



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA
FACULTAD DE QUÍMICA

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FLUJO DE
FLUIDOS VISCOELÁSTICOS Y
VISCOELASTOPLÁSTICOS ALREDEDOR
DE ESFERAS.**

TESIS

**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA**

PRESENTA

I.Q. OSVALDO RESENDIZ TOLENTINO

**TUTOR PRINCIPAL:
DR. JOSÉ ESTEBAN LÓPEZ AGUILAR
FACULTAD DE QUÍMICA**

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., JUNIO 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México



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. Manero Brito Octavio
SECRETARIO: Dr. López Serrano Ramos Francisco
1er. VOCAL: Dr. López Aguilar José Esteban
2do. VOCAL: Dr. Vicente y Rodríguez William
3er. VOCAL: Dr. Rosas Aburto Alberto

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

FACULTAD DE QUÍMICA, EDIFICIO D, CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. DE MÉXICO

ASESOR DEL TEMA:

DR. JOSÉ ESTEBAN LÓPEZ AGUILAR

SUSTENTANTE:

I.Q. OSVALDO RESENDIZ TOLENTINO

LISTA DE SÍMBOLOS

\mathbf{u}	Vector velocidad [m/s]
p	Presión [Pa]
A	Área transversal de la tubería [m ²]
f	Funcional de estructura - fluidez adimensional
Q	Flujo volumétrico [m ³]
L	Longitud característica [m]
G_0	Modulo elástico a bajas rapidezces de deformación [Pa]
De	Número de Débora, adimensional
Re	Número de Reynolds, adimensional
Wi	Número de Weissenberg, adimensional
k_0	Parámetro de destrucción de la estructura [m ² /N]
N_1	Primera diferencia de esfuerzos normales [N/m ²]
N_2	Segunda diferencia de esfuerzos normales [N/m ²]
\mathbf{D}	Tensor rapidez de deformación [s ⁻¹]
U	Velocidad característica [m/s]
t	Tiempo [s]
$K(\tau_{kk})$	Funcional de estructura de Phan-Thien—Tanner
J_2	Segundo Invariante del tensor de esfuerzos [N ² /m ⁴]
J_3	Tercer Invariante del tensor de esfuerzos [N ³ /m ⁶]
c	Parámetro del criterio de Sica et al. (2020)
k_i	Constantes asociadas al esfuerzo de cedencia, adimensional

SÍMBOLOS GRIEGOS

τ_{11}	Esfuerzo normal en la dirección principal [N/m ²]
τ_{22}	Esfuerzo normal en la dirección del gradiente [N/m ²]
τ_{33}	Esfuerzo normal en la dirección neutral [N/m ²]
τ_{rz}	Esfuerzo cortante [N/m ²]
τ_{rr}	Esfuerzo normal en la dirección r [N/m ²]
τ_{zz}	Esfuerzo normal en la dirección z [N/m ²]
$\tau_{\theta\theta}$	Esfuerzo normal en la dirección θ [N/m ²]
β	Fracción de solvente, adimensional
ω	Número adimensional de construcción de estructura, adimensional
ξ_{G0}	Número adimensional para la destrucción de estructura referido al módulo elástico, adimensional
ξ	Número adimensional para la destrucción de estructura referido al esfuerzo viscoso característico, adimensional
$\dot{\gamma}$	Rapidez de deformación [s ⁻¹]
τ_p	Tensor de esfuerzos del fluido viscoelástico (soluta) [N/m ²]
τ_s	Tensor de esfuerzos del solvente [N/m ²]
τ	Tensor de esfuerzos total [N/m ²]
λ_s	Tiempo de construcción de estructura [s]
λ_1	Tiempo de relajamiento [s]
$\eta_{\infty+\delta}$	Viscosidad del soluto a altos valores de rapidez de deformación [Pa s]
η_{p0}	Viscosidad del soluto a bajas rapidezces de deformación [Pa s]

η_s	Viscosidad del solvente [Pa s]
μ	Viscosidad dinámica [Pa s]
ε	Parámetro de extensibilidad, modelos de Phan-Thien-Tanner, adimensional
Π	Tensor de conformación [N/m ²]
σ_d	Tensor de esfuerzos deviatorico [N/m ²]
τ_y	Esfuerzo de cedencia [N/m ²]

ÍNDICE

[0]	RESUMEN.....	9
[1]	INTRODUCCIÓN.....	11
	[1.1] Antecedentes.....	11
[2]	MARCO TEÓRICO.....	20
	[2.1] Ecuaciones de balance y modelos constitutivos.....	20
	[2.1.1] Ecuaciones de Balance.....	20
	[2.1.2] Ecuación Constitutiva Diferencial Generalizada.....	22
	[2.1.3] Modelo BMP_ τ_p	24
	[2.1.4] Modelo EPTT.....	26
	[2.2] Flujo alrededor de esferas.....	28
	[2.3] Coeficiente de arrastre.....	31
	[2.4] Tensor de conformación.....	32
	[2.5] Esfuerzo de cedencia y criterios de cedencia.....	34
	[2.5.1] Criterio de Tresca y de von Mises.....	37
	[2.5.2] Criterio de Sica et al. (2020).....	38
	[2.5.3] Criterio del segundo invariante.....	40
	[2.6] Cálculo de criterios para una geometría cilíndrica.....	41

[2.7]	Problema del alto número de Weissenberg y estabilización del sistema.....	49
[2.8]	Algoritmo numérico.....	51
[3]	HIPÓTESIS, JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS.....	53
[3.1]	Hipótesis.....	53
[3.2]	Justificación.....	54
[3.3]	Objetivos.....	55
[4]	RESULTADOS Y ANÁLISIS.....	56
[4.1]	Régimen viscoelástico.....	56
[4.1.1]	Efecto del nivel de engrosamiento a la extensión.....	56
[4.1.2]	Efecto del número de Débora.....	70
[4.1.3]	$BMP+_{\tau_p}$ vs EPTT.....	74
[4.2]	Régimen plástico.....	80
[4.2.1]	Criterios de cedencia.....	81
[4.2.2]	Efecto de parámetro c en criterio de Sica et al.....	83
[4.2.3]	Criterio de Sica et al. (2020) Estimación del parámetro c	85
[4.2.4]	Criterio del Segundo Invariante. Efecto de concentración.....	88
[4.2.4]	Criterio del Segundo Invariante. Efecto de engrosamiento a la extensión.....	89

[5]	CONCLUSIONES.....	92
[6]	TRABAJO FUTURO.....	94
[7]	PRODUCTIVIDAD: LISTA DE ARTÍCULOS Y CONGRESOS.....	95
[8]	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	96

Índice de Figuras

Figura 1.1. Esquema idealizado de un fluido micelar de tipo gusano (Yang, 2002).....	13
Figura 2.1. Reología de modelo $BMP+_{\tau_p}$ y EPTT; Distinto nivel de engrosamiento (NH, MH, SH); a) η_{Shear} y η_{Ext} b) N_1	26
Figura 2.2. Estructura de red tipo Lodge-Yamamoto (Ferrás et al., 2019).....	27
Figura 2.3. Frente de cedencia experimental en esfera sedimentando vs frente obtenido de un modelo (línea solida) (Holenberg et al., 2012).....	30
Figura 2.4. Modelos con viscosidad cortante constante, efectos de N_1 y η_{Ext} en la evolución del coeficiente de arrastre en esferas rígidas (Tammadon-Jahromi et al., 2011).....	32
Figura 2.5. Curvas de flujo para fluidos concentrados a) Esfuerzo cortante (τ_{rz}) b) Viscosidad de corte y extensional c) Primera diferencia de esfuerzos normales.....	36
Figura 2.6. Esquema de simulación; Principales zonas y malla de elementos finitos.....	52

Figura 4.1. Perfil N_1 a) NH b) MH; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 6$	58
Figura 4.2 Perfil f a) NH b) MH; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 6$	59
Figura 4.3 Coeficiente de arrastre respecto al aumento de De ; NH vs MH, $\beta = \frac{1}{9}$	61
Figura 4.4 Máximos globales de N_1 respecto al aumento de De ; NH vs MH, $\beta = \frac{1}{9}$	62
Figura 4.5 Perfil N_1 a) MH b) SH; $\beta = 0.5$; $De = 2$	65
Figura 4.6 Perfil f a) NH b) MH; $\beta = 0.5$; $De = 2$	66
Figura 4.7 Coeficiente de arrastre respecto al aumento de De ; NH vs MH vs SH, $\beta = 0.5$	68
Figura 4.8 Perfil s_2 a) MH b) SH; $\beta = 0.5$; $De = 2$	69
Figura 4.9 Perfil N_1 ; a distintos valores de De ; $\beta = \frac{1}{9}$; MH.....	71
Figura 4.10 Perfil f a distintos valores de De ; $\beta = \frac{1}{9}$; MH.....	73
Figura 4.11 Perfil N_1 ; BMP+ τ_p vs EPTT; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 2$	75
Figura 4.12 Perfil f ; BMP+ τ_p vs EPTT; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 2$	77
Figura 4.13 Perfil N_1 ; BMP+ τ_p vs EPTT; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 5$	78
Figura 4.14 Perfil f ; BMP+ τ_p vs EPTT; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 5$	80

