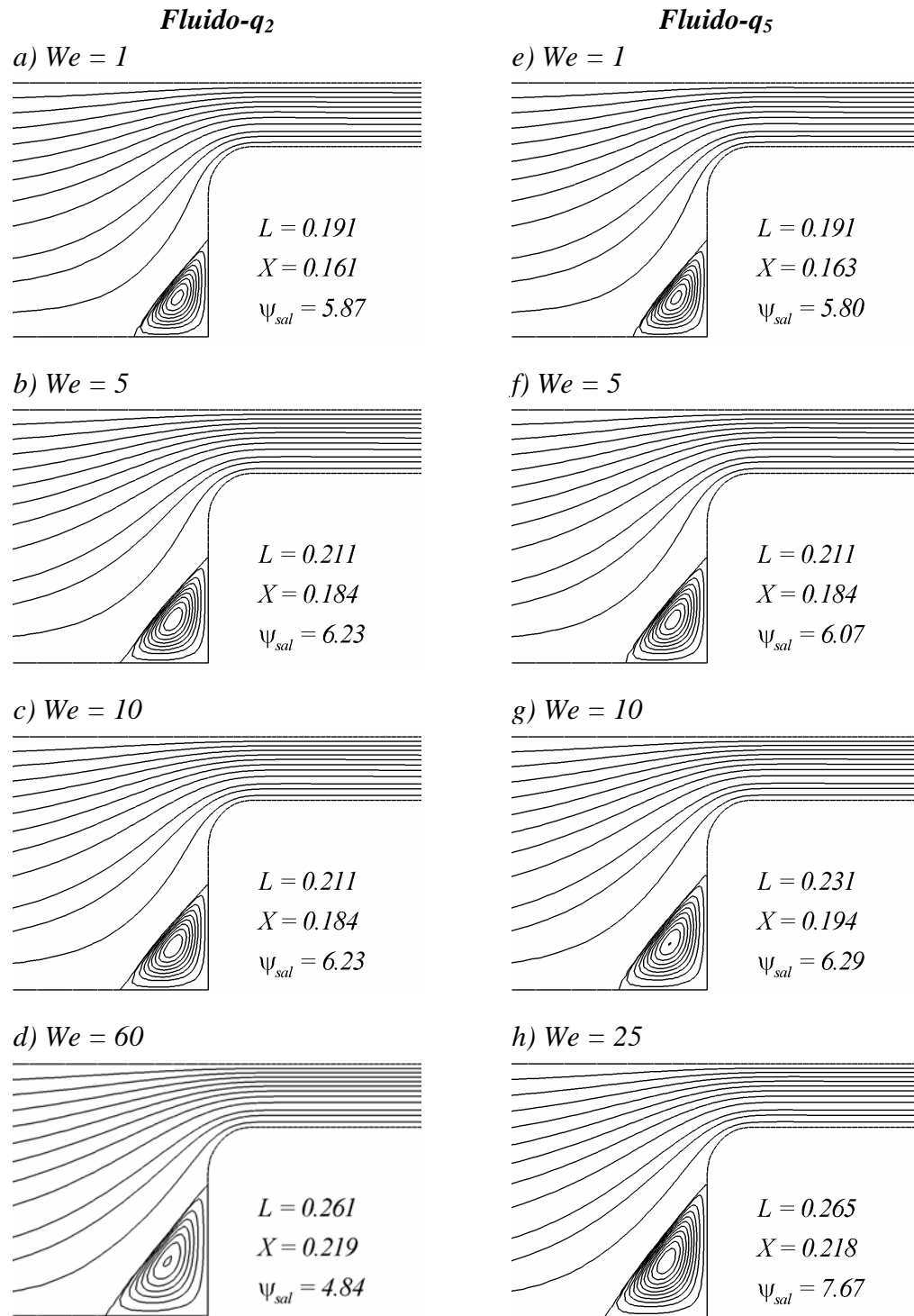


Figura 6.4. Función corriente y datos de Vórtices ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), incrementando  $We$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $q = 2$  y  $5$ .

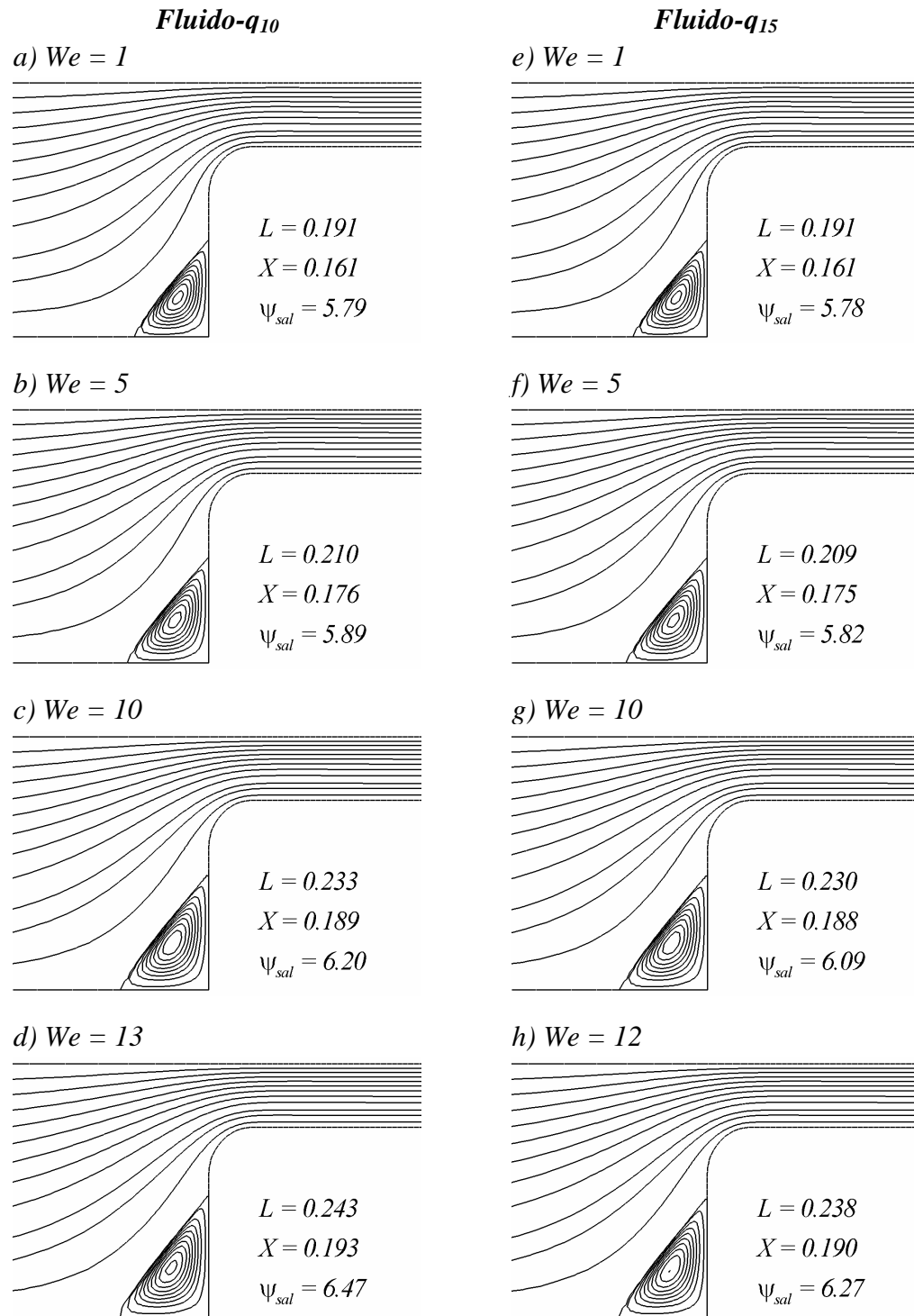


Figura 6.5. Función corriente y datos de Vórtices ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), incrementando  $We$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $q = 10$  y  $15$ .

El componente extensional del tensor de rapidez de deformación,  $d_{xx}$ , puede arrojar mayor información sobre la discrepancia en la respuesta del fluido- $q_2$  con respecto a las otras configuraciones. La Figura 6.6 (columna izquierda) muestra  $d_{xx}$  para un nivel de elasticidad de  $We = 10$ . En dicha figura se pueden detectar dos máximos en  $d_{xx}$ , uno en la línea de simetría, justo antes de que el fluido ingrese al canal de salida; el otro valor máximo está prácticamente al final de la curvatura de la esquina de la restricción, en contacto con la pared de la contracción. Como se puede observar, los campos  $d_{xx}$  son muy semejantes para las distintas configuraciones en el número de brazos utilizadas aquí. Adicionalmente, la variación de  $d_{xy}$  con respecto a  $q$ , es también minúscula (columna derecha de la Figura 6.6); por esto se puede concluir que los cuatro fluidos estudiados en la presente sección, están expuestos esencialmente a los mismos valores de rapidez de deformación. Sin embargo, aún con los campos del tensor de rapidez de deformación semejantes, la viscosidad extensional mostrada por cada fluido es significativamente diferente. Para  $q = 2$ , el régimen de reducción en viscosidad extensional empieza en  $\lambda_{0b}\dot{\epsilon} \approx 0.2$ ; para los fluidos  $q \geq 5$ , este régimen de reducción en  $\eta_e$  comienza hasta que la rapidez de deformación toma valores de  $\lambda_{0b}\dot{\epsilon} \geq 9$ .

Es conveniente mostrar las regiones en el flujo donde la reducción en viscosidad extensional es “esperada”. En el caso  $q_2$ , se tiene un área de gran tamaño en donde se anticipa esta reducción en  $\eta_e$ . Para el fluido- $q_5$ , esta área se reduce considerablemente debido al hecho de que el régimen de ablandamiento en extensión comienza a valores de rapidez de deformación más grandes que para  $q = 2$  (ver Figura 2.5); esto se debe exclusivamente a la reología del fluido, ya que los valores de  $d_{xx}$  y  $d_{xy}$  pueden considerarse como inmutables al variar el número de brazos de la molécula, como se mencionó anteriormente. La Figura 6.7 muestra las regiones en las cuales se espera la reducción en la viscosidad extensional para los casos  $q = 2$  y  $q = 5$ . Estas regiones se

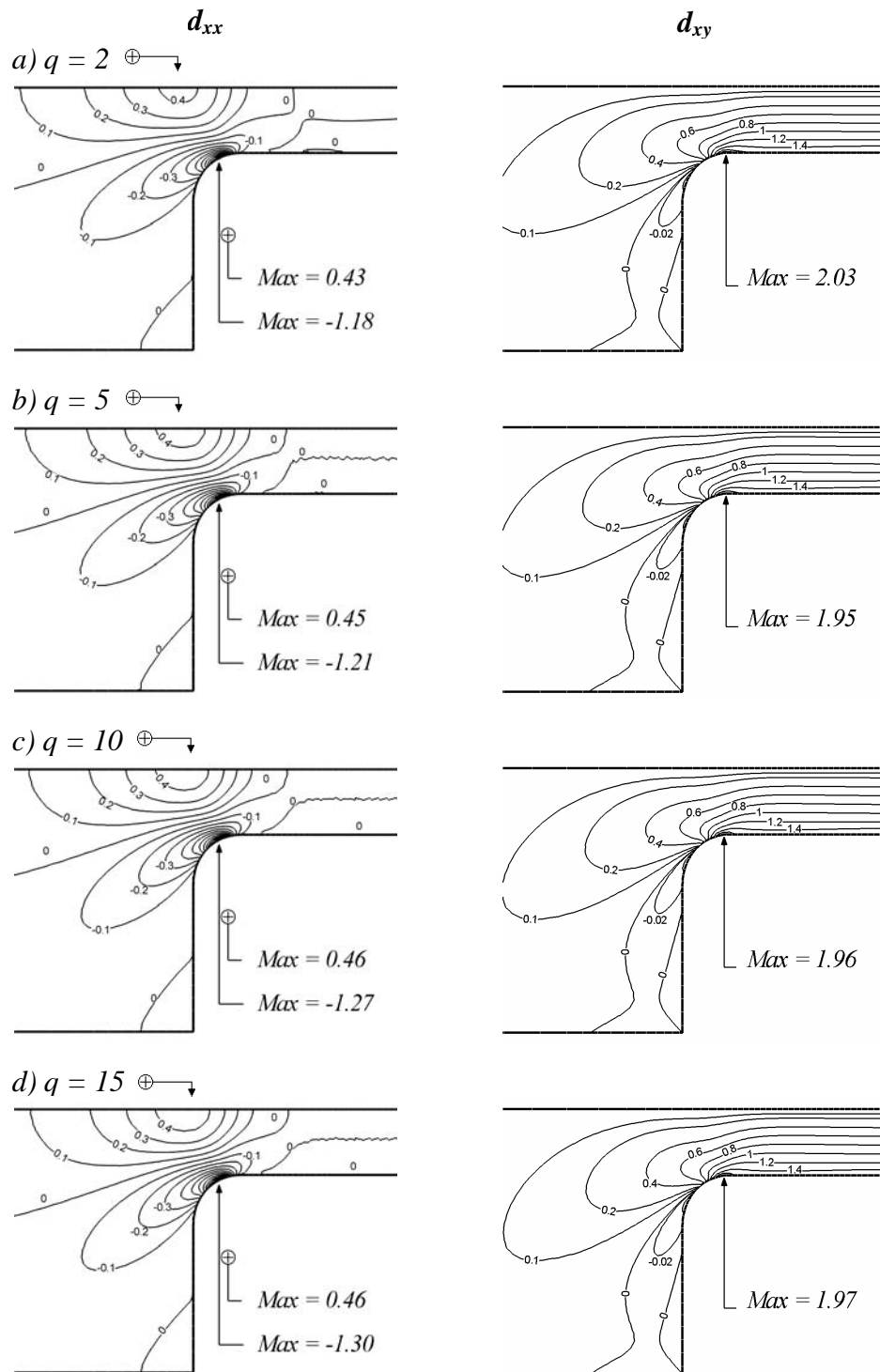


Figura 6.6. Campos de rapidez de extensión  $d_{xx}$  y  $d_{xy}$ ,  $We = 10$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ; incrementando  $q$ .

obtienen al tomar  $(\partial u / \partial x)$  como equivalente de la rapidez de extensión  $\dot{\epsilon}$ , para la Figura 6.7a,b y al invariante generalizado  $\Gamma^\ddagger$  en la Figura 6.7c,d. Los valores indicados en las zonas sombreadas corresponden a aquellos en los cuales el régimen de ablandamiento comienza, a un valor de elasticidad dado. Esto es, para el fluido- $q_2$ , la reducción en  $\eta_e$  empieza a  $\lambda_{0b}\dot{\epsilon} \approx 0.2$ . Entonces, para el nivel de elasticidad seleccionado,  $We = 10$ , es necesario extraer el valor correspondiente del tiempo de relajación  $\lambda_{0b}$ ; siguiendo las definiciones de los números adimensionales y valores característicos (ver sección 2.4). El resultado para el fluido- $q_2$  es que la reducción en viscosidad extensional empieza a un valor de rapidez de extensión de  $\dot{\epsilon} \approx 0.02$  unidades inversas de tiempo.

Siguiendo el mismo procedimiento para el fluido- $q_5$ , la reducción en viscosidad empieza en  $\dot{\epsilon} \approx 0.9$  unidades inversas de tiempo, significando una diferencia de más de un orden de magnitud al compararse con el caso  $q = 2$ .

Tomando en cuenta que el flujo extensional uniaxial sólo ocurre a lo largo de la línea central (cerca de la restricción), entonces,  $\partial u / \partial x$  y  $\Gamma$  son solo una guía de deformación extensional cuando se aplican a este flujo complejo. Con este criterio, se puede observar que la región “esperada” de ablandamiento para  $q_2$  es considerablemente más grande que para  $q_5$ ; esto es válido con ambas aproximaciones de rapidez de extensión ( $\partial u / \partial x$  y  $\Gamma$ ). Nótese que los campos  $\Gamma$  identifican también deformación cortante<sup>§</sup>.

En la Tabla 6.2 se presenta información de la convergencia con respecto al mallado, en términos del tamaño de vórtice dominante  $X$ . El fluido seleccionado es el caso  $q = 5$ , cubriendo el intervalo  $0.1 \leq We \leq 25$  para los tres mallados utilizados. Se observa

---

<sup>‡</sup> Invariantes de flujo,  $\Gamma = 2\sqrt{I_2}$  y  $\Sigma = 3I_3/I_2$ , donde  $I_2 = \frac{1}{2}tr(\mathbf{d}^2)$  y  $I_3 = \det(\mathbf{d})$ , ver [63].

<sup>§</sup> El invariante  $\Sigma$ , asociado comúnmente con la deformación extensional, no está definido en flujos rectangulares 2D.

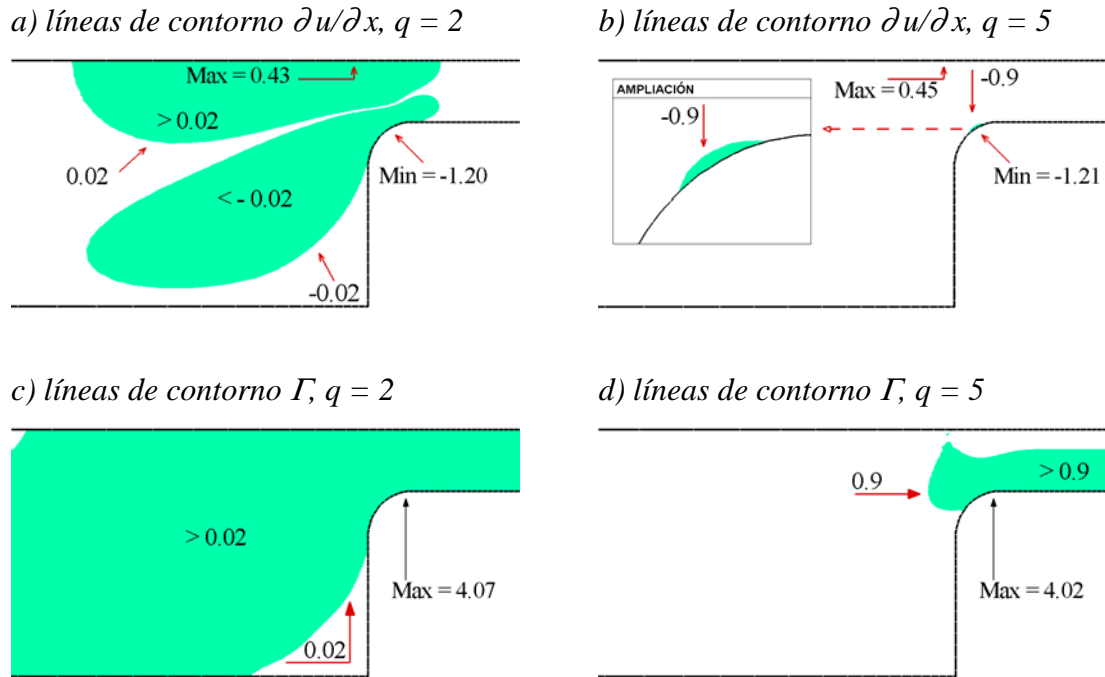


Figura 6.7. Zonas de ablandamiento ( $d_{xx}$  y  $\Gamma$ ),  $We = 10$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $q = 2$  y  $5$ .

que la convergencia se mejora a mayor refinamiento del mallado de la geometría; esto permite, además, que se obtengan soluciones a niveles de elasticidad mayores.

### 6.3.1b Perfiles en la línea central y en la pared del canal de salida

En la Figura 6.8 se presentan los valores de la primer diferencia de esfuerzos normales  $N_1$ , extensión molecular  $\lambda$ , componente polimérico  $\tau_{yy}$  del tensor de esfuerzos y

Tabla 6.2. Convergencia en términos del tamaño de celda del vórtice dominante (X):  $0.1 \leq We \leq 25$ ,  $q = 5$

<b>Mallado</b>	<b>We</b>						
	<b>0.1</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>15</b>	<b>20</b>	<b>25</b>
<b>(4:1)<sub>a</sub></b>	0.151	0.162	0.182	0.190	-	-	-
<b>(4:1)<sub>b</sub></b>	0.152	0.163	0.184	0.194	0.205	-	-
<b>(4:1)<sub>c</sub></b>	0.152	0.163	0.184	0.194	0.205	0.212	0.218



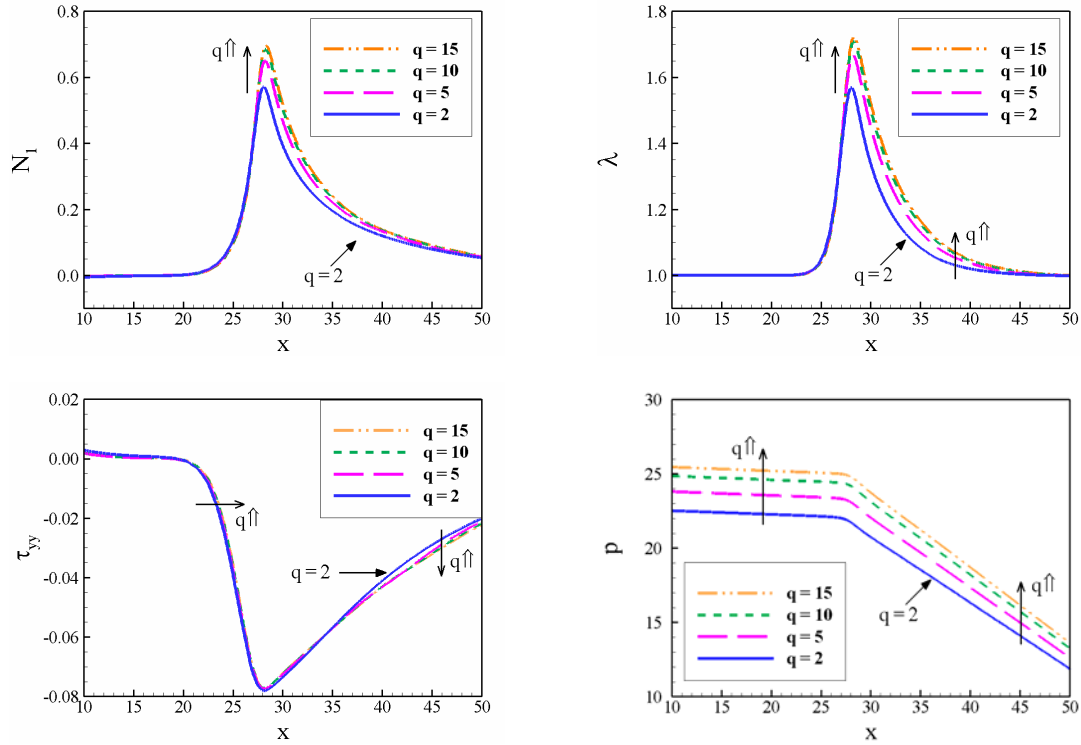


Figura 6.8. Perfiles a lo largo de la línea de simetría,  $We = 10$ ;  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ; incrementando  $q$ .

presión  $p$ , a un nivel de elasticidad de  $We = 10$ . A partir de  $q = 2$  hasta 15, el incremento en los valores máximos en  $N_1$  y  $\lambda$  está alrededor de 20% y 10% respectivamente. El incremento en ambas variables puede ser atribuido a que la viscosidad extensional es mayor, debido al incremento de brazos- $q$  en la molécula. Sin embargo, se observa un efecto casi nulo en la variable  $\tau_{yy}$  ante tal variación en  $q$ . La presión (y caída de presión) se incrementa en un 9% desde  $q = 2$  hasta  $q = 15$ .

En la Figura 6.9 se muestran los perfiles de  $N_1$ ,  $\lambda$ ,  $\tau_{xy}$  y  $\tau_{yy}$  a lo largo de (justo sobre) la pared del conducto de salida, esto es a  $y = 3$  para  $We = 10$ . De  $q = 2$  hasta  $q = 15$ , los valores de la primer diferencia de esfuerzos normales crecen alrededor de un 135% y para la extensión molecular, en un 50%. El componente  $xy$  polimérico del tensor

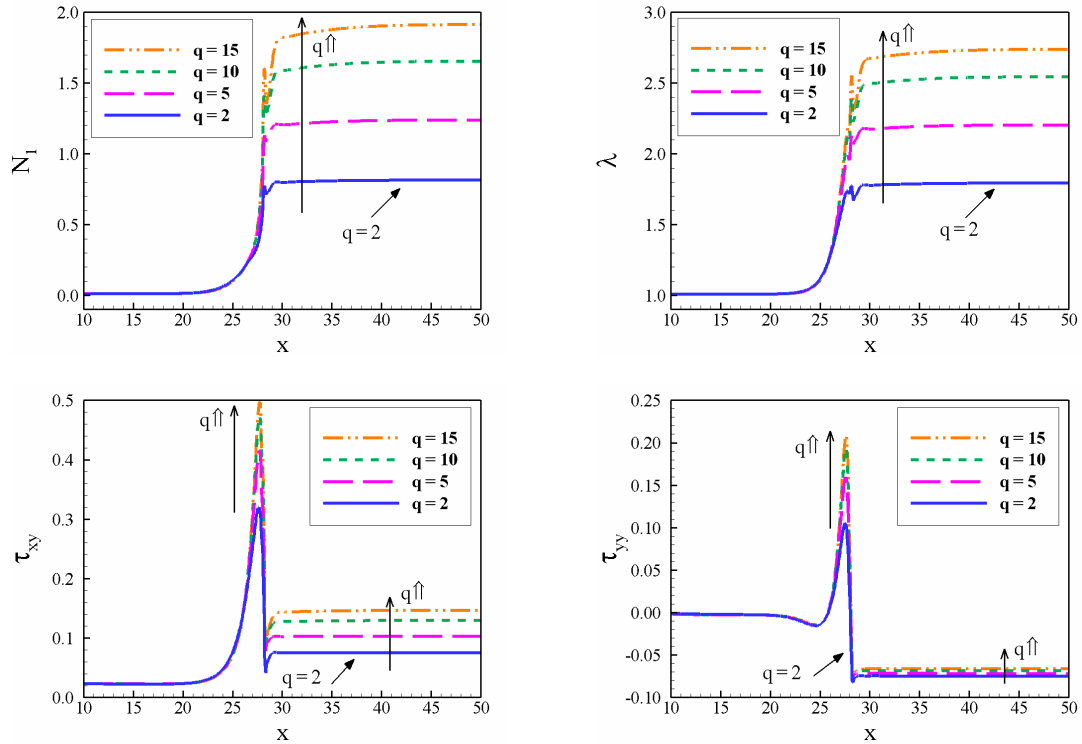


Figura 6.9. Perfiles a lo largo del canal de salida,  $y = 3$ ,  $We = 10$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ , incrementando  $q$ .

de esfuerzos extra,  $\tau_{xy}$ , también crece al incrementar el número de brazos de la molécula Pom-Pom, mientras que  $\tau_{yy}$  muestra un incremento semejante pero menos evidente.

### 6.3.1c Extensión molecular, esfuerzo, rapidez de deformación y caída de presión

En la frontera de la esquina reentrante se encuentran los valores máximos de los componentes del tensor de rapidez de deformación  $d_{xx}$  y  $d_{yy}$  (Figura 6.6).  $d_{xx}$  exhibe un valor máximo en la línea central, mientras que el fluido sobre la pared del canal de salida es expuesto a altos valores de rapidez de corte ( $d_{xy}$ ). Adicionalmente, se tienen valores significativos de rapidez de deformación en la zona de entrada a la contracción. Lejos de la contracción, la deformación cortante es la dominante, alcanzando un valor alto en el fluido sobre la pared del canal de salida. Por lo anterior, la influencia del número de bra-

zos será estimulada principalmente en dichas zonas. Nótese que el *efecto de  $q$*  se refleja en las diferencias encontradas en los valores altos de esfuerzo ( $\tau_{xx}$ ) y extensión molecular ( $\lambda$ ) a lo largo del canal de salida. Estas diferencias están relacionadas con el coeficiente de la primer diferencia de esfuerzos normales,  $\psi_1$ , y no con la viscosidad cortante, la que es prácticamente indistinta a cambios en  $q$ . También es importante notar que la influencia de la restricción sobre la pared del conducto de salida es pequeña, esto debido al muy bajo tiempo de residencia del flujo al pasar por la contracción.

*- Tendencia de  $\lambda$*

El estiramiento del esqueleto de la molécula Pom-Pom se muestra en la Figura 6.10 (columna izquierda). Se identifican zonas en donde el fluido es deformado de manera no significativa; estas zonas corresponden al canal de alimentación (aguas arriba) y a lo largo/cerca de la línea de simetría lejos de la restricción (ver Bishko et al. [66]). La deformación dominante en estas regiones es la deformación cortante. Adicionalmente, se tiene que la extensión molecular es baja dentro de las zonas de recirculación. Se puede identificar una región en forma de banda en donde la extensión de la molécula es mayor (ver [66]), zona en la cual el efecto extensional domina sobre la deformación cortante.

En la Figura 6.10 se pueden apreciar dos zonas arriba de la esquina entrante en donde los niveles de estiramiento son mayores. La primera es parte de la zona de entrada (a la contracción), y la otra, menor en tamaño, se sitúa por debajo de la primer zona, en contacto con la pared al final de la curvatura de la esquina de la restricción.

Adicionalmente, se observa un nivel alto de estiramiento molecular en la línea central, justo arriba de la contracción (Figura 6.8) y también a lo largo de la pared del conducto de salida (Figura 6.9). Para  $We = 10$ , se puede detectar un incremento en los

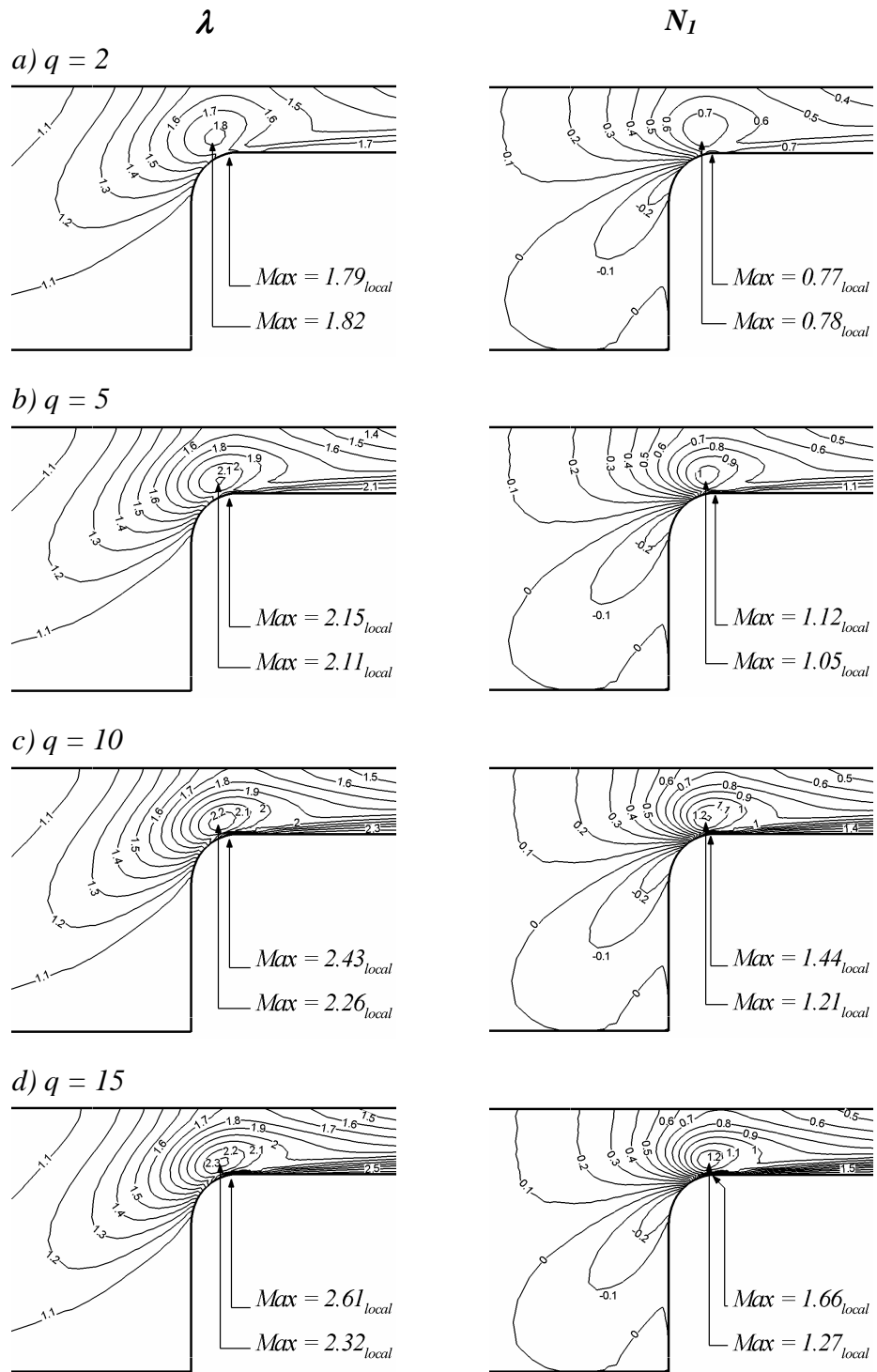


Figura 6.10. Campos de estiramiento y primer diferencia de esfuerzos normales (polimérica),  $We = 10$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ; incrementando  $q$ .

valores máximos cuando se aumenta  $q$  (ver Figura 6.10); para  $q=2$ , se tiene  $\lambda_{\max} = 1.82$ , mientras que para  $q=15$ , en el flujo entrante a la constricción, se tiene un valor máximo (local) de  $\lambda_{\max} = 2.32$  y  $\lambda_{\max} = 2.61$  en la pequeña área tocando la pared. Nótese que el estiramiento de la molécula a lo largo de la pared de salida es comparable en magnitud a los máximos mencionados. Con el fin de detectar la influencia de  $\eta_e$  en este flujo complejo, se presentan las líneas de contorno a un nivel de elasticidad mayor ( $We = 25$ ) en la Figura 6.11 para las variables  $\lambda$  y  $N_1$ . Las soluciones disponibles a este nivel de elasticidad son solo para los casos  $q = 2$  y  $5$ . El cambio en el número de brazos provoca diferencias más visibles en este nivel de elasticidad (comparado con  $We = 10$ ). La extensión molecular sobre la zona de la contracción, crece alrededor de 25% para  $We = 25$  de  $q = 2$  a  $q = 5$ , opuesto al incremento de un 10% para  $We = 10$ .

*- Tendencia de  $N_1$ ,  $\tau_{yy}$  y  $\tau_{xy}$*

En la Figura 6.10 (columna derecha) se muestran las líneas de contorno para la primer diferencia de esfuerzos normales ( $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ ). El incremento en el número de brazos resulta en un incremento general en  $N_1$  sobre la zona de la contracción y a lo largo de la pared del conducto de salida. La influencia de  $q$  sobre la respuesta de  $N_1$  se amplifica si se eleva el nivel de elasticidad a  $We = 25$ . Se detecta un crecimiento de un 65% para el máximo (positivo) de  $N_1$ , esto variando desde  $q = 2$  hasta  $5$ . Para  $We = 10$ , este crecimiento es alrededor de 34%, bajo la misma variación en el número de brazos (ver Figura 6.11). En la parte anterior a la contracción no se detecta diferencia alguna.

El máximo del esfuerzo polimérico  $\tau_{yy}$  está situado en la curvatura de la esquina re-entrante. Los valores en la línea de simetría son de un orden de magnitud menor (aproximadamente) que los valores máximos. También puede distinguirse la región en

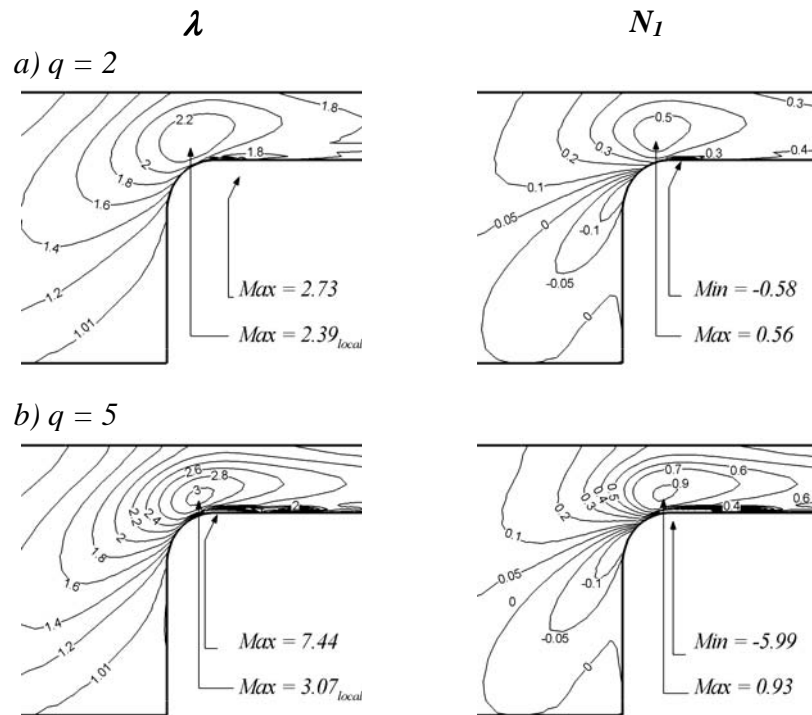


Figura 6.11. Campos de estiramiento y primer diferencia de esfuerzos normales (polimérica),  $We = 25$ ;  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $q = 2$  y  $5$ .

*forma de banda* de la entrada a la contracción para  $\tau_{yy}$  (Figura 6.12 columna izquierda). Existen valores negativos de  $\tau_{yy}$  en el fluido sobre la pared del canal de salida, valores que decrecen en magnitud al aumentar el número de brazos. En general, el componente cortante polimérico ( $\tau_{xy}$ ) se incrementa ligeramente al incrementar  $q$ . También es posible identificar la banda en la sección de entrada a la contracción (Figura 6.12, columna derecha).

- *Tendencia de  $d_{xx}$ ,  $d_{xy}$  y caída de presión*

La Figura 6.6 muestra que el incremento en el número de brazos de la molécula Pom-Pom ejerce una influencia no significativa sobre los componentes del tensor de

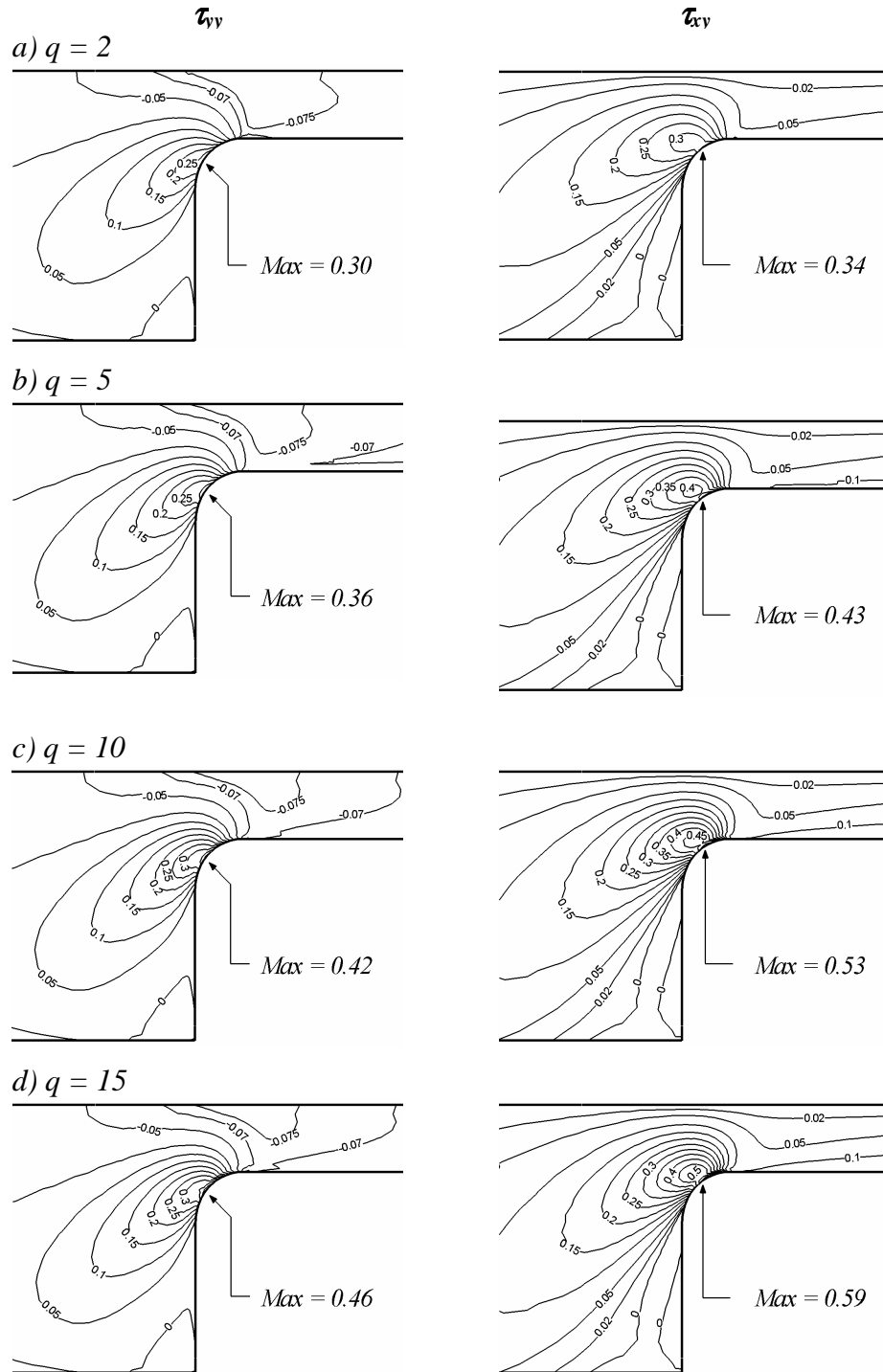


Figura 6.12. Campos de esfuerzo normal  $\tau_{yy}$  y esfuerzo cortante,  $We = 10$ ;  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ; incrementando  $q$ .

rapidez de deformación  $d_{xx}$  y  $d_{xy}$ . Sólo se detecta un pequeño incremento en los valores máximos para  $d_{xx}$  en la línea central y arriba de la esquina entrante.

Como se mencionó en el principio de esta sección (6.3.1c), en las regiones de flujo sujetas a valores altos de rapidez de deformación son donde se espera que la influencia de la variación en el número de brazos de la molécula Pom-Pom sea mayor. La razón es que en dichas zonas las funciones reométricas pueden alcanzar valores altos o amplificar las diferencias de dichas funciones con respecto a  $q$ . La Figura 2.5d muestra que el estiramiento de la molécula depende tanto de la deformación cortante como extensional, aunque en este último tipo de flujo, la deformación es mayor. Por tanto, las líneas de contorno asemejan aquellas a las mostradas por  $d_{xx}$  en la sección entrante a la contracción y, en el conducto de salida, apenas rebasada la curvatura, los patrones de la extensión molecular siguen la tendencia del componente del tensor de rapidez de deformación  $d_{xy}$  (ver Figura 6.10).