Figura 4.15 Frentes de cedencia obtenidos para tres criterios a) von Mises b) Segundo invariante c) Sica et al. ($c=-0.1$); $\beta = 0.01$; MH	82
Figura 4.16 Frentes de cedencia obtenidos para distintos parámetros del criterio Sica et al. (2020); $De = 1$; $\beta = 0.01$; MH	84
Figura 4.17 Frentes de cedencia obtenidos para dos valores del parámetro c utilizando el criterio de Sica et al. (2020); $\beta = 0.01$; MH	87
Figura 4.18 Frentes de cedencia obtenidos para distintas fracciones de solvente; MH	89
Figura 4.19 Frentes de cedencia obtenidos para distintos niveles de engrosamiento a la extensión; $\beta = 0.01$	90

Índice de Tablas

Tabla 1.1. Modelos microestructurales para fluidos micelares de tipo gusano.....	18
Tabla 1.2 Modelos basados en un parámetro de estructura para fluidos micelares de tipo gusano.....	19
Tabla 4.1 Simulaciones contrastadas para el engrosamiento a la extensión.....	56
Tabla 4.2 Máximos y mínimos de N_1 a distintas fracciones de solvente.....	64

SIMULACIÓN NÚMÉRICA DE FLUJO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS Y VISCOELASTOPLÁSTICOS ALREDEDOR DE ESFERAS

Resumen

En este trabajo se obtienen y analizan soluciones numéricas del flujo alrededor de esferas para fluidos micelares de tipo gusano empleando el modelo Bautista-Manero-Puig Plus τ_p (BMP+ τ_p). Se observa la influencia del engrosamiento a la extensión y del flujo volumétrico, además de que se contrasta con un modelo conocido y empleado ampliamente: El modelo de Phan-Thien—Tanner exponencial (EPTT, por sus siglas en inglés), que tiene su origen en el modelado constitutivo de soluciones poliméricas y polímeros fundidos.

Esta tesis se divide de la siguiente manera:

En el Capítulo 1, se plantea la Introducción de este tema, se recopila la información de los antecedentes de este trabajo, dando una perspectiva general de las definiciones más importantes, así como de trabajos previos relacionados. En el Capítulo 2, llamado Marco Teórico, se detallan las ecuaciones empleadas para la descripción del problema desde principios fundamentales, se hace una descripción del método numérico empleado y se da una perspectiva de los fundamentos teóricos necesarios para poder discutir los aspectos más relevantes obtenidos, y tener una mejor visión de los avances generados por el desarrollo de este proyecto. Posteriormente, en el Capítulo 3, se describen la hipótesis, la justificación y los objetivos que sustentan este trabajo. De esta manera, cuando se describa el Capítulo 4, se podrán discutir los Resultados de las soluciones

obtenidas, dividido todo en dos grandes secciones: El régimen viscoelástico y el régimen plástico, de los cuales cada sección tendrá sus respectivas subsecciones.

En el *régimen viscoelástico*, se discute, en primera instancia, la influencia del engrosamiento a la extensión en las soluciones numéricas por medio de dos propiedades importantes (i.e. primera diferencia de esfuerzos normales, N_1 y parámetro de estructura, f). Posteriormente, se aborda el análisis del efecto del número de Débora (De), que en este trabajo define al flujo volumétrico adimensional, culminando con todo el trabajo de simulación de esta sección con el contraste del modelo $BMP+_{\tau_p}$ y el modelo EPTT. Por otra parte, en el análisis del *régimen plástico*, se identificarán cuatro secciones: en la primera, se introducen los criterios de cedencia analizados como base de este trabajo de investigación; después, se aborda el caso en específico del criterio de Sica et al. (2020) para analizar la influencia de sus parámetros en la determinación en los frentes de cedencia; posteriormente, se aborda el efecto de la concentración de soluto en el fenómeno de plasticidad; y se culmina con el análisis del efecto del nivel de engrosamiento a la extensión. Finalmente, en el Capítulo 5 se dan las conclusiones de este estudio y recomendaciones para trabajos futuros.

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Citando a Owens & Philips (2002): “La simulación numérica ha sido una herramienta utilizada para encontrar soluciones en flujo de fluidos no-newtonianos debido a dos razones principales: La posibilidad de generar resultados en problemas no triviales de fluidos que presentan elasticidad y su aplicación en flujos industriales sin la necesidad de experimentación”.

Es a partir del trabajo de la Reología Computacional que se han podido mejorar y proponer modelos constitutivos útiles para flujos viscométricos i.e. flujo en un tubo, flujo de Couette, etc., pero que perdían consistencia para flujos complejos (Owens & Phillips, 2002; Alves et al., 2021), implementar nuevos métodos numéricos, e.g. métodos de volúmenes finitos (FVM, por sus siglas en inglés; Alves et al., 2021), métodos de diferencias finitas (FDM; Alves et al., 2021), métodos híbridos de volumen finito-elemento finito (FEM; Webster et al., 2005; Lopez-Aguilar et al., 2016; Lopez-Aguilar et al., 2017; López-Aguilar et al.; 2018), entre muchos otros; predecir datos experimentales, como los reportados en fluidos de Boger para flujos en contracción y contracción-expansión en distintas relaciones de aspecto y geometrías (López-Aguilar et al., 2016; López-Aguilar et al., 2017; López-Aguilar et al., 2018; López-Aguilar et al., 2020; Sica et al., 2020), entre otras aportaciones. Además, al generar un nuevo modelo constitutivo, existen flujos típicos en mecánica de fluidos no newtonianos que sirven para probarlos y extraer sus propiedades, aproximar influencias de sus mecanismos físicos y propiedades en flujos complejos en un sistema sin recurrir a la experimentación e.g. flujo en un tubo en cruz variando

sinusoidalmente, contracción 4:1 planar y axisimétrica (Leal et al., 1988, Owens & Phillips, 2002)

Los trabajos de simulación numérica y experimentación en Mecánica de Fluidos No Newtonianos son de especial interés al analizar flujos complejos, i.e. flujos cuya deformación es mixta, teniendo componentes cortantes y extensionales no homogéneos mezclados en el campo de flujo. Ejemplos de flujos complejos típicos son el flujo en contracción, flujo alrededor de un cilindro en un canal, flujo entre dos cilindros rotando excéntricamente, y el flujo alrededor de esferas (Leal et al., 1988; López-Aguilar et al., 2018; Resendiz-Tolentino, 2019; Owens & Phillips, 2002). Este último representa un problema que se ha estudiado desde el trabajo de Stokes en 1851 (Owens & Phillips, 2002), para el cual se puede obtener un resultado analítico al emplear un fluido Newtoniano. No obstante, al emplear fluidos más complejos es necesario implementar una solución numérica (Owens & Phillips, 2002).

El flujo alrededor de esferas de fluidos complejos resulta de gran interés en reometría y en aplicaciones industriales (Owens & Phillips, 2002; McKinley, 2002), ya que este flujo es uno de los más estudiados experimentalmente con pocas aproximaciones teóricas (Holenberg et al. 2012; Jayaramann & Belmonte, 2003; Sasmal, 2021), además de ser una geometría relativamente simple que existe en diferentes procesos como en desplazamiento de partículas sólidas en el seno de un fluido (McKinley, 2002). Las diversas propiedades reológicas de fluidos complejos, como el adelgazamiento al corte, engrosamiento y adelgazamiento a la extensión, viscoelasticidad y esfuerzo de cedencia producen manifestaciones experimentales en flujo alrededor de esferas, como: el desarrollo de caudas negativas, asimetría en

frentes de flujo, oscilaciones de velocidad en la región de la cauda, etc. (McKinley, 2002; Holenberg, 2012; Jayaraman & Belmonte, 2003), algunas de las cuales se explorarán en este trabajo. Uno de los materiales que cumplen con estas características son los fluidos micelares de tipo gusano.

Los fluidos micelares de tipo gusano son soluciones de tensoactivos generalmente concentradas, con una sal y/o con aditivos, que generan estructuras (micelas) dispuestas en arreglos físicos tubulares, como los presentados en la Fig. 1.1. (Dreiss, 2007; Yang, 2002). Las aplicaciones de estos fluidos son variadas, e.g. productos de cuidado personal, pinturas, agentes que disminuyen arrastre, espumas, cementos, pastas de dientes, alimentos, aceites cerosos, biofluidos como sangre, esputo y tejidos, etc. (Dreiss, 2007; Frigaard et al., 2017; Livescu, 2012). Entre las sustancias que pueden producir este tipo de mezclas, destacan los tensoactivos catiónicos con largas cadenas alifáticas como el bromuro de cetiltrimetilamonio (Cetyl trimethyl amonium bromide, CTAB, por sus siglas en inglés) en una solución de salicilato de sodio (NaSal) y el bromuro de cetilpiridinio (cetylpyridinium bromide, CPBr; Dreiss, 2007)



Figura 1.1. Esquema idealizado de un fluido micelar de tipo gusano (Yang, 2002)

Este tipo de estructura en los fluidos micelares provoca respuestas reológicas similares a los exhibidos en soluciones poliméricas, que relajan esfuerzos por reptación (Dreiss, 2007; López-Aguilar, 2014). Adicionalmente, las soluciones micelares tipo gusano, al ser sometidas a una deformación, relajan esfuerzos por el rompimiento de las interacciones intermicelares de las cuales están formadas. Este fenómeno de construcción-destrucción de la estructura interna es contemplado en las ecuaciones constitutivas que se han diseñado para la modelación de estos fluidos. De esta manera, se reconocen dos maneras de representar en ecuaciones constitutivas estos comportamientos: i) Modelos microestructurales y ii) Modelos basados en la evolución de un parámetro de estructura.