Observando con mayor detalle, se puede apreciar similitud entre la respuesta del esfuerzo y extensión molecular. Sin embargo, debido a que en la región que cubre la entrada a la contracción hasta pasar la curvatura de la misma, la deformación es una mezcla de ambos tipos (cortante y extensional), las funciones materiales sólo pueden usarse como guía para anticipar cualquier respuesta al flujo.

En la Figura 6.13 se presenta la caída de presión, normalizada por la correspondiente newtoniana ( $\Delta p_{newt}$ ) con el mismo flujo e igual valor de viscosidad cortante que la correspondiente a la viscosidad a cero rapidez de corte ( $\eta_s|_{\dot{\gamma} \rightarrow 0}$ ) del fluido Pom-Pom. Esta caída de presión normalizada sufre un significativo decaimiento (monótono) al incrementar la elasticidad del fluido. Para  $We < 2$ , esta reducción es del orden de 70% (para cualquier fluido- $q_i$ ) respecto a la línea de referencia newtoniana ( $\Delta p / \Delta p_{Newt} = 1$ ).



Después de este nivel de elasticidad, la rapidez de decaimiento se reduce considerablemente hasta alcanzar finalmente un valor asintótico, reconocible a  $We = 10$ . Se aprecian diferencias poco significativas para los valores de  $q$  utilizados aquí, produciéndose solo una minúscula reducción en  $\Delta p$  para sistemas con más brazos en los extremos de la molécula. Esta caída de gran magnitud en la presión es debido al adelgazamiento al corte provocado por los parámetros del fluido Pom-Pom que se seleccionaron. Las pequeñas diferencias en  $\Delta p / \Delta p_{Newt}$  con respecto a  $q$  pueden ser atribuidas a los ligeros cambios de la viscosidad cortante al variar el número de brazos.

### **6.3.2 Variación del parámetro $\alpha$ {0.15, 0.25, 0.5}**

La respuesta en flujo reométrico para un ajuste en el parámetro de anisotropía  $\alpha$ , se presenta en la Figura 6.14 para  $q = 15$ . Clemeur et al. [35] han reportado “defectos numéricos” para los modelos Pom-Pom. Estos autores pusieron particular atención a las inestabilidades en las funciones materiales provocadas por ciertos valores de  $\alpha$ . Para valores suficientemente bajos del parámetro de anisotropía, no se observa ninguna singularidad en viscosidad cortante ni en la primer diferencia de esfuerzos normales; sin embargo, al incrementar  $\alpha$  y/o  $q$  (si  $\alpha > 0$ ) surgen las singularidades. En flujo extensional, la inestabilidad se presenta “aplanando” la viscosidad  $\eta_e$ , lo cual no tiene sentido físico. La relación de Trouton y la extensión molecular en flujos reométricos también sufren efectos por dichas deficiencias en las propiedades numéricas de los modelos Pom-Pom extendidos. Con el objetivo de *capturar* el efecto de la inestabilidad sobre la respuesta en flujo, se generaron soluciones para una variedad de valores de anisotropía, siendo  $\alpha = \{0.15, 0.25, 0.5\}$ , fijando el número de brazos a  $q = 15$ , debido a que a este valor, las inestabilidades son más evidentes. La Figura 6.15 muestra los perfiles en la pared del conducto de salida para  $N_1$ ,  $\lambda$ ,  $\tau_{xy}$  y  $N_2$ .

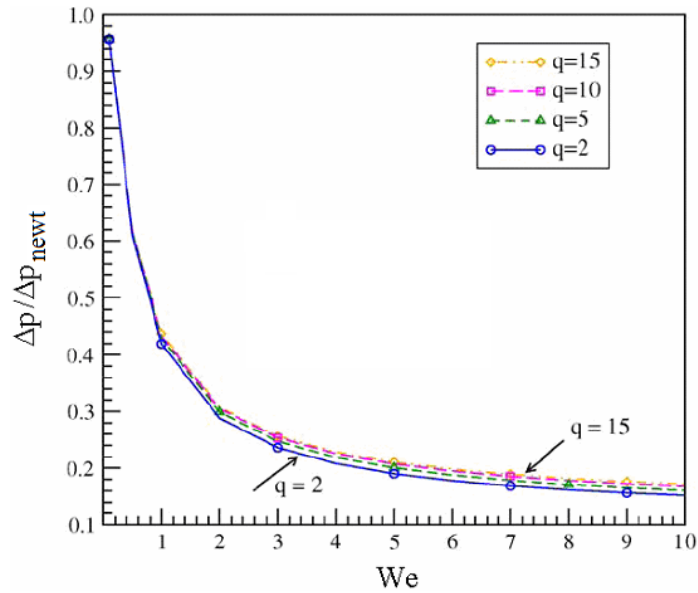
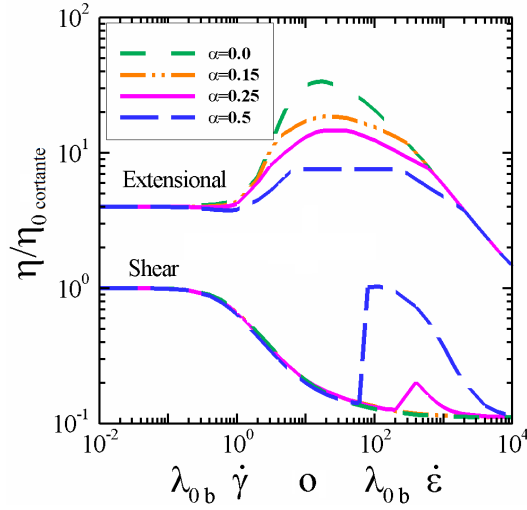


Figura 6.13. Caída de presión normalizada vs.  $We$ :  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ,  $\alpha = 0.15$ ;  $q = 2, 5, 10, 15$ .

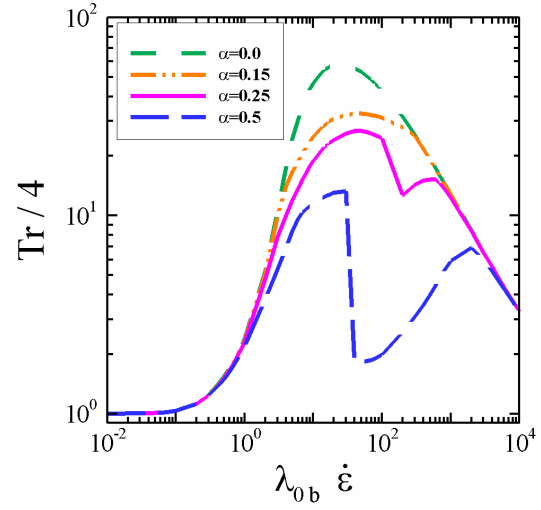
Para  $\alpha = 0.15$  y  $0.25$  (Figura 6.15) no se observan efectos significativos en estos perfiles. Nótese que  $N_2$  prácticamente se desvanece antes y después de la restricción. Fijando  $\alpha = 0.5$  se observa una reducción en la primer diferencia de esfuerzos normales, extensión molecular y esfuerzo cortante polimérico, cuando el fluido ha rebasado la restricción; de estos parámetros, aquel en el que se observa una variación mayor es  $N_1$ , el cual presenta una reducción alrededor de 30% (al variar de  $\alpha = 0.15$  a  $\alpha = 0.5$ ).

La segunda diferencia de esfuerzos normales,  $N_2$ , exhibe un incremento de más de un orden de magnitud tomando como referencia el perfil a  $\alpha = 0.15$ . Adicionalmente se detecta un decaimiento en los valores máximos localizados en la cercanía de la contracción. El efecto de “aplanamiento” en la viscosidad extensional puede ser la causa de esta última respuesta. Tal reducción en valores máximos es más prominente en  $N_1$  y  $\lambda$  (ambas variables muestran dependencia en deformaciones extensionales) que en el esfuerzo

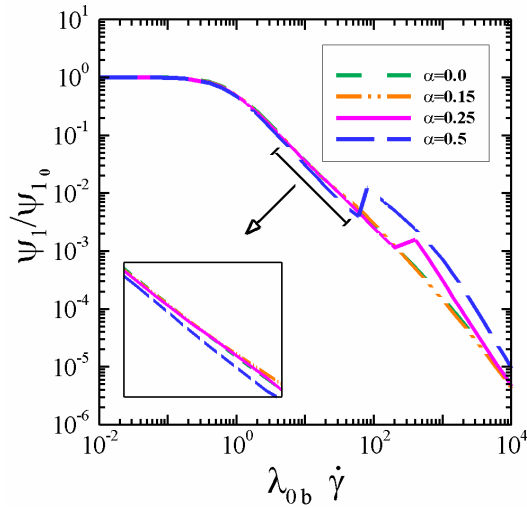
a) Viscosidad cortante y planar



b) Relación de Trouton planar



c) Coeficiente de  $N_1$



d) Extensión molecular

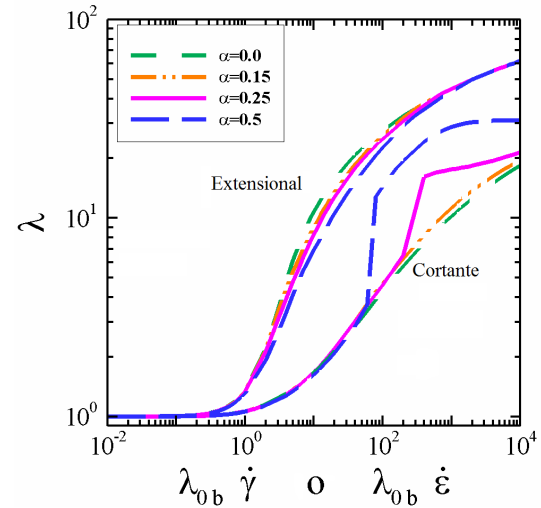


Figura 6.14. Propiedades reológicas del modelo SXPP, variando  $\alpha$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\epsilon = 1/3$  y  $q = 15$ .

cortante. El decaimiento en  $N_1$  y  $\lambda$ , a lo largo de la pared del canal de salida, cuando  $\alpha = 0.5$  puede ser la consecuencia de la reducción en  $\psi_1$  (respecto a  $\alpha \leq 0.25$ ) antes de que se presente la inestabilidad (ver la sección aumentada en la Figura 6.14c).

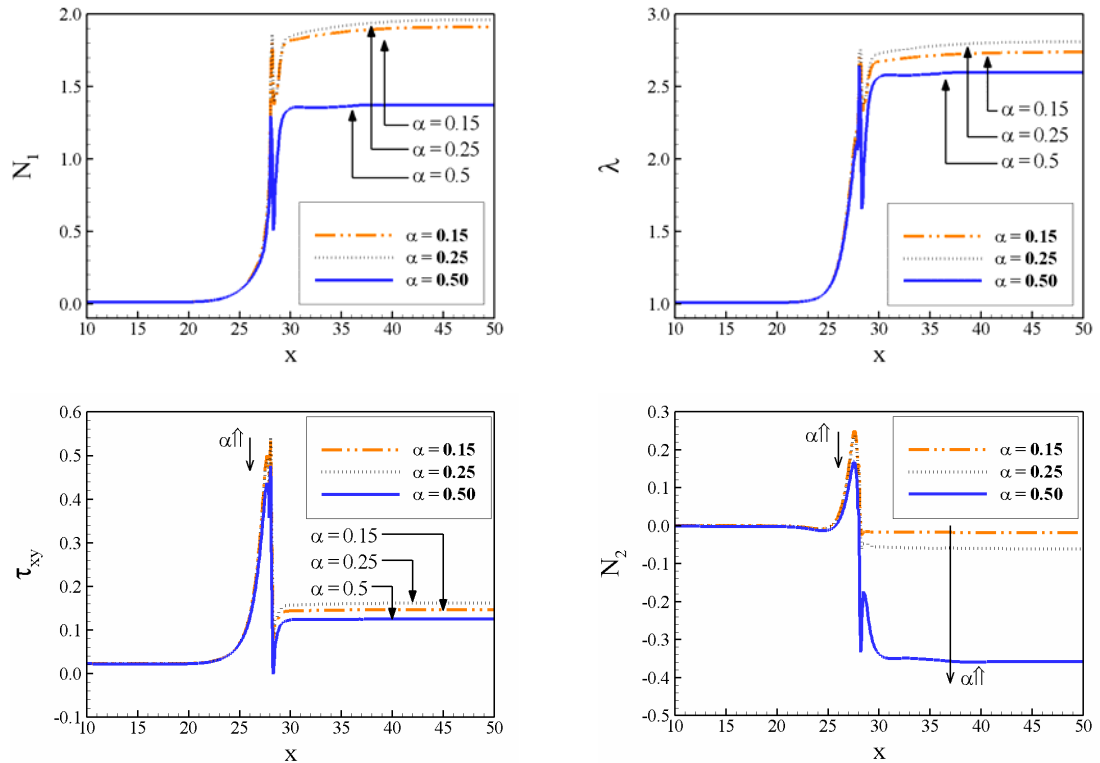


Figura 6.15. Perfiles a lo largo de la pared de salida,  $y = 3$ , incrementando  $\alpha$ .  $Re = 0$ ,  $\beta = 1/9$ ,  $\varepsilon = 1/3$ ;  $q = 15$ ,  $We = 10$ .

Debido a que en las soluciones obtenidas para los valores del parámetro que controla el efecto de anisotropía no se observa ninguna discontinuidad o respuesta anormal, debe suponerse que los valores de rapidez de deformación a los que el fluido está expuesto, no son lo suficientemente grandes para que se presenten las singularidades anticipadas, especialmente en el canal de salida. En la constricción es posible que los valores de rapidez de deformación sean suficientemente grandes en magnitud; sin embargo, el tiempo de residencia es demasiado corto, lo que provoca que el fluido no alcance el valor de estado estacionario.

### **6.3.3 Respuesta extensional con dos modelos: Pom-Pom y PTT**

Se presenta una comparación del tamaño e intensidad de vórtice en una contracción 4:1 con esquina con curvatura, utilizando los modelos Pom-Pom (modelo cinético) y el modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner.

Aboubacar et al. [7,8] reportaron medidas de vórtice para dos fluidos EPTT, ambos mostrando respuesta extensional distinta. El fluido EPTT ( $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ ) presenta un endurecimiento extensional severo, mientras que para el fluido con  $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ , este endurecimiento es considerablemente menor. El objetivo es realizar la simulación con fluidos SXPP con respuestas similares en flujo extensional a los EPTT utilizados en referencias [7,8]. Para cada fluido EPTT, se contraponen dos diferentes conjuntos de parámetros SXPP, en el primer caso se asigna un valor semejante al máximo en viscosidad extensional ( $\eta_e$ ) y otro con máximo semejante a la relación de Trouton ( $Tr$ ). Esto puede ser útil para asociar la respuesta de flujo con propiedades extensionales o, aquellas moderadas por influencia cortante. Para aproximar los máximos en la viscosidad extensional y relación de Trouton, se utilizó el mismo valor del cociente de viscosidad  $\beta$  de las referencias [7,8]. Esto hace que las viscosidades extensional y cortante entre ambos modelos sean iguales tanto a valores bajos como muy altos de rapidez de deformación. Una vez que  $\beta$  está fijo (i.e. el contenido de disolvente), los parámetros que ejercen influencia en el nivel de endurecimiento del modelo SXPP\*\* son, la relación de tiempo de relajación  $\varepsilon$ , y el número de brazos  $q$ . El incremento en cualquiera de estas dos variables aumenta el grado de endurecimiento extensional. Adicionalmente, para la relación dada de disolvente/solución  $\beta$ , sólo  $\varepsilon$  tiene un efecto en la viscosidad cortante; éste es, al aumentar  $\varepsilon$ , el comienzo del adelgazamiento al corte se retrasa a valores más altos de rapidez de corte. La variación simultánea de  $\varepsilon$  y  $q$  fue necesaria para obtener valores máximos de

---

\*\* La viscosidad extensional es afectada también por el parámetro  $\alpha$ ; sin embargo, este puede introducir deficiencias numéricas en el modelo, como se discutió en la sección 6.3.2.

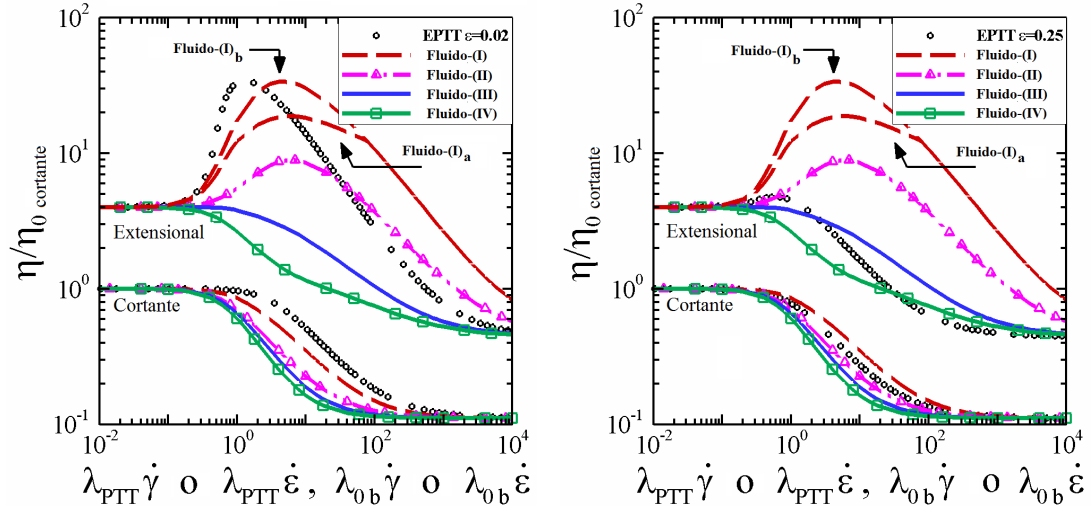
los fluidos SXPP que fuesen semejantes a los utilizados en la referencias [7,8] para el modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner. Los cuatro fluidos que asemejan la respuesta EPTT son enumerados como (I)<sub>a</sub>, (II), (III), (IV). Se presenta de manera adicional, un ajuste en  $\alpha$  para el fluido con el nivel de endurecimiento mayor, Fluido-(I)<sub>a</sub>. Este fluido extra se denomina Fluido-(I)<sub>b</sub>. Los parámetros SXPP utilizados se reportan en la Tabla 6.3, mientras que la Figura 6.16 muestra la comparación de las respuestas materiales SXPP con las exhibidas por EPTT.

El fluido-(I)<sub>a</sub> presenta un máximo en viscosidad extensional semejante al de EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ ), y exhibe el nivel de endurecimiento mayor dentro de los fluidos SXPP usados aquí; sin embargo, este fluido SXPP excede el máximo en la relación de Trouton del correspondiente fluido EPTT, aún cuando las respuestas en flujo cortante de ambos fluidos son semejantes. En contraste, el fluido-(II) exhibe altos niveles de endurecimiento, aunque menores que los del fluido-(I)<sub>a</sub> y asemeja la relación de Trouton para el caso EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ ).

Tabla 6.3. Parámetros SXPP y EPTT;  $\beta = 1/9$

	<i><b>PTT correspondiente</b></i>	<i><b>q</b></i>	<i><b><math>\epsilon</math></b></i>	<i><b><math>\alpha</math></b></i>	<i><b>Comentarios</b></i>
<i><b>Fluido-(I)<sub>a</sub></b></i>	$\eta_e$ : EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ )	8	0.999999	0.15	Endurecimiento severo
<i><b>Fluido-(I)<sub>b</sub></b></i>	$\eta_e$ : EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ )	8	0.999999	0.05	Endurecimiento severo
<i><b>Fluido-(II)</b></i>	$Tr$ : EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ )	5	0.5	0.15	Endurecimiento fuerte
<i><b>Fluido-(III)</b></i>	$\eta_e$ : EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ )	2	0.333333	0.15	Adelgazamiento retrasado
<i><b>Fluido-(IV)</b></i>	$Tr$ : EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ )	2	0.075	0.15	Adelgazamiento

a) Viscosidad planar y cortante ( $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ ) b) Viscosidad planar y cortante ( $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ )



c) Relación de Trouton ( $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ )

d) Relación de Trouton ( $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ )

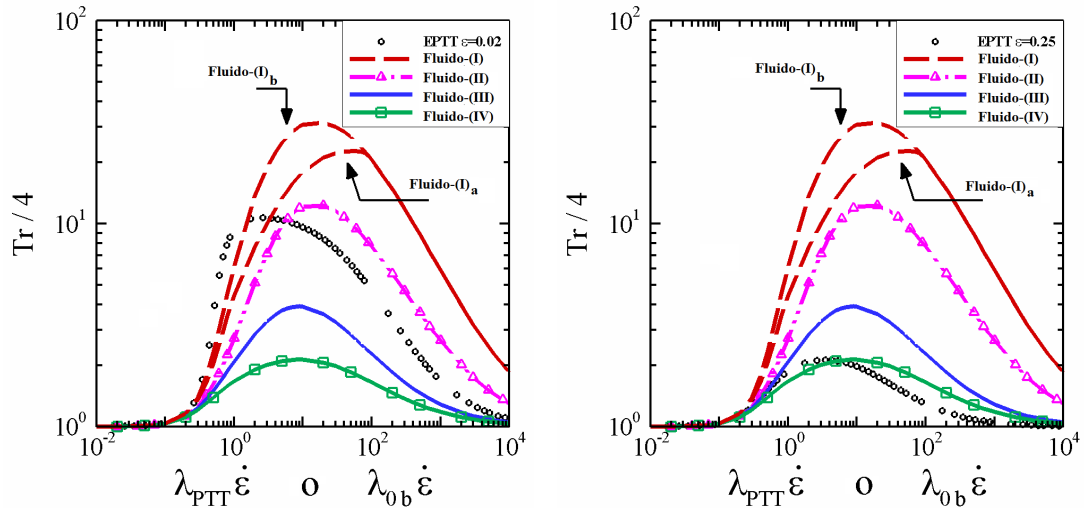


Figura 6.16. Propiedades reológicas de los modelos SXPP y EPTT: variación en  $q$ ,  $\varepsilon$  y  $\varepsilon_{PTT}$ ;  $\beta = 1/9$ ,  $\alpha = 0.15$ .

El fluido-(III) presenta un nivel de endurecimiento extensional reducido, aproxima la respuesta de  $\eta_e$  para EPTT ( $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ ), mientras que el fluido-(IV) se ajusta al

máximo en la relación de Trouton. Nótese que el ablandamiento en viscosidad extensional del fluido-(IV) ocurre sin que exista un endurecimiento (aumento en  $\eta_e$ ) previo. El fluido-(III) es el caso base utilizado en la simulaciones del presente trabajo.

La influencia de la elasticidad en el tamaño de celda de los vórtices ( $L$ , a lo largo de la pared perpendicular al flujo y  $X$ , a lo largo de la pared paralela al flujo) y en la intensidad ( $\psi_{sal}$ ) se presenta aquí para los cinco fluidos simulados. La dinámica del crecimiento de los vórtices para el modelo de Phan-Thien/Tanner es reportada por Aboubacar et al. [7]. Esta información fue medida e interpretada de manera gráfica.

En las siguientes secciones se presentan por separado los comentarios de los fluidos con endurecimiento severo y moderado, tratando el ajuste en  $\eta_e$  y  $Tr$  en turno. Como se explicó en la sección 6.3.1a, las medidas de tamaño de vórtice  $X$  y  $L$  son calibradas por la separación entre las placas del canal de alimentación. Las líneas de corriente para los escenarios de endurecimiento severo y moderado se muestran en la Figura 6.17 y Figura 6.18, mientras que la Figura 6.19 presenta la tendencia en el tamaño de celda e intensidad, junto con las predicciones de los dos fluidos EPTT reportados por Aboubacar et al. [7].

### *6.3.3a Ajuste de endurecimiento severo: EPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ ), $\eta_e$ y $Tr$*

El fluido-(I)<sub>a</sub> presenta un máximo en  $\eta_e$  comparable al caso EPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ ) con un endurecimiento severo en viscosidad extensional. En general, se obtienen vórtices de mayor tamaño para fluido-(I)<sub>a</sub> que para fluido-(II). Para todos los casos, la intensidad del vórtice ( $\psi_{sal}$ ) es mayor para los fluidos con mayor endurecimiento extensional. La tendencia (al incrementar  $We$ ) en la intensidad y tamaño de celda para ambos fluidos Pom-Pom es muy semejante (ver Figura 6.17 y Figura 6.19). Se pueden apreciar dos características: primero,  $We_{crit}$  es menor para el fluido con mayor nivel de endurecimiento



extensional. Para el fluido-(II), con un nivel menor de endurecimiento, se tiene  $We_{crit} \approx 17$ , un valor que es casi el doble que para el fluido-(I)<sub>a</sub>,  $We_{crit} \approx 9$ . La segunda característica es que el tamaño de la celda de vórtice e intensidad son muy semejantes para ambos fluidos en su correspondiente  $We_{crit}$ .

El caso EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ ) exhibe una ligera inhibición a bajos niveles de elasticidad ( $We \leq 3$ ). Esto es seguido por un incremento significativo tanto en tamaño de celda como en intensidad. Para este fluido, el máximo Weissenberg que se obtuvo en la simulación es  $We \approx 30$  (ver la figura 6 en Aboubacar et al. [7]). No obstante, no se observa ningún efecto inhibitorio en el crecimiento de vórtice al incrementar la elasticidad para ninguno de los fluidos SXPP (I)<sub>a</sub> y (II); las tendencias son semejantes, pero no la magnitud. La curvatura de la línea de separación difiere para los casos EPTT y SXPP. El modelo EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.02$ ) muestra una estructura lineal a baja elasticidad; gradualmente esta estructura se torna ligeramente cóncava. Siguiendo el incremento en  $We$ , se obtienen estructuras convexas y vórtices de gran tamaño. En contraste, los fluidos SXPP, ajustando  $\eta_e$  y  $Tr$ , presentan un cambio insignificante respecto al número de Weissenberg, en orientación o forma de la línea de separación (vórtice-flujo). Esta estructura es prácticamente una línea recta.

### *6.3.3b Ajuste caso modesto endurecimiento extensional: EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ), $\eta_e$ y $Tr$*

El máximo en viscosidad extensional del caso EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ), es aproximado por el fluido-(III). Ambos fluidos representan un material con un endurecimiento ligero, seguido por ablandamiento extensional. El fluido-(IV), un fluido sin endurecimiento, iguala el máximo en la relación de Trouton para EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ). El decaimiento en el nivel de endurecimiento, comparado con el escenario de fluidos con endurecimiento severo, se refleja en la predicción de vórtices de menor tamaño para ambos modelos, EPTT y SXPP. Además, el mismo decaimiento resulta en niveles de elasticidad obteni-

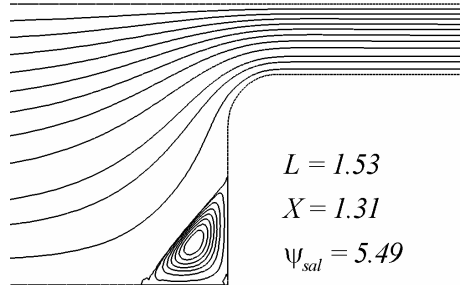
bles, siendo  $We_{crit} \approx 60$  para los fluidos (III) y (IV). El caso del fluido-(III) exhibe un ligero crecimiento en la intensidad de vórtice, aunque ésto es difícil de detectar de la Figura 6.19. Dicho crecimiento ocurre hasta un nivel de elasticidad alrededor de  $We = 5$ . Después de esta etapa, la intensidad disminuye ligeramente de forma monótona. Al comparar la respuesta del fluido-(III) con la exhibida por el caso EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ), se obtienen tendencias similares, aunque las variaciones son más visibles para el modelo Phan-Thien/Tanner. La intensidad máxima de ambos fluidos, (III) y EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ), ocurren aproximadamente en el mismo número de Weissenberg,  $We \approx 5$ .

No se presenta ningún crecimiento en vórtice para el fluido-(IV), en intensidad o tamaño de celda, hasta un nivel de  $We = 30$ , después del cual se obtiene un ligero incremento en estas magnitudes. Esta tendencia seguida por el fluido-(IV), es opuesta a la mostrada por el caso EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ); sin embargo, a  $We = 100$  el fluido EPTT muestra una intensidad límite semejante a la exhibida por el fluido-(IV) a Weissenberg de 60.

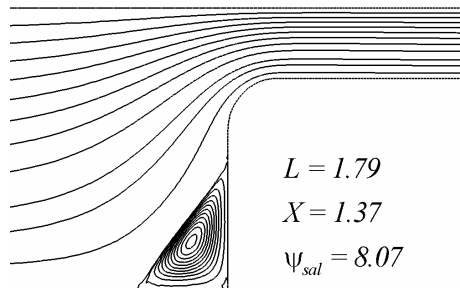
La reducción en la intensidad de vórtice y tamaño de celda puede ser una consecuencia del ablandamiento en flujo extensional y a los niveles asociados de la relación de Trouton. El mayor nivel de elasticidad alcanzado por el modelo EPTT, puede ser atribuido al hecho de que la viscosidad extensional para EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.25$ ) es menor que para su contraparte SXPP, fluido-(III), y a los valores de rapidez de extensión mayores que  $O(2)$  unidades (ver Figura 6.16). La forma de la línea de separación es prácticamente lineal para el fluido-(III), similar a la predicha para el fluido-(I)<sub>a</sub> y (II). Sin embargo, el fluido-(IV) presenta una estructura relativamente convexa. Para el correspondiente modelo EPTT, la línea de separación cambia de lineal ( $We = 1$ ) a convexa ( $We = 5$ ), recuperando la forma lineal a niveles de elasticidad mayores de  $We = 20$  (ver [7]).

**Fluido-I<sub>a</sub>: ajustando  $\eta_e - \epsilon_{PTT} = 0.02$**

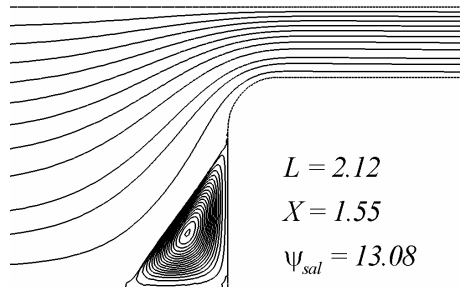
a)  $We = 1$



b)  $We = 5$

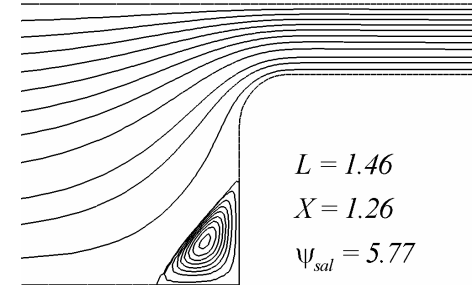


c)  $We = 9$

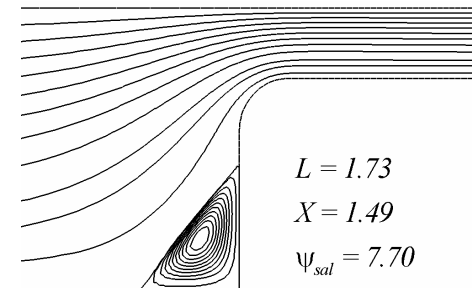


**Fluido-II: ajustando  $Tr - \epsilon_{PTT} = 0.02$**

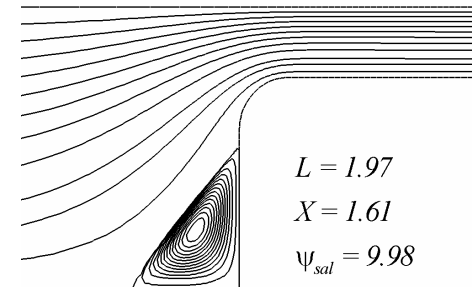
d)  $We = 1$



e)  $We = 5$



f)  $We = 10$



g)  $We = 17$

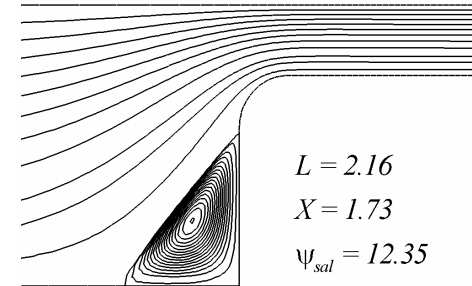
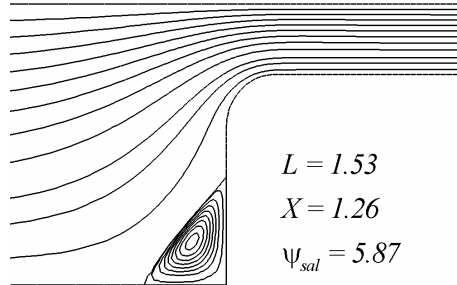


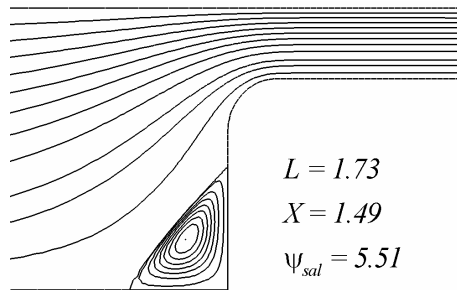
Figura 6.17. Vórtices y líneas de corriente ( $L, X, \psi_{sal} \times [-10^4]$ ), casos I<sub>a</sub> y II, endurecimiento severo.

**Fluido-III: ajustando  $\eta_e - \epsilon_{PTT} = 0.25$**

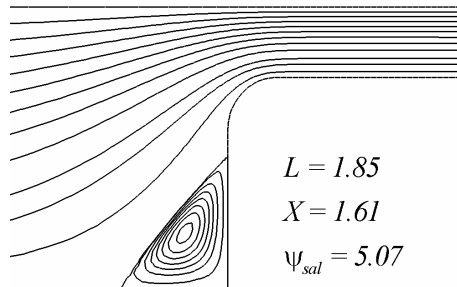
a)  $We = 1$



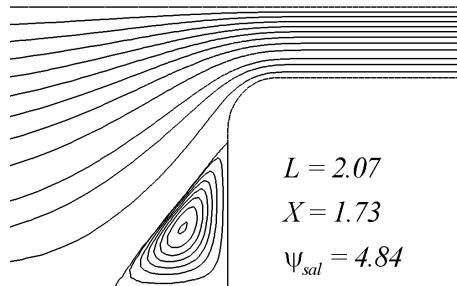
b)  $We = 10$



c)  $We = 20$

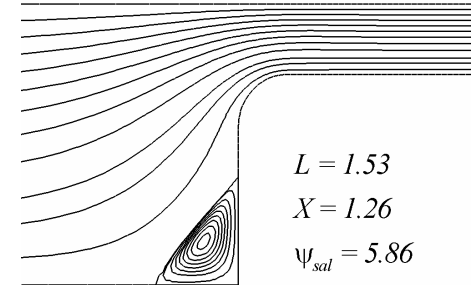


d)  $We = 60$

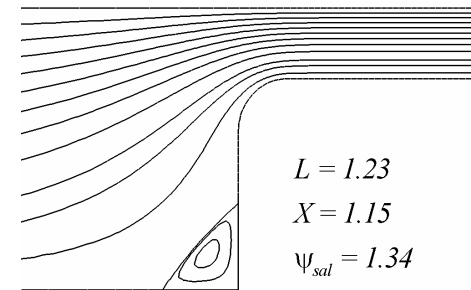


**Fluido-IV: ajustando  $Tr - \epsilon_{PTT} = 0.25$**

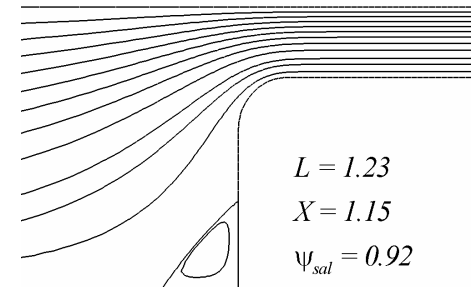
e)  $We = 1$



f)  $We = 10$



g)  $We = 20$



h)  $We = 60$

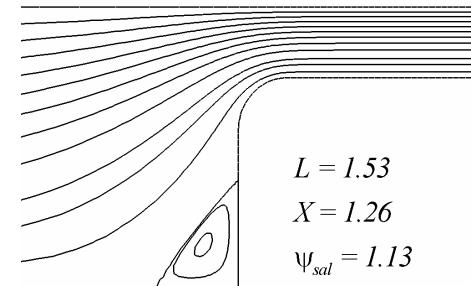


Figura 6.18. Vórtices y líneas de corriente ( $L, X, \Psi_{sal} \times [-10^4]$ ), casos III y IV, endurecimiento moderado.

**Fluidos con endurecimiento severo**

**Fluidos con endurecimiento moderado**

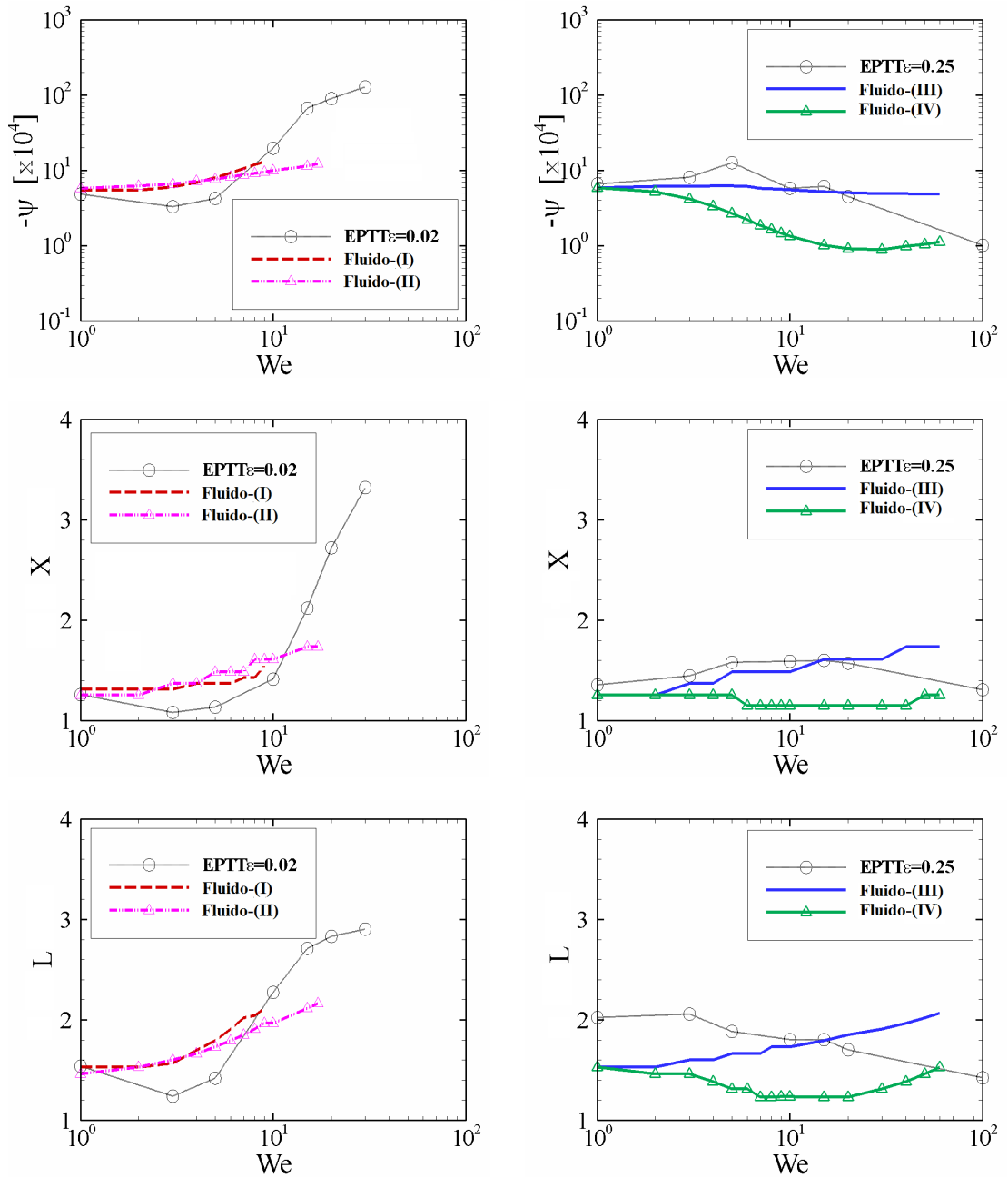


Figura 6.19. Intensidad de vórtice dominante y tamaño de celda, incrementando  $We$ ; fluidos con endurecimiento extensional severo y moderado.

*6.3.3c Fluido-(I)<sub>a</sub> y Fluido-(I)<sub>b</sub>: diferencias y similitudes*

En esta sección se estudia la influencia de  $\alpha$  para el fluido SXPP que exhibe el nivel de endurecimiento extensional mayor. Se muestran líneas de contorno para la primera y segunda diferencias de esfuerzo normal (poliméricos) en la Figura 6.20 para el fluido-(I)<sub>a</sub> y (I)<sub>b</sub>. La única diferencia entre los parámetros de estos fluidos es el nivel de anisotropía, gobernada por  $\alpha = 0.15$  y  $\alpha = 0.05$ , respectivamente.

El efecto de variar la anisotropía en  $N_1$  se observa principalmente en dos regiones. Una está justo arriba de la esquina entrante, una pequeña zona donde el decrecimiento en  $N_1$  puede ser relacionado con la reducción en viscosidad extensional por el incremento en  $\alpha$ . La segunda región corresponde al fluido sobre la pared del conducto de salida, donde diferencias en  $\psi_1$  en los niveles de anisotropía, producen una reducción en  $N_1$  al variar  $\alpha$  de 0.05 a 0.15. En la sección 6.3.2 se comenta una respuesta similar.

Se espera que la influencia de  $\alpha$  sea mayor en  $N_2$  que en  $N_1$ . Al pasar el fluido a través de la zona en forma de *banda* de alta extensión, alcanzando la esquina entrante, se observa un ligero decaimiento en los valores de  $N_2$  junto al decrecimiento en  $\alpha$ . La variación más significativa en  $N_2$  es a lo largo de la pared de salida, justo después del término de la curvatura de la esquina, la cual es una región sujeta a una fuerte deformación cortante. En esta zona, se registra un incremento en la magnitud de la diferencia de esfuerzos normales, de 0.07 unidades a  $\alpha = 0.05$  hasta 1.5 unidades para  $\alpha = 0.15$ . Cerca de la línea de simetría en la sección de entrada a la contracción, el ajuste en  $\alpha$  ejerce una influencia en  $N_2$  difícil de detectar. Todo lo anterior, lleva a la conclusión de que la variación en  $\alpha$  ejerce influencia principalmente en la respuesta en flujo cortante.

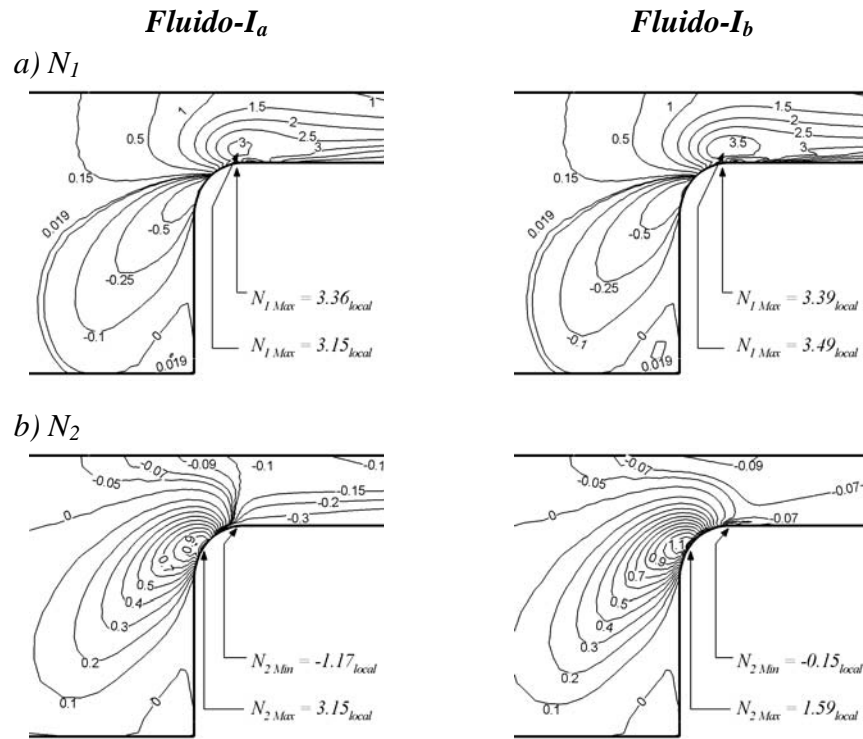


Figura 6.20. Contornos de primera y segunda diferencia de esfuerzos normales ( $N_1$ ,  $N_2$ ):  
 $\alpha = 0.05$  (Fluido-I<sub>b</sub>) y  $0.15$  (Fluido-I<sub>a</sub>);  $We = 8$ .

Se presenta una reducción en el endurecimiento extensional provocado por el incremento en el parámetro de anisotropía, desde  $\alpha = 0.05$  hasta  $\alpha = 0.15$ . Esta reducción, como se anticipó, permite que las simulaciones alcancen un nivel de elasticidad crítica mayor, aunque en este caso, el incremento en  $We_{crit}$  es poco significativo, de  $We_{crit} = 8$  a  $We_{crit} = 9$ , para los fluidos (I<sub>a</sub>) y (I<sub>b</sub>), respectivamente.

## 6.4 Conclusiones

La influencia de la variación del número de brazos ( $q$ ) unidos a ambos lados del esqueleto de la molécula Pom-Pom, en flujo complejo, contracción 4:1 rectangular, ha sido el objeto de estudio de este capítulo. La viscosidad extensional es afectada de mane-

ra importante por ese parámetro. La geometría de flujo es la contracción rectangular 4:1 con esquina *redondeada*. Con la variación de  $q$  desde 2 a 15, el fluido presenta diferentes niveles de endurecimiento, desde poco significativo (a veces denominado aquí como fluido con ablandamiento *retrasado*) hasta severo, respectivamente. Nótese que, en las condiciones cinemáticas de flujo, el ablandamiento extensional no se anticipa para fluidos  $q_{10}$  y  $q_{15}$  (10 y 15 brazos); para el fluido- $q_5$ , la reducción en viscosidad extensional tal vez ocurre en una minúscula región cerca de la esquina entrante. Existe un impacto significativo sobre la viscosidad extensional y primera diferencia de esfuerzos normales que hay que considerar con el cambio en  $q$ . La viscosidad cortante para el conjunto de parámetros seleccionados, no obstante, no sufre cambios significativos al variar el número de brazos en la molécula.

La influencia detectada sobre los componentes del tensor de rapidez de deformación  $d_{xx}$  y  $d_{yy}$  al cambiar  $q$ , puede considerarse como ligera. Se mostraron zonas en el dominio del flujo, en las cuales se espera que el ablandamiento extensional (reducción en  $\eta_e$ ) se presente. El tamaño de estas zonas ayuda a explicar las diferencias entre las respuestas del fluido- $q_2$  y los otros fluidos seleccionados ( $q \geq 5$ ). Debido a los diferentes comportamientos en la viscosidad extensional, se ha encontrado que el área de estas zonas, en donde se espera la reducción en  $\eta_e$ , decrece visiblemente, incluso desaparece. El que ocurra el ablandamiento extensional parece tener un impacto fuerte en la respuesta de los vórtices, produciendo un efecto inhibitor en la intensidad. Además, niveles menores de endurecimiento extensional, pueden ser causantes de obtener valores más grandes de  $We_{crit}$ , tal como se reporta en [49,77,95]. El tamaño de vórtice sigue una tendencia similar para los fluidos- $q_i$  aquí estudiados. Nótese que los fluidos para los cuales no se espera el ablandamiento extensional debido a las condiciones de flujo, el tamaño de celda sigue esencialmente la misma respuesta.



Las variables relacionadas directamente con la viscosidad cortante,  $\tau_{xy}$  y  $\Delta p$ , exhiben sólo diferencias menores en el flujo al cambiar el número de brazos de la molécula. En la línea central o de simetría, se tiene exclusivamente deformación extensional, mientras que una fuerte deformación cortante se desarrolla en las paredes del conducto de salida. En la sección de entrada a la contracción, incluyendo la esquina de entrada, se presentan las dos clases de deformaciones. En regiones dominadas por deformación extensional, se puede observar incremento en la magnitud del esfuerzo y estiramiento del esqueleto de la molécula Pom-Pom. La extensión molecular crece continuamente (incluso más del 100%) a lo largo de la sección de entrada a la contracción. Dicho incremento es más evidente para el cambio de fluido- $q_2$  a  $q_5$ . En el canal de salida, en donde se desarrolla una zona de deformación cortante fuerte, se detectan aumentos significativos en  $N_1$  y  $\lambda$  al incrementar  $q$ ; estas diferencias se mantienen a lo largo del canal de salida. Se tiene que el cambio de  $q = 2$  a  $q = 5$  es, de nuevo, más importante. Como se mencionó anteriormente, el coeficiente de la primera diferencia de esfuerzos normales es la causa de dichas variaciones.

Valores grandes del parámetro que gobierna la anisotropía del modelo eXtendido Pom-Pom ( $\alpha$ ), pueden producir singularidades (discontinuidades) en las funciones materiales. Sin embargo, de acuerdo con los resultados, no hay evidencia de que las discontinuidades en la funciones reométricas en flujo cortante se presenten, debido a que no se detectaron respuestas discontinuas ni errores que hagan pensar que ocurrieron. La explicación de que no se hayan presentado dichas singularidades es tal vez que las condiciones de flujo (deformación cortante y extensional) no alcanzan valores necesarios para esto.

La comparación de las respuestas de los modelos Pom-Pom y el exponencial de Phan-Thien/Tanner (EPTT), se presenta en términos de la tendencia de los vórtices. Los fluidos Pom-Pom presentan valores muy semejantes en los máximos de la viscosidad

extensional y relación de Trouton de dos fluidos EPTT, utilizados por Aboubacar et al. [7]. El ajuste de los fluidos Pom-Pom (para igualar los máximos en  $\eta_e$  y  $Tr$ ) se realizó fijando el cociente de viscosidades  $\beta$  al utilizado en [7], y luego, se variaron simultáneamente el número de brazos  $q$ , y el cociente de tiempos de relajación  $\varepsilon$ . Las diferencias en la rapidez de cambio en el adelgazamiento al corte y en el endurecimiento/decaimiento extensional, implican que incluso si el máximo en la viscosidad extensional es semejante para un fluido Pom-Pom y uno EPTT, las relaciones de Trouton del caso SXPP son mayores a las correspondientes PTT. Por esta razón, se presentan dos fluidos Pom-Pom para cada fluido de Phan-Thien/Tanner; el primero reproduciendo el máximo en  $\eta_e$ , mientras que el segundo, ajusta  $Tr$ .

Para el fluido PTT con el mayor nivel de endurecimiento extensional ( $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ ), los fluidos (I)<sub>a</sub> y (II) aproximan  $\eta_e$  y  $Tr$ , respectivamente. En este escenario, se observa que el crecimiento en el tamaño de celda e intensidad de vórtice siguen tendencias similares para los tres fluidos, excepto por un pequeño efecto inhibitor a valores bajos de elasticidad para el caso EPTT. Se encuentran vórtices de mayor tamaño para los fluidos con mayor nivel de endurecimiento en flujo extensional. Para el caso del endurecimiento moderado, EPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ ) y fluido-(III) muestran máximos semejantes en viscosidad extensional; la intensidad de vórtice crece hasta  $We \approx 5$ . Después de este valor, se observa una reducción. Sin embargo, los cambios para el fluido PTT son considerablemente más significativos. Para el caso SXPP, el fluido-(IV) no exhibe ningún grado de endurecimiento, este fluido sufre una reducción en  $\eta_e$  aún a valores bajos de rapidez de extensión. La tendencia de la intensidad de vórtice para este fluido es opuesta a la del correspondiente caso PTT. Este fluido SXPP es el único en el que se observa reducción en el tamaño de celda. Por esto, se puede concluir que niveles mayores en el crecimiento de  $\eta_e$ , están relacionados con la generación de vórtices de gran magnitud.

En este estudio, la tendencia en la dinámica de vórtices se aproxima mejor si se tienen fluidos con viscosidad extensional semejante, en vez de igualar relaciones de Trouton (para el caso de endurecimiento extensional moderado). En todas las secciones del presente capítulo, al reducir el nivel máximo en  $\eta_e$ , se produce un incremento en el nivel de elasticidad obtenible ( $We_{crit}$ ) en las simulaciones.

## CAPÍTULO 7

### Caída de Presión en Exceso para Fluidos de Boger\*

En este capítulo se estudia la estimación de la caída de presión ( $\Delta p$ ) para fluidos elásticos, con viscosidad cortante constante (fluidos de Boger), fluyendo a través de geometrías con contracción y contracción/expansión. Se ha encontrado experimentalmente que para un fluido de Boger, la caída de presión es mayor a la correspondiente de un fluido newtoniano con la misma viscosidad y flujo ( $Q$ ). Esto sucede en contracciones con geometría radial, mas no en contracciones de canales rectangulares. Este fenómeno se conoce como *caída de presión en exceso* (excess pressure drop o *epd*) y no ha sido posible simularlo numéricamente. El cambio de la geometría con contracción 4:1 a la contracción/expansión 4:1:4 ayuda a determinar factores que contribuyen a tal crecimiento en la caída de presión. Entre estos factores, la viscosidad extensional,  $\eta_e$ , del fluido y el cociente de viscosidades,  $\beta$ , ejercen una influencia extrema en el aumento de

---

\* Material de este capítulo ha sido enviado para su publicación en *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*.

la caída de presión. Además del modelo Oldroyd-B, en este capítulo se estudia el desempeño de otras ecuaciones constitutivas, capaces de reproducir endurecimiento extensional severo. Para obtener las simulaciones, se utiliza un algoritmo híbrido de elemento/volumen finito con un procedimiento de evolución en el tiempo.

## 7.1 Introducción

El aumento en la caída de presión en exceso<sup>†</sup> (*epd*) observado para fluidos de Boger en contracciones con geometría axisimétrica, pero no en geometrías rectangulares, ha sido un fenómeno muy difícil de simular para los algoritmos numéricos y modelos reológicos a la fecha. La importancia de estos fluidos de Boger es que representan de manera adecuada el comportamiento de sistemas poliméricos muy diluidos. La adición de pequeñas cantidades de polímero a un disolvente newtoniano puede producir propiedades elásticas de gran magnitud, mientras que la viscosidad cortante de la solución es prácticamente la misma del disolvente [96].

Nigen y Walters [97] midieron experimentalmente caídas de presión a través de contracciones, a diferentes flujos, para dos fluidos de Boger (B1 y B2 [96]) de poliacrilamida/glucosa-agua y dos fluidos newtonianos de glucosa-agua (NS1 y NS2 [96]). Las contracciones de estudio estuvieron en el intervalo  $2 \leq \hat{\beta} \leq 32$  para geometrías axisimétricas y planares; estos autores consideraron salidas (boquillas) largas y cortas. Al analizar la configuración en coordenadas cilíndricas, no se detecta diferencia alguna entre las caídas de presión para fluidos newtonianos y de Boger, esto a flujos de baja magnitud. Al incrementar  $Q$  (más de un orden de magnitud), las discrepancias se vuelven aparentes tanto en boquillas cortas como largas, aunque más pronunciadas para el caso de bo-

---

<sup>†</sup> En este capítulo, *epd* es usado para identificar la caída de presión de un fluido no newtoniano, aun si la tendencia al incrementar la elasticidad o flujo es decreciente. El término *aumento en epd* es utilizado cuando el exceso en caída de presión sigue una tendencia de crecimiento.

quillas cortas. Para el caso de coordenadas rectangulares, no se detecta ninguna diferencia entre fluidos de Boger y newtonianos.

En su trabajo experimental, Maia y Binding [14] consideraron el flujo del llamado fluido S1 (polisobutileno en una mezcla de disolvente consistiendo en polibuteno y Dekalin) a través de contracciones de simetría cilíndrica. El fluido S1 es un sistema que exhibe adelgazamiento al corte y endurecimiento extensional. Las relaciones de contracción consideradas están dentro del intervalo  $24.4:1 \leq \hat{\beta} \leq 124.3:1$ . Maia y Binding [14] observaron que la relación entre caída de presión y la rapidez de corte en la pared es independiente del cociente de contracción utilizado e identificaron tres distintas regiones de  $\Delta p$  sobre la rapidez de corte en la pared. Usando el “análisis de Binding”, estos autores encontraron resultados cualitativamente aceptables al calcular la viscosidad extensional, de baja rapidez de deformación, a partir de datos de caída de presión en contracciones. Maia [13] probó la capacidad de dos ecuaciones constitutivas integrales, la propuesta por Wagner y su modificación por Papanastasiou-Scriven-Macosko (modelo PSM). También estudió dos modelos diferenciales, la versión exponencial de Phan-Thien/Tanner (EPTT) y el modelo de Giesekus; estos modelos fueron usados para representar la respuesta del fluido S1 en flujo cortante y extensional uniaxial estacionario y también en flujo a través de contracciones con simetría radial. Se encontró que los resultados del modelo EPTT están en mejor concordancia con observaciones experimentales. Adicionalmente, al utilizar el análisis de Binding con este modelo, se predijeron razonablemente bien las caídas de presión (en términos de la corrección de Couette) para valores bajos y altos de rapidez de corte en la pared. En la zona intermedia, el análisis sobreestima los valores experimentales.

El flujo a través de geometrías con contracción/expansión de simetría radial ( $2 \leq \hat{\beta} \leq 8$ ) fue estudiado por Rothstein y McKinley [76] (ver además [98]). Estos autores investigaron la respuesta de la caída de presión de un fluido de Boger a condiciones

de flujo reptante. El fluido de Boger consistió en una solución diluida de poliestireno monodisperso/poliestireno (oligómero), con una relación de viscosidades de aproximadamente  $\beta = 0.92$ . Los autores observaron, en todas sus pruebas, valores grandes de  $epd$  (respecto al caso newtoniano), variando la relación de diámetros de la contracción ( $\hat{\beta}$ ) y la curvatura de la esquina reentrante.

Szabo et al. [99] simularon el flujo de la versión de Chilcott-Rallison del modelo de extensión finita de un resorte no lineal (FENE-CR). Este modelo representa un fluido con viscosidad cortante constante y endurecimiento extensional [100]. La geometría de flujo utilizada fue una contracción/expansión 4:1:4 con simetría radial. Los autores observaron que al fijar el parámetro de extensibilidad a  $L = 5$ , la caída de presión en exceso disminuye a valores bajos de elasticidad, hasta que a un número de Deborah<sup>‡</sup> ( $De$ ) de  $\approx 3$ ,  $epd$  sigue una tendencia creciente. Para incrementos posteriores en elasticidad, la caída de presión para el fluido de Boger supera (ligeramente) a la correspondiente newtoniana hasta que la convergencia se pierde ( $De_{crit} \approx 9.5$ ). Al ajustar  $L = 3.26$ , se observa de nuevo un incremento en  $epd$ ; sin embargo la convergencia se pierde antes de cruzar el valor newtoniano de referencia. Adicionalmente, al fijar el parámetro de extensibilidad a  $L \rightarrow \infty$  (respuesta reométrica equivalente al modelo Oldroyd-B) se tiene un decaimiento monótono en  $epd$  al aumentar la elasticidad. El parámetro  $L$  controla la máxima extensión alcanzable por la moléculas de polímero, el grado de endurecimiento extensional para el modelo FENE-CR es siempre mayor a valores más grandes de  $L$ . La relación de viscosidad disolvente/solución en la referencia [99] es de<sup>§</sup>  $\beta = 1/9$ .

Para  $L = 3.26$ , el mínimo (i.e. inicio de la subida) en  $\Delta p$  es a un valor de  $De \approx 1.2$ , sin embargo, el aumento en  $epd$  no es lo suficientemente grande para cruzar la línea de

---

<sup>‡</sup> Con una definición idéntica al número de Weissenberg usado en el presente estudio.

<sup>§</sup> Como se menciona en el capítulo 5,  $\beta = 1/9$  representa un sistema con alto contenido polimérico, que no es el caso de un fluido de Boger; sin embargo, como la viscosidad cortante del modelo FENE-CR es constante, se puede usar para representar sistemas poliméricos muy diluidos en ciertos casos.

referencia newtoniana, debido a la pérdida de convergencia. Al cambiar a  $L=5$ , el mínimo en  $\Delta p$  es ahora a  $De \approx 3$  y el *cruce* (de la línea newtoniana) aparece. Finalmente, para una molécula polimérica sin límite en extensión ( $L \rightarrow \infty$ ), no se aprecia ningún mínimo (y por tanto, ningún *cruce*) en  $\Delta p$ . La respuesta de la caída de presión en este caso, es similar a la reportada (Aboubacar et al. [7,8,58]) para un fluido de Oldroyd-B. La presencia del *mínimo* y del *cruce* en  $\Delta p$  son fenómenos de gran importancia, en donde el balance entre efectos elásticos y viscosos ejerce un papel clave. El procedimiento numérico empleado fue un esquema de elemento finito. Szabo et al. [99] fueron los primeros en simular numéricamente dicho incremento en  $epd$  y su crecimiento arriba del valor newtoniano.

En la contracción/expansión 4:1:4, las distancias requeridas para que el esfuerzo se relaje completamente son significativamente más cortas que aquellas para la contracción 4:1. Exceptuando la presión, no se presentan diferencias entre los valores en posiciones suficientemente alejadas de la restricción 4:1:4, sean antes o después. Por tanto, la rapidez de disipación ( $\mathcal{D}$ ) sobre el dominio puede ser igualada al producto del flujo por la caída de presión obtenida. No se puede obtener una relación similar para el caso de la contracción. Esta característica fue mencionada por Cartalos y Piau [101]. En la sección 7.3.3e, esta equivalencia entre la disipación y el producto de la caída de presión y flujo, es de ayuda para reconocer las condiciones requeridas para obtener las pérdidas de presión ( $\Delta p_{Boger}$ ) mayores a las correspondientes de fluidos newtonianos.

La respuesta de la caída de presión del modelo Pom-Pom, para un fluido con adelgazamiento al corte, es un decaimiento monótono, para una geometría con contracción/expansión 4:1:4 planar, según lo reportado por Wapperom y Keunings [94]. En un estudio más reciente, Binding et al. [102] predijeron el *mínimo* en  $\Delta p$  para el caso 4:1:4 en ambas configuraciones, planar y axisimétrica, ajustando la relación de viscosidad disolvente/solución a  $\beta = 1/9$ . El *cruce* fue detectado para la configuración planar con el



mismo valor de  $\beta$ . Los resultados para el sistema con alto contenido polimérico ( $\beta = 1/9$ ) siguen una tendencia decreciente en caída de presión contra el incremento en  $De$ . En la referencia [102], se utilizó el software de volumen finito POLYFLOW.

Perera y Walters [103] investigaron el flujo, a través de una expansión/contracción/expansión, de un fluido de Oldroyd de 4 constantes, fluido que presenta adelgazamiento al corte. Su principal objetivo fue el de observar la influencia de las funciones reométricas sobre el crecimiento de vórtices. Keiller [95] predijo caídas de presión a través de orificios dentro de tubos para los modelos Oldroyd-B y FENE-CR. Para estos fluidos viscoelásticos, los valores de  $\Delta p$  son menores que para el caso newtoniano, con equivalente viscosidad cortante y flujo. Keiller asoció esta disminución en la caída de presión con el desarrollo de un flujo Poiseuille en la gran longitud del tubo de salida. La caída de presión extra\*\* para los modelos Oldroyd-B y FENE-CR siguieron el mismo decaimiento monótono al incrementar el número de Weissenberg ( $We$ ). Esto se obtiene cuando la elasticidad es lo suficientemente grande para que las moléculas hayan alcanzado su máxima extensión en el caso del modelo FENE-CR, produciendo un pequeño incremento antes de alcanzar un valor asintótico en caída de presión en ambas configuraciones, axisimétrica y planar.

Aboubacar et al. [7,8] compararon la caída de presión para el flujo a través de una contracción abrupta (esquina reentrante sin curvatura alguna) y una con esquina redondeada, en geometrías en coordenadas cilíndricas y rectangulares, para cinco fluidos viscoelásticos, uno Oldroyd-B (endurecimiento extensional sin límite superior), dos casos con bajo crecimiento en viscosidad extensional ( $\eta_e$ ) y, dos casos con endurecimiento severo, estos últimos cuatro fluidos, representados con los modelos PTT (lineal y exponencial). La caída de presión reportada fue normalizada con la correspondiente a un flui-

---

\*\* Definición: caída de presión extra  $\frac{\Delta p_{Boger} - \Delta p_{Newt}}{\Delta p_{Newt} / L_{downstream}}$ .

do newtoniano. El parámetro del contenido de disolvente fue fijado como  $\beta = 1/9$ . Al aumentar la elasticidad, los resultados de las simulaciones para *todos* los fluidos mostraron un decaimiento monótono de la caída de presión normalizada, es decir, los valores siempre fueron menores, y se alejaban del valor unitario (caída de presión normalizada del fluido newtoniano) al incrementar la elasticidad. La tendencia de cada caso sufrió poco cambio al variar el tipo de esquina (curva o abrupta). Estos comentarios son válidos tanto para la simetría rectangular como la cilíndrica. De los fluidos estudiados, el fluido Oldroyd-B presenta una viscosidad cortante constante y los cuatro PTT sufren adelgazamiento cortante. De lo anterior surge el cuestionamiento de qué condiciones son requeridas para producir un aumento en *epd* en la configuración cilíndrica para el modelo altamente elástico, con viscosidad cortante constante, Oldroyd-B; modelo capaz de representar la respuesta de fluidos de Boger.

Las simulaciones numéricas reportadas en este capítulo se obtuvieron con el algoritmo híbrido de elemento/volumen finito (*fe/fv*). El problema considerado es el flujo lento (reptante) a través de una contracción 4:1 y una contracción/expansión 4:1:4, con esquinas curvas y con simetrías rectangulares y cilíndricas. La geometría contracción/expansión 4:1:4 está de acuerdo a la especificada por Rothstein and McKinley [76,98], Szabo et al. [99] y Wapperom y Keunings [94]. El modelo Oldroyd-B es empleado para representar respuesta tipo de fluidos de Boger, debido a que su viscosidad cortante es constante y que el endurecimiento extensional es severo (tiende a infinito). De manera alterna, se utilizaron los modelos de Phan-Thien/Tanner y Pom-Pom extendido de una ecuación (SXPP), con un adecuado ajuste de parámetros, para representar también fluidos de Boger. Con este fin, el adelgazamiento al corte exhibido por ambos modelos es removido casi completamente, al incrementar  $\beta$ . El endurecimiento extensional severo se obtiene al mover los parámetros restantes de cada modelo.

## 7.2 Especificación del Problema

El radio del canal de entrada (distancia media en el caso rectangular) es  $R_u$ ; el del plano medio está dado por  $R_c = R_u/4$ ; la curvatura de la esquina entrante está determinada por fracciones de  $R_c$ , ver Figura 7.1 para una representación esquemática de estas geometrías. Las especificaciones de la contracción/expansión son las mismas que las dadas en la referencia [94]. Las longitudes de los canales de entrada y salida son  $19.5L$ , donde  $L = R_u/4$ . En el caso de la contracción, se utilizó la misma geometría que en el capítulo 6.

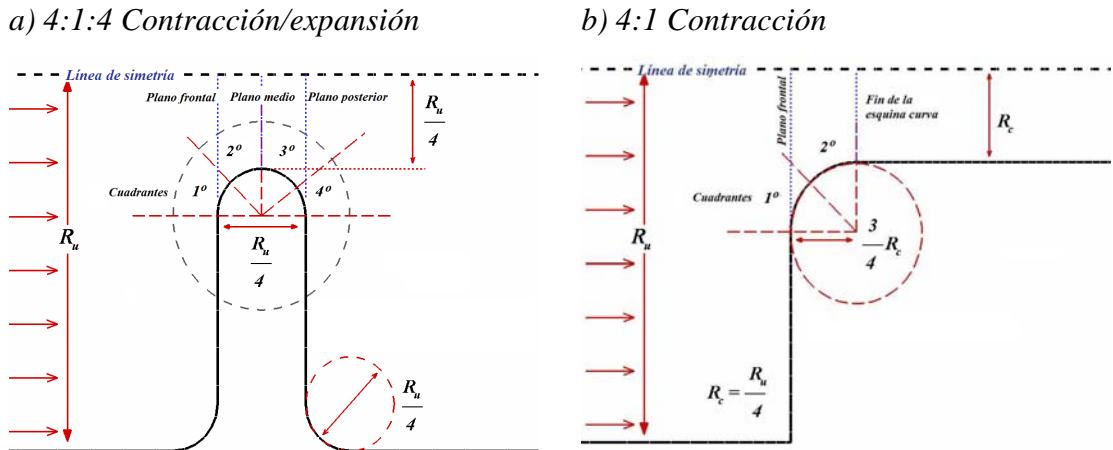


Figura 7.1. Diagrama de a) contracción/expansión 4:1:4, b) 4:1 contracción.

Se emplearon tres mallados con diferentes grados de refinamiento (ver Figura 7.2) para cada geometría. La densidad de elementos crece espacialmente en la vecindad de la pared de la contracción. La Tabla 7.1 provee información detallada de las características de cada mallado.

En este estudio se hace la comparación entre las simulaciones en geometrías rectangulares y cilíndricas al imponer la misma velocidad promedio a través de la restricción,

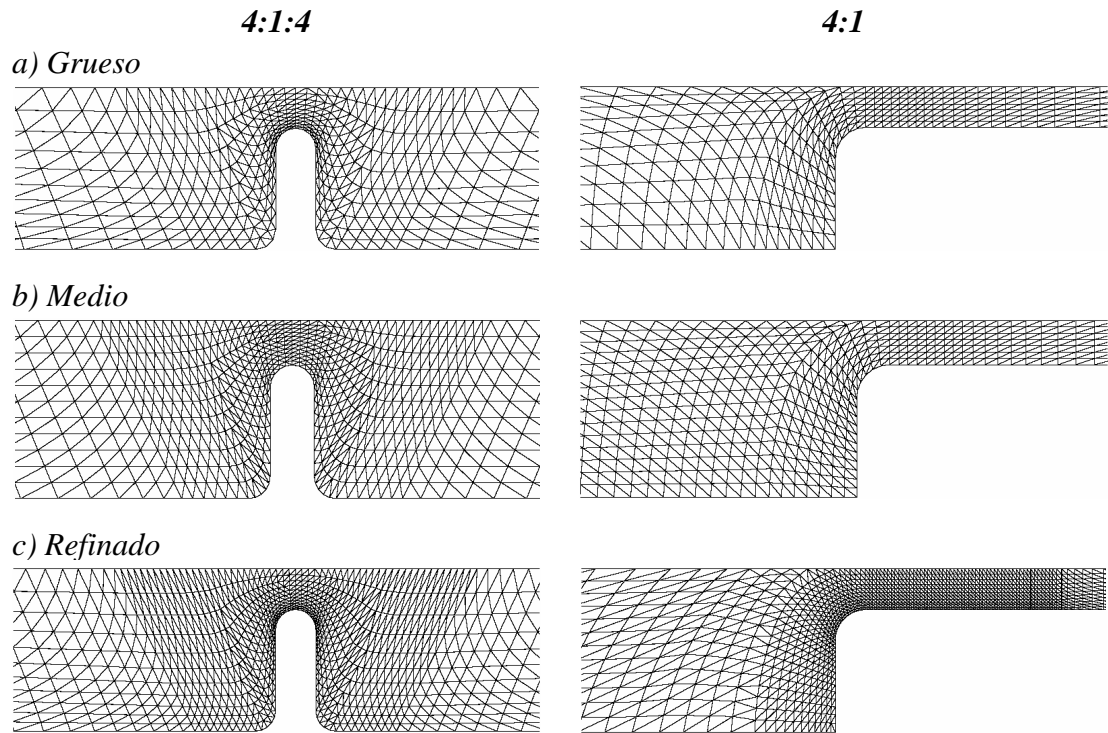


Figura 7.2. Acercamientos de los mallados contracción/expansión 4:1:4 y contracción 4:1; a) grueso, b) medio, c) refinado.

de manera similar a como hicieron Binding et al. [102] y Phillips [104]. La respuesta en flujo se analiza con respecto al incremento en elasticidad, en términos del número de Weissenberg. El incremento en  $We$  puede lograrse mediante la variación del tiempo de relajación del fluido o en la escala de velocidad; ver ecuación (2.50), dando ambos enfoques resultados muy semejantes. En este trabajo, el incremento en el número de Weissenberg se hace por medio del tiempo de relajación.

Las condiciones de frontera a la entrada de la geometría son impuestas mediante la solución del flujo Poiseuille, reportado por Waters y King [62]. La velocidad en la pared se fija a cero (condición de adherencia). La longitud del canal de entrada es suficientemente grande para asegurar que antes de que el fluido alcance la zona de entrada a la contracción, el flujo sea totalmente desarrollado. El esfuerzo está determinado de mane-

ra puntual por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias generadas del modelo reológico en particular. Se emplea la técnica de continuación en elasticidad para obtener soluciones a estado estacionario convergentes; los incrementos en  $We$  son típicamente  $\{0.1, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.1, 2.2, \dots, We_{crit}\}$ . A  $We = 0.1$ , las condiciones iniciales para esfuerzo y velocidad son a condiciones de reposo. El criterio para terminar el procedimiento de incrementos de tiempo es cuando la norma  $L_2$ , relativa a la máxima diferencia entre dos pasos de tiempo consecutivos cae dentro de una tolerancia ( $10^{-7}$  en el presente estudio).

### 7.2.1 Calibración de la caída de presión

La caída de presión total, observada en un flujo por una contracción, es la suma de la correspondiente  $\Delta p$ , del flujo Poiseuille completamente desarrollado, antes y después de la contracción, más la pérdida adicional debido a la presencia de la restricción. A esta pérdida adicional se le denomina aquí “corrección de entrada”  $\Delta p_{en}$ . Si el fluido es de tipo Boger, se esperan diferencias significativas en las geometrías axisimétricas, más no en las rectangulares; esto al compararse con el caso newtoniano de igual viscosidad y flujo.

Tabla 7.1. Características de los mallados

<i>Mallado</i>	<i>Elementos</i>	<i>Nodos</i>	<i>Grados de Libertad</i> <i>(u, p, τ)</i>	<i>Rmin</i>
<i>(4:1:4)<sub>a</sub></i>	1080	2289	14339	0.0099
<i>(4:1:4)<sub>b</sub></i>	1672	3519	22038	0.0074
<i>(4:1:4)<sub>c</sub></i>	2112	4439	27798	0.0058
<i>(4:1)<sub>a</sub></i>	1086	2325	14570	0.0296
<i>(4:1)<sub>b</sub></i>	1626	3433	21502	0.0170
<i>(4:1)<sub>c</sub></i>	2693	5652	35392	0.0097

La caída de presión en exceso (*epd*) es reportada aquí en términos de la corrección de entrada normalizada (ver por ejemplo [7,76,98,102]) y se define como

$$\mathcal{P} = \frac{(\Delta p - \Delta p_{fd})_{Boger}}{(\Delta p - \Delta p_{fd})_{Newt}} = \frac{(\Delta p_{en})_{Boger}}{(\Delta p_{en})_{Newt}} \quad (7.1)$$

donde la contribución del flujo Poiseuille es  $\Delta p_{fd} = \Delta p_{upstream} + \Delta p_{downstream}$  y, como se menciona anteriormente, el flujo y la viscosidad de corte se establecen como iguales para ambos fluidos, viscoelástico y newtoniano. La caída de presión total ( $\Delta p = p^{inlet} - p^{exit}$ ) se monitorea en posiciones sobre la línea central, en las que se puede suponer que el flujo está totalmente desarrollado (dentro de valor de 1%) en  $\tau$ ,  $\nabla \mathbf{u}$  o  $\nabla p$ . Se varía la relación de viscosidad  $\beta$  con el fin de obtener fluidos aproximados a los de Boger. Los valores de esta relación son  $\{1/9, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999\}$ ; los sistemas con alto contenido polimérico están representados por  $\beta = 1/9$ , mientras que  $\beta \geq 0.9$  es para sistemas muy diluidos. Para los modelos cuya viscosidad cortante no es constante (PTT y SXPP),  $\beta$  controla el nivel de variación en  $\eta_s$ . De hecho, para la viscosidad cortante normalizada ( $\eta_s/\eta_{s0}$ ), se satisface la relación  $\eta_s/\eta_{s0} \rightarrow \beta$  para valores extremadamente grandes de la rapidez de corte ( $\dot{\gamma} \rightarrow \infty$ ). Esto significa que para  $\beta = 0.9$ , se anticipa que la desviación máxima de la respuesta de un fluido de Boger es de 10%. Por tanto, para los modelos PTT y XPP, la relación de viscosidad utilizada en este capítulo es  $\beta \geq 0.9$ .

### 7.3 Resultados y comentarios

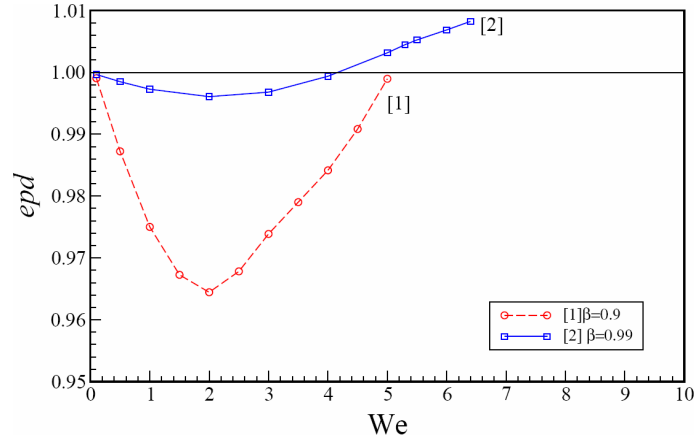
Se estudia la caída de presión en exceso variando la elasticidad, para el modelo Oldroyd-B. La causa de las diferencias observadas en *epd* se analiza para dos diferentes niveles de contenido de disolvente:  $\beta = 0.9$ , donde se presenta el *mínimo en  $\Delta p$*  (i.e. *epd* comienza a crecer) y,  $\beta = 0.99$ , en donde aparece el fenómeno de *cruce* del valor

newtoniano de referencia. Después se presenta una comparación entre el flujo a través de las geometrías 4:1:4 y 4:1; comparación realizada en términos de la presión ( $p$ ). Se utilizan ecuaciones reológicas como los modelos de Phan-Thien/Tanner y la versión Pom-Pom extendida de una ecuación, a los cuales se ajustaron parámetros para que representen de forma aproximada a fluidos con viscosidad cortante constante, con niveles grandes de endurecimiento extensional; esto con el fin de estimular el aumento en  $epd$  de fluidos con viscosidad cortante delimitada. Se examina la influencia de la posición de los puntos de monitoreo, y se incluyen comentarios en las condiciones necesarias para obtener caídas de presión de gran magnitud, comparados con los exhibidos por fluidos newtonianos.

### ***7.3.1 Caída de presión en exceso, geometrías 4:1:4 y 4:1: modelo Oldroyd-B***

En la Figura 7.3 se muestran los resultados de la geometría 4:1:4 planar y cilíndrica, de la variación de la caída de presión en exceso ( $epd$ ) al aumentar el nivel de elasticidad ( $We$ ) del sistema. Considérese primero la relación de disolvente  $\beta = 0.9$  en la geometría radial, en donde se presenta un decaimiento al incrementar  $We$  hasta que se alcanza un valor  $epd$  mínimo a  $We = 2$ . Después de esto, se tiene una tendencia creciente, la cual se detiene debido a la pérdida de convergencia a  $We_{crit} = 5$ . En este último valor de elasticidad,  $epd$  toca la línea de referencia newtoniana ( $epd = 1$ ). La presencia de este *mínimo* es la primer característica a ser analizada. La misma respuesta se presenta para el caso axisimétrico con  $\beta = 0.99$ . El mínimo ocurre al mismo nivel de elasticidad que para el caso  $\beta = 0.9$ , aunque para este sistema más diluido,  $epd$  cruza la línea de referencia a  $We \approx 4.2$  y el crecimiento continúa hasta  $We_{crit} = 6.4$ . En este caso, ocurre el *cruce*, la segunda característica importante. Nótese que aun cuando la rapidez de crecimiento en  $epd$  es menor para  $\beta = 0.99$  que la pendiente del caso  $\beta = 0.9$ , dos

a) 4:1:4 Axisimétrico



b) 4:1:4 Planar

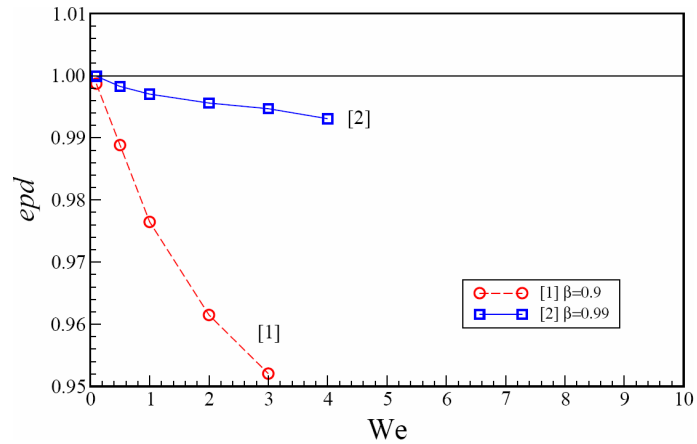
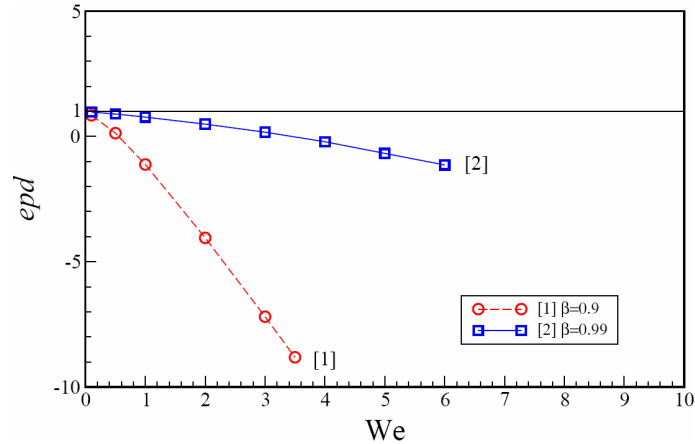


Figura 7.3. Caída de presión ( $epd$ ) vs.  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$  y  $0.99$ , contracción/expansión 4:1:4; a) axisimétrico, b) planar.

factores propician el *cruce*: la capacidad de obtener simulaciones con valores de elasticidad mayor y el hecho de que a  $\beta = 0.99$ , la línea de  $epd$  está muy cercana al valor newtoniano de referencia; esto debido a la mayor cantidad de disolvente. En el caso planar, se tiene un decaimiento monótono (curvatura cóncava) en  $epd$  para ambos niveles de contenido de disolvente. Los niveles críticos son  $We_{crit} \approx 3$  y  $We_{crit} \approx 4$  para  $\beta = 0.9$  y  $\beta = 0.99$ , respectivamente. Cambiando a la contracción 4:1 (Figura 7.4), sólo



a) 4:1 Axisimétrico



b) 4:1 Planar

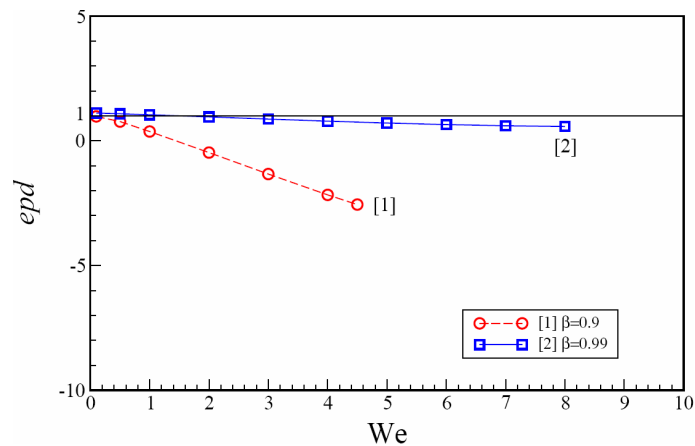


Figura 7.4. Caída de presión ( $epd$ ) vs.  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta=0.9$  y  $0.99$ , contracción 4:1; a) axisimétrica, b) planar.

se presenta reducción en  $epd$  al aumentar la elasticidad del sistema. Esta reducción es más significativa para el escenario de simetría cilíndrica que para el caso rectangular; curiosamente, la tendencia es ahora convexa, por lo que no se anticipa ningún valor asintótico para esta configuración radial. Niveles críticos de elasticidad (o de pérdida de convergencia) son  $We \approx 3.5$  ( $\beta = 0.9$ ),  $We \approx 6$  ( $\beta = 0.99$ ) para la contracción axisimétrica, y  $We \approx 4.5$  ( $\beta = 0.9$ ),  $We \approx 8$  ( $\beta = 0.99$ ) para la configuración rectangular. Nótese

que los valores de  $epd$  para la contracción son significativamente mayores que para la contracción/expansión; de hecho, las caídas de presión pueden ser alrededor de veinte veces más grandes en el caso de la contracción 4:1.