Uno de los modelos microestructurales más utilizados es el modelo de Vazquez-Cook-McKinley (VCM; Vasquez et al., 2007; Sasmal, 2021), el cual está basado en un modelo discreto de la teoría de Cates (Cates, 1987), en donde se emplean dos elementos elásticos hookeanos que representan a cadenas largas que pueden romperse en unas más cortas y que, a su vez, pueden recombinarse para formar una cadena larga. El modelo VCM utiliza ecuaciones cinéticas análogas al comportamiento químico y ha demostrado modelar de buena manera flujos simples y complejos estacionarios y transitorios (Zhou et al., 2014; Germann et al., 2013). Por otra parte, el modelo de varillas reactivas (Reactive Rod Model, RRM, por sus siglas en inglés; Graham & Dutta, 2018) es un modelo microestructural que considera una suspensión de varillas rígidas con comportamiento browniano cuya longitud varía dinámicamente considerando una unión entre varillas cuyo crecimiento y rompimiento depende del flujo y de la orientación de las varillas

(Graham & Dutta, 2018; Graham & Hommel, 2021). Esta propuesta predice los efectos de engrosamiento a la extensión y adelgazamiento al corte característicos de estos fluidos y permite explicar las estructuras inducidas por flujo (Flow-Induced Structures, FIS, por sus siglas en inglés) que aparecen en experimentos (Graham & Dutta, 2018; Berret et al., 2000).

Existen modelos que contemplan fluidos tixotópicos-viscoelastoplásticos como el modelo de Varchanis et al. (2019), denominado como Saramito-Phan Thien-Tanner-Isotropic-Kinematic-Hardening (SPTT-IKH). Este modelo considera la influencia del endurecimiento isotrópico y cinemático (isotropic hardening, IH, y kinematic hardening, KH, por sus siglas en inglés) de la microestructura. Para ello, los autores parten de algunas premisas del modelo de Phan Thien-Tanner (PTT, véase Capítulo 2) y del modelo propuesto para materiales viscoelastoplásticos de Saramito (2007).

El modelo de Saramito (2007) es un modelo que cumple con la Segunda Ley de la Termodinámica en el cual se considera el modelo de Oldroyd-B combinado con el modelo de Bingham, así como también se puede ampliar para introducir el modelo de Herschel-Bulkley en la respuesta plástica del material. Este modelo ha sido la base de muchos otros estudios que contemplan la tixotropía de materiales con plasticidad y viscoelasticidad, como en el trabajo desarrollado por Fraggadakis et al. (2016), en el que se contrastan diferentes ecuaciones constitutivas que buscan caracterizar fluidos viscoelastoplásticos y en el cual se explora el modelo de Saramito-IKH, el modelo de Park y Liu y el modelo de Belblidia et al. Adicionalmente, Fraggadakis et al. (2016), con un modelo derivado del de Saramito (2007), obtuvo resultados de frentes de cedencia en flujo alrededor de esferas que no

correspondieron con los resultados experimentales de Holenberg et al. (2012), pero obtienen un acercamiento a la generación de frentes de flujo asimétricos.

Finalmente, considerando los modelos que utilizan un parámetro de estructura para describir la reología de soluciones micelares tipo gusano, se encuentra la familia de ecuaciones de estado reológico de Bautista-Manero-Puig (BMP; Manero et al., 2007; López-Aguilar et al., 2014; López-Aguilar et al., 2015; López-Aguilar et al., 2016; López-Aguilar et al., 2018). Entre estos modelos, cabe destacar el denominado Bautista-Manero-Puig Plus τ_p (BMP+ τ_p), el cual contempla la tixotropía de la estructura interna en la viscosidad del soluto a partir de una ecuación de evolución en la fluidez adimensional (López-Aguilar et al., 2018). Cabe aclarar que este modelo ha sido empleado para analizar otros sistemas de flujo complejo (flujo en contracción-expansión circular, López-Aguilar et al., 2018). Además de que es capaz de predecir segregación de flujo como flujo bandeado (López Aguilar et al., 2017). El flujo bandeado es un fenómeno estudiado con el modelo BMP+ τ_p con base en la dependencia del coeficiente de destrucción de la estructura con la rapidez de deformación, que conduce a una curva de flujo no monotónica en flujo cortante simple (López-Aguilar et al., 2017). Este fenómeno también ha sido reportado con otros modelos como el modelo VCM en flujo en tuberías y contracción planar (Hooshyar & Germann, 2017; Hooshyar & Germann, 2019).

El modelo BMP+ τ_p contempla una mejora con respecto a sus predecesores en la misma familia i.e. MBM, NM_T, NM_ τ_p (López-Aguilar et al., 2018). En primer lugar, con respecto al modelo BMP original, corrige la extensibilidad infinita a valores de deformación finitos; esta variante incluye a la viscoelasticidad en la ecuación de ala

dinámica estructural, misma propuesta que ya se había implementado en versiones anteriores (NM_ τ_p , NM_T; López-Aguilar, 2014, López-Aguilar, 2015). Esta reciente versión destaca además por corregir el aplanamiento en el comportamiento de N_1 en corte, lo que permite observar la influencia de la viscoelasticidad en rapidezces de corte relativamente grandes y medianas.

Así, el modelo BMP+_ τ_p (López-Aguilar et al., 2018) se toma como base en este estudio sobre el flujo alrededor de esferas. Algunas de las propiedades a analizar en este trabajo para flujos tixoviscoelastoplásticos son: plasticidad, viscoelasticidad, dinámica de flujo (estructura de flujo) y requerimientos energéticos para que un flujo se lleve a cabo (coeficientes de arrastre; López-Aguilar et al., 2018). Algunos de los modelos más utilizados para fluidos micelares de tipo gusano se enlistan en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1. Modelos microestructurales para fluidos micelares de tipo gusano

MODELOS EMPLEADOS PARA FLUIDOS MICELARES DE TIPO GUSANO		
Modelos microestructurales: Contemplan la dinámica de la estructura con aproximaciones basadas en una idealización de los arreglos micelares		
Modelo	Principio	Ecuaciones Constitutivas
Vasquez-Cook-McKinley (VCM; Samal, 2021)	Se consideran ecuaciones cinéticas para la cantidad de sustancia de cadenas “largas” (n_A) y cadenas “cortas” (n_B) que tienen impacto en los tensores asociados a cada especie (\mathbf{A} , \mathbf{B})	$\mu \frac{Dn_A}{Dt} - 2\delta_A \nabla^2 n_A = \frac{1}{2} c_B n_B^2 - c_A n_A$ $\mu \frac{Dn_B}{Dt} - 2\delta_B \nabla^2 n_B = \frac{1}{2} c_B n_B^2 + 2c_A n_A$ $\overset{\nabla}{\mu} \mathbf{A} + \mathbf{A} - n_A \mathbf{I} - \delta_A \nabla^2 \mathbf{A} = c_B n_B \mathbf{B} + c_A \mathbf{A}$ $\epsilon \overset{\nabla}{\mu} \mathbf{B} + \mathbf{B} - \frac{n_B}{2} \mathbf{I} - \epsilon \delta_B \nabla^2 \mathbf{B} = -2\epsilon c_B n_B \mathbf{B} + 2\epsilon c_A \mathbf{A}$ $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s = (\mathbf{A} + 2\mathbf{B}) - (n_A + n_B) \mathbf{I} + \beta_{VCM} \dot{\boldsymbol{\gamma}}$
Modelo de varillas reactivas (RRM; Graham & Dutta, 2018)	Contempla una serie de varillas con un movimiento browniano que pueden formar estructuras más grandes de acuerdo a la orientación, por lo que se emplea un tensor de orientación (\mathbf{S}) en este modelo.	$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = -6D_r \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{S}^T + \mathbf{S} \cdot \nabla \mathbf{u} - 2\mathbf{K} : \langle \mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ $\boldsymbol{\tau}_p = 3nk_B T \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) + \frac{nk_B T}{2D_{r,0}} \mathbf{K} : \langle \mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s = \boldsymbol{\tau}_p + 2\eta_s \mathbf{D}$

Tabla 1.2. Modelos basados en un parámetro de estructura para fluidos micelares de tipo gusano

MODELOS EMPLEADOS PARA FLUIDOS MICELARES DE TIPO GUSANO		
Modelos basados en un parámetro de estructura (f): Consideran un parámetro asociado a la mecánica de construcción-destrucción de la estructura interna dependiente de las propiedades físicas del sistema.		
Modelo	Principio	Ecuaciones Constitutivas
Bautista-Manero-Puig (BMP; Manero et al., 2007)	Se encuentra basado en el modelo de Maxwell con derivada convectiva superior acoplado a una ecuación cinética para el parámetro de estructura considerando la disipación de energía en la dinámica de construcción-destrucción	$\frac{df}{dt} = \frac{f_0 - f}{\lambda} + k(f_\infty - f)\boldsymbol{\tau} : \mathbf{D}$ $f\boldsymbol{\tau} + \frac{1}{G_0} \nabla \boldsymbol{\tau} = \mathbf{D}$
Bautista-Manero-Puig Modificado (NM_T; López-Aguilar et al., 2014; López-Aguilar et al., 2015)	Considera una modificación con respecto a los modelos predecesores a partir de observaciones fenomenológicas de las soluciones	$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\omega}(1 - f) + \xi_{G_0} De \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} $ $De \nabla \boldsymbol{\tau}_p = 2(1 - \beta)\mathbf{D} - f\boldsymbol{\tau}_p$ $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s = \boldsymbol{\tau}_p + 2\beta\mathbf{D}$
Bautista-Manero-Puig Plus τ_p (BMP+ τ_p ; López-Aguilar et al., 2018)	Se deduce un parámetro de estructura (f) bajo los mismos principios que toda la familia de modelos BMP	$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) f = \frac{1}{\omega}(1 - f) + (\xi_{G_0} De - \xi f) \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} $ $De \nabla \boldsymbol{\tau}_p = 2(1 - \beta)\mathbf{D} - f\boldsymbol{\tau}_p$ $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s = \boldsymbol{\tau}_p + 2\beta\mathbf{D}$

2. MARCO TEÓRICO

A continuación, se exponen las ecuaciones de balance consideradas en el sistema analizado, los modelos empleados en el proceso de simulación, los conceptos más relevantes y el fundamento teórico de este trabajo.

2.1 Ecuaciones de balance y modelos constitutivos

2.1.1. Ecuaciones de Balance

El sistema se encuentra sujeto a las ecuaciones de conservación de materia (Ec. de continuidad), momentum (Ec. de Cauchy) y energía (Ec. de energía). Para el trabajo presente se considera un flujo isotérmico, lo que satisface de manera automática la ecuación de balance de energía. Por lo tanto, las ecuaciones de balance de masa y momentum de forma adimensional a las que queda sujeto el sistema son:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$Re \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p. \quad (2)$$

Como se observa, para esta familia de ecuaciones, las expresiones diferenciales contemplan términos temporales (t) y espaciales (x). Asimismo, existe la presencia de funciones tensoriales como el gradiente de velocidad ($\nabla \mathbf{u}$) y el tensor de esfuerzos ($\boldsymbol{\tau}$), funciones vectoriales como la función velocidad (\mathbf{u}) y finalmente funciones escalares como la presión hidrodinámica (p).

El tensor de esfuerzos $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p$ se representa como una suma de las contribuciones del solvente ($\boldsymbol{\tau}_s$) y del soluto ($\boldsymbol{\tau}_p$). Por un lado, se tiene un

comportamiento viscoso inelástico newtoniano ($\tau_s = 2\beta\mathbf{D}$) para el solvente y, por el otro, un comportamiento no lineal sujeto a una ecuación constitutiva no-newtoniana para el soluto (ver siguiente sección para el Modelo BMP+ $_{-}\tau_p$).

La composición de la mezcla puede representarse por la relación de viscosidades entre aquéllas del solvente newtoniano y del soluto no-newtoniano, denominada fracción de solvente (β). Esta cantidad se define como el cociente de la viscosidad del solvente η_s entre la suma de la viscosidad del solvente y la viscosidad del soluto a bajas rapidezces de deformación η_{p0} :

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_{p0}}. \quad (3)$$

La adimensionalización de las variables presentes en las ecuaciones de conservación (1)-(2) son las siguientes:

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U}, \quad t^* = \frac{U}{L}t, \quad \mathbf{D}^* = \frac{L}{U}\mathbf{D}, \quad \boldsymbol{\tau}_p^* = \frac{\boldsymbol{\tau}_p}{(\eta_{p0} + \eta_s)\frac{U}{L}}, \quad p^* = \frac{p}{(\eta_{p0} + \eta_s)\frac{U}{L}},$$

de las cuales se define el número de Reynolds:

$$Re = \frac{\rho UL}{(\eta_{p0} + \eta_s)}. \quad (4)$$

El comportamiento viscoelástico del material se representa a través del número adimensional de Débora (De , López-Aguilar et al., 2018; López-Aguilar et al., 2022):

$$De = \lambda_1 \frac{U}{L}, \quad (5)$$

donde:

$$\lambda_1 = \frac{\eta p_0}{G_0}. \quad (6)$$

De la Ec. (5), se observa que el De es directamente proporcional U , que representa a una velocidad característica del sistema. Esta velocidad característica se relaciona en este trabajo con el flujo volumétrico (Q) a través de la relación $Q = AU$, donde A representa el área transversal del conducto que contiene a la esfera.

Asimismo, la Ec. (6) define al tiempo de relajamiento del material a bajas rapidezces de deformación, que corresponde al cociente de la viscosidad del soluto a bajas rapidezces de deformación entre el módulo elástico en las mismas condiciones.

2.1.2. Ecuación Constitutiva Diferencial Generalizada

Al analizar un fluido viscoelástico es importante considerar los esfuerzos normales, ya que su valor puede ser comparable e incluso mayor al generado por esfuerzos cortantes.

En Reología se analizan estos esfuerzos normales en dos principales funciones denominadas: primera diferencia de esfuerzos normales (N_1) y segunda diferencia de esfuerzos normales (N_2), que son expresadas de la siguiente manera:

$$N_1 = \tau_{11} - \tau_{22}, \quad (7)$$

$$N_2 = \tau_{22} - \tau_{33}, \quad (8)$$

donde la dirección número 1, es la dirección del flujo principal, el número 2, es la dirección del gradiente, y el número 3, representa la dirección neutral. Se puede

considerar las diferencias de esfuerzos normales en las coordenadas relevantes para el flujo alrededor de una esfera contenida en un conducto cilíndrico de la siguiente manera:

$$N_1 = \tau_{zz} - \tau_{rr}, \quad (9)$$

$$N_2 = \tau_{rr} - \tau_{\theta\theta}. \quad (10)$$

Para este sistema se consideran coordenadas cilíndricas, por lo que τ_{zz} es el esfuerzo normal en la dirección axial, τ_{rr} representa el esfuerzo normal en dirección radial y $\tau_{\theta\theta}$ es el esfuerzo normal en dirección azimutal.

Uno de los marcos teóricos de modelado constitutivo que produce respuesta viscoelástica es la ecuación constitutiva diferencial generalizada:

$$De \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2(1 - \beta)\mathbf{D} - f\boldsymbol{\tau}_p. \quad (11)$$

Esta ecuación constitutiva generalizada considera efectos no-newtonianos a través de dos ingredientes: (i) la derivada convectiva superior del tensor de esfuerzos $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p$, que se define como: $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_p - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}_p - \boldsymbol{\tau}_p \cdot \nabla \mathbf{u}$. Por otro lado, (ii) el funcional de estructura f , que se puede interpretar como una fluidez adimensional para algunos modelos, definida como $f = \frac{\eta_{p0}}{\eta_p}$. Como se observa en la Ec. (11), el número de Débora modula la influencia de la derivada convectiva superior y, por lo tanto, la magnitud y funcionalidad de N_1 y N_2 con la rapidez de deformación. El funcional f especifica la naturaleza estructural del material a través de su funcionalidad con los diversos invariantes de flujo relevantes en ecuaciones constitutivas específicas. El caso más sencillo, el modelo de Oldroyd-

B, considera una estructura dada por $f = 1$, el cual funciona como referencia y origen en el análisis del presente trabajo. Otros modelos constitutivos de uso general pueden ser acomodados dentro del paradigma que ofrece la Ec.(11). En las siguientes secciones se detallan los modelos utilizados en este trabajo de investigación.

2.1.3. Modelo BMP+ $_{\tau_p}$

Para caracterizar la respuesta mecánica de fluidos tixoviscoelastoplásticos, se utiliza el modelo BMP+ $_{\tau_p}$ en este trabajo (López-Aguilar et al., 2018; Resendiz-Tolentino, 2019; López-Aguilar et al., 2022). Este modelo emplea una segunda ecuación diferencial parcial para la fluidez adimensional f en la que se concentran la dinámica de destrucción y construcción de estructuras micelares, y que se define como:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) f = \frac{1}{\omega} (1 - f) + (\xi_{G_0} De - \xi f) |\boldsymbol{\tau} : D|, \quad (12)$$

donde, el término constructivo se encuentra modulado por el inverso del tiempo característico de formación de estructuras (λ_s), i.e. $\omega = \lambda_s \frac{U}{L}$ en forma adimensional. En contraposición, se perciben dos coeficientes relacionados con la destrucción de la estructura interna del material: el primero resulta de la siguiente manera: $\xi_{G_0} = \frac{k_0 G_0}{\eta_{\infty} + \delta} (\eta_{p0} + \eta_s)$, mientras que el segundo se define como: $\xi = k_0 (\eta_{p0} + \eta_s) \frac{U}{L}$, donde k_0 es el inverso del esfuerzo característico de destrucción de la estructura. El término $\eta_{\infty} + \delta$ es la viscosidad del soluto a altas rapidez de deformación.

La especificación de valores para los coeficientes adimensionales constructivos y destructivos son los que proporcionan distintas propiedades reológicas i.e. engrosamiento/adelgazamiento a la extensión, adelgazamiento al corte, etc. (López-Aguilar et al., 2018). Por ejemplo, para un fluido no engrosante a la extensión, denominado No-Hardening (NH, por su traducción al inglés), los valores son: $\omega = 4$ y $\xi_{G_0} = 1$; mientras que para un fluido medianamente engrosante, Moderate-Hardening (MH), los parámetros son: $\omega = 4$ y $\xi_{G_0} = 0.1125$; y finalmente, para un fluido altamente engrosante a la extensión, Strong-Hardening (SH), se obtiene que $\omega = 0.28$ y $\xi_{G_0} = 0.1125$ (véase Fig. 2.1; López-Aguilar et al., 2018).