En todas estas simulaciones, se alcanzan niveles de elasticidad mayores para sistemas con mayor contenido de disolvente (i.e. valores de  $\beta$  mayores). La reducción en la caída de presión ha sido frecuentemente reportada tanto para configuraciones rectangulares como cilíndricas y para los dos tipos de esquina usados aquí, abrupta y con curvatura [7,8,95,105].

### *7.3.1a Resultados – flujo 4:1:4*

La Figura 7.5 presenta las líneas de contorno para la presión en el caso 4:1:4, a  $We = 2$  y  $We = 3$ , fijando  $\beta = 0.99$ ; esto con el fin de demostrar la obtención de la convergencia con respecto al nivel de refinamiento del mallado. Al observar estas líneas de contorno, se detectan dos aspectos: desde el mallado grueso hasta el fino, ocurre un efecto suavizante en los trazos, esto debido a que la solución se obtiene en más puntos (nodos) cuanto más refinado sea el mallado; de forma adicional, las líneas de contorno a cualquier presión (adimensional) están localizadas en la misma posición de cada mallado utilizado, por lo que se concluye que los resultados de cualquier mallado es adecuado.

#### *- Flujo en contracción/expansión axisimétrico; $\beta = 0.9$*

En este caso se presta atención especial a la presencia del *mínimo en  $\Delta p$*  para esta situación. Las líneas de contorno para la presión alrededor de la restricción se muestran en la Figura 7.6. Además de los diferentes niveles de presión, se aprecian discrepancias entre las configuraciones rectangulares y axisimétricas en una pequeña área, en contacto con la parte frontal de la restricción. En esta zona se detecta un máximo (local) en

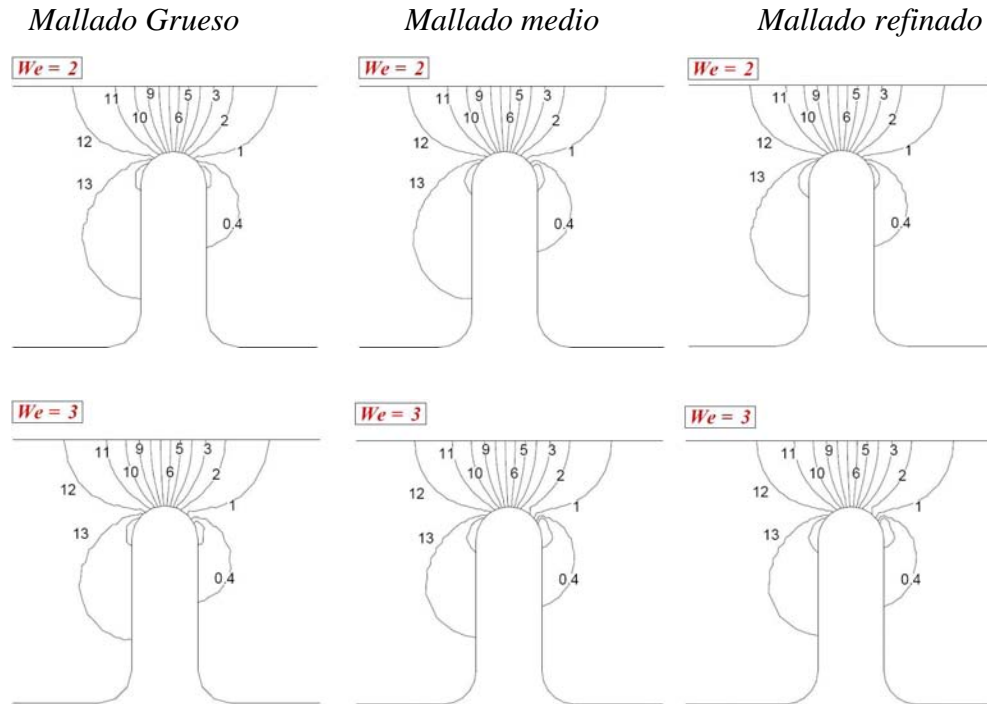


Figura 7.5. Niveles de presión alrededor de la contracción/expansión (Oldroyd-B):  $\beta = 0.99$ ,  $We = 2$  y  $3$ , 4:1:4 axisimétrico, mallado grueso, medio y refinado.

presión, y para el caso con configuración cilíndrica, esta zona decrece en área para  $We=1$  y  $We=2$ . Después de esta reducción, se detecta un incremento al alcanzar  $We=3$ . Esta respuesta no se presenta en el caso de la configuración planar, en donde únicamente se detecta la reducción en el área de esta zona. Esto puede observarse en las zonas sombreadas de la Figura 7.6. Nótese que la respuesta (reducción/aumento) en estas regiones emula a la mostrada por  $epd$  (también se presenta un mínimo en el mismo valor de elasticidad).

- Presión en la línea de simetría y a lo largo de la pared, axisimétrico,  $\beta = 0.9$

Para el caso 4:1:4 con simetría radial, la presión en la línea central (simetría) se presenta en la Figura 7.7, en la cual, el gráfico inferior izquierdo es para la geometría

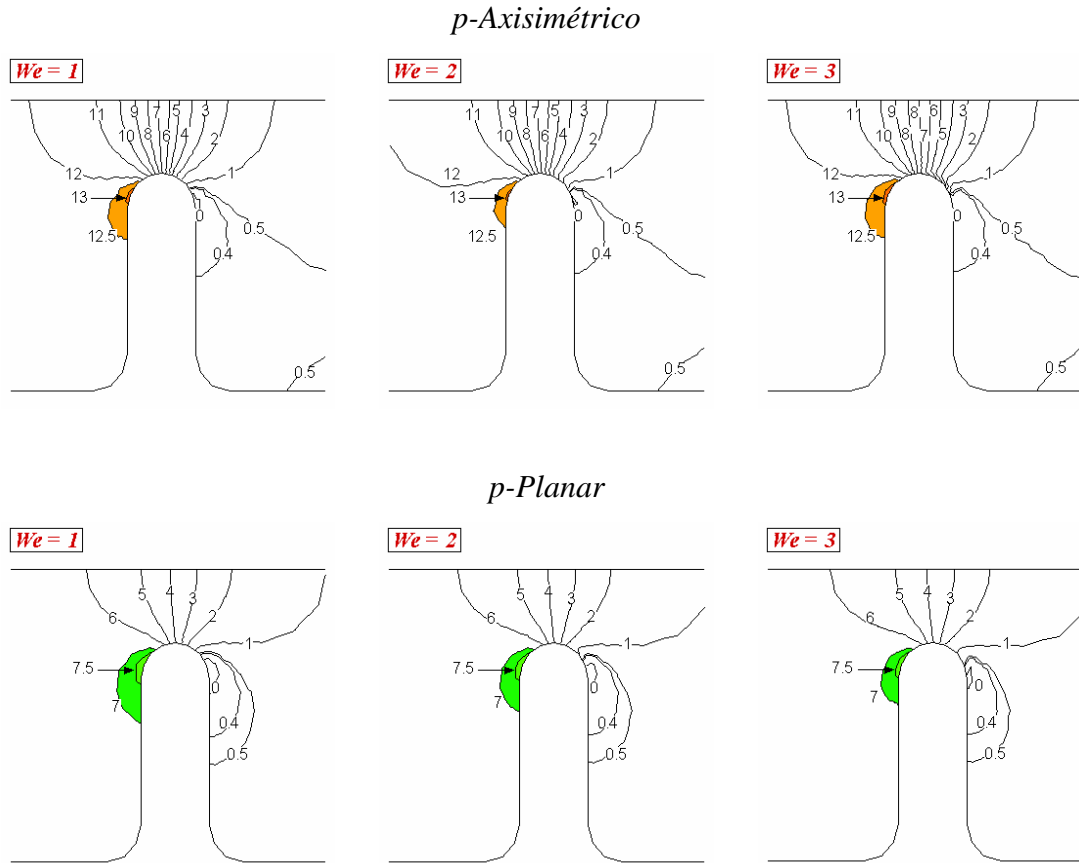


Figura 7.6. Líneas de contorno de presión alrededor de la contracción/expansión: incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , axisimétrico vs. planar.

completa y las otras secciones son ampliaciones de otras secciones. El gráfico superior izquierdo es una ampliación de la sección de entrada a la contracción, zona en la cual se detecta un cruce o mínimo en los niveles de presión mostrados. A medida de que el flujo avanza hacia la contracción (gráfico superior derecho), la presión se torna lineal, esto es,  $p$  crece con  $We$ . Para la sección de salida de la restricción (gráfico inferior derecho) no se detectan diferencias significativas; los niveles seleccionados de Weissenberg coinciden y gradualmente se acerca al valor preestablecido de salida. También hay que notar, que como el valor de salida (valor de referencia) es de  $p = 0$ , los comentarios anteriores son también válidos para caída de presión.

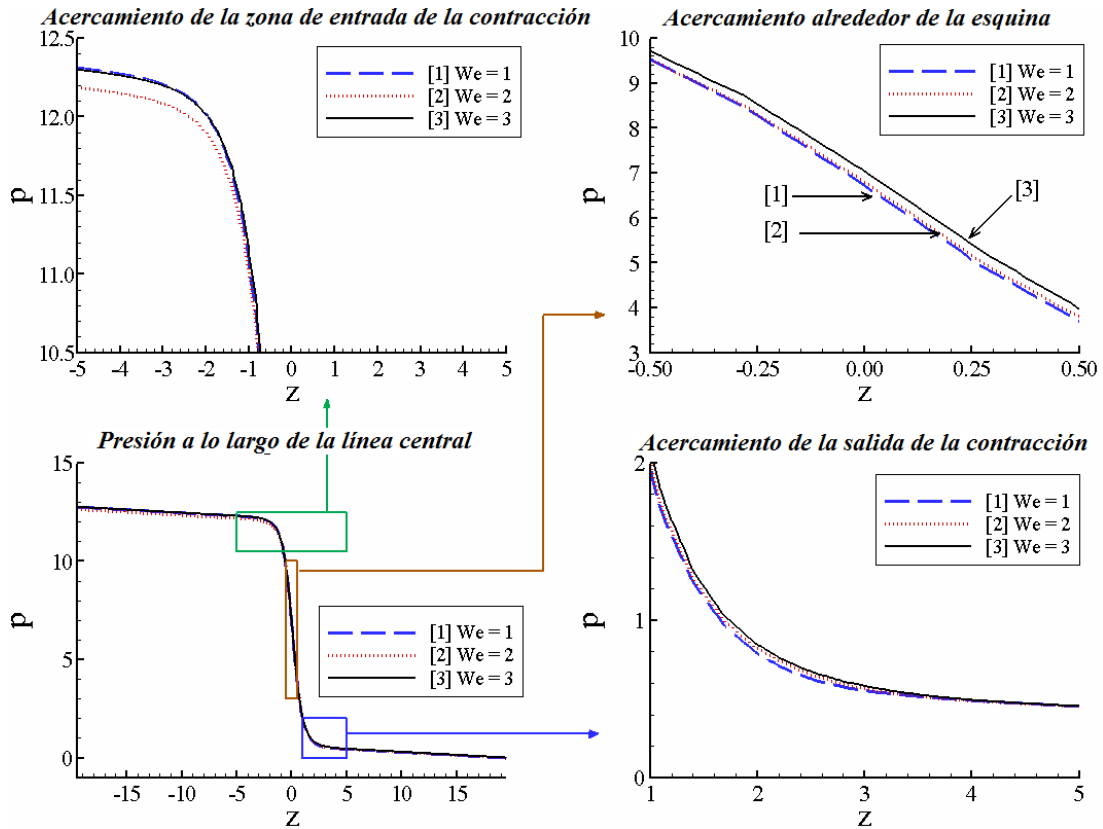


Figura 7.7. Perfil de presión a lo largo de la línea de simetría: incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ . 4:1:4 axisimétrico.

- Perfiles de presión en la pared; axisimétrico y planar,  $\beta = 0.9$

La línea de simetría es comúnmente usada para reportar la variación de las variables de flujo; sin embargo, hacer esto no ayuda a saber el por qué ocurre el mínimo. Por este motivo se presentan en la Figura 7.8 los perfiles de presión a lo largo de la pared. Se introduce una coordenada curvilínea generalizada ( $\xi$ ) para tomar en cuenta la caras frontal y posterior de la restricción. Esta variable se define en forma de incrementos como  $\delta\xi = \sqrt{\delta r^2 + \delta z^2}$ , en donde  $r$  y  $z$  son, respectivamente, las coordenadas radial/vertical y axial, y  $\delta$  es el operador de diferencia.

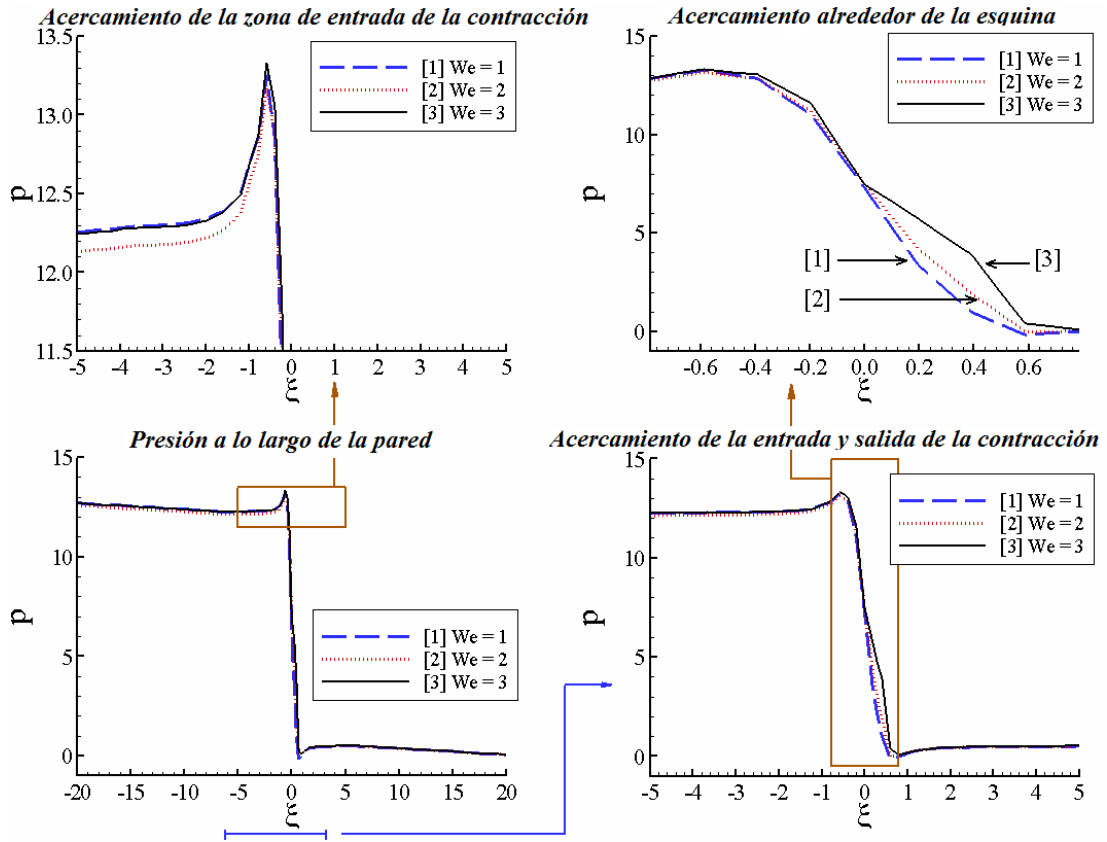


Figura 7.8. Perfil de presión a lo largo de la pared: incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico.

El mínimo o cruce en los niveles de presión también se presenta al crecer el nivel de elasticidad en la sección de entrada a la contracción (gráfico superior izquierdo), esto es, la presión a  $We = 3$  se torna superior que para  $We = 2$ , siendo ligeramente inferior a la calculada para  $We = 1$ . El gráfico inferior derecho de la Figura 7.8 es una amplificación alrededor de la restricción, en donde se observan diferencias menores en las líneas de  $p$ . Es en la zona después del plano medio de la restricción (ver Figura 7.1), en la que se observan diferencias importantes. El gráfico superior derecho es una amplificación adicional de la región de la restricción, cubriendo exactamente desde la cara frontal de la contracción hasta la cara posterior de la expansión, el plano medio está localizado en  $\xi = 0$ .

Se detectan algunas diferencias para los tres niveles de  $We$  antes del plano medio. En esta zona, la diferencia entre las soluciones a  $We = 3$  y  $We = 2$  es ligeramente mayor que para  $We = 2$  y  $We = 1$ . La magnitud de estas diferencias en la sección de la cara posterior (tercer/cuarto cuadrantes en la Figura 7.1) es visiblemente mayor. El incremento en  $We$  se refleja en niveles superiores de presión a través del tercer y cuarto cuadrante; el distanciamiento entre  $We = 3$  y  $We = 2$  es ahora significativamente mayor.

En la Figura 7.9 se presenta una comparación del flujo por la contracción/expansión 4:1:4 entre el caso axisimétrico y el planar. La región mostrada corresponde a las caras frontal y posterior de la restricción. Para el caso rectangular es difícil observar diferencias en los valores de presión, antes del plano medio. Estas diferencias son apenas visibles en el cuarto cuadrante, posición en la que el fluido rebasó la separación mínima de la geometría (plano medio).

Las soluciones del caso 4:1:4 con simetría radial muestran diferencias mayores en toda la sección. La separación máxima, entre los resultados de presión a cada nivel de elasticidad, se reduce en un factor de tres al cambiar de la geometría cilíndrica a la rectangular. Adicionalmente se observa que las discrepancias en la tendencia de  $p$  se localizan principalmente en el cuarto cuadrante, en contraste con el caso cilíndrico, en donde se presentan diferencias significativas justo después de que el fluido pasó el plano medio (inicio del tercer cuadrante).

*- Esfuerzo y rapidez de deformación, casos planar y axisimétrico,  $\beta = 0.9$*

En la Figura 7.10 se presentan gráficos de superficie para la primer diferencia de esfuerzos (poliméricos) normales, definida por<sup>††</sup>  $N_1 = \tau_{11} - \tau_{22}$ . También se presentan líneas de contorno para  $\tau_{11}$  y  $\tau_{22}$  en la Figura 7.11 y Figura 7.12, respectivamente. Como se

---

<sup>††</sup> Caso rectangular ( $\tau_{xx}, \tau_{yy} \rightarrow \tau_{11}, \tau_{22}$ ); axisimétrico ( $\tau_{rr}, \tau_{zz} \rightarrow \tau_{22}, \tau_{11}$ ).

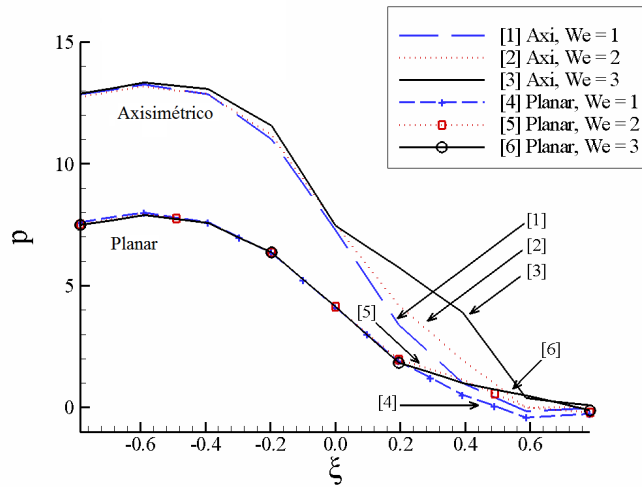


Figura 7.9. Perfil de presión a lo largo de la pared de la restricción (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.

mencionó anteriormente, estos gráficos son para la mitad del canal, debido a consideraciones de simetría, además de que sólo presentan la restricción y sus alrededores. En todas las figuras la perspectiva es tal que la dirección del flujo es de izquierda a derecha.

Para ambos escenarios, planar y axisimétrico, los máximos en la diferencia polimérica de esfuerzos y del componente  $\tau_{11}$  están situados justo después del plano medio, en el tercer y cuarto cuadrantes, en contacto con la pared de la restricción. El campo  $\tau_{11}$  muestra que este máximo ocurre en una superficie relativamente pequeña, mas con una gran “concentración” de esfuerzo (extrema en la configuración radial). En la contracción con simetría radial, el máximo en  $N_1$  se incrementa desde 5.7 a 45.9 unidades (más de ocho veces mayor) cuando la elasticidad varía de  $We = 1$  a  $We = 3$ , con un ligero desplazamiento (hacia la salida de la restricción) en la locación del máximo. Se detecta



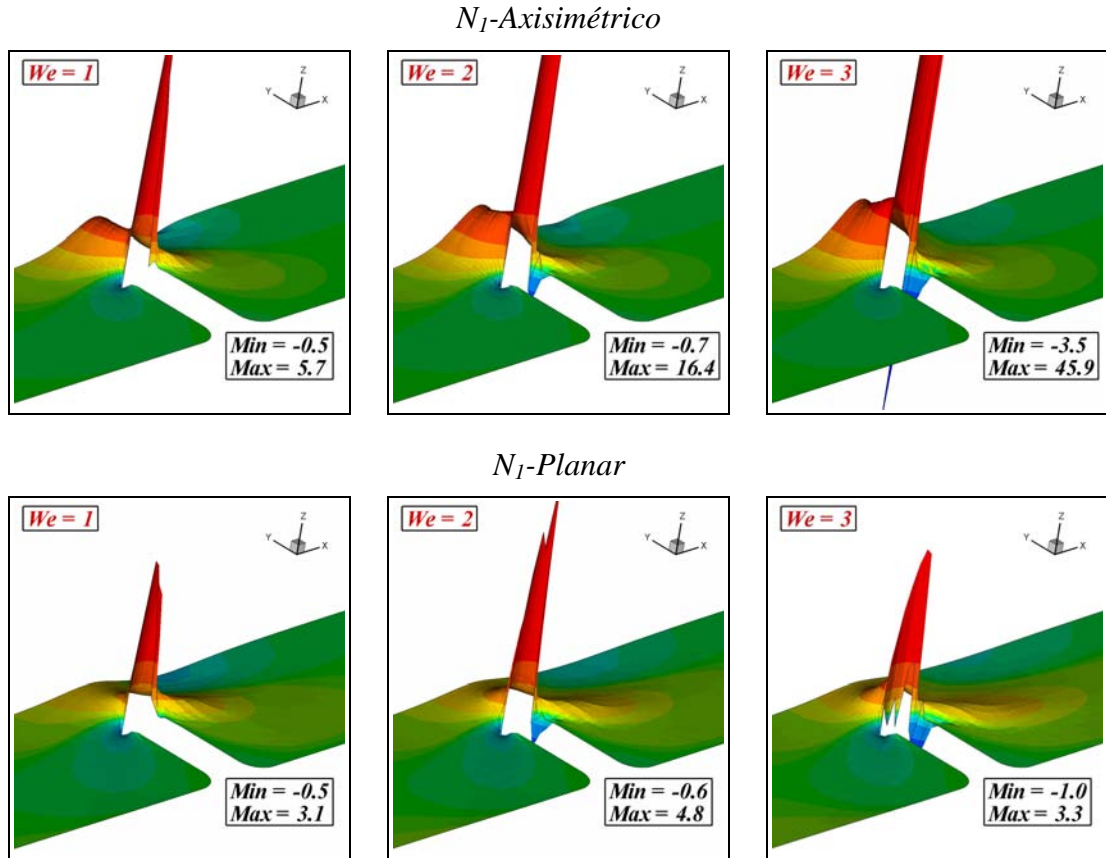


Figura 7.10. Superficies de la primer diferencia polimérica de esfuerzos normales,  $N_I$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.

también una ligera difusión hacia la línea de simetría, efecto que es más evidente con la elasticidad<sup>††</sup>, sin embargo, los valores son considerablemente menores a los exhibidos por los correspondientes valores máximos.

Considérese ahora el caso de la geometría rectangular. Los máximos de esfuerzo están situados en las mismas regiones. El ligero desplazamiento del valor extremo en  $\tau_{11}$  aún está presente. La principal diferencia con respecto al caso cilíndrico es que no hay

<sup>††</sup> El esfuerzo máximo a lo largo de la línea de simetría está cerca del plano medio.

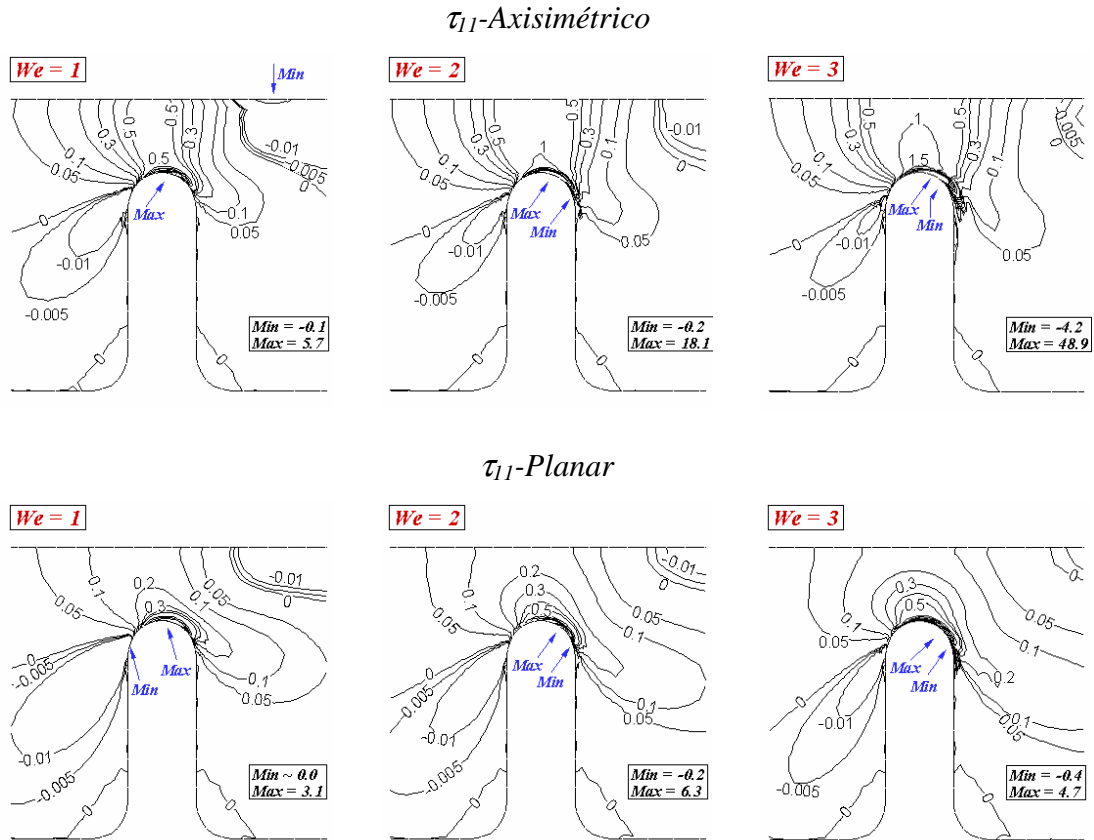


Figura 7.11. Líneas de contorno  $\tau_{11}$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.

incremento substancial alguno ( $< 7$  unidades) al aumentar el nivel de elasticidad del fluido. Además, la difusión hacia la línea de simetría es considerablemente menor (ver Figura 7.10 y Figura 7.11).

El segundo componente normal del tensor de esfuerzos,  $\tau_{22}$ , ( $\tau_{yy}$  planar o  $\tau_{rr}$  axisimétrico) se presenta en la Figura 7.12. Este componente exhibe dos máximos, antes y después de la restricción en contacto con la pared; de los valores extremos, el de mayor magnitud está localizado después del plano medio (mínima separación), sin embargo,

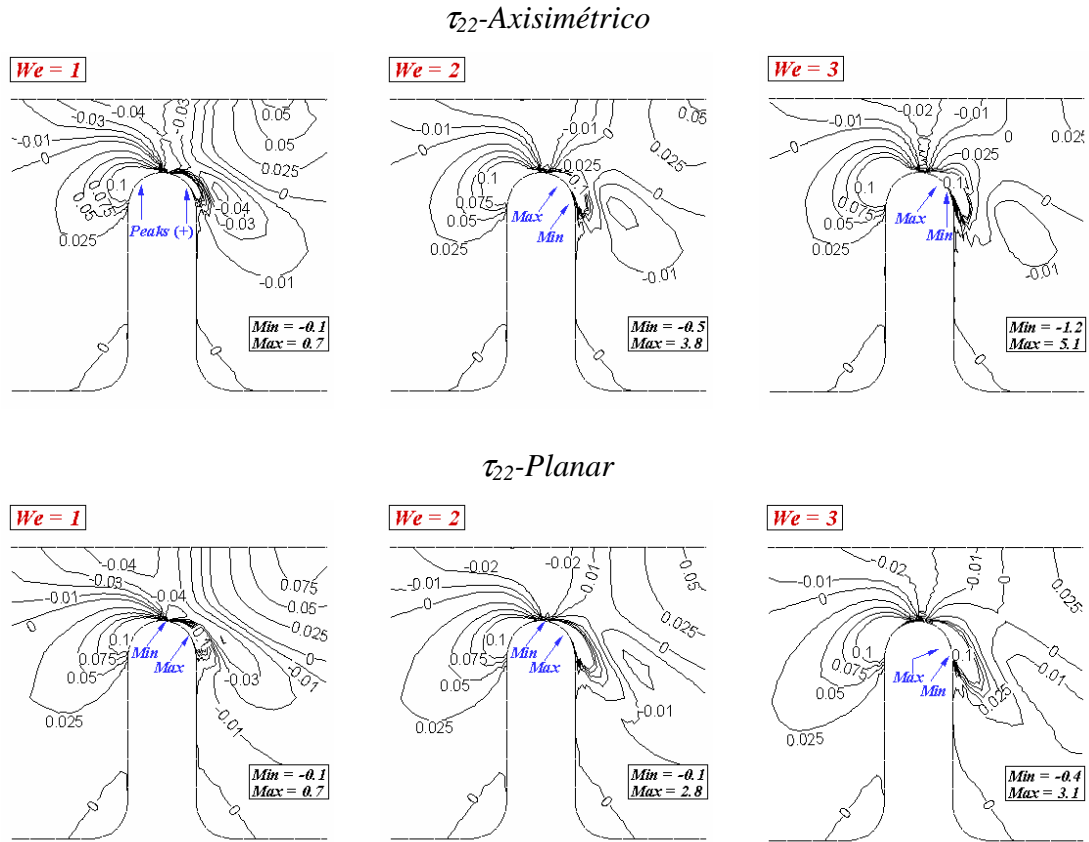


Figura 7.12. Líneas de contorno  $\tau_{22}$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.

ambos están dentro del mismo orden de magnitud. El incremento en  $We$  produce un aumento en las magnitudes de los máximos de  $\tau_{22}$  (mayor en el caso axisimétrico). Nótese que en comparación con los valores extremos mostrados por  $\tau_{11}$  (o  $N_1$ ), a cualquier nivel de elasticidad simulado, los máximos de  $\tau_{22}$  son de magnitud considerablemente menor.

En la Figura 7.13 se presentan las líneas de contorno para el componente polimérico del esfuerzo cortante ( $\tau_{12}$ ). En este caso los valores extremos se presentan antes (máximo) y después (mínimo) de la separación de la geometría. Aún cuando en la

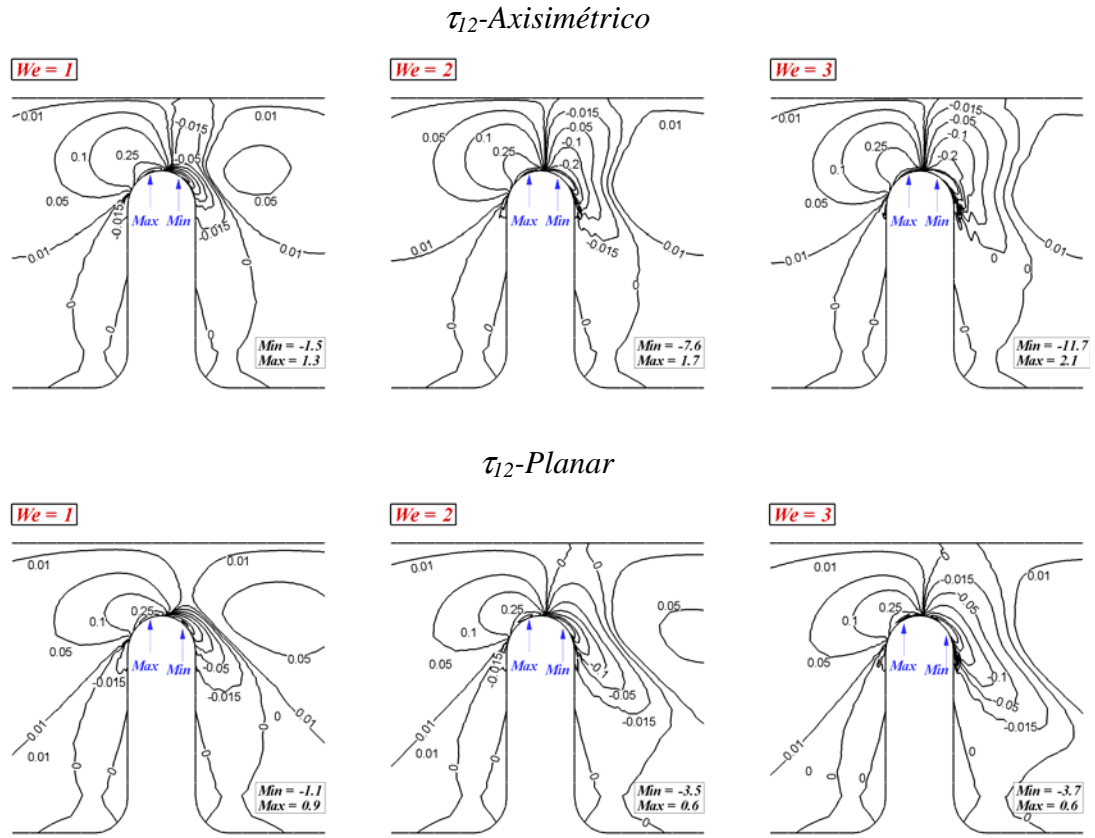


Figura 7.13. Líneas de contorno  $\tau_{12}$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.

configuración con simetría radial, ambos extremos crecen junto con la elasticidad, el efecto es más significativo para el mínimo (de -1.5 a -11.7 unidades), localizado justo después del plano medio. En la configuración planar el crecimiento es considerablemente menor. A un nivel de elasticidad de  $We = 3$ , la magnitud del componente  $\tau_{12}$  es significativamente menor que para  $\tau_{11}$ .

Para el tensor de rapidez de deformación  $d_{11}$ , se presentan las líneas de contorno en la Figura 7.14, lo que indica que la influencia de  $We$  en ambas configuraciones no es significativa. Se observan cuatro valores extremos en el campo de flujo, todos en la

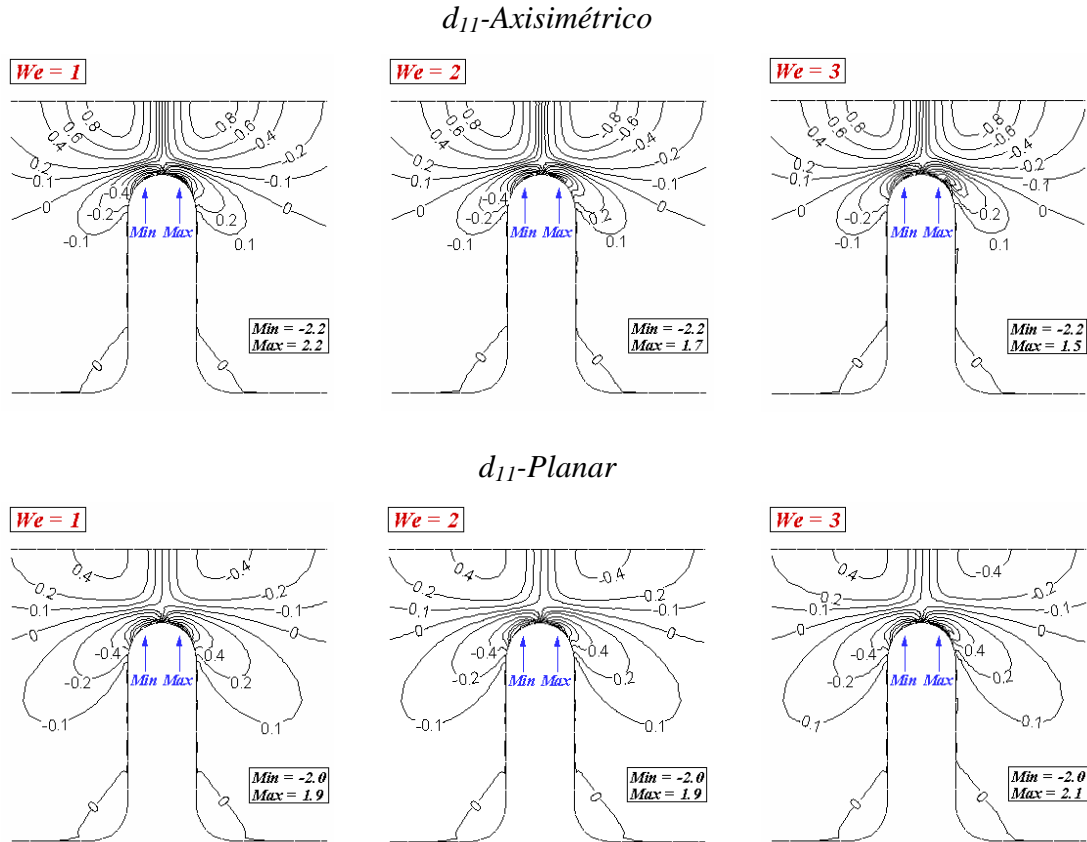


Figura 7.14. Líneas de contorno  $d_{11}$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4, axisimétrico vs. planar.

cercanía de la restricción. Los máximos en contacto con la pared son alrededor de  $O(2)$  unidades y no hay diferencias importantes en las magnitudes entre los casos axisimétrico y planar. Los máximos localizados en la línea central para el caso radial son aproximadamente el doble de los exhibidos en la configuración planar. Más aún, las regiones de rapidez de deformación creciente (en valor absoluto) están más “concentradas” en la configuración axisimétrica.

El esfuerzo polimérico  $\tau_{11}$  (o  $N_1$ ) muestra sólo un máximo, el cual está en la vecindad de la restricción, en contacto con la pared, posición cercana a la del máximo en  $d_{11}$ .

Es de notar que existe cierta difusión desde el máximo en esfuerzo normal hacia la línea central, lo que se interpreta como una manifestación del fenómeno elástico.

Como se mencionó en el capítulo 6, en el caso de flujo complejo,  $d_{11}$  solo sirve de guía para determinar la rapidez de deformación extensional. En un intento para relacionar  $\tau_{11}$  (o  $N_1$ ) con la rapidez de deformación, se presentan en la Figura 7.15 las formas típicas de los invariantes de flujo  $\Gamma$  y  $\Sigma$  (ver sección 6.3.1a para su definición), sólo para la configuración cilíndrica. Los máximos en  $\Sigma$  están situados en la línea de simetría, con un máximo antes del plano medio y un mínimo de igual magnitud después de esta posición. En general no se observa efecto alguno por la variación de  $We$ . Estas dos zonas de valores grandes de  $\Sigma$  se extienden hasta la pared de la restricción, mostrando una difusión mayor que la mostrada en  $d_{11}$ ; sin embargo, no se observa ningún extremo en el fluido en contacto con la pared de la restricción. La representación de la rapidez de corte en términos de  $\Gamma$ , es la que presenta un solo valor máximo en la pared de la contracción/expansión, prácticamente en la posición del plano medio, mostrando similitud con el exhibido por  $\tau_{11}$ .  $\Gamma$  también presenta un máximo local en la línea central con simetría antes y después del plano medio.

Se puede concluir que existe una relación entre los máximos de esfuerzo  $\tau_{11}$  (o  $N_1$ ) y la rapidez de deformación a la que está sometida el fluido sobre la pared de la restricción en la posición del plano medio. La difusión hacia la línea central es detectada para estas variables. En la configuración planar no se puede obtener tal conclusión. Como resultado, el nivel esperado de endurecimiento extensional en ambas configuraciones puede diferir bastante, siendo mayor para la geometría radial; adicionalmente, en esta misma configuración, se estimulan variaciones de mayor rapidez a la entrada de la restricción y en la salida de la misma. Esto está en acuerdo con Szabo et al. ([99]), en donde se menciona que en la contracción/expansión cilíndrica, la variación de los esfuerzos elásticos ocurre casi en su totalidad en dicha zona y una muy pequeña vecindad.

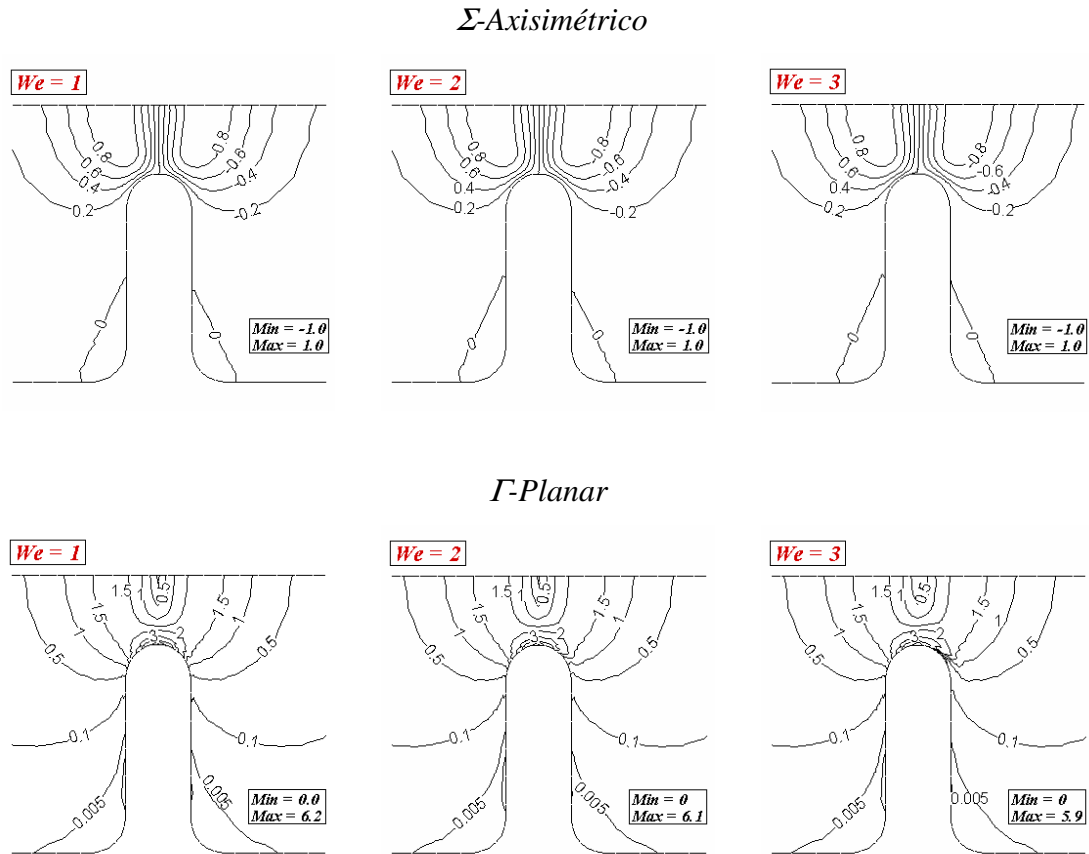


Figura 7.15. Líneas de contorno  $\Sigma$  y  $\Gamma$ (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico.