Como se ve en la Fig. 2.1, los niveles de respuesta a la extensión provocan cambios importantes en la reología del fluido, que se reflejan en dos mesetas para las viscosidades, así como una meseta para N_1 que ve modificado su nivel, y un cambio en la tendencia lineal del esfuerzo cortante. Uno puede notar que, a medida que las propiedades de engrosamiento a la extensión dominan, de NH hacia SH, la viscosidad de corte y la primera diferencia de esfuerzos normales aumentan sus valores cuando se comparan a un mismo nivel de rapidez de deformación.

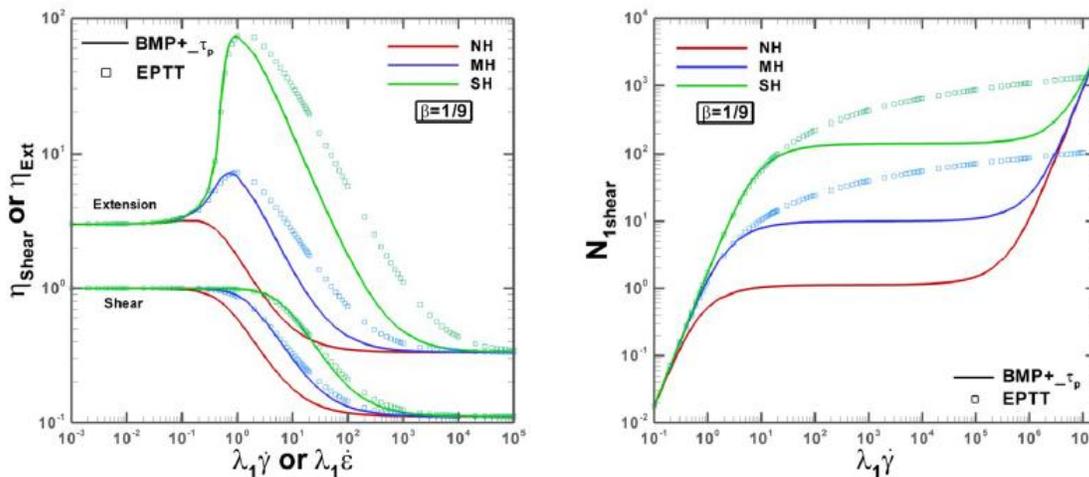


Figura 2.1. Reología de modelo $BMP+_{\tau_p}$ y EPTT; Distinto nivel de engrosamiento (NH, MH, SH); a) η_{Shear} y η_{Ext} b) N_1 ; $\beta=1/9$

2.1.4. Modelo EPTT

Este trabajo analiza el modelo $BMP+_{\tau_p}$, no obstante, es importante contrastar las diferencias que posee este modelo con algún otro modelo existente que presente propiedades similares y que sea conocido. El modelo de Phan-Thien-Tanner exponencial (Exponential Phan-Thien-Tanner, EPTT, por sus siglas en inglés) es empleado en caracterización de polímeros fundidos y soluciones poliméricas. Este modelo también predice un adelgazamiento al corte y un engrosamiento a la extensión acompañado de una respuesta viscoelástica no lineal (Ferrás et al., 2019; Phan-Thien, 1978; Enders et al., 2019).

El modelo EPTT, que corresponde a un modelo basado en la teoría de redes tipo Lodge-Yamamoto para fluidos poliméricos (Fig. 2.2; Phan-Thien & Tanner, 1977), considera que un polímero está conformado por uniones que no se mueven como

puntos libres en el continuo, sino que permiten que exista cierto *deslizamiento efectivo*, así como una rapidez de destrucción que depende del esfuerzo al que es sometida la red (Ferrás et al. 2019).

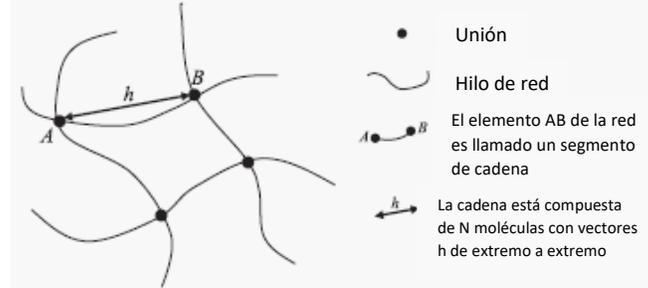


Figura 2.2. Estructura de red tipo Lodge-Yamamoto (Ferrás et al., 2019)

Phan-Thien y Tanner (1977) postulan la siguiente ecuación constitutiva para el caso isotérmico:

$$K(\tau_{kk})\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\circ}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (13)$$

donde:

$$K(\tau_{kk}) = 1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{kk}, \quad (14)$$

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} + \xi(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\tau}). \quad (15)$$

De manera similar al modelo BMP+ τ_p , el modelo EPTT considera un tiempo característico viscoelástico (λ) y una viscosidad del polímero (η_p). $\overset{\circ}{\boldsymbol{\tau}}$ es la derivada de Gordon-Schowalter descrita en la en la Ec. 15. Además, se añade un parámetro ξ (parámetro de movimiento no afín) que depende del nivel de deslizamiento entre la red y el medio continuo y que permite incluir efectos anisotrópicos en el flujo ($0 \leq \xi \leq 1$). El funcional de estructura $f = K(\tau_{kk})$ contiene

un parámetro de extensibilidad (ε) y es función directa del primer invariante del tensor de esfuerzos.

Una primer variante de esta familia de fluidos PTT es el modelo de Phan-Thien–Tanner Lineal (LPTT, por sus siglas en inglés; Phan-Thien & Tanner, 1977; Ferrás et al., 2019), sin embargo, pronto se encontraron limitaciones en este modelo al incluir flujos “fuertes” (extensionales; Phan-Thien & Tanner, 1977), por lo que fue necesario implementar una modificación, tomando en consideración el funcional denominado $f = K(\tau_{kk})$ en una combinación exponencial (Phan-Thien 1978):

$$f = K(\tau_{kk}) = \exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{kk}\right). \quad (16)$$

Con esta variante exponencial se pudo describir de una mejor manera la rapidez de destrucción de uniones (Ferrás et al., 2019). Además, el modelo EPTT ha demostrado efectividad en la caracterización de datos experimentales en flujos extensionales como en cauda negativa de burbujas ascendentes en soluciones de biopolímeros (Enders et al., 2019) con un valor de $\varepsilon = 0.01$ y es uno de los modelos más importantes para fluidos viscoelásticos por su formulación (Ferrás et al., 2019; Enders et al., 2019).

2.2 Flujo alrededor de esferas

El flujo alrededor de esferas de fluidos no-newtonianos resulta un problema de mayor complejidad que el presentado para un flujo de Stokes (McKinley, 2002; Owens & Phillips, 2002; Rothstein & Mohammadigoushki, 2020), que corresponde a la formulación newtoniana con solución analítica (Owens & Phillips, 2002). Para fluidos viscoelásticos en flujo alrededor de esferas no existe una solución analítica,

debido a la mezcla de deformaciones de extensión y corte en el campo de flujo (Owens & Phillips, 2002; Chilcott & Rallison, 1988).

De trabajos previos en flujo alrededor de esferas de fluidos viscoelásticos (Chilcott & Rallison, 1988; McKinley, 2002), se sabe que se generan zonas en las que prevalece alguna deformación; para el flujo alrededor de esferas, en la parte anterior del obstáculo se presenta, en mayor medida, una compresión planar, mientras que en la parte posterior prevalecerá una extensión uniaxial, ambas de naturaleza no-homogénea. Además, sobre la superficie de la esfera, la deformación preponderante es corte no-homogéneo. Algunos autores dan mayor importancia a la respuesta extensional en la cauda de la esfera (Chilcott & Rallison, 1988; Enders et al., 2019; Jayaraman & Belmonte, 2003).

La región en la que se observa la extensión uniaxial no-homogénea es denominada cauda, y para fluidos viscoelásticos adelgazantes al corte es posible identificar una inversión en la dirección del flujo en la cauda con respecto a la dirección principal, generando el fenómeno de cauda negativa (McKinley, 2002).

Adicionalmente, se ha visto que existen oscilaciones no transitorias en la velocidad de descenso de una esfera para fluidos micelares de tipo gusano (Jayaraman & Belmonte, 2003). Este fenómeno, para ser explicado, requiere de analizar la reología del sistema de una manera que se contemplen las respuestas extensionales y cortantes específicas para el material, pues a pesar de que exista una extensión uniaxial en la parte posterior, hay un cambio súbito de deformación derivado del corte que sufre el material en la superficie de la esfera (Jayaraman & Belmonte, 2003).

Este problema ha sido escasamente analizado a través de simulación numérica para fluidos micelares y tixoviscoelastoplásticos. El trabajo de Sasmal (2021) recopila la información de la simulación numérica de flujo alrededor de esferas con el modelo VCM y el modelo de Giesekus. Mientras que Fraggedakis et al. (2016) reportó los resultados para el modelo de Saramito-IKH, un modelo tixoviscoelastoplástico en flujo alrededor de esferas.

Por otro lado, es importante destacar que cuando se analizan soluciones en el régimen plástico (sistemas concentrados y poco móviles; valores bajos de β y bajos De), se han analizado los frentes de cedencia, que muestran la zona cedida de un material plástico (Holenberg et al., 2012). De resultados experimentales de flujo alrededor de esferas de fluidos complejos como los reportados por Holenberg et al., (2012), resulta evidente la necesidad de modelos que puedan aproximar de mejor manera la asimetría en los frentes de cedencia con respecto al eje de la esfera obtenida de manera experimental, ligada con la manifestación de propiedades no-lineales del fluido sometido a la deformación compleja causada por la esfera en el canal, i.e. viscoelasticidad y tixotropía (Fig. 2.2).

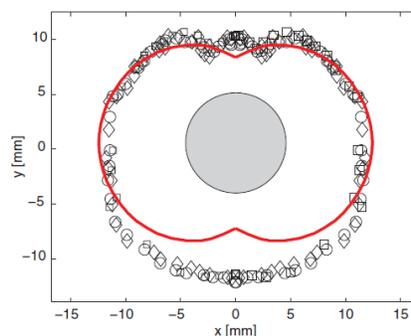


Figura 2.3. *Frente de cedencia experimental en esfera sedimentando vs frente obtenido de un modelo (línea sólida) (Holenberg et al., 2012)*

2.3 Coeficiente de arrastre

Todo cuerpo sometido a un flujo genera una resistencia que se traduce en una fuerza de arrastre (Goosens, 2019). Para el análisis de la resistencia en flujo alrededor de esferas se emplea un valor adimensional denominado coeficiente de arrastre (K ; Goosens, 2019), el cual es un término relacionado a la fuerza de arrastre por unidad de área. El resultado de este término en fluidos newtonianos es ampliamente conocido y se sabe que es dependiente únicamente del número de Reynolds (Re ; McKinley, 2002). No obstante, para flujo sin fronteras en un fluido viscoelástico se genera un factor de corrección de arrastre para su análisis (McKinley, 2002). Este factor se define como el cociente del factor de arrastre viscoelástico (Wi o $De > 0$) entre el coeficiente de arrastre newtoniano ($K_{Newtonian} = 24/Re$, para flujos reptantes; McKinley, 2002).

$$X(De) = \frac{K(De)}{K_{Newtonian}}. \quad (17)$$

La evolución de esta función con base en el incremento de De proporciona información de la consistencia del modelo y demuestra el requerimiento energético del fluido para superar un obstáculo con respecto a una instancia equivalente pero con un fluido newtoniano (McKinley, 2002).

La influencia que tienen ciertas propiedades en el factor de arrastre es de suma importancia al analizar las tendencias esperadas para fluidos viscoelásticos. Se sabe que algunas propiedades materiales generan cierta tendencia en el comportamiento del flujo (Tamaddon-Jahromi et al., 2011), como la primera diferencia de esfuerzos normales (N_1) y la viscosidad extensional (η_{Ext}).

Tamaddon-Jahromi et al. (2011) sostienen que, en ausencia de adelgazamiento al corte, un incremento en la viscosidad extensional genera un aumento en el factor de arrastre al incrementar el número de Débora (De), mientras que un aumento en N_1 tendrá un efecto inverso (Fig. 2.4).

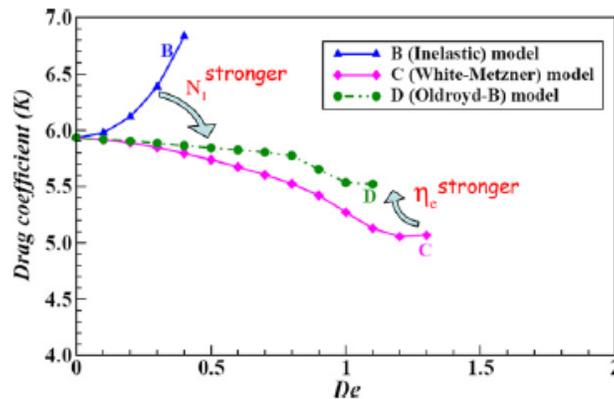


Figura 2.4. Modelos con viscosidad cortante constante, efectos de N_1 y η_{Ext} en la evolución del coeficiente de arrastre en esferas rígidas (Tammaddon-Jahromi et al., 2011)

2.4 Tensor de conformación

Una matriz simétrica \mathbf{A} , cuyas componentes son números reales, es positiva definida si y solo si los determinantes de las submatrices de A son positivos (Nieves, 2014).

Este tipo de tensores tienen múltiples aplicaciones. Sin embargo, la de importancia en este trabajo es la que desempeña en el caso de la pérdida de evolución de soluciones transitorias de flujos de fluidos viscoelásticos (Dupret & Marchal, 1986). Es importante que la condición de positivo definido no se pierda en los métodos numéricos para fluidos viscoelásticos, ya que eso deriva en inestabilidades no-lineales importantes (Hulsen, 1990). Así, para proporcionar una guía de la estabilidad numérica de un modelo, es práctica común calcular los valores propios

del tensor de conformación (López-Aguilar et al., 2015). Estos valores propios se correlacionan con la estabilidad del sistema de ecuaciones que se resuelven numéricamente, siendo las instancias en donde la pérdida de la calidad positiva definida aquellas que encuentran divergencia y falta de trazabilidad en sus soluciones (López-Aguilar et al., 2014; López-Aguilar et al., 2015).

Para el caso del modelo BMP+ $_{\tau_p}$ se calcula el siguiente tensor de conformación adimensional:

$$\Pi^* = \frac{Wi}{1-\beta} \boldsymbol{\tau}_p^* + \mathbf{I}. \quad (18)$$

La obtención de los valores propios se explica a continuación:

En primer lugar, se busca la ecuación característica del sistema (López-Aguilar et al., 2014; López-Aguilar et al., 2015)

$$\det(\Pi - s\mathbf{I}) = 0. \quad (19)$$

Aplicando esto a un sistema en coordenadas cilíndricas:

$$\det \begin{pmatrix} \Pi_{zz} - s & \Pi_{rz} & 0 \\ \Pi_{rz} & \Pi_{rr} - s & 0 \\ 0 & 0 & \Pi_{\theta\theta} - s \end{pmatrix} = 0. \quad (20)$$

De lo cual se obtiene la siguiente ecuación característica:

$$[(\Pi_{zz} - s)(\Pi_{rr} - s) - \Pi_{rz}^2](\Pi_{\theta\theta} - s) = 0. \quad (21)$$

Al observar la ecuación característica resulta evidente que el tercer eigenvalor corresponde al valor de $\Pi_{\theta\theta}$, por lo que los valores propios de mayor interés son el

primero y el segundo, que se obtienen de la siguiente ecuación cuadrática resultante:

$$s^2 - (\Pi_{zz} + \Pi_{rr})s + (\Pi_{zz}\Pi_{rr} - \Pi_{rz}^2) = 0. \quad (22)$$

Al obtener las raíces de esta ecuación, los valores propios resultan de la siguiente manera:

$$s_1 = \frac{(\Pi_{zz} + \Pi_{rr}) + \sqrt{(\Pi_{zz} + \Pi_{rr})^2 - 4(\Pi_{zz}\Pi_{rr} - \Pi_{rz}^2)}}{2}, \quad (23)$$

$$s_2 = \frac{(\Pi_{zz} + \Pi_{rr}) - \sqrt{(\Pi_{zz} + \Pi_{rr})^2 - 4(\Pi_{zz}\Pi_{rr} - \Pi_{rz}^2)}}{2}. \quad (24)$$

Un cambio de signo en estos valores demuestra un cambio abrupto en las soluciones numéricas y son un indicio de inestabilidad numérica y contaminación de soluciones (López-Aguilar et al., 2015).

2.5 Esfuerzo de cedencia y criterios de cedencia.

En Reología existe un concepto que ha sido debatido constantemente (Barnes, 1999): el esfuerzo de cedencia. En términos simples, podemos definirlo como el esfuerzo necesario para que un material se deforme y fluya por acción de una fuerza (hablando de fluidos que presentan plasticidad) (Barnes, 1985). Cuando el esfuerzo aplicado a un material es menor a su esfuerzo de cedencia, el material no se deforma y aparece como un sólido. El esfuerzo de cedencia se ha considerado como un concepto que puede ser más una idea pragmática que un hecho físico (Barnes, 2007). No obstante, su utilidad en modelos que describen el

fenómeno de plasticidad en diversos materiales e.g. crudo pesado, pasta de dientes (Zhang et al., 2022; Barnes, 1999), ha permitido el avance en su entendimiento y su aplicación tecnológica (Lopez-Aguilar, 2018; Holenberg, 2012; Saramito et al., 2007).

Existen dos tipos de esfuerzos de cedencia: (i) el esfuerzo de cedencia verdadero (*true yield-stress*, por su terminología en inglés) y (ii) el esfuerzo de cedencia aparente (*apparent yield-stress*, por su terminología en inglés). El primero hace referencia a un valor de esfuerzo límite para comenzar la deformación a corte cero (Barnes, 1999), mientras que el segundo representa un valor de esfuerzo en el cual existe un cambio abrupto en las propiedades del material (generalmente observado en la viscosidad), registrado a través de una caída pronunciada de la viscosidad desde la primera meseta newtoniana con valores de viscosidad significativamente elevados (Barnes, 1999). Así, el esfuerzo de cedencia verdadero, por definición, provee al material de una viscosidad infinita cuando el esfuerzo aplicado a la muestra es menor que el esfuerzo de cedencia, lo que da la idea de un comportamiento sólido bajo dichas condiciones. En contraste, el esfuerzo de cedencia aparente asigna al material una viscosidad finita pero significativamente grande a bajas rapidezces de deformación (Barnes, 1999; Barnes, 2007).