- Contracción/expansión Axisimétrica;  $\beta = 0.99$

Considerando el ajuste en la relación de disolvente a  $\beta = 0.99$  para la contracción/expansión 4:1:4 axisimétrica, el aumento en  $epd$  es suficiente para que se presente el fenómeno del *cruce* de la línea de referencia newtoniana. Se ha mencionado previamente, que el incremento en la relación de disolvente produce tendencias en  $epd$  que se aproximan cada vez más al valor de referencia. El cambio propuesto significa que la contribución de la viscosidad del disolvente es del 99%. Con esto, el endurecimiento en viscosidad extensional se torna más abrupto al presentarse valores de rapidez de defor-

mación acercándose al límite  $\lambda \dot{\epsilon} = 1/2$  (modelo Oldroyd-B). Para apreciar la influencia de  $\beta$  sobre  $\eta_e$ , ver Figura 7.16a (en la sección 7.3.3 se ofrecen más comentarios sobre esta figura). En el presente estudio, la respuesta extensional del fluido se ajusta mediante el cambio en el contenido de disolvente, mientras que Szabo et al. [99] ajusta el parámetro que limita la extensión ( $L$ ) de la molécula del modelo FENE-CR, con el fin de influenciar la caída de presión calculada. Para esta contribución de disolvente, se presta atención exclusivamente a la configuración axisimétrica, en la cual se da el fenómeno del *cruce*.

*- Perfiles de presión en la pared; axisimétrico y planar,  $\beta = 0.99$*

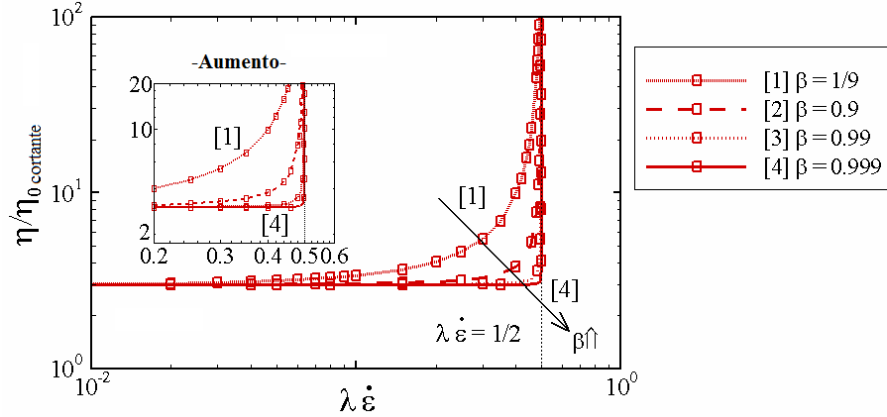
La Figura 7.17 presenta el perfil de presión en la pared para el flujo 4:1:4 axisimétrico. Se puede observar el fenómeno del cruce entre valores de presión a diferentes niveles de Weissenberg a lo largo de la pared de la geometría. En esta caso, la presión a  $We = 5$  es mayor que para  $We = 1$  y  $We = 2$ . En la región de salida, los tres niveles seleccionados de elasticidad producen los mismos valores de presión. La diferencia entre los casos  $\beta = 0.9$  y  $\beta = 0.99$  está en la separación de los niveles de presión; separación generada por el incremento en elasticidad. Los cambios visibles están dados casi completamente en el cuarto cuadrante; la separación de  $We = 1$  y  $We = 2$  no es tan aparente como la que ocurre para  $We = 5$ . A este valor de Weissenberg,  $epd$  ha cruzado la línea de referencia newtoniana ( $epd = 1$ ); mediante interpolación, se puede estimar que este cruce ocurre a  $We \approx 4.2$ . El número de Weissenberg crítico es cercano a  $We_{crit} = 6.4$ .

*- Esfuerzo y rapidez de deformación;  $\beta = 0.99$*

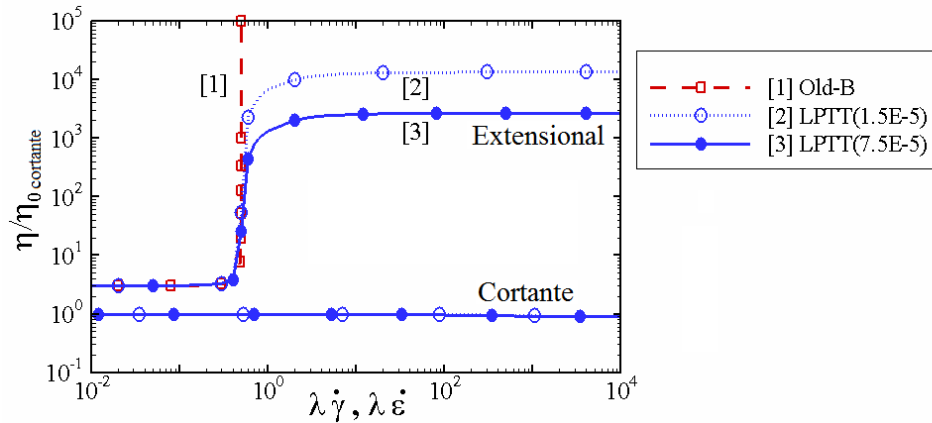
En la Figura 7.18 se muestran las líneas de contorno para el componente normal de esfuerzos  $\tau_{11}$  y el componente de rapidez de deformación  $d_{11}$ . Esta figura es para el



a) Oldroyd-B, viscosidad extensional



b) Viscosidad cortante y extensional,  $\beta = 0.9$



c) Viscosidad cortante y extensional,  $\beta = 0.99$

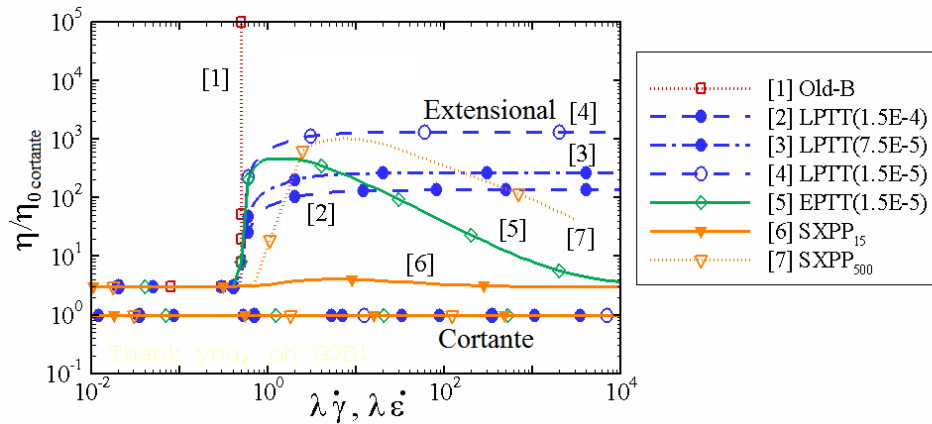


Figura 7.16. Propiedades reológicas: Oldroyd-B, LPTT, EPTT y SXPP.

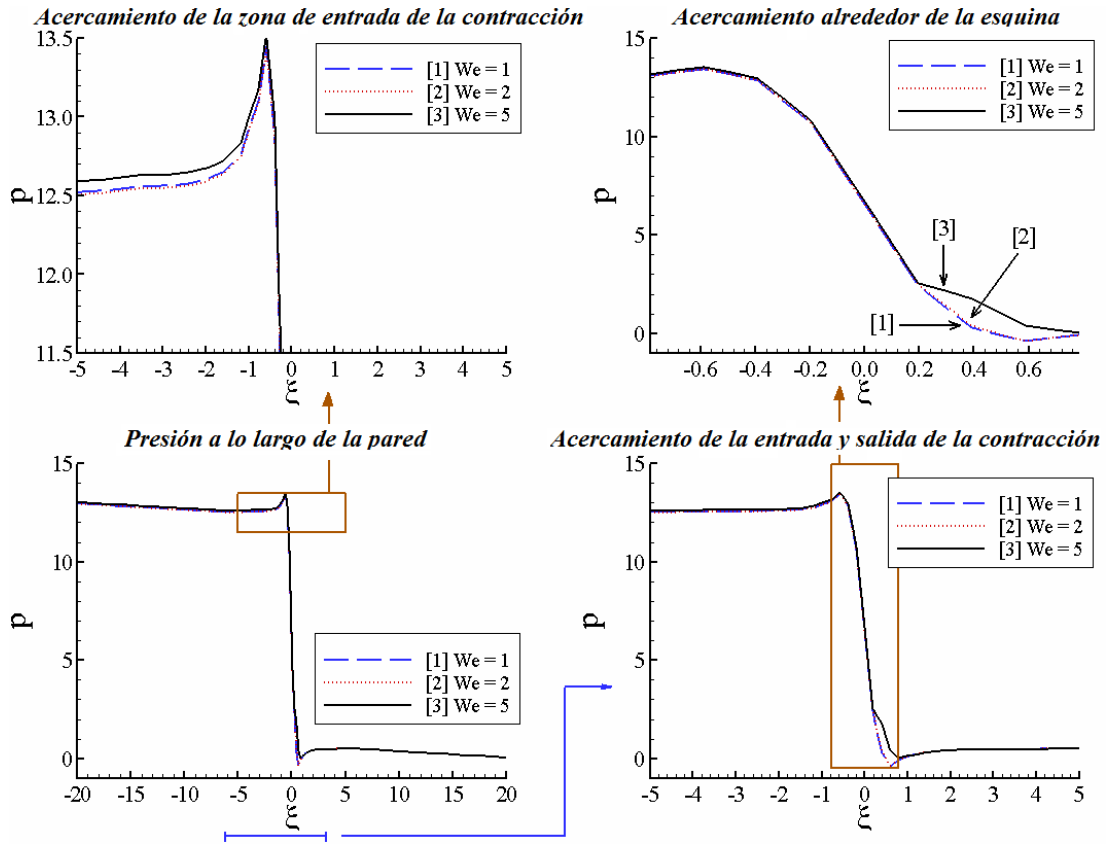


Figura 7.17. Perfil de presión a lo largo de la pared, incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.99$ , 4:1:4 axisimétrico.

flujo de un fluido Oldroyd-B en la configuración axisimétrica, con una contribución de disolvente del 99%. Se aprecia una respuesta muy semejante a la exhibida por el caso  $\beta = 0.9$ . Se obtiene un incremento significativo, al elevar los niveles de elasticidad, en el máximo  $\tau_{11}$  (localizado después del plano medio, en contacto con la pared); este incremento es desde 0.6 ( $We = 1$ ) hasta 20.8 ( $We = 5$ ). Sin embargo, los máximos del caso  $\beta = 0.99$  son menores que los resultantes para  $\beta = 0.9$  a una elasticidad ( $We$ ) dada. La elevación en  $\beta$  desde 0.9 hasta 0.99 produce una reducción en la contribución de la viscosidad polimérica, que está asociada al decaimiento inicial en los trazos de  $epd$ . Esto

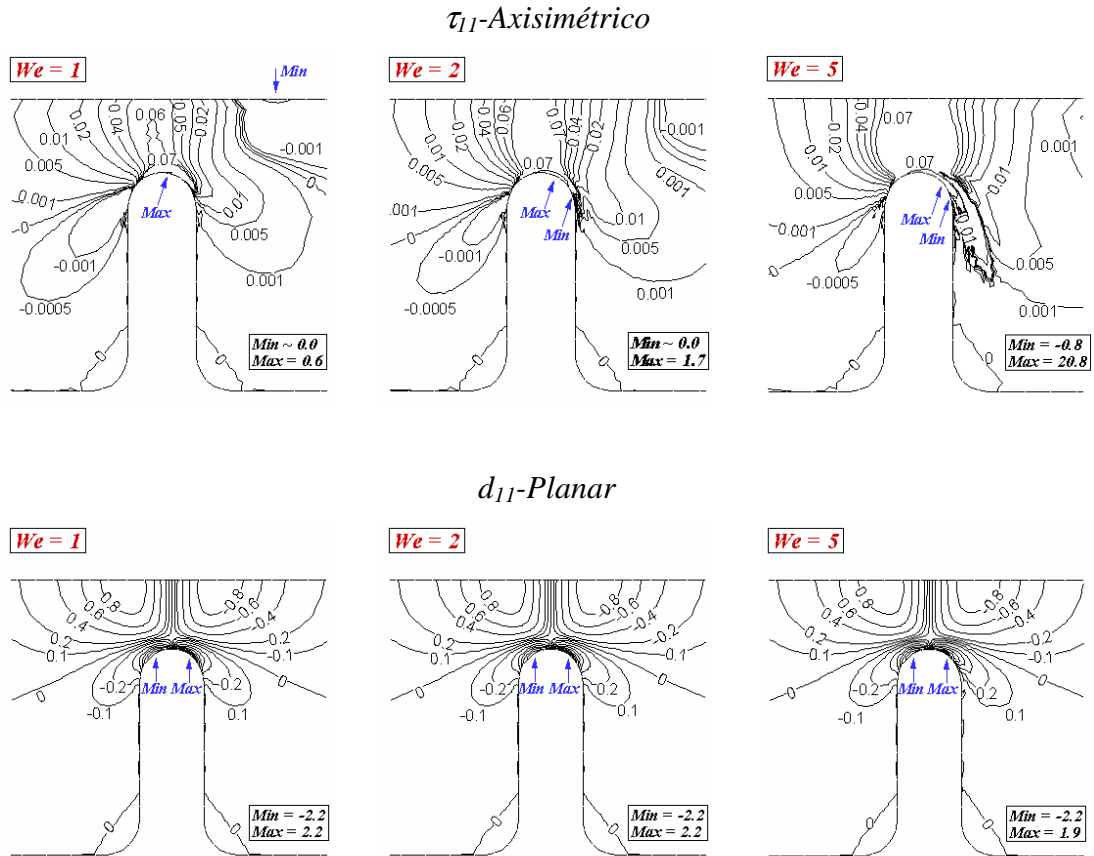


Figura 7.18. Líneas de contorno  $\tau_{11}$ ,  $d_{11}$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.99$ , 4:1:4, axisimétrico.

es, para una mayor contribución polimérica a la viscosidad (menor  $\beta$ ), el decaimiento inicial en la caída de presión es mayor. El hecho de que el *mínimo* en  $\Delta p$  sea menos visible para  $\beta = 0.99$  que para  $\beta = 0.9$  se considera como consecuencia de la mayor presencia de disolvente (Figura 7.3a).

Rothstein y McKinley [98] explican este decrecimiento en  $epd$ , a cualquier valor de contenido de disolvente, mediante argumentos moleculares. Estos autores interpretan este decaimiento como resultado de un proceso de almacenamiento de energía, que ocurre mientras las cadenas poliméricas están siendo extendidas. Al seguir incrementando

$We$  (por medio de aumentar el flujo o la elasticidad de la molécula), las moléculas alcanzan su máxima extensión y empiezan a comportarse como “barras” rígidas, incrementando la caída de presión (tendencia al *mínimo*) por el arrastre (viscous drag) adicional por la presencia de dichas barras. Parte del esfuerzo generado en la restricción es recuperable una vez que el fluido rebasa la contracción y las cadenas de polímero retornan a su longitud original.

El incremento en  $\beta$  (que es una medida de la concentración de polímero), puede ser descrito como una reducción en el número de cadenas poliméricas en el fluido. Esto explica el menor decaimiento inicial en  $epd$ , confirmando las observaciones obtenidas en el presente estudio (Figura 7.3a). Nótese que con el modelo Oldroyd-B, no existe límite alguno para la extensión molecular y aun así, se observa el *mínimo* en  $epd$ . Esta respuesta puede indicar que el arrastre adicional está presente aún cuando las cadenas poliméricas no han alcanzado la longitud máxima (crítica).

El componente  $d_{11}$  del tensor de rapidez de deformación mostrado en la Figura 7.18 para  $\beta = 0.99$ , exhibe patrones en las líneas de contorno prácticamente iguales que aquellos para  $\beta = 0.9$  (Figura 7.14), con sólo diferencias menores en el valor de los máximos. Entonces, para ambas relaciones de disolvente, se esperan zonas de alta deformación cerca del plano medio de la contracción (en contacto con la pared) y en la línea de simetría, esta última de menor magnitud.

### *7.3.1 Comparación con los resultados de la contracción 4:1, $[p-p_{Newt}]$*

En esta sección se presentan resultados del flujo por la contracción 4:1 (Figura 7.4). Se observa que  $epd$  sufre un decaimiento monótono al aumentar el nivel de elasticidad; para  $\beta = 1/9$  se ha reportado un decaimiento semejante (por ejemplo, ver referencias [7,8]). No se detecta tendencia alguna de alcanzar el *mínimo* en  $epd$  en la Figura 7.4.

Considerando la contracción 4:1 axisimétrica, la Figura 7.19 presenta la presión (o la caída de presión debido a que en la salida se establece  $p = 0$ ) a lo largo de la pared (frontera sólida). No se detecta ningún cruce entre los niveles de presión en la sección de entrada a la contracción (gráfico izquierdo superior); por tanto, no ocurre el *mínimo* en *epd*. El aumento en  $We$  produce un decaimiento en el nivel de presión en cualquier punto sobre la pared (ver resultados de la geometría completa, gráfico superior derecho). Este decaimiento se reduce al acercarse al canal de salida (gráfico inferior derecho); de nuevo, esto es debido a la imposición de presión nula en la salida de la geometría. Aún en la entrada de la contracción, no se observa cruce alguno en la presión. Esta respuesta del fluido en la contracción 4:1 con simetría radial es extremadamente diferente a la exhibida en el flujo a través de la contracción/expansión 4:1:4 (Figura 7.8). Nótese que en la contracción, las caídas de presión son de alrededor de 400 unidades, mientras que para el caso 4:1:4, esto se reduce a  $\approx 15$  (incrementos en  $\Delta p$ , corresponden a una mayor disipación por el flujo).

Se presenta a continuación una nueva calibración para la presión; ésta se define como la presión del fluido de Boger (modelo Oldroyd-B en este caso) menos la correspondiente presión si el fluido fuese newtoniano, esto es  $[p - p_{Newt}]$ . Los resultados para esta nueva variable, evaluada en la pared de la geometría, se presentan en la Figura 7.20. La equivalencia entre ambas configuraciones de flujo (newtoniano y Oldroyd-B) está en términos de la viscosidad cortante y flujo total (iguales para ambos fluidos). Para la contracción, los resultados están en la columna izquierda, mientras que para el caso 4:1:4, en la columna derecha. Adicionalmente se presenta la gráfica de esfuerzo  $\tau_{11}$  para cada caso. Tanto el plano medio de la contracción/expansión como el final de la curvatura de la esquina de la contracción, están localizadas en  $\xi = 0$ .

Nótese que en la Figura 7.20, los máximos en el esfuerzo y en la presión (calibrada) ocurren en la misma posición. Para la geometría 4:1 estos máximos están situados casi

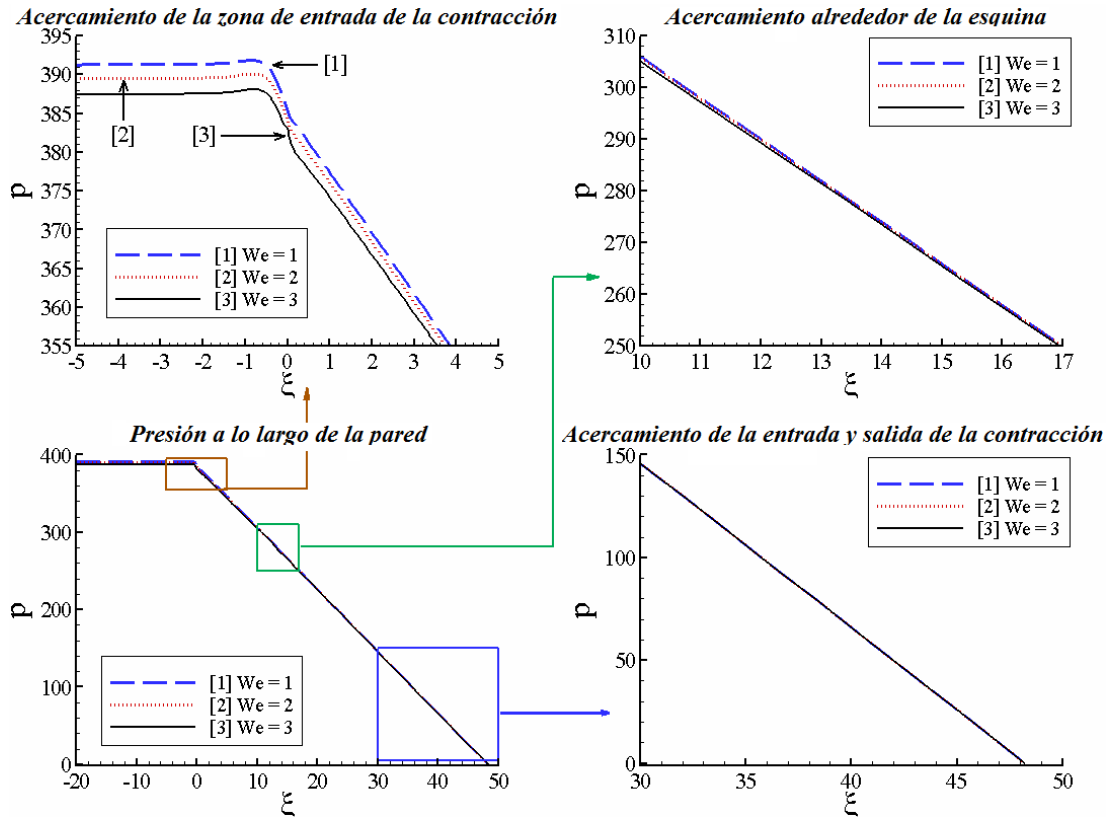


Figura 7.19. Presión a lo largo de la pared, incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1 axisimétrico.

exactamente al final de la curvatura de la esquina re-entrante ( $\xi \approx 0.04$  unidades), mientras que el caso 4:1:4, el máximo ocurre entre el plano medio y la cara posterior de la restricción ( $\xi \approx 0.2$  unidades). Es de notar, que aún cuando los máximos del esfuerzo son de magnitud muy similar entre las geometrías a cualquier nivel de  $We$ , los resultados de  $[p - p_{Newt}]$  son significativamente diferentes.

En el flujo a través de la geometría 4:1:4 (gráficos de la columna derecha), el esfuerzo y la presión calibrada tienen un valor constante respecto a la posición  $\xi$  excepto en la región de la restricción, mientras que para el caso 4:1, ocurre una relajación en el esfuerzo y en  $[p - p_{Newt}]$  a lo largo del conducto de salida.

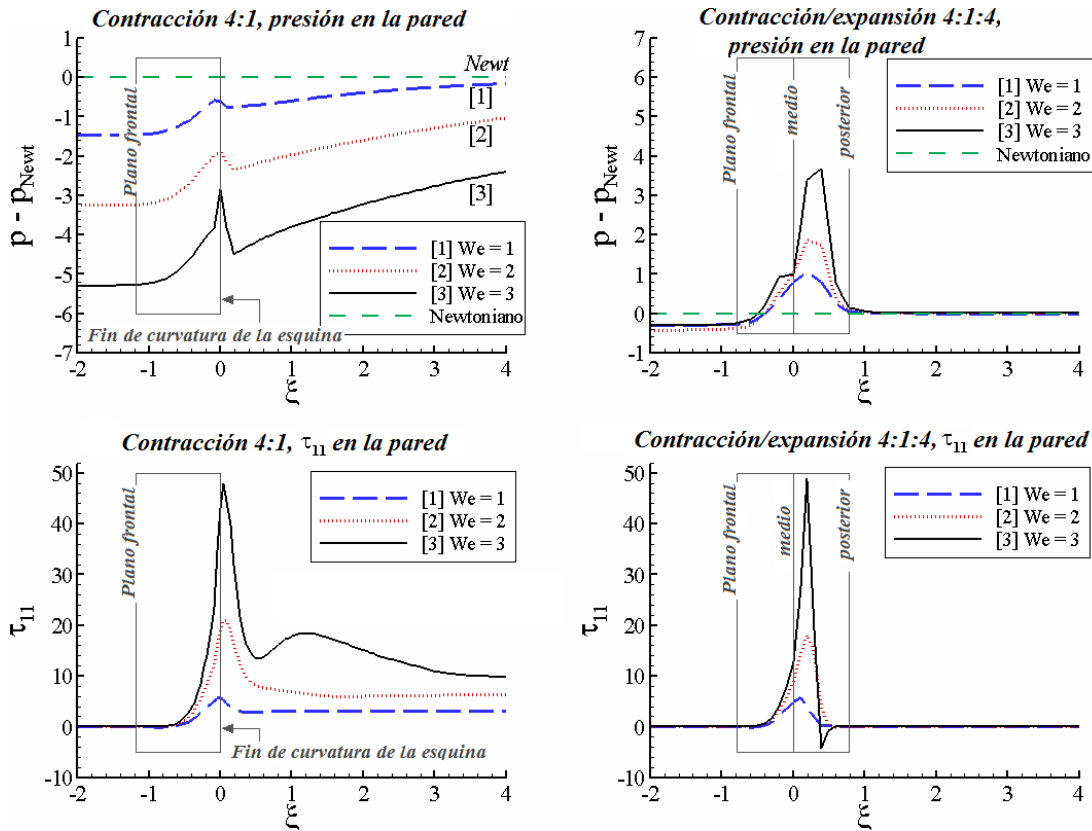


Figura 7.20. Perfiles de Presión [ $p - p_{Newt}$ ] y esfuerzo  $\tau_{11}$  a lo largo de la pared, incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta = 0.9$ , 4:1 y 4:1:4 axisimétrico.

Otro aspecto a observar es que en la contracción 4:1, los resultados en  $p$  son menores que los correspondientes al caso newtoniano a cualquier valor de la coordenada  $\xi$ . Esta respuesta está en contraste con la obtenida del flujo por la contracción/expansión, donde se tiene [ $p - p_{Newt}$ ] positivo en los cuadrantes tercero y cuarto de la restricción; esta diferencia se incrementa con  $We$ . El *mínimo* en la caída de presión puede asociarse con esta diferencia positiva ( $[p - p_{Newt}] > 0$ ) y con su incremento al aumentar la elasticidad. Nótese que la reducción excesiva en esta presión de calibración con los incrementos en elasticidad para la configuración 4:1 impide que los máximos en [ $p - p_{Newt}$ ] crucen la línea. Uno podría especular que, para obtener [ $p - p_{Newt}$ ]  $> 0$  en esta configura-

ción 4:1 axisimétrica, se requieren niveles de elasticidad muy superiores a los que se puede obtener con el modelo de Oldroyd-B, con los métodos numéricos disponibles a la fecha. Para el caso 4:1:4, el *mínimo* en *epd* es explicado en términos de los máximos en  $[p - p_{Newt}]$ , los cuales son provocados por el esfuerzo.

En la Figura 7.21 se presentan resultados exclusivamente para la contracción 4:1:4, contrastando información de  $[p - p_{Newt}]$  y esfuerzo entre las configuraciones planar (columna izquierda) y axisimétrica (columna derecha), incrementando la elasticidad del sistema. En estos resultados se observa que la generación de esfuerzo a través de la constricción de la configuración rectangular, es considerablemente menor que aquella para la configuración axisimétrica. Las diferencias de presión son entonces menores en el caso planar, así que no se presenta ningún cruce de  $[p - p_{Newt}]$  vs.  $We$  en la entrada de la contracción, y por tanto, no se presenta el *mínimo* en *epd*.

### **7.3.2 Dinámica de vórtices (4:1:4 y 4:1)**

Las líneas de corriente para la configuración radial de la contracción 4:1 y la contracción/expansión 4:1:4 se muestran en las Figura 7.22 y Figura 7.23. Las funciones de corriente con valores dentro del intervalo  $0 \leq \psi \leq 0.5$  están afuera de la región del vórtice, sobre la que se usan incrementos de  $\Delta\psi = 0.05$ . Para las líneas de corriente dentro de la región del vórtice, se escogen seis valores para los trazos  $[10^{-4} \leq \psi \leq 10^{-3}]$  con incrementos de  $0.15^{-3}$ . La Figura 7.22 considera dos valores de contenido de disolvente,  $\beta = 0.99$  y  $\beta = 1/9$ , correspondiendo a un caso con alto contenido de disolvente y con alto contenido polimérico, respectivamente. Para la simulación con  $\beta = 1/9$ , se obtienen crecimiento de vórtices tanto en intensidad como en tamaño de celda en la sección anterior a la contracción, mientras que el vórtice casi desaparece en la sección después de la restricción; esto para un cambio en elasticidad de  $We = 0.1$  a  $1.5$ . En el otro extremo



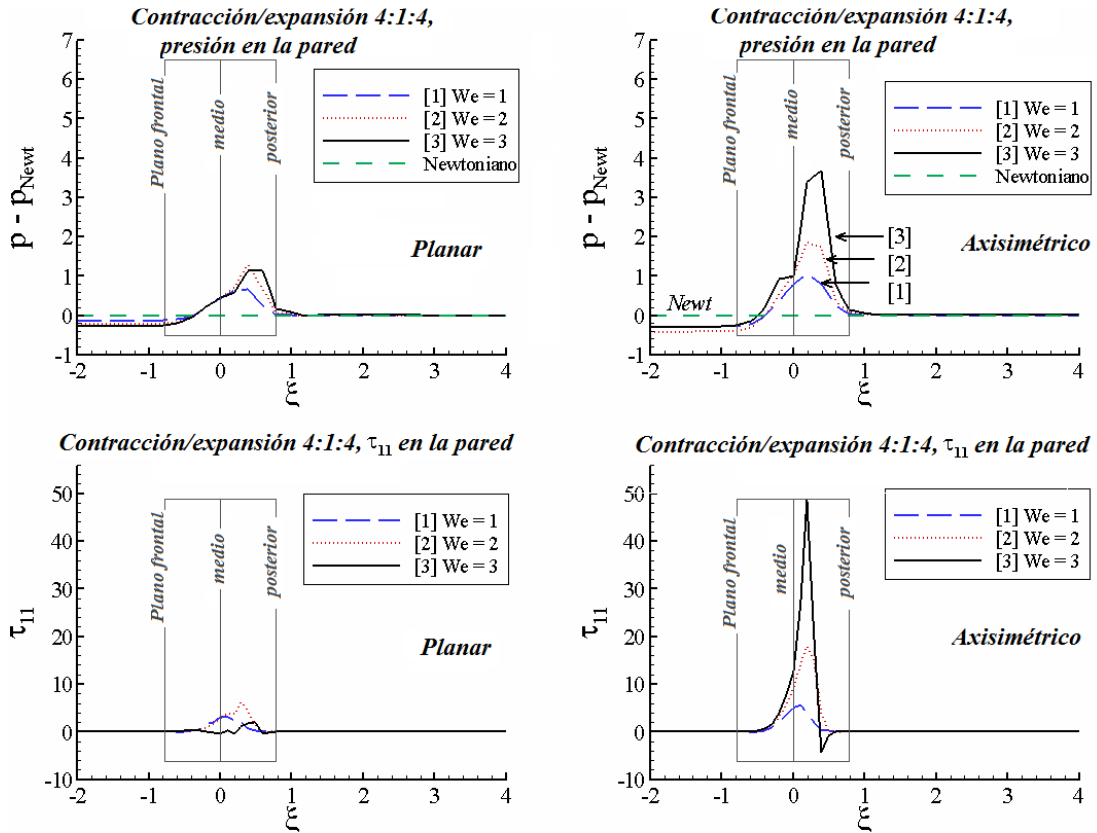


Figura 7.21. Perfiles de presión  $[p - p_{Newt}]$  y esfuerzo  $\tau_{11}$  a lo largo de la pared, incrementando  $We$  (Oldroyd-B);  $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico y planar.

( $\beta = 0.99$ ), la variación es menos visible. En términos del tamaño de celda, se presenta un crecimiento poco significativo en la sección después de la restricción para  $We = 5$ . Observando la intensidad, la del vórtice previa a la reducción en diámetro se incrementa ligeramente, sin embargo, la variación del vórtice de salida de la restricción es más visible. Para una variación en la elasticidad de  $We = 1$  a 2, se presenta una reducción en la intensidad, seguida por un incremento de  $We = 2$  a 5. Este decaimiento seguido por el incremento está en correspondencia directa con la respuesta de  $epd$  a este nivel de disolvente,  $\beta = 0.99$ . Como se notó anteriormente, se generan esfuerzos de gran magnitud sobre el tercer y cuarto cuadrantes (después del plano medio), en donde se observan vórtices de mayor tamaño para este sistema con alto contenido de disolvente.

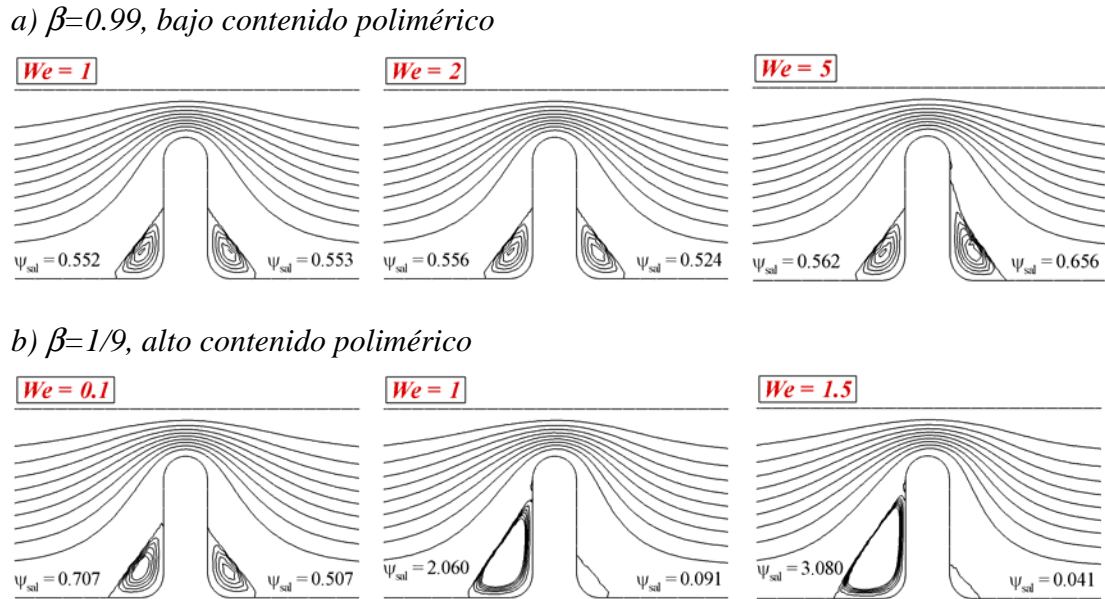


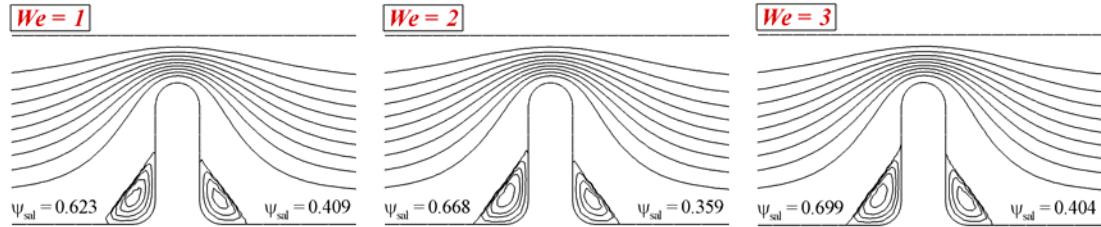
Figura 7.22. Función corriente ( $-\psi \times 10^3$ ), incrementando  $We$  (Oldroyd-B): 4:1:4 axisimétrico; a)  $\beta = 0.99$ , b)  $\beta = 1/9$ .

En la Figura 7.23 se trazan las líneas de corriente para  $\beta = 0.9$  en dos configuraciones axisimétricas distintas: la contracción/expansión 4:1:4 y la contracción 4:1. En esta situación el vórtice previo a la restricción sufre un incremento en intensidad al elevar el nivel de elasticidad, esto para ambas geometrías. En contraste con la geometría 4:1:4 y en la sección de salida, la intensidad de vórtice refleja una reducción de  $We = 1$  a  $We = 2$ ; después de este valor, a  $We = 3$ , se presenta un incremento (semejante al caso  $\beta = 0.99$ , mostrado previamente). Es precisamente bajo estas circunstancias que ocurre el *mínimo en epd*.

### 7.3.3 Fluidos de Boger con modelos alternativos: 4:1:4 axisimétrico

Hasta este punto, todas las predicciones del presente capítulo han sido realizadas con el modelo Oldroyd-B, un fluido con endurecimiento extensional muy pronunciado y no delimitado. El siguiente paso es realizar las simulaciones con otros modelos capaces

a) 4:1:4, axisimétrico



b) 4:1, axisimétrico

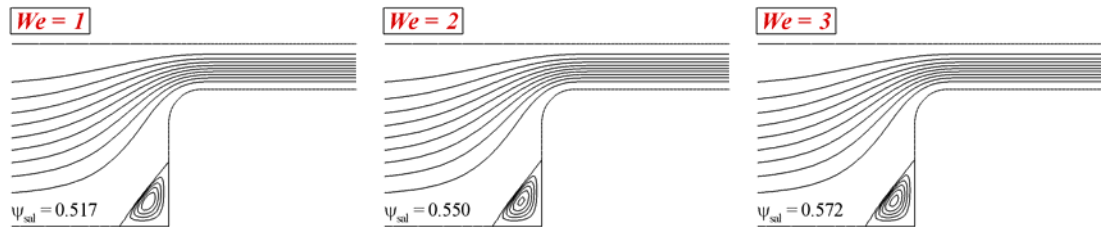


Figura 7.23. Función corriente ( $-\psi \times 10^3$ ), incrementando  $We$  (Oldroyd-B):  $\beta=0.9$ , axisimétrico; a) 4:1:4, b) 4:1.

de representar la respuesta de fluidos de Boger, con un nivel de aumento apreciable en la viscosidad extensional. La viscosidad cortante constante se obtiene mediante el uso de altos contenidos de disolvente en el sistema, i.e.  $\beta \rightarrow 1$ . Los modelos seleccionados son el modelo de Phan-Thien/Tanner, en sus versiones lineal y exponencial (LPTT y EPTT) y la versión de una ecuación del modelo extendido Pom-Pom (SXPP). Se incluye una comparación entre los resultados de *epd* arrojada por estos modelos, incluyendo la respuesta del fluido Oldroyd-B; esta comparación es para el caso de más interés, la contracción/expansión 4:1:4 axisimétrica.

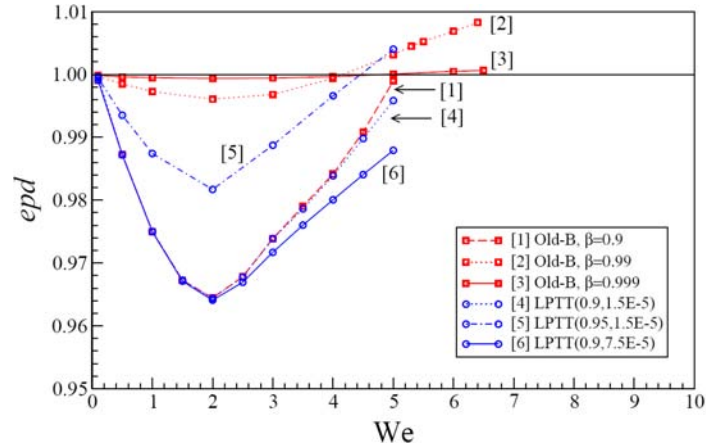
Los parámetros que controlan o estimulan valores grandes de viscosidad extensional son PTT( $\beta, \varepsilon_{PTT}$ ), SXPP( $\beta, \varepsilon, q$ ) y Oldroyd-B( $\beta$ ). Con los modelos PTT y SXPP, el parámetro de razón de viscosidades,  $\beta$ , es usado para controlar el nivel de separación del valor de viscosidad newtoniano (adimensional unitario) de la segunda meseta de la viscosidad no newtoniana de fluidos con adelgazamiento al corte. Esto significa que la

aproximación a la viscosidad cortante constante para estos fluidos con adelgazamiento, está dentro del 10% para  $\beta = 0.9$  y 1% para  $\beta = 0.99$  (ver comentarios de la Figura 7.16 en la sección 7.3.1a). Es de notar que el modelo LPTT representa fluidos con puro endurecimiento extensional, es decir, no se observa reducción alguna en  $\eta_e$ , alcanzando un valor asintótico a valores muy altos de rapidez de deformación extensional (Figura 7.16). Este fluido puede *aproximar* la respuesta extensional estacionaria del modelo FENE-CR con su parámetro de ajuste de la extensión finito ( $L$ ), mediante ajuste del parámetro  $\varepsilon_{PTT}$ :  $L = 50$  presenta una respuesta semejante a  $\varepsilon_{PTT} = 0.02$ , mientras que  $L = 5$  es semejante a  $\varepsilon_{PTT} = 0.1$  [106]. Alternativamente, el modelo cinético SXPP corresponde a un fluido con propiedades de endurecimiento/ablandamiento extensional, con el máximo en  $\eta_e$  controlado por ambos parámetros SXPP( $\varepsilon, q$ ). Aquí,  $\varepsilon$  controla el nivel de traslape (crosslinking) del sistema (peso molecular,  $M_w$ ) y  $q$  corresponde al número de brazos en ambos lados del esqueleto de la molécula Pom-Pom. El uso de estos modelos alternativos tiene el objetivo de evaluar el impacto que ejercen el delimitado endurecimiento extensional (a comparación de caso con  $\eta_e$  infinita del modelo Oldroyd-B) y la presencia del ablandamiento extensional excesivo y moderado.