El modelo $BMP+_{\tau_p}$ predice esfuerzo de cedencia aparente a través de una diferencia pronunciada de la primera y segunda mesetas newtonianas, i.e. cuando la fracción de solvente es extremadamente baja ($\beta \rightarrow 0$), que caracteriza a sistemas concentrados (López-Aguilar et al., 2018; López-Aguilar et al., 2021). Los

valores necesarios para un análisis de plasticidad i.e. esfuerzo de cedencia aparente, se obtienen de gráficas obtenidas en flujos controlados, en flujo cortante simple y flujo uniaxial (Fig. 2.5; López-Aguilar et al., 2018, López-Aguilar et al., 2021)

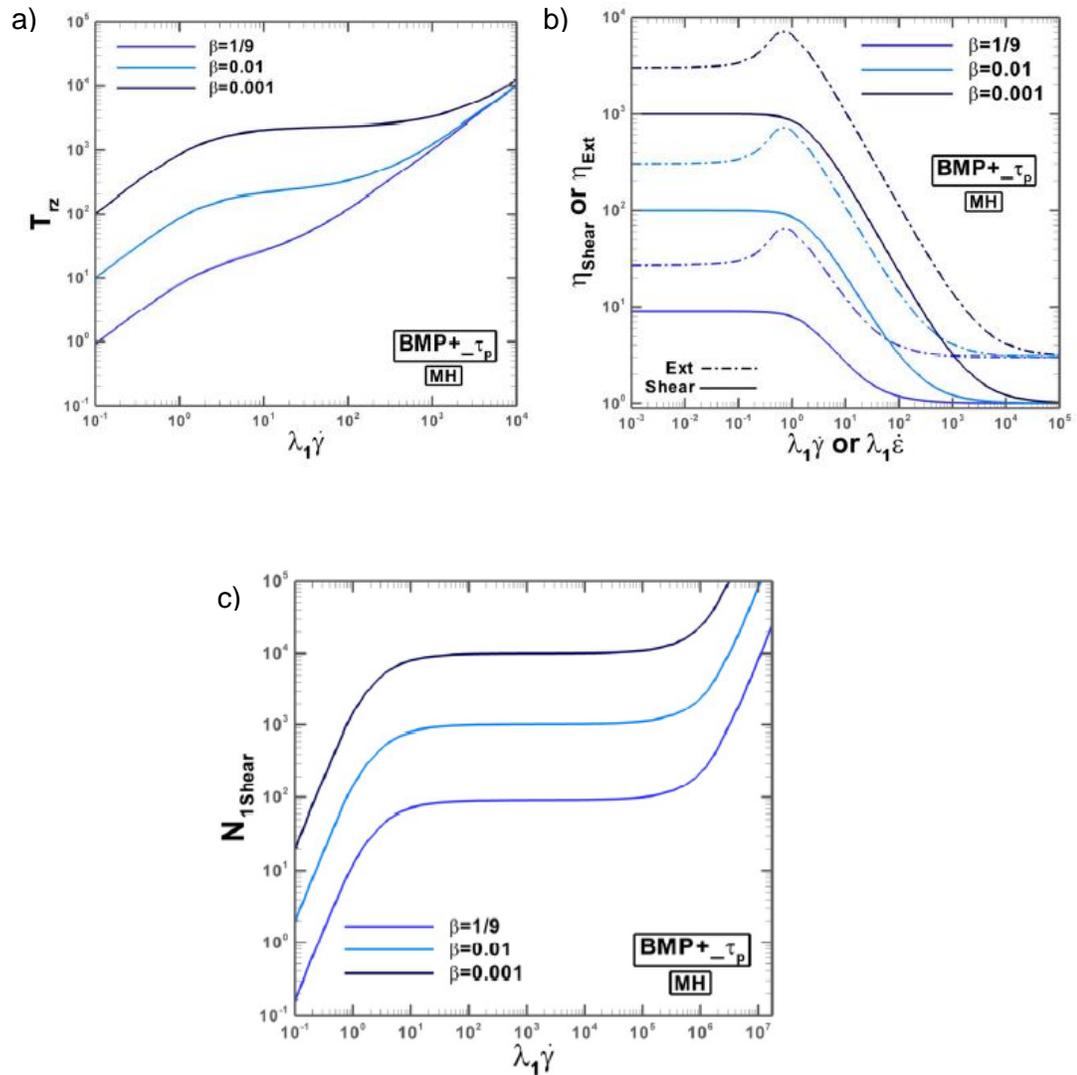


Figura 2.5. Curvas de flujo para fluidos concentrados a) Esfuerzo cortante (T_{rz}) b) Viscosidad de corte y extensional c) Primera diferencia de esfuerzos normales

2.5.1 Criterio de Tresca y de Von Mises

El concepto de esfuerzo de cedencia es aplicado a fluidos con base en los trabajos de Bingham (Bingham, 1916); no obstante, tiene sus bases en las teorías de falla de los sólidos elásticos, siendo ampliamente estudiado en metales (Hill, 1998). El análisis de plasticidad en metales ha ocasionado que se generen expresiones para medir el momento en que un material comienza a deformarse; en el caso de fluidos con plasticidad sería equivalente al momento en que empiezan a ceder (Barnes, 1999). Dichos criterios se definen como criterios de cedencia (Hill, 1998) de los cuales destacan dos de ellos: El criterio de Tresca y el criterio de von Mises (Hill, 1998).

El criterio de Tresca consiste en analizar el esfuerzo cortante máximo que se genera en un material (Hill, 1998): cuando éste sobrepasa un valor constante k_1 (relacionado de manera general al denominado esfuerzo de cedencia), entonces se considera que el material cede, se deforma y fluye:

$$\begin{cases} \max(\sigma_{12}) \geq k_1 & \text{Zona cedida} \\ \max(\sigma_{12}) < k_1 & \text{Zona plástica} \end{cases}$$

En contraparte, el criterio de von Mises ofrece un análisis más profundo, al emplear como medida del esfuerzo en la muestra al segundo invariante del esfuerzo deviatorico (Hill, 1998). El esfuerzo deviatorico es un tensor al que se le elimina la contribución hidrostática del fluido, también denominada *parte esférica* (Hill, 1998; Sica et al., 2020). De manera general, el esfuerzo deviatorico se define de la siguiente manera:

$$\sigma_d = \sigma - \frac{1}{3}tr(\sigma)I, \quad (25)$$

donde, σ es el tensor de esfuerzos, σ_d representa el esfuerzo deviatorico e I es el tensor identidad.

El criterio de von Mises parte de la definición anterior (Hill, 1998) pero reemplaza al esfuerzo cortante por el segundo invariante del esfuerzo. Con esta cantidad, es posible definir un frente de flujo con la siguientes expresiones:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{1}{2}tr(\sigma_d \cdot \sigma_d)} \geq k_2, \quad \text{Material cediendo,} \\ \sqrt{\frac{1}{2}tr(\sigma_d \cdot \sigma_d)} < k_2, \quad \text{Material sin ceder,} \end{array} \right.$$

donde k_2 es la medida del esfuerzo de cedencia del material.

Al considerar sólo la parte deviatorica, la transición de la zona plástica a la zona fluidizada se atribuye principalmente a los esfuerzos cortantes y una pequeña contribución de los esfuerzos normales (Sica, 2017).

2.5.2 Criterio de Sica et al. (2020)

Pese a que los criterios mencionados son los que prevalecen en el análisis de plasticidad en fluidos, otros trabajos sugieren la implementación de nuevas medidas como criterio de cedencia (Lopez-Aguilar et al., 2018; Sica, 2017; Sica et al., 2020). Al aplicar el criterio de von Mises para deformaciones distintas al corte (Martinie et al., 2013), los resultados muestran que este criterio no reproduce de manera satisfactoria datos experimentales en los materiales como emulsiones y geles de Carbopol (Zhang et al., 2005).

En el caso de una extensión uniaxial, si se considera el criterio de von Mises, se deduce una relación entre los esfuerzos de cedencia de corte y extensional (Martinie et al., 2013; Niedzwiedz et al., 2010):

$$\tau_{y,e} = \sqrt{3} \tau_{y,s}, \quad (26)$$

en donde, $\tau_{y,e}$ es el esfuerzo de cedencia en extensión y $\tau_{y,s}$ es el esfuerzo de cedencia en corte. Esta relación constante se ha corroborado en datos experimentales como: emulsiones a distintas concentraciones con emulsificante Span 80 en dodecano (Ovarlez et al., 2010). No obstante, hay evidencias de desviaciones de esta relación para emulsiones, a distintas concentraciones y geles de Carbopol (Zhang et al., 2005). Por ello, se ofrecen nuevas alternativas de evaluar un frente de cedencia (Sica et al., 2020) basándose nuevamente en las teorías de falla (Cazacu, 2004).

Una de estas alternativas es emplear el tercer invariante del tensor de deformación, ya que se ha encontrado que, para modelos generalizados de Herschel-Bulkley que incluyen el tercer invariante en la ecuación constitutiva, la relación entre los esfuerzos de cedencia extensional y corte representa una constante dependiente de un parámetro relacionado a la influencia de III_D (Martinie et al., 2013). Con esta evidencia, se ha incluido el tercer invariante en un criterio que generalice el criterio de von Mises (Sica et al., 2020; Cazacu, 2004) de la siguiente manera:

$$J_2^{3/2} - cJ_3 = \tau_y^3, \quad (27)$$

donde, $J_2 = \frac{tr(\sigma_d \cdot \sigma_d)}{2}$ es el segundo invariante del tensor de esfuerzos y $J_3 = \frac{tr(\sigma_d \cdot \sigma_d \cdot \sigma_d)}{3}$ es el tercer invariante del mismo; finalmente τ_y representa el esfuerzo de cedencia.