### *7.3.3a epd para Oldroyd-B, LPTT( $\varepsilon_{PTT}=0.15 \times 10^{-4}$ ), LPTT( $\varepsilon_{PTT}=0.75 \times 10^{-4}$ ): $\beta=0.9$*

Al observar la Figura 7.24a, la variación de  $\beta$  para los modelos Oldroyd-B y LPTT, se tiene que los resultados LPTT asemejan la tendencia *epd* mostrada por el modelo Oldroyd-B. Los valores concuerdan hasta que se alcanza el *mínimo* en *epd* a  $We = 2$ . Después de esta etapa, el fluido LPTT con mayor endurecimiento extensional, LPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ), se aproxima mejor a la tendencia creciente de *epd* trazada por el fluido Oldroyd-B. Una vez que el *mínimo* ( $We = 2$ ) ha sido superado, la rapidez de crecimiento de *epd* con respecto a la elasticidad, para los modelos estudiados, es mayor

a) Variación de  $\beta$



b)  $\beta=0.99$

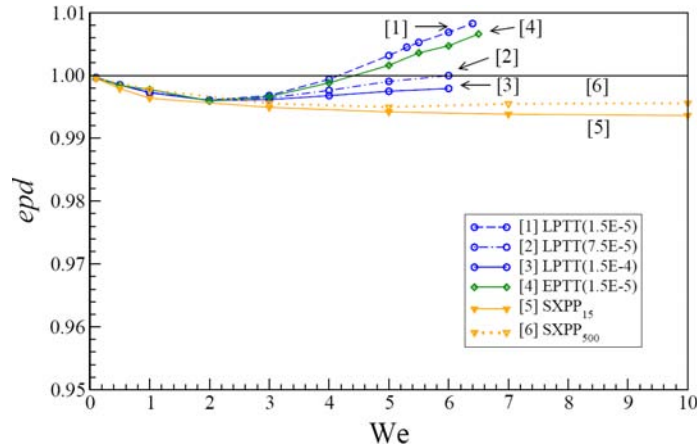


Figura 7.24. Caída de presión ( $epd$ ) vs.  $We$ : 4:1:4 axisimétrico;  
a) variación en  $\beta$ , b)  $\beta = 0.99$ .

conforme el fluido presente mayor endurecimiento extensional, en donde el límite superior está dado por el modelo Oldroyd-B. En este caso (Oldroyd-B), si fuese posible obtener simulaciones desde  $We_{crit} \approx 5$  hasta 9, y estas siguiesen la misma tendencia, sería posible observar el aumento en  $epd$  reportado por Szabo et al. [99] con el modelo FENE-CR.

7.3.3b *epd* para LPTT( $\epsilon PTT=0.15 \times 10^{-4}$ ):  $\beta=0.95$

Las mismas tendencias son reproducidas por LPTT( $\beta = 0.95$ ), con un menor decrecimiento en *epd* que para el caso  $\beta = 0.9$ , y menor crecimiento posterior al *mínimo* en *epd*. El *cruce* con la línea de referencia newtoniana ocurre antes, a  $We = 4.4$ , y ocurre un incremento en el nivel crítico  $We_{crit} \approx 5$ . Lo anterior pone de manifiesto la importancia del ajuste en el parámetro  $\beta$ .

7.3.3c *epd* para Old-B, modelos LPTT, EPTT y SXPP: alta  $\beta=0.99$

El cambio desde  $\beta = 0.9$  hasta una fracción de disolvente mayor,  $\beta = 0.99$ , produce considerable impacto en el nivel de *epd* observado, en la rapidez de decaimiento inicial y en el nivel del *mínimo* (Figura 7.24b). Esto se debe a las proporciones relativas de disolvente y componente polimérico, y la influencias de dichas proporciones sobre la magnitud de la parte elástica del esfuerzo. Como se ilustra en la Figura 7.16, previo a la rapidez de deformación crítica de 0.5 unidades, el incremento en  $\beta$  provoca una reducción en la viscosidad extensional. La Tabla 7.2 indica los parámetros utilizados para investigar la respuesta de *epd* de los modelos seleccionados y así, obtener el efecto de las funciones materiales sobre el flujo. El modelo Oldroyd-B muestra un grado de deformación extensional sin límite, por lo que no se tabularon sus datos en dicha tabla.

Para el caso  $\beta = 0.99$ , se tiene de nuevo que todos los modelos producen el decaimiento en *epd* similar hasta  $We = 2$ . Esto indica que ocurren máximos de rapidez de extensión similares en el campo de flujo, relativamente independiente del valor de  $\beta$  hasta un  $We$  igual a dos. Después del nivel  $We = 2$ , la discrepancia en las propiedades del fluido provoca diferencias en las respuestas de flujo. Los fluidos LPTT( $\beta = 0.99$ ) aproximan la respuesta Oldroyd-B, mostrando el *mínimo* en *epd* y mostrando la tendencia en interceptar la línea de referencia newtoniana. Como era de esperarse, el fluido con

el mayor nivel de endurecimiento extensional, LPTT ( $\varepsilon_{PTT} = 1.5 \times 10^{-5}$ ), sigue la tendencia marcada por el fluido Oldroyd-B de manera más cercana y por tanto, presenta la mayor rapidez en el crecimiento de  $epd$ . Esta versión de los modelos de Phan-Thien/Tanner tiene como característica, en general, de sostener el nivel de endurecimiento a valores de rapidez de deformación elevados; además, en la medida de que  $\varepsilon_{PTT} \rightarrow 0$ , la respuesta LPTT se asemeja más a la exhibida por el modelo Oldroyd-B. El caso con  $\varepsilon_{PTT} = 1.5 \times 10^{-5}$  es tan cercano al modelo Oldroyd-B, que también logra cruzar la línea de referencia newtoniana. Esto no sucede para valores ligeramente superiores de  $\varepsilon_{PTT} = \{0.75 \times 10^{-4}, 1.5 \times 10^{-4}\}$ , líneas [2] y [3] de la Figura 7.24b. En contraste, el modelo SXPP alcanza un valor asintótico después de  $We = 2$ . Para SXPP<sub>15</sub>, no hay mínimo local, y por lo mismo, no se presenta ningún aumento en  $epd$ . Se asume que este fluido ha alcanzado una meseta en la viscosidad extensional (nivel constante en la relación de Trouton) para este intervalo de  $We$  dentro de la zona de la restricción, la cual ejerce el mayor impacto sobre  $epd$ . Cualquier efecto de ablandamiento es insignificante para esta opción SXPP.

Tabla 7.2. Parámetros para el caso con relación de disolvente  $\beta = 0.99$

	<b><i>LPTT</i></b>	<b><i>EPTT</i></b>	<b><i>SXPP</i><sup>§§</sup></b>
<i>Endurecimiento severo</i>	$\varepsilon = 0.15 \times 10^{-4}$	$\varepsilon = 0.15 \times 10^{-4}$	$\varepsilon = 0.99\dots, q = 500$
⋮	$\varepsilon = 0.75 \times 10^{-4}$		
⋮	$\varepsilon = 1.5 \times 10^{-4}$		
<i>Endurecimiento ligero</i>			$\varepsilon = 0.99\dots, q = 15$ SXPP <sub>15</sub>

<sup>§§</sup> El parámetro de anisotropía ( $\alpha$ ) se fija como cero para ambos fluidos SXPP.

El fluido SXPP<sub>500</sub> exhibe un endurecimiento extensional severo a valores de rapidez de estiramiento moderados, alcanza un máximo equivalente al del fluido LPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ), con la diferencia de que el caso SXPP presenta un decaimiento en  $\eta_e$  una vez alcanzado el máximo. Aquí, para el caso SXPP<sub>500</sub> ocurre un mínimo a  $We = 5$ , sin embargo, es casi imperceptible.

La tendencia en la curva *epd* parece más cercana a alcanzar un valor asintótico que a cruzar la línea de referencia newtoniana. Esto puede asociarse a que el máximo de esfuerzo (justo después del plano medio) es significativamente menor que el observado para los modelos Oldroyd-B y PTT (ver Figura 7.25,  $\beta = 0.99$ ). Lo que parece esencial en este caso, es el retraso en el régimen de endurecimiento extensional mostrado por el modelo SXPP<sub>500</sub>. Por esto, el incremento en esfuerzo disminuye substancialmente; por ejemplo, a  $\lambda_{0b}\dot{\varepsilon} \approx 0.7$ , la viscosidad extensional para LPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ) y EPTT( $\varepsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ) son mayores a 300 unidades, mientras que para SXPP<sub>500</sub> es alrededor de 3 unidades (ver Figura 7.16c). Es hasta que la rapidez de deformación es  $\lambda_{0b}\dot{\varepsilon} \approx 2.0$ , que el fluido SXPP<sub>500</sub> alcanzará dichos ordenes de magnitud en  $\eta_e$ . El *mínimo* en *epd* para los modelos PTT puede ser correlacionado a la similitud que guarda este modelo con la respuesta Oldroyd-B en flujo extensional, específicamente el rápido incremento en  $\eta_e$  cerca de 0.5 unidades en rapidez de extensión. Después de tal rapidez de deformación, el modelo LPTT alcanza una meseta, con niveles de viscosidad extensional de  $\{10^3, 250, 150\}$  unidades para  $\varepsilon_{PTT} = \{0.15 \times 10^{-4}, 0.75 \times 10^{-4}, 1.5 \times 10^{-4}\}$ . La tendencia en los resultados en *epd* a alcanzar valores asintóticos a niveles de elasticidad puede relacionarse con las mesetas en  $\eta_e$  mostrados por los modelos LPTT. Para los dos fluidos,  $\varepsilon_{PTT} = \{0.75 \times 10^{-4}, 1.5 \times 10^{-4}\}$ , sus trazos ([2], [3]) están en proximidad con la línea de referencia newtoniana. Nótese que para  $\varepsilon_{PTT} = 1.5 \times 10^{-4}$ , que corresponde a la meseta en  $\eta_e$  de menor magnitud del fluido LPTT, se presenta una línea en *epd* que termina



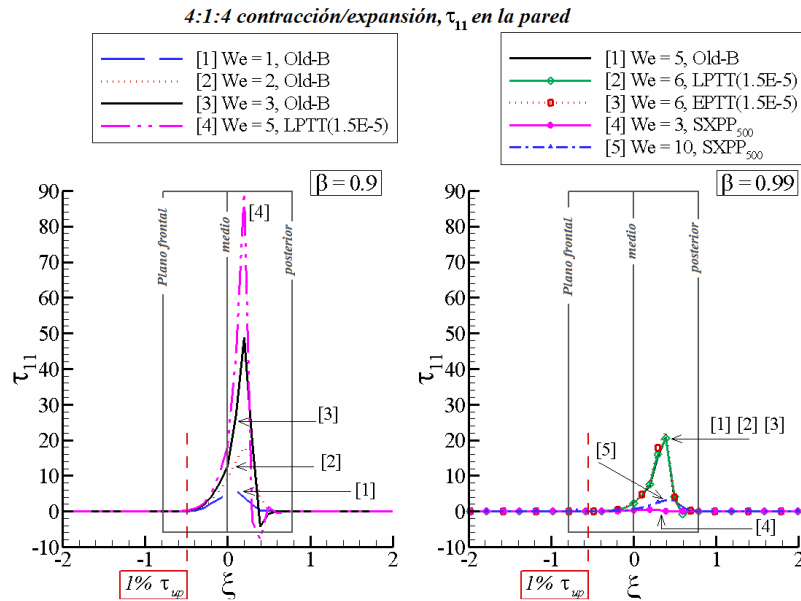


Figura 7.25. Perfil de esfuerzo normal a lo largo de la pared, incrementando  $We$ :  $\beta = 0.9$  y  $0.99$ ; 4:1:4 axisimétrico.

siendo prácticamente paralela a la línea de referencia newtoniana. En las regiones del flujo en donde la deformación extensional domina y es relativamente constante, la respuesta *epd* se acerca a la equivalente de un fluido newtoniano. El cociente (casi constante) entre la *epd* resultante y el valor de referencia newtoniano puede ser relacionada con el aumento en la viscosidad extensional previo al valor asintótico.

Siguiendo con la comparación entre dos fluidos con severo endurecimiento extensional, seguido de ablandamiento (reducción en  $\eta_e$ ), EPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ) y SXPP<sub>500</sub>, proporcionan un mejor entendimiento de la influencia del retraso en el incremento en  $\eta_e$  sobre la tendencia en *epd*. Este retraso del inicio del régimen de endurecimiento provoca los menores valores de esfuerzo desarrollado por SXPP<sub>500</sub>. Esto puede observarse en la Figura 7.25 para  $\beta = 0.99$ , donde el máximo en esfuerzo en la pared para SXPP<sub>500</sub> y  $We = 10$  es alrededor de cinco veces menor que para LPTT( $\epsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ) o Oldroyd-B, ambos a  $We = 6$  o menor. El incremento en es-

fuerzo de SXPP<sub>500</sub> al incrementar aún más la elasticidad, indica que el régimen de ablandamiento extensional está todavía por alcanzarse. En la Figura 7.25 se puede observar que el máximo de esfuerzo para  $We = 10$  es cerca de seis veces mayor que para  $We = 3$ . Este crecimiento puede ser reducido por un efecto adicional, identificado como el gradual (comparado con PTT y Oldroyd-B) incremento en la viscosidad extensional que exhibe esta versión de los modelos Pom-Pom, SXPP<sub>500</sub>. Observando que la curva *epd* para EPTT ( $\epsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ) de la Figura 7.24b, solo se nota una ligera separación de la respuesta LPTT ( $\epsilon_{PTT} = 0.15 \times 10^{-4}$ ), líneas [1] y [4]. Esta diferencia puede estar relacionada con el valor máximo en  $\eta_e$ , que para el modelo EPTT es ligeramente menor al del caso LPTT; también puede asociarse con la reducción en la rapidez de endurecimiento que ocurre previo al inicio del régimen de ablandamiento.

#### 7.3.3d Predicciones para muy alto contenido de disolvente, $\beta=0.999$ , Oldroyd-B

Considerando ahora el sistema con la mínima separación de la línea de referencia newtoniana (comparado con  $\beta = 0.9$  y  $\beta = 0.99$ ), esto debido a la cantidad extrema de disolvente, correspondiendo a un 99.9% de la viscosidad total. Este caso se define al establecer el cociente de viscosidades en  $\beta = 0.999$ . Aun con esta minúscula concentración de polímero, el *mínimo* en *epd* y el *cruce* de la línea newtoniana pueden ser detectados. La posición del mínimo local no cambia, lo que se modifica es la rapidez de decaimiento y crecimiento en *epd*. Las tendencias mostradas son consistentes con los argumentos presentados anteriormente.

#### 7.3.3e Locación del punto de monitoreo de presión y disipación

Adicionalmente, se presentan en esta sección, comentarios sobre el impacto de  $[p - p_{Newt}]$  en *epd* por la contracción/expansión 4:1:4 de configuración cilíndrica, al variar el parámetro  $\beta$  como  $\{1/9, 0.9, 0.99\}$ . Recordando que para el caso  $\beta = 1/9$  no ocu-

re ningún cruce de  $[p - p_{Newt}]$  con  $We$  en la sección de entrada a la contracción, y por tanto, no se observa el *mínimo* en *epd* (se tiene un decaimiento monótono). Para el caso  $\beta = 0.9$  sí se observa el *mínimo* en *epd*, mientras que si  $\beta = 0.99$ , se dan ambos fenómenos, el *mínimo* y el *cruce* en *epd*, como se nota en la Figura 7.26. Al identificar la presión  $p$  resultante del modelo Oldroyd-B como  $p_{Boger}$ , se tiene la siguiente expresión,

$$\frac{(\Delta p_{en})_{Boger} - (\Delta p_{en})_{Newt}}{(\Delta p_{en})_{Newt}} = \mathcal{P} - 1 = \frac{\Delta [p_{Boger} - p_{Newt}]_{en}}{(\Delta p_{en})_{Newt}}. \quad (7.2)$$

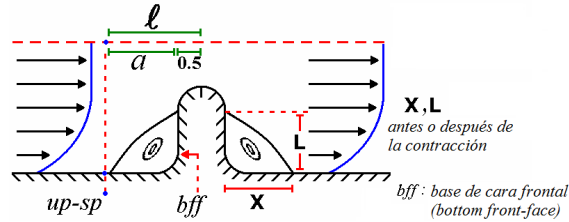
De la Figura 7.26, se puede observar que en las secciones de flujo totalmente desarrollado, denotadas con el subíndice *fd*,  $\Delta [p_{Boger} - p_{Newt}]_{fd} \approx 0$ . Teóricamente, bajo las mismas condiciones de flujo y viscosidad cortante de ambos modelos, Boger y newtoniano, esta aproximación es exacta. De aquí que,

$$\frac{\Delta [p_{Boger} - p_{Newt}]_{en}}{(\Delta p_{en})_{Newt}} = \frac{\Delta [p_{Boger} - p_{Newt}]_{fd}}{(\Delta p_{en})_{Newt}} = \mathcal{P} - 1. \quad (7.3)$$

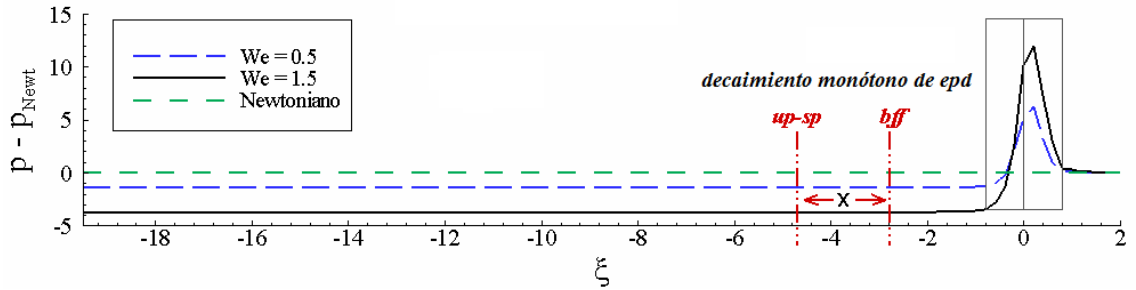
Para que *epd* cruce la línea de referencia newtoniana, es decir, que se genere *epd* en exceso,  $(\mathcal{P} - 1)$  debe ser positiva y se sabe que en general  $(\Delta p_{en})_{Newt} > 0$ . Con la calibración en el esquema numérico de  $p_{Boger}^{exit} = p_{Newt}^{exit} = 0$ , esto implica que  $(\mathcal{P} - 1) > 0$  si y solo si  $[p_{Boger} - p_{Newt}]^{up-sp} > 0$ . Por esto, se puede definir un punto de observación de la presión *corriente arriba up-sp* (upstream sampling-point), ver Figura 7.26a, establecido antes de la contracción a una mínima distancia del plano medio, en donde se tenga el flujo totalmente desarrollado y fuera de la región de recirculación (vórtice), de tal forma que  $(p_{Boger} - p_{Newt})^{inlet} = (p_{Boger} - p_{Newt})^{up-sp}$ .

Contracción/expansión 4:1:4

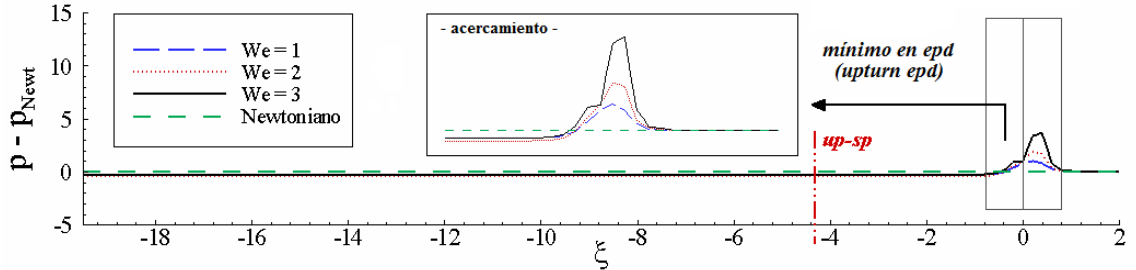
a) Representación esquemática del punto de observación



b)  $\beta = 1/9$



c)  $\beta = 0.9$



d)  $\beta = 0.99$

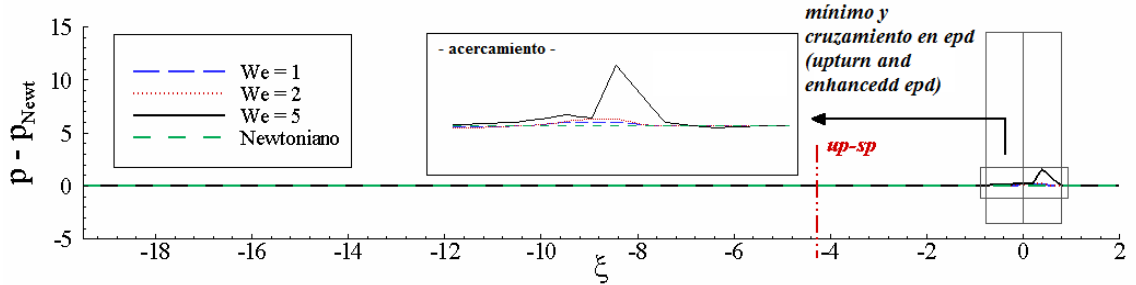


Figura 7.26. Perfiles  $[p-p_{Newt}]$  a lo largo de la pared, incrementando  $We$  (Oldroyd-B): 4:1:4 axisimétrico; a) representación esquemática, b)  $\beta = 1/9$ , c)  $\beta = 0.9$ , d)  $\beta = 0.99$ .

Específicamente, con  $\Delta p = p^{inlet} - p^{exit}$ ,

$$\frac{\Delta [P_{Boger} - P_{Newt}]}{(\Delta p_{en})_{Newt}} = \frac{(P_{Boger} - P_{Newt})^{inlet} - (P_{Boger} - P_{Newt})^{exit}}{(\Delta p_{en})_{Newt}}, \quad (7.4)$$

entonces,

$$\frac{(P_{Boger} - P_{Newt})^{inlet}}{(\Delta p_{en})_{Newt}} = \mathcal{P} - 1 = \frac{(P_{Boger} - P_{Newt})^{up-sp}}{(\Delta p_{en})_{Newt}}. \quad (7.5)$$

Con esto se puede establecer la localización del punto de observación de la presión, que para  $\{\beta = 0.99, We = 5\}$  es satisfecho en el canal de entrada, aún lejos de la contracción, una etapa en donde se detecta *epd* en exceso (aunque muy ligeramente). Con  $\beta = 0.9$ , la misma condición se satisface a una distancia corta (sobre la línea central o de simetría) de  $\approx 0.5$  unidades, entre la cara frontal de la restricción y el plano medio. Esto significa que, para este caso, al mover el punto de monitoreo a un punto entre la cara frontal y el plano medio, se obtendrá *epd* mayor al valor newtoniano; sin embargo, ésta no es una medición válida, ya que en la zona de la constricción, la condición de flujo desarrollado no se cumple en todas las variables. Además,  $(\mathcal{P} - 1)$  es mayor de cero solo en una pequeña área, fuera de la cual, para  $\{\beta = 0.99, We = 5\}$ , se tiene que  $epd < 1$ .

En la Figura 7.27 se muestra el comportamiento de *epd*, primero con respecto al número de Weissenberg para dos fluidos a distintos puntos de monitoreo  $\ell$  y también con respecto al punto de monitoreo. Para el comportamiento de *epd* vs. *We* se tiene que a puntos de monitoreo pequeños, los dos fluidos pueden exhibir caídas de presión claramente superiores a la correspondiente newtoniana al incrementar el nivel de elasticidad

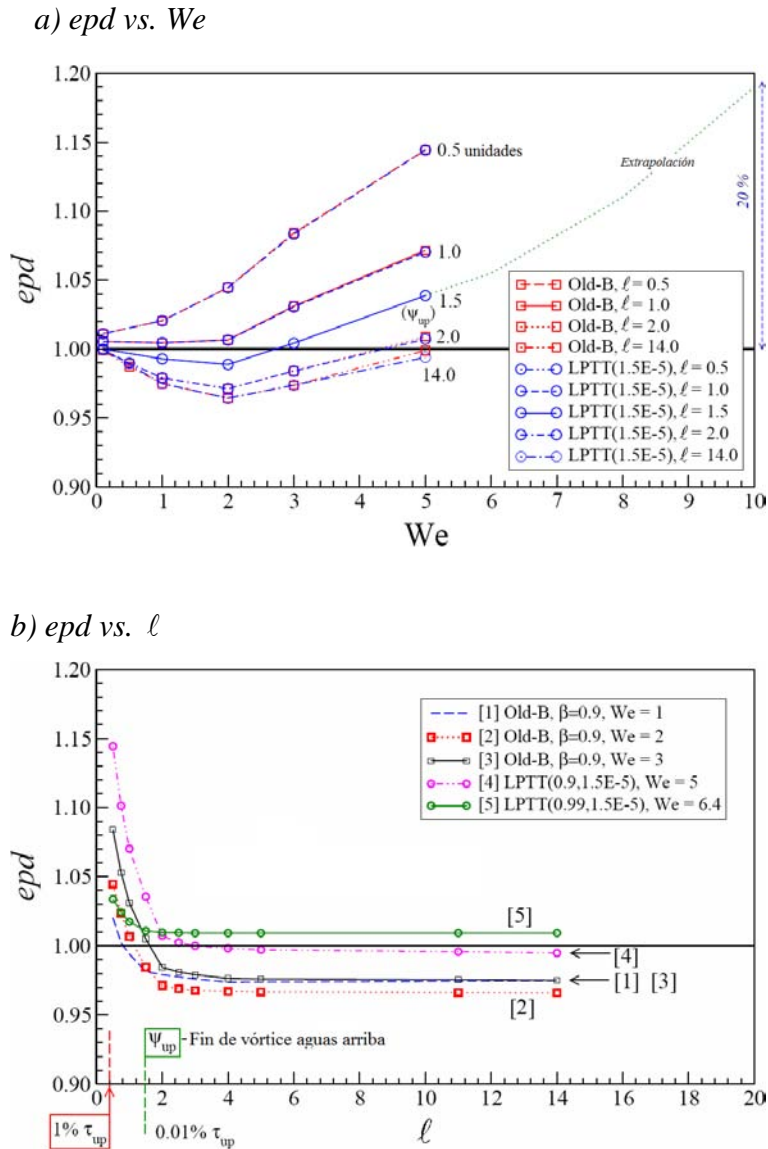


Figura 7.27. Caída de presión ( $epd$ ) a diferentes puntos de observación y niveles de elasticidad:  $\beta = 0.9$ , 4:1:4 axisimétrico.

del sistema. Sin embargo, estos puntos de monitoreo no están siquiera fuera de la zona de vórtices ( $\psi_{up}$ ), por lo que no pueden considerarse como puntos de monitoreo válidos. La lectura de  $epd$  a  $\ell = 2$  está cerca del valor real, mientras que si  $\ell = 14$ , la lectura está lo suficientemente estable para considerarse como una lectura válida.

Considerando el comportamiento de  $epd$  respecto al punto de monitoreo (Figura 7.27b), se observa que en todos los casos mostrados, es posible encontrar  $epd$  mayor al valor unitario, aunque sean lecturas no válidas, esto a valores pequeños del punto de monitoreo  $\ell$ . Solo el caso LPTT(0.99,  $1.5 \times 10^{-5}$ ), a  $We = 5$  cumple con  $epd > 1$  en su valor asintótico.

Combinando la información reunida en la Figura 7.27b con la de Figura 7.27a y seleccionando  $\ell \approx 1.5$  unidades, se ha incluido un trazo de los valores posibles que tomaría  $epd$  ( $We, \beta = 0.9$ ) en la Figura 7.27a para  $We > 5$ . Esto ayuda a identificar que a un nivel de elasticidad de  $We = O(10)$  sería probable conseguir un exceso en  $epd$  de  $O(20\%)$ .

Siguiendo las observaciones de Szabo et al. [99] y Cartalos y Piau [101], los cuales encontraron que la rapidez de disipación es igual al producto caída de presión y flujo, suponiendo que el esfuerzo presenta la misma distribución antes y después de la restricción. Esta relación es válida por tanto para la contracción/expansión mas no para la geometría con sólo la reducción en diámetro. En este trabajo se desea una relación semejante entre la rapidez de disipación y  $[p - p_{Newt}]$ . Empezando con<sup>§§§</sup>,

$$\Delta p Q = \mathcal{D} \quad \text{donde} \quad \Delta p = p^{inlet} - p^{exit}, \quad (7.6)$$

y reconociendo que  $\mathcal{D} = \int_V \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} dV$  sobre la entrada y salida de la región estudiada, donde  $\boldsymbol{\sigma}$  es el esfuerzo total y  $V$  es el volumen total de fluido, se puede definir

$$(\Delta p Q = \mathcal{D})_{Boger} \quad \text{y} \quad (\Delta p Q = \mathcal{D})_{Newt}, \quad (7.7)$$

suponiendo un flujo constante e igual para ambos fluidos, se tiene

---

<sup>§§§</sup> La ecuación (7.6) se satisface a cada instante bajo condiciones de flujo reptante.

$$\Delta [p_{Boger} - p_{Newt}] = \frac{[\mathcal{D}_{Boger} - \mathcal{D}_{Newt}]}{Q}, \quad (7.8)$$

y debido a la calibración,  $[p_{Boger} - p_{Newt}]^{exit} = 0$ , entonces,

$$[p_{Boger} - p_{Newt}]^{inlet} = [p_{Boger} - p_{Newt}]^{up-sp} = \frac{[\mathcal{D}_{Boger} - \mathcal{D}_{Newt}]}{Q}, \quad (7.9)$$

donde la sección de entrada a la contracción puede tomarse como el punto de observación de la presión *corriente arriba*, siempre y cuando la condición de flujo totalmente desarrollado se cumpla (principalmente en esfuerzo). Esto identifica la relación entre el diferencial de disipación por flujo unitario, el diferencial de presión corriente arriba y *epd* de la ecuación (7.5). Debido a que se pueden aplicar los mismos argumentos para separar secciones 4:1:4 de flujo totalmente desarrollado, tanto *corriente arriba* como *abajo*, en donde la relación  $\Delta [p_{Boger} - p_{Newt}]_{fd} = 0$  se satisface, entonces, puede concluirse que no hay diferencia en la rapidez de disipación entre estos fluidos, Boger y newtoniano, a través de estas regiones de flujo totalmente desarrollado. Considerando el complemento geométrico, esto es, únicamente la restricción y las secciones de entrada y salida cercanas al plano medio, regiones en las que no se presenta el flujo totalmente desarrollado, puede establecerse la siguiente identidad,

$$\frac{[\mathcal{D}_{Boger} - \mathcal{D}_{Newt}]^{constriction}}{Q} = [p_{Boger} - p_{Newt}]^{up-sp} = (\mathcal{P} - 1)(\Delta p_{en})_{Newt} \quad (7.10)$$

Si  $[p_{Boger} - p_{Newt}]^{up-sp}$  fuera positivo, con el fin de obtener  $\mathcal{P} - 1 > 0$ , significaría que la diferencia de disipación a través (y únicamente) de la zona de la restricción debe ser positiva. Lo anterior es independiente si la referencia es la línea central o a lo largo de la pared. Entonces para el flujo por la contracción/expansión 4:1:4, la longitud del



canal de entrada y salida es irrelevante para este problema, siempre y cuando se cumpla la condición de flujo totalmente desarrollado.

Con el objetivo de corroborar y validar estos comentarios, la Figura 7.28 presenta los trazos de  $epd$  obtenidos a través de diversas predicciones numéricas para el flujo 4:1:4 axisimétrico. Este diagrama incluye los resultados de los estudios de Szabo et al. [99], Binding et al. [102] y el presente trabajo. En general el nivel de concordancia, para las dos relaciones de disolvente ( $\beta = 1/9$  y  $0.9$ ), es bueno.

## **7.4 Conclusiones**

En este capítulo se obtuvieron los datos de caída de presión físicamente representativos para fluidos con viscosidad cortante constante y altamente elásticos (fluidos de Boger). En particular, el trabajo se concentró en modelos con estas características y con niveles de endurecimiento extensional en flujos a través de contracción y contracción/expansión. Los principales comentarios de este capítulo pueden resumirse como:

(i) Se han identificado diferencias significativas en los resultados de  $epd$ , para los casos de configuraciones planar y axisimétrica, en contracción/expansión 4:1:4, para fluidos Oldroyd-B. Sólo en esta última configuración, se obtuvo caída de presión mayor a la calculada para el caso newtoniano (caída de presión en exceso) bajo ciertas circunstancias. El ajuste del cociente de viscosidades (disolvente/total),  $\beta$ , ejerce una influencia severa en los niveles de  $epd$ , donde las altas concentraciones de disolvente provocan que se presente un *mínimo* en la caída de presión. Esto puede ser visto como un ajuste similar al del parámetro  $L$  del modelo FENE-CR en Szabo et al. [99], con el cual se estimula una viscosidad extensional de gran magnitud pero finita. Algunos de los fluidos Oldroyd-B exhibieron el aumento (deseado) en  $epd$ . Es razonable el argumentar

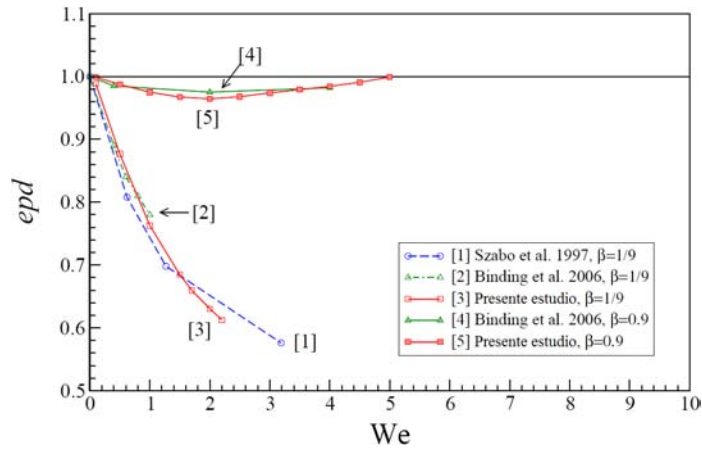


Figura 7.28. Caída de presión ( $epd$ ) vs.  $We$  (Oldroyd-B): 4:1:4 axisimétrico; variando el esquema numérico y modelo.

que el ajuste en  $\beta$  para los fluidos FENE-CR no es necesario en casos en donde la extensión de la cadena polimérica es pequeña (valores bajos de  $L$  - parámetro de extensibilidad finita). Bajo tales circunstancias (con extensión limitada) existe una reducción en la energía almacenada por el sistema. De esto, el decaimiento inicial en la caída de presión puede esperarse menor que el exhibido por el modelo Oldroyd-B (con extensibilidad de las cadenas sin límite). Además, es importante notar que el modelo FENE-CR presenta una viscosidad cortante constante, mientras que para las simulaciones PTT y SXPP, fue necesario establecer contribuciones de disolvente muy altas, con el fin de representar fluidos de Boger. Recordar que los resultados Oldroyd-B para [99,102] y el presente trabajo muestran diferencias insignificantes, para el nivel  $\beta=1/9$  (ver Figura 7.28).

(ii) Otra característica importante es que el mínimo en  $epd$  no se presentó para ninguno de los casos con geometría rectangular ni para la contracción 4:1, rectangular o cilíndrica.

(iii) En la contracción/expansión 4:1:4 axisimétrica; modelo Oldroyd-B, en los casos en donde se detecta el *mínimo* en  $epd$ , éste es acompañado por un vórtice de intensi-

dad y de tamaño relativamente grandes en la sección de la salida de la restricción; vórtice de mayor magnitud al que ocurre en la sección de entrada.

(iv) El modelo LPTT sigue las tendencias en  $epd$  del modelo Oldroyd-B. Al ajustar el parámetro  $\varepsilon_{PTT}$  se identifica la influencia que ejerce el endurecimiento extensional severo, y el impacto del crecimiento limitado en  $\eta_e$ . Entre mayor sea el nivel de endurecimiento, mayor será el incremento en  $epd$ , una vez que se haya superado el mínimo en la caída de presión. El modelado Pom-Pom, con un crecimiento en  $\eta_e$  moderado en flujo extensional puro, refuerza tal conclusión. Esto también indica que una vez que, en las condiciones de flujo, se ha obtenido un valor meseta (asintótico) en la viscosidad extensional\*\*\*\*, se espera que  $epd$  también alcance un valor asintótico y su comportamiento, a partir de este punto, sea paralelo al de un fluido newtoniano.

(v) Una característica única del presente estudio es el identificar influencias desde la pared de las geometrías, en particular, el esfuerzo normal  $\tau_{11}$ . Una explicación de la presencia del *mínimo* en  $epd$  para el caso axisimétrico 4:1:4 (el fenómeno de mayor importancia captado en estas simulaciones), puede encontrarse en la correlación que se observa entre los cambios de esfuerzo normal, ocurridos en el tercer y cuarto cuadrantes de la restricción, y la caída de presión; esto parece estimular cierta difusión hacia la línea de simetría, principalmente en esfuerzo y rapidez de deformación. Todo lo anterior ejerce una influencia en la caída de presión al cruzar la restricción. Las simulaciones indican que esto no sucede en la configuración rectangular, ni en ninguna de las geometrías con contracción 4:1, por lo menos en los niveles de elasticidad obtenidos. Realizando una comparación entre la contracción/expansión y la contracción, se puede especular que se requeriría elevar los niveles de rapidez de deformación y la elasticidad obtenible ( $We_{crit}$ ) al menos dos órdenes de magnitud para estimular el aumento en  $epd$  en la contracción

---

\*\*\*\* Equivalentemente en relación de Trouton para fluidos con adelgazamiento al corte, ver los resultados de caída de presión de Aboubacar et al. [1,2] Wapperom y Keunings [102], Alves et al. [8], Szabo et al. [90].

4:1. Sin embargo, es necesario el tomar en cuenta que la caída de presión (y también la disipación) para el flujo por contracción es un orden de magnitud mayor que la calculada en la contracción/expansión. Esto es, buscando niveles de elasticidad mayores, para inducir crecimiento en los máximos de esfuerzo (que tendrán una mayor influencia en  $epd$ ), se producirían también, presiones de entrada a la contracción que se alejan más de la línea de referencia newtoniana. Estas dos influencias están en conflicto en la contracción 4:1, lo que llevó a la especulación anterior. Desafortunadamente, hasta la fecha, no ha sido posible el alcanzar tales niveles de elasticidad mediante los procedimientos numéricos actuales.

(vi) Mediante el análisis de los resultados 4:1:4, se ha identificado una relación entre  $[p - p_{Newt}]$ ,  $epd$  y el diferencial de rapidez de disipación a través de la zona de la restricción. Esta relación indica que para obtener aumento en  $epd$ , se requiere que  $[p - p_{Newt}]$ , en la zona de la restricción sea positiva. Además, los resultados de  $[p - p_{Newt}]^{up-sp}$  pueden emplearse directamente para estimar  $epd$  ( $\mathcal{P}$ ). De esto, y considerando LPTT como un modelo físicamente más representativo para fluidos de Boger con alto endurecimiento extensional, se puede apreciar cómo el aumento en  $epd$  debiera ser medido.

Estos resultados implican, que si se desea obtener aumento en la caída de presión, es crucial estimular un severo endurecimiento extensional, con el fin de elevar los niveles de esfuerzo a través de la restricción. Con los modelos utilizados en el presente trabajo, el contenido de disolvente en el sistema es un parámetro de cuyo ajuste depende en gran medida el comportamiento de  $epd$ .

## **CAPÍTULO 8**

### **Modelos Bautista-Manero en Flujos a través de Configuraciones Rectangulares**

En este capítulo se presenta el modelado de flujo a través de geometrías de configuración rectangular, con ecuaciones constitutivas desarrolladas para representar sistemas tensoactivos de micelas tipo gusano (“worm-like micellar systems”), los cuales son empleados en procedimientos de recuperación de crudo. Típicamente, estos sistemas exhiben respuestas ajustables al modelo de Maxwell, para deformación cortante oscilatoria de pequeña amplitud. Sin embargo, según Manero et al. [3], su modelado mediante una ecuación reológica todavía no se ha realizado de manera satisfactoria. Se requiere de una buena representación de las propiedades extensionales de dichos sistemas viscoelásticos, debido a la importancia de este tipo de deformación en sistemas de flujo a través de medios porosos. Aquí, el objetivo es predecir la caída de presión de sistemas viscoelásticos con adelgazamiento al corte en canales planos.

## **8.1 Introducción**

Los sistemas coloidales y poliméricos exhiben una variedad de respuestas reológicas. Algunos de estos sistemas tienen directa aplicación en las industrias alimenticia, petrolera, cosmética y de recubrimientos, particularmente, en ciertos procedimientos de recuperación de petróleo existe una necesidad de fluidos capaces de transformarse de un fluido de baja viscosidad (newtoniano) a un sistema altamente viscoelástico, y retornar a la forma newtoniana de viscosidad reducida. Estos cambios pueden inducirse en diferentes etapas del procedimiento de recuperación de crudo. Los sistemas tensoactivos viscoelásticos (Viscoelastic surfactants systems o VES), con formación de micelas tipo gusano, caen dentro de esta categoría y su uso como fluidos de estimulación de pozos se ha incrementado, debido a sus propiedades de asociación y disociación.

La estimulación hidráulica de pozos petroleros es una técnica que incrementa la productividad del pozo cuando la permeabilidad del medio es baja. Una de estas técnicas es el fracturamiento mediante geles viscoelásticos. Este consiste en transmitir presión hidráulica a la roca para provocar fracturas en la formación. El gel utilizado también contiene partículas (empaque) de cerámica o arena; así el sistema global constituye un paquete de soporte poroso. El objetivo del gel es, además de provocar las fracturas, transportar el empaque a los sitios de las fracturas y, el del empaque o soporte, de mantener abiertos dichos canales una vez que el fluido presurizador es removido, mediante la degradación del gel. Los fluidos poliméricos usados como líquidos de fracturación presentan el inconveniente de que no pueden ser degradados en su totalidad y su tamaño de partícula es suficiente para tapar los poros de la fractura, limitando la facilidad de fluir en el sistema. El uso de sistemas tensoactivos viscoelásticos como fluidos de fracturación, agrupándose en micelas tipo gusano, ha sido un procedimiento relativamente nuevo. Una vez que el soporte es colocado por estos fluidos, las partículas tensoactivas entran en contacto con el hidrocarburo producido por la fractura, provocando así que la

organización micelar se transforme de asociaciones tipo gusano (de gran longitud) a pequeñas esferas, tal vez, microemulstiones. Como consecuencia, la viscosidad y la elasticidad del fluido residual decaen significativamente, por lo que pueden fluir fácilmente del soporte. El resultado es que el taponamiento de los poros es no significativo, por lo que se obtienen eficiencias elevadas en el flujo a través de las fracturas (ver Boek et al. [5]).

Investigando la respuesta reológica de los sistemas con micelas tipo gusano, Manero et al. [3] propusieron un modelo de estructura similar a la ecuación constitutiva Oldroyd-B, para la descripción de la evolución del esfuerzo, acoplado con la ecuación de Fredrickson [107]\*. Este modelo toma en cuenta la construcción y destrucción de las micelas en la solución, lo que resulta en un sistema constitutivo capaz de reproducir adelgazamiento al corte, y endurecimiento/ablandamiento extensional. Se ha encontrado que este modelo reproduce de forma satisfactoria resultados experimentales oscilatorios de pequeña amplitud y, en flujo cortante, para un sistema tensoactivo de cloruro de erucyl bis(hidroxyetil)metilamonio (EHAC). Sin embargo, la viscosidad extensional del modelo presenta una zona de indeterminación, a valores intermedios de la rapidez de deformación. Debido a que los valores de rapidez de deformación en flujo a través de medio poroso pueden caer dentro del intervalo en donde el modelo Bautista-Manero (BM modelo) se indetermina, se reportan modificaciones a éste.

Las ecuaciones del modelo original BM son:

Evolución del esfuerzo extra,

$$\mathbf{T} + \frac{\eta}{G_0} \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2\eta \left( \mathbf{d} + \lambda_J \overset{\nabla}{\mathbf{d}} \right), \quad (8.1)$$

---

\* Moore [108] y Chung y Evans [109] son algunos ejemplos de ecuaciones similares a la propuesta por Fredrickson, que toman en cuenta la formación y destrucción de estructuras.

ecuación cinética,

$$\frac{d}{dt}[\eta^{-1}] = \underbrace{\frac{1}{\lambda} \left( \frac{1}{\eta_0} - \frac{1}{\eta} \right)}_{\text{construcción}} + \underbrace{k \left( \frac{1}{\eta_\infty} - \frac{1}{\eta} \right)}_{\text{destrucción}} \mathbf{T}:\mathbf{d}, \quad (8.2)$$

con la notación,

- $\lambda_J$ : Tiempo de retardamiento (relacionada con la viscosidad del disolvente),
- $\lambda, k$ : Parámetros de tiempo de relajación y rompimiento, respectivamente,
- $\eta$ : Viscosidad,
- $\eta_p, \mu_s$ : Viscosidad polimérica (variable) y de disolvente (constante), respectivamente,
- $\eta_0, \eta_\infty$ : Viscosidad a tasa de corte cero e infinita, respectivamente,
- $G_0$ : Módulo elástico.

## 8.2 Modelo Bautista-Manero modificado

Con el fin de eliminar los problemas de viscosidad extensional del modelo original BM, Boek et al. [4], alteraron el modelo, dando lugar a la versión Bautista-Manero modificada (MBM), en la cual, la contribución del disolvente y del componente viscoelástico están separadas. En esta nueva formulación, el coeficiente  $k/\eta_\infty$  es tratado como un solo parámetro. La ecuación constitutiva presenta una viscosidad extensional continua, lo que hace que el modelo pueda usarse para representar propiedades de endurecimiento/ablandamiento extensional a valores físicamente posibles de rapidez de extensión, ver ecuaciones (8.3)-(8.5). Las ecuaciones de este nuevo modelo son:



Evolución del esfuerzo viscoelástico,

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\eta_p}{G_0} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p \mathbf{d}, \quad (8.3)$$

ecuación cinética<sup>†</sup>,

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\eta_p} \right) = \frac{1}{\lambda} \left( \frac{1}{\eta_0} - \frac{1}{\eta_p} \right) + \left( \frac{k}{\eta_\infty} \right) \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}, \quad (8.4)$$

contribución del disolvente,

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\mu_s \mathbf{d}. \quad (8.5)$$

Para programar este modelo en el código de elemento/volumen finitos utilizado, es necesario expresar el sistema de ecuaciones en forma adimensional, con las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} Re = \rho \frac{UL}{\mu}, & \quad We = \frac{\mu}{G_0} \frac{U}{L}, & \quad \beta = \frac{\mu_s}{\mu}, & \quad \phi_0 = \frac{\eta_0}{\mu}, \\ \phi = \frac{\eta_p(t, \mathbf{x})}{\mu}, & \quad \omega = \lambda \frac{U}{L}, & \quad \xi = \left( \frac{k}{\eta_\infty} \right) \mu_s \frac{U}{L}. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Con lo anterior, el modelo MBM adimensional queda:

Ecuación de movimiento,

$$Re \left[ \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \beta \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (8.7)$$

---

<sup>†</sup> Nótese que en el modelo BM,  $\eta_0$  es la viscosidad a cero rapidez de corte, mientras que en la versión modificada, solo lo es para la contribución viscoelástica. Entonces, en la ecuación (8.6),  $\mu = \eta_0$  para el modelo BM y para la modificación,  $\mu = \eta_0 + \mu_s$ .

evolución del esfuerzo,

$$\boldsymbol{\tau} + We \overset{\nabla}{\phi} \boldsymbol{\tau} = 2 \phi \mathbf{d}, \quad (8.8)$$

ecuación cinética,

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\phi} \right) = \frac{1}{\omega} \left( \frac{1}{\phi_0} - \frac{1}{\phi} \right) + \left( \frac{\xi}{\beta} \right) \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{d}. \quad (8.9)$$

### 8.3 Resultados

Se han obtenido resultados para el modelo MBM en flujo a través de una contracción 4:1, de esquina con curvatura, en configuración rectangular 2D. Las condiciones son de flujo reptante ( $Re = 0$ ), con una relación en las viscosidad de disolvente/total de  $\beta = 1/9$ , y viscosidad a cero rapidez de corte de  $\phi_0 = 8/9$ . Se hicieron simulaciones de dos casos, ajustando valores máximos de la viscosidad extensional del modelo MBM con los exhibidos por el modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner (EPTT) para  $\varepsilon_{PTT} = 0.02$  (endurecimiento severo) y  $\varepsilon_{PTT} = 0.25$  (endurecimiento moderado). Estos fluidos EPTT han sido comentados en el capítulo 6. En la Figura 8.1 se ilustran las funciones materiales<sup>‡</sup>. Se puede observar que ambos modelos presentan la misma respuesta a valores bajos de rapidez de deformación. En flujo cortante, el ajuste es muy satisfactorio a cualquier valor de rapidez de corte.

Para los dos juegos de parámetros escogidos, se observa reducción en la intensidad y en el tamaño de celda, como se muestra en la Figura 8.2. Para el fluido con el menor endurecimiento, el nivel máximo de elasticidad simulado ( $We_{crit} \approx 7$ ) es ligeramente mayor que cuando se compara para el caso de endurecimiento severo ( $We_{crit} \approx 5$ ). Esta

---

<sup>‡</sup> La rapidez de deformación se hace adimensional mediante  $\lambda_0 = \eta_0/G_0$  en el modelo MBM.

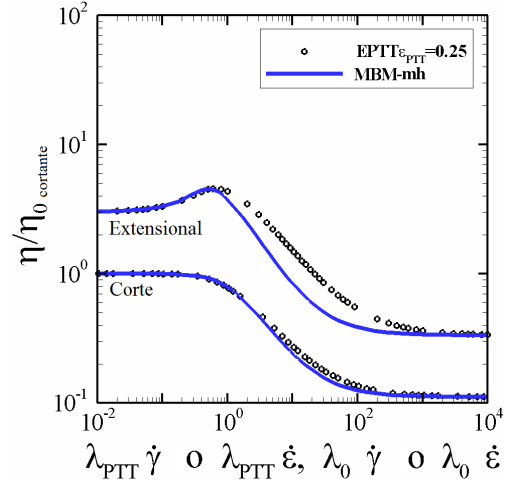
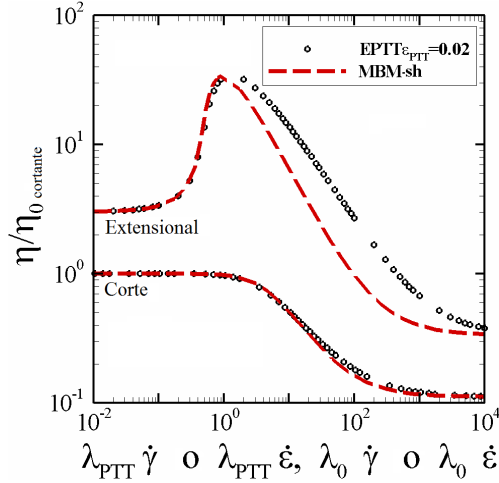
**Endurecimiento extensional severo**

$$\omega = 0.28, \xi = 0.1$$

**Endurecimiento extensional moderado**

$$\omega = 4.0, \xi = 0.1$$

*Viscosidad cortante y extensional*



*Relación de Trouton*

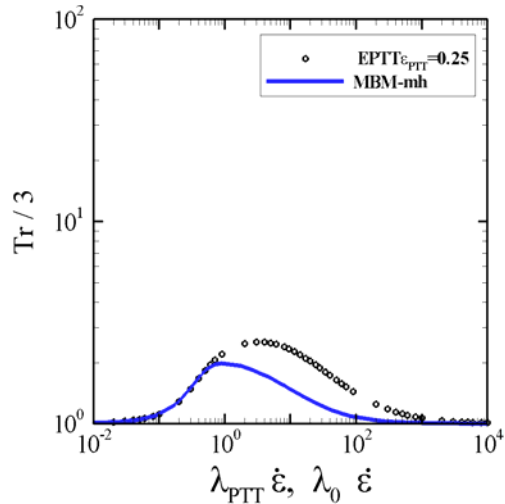
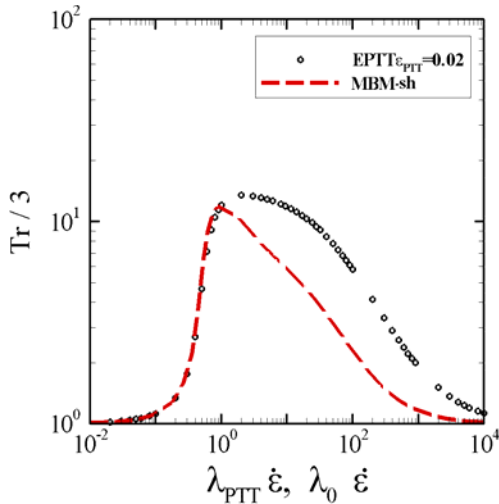


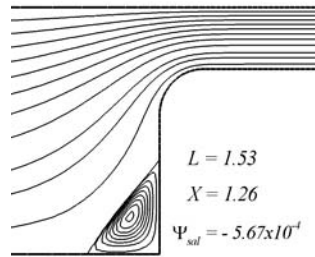
Figura 8.1. Funciones reométricas para los modelos MBM y EPTT.

reducción en el nivel crítico de elasticidad al incrementar el grado de endurecimiento es una característica comúnmente observada, por ejemplo ver Aboubacar et al. [8]. En condiciones semejantes, los correspondientes fluidos EPTT exhiben crecimiento de vórtices al incrementar el nivel de elasticidad ( $We$ ) para el caso con condiciones severas de

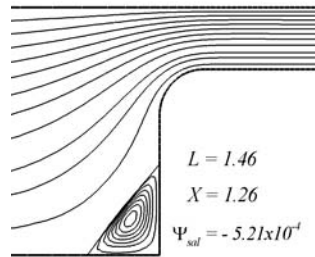
**Endurecimiento severo**

$\omega = 0.28, \xi = 0.1$

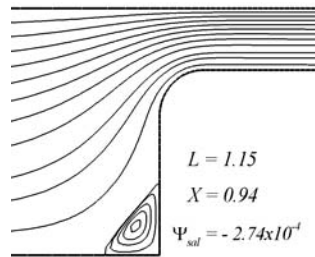
a)  $We = 0.1$



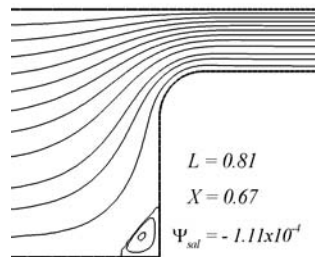
b)  $We = 1$



c)  $We = 3$



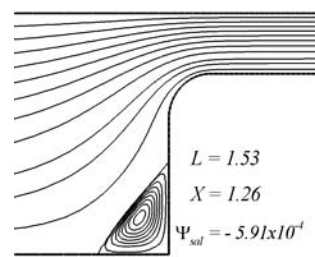
d)  $We = 5$



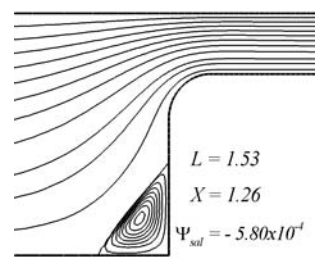
**Endurecimiento moderado**

$\omega = 4.0, \xi = 0.1$

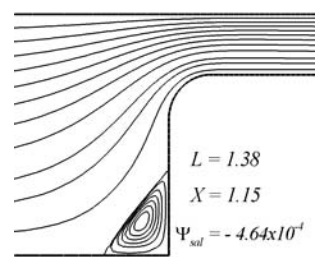
e)  $We = 0.1$



f)  $We = 1$



g)  $We = 3$



h)  $We = 7$

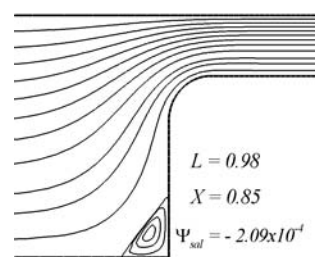


Figura 8.2. Líneas de corriente para el modelo MBM en flujo a través de la contracción 4:1.

endurecimiento extensional, mientras que para el caso del fluido con endurecimiento moderado, sólo se presenta reducción en el vórtice. Esta diferencia en la respuesta puede ser asociada entonces con el hecho de que el modelo MBM comienza el ablandamiento a valores de rapidez de deformación menores que el caso EPTT (ésta también se refleja en la relación de Trouton).

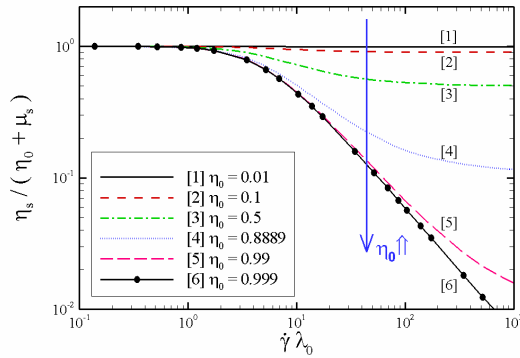
### **8.3.1 Funciones materiales para el modelo MBM**

Para establecer la influencia de los diferentes parámetros del modelo MBM en flujos viscométricos, se presenta la respuesta de este modelo en función de variaciones en  $\eta_0$  (Figura 8.3),  $k/\eta_\infty$  (Figura 8.4), y  $\lambda$  (Figura 8.5).

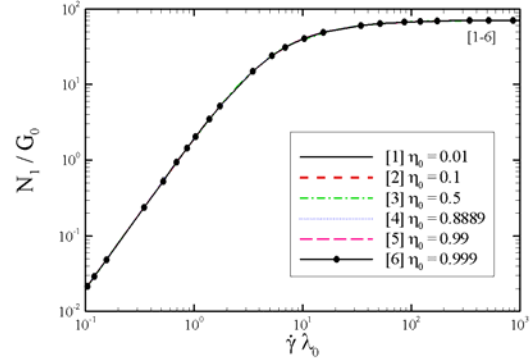
La viscosidad cortante sufre un desplazamiento desde un nivel casi constante ( $\eta_0 = 0.01$ ), cercana a la respuesta Oldroyd-B, hasta un caso con adelgazamiento cortante extremo, en donde la segunda región newtoniana se alcanza a valores de rapidez de corte muy altos. No se aprecia efecto sobre  $N_1$  al presentar la variable en forma adimensional (Figura 8.3). Los incrementos en la viscosidad a cero rapidez de corte producen un crecimiento en el grado de endurecimiento extensional y una reducción hasta el nivel asintótico de esta viscosidad.

La influencia en la variación de  $k/\eta_\infty$  se muestra en la Figura 8.4. Para la viscosidad cortante, un incremento en este parámetro se refleja en una reducción en el valor de rapidez de corte en la que comienza el adelgazamiento, y también en el inicio de la segunda región newtoniana. Los niveles del valor asintótico son independientes de  $k/\eta_\infty$ . De  $k/\eta_\infty = 0.001$  a 100, el valor límite de la primera diferencia de esfuerzos normales decae más de cinco décadas ( $N_1/G_0 \approx 7 \times 10^4$  a  $7 \times 10^{-2}$ ) y se alcanza a valores de rapidez de deformación menores. Un incremento similar en  $k/\eta_\infty$  reduce el nivel de crecimiento

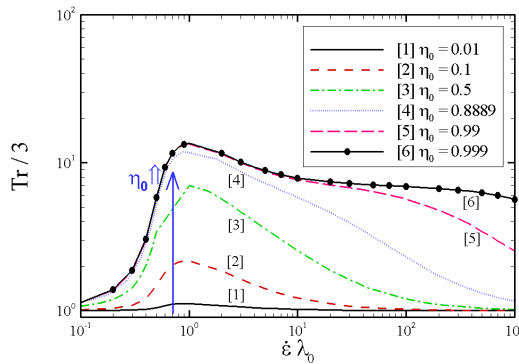
a) Viscosidad cortante



b) 1ª diferencia de esfuerzos normales



c) Relación de Trouton Uniaxial



d) Viscosidad Uniaxial

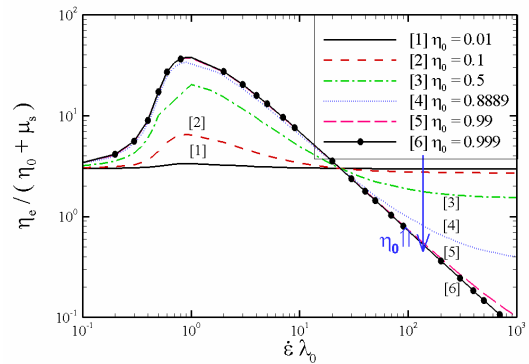
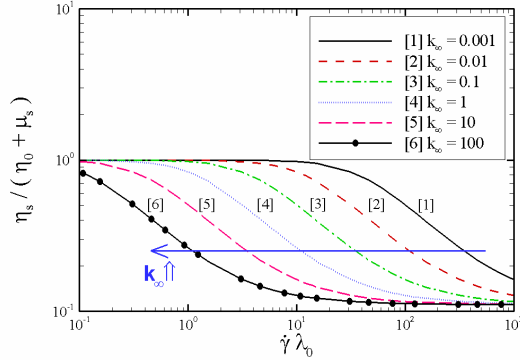


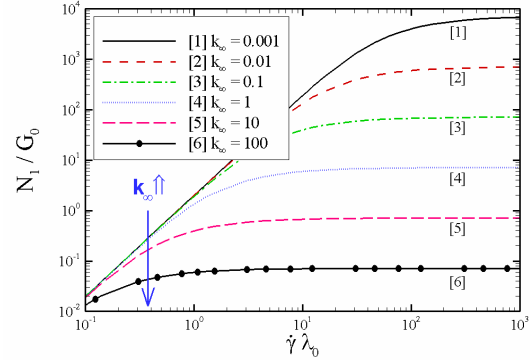
Figura 8.3. Respuesta MBM cortante y uniaxial, variando  $\eta_0$ :  $G_0 = 1$ ,  $k/\eta_\infty = 0.01$ ,  $\mu_s = 1/9$ ,  $\lambda = 0.28$ .

desde  $3 \times 10^3$  hasta cero; así que para el fluido con  $k/\eta_\infty = 100$ ,  $\eta_e$  decae de forma monótona, presentando ablandamiento aún a valores de  $\dot{\epsilon}$  muy bajos. La Figura 8.5 muestra la respuesta para cambios en  $\lambda$ . La respuesta parece emular a la exhibida por variaciones en  $k/\eta_\infty$ . Se puede apreciar que la pseudoplasticidad se presenta a valores de rapidez de corte menores, y que  $N_1$  decae cerca de cuatro décadas logarítmicas al variar  $\lambda$  desde 0.01 hasta 100. Igual que en el caso anterior, el incremento en  $\lambda$  produce un considerable aumento en el grado de endurecimiento extensional. Se observa que valores menores de  $\lambda$  generan máximos de mayor nivel en la viscosidad extensional.

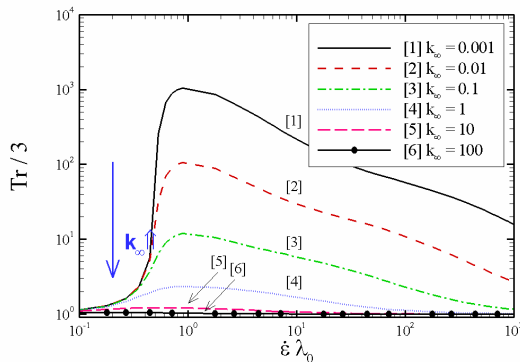
a) Viscosidad cortante



b) 1ª diferencia de esfuerzos normales



c) Relación de Trouton uniaxial



d) Viscosidad uniaxial

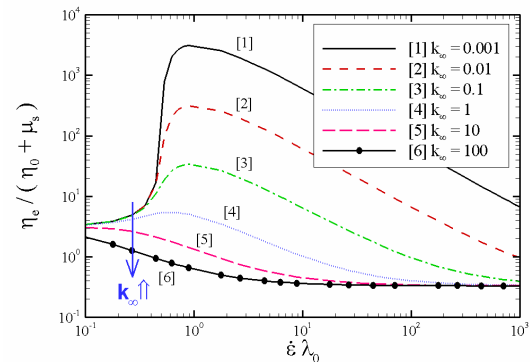


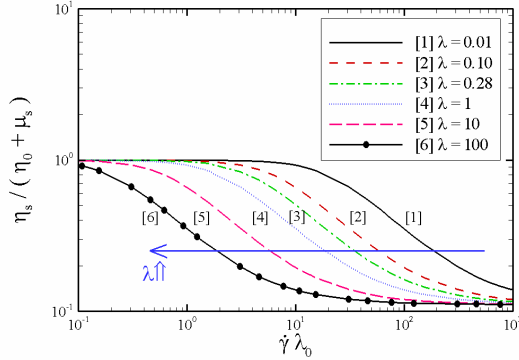
Figura 8.4. Respuesta MBM cortante y uniaxial, variando  $k/\eta_\infty$ :  $G_0 = 1$ ,  $\eta_0 = 8/9$ ,  $\mu_s = 1/9$ ,  $\lambda = 0.28$ .

Nótese que para  $\lambda \geq 10$ , no se aprecia endurecimiento alguno, por lo que no existe máximo alguno en  $\eta_e$ .

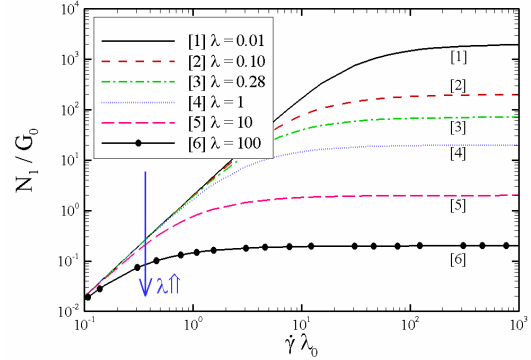
### 8.3.2 Estimación de la caída de presión en canales rectangulares

Se ha generado un esquema de solución para el problema unidimensional de estado estacionario, con el fin de estimar la caída de presión para el fluido MBM en un canal rectangular, sin contracción ni expansión alguna (flujo Poiseuille rectangular estacionario). El sistema de ecuaciones se resuelve para la velocidad y la rapidez de corte en la dirección perpendicular al flujo (dimensión  $H$ ), teniendo la función de viscosidad

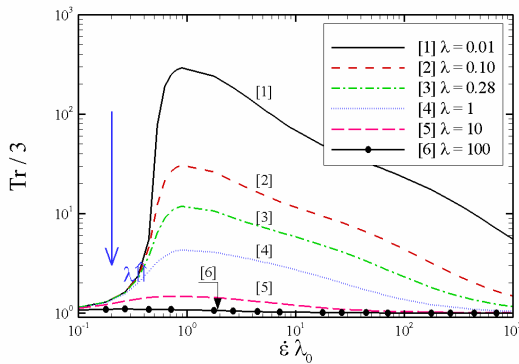
a) Viscosidad cortante



b) 1ª diferencia de esfuerzos normales



c) Relación de Trouton uniaxial



d) Viscosidad uniaxial

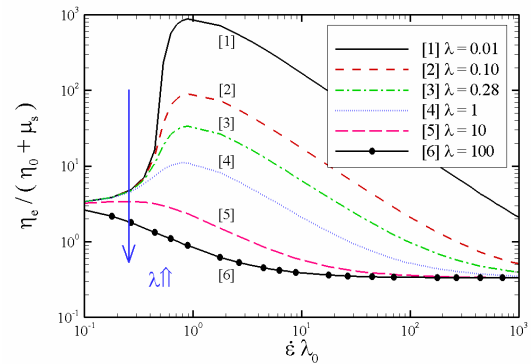


Figura 8.5. Respuesta MBM cortante y uniaxial, variando  $\lambda$ :  $G_0 = 1$ ,  $\eta_0 = 8/9$ ,  $k/\eta_\infty = 0.01$ ,  $\mu_s = 1/9$ .

especificada; con esto, se calcula la caída de presión del sistema. La Figura 8.6 ilustra la división del dominio (dirección perpendicular al flujo) en una serie de segmentos y nodos, mostrando que al incrementar el número de segmentos (refinar el mallado), se obtiene una solución convergente respecto al grado de refinamiento del mallado.

La posición en la dirección perpendicular al flujo está dentro del intervalo  $-1 \leq \bar{y} \leq 1$ , representada adimensionalmente por  $\bar{y} = y / [\frac{1}{2} H]$ .



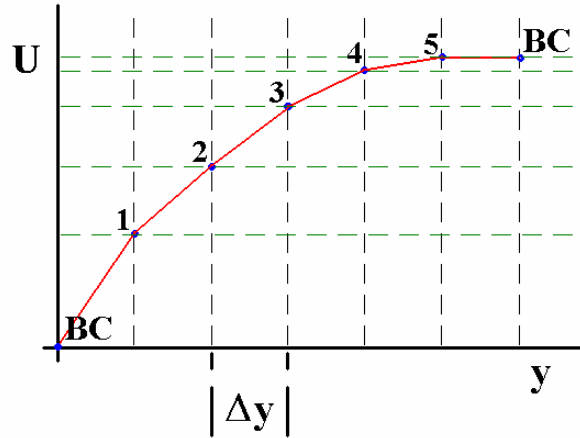


Figura 8.6. Esquema de la división del dominio en segmentos para el problema en un canal rectangular 1D.

La ecuación de *momentum* para el modelo MBM en un canal rectangular ( $-1 \leq \bar{y} \leq 1$ ) se reduce a:

$$-\frac{1}{2} H \frac{\Delta p}{L} \bar{y} = [\eta_p + \mu_s] \dot{\gamma}, \quad (8.10)$$

que en el punto medio del canal satisface la condición,

$$\bar{y} = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{\gamma} = 0. \quad (8.11)$$

La viscosidad cortante del modelo MBM está dada por:

$$\eta_p = \frac{1}{2\lambda k_\infty \eta_0 \dot{\gamma}^2} \left[ -1 + \sqrt{1 + 4\lambda k_\infty \eta_0^2 \dot{\gamma}^2} \right], \quad (8.12)$$

donde, por conveniencia, el parámetro  $(k/\eta_\infty)$  se representa como  $k_\infty$ .

La solución de la ecuación (8.10), en una serie de valores  $\bar{y}$  (posiciones  $y_i$ ), cubriendo desde la mitad del canal hasta la frontera sólida, arroja el perfil rapidez de deformación cortante. La integración de este perfil, por medio de la serie de Taylor, resulta en el perfil de velocidad:

$$u_i = u_{i-1} + \Delta\bar{y} \dot{\gamma}_{i-1}. \quad (8.13)$$

En la pared se cumple la condición de adherencia,

$$\bar{y} = \pm 1 \Rightarrow u = 0, \quad (8.14)$$

que al aplicarla resulta en:

$$u_0 = 0. \quad (8.15)$$

La ecuación (8.15) es el punto de inicio de la integración numérica *hacia delante* especificado en la ecuación (8.13). El procedimiento se termina a la separación media del canal. Por definición,  $\Delta y$  es la distancia o separación de dos puntos sucesivos de la división del dominio, ver Figura 8.6.

Finalmente, es necesario el calcular el flujo  $Q$  resultante:

$$Q = 2W H \int_0^1 u(\bar{y}) d\bar{y}. \quad (8.16)$$

Con el fin de verificar que el algoritmo es consistente y que converge en términos de refinamiento de mallado, en la Figura 8.7 se presenta la solución usando 11, 101 y 1001 puntos de división. Es evidente que las tres soluciones están completamente acordes entre sí.

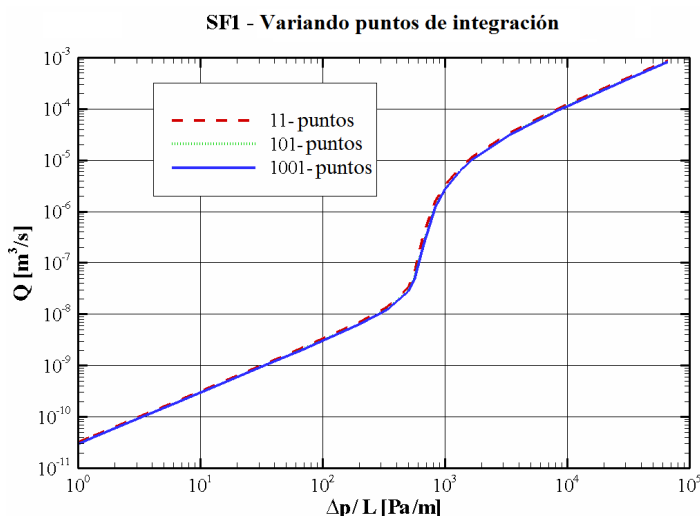


Figura 8.7. Soluciones a diferentes grados de libertad.

Una vez que la solución ha sido validada, el siguiente paso es el generar gráficos de  $Q$  vs.  $\Delta p$  para tres canales de diferente separación ( $H$ ), con un juego de parámetros predeterminado, dado en la Tabla 8.1 (fluido SF1). En la Figura 8.8 se presenta un gráfico de éstos cálculos. Estos resultados están expresados con sus dimensiones.

De la Figura 8.8 se observa un incremento monótono del gasto al aumentar el valor de la caída de presión. Las curvas pueden ser sobrepuestas casi perfectamente, lo que indica que siguen la misma tendencia. Sin embargo, es difícil extraer un factor

Tabla 8.1. Parámetros del fluido SF1

$\mu_s$ [Pa s]	0.0264
$\eta_0$ [Pa s]	11
$k/\eta_\infty$ [Pa <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> ]	0.33019
$\lambda$ [s]	13.6284
$G_0$ [Pa]	0.44

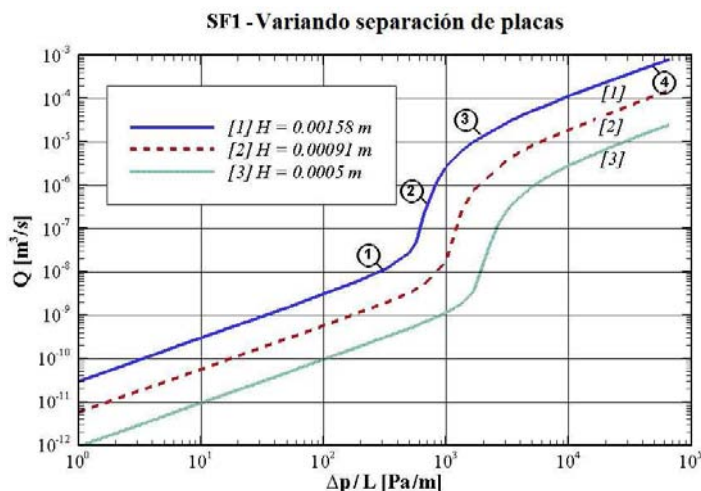


Figura 8.8. Curvas  $Q$  vs.  $\Delta p$  para distintos valores de separación ( $H$ ).

de desplazamiento constante, debido a que la zona en donde el flujo comienza a crecer más rápido no se origina en el mismo nivel de caída de presión. El comportamiento  $Q$  vs.  $\Delta p$  lineal es para valores bajos de caída de presión ( $< 500$  Pa) y se recupera a muy altos valores ( $> 10^4$  Pa). Para valores intermedios de  $\Delta p$  ( $500 < \Delta p < 10^4$  Pa), se presenta una respuesta no lineal, en donde  $Q$  crece más rápido que  $\Delta p$ .

Esta respuesta no lineal puede asociarse a la variación de la rapidez de corte que sufre el fluido con los parámetros especificados. La evidencia de esto se presenta en la Figura 8.9, en donde se muestra la evolución de la deformación cortante estacionaria y los perfiles de velocidad correspondientes. Esto para valores crecientes de  $\Delta p/L$ . En  $\Delta p/L = 300$  Pa/m (punto 1), se tiene un perfil de rapidez de deformación lineal (distribución parabólica de velocidades). Al aumentar a  $\Delta p/L = 700$  Pa/m (punto 2), tanto la rapidez de corte como el perfil de velocidad se separan del comportamiento newtoniano. El fluido cerca de la pared está expuesto a una variación significativa de rapidez de corte, lo que se opone a la poca variación de  $\dot{\gamma}$  cerca de la línea de simetría. Es de notar

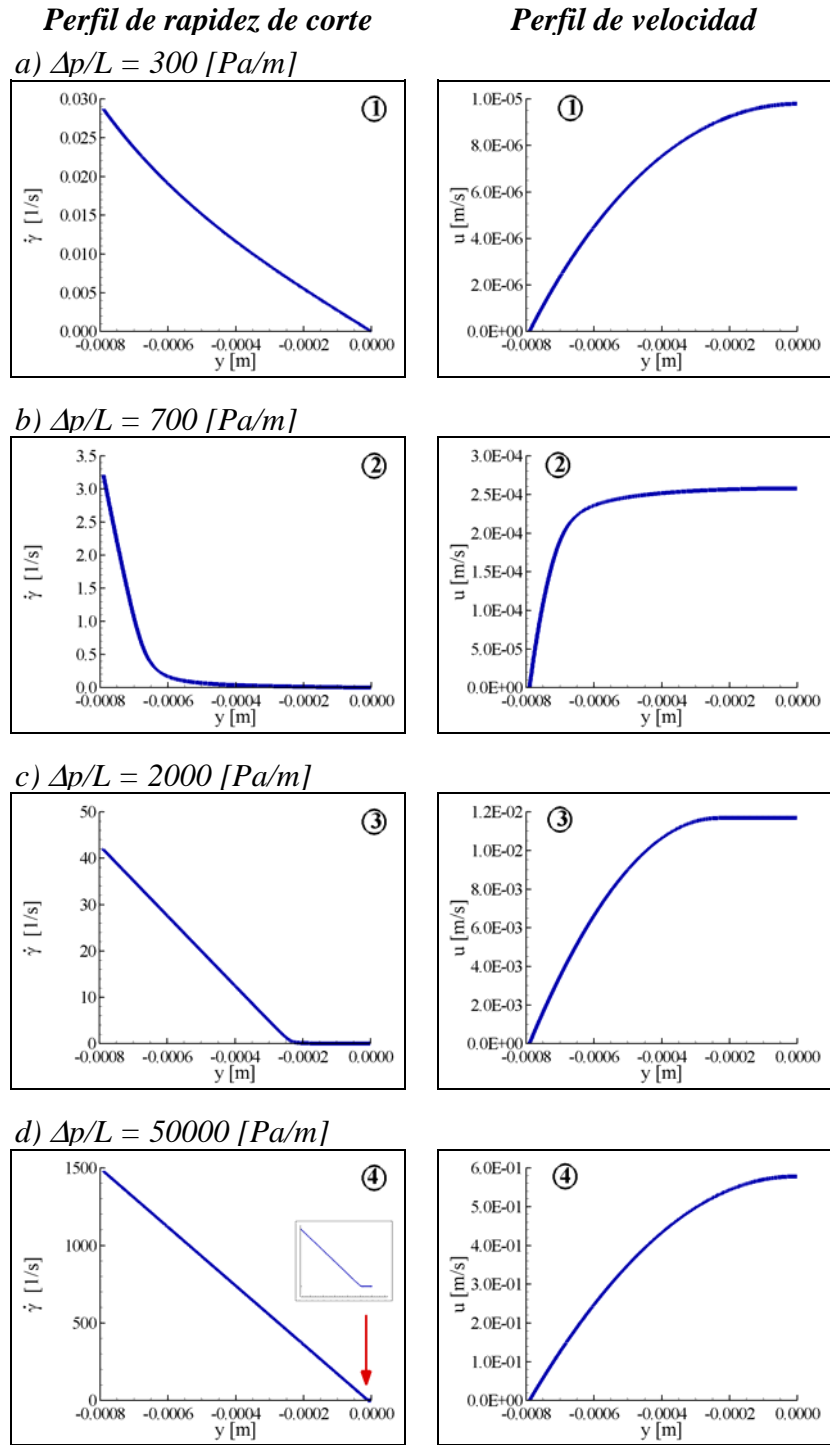


Figura 8.9. Evolución de los perfiles de rapidez de corte y velocidad al incrementar  $\Delta p$ .

que el perfil de velocidades es prácticamente plano en la región de baja rapidez de corte (vecindad de la línea de simetría). Es bajo estas condiciones en las que el flujo volumétrico sufre un incremento más rápido que la caída de presión. En el siguiente nivel evaluado,  $\Delta p/L = 2000$  Pa/m (punto 3), la curva  $Q$  vs.  $\Delta p$  recupera su relación lineal, así que el perfil de rapidez de corte y la velocidad, retornan casi a su forma lineal y parabólica, respectivamente. Es sólo cuando se eleva la caída de presión a valores muy altos,  $\Delta p/L = 50000$  Pa/m (punto 4), que dichas tendencias se recuperan casi en su totalidad. El cuadrado del coeficiente de Pearson<sup>§</sup> ( $r$ , regresión lineal) es una medida de la proximidad de una serie de datos al comportamiento lineal, en este caso perfil- $\dot{\gamma}$  newtoniano, un valor  $r$  de unidad significa una pendiente constante. Para estimar el grado de recuperación del comportamiento newtoniano, se reportan los valores de este coeficiente para la rapidez de corte en los casos 3 y 4, siendo estos  $r = 0.97$  para el punto 3 ( $\Delta p/L = 2000$  Pa/m), y para el punto 4 ( $\Delta p/L = 50000$  Pa/m), el valor  $r$  cae dentro del intervalo  $[0.99, 1]$ . El punto 4 está claramente más cerca del comportamiento newtoniano que el punto 3.

### ***8.3.3 Una solución analítica***

La solución numérica presentada en la sección anterior fue comparada con los resultados arrojados por un procedimiento de evaluación directo, esto es, una solución analítica, que afortunadamente fue posible extraer para este problema.

Para obtener esta solución analítica, se recurre al análisis realizado para un modelo Oldroyd de cuatro constantes (con adelgazamiento al corte) en un flujo por tuberías, análisis realizado por Walters [110]. El procedimiento consiste en un cambio de variable que da como resultados la velocidad en función de la rapidez de corte exclusivamente.

---

<sup>§</sup> Definición de coeficiente de Pearson para  $n$  datos  $(X, Y)$ : 
$$r = \frac{n(\Sigma XY) - (\Sigma X)(\Sigma Y)}{\sqrt{[n\Sigma X^2 - (\Sigma X)^2][n\Sigma Y^2 - (\Sigma Y)^2]}}$$

De la ecuación (8.10) – balance de fuerzas, la posición  $y$  perpendicular al flujo se expresa en términos de la rapidez de deformación cortante como:

$$y = \theta(\dot{\gamma}) = -\left[\eta_p + \mu_s\right] \frac{1}{\left(\frac{\Delta p}{L}\right)} \dot{\gamma}. \quad (8.17)$$

Siguiendo la regla de la cadena de diferenciación, la función  $\theta(\dot{\gamma})$  satisface:

$$\frac{1}{\dot{\gamma}} = \frac{dy}{du} = \frac{d\theta}{d\dot{\gamma}} \frac{d\dot{\gamma}}{du}. \quad (8.18)$$

Integrando esta relación, la velocidad es:

$$u = \int \dot{\gamma} \frac{d\theta}{d\dot{\gamma}} d\dot{\gamma} + C. \quad (8.19)$$

Si se conoce  $\eta_p$  de la ecuación (8.12), la velocidad, como función de la rapidez de corte, está determinada de forma analítica por la ecuación (8.20), derivada de lo anterior:

$$u(\dot{\gamma}) = \frac{\mu_s}{2\left(\frac{\Delta p}{L}\right)} \left[\dot{\gamma}_x^2 - \dot{\gamma}^2\right] + \frac{1}{2k_\infty \eta_0 \lambda \left(\frac{\Delta p}{L}\right)} \text{Ln} \left[ \frac{1 + \sqrt{1 + 4k_\infty \eta_0^2 \lambda \dot{\gamma}_x^2}}{1 + \sqrt{1 + 4k_\infty \eta_0^2 \lambda \dot{\gamma}^2}} \right], \quad (8.20)$$

donde  $\dot{\gamma}_x$  es la solución en la frontera sólida ( $\bar{y} = \pm 1$ ).

Conociendo  $\eta_p$ , la expansión de la ecuación (8.17) resulta en un polinomio cúbico para  $\dot{\gamma}$  en función de  $\bar{y}$ , de la forma,

$$\dot{\gamma}^3 + a_1 \dot{\gamma}^2 + a_2 \dot{\gamma} + a_3 = 0. \quad (8.21)$$

Los coeficientes están dados por:

$$a_1 = \frac{H}{\mu_s} \frac{\Delta p}{L} \bar{y},$$

$$a_2 = \frac{-(\eta_0 + \mu_s) + \frac{1}{4} H^2 k_\infty \left[ \frac{\Delta p}{L} \right]^2 \eta_0 \lambda \bar{y}^2}{k_\infty \eta_0 \mu_s^2 \lambda}, \quad (8.22)$$

$$a_3 = -\frac{\frac{1}{2} H \bar{y}}{k_\infty \eta_0 \mu_s^2 \lambda} \left[ \frac{\Delta p}{L} \right],$$

donde se busca la raíz real a cualquier posición perpendicular a la dirección del flujo,  $y$ .

En este caso, la solución se extrae analíticamente usando el método de Cardano [111]:

$$a) \quad \dot{\gamma}_{root1} = Sc + Tc - \frac{1}{3} a_1,$$

$$b) \quad \dot{\gamma}_{root2} = -\frac{1}{2} (Sc + Tc) - \frac{1}{3} a_1 + \frac{1}{2} i \sqrt{3} (Sc - Tc), \quad (8.23)$$

$$c) \quad \dot{\gamma}_{root3} = -\frac{1}{2} (Sc + Tc) - \frac{1}{3} a_1 - \frac{1}{2} i \sqrt{3} (Sc - Tc).$$

Las cantidades  $\{ Sc, Tc \}$ , necesarias para evaluar este conjunto de soluciones (raíces) están definidas en términos de otras cantidades  $\{ Qc, Rc, Dc \}$ :



$$\begin{aligned}
 Qc &= \frac{3a_2 - a_1^2}{9}, & Rc &= \frac{9a_1a_2 - 27a_3 - 2a_1^3}{54}, \\
 Dc &= Qc^3 + Rc^2, & Sc &= \sqrt[3]{Rc + \sqrt{Dc}}, \\
 Tc &= \sqrt[3]{Rc - \sqrt{Dc}}.
 \end{aligned} \tag{8.24}$$

El discriminante,  $Dc$ , indica la naturaleza de las soluciones. Para el caso en que  $Dc < 0$ , todas las soluciones son reales y las siguientes fórmulas pueden utilizarse para simplificar los cálculos:

$$\begin{aligned}
 a) \quad \dot{\gamma}_{root1} &= 2\sqrt{-Qc} \cos\left[\frac{1}{3}\varphi\right] - \frac{1}{3}a_1, \\
 b) \quad \dot{\gamma}_{root2} &= 2\sqrt{-Qc} \cos\left[\frac{\varphi + 2\pi}{3}\right] - \frac{1}{3}a_1, \\
 c) \quad \dot{\gamma}_{root3} &= 2\sqrt{-Qc} \cos\left[\frac{\varphi + 4\pi}{3}\right] - \frac{1}{3}a_1.
 \end{aligned} \tag{8.25}$$

Donde

$$\varphi = \cos^{-1}\left[\frac{Rc}{\sqrt{-Qc^3}}\right]. \tag{8.26}$$

Con estas definiciones, la tercera raíz ( $\dot{\gamma}_{root3}$ ), dada por las ecuaciones (8.23)c o (8.25)c, es la equivalente a la solución numérica extraída por el algoritmo 1D de diferen-

cias finitas. La rapidez de deformación en la pared,  $\dot{\gamma}_x$ , requerida por la ecuación (8.20) es:

$$a) \quad \dot{\gamma}_x = \dot{\gamma}_{root3} \quad at \quad \bar{y} = -1, \quad b) \quad \dot{\gamma}_x = -\dot{\gamma}_{root3} \quad at \quad \bar{y} = 1. \quad (8.27)$$

Para una solución física, que varíe suavemente desde  $\bar{y} = -1$  hasta la línea de simetría ( $\bar{y} = 0$ ), el valor máximo de rapidez de corte apropiado está dado por la identidad (8.27)a.

Se pueden aplicar procedimientos similares a otros modelos de los que se conozca la funcionalidad polinomial en  $\dot{\gamma}$  de la viscosidad (e.g. PTT y Pom-Pom), y que contemplen una contribución del disolvente, aunque el polinomio debe ser de orden no mayor que dos. Esto es válido para ecuaciones de evolución de esfuerzo tipo Oldroyd (ver ecuación (8.3)), donde sólo aparecen los primeros términos de  $\mathbf{d}$  (o  $\dot{\gamma}$ ). No se anticipan términos de tercer orden en la ecuación constitutiva debido al teorema de representación (ver [19]) de tensores (teorema de *Cayley-Hamilton*), que indica que términos con  $\mathbf{d}^3$ , o superiores pueden representarse a su vez con términos función de  $\mathbf{d}^2$ ,  $\mathbf{d}$  y sus invariantes.

## 8.4 Conclusiones

El modelo Bautista-Manero (BM) es adecuado para representar sistemas con formación de micelas tipo gusano en ciertas condiciones de flujo. Sin embargo, se encontró que este modelo exhibe respuestas sin sentido físico en flujo extensional. En el presente estudio, se hicieron simulaciones con la modificación propuesta por Boek et al. [4], una versión en la cual, la viscosidad extensional varía de forma continua.

Las funciones materiales de este nuevo modelo, MBM, se ajustaron para reproducir las exhibidas por el modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner. En contraste con la situación de los modelos Pom-Pom, ambas viscosidades, cortante y extensional, pueden ser aproximadas simultáneamente con un solo juego de parámetros para cada nivel de endurecimiento extensional. En flujos reométricos, la variación en  $k/\eta_\infty$  y  $\lambda$  producen una respuesta prácticamente idéntica, tanto en viscosidad como en esfuerzo.

Siguiendo el procedimiento propuesto por Walters, se derivó una solución analítica  $\{u, \dot{\gamma}\}(\bar{y})$  para el flujo Poiseuille estacionario de un fluido MBM en un canal rectangular. Este método consiste en un cambio de variable, dejando la posición perpendicular al flujo  $\bar{y}$  como función de la rapidez de corte  $\dot{\gamma}$ . Esto conduce a una integral que al resolverla, proporciona la velocidad  $u$  en términos de la rapidez de corte y su valor en la pared  $\dot{\gamma}_x$ . Para obtener  $\dot{\gamma}_x$ , se debe encontrar la raíz adecuada de una ecuación polinomial cúbica. Finalmente, se tiene que esta solución es acorde a una solución obtenida con un procedimiento de diferencias finitas.

Para este tipo de flujo, se encontraron dos regiones en donde la relación  $Q$  vs.  $\Delta p$  es lineal. Estas zonas ocurren a valores bajos y muy altos de caída de presión. Entre estas dos, existe una región en donde el flujo volumétrico se incrementa más rápido que  $\Delta p$ . Este incremento súbito en  $Q$ , es el resultado del adelgazamiento del fluido. Debido a esto, el perfil de rapidez de corte se aleja del comportamiento newtoniano exhibido en las regiones donde la relación  $Q$  vs.  $\Delta p$  es lineal, regiones en las que el fluido se comporta con viscosidad casi constante.

## Conclusiones

En este estudio se presentó la simulación de flujo a través de contracciones y contracción/expansión en configuraciones rectangulares y axisimétricas. Se ha dedicado especial atención a relacionar la respuesta del fluido con sus propiedades en flujos reométricos, tales como viscosidad extensional y cortante. En particular, se ha encontrado que la intensidad de vórtice en flujos por contracción exhibe una dependencia con el grado de endurecimiento elongacional (aumento en  $\eta_e$ ). Esto es, para fluidos con reducción en la viscosidad extensional, bajo las condiciones de flujo existentes, la intensidad de vórtice disminuye en magnitud. El esfuerzo y estiramiento molecular están en función de las respuestas reométricas del fluido. En ciertos casos, es posible el discernir el régimen dominante en una región específica; por ejemplo, en flujos por contracción, se tiene que en la línea central o de simetría, cerca del cambio de área de flujo, la deformación es únicamente extensional, mientras que el fluido en contacto con las fronteras sólidas de la geometría, antes y después de la contracción, está bajo influencia dominante de deformación cortante. En la zona donde se encuentra la restricción, se esperan efectos extensionales y cortantes importantes, cerca de la pared. De esto, en zonas en donde la deformación extensional domina, la viscosidad extensional es un parámetro importante, y en regiones de flujo cortante fuerte, la primera diferencia de esfuerzos normales y la viscosidad de corte gobiernan la respuesta del fluido.

El esquema numérico de solución empleado a lo largo de este estudio es el algoritmo híbrido de elemento finito/volumen finito (fe/fv), desarrollado por el grupo de reología computacional del *Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics* (INNFM), de la

*University of Wales Swansea*. En los capítulos 4 y 5, se validaron las soluciones obtenidas al compararse con las predicciones de un algoritmo semi-lagrangiano de volumen finito, implementado por el grupo de dinámica de fluidos INNFM de la universidad de *Cardiff*.

Inicialmente se consideró el modelo Pom-Pom extendido de una ecuación (ver referencia [2]), para simular el flujo a través de un canal rectangular sin cambios de dirección en el flujo. Este modelo, que pertenece a una clase relativamente nueva de ecuaciones constitutivas, se desarrolló principalmente de bases físicas. Se han propuesto numerosas modificaciones desde la introducción de la versión original por McLeish y Larson [1]. En el canal rectangular se estudió la influencia de los parámetros adimensionales, sobre la respuesta en flujo. Estos parámetros controlan el grado de endurecimiento extensional, el comienzo del adelgazamiento al corte y la contribución viscoelástica por medio de la fracción de disolvente. El siguiente paso fue el de realizar las simulaciones para el flujo por una contracción 4:1 planar, donde se reportaron variaciones en el vórtice, esfuerzo y extensión molecular en dos niveles de inercia ( $Re = 0$  y  $1$ ). Se implementó una versión alterna del modelo Pom-Pom de una ecuación, el aquí denominado  $\lambda^2$ XPP [36], que arroja resultados prácticamente idénticos a aquellos de la versión SXPP.

El modelo SXPP presenta la ventaja de que, bajo ciertas condiciones, se puede variar la respuesta en flujo elongacional, induciendo cambios minúsculos en la viscosidad cortante. Con esta característica, se investigó la influencia de la viscosidad extensional en el flujo a través de una contracción 4:1, para fluidos con adelgazamiento al corte. Además, se observó la influencia de variar el grado de anisotropía del modelo y de las dificultades numéricas que introduce el factor que la controla. Se concluyó que la inestabilidad provocada por el parámetro de anisotropía ocurre a deformaciones altas, las cuales no se presentan en los flujos estudiados. Se realizó una comparación entre respuestas de los modelos SXPP y exponencial de Phan-Thien/Tanner, a dos niveles

distintos de endurecimiento. Los fluidos con valores de viscosidad extensional semejantes mostraron tendencias similares, aunque para el caso con endurecimiento elongacional moderado. Se observó claramente que ajustar la viscosidad extensional produce una mejor tendencia que ajustar las relaciones de Trouton.

El fenómeno de caída de presión en exceso, para fluidos de Boger en geometrías con contracción y contracción/expansión, de configuración axisimétrica ha sido estudiado a detalle. Para este fenómeno, la ecuación constitutiva utilizada ha sido principalmente Oldroyd-B, debido a que presenta tanto viscosidad cortante constante, como propiedades viscoelásticas (fluidos de Boger). Con el fin de aproximar respuesta tipo Boger con otros modelos reológicos (SXPP y PTT), se ajustó la relación de viscosidades disolvente/total de tal forma que el sistema presente una excesiva cantidad de disolvente (newtoniano) y además se estimularon niveles de endurecimiento extensional de gran magnitud. Los resultados indican que en el caso de la contracción/expansión cilíndrica, se desarrolla un esfuerzo normal de gran magnitud, esto en las cercanías de la restricción y es debido a este esfuerzo que la presión se incrementa sobre el valor newtoniano correspondiente. Este máximo en presión, bajo ciertas condiciones, puede ser suficiente para que tenga lugar el fenómeno de caída de presión en exceso (*epd*). De manera adicional, al incrementar la presencia de disolvente en el sistema, el trazo de *epd* cruza el valor newtoniano de referencia, obteniéndose un aumento en la caída de presión. El esfuerzo máximo que se presenta en la configuración rectangular de la contracción/expansión, es significativamente de menor magnitud y no se incrementa al aumentar el nivel de elasticidad del sistema. El aumento de *epd* ha sido un fenómeno difícil de reproducir en simulaciones numéricas. Szabo et al. [99] fueron los primeros en reportar *epd* arriba del valor newtoniano, lo cual también fue reportado por Binding et al. [102]. Una contribución original del presente trabajo es el de monitorear la presión en la pared, no sólo en la línea central. Es cerca de la pared donde

ocurren efectos importantes, los cuales se difunden hacia la línea de simetría, pero con magnitud considerablemente reducida.

Otra contribución es el proponer otra calibración de presión,  $[p - p_{Newt}]$ . Esta variable presenta un comportamiento semejante al exhibido por el esfuerzo normal, confirmando que la respuesta de ambas variables está relacionada. También se tiene que esta nueva variable es útil para identificar las condiciones necesarias para obtener aumento en  $epd$ . Para esto, se compara la diferencia de la rapidez de disipación (ver [99,101]) entre fluidos de Boger y newtonianos. Si la rapidez de disipación en la zona cercana a la restricción (no en toda la geometría) es mayor para el fluido de Boger, entonces se anticipa  $epd$  arriba del valor newtoniano.

Los modelos Bautista-Manero (BM) han sido introducidos recientemente para representar el comportamiento reológico de sistemas micelares tipo gusano (micelas gigantes). Estos sistemas pueden mostrar propiedades altamente viscoelásticas, y en contacto con una fase aceitosa, esta naturaleza viscoelástica se puede eliminar, por lo que son de utilidad en técnicas de extracción de petróleo. Sin embargo, la formulación original del modelo BM presenta un intervalo de rapidez de elongación en donde no se tiene definida la viscosidad extensional. Esto fue corregido mediante la introducción del modelo Bautista-Manero modificado (MBM), propuesto por Boek et al. [4]. Se presentaron resultados para el modelo MBM en flujos 2D a través de contracciones y canales rectangulares. Las simulaciones de caída de presión en flujo Poiseuille (1D) han sido validadas mediante dos métodos: una implementación de diferencias finitas y la solución analítica, arrojando ambos métodos los mismos resultados. La solución analítica fue obtenida siguiendo el procedimiento de Walters [110]. La tendencia de los trazos  $Q$  vs.  $\Delta p$  puede explicarse en términos de las diferentes regiones de rapidez de corte del sistema.

Se puede considerar la inclusión de la versión semilineal del modelo SXPP, con el fin de realizar más estudios de la influencia ejercida por la viscosidad extensional. Para esto, es posible especificar parámetros para que los fluidos semilineal SXPP y lineal PTT exhiban endurecimiento y ablandamiento extensional débiles, y así, obtener fluidos con propiedades viscoelásticas, pero con viscosidad extensional relativamente constante. Por otro lado, ambos modelos lineales pueden producir valores de viscosidad elongacional de gran magnitud y no presentar ablandamiento. No se espera que los fluidos viscoelásticos con ligera variación en la viscosidad extensional representen fluidos reales; sin embargo, pueden ser útiles para establecer con mayor claridad la influencia de esta viscosidad en simulaciones numéricas.



# ANEXO I

## Modelo SXPP: información adicional

Este anexo presenta expresiones para el esfuerzo y variables relacionadas, relevantes al flujo planar 2D; ecuaciones útiles en el análisis cuando se conoce la rapidez de corte ( $\dot{\gamma}$ ). Como las expresiones para el flujo Couette y Poiseuille son las mismas, estas funciones pueden usarse en ambos tipos de flujo. La diferencia está en el perfil de  $\dot{\gamma}$  (y, por tanto, en las condiciones de frontera). En flujo Couette, el perfil  $\dot{\gamma}$  es constante, mientras que para flujo Poiseuille, este perfil adquiere forma lineal (caso newtoniano) o con cierta curvatura (fluidos con adelgazamiento al corte). En adición, se incluyen las ecuaciones completamente desarrolladas para la versión extendida Pom-Pom de una ecuación, en flujo planar y axisimétrico.

### I.1 Relaciones para flujo planar estacionario a través de un canal

Las siguientes ecuaciones son para el flujo en geometría con configuración rectangular, bidimensional, para un fluido SXPP. Describen el perfil de esfuerzo en flujo Couette y Poiseuille, dependiendo de la especificación de la rapidez de corte; las

ecuaciones están expresadas en forma adimensional. Se asumen como válidas las siguientes suposiciones:

$$\begin{aligned}
 v=u_y=0, & & \alpha=0, \\
 \frac{\partial}{\partial t}=0, & & \frac{\partial}{\partial x}=0 \text{ excepto para } p.
 \end{aligned}
 \tag{AI.1}$$

Con esto, el perfil de esfuerzo y demás variables están dados por:

$$\begin{aligned}
 \tau_{xx} &= -\left(\frac{1-\beta}{We}\right) \frac{f(\tau)-1}{f(\tau)} + 2We \frac{(1-\beta)}{f(\tau)^3} \dot{\gamma}^2, & \tau_{xy} &= \frac{1-\beta}{f(\tau)^2} \dot{\gamma}, \\
 \tau_{yy} &= -\left(\frac{1-\beta}{We}\right) \frac{f(\tau)-1}{f(\tau)}, & \tau_{zz} &= -\left(\frac{1-\beta}{We}\right) \frac{f(\tau)-1}{f(\tau)}, \\
 N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy} &= 2We \frac{(1-\beta)}{f(\tau)^3} \dot{\gamma}^2, & N_2 = \tau_{yy} - \tau_{zz} &= 0, \\
 tr(\tau) &= -3\left(\frac{1-\beta}{We}\right) \frac{f(\tau)-1}{f(\tau)} + 2We \frac{(1-\beta)}{f(\tau)^3} \dot{\gamma}^2, & \frac{\psi}{\psi_0} &= \frac{1}{f(\tau)^3}, \\
 \lambda &= \sqrt{\frac{1}{f(\tau)} + \frac{1}{3} \frac{We}{(1-\beta)} N_1}.
 \end{aligned}
 \tag{AI.2}$$

## I.2 Expresiones desarrolladas para el flujo SXP en configuraciones rectangulares

1.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{xx}$  :

$$We \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} + We \left( u \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial y} + w \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial z} \right) - 2We \left( \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xz} \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{xx}^2 + \tau_{xy}^2 + \tau_{xz}^2) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{xx} + \frac{(1-\beta)}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] = 2(1-\beta) \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (\text{AI.3})$$

2.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{xy}$  :

$$We \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} + We \left( u \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + w \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial z} \right) - We \left( \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{yz} \frac{\partial u}{\partial z} \right) - We \left( \tau_{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{xz} \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{xx} \tau_{xy} + \tau_{xy} \tau_{yy} + \tau_{xz} \tau_{yz}) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{xy} = (1-\beta) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right). \quad (\text{AI.4})$$

3.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{yy}$  :

$$We \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} + We \left( u \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + w \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial z} \right) - 2We \left( \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{yz} \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{xy}^2 + \tau_{yy}^2 + \tau_{yz}^2) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{yy} + \frac{(1-\beta)}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] = 2(1-\beta) \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (\text{AI.5})$$

4.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{zz}$  :

$$\begin{aligned} We \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial t} + We \left( u \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial y} + w \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) - We \left( \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} \right) - We \left( \tau_{zx} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{zy} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \\ \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{xz} \tau_{zx} + \tau_{yz} \tau_{zy} + \tau_{zz}^2) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{zz} + \frac{(1-\beta)}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] = 2(1-\beta) \frac{\partial w}{\partial z}. \end{aligned} \quad (\text{AI.6})$$

5.- Función extra:

$$f(\boldsymbol{\tau}) = 2 \frac{1}{\varepsilon} \left( 1 - \frac{1}{\lambda} \right) e^{\nu(\lambda-1)} + \frac{1}{\lambda^2} \left( 1 - \frac{1}{3} \alpha \frac{We^2}{(1-\beta)^2} (\tau_{xx}^2 + \tau_{yy}^2 + \tau_{zz}^2 + 2\tau_{xy}^2 + 2\tau_{xz}^2 + 2\tau_{yz}^2) \right). \quad (\text{AI.7})$$

### I.3 Expresiones desarrolladas para el flujo SXP en configuraciones cilíndricas

1.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{rr}$  :

$$We \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tau_{rr} + u_r \frac{\partial \tau_{rr}}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \tau_{rr}}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \tau_{rr}}{\partial z} - 2 \frac{u_\theta}{r} \tau_{r\theta} - 2 \tau_{rr} \frac{\partial u_r}{\partial r} - 2 \tau_{r\theta} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} \right) - 2 \tau_{rz} \frac{\partial u_r}{\partial z} \right] + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} [\tau_{rr}^2 + \tau_{r\theta}^2 + \tau_{rz}^2] + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{rr} + \frac{(1-\beta)}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] = 2(1-\beta) \frac{\partial u_r}{\partial r}. \quad (\text{AI.8})$$

2.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{\theta\theta}$  :

$$We \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tau_{\theta\theta} + u_r \frac{\partial \tau_{\theta\theta}}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \tau_{\theta\theta}}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \tau_{\theta\theta}}{\partial z} + 2 \frac{u_\theta}{r} \tau_{r\theta} - \left( 2 \tau_{r\theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + 2 \tau_{\theta\theta} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right] + 2 \tau_{\theta z} \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) \right] + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{r\theta}^2 + \tau_{\theta\theta}^2 + \tau_{\theta z}^2) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{\theta\theta} + \frac{(1-\beta)}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] = 2(1-\beta) \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right). \quad (\text{AI.9})$$

3.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{zz}$  :

$$We \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tau_{zz} + u_r \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} - \left( 2 \tau_{rz} \frac{\partial u_z}{\partial r} + 2 \tau_{\theta z} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right] + 2 \tau_{zz} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{rz}^2 + \tau_{z\theta}^2 + \tau_{zz}^2) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{zz} + \frac{(1-\beta)}{We} [f(\boldsymbol{\tau}) - 1] = 2(1-\beta) \frac{\partial u_z}{\partial z}. \quad (\text{AI.10})$$

4.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{r\theta}$ :

$$\begin{aligned}
 We \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tau_{r\theta} + u_r \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial z} + \frac{u_\theta}{r} (\tau_{rr} - \tau_{\theta\theta}) - \left( \tau_{rr} \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \tau_{r\theta} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_r}{\partial r} \right] + \right. \right. \\
 \left. \left. \tau_{\theta\theta} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} \right] + \tau_{rz} \frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \tau_{z\theta} \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) \right] + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{rr} \tau_{r\theta} + \tau_{r\theta} \tau_{\theta\theta} + \tau_{rz} \tau_{z\theta}) + \quad (A1.11) \\
 f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{r\theta} = (1-\beta) \left( \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} \right).
 \end{aligned}$$

5.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{\theta z}$ :

$$\begin{aligned}
 We \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tau_{\theta z} + u_r \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial z} + \frac{u_\theta}{r} \tau_{rz} - \left( \tau_{rz} \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \tau_{\theta z} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right] + \tau_{zz} \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) - \right. \\
 \left. \left( \tau_{\theta r} \frac{\partial u_z}{\partial r} + \tau_{\theta\theta} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right] + \tau_{\theta z} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{rz} \tau_{\theta r} + \tau_{\theta z} \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz} \tau_{\theta z}) + \quad (A1.12) \\
 f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{\theta z} = (1-\beta) \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right).
 \end{aligned}$$

6.- Esfuerzo polimérico  $\tau_{rz}$  :

$$We \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tau_{rz} + u_r \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} - \frac{u_\theta}{r} \tau_{\theta z} - \left( \tau_{rz} \frac{\partial u_r}{\partial r} + \tau_{rz} \frac{\partial u_z}{\partial z} + \tau_{\theta z} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} \right] + \tau_{r\theta} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \tau_{rr} \frac{\partial u_z}{\partial r} + \tau_{zz} \frac{\partial u_r}{\partial z} \right] \right) \right] + \frac{\alpha We}{(1-\beta)} (\tau_{rr} \tau_{rz} + \tau_{r\theta} \tau_{\theta z} + \tau_{rz} \tau_{zz}) + f(\boldsymbol{\tau}) \tau_{rz} = (1-\beta) \left( \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right). \quad (\text{AI.13})$$

7.- Función extra

$$f(\boldsymbol{\tau}) = 2 \frac{1}{\varepsilon} \left( 1 - \frac{1}{\lambda} \right) e^{\nu(\lambda-1)} + \frac{1}{\lambda^2} \left( 1 - \frac{1}{3} \alpha \frac{We^2}{(1-\beta)^2} \left[ \tau_{rr}^2 + \tau_{\theta\theta}^2 + \tau_{zz}^2 + 2\tau_{r\theta}^2 + 2\tau_{rz}^2 + 2\tau_{z\theta}^2 \right] \right). \quad (\text{AI.14})$$

8.- Extensión molecular:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{1}{3} \frac{We}{(1-\beta)} [\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}]}. \quad (\text{AI.15})$$

## ANEXO II

### Líneas de Corriente

Algunos de los resultados de las simulaciones en flujos a través de contracciones se han presentado de forma gráfica mediante líneas de corriente. Estas líneas coinciden con la trayectoria trazada por un elemento de fluido en flujo estacionario. Para flujo incompresible, en coordenadas cartesianas, la ecuación de continuidad (bidimensional) es,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (\text{AII.1})$$

Definiendo la *función corriente*

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad y \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (\text{AII.2})$$



Obteniendo el componente distinto a cero del vector vorticidad en flujos 2D [24],

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = f. \quad (\text{AII.3})$$

La solución de la ecuación (AII.3) proporciona el valor en la posición  $(x, y)$ . Esta función  $\psi$  tiene la propiedad de ser constante a lo largo de una línea de corriente. Puede calcularse por un procedimiento de elemento finito. Además, se tiene que la intensidad del vórtice ( $\psi_{sal}$ ) es el valor máximo de  $\psi$  observado dentro de la región de recirculación, y está relacionado con la relación de flujos entre el flujo interior del vórtice y el flujo a través de la contracción (ver Purnode y Crochet [77]).

## Referencias

- [1] T.C.B. McLeish, R.G. Larson, Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer, *Journal of Rheology* **42** (1998) 81-110.
- [2] W.M.H. Verbeeten, G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens, Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom-Pom model, *Journal of Rheology* **45** (2001) 823-843.
- [3] O. Manero, F. Bautista, J.F.A. Soltero, J.E. Puig, Dynamics of worm-like micelles: the Cox-Merz rule, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **106** (2002) 1-15.
- [4] E.S. Boek, J.T. Padding, V.J. Anderson, P.M.J. Tardy, J.P. Crawshaw, J.R.A. Pearson, Constitutive equations for extensional flow of wormlike micelles: stability analysis of the Bautista-Manero model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **126** (2005) 39-46.
- [5] E.S. Boek, A. Jusufi, H. Löwen, G.C. Maitland, Molecular design of responsive fluids: molecular dynamics studies of viscoelastic surfactant solutions, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14** (2002) 9413-9430.
- [6] J.G. Oldroyd, On the formulation of rheological equations of state, *Proceedings of the Royal Society A* **200** (1950) 523-541
- [7] M. Aboubacar, H. Matallah, H.R. Tamaddon-Jahromi, M.F. Webster, Numerical prediction of extensional flows in contraction geometries: hybrid finite volume/element method, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **104** (2002) 125-164.
- [8] M. Aboubacar, H. Matallah, M.F. Webster, Highly elastic solutions for Oldroyd-B and Phan-Thien/Tanner fluids with a finite volume/element method: planar contraction flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **103** (2002) 65-103.

- [9] P.J. Doerpinghaus, D.G. Baird, Pressure Profiles Along an Abrupt 4:1 Planar Contraction, *AIChE Journal* **49** (2003) 2487-2498.
- [10] P.J. Oliveira, F.T. Pinho, Plane contraction flows of upper convected Maxwell and Phan-Thien-Tanner fluids as predicted by a finite-volume method, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **88** (1999) 63-88.
- [11] D. Binding, An approximate analysis for contraction and converging flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **27** (1988) 173-189.
- [12] D. Binding, Further considerations of axisymmetric contraction flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **41** (1991) 27-42.
- [13] J.M. Maia, Theoretical modelling of fluid S1: a comparative study of constitutive models in simple and complex flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **85** (1999) 107-125.
- [14] J.M. Maia, D. Binding, Influence of elongational properties on the contraction flow of polyisobutylene in a mixed solvent, *Rheological Acta* **38** (1999) 160-171.
- [15] M. Aboubacar, M.F. Webster, Development of an optimal hybrid finite volume/element method for viscoelastic flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **41** (2003) 1147-1172.
- [16] M.F. Webster, H.R. Tamaddon-Jahromi, M. Aboubacar, Time-Dependent Algorithms for Viscoelastic Flow: Finite Element/Volume Schemes, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* **21** (2005) 272-296.
- [17] D.M. Jones, K. Walters, P.R. Williams, On the extensional viscosity of mobile polymer solutions, *Rheological Acta* **26** (1987) 20-30.
- [18] H.A. Barnes, J.F. Hutton, K. Walters, *An Introduction to Rheology*, Elsevier, (1989).
- [19] R.G. Larson, *Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*, Butterworths, (1988).
- [20] C.H. Macosko, *Rheology: Principles, Measurements, and Applications*, John Wiley & Sons, (1994).
- [21] R.I. Tanner, *Engineering Rheology*, Oxford University Press, (2000).

- [22] M.S. Chandio, Numerical Study of Model, Industrial and Free-Surface Flows. In: Computer Science, Vol. Philosophiae Doctor, University of Wales, Swansea, Swansea, U.K., 2002, p. 208.
- [23] I.J. Keshtiban, Numerical Simulation of compressible Viscoelastic Flows. In: Computer Science, Vol. Philosophiae Doctor, University of Wales, Swansea, Swansea, U.K., 2004, p. 199.
- [24] H. Matallah, Numerical Simulation of Viscoelastic Flows. In: Computer Science, Vol. Philosophiae Doctor, University of Wales, Swansea, Swansea, U.K., 1998, p. 193.
- [25] R.B. Bird, R.C. Armstrong, O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 1: Fluid Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., (1987).
- [26] R. Sizaire, *keyFE2 User Manual*, (2004).
- [27] J.C. Maxwell, On the dynamical theory of gases, *Philosophical Transactions of the Royal Society A* **157** (1867) 49-88.
- [28] N. Phan-Thien and R. I. Tanner, 'A New Constitutive Equation Derived from Network Theory', *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, vol 2, pp 353-365, (1977).
- [29] E. Mitsoulis, M. Schwetz, H. Münstedt, Entry flow of LDPE melts in a planar contraction, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **111** (2003) 41-61.
- [30] M. Doi, S.F. Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics*, Oxford University Press, (1986).
- [31] R.G.M.v. Os, T.N. Phillips, Efficient and stable spectral element methods for predicting the flow of an XPP fluid past a cylinder, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **129** (2005) 143-162.
- [32] N.J. Inkson, T.C.B. McLeish, O.G. Harlen, D.J. Groves, Predicting low density polyethylene melt rheology in elongational and shear flows with "pom-pom" constitutive equations, *Journal of Rheology* **43** (1999) 873-896.
- [33] R.J. Blackwell, T.C.B. McLeish, O.G. Harlen, Molecular drag-strain coupling in branched polymer melts, *Journal of Rheology* **44** (2000) 121-136.

- [34] W.M.H. Verbeeten, G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens, Erratum: "Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom-Pom model" [J. Rheol. 45, 823-843 (2001)], *Journal of Rheology* **45** (2001) 1489.
- [35] N. Clemeur, R.P.G. Rutgers, B. Debbaut, On the evaluation of some differential formulations for the pom-pom constitutive model, *Rheological Acta* **42** (2003) 217-231.
- [36] R.G.M.v. Os, T.N. Phillips, The prediction of complex flows of polymer melts using spectral elements, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **122** (2004) 287-301.
- [37] W.M.H. Verbeeten, G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens, Numerical simulations of the planar contraction flow for a polyethylene melt using the XPP model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **117** (2004) 73-84.
- [38] J.v. Meerveld, Note on the thermodynamic consistency of the integral pom-pom model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **108** (2002) 291-299.
- [39] W.M.H. Verbeeten, G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens, Viscoelastic analysis of complex polymer melt flow using the eXtended Pom-Pom model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **108** (2002) 301-326.
- [40] F.P.T. Baaijens, Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **79** (1998) 361-385.
- [41] R.G. Owens, T.N. Phillips, *Computational Rheology*, Imperial College Press, London, (2002).
- [42] K. Walters, M.F. Webster, The distinctive CFD challenges of computational rheology, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **43** (2003) 577-596.
- [43] P. Townsend, M.F. Webster, An algorithm for the three-dimensional transient simulation of non-Newtonian fluid flows. In: NUMETA 87, Vol. 2:T12/1, Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1987.
- [44] J. Donea, A Taylor-Galerking method for convective transport problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **20** (1984) 101-119.
- [45] R. Temam, *Theory and Numerical Analysis of the Navier-Stokes equations*, North-Holland, (1977).

- [46] A.J. Chorin, Numerical solution of the Navier-Stokes equations, *Mathematics of Computation* **22** (1986) 745-762.
- [47] J.v. Kan, A second-order-accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* **7** (1986) 870-891.
- [48] D.M. Hawken, H.R. Tamaddon-Jahromi, P. Townsend, M.F. Webster, A Taylor-Galerkin-based algorithm for viscous incompressible flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **10** (1990) 327-351.
- [49] E.O.A. Carew, P. Townsend, M.F. Webster, A Taylor-Petrov-Galerkin algorithm for viscoelastic flow, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **50** (1993) 253-287.
- [50] A. Baloch, P. Townsend, M.F. Webster, On the simulation of highly elastic complex flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **59** (1995) 111-128.
- [51] T.J. Chung, *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*, McGraw-Hill, (1978).
- [52] M.J. Crochet, A.R. Davies, K. Walters, *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*, Vol. **1**, Elsevier, (1984).
- [53] O.C. Zienkiewicz, K. Morgan, *Finite elements and approximation*, Wiley, New York, (1983).
- [54] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Numerical Discretization*, Vol. **1**, Wiley, (1988).
- [55] M. Aboubacar, J.P. Aguayo, P.M. Phillips, T.N. Phillips, H.R. Tamaddon-Jahromi, B.A. Snigerev, M.F. Webster, Modelling pom-pom type models with high-order finite volume schemes, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **126** (2005) 207-220.
- [56] T.N. Phillips, A.J. Williams, Conservative Semi-Lagrangian Finite Volume Schemes, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* **17** (2001) 403-425.
- [57] M.S. Chandio, K.S. Sujatha, M.F. Webster, Consistent hybrid finite volume/element formulations: model and complex viscoelastic flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **45** (2004) 945-971.

- [58] M. Aboubacar, T.N. Phillips, H.R. Tamaddon-Jahromi, B.A. Snigerev, M.F. Webster, High-order finite volume methods for viscoelastic flow problems, *Journal of Computational Physics* **199** (2004) 16-40.
- [59] M. Aboubacar, M.F. Webster, A cell-vertex finite volume/element method on triangles for abrupt contraction viscoelastic flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **98** (2001) 83-106.
- [60] J.M. Marchal, M.J. Crochet, A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **26** (1987) 77-114.
- [61] T.N. Phillips, A.J. Williams, Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-Lagrangian finite volume method, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **87** (1999) 215-246.
- [62] N.D. Waters, M.J. King, Unsteady flow of an elastico-viscous liquid, *Rheological Acta* **9** (1970) 345-355.
- [63] G. Ianniruberto, G. Marrucci, A multi-mode CCR model for entangled polymers with chain stretch, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **102** (2002) 283-395.
- [64] G. Marrucci, Dynamics of entanglements: A nonlinear model consistent with the Cox-Merz rule, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **62** (1996) 279-289.
- [65] P. Wapperom, R. Keunings, G. Ianniruberto, Prediction of rheometrical and complex flows of entangled linear polymers using the double-convection-reptation model with chain stretch, *Journal of Rheology* **47** (2003) 247-265.
- [66] G.B. Bishko, O.G. Harlen, T.C.B. McLeish, T.M. Nicholson, Numerical simulation of the transient flow of branched polymer melts through a planar contraction using the 'pom-pom' model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **82** (1999) 255-273.
- [67] K. Lee, M.R. Mackley, T.C.B. McLeish, T.M. Nicholson, O.G. Harlen, Experimental observation and numerical simulation of transient "stress fangs" within flowing molten polyethylene, *Journal of Rheology* **45** (2001) 1261-1277.
- [68] H. Nguyen, D.V. Boger, The kinematics and stability of die entry flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **5** (1979) 353-368.

- [69] D.V. Boger, D.U. Hur, R.J. Binnington, Further observations of elastic effects in tubular entry flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **20** (1986) 31-49.
- [70] S.A. White, D.G. Baird, Flow visualization and birefringence studies on planar entry flow behaviour of polymer melts, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **29** (1988) 245-267.
- [71] S.A. White, D.G. Baird, The importance of extensional flow properties on planar entry flow patterns of polymer melts, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **20** (1986) 93-101.
- [72] W.P. Raiford, L.M. Quinzani, P.J. Coates, R.C. Armstrong, R.A. Brown, LDV measurements of viscoelastic flow transitions in abrupt axisymmetric contractions: Interaction of inertia and elasticity, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **32** (1989) 39-68.
- [73] J.A. Byars, R.J. Binnington, D.V. Boger, Entry flow and constitutive modelling of fluid S1, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **72** (1997) 219-235.
- [74] D. Binding, K. Walters, On the use of flow through a contraction in estimating the extensional viscosity of mobile polymer solutions, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **30** (1988) 233-250.
- [75] M.A. Zirnsak, D.V. Boger, Axisymmetric entry flow of semi-dilute xanthan gum solutions: prediction and experiment, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **79** (1998) 105-136.
- [76] J.P. Rothstein, G.H. McKinley, The axisymmetric contraction-expansion: the role of extensional rheology on vortex growth dynamics and the enhanced pressure drop, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **98** (2001) 33-63.
- [77] B. Purnode, M.J. Crochet, Flows of polymer solutions through contractions Part 1: flows of polyacrylamide solutions through planar contractions, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **65** (1996) 269-289.
- [78] R.E. Evans, K. Walters, Flow characteristics associated with abrupt changes in geometry in the case of highly elastic liquids, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **20** (1986) 11-29.



- [79] R.E. Evans, K. Walters, Further remarks on the lip-vortex mechanism of vortex enhancement in planar-contraction flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **32** (1989) 95-105.
- [80] J.M. Marchal, M.J. Crochet, Hermitian finite elements for calculating viscoelastic flow, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **20** (1986) 187-207.
- [81] J.Y. Yoo, Y. Na, A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the SIMPLER algorithm, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **39** (1991) 89-106.
- [82] M.A. Alves, F.T. Pinho, P.J. Oliveira, Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **93** (2000) 287-314.
- [83] T.N. Phillips, A.J. Williams, Comparison of creeping and inertial flow of an Oldroyd B fluid through planar and axisymmetric contractions, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **108** (2002) 25-47.
- [84] S.-C. Xue, N. Phan-Thien, R.I. Tanner, Three dimensional numerical simulations of viscoelastic flows through planar contraction, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **74** (1998) 195-245.
- [85] I. Sirakov, A. Ainsler, M. Haouche, J. Guillet, Three-dimensional numerical simulation of viscoelastic contraction flows using the Pom-Pom differential constitutive model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **126** (2005) 163-173.
- [86] D.V. Boger, Viscoelastic Flows Through Contractions, *Annual Review of Fluid Mechanics* **19** (1987) 157-182.
- [87] M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, On the effect of contraction ratio in viscoelastic flow through abrupt contractions, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **122** (2004) 117-130.
- [88] B. Tremblay, Visualization of the flow of linear low density polyethylene/low density polyethylene blends through sudden contractions, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **43** (1992) 1-29.
- [89] H. Matallah, P. Townsend, M.F. Webster, Viscoelastic multi-mode simulations of wire-coating, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **90** (2000) 217-241.

- [90] M. Zatloukal, Differential viscoelastic constitutive equations for polymer melts in steady shear and elongational flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **113** (2003) 209-227.
- [91] A.C.B. Bogaerds, A.M. Grillet, G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens, Stability analysis of polymer shear flows using the eXtended Pom-Pom constitutive equations, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **108** (2002) 187-208.
- [92] R.I. Tanner, S. Nasserri, Simple constitutive models for linear and branched polymers, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **116** (2003) 1-17.
- [93] N. Clemeur, R.P.G. Rutgers, B. Debbaut, Numerical simulation of abrupt contraction flows using the Double Convected Pom-Pom model, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **117** (2004) 193-209.
- [94] P. Wapperom, R. Keunings, Numerical simulation of branched polymer melts in transient complex flow using pom-pom models, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **97** (2001) 267-281.
- [95] R.A. Keiller, Entry-flow calculations for the Oldroyd-B and FENE equations, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **46** (1993) 143-178.
- [96] D.V. Boger, Short communication: A highly elastic constant-viscosity fluid, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **3** (1977) 87-91.
- [97] S. Nigen, K. Walters, Viscoelastic contraction flows: comparison of axisymmetric and planar configurations, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **102** (2002) 343-359.
- [98] J.P. Rothstein, G.H. McKinley, Extensional flow of a polystyrene Boger fluid through a 4:1:4 axisymmetric contraction/expansion, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **86** (1999) 61-88.
- [99] P. Szabo, J.M. Rallison, E.J. Hinch, Start-up of flow of a FENE-fluid through a 4:1:4 constriction in a tube, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **72** (1997) 73-86.
- [100] M.D. Chilcott, J.M. Rallison, Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **29** (1988) 381-432.

- [101] U. Cartalos, J.M. Piau, Creeping flow regimes of low concentration polymer solutions in thick solvents through an orifice die, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **45** (1992) 231-285.
- [102] D.M. Binding, P.M. Phillips, T.N. Phillips, Contraction /expansion flows: The pressure drop and related issues, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **137** (2006) 31-38.
- [103] M.G.N. Perera, K. Walters, Long range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry Part 2: the expansion/contraction/expansion problem, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **2** (1977) 191-204.
- [104] P.M. Phillips, The Characterisation of Some Non-Newtonian Fluids and Experimental Measurements and Observations in a Contraction Expansion Geometry. In, University of Wales, Aberystwyth, 2005, p. 33.
- [105] M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **110** (2003) 45-75.
- [106] M. Herrchen, H.C. Öttinger, A detailed comparison of various FENE dumbbell models, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **68** (1997) 17-42.
- [107] A. G. Fredrickson, A model for the thixotropy of suspensions, *AIChE Journal* **16** (1970) 436-441.
- [108] F. Moore, The rheology of ceramic slips and bodies, *Transactions of the British Ceramic Society* **58** (1959), 470-494.
- [109] D.C.-H. Cheng, F. Evans, Phenomenological characterization of the rheological behaviour of inelastic reversible thixotropic and antithixotropic fluids, *British Journal of Applied Physics* **16** (1965) 1599-1617.
- [110] K. Walters, A Note on the Rectilinear Flow of Elastico-Viscous Liquies through Straight Pipes of Circular Cross-Section, *Archive for Rational Mechanics and Analysis* **9** (1962) 411\_414.
- [111] M. Spiegel, A.A. Rapun, *Fórmulas y Tablas de Matemática Aplicada*, McGraw-Hill, (1992).

Gracias a DIOS.

## Lista de Publicaciones

- 1.- J.P. Aguayo, P.M. Phillips, T.N. Phillips, B.A. Snigerev, H.R. Tamaddon-Jahromi, M.F. Webster, The Numerical Prediction of Viscoelastic Flows using the Pom-Pom Models and High-Order Finite Volume Schemes. In: J.W. Lee, S.J. Lee (Eds.), The XIVth International Congress on Rheology, The Korean Society of Rheology, Seoul, Korea, 2004, pp. CR37-31, CR37-33.
- 2.- M. Aboubacar, J.P. Aguayo, P.M. Phillips, T.N. Phillips, H.R. Tamaddon-Jahromi, B.A. Snigerev, M.F. Webster, Modelling pom-pom type models with high-order finite volume schemes, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **126** (2005) 207-220.
- 3.- J.P. Aguayo, H.R. Tamaddon-Jahromi, M.F. Webster, Extensional response of the pom-pom model through planar contraction flows for branched polymer melts, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **134** (2006) 105-126.
- 4.- J.P. Aguayo, P.M. Phillips, T.N. Phillips, H.R. Tamaddon-Jahromi, B.A. Snigerev, M.F. Webster, The numerical prediction of planar viscoelastic contraction flows using the pom-pom model and high-order finite volume schemes, *Journal of Computational Physics* **220** (2007) 586-611.
- 5.- J.P. Aguayo, H.R. Tamaddon-Jahromi, M.F. Webster, Excess pressure-drop estimation in contraction and expansion flows for constant shear-viscosity, extension strain-hardening fluids, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **153** (2008) 157-176.
- 6.- J.P. Aguayo, H.R. Tamaddon Jahromi, M.F. Webster and O. Manero, A study on Bautista-Manero models for worm-like micellar systems, **enviado** a *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. JNNFM-D-09-00016.