Así, la manera de identificar la zona plástica y la zona fluidizada, resulta:

$$\begin{cases} \sqrt{J_2} - c\sqrt[3]{J_3} \geq k_3 & \text{Material cediendo} \\ \sqrt{J_2} - c\sqrt[3]{J_3} < k_3 & \text{Material sin ceder} \end{cases}$$

Nuevamente, se considera la constante k_3 como un valor relacionado al esfuerzo de cedencia de la sustancia evaluada, y se introduce un parámetro c que representa la contribución del tercer invariante al fenómeno de cedencia. Este parámetro se estima de manera experimental, obteniendo resultados de cedencia en una extensión controlada (Sica et al., 2020).

Este nuevo criterio ha sido probado contra datos experimentales para una extensión planar con resultados positivos para varias sustancias que presentan viscoelastoplasticidad (masilla, geles para el cabello, y pasta de soldadura; Sica et al., 2020).

2.5.3 Criterio del segundo invariante.

Otro criterio de cedencia regularmente utilizado para el cálculo de frentes de flujo en flujos complejos de materiales viscoplásticos y viscoelastoplásticos es aquel basado en el segundo invariante del tensor de esfuerzos, i.e. $II_{\tau_p} = \sqrt{\frac{1}{2}tr(\tau_p \cdot \tau_p)}$ (Lopez-Aguilar et al., 2018; López-Aguilar et al., 2021).

El efecto de plasticidad será observable cuando se traten mezclas concentradas, por lo que la importancia del componente del tensor asociado a la parte newtoniana en una formulación de esfuerzos separados en contribuciones de soluto (viscoelástico) y solvente (newtoniano) puede despreciarse y considerar lo siguiente (López-Aguilar, 2018):

$$\begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p \cdot \boldsymbol{\tau}_p)} \geq k_4, & \text{Material cediendo,} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p \cdot \boldsymbol{\tau}_p)} < k_4, & \text{Material sin ceder,} \end{cases}$$

donde $\boldsymbol{\tau}_p$ representa el tensor de esfuerzos del soluto, y k_4 nuevamente es el esfuerzo de cedencia.

El fundamento de este criterio de cedencia radica en la mecánica de medios continuos, donde el valor del segundo invariante representa la magnitud de un tensor y, por ello, una medida que puede ser comparada contra τ_y , considerando todos los componentes del tensor en una sola variable escalar.

2.6 Cálculo de criterios para una geometría cilíndrica

El tensor de esfuerzos del soluto $\boldsymbol{\tau}_p$ en coordenadas cilíndricas y flujo irrotacional es:

$$\boldsymbol{\tau}_p = \begin{pmatrix} \tau_{zz} & \tau_{rz} & 0 \\ \tau_{rz} & \tau_{rr} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{\theta\theta} \end{pmatrix}$$

En primera instancia, se puede definir el tensor de esfuerzos como una contribución del efecto hidrostático y un tensor debido al movimiento de la siguiente manera (López-Aguilar et al., 2018; López-Aguilar et al., 2021):

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}. \quad (28)$$

Se sabe que el esfuerzo deviatorico se expresa como:

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma})\mathbf{I}. \quad (29)$$

Aplicando la primera definición se sustituye y se aprecia lo siguiente:

$$\boldsymbol{\sigma}_d = -p\mathbf{I} + \mathbf{T} - \frac{1}{3}tr(-p\mathbf{I} + \mathbf{T})\mathbf{I} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T} + p\mathbf{I} - \frac{1}{3}tr(\mathbf{T})\mathbf{I}, \quad (30)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \mathbf{T} - \frac{1}{3}tr(\mathbf{T})\mathbf{I} = \mathbf{T}_d. \quad (31)$$

Si se expresa el tensor de esfuerzos total en la suma de sus contribuciones de soluto y solvente:

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p. \quad (32)$$

Sustituyendo la Ec. (32) en (31):

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p)\mathbf{I}, \quad (33)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\tau}_p)\mathbf{I}. \quad (34)$$

Se puede calcular el criterio de von Mises de la siguiente manera:

$$\sqrt{\frac{1}{2}tr(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d)} = \sqrt{\frac{1}{2}tr \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\tau}_p)\mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\tau}_p)\mathbf{I} \right) \right]}, \quad (35)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} \geq k_2, \quad \text{Material cediendo,} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} < k_2, \quad \text{Material sin ceder,} \end{array} \right.$$

Sin embargo, la expresión para el criterio de von Mises en soluciones concentradas puede simplificarse si se desprecia la contribución del solvente en la cedencia del fluido de la siguiente forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} \geq k_2, \quad \text{Material cediendo,} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} < k_2, \quad \text{Material sin ceder,} \end{array} \right.$$

Asimismo, para el criterio de cedencia de Sica et al. (Sica et al., 2020, Cazacu et al., 2004) se puede obtener una expresión para el frente de cedencia, partiendo de las expresiones del segundo y tercer invariante del tensor de esfuerzos deviatorico:

$$J_2 = \frac{1}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d), \quad (36)$$

$$J_3 = \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d). \quad (37)$$

Si se sustituye la expresión del tensor de esfuerzo deviatorico, se obtiene lo siguiente:

$$J_2 = \frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right], \quad (38)$$

$$J_3 = \frac{1}{3} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]. \quad (39)$$

Dejando la expresión correspondiente para establecer el criterio de una forma compleja:

$$\sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} - \frac{c}{3} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} \geq k_4, \quad \text{Material cediendo,}$$

$$\sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} - \frac{c}{3} \text{tr} \left[\left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) \mathbf{I} \right) \right]} < k_4, \quad \text{Material sin ceder.}$$

Para la geometría axisimétrica que nos ocupa:

$$\text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p) = \tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}, \quad (40)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_d = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p - \frac{1}{3} (\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) \mathbf{I}, \quad (41)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_d = 2\beta \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{12} & D_{22} & D_{23} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tau_{zz} & \tau_{rz} & 0 \\ \tau_{rz} & \tau_{rr} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{\theta\theta} \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz} & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz} \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Dado que el esfuerzo de cedencia se presenta usualmente en soluciones concentradas, se puede aproximar la expresión del esfuerzo deviatorico despreciando la contribución del solvente y se puede establecer la siguiente forma del mismo:

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \begin{pmatrix} \tau_{zz} - \frac{1}{3} (\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) & \tau_{rz} & 0 \\ \tau_{rz} & \tau_{rr} - \frac{1}{3} (\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3} (\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) \end{pmatrix}. \quad (43)$$

La definición de los esfuerzos normales en esta geometría es:

$$N_1 = \tau_{zz} - \tau_{rr}, \quad (44)$$

$$N_2 = \tau_{rr} - \tau_{\theta\theta}. \quad (45)$$

Analizamos componente por componente, empezando por el componente zz :

$$\tau_{zz} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{2}{3}\tau_{zz} - \frac{1}{3}\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}\tau_{rr}, \quad (46)$$

$$\tau_{zz} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(\tau_{zz} - \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz} - \tau_{rr}) \quad (47)$$

$$\tau_{zz} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(\tau_{zz} - \tau_{rr} + \tau_{rr} - \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz} - \tau_{rr}), \quad (48)$$

$$\tau_{zz} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(2N_1 + N_2). \quad (49)$$

Se aplica un análisis similar para el componente rr :

$$\tau_{rr} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{2}{3}\tau_{rr} - \frac{1}{3}\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}\tau_{zz}, \quad (50)$$

$$\tau_{rr} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(\tau_{rr} - \tau_{zz} + \tau_{rr} - \tau_{\theta\theta}), \quad (51)$$

$$\tau_{rr} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(N_2 - N_1). \quad (52)$$

Finalmente, se realiza para el componente $\theta\theta$:

$$\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{2}{3}\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}\tau_{zz} - \frac{1}{3}\tau_{rr}, \quad (53)$$

$$\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(\tau_{\theta\theta} - \tau_{rr} - \tau_{zz} + \tau_{\theta\theta}), \quad (54)$$

$$\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(\tau_{\theta\theta} - \tau_{rr} - \tau_{zz} + \tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} - \tau_{rr}), \quad (55)$$

$$\tau_{\theta\theta} - \frac{1}{3}(\tau_{rr} + \tau_{\theta\theta} + \tau_{zz}) = \frac{1}{3}(-2N_2 - N_1) = -\frac{1}{3}(2N_2 + N_1), \quad (56)$$

Sustituyendo estos resultados en el tensor de esfuerzos deviatorico:

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(2N_1 + N_2) & \tau_{rz} & 0 \\ \tau_{rz} & \frac{1}{3}(N_2 - N_1) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}(2N_2 + N_1) \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Al obtener el primer producto interior, se obtiene lo siguiente:

$$\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d = \begin{pmatrix} \frac{1}{9}(2N_1 + N_2)^2 + \tau_{rz}^2 & \frac{\tau_{rz}}{3}(2N_2 + N_1) & 0 \\ \frac{\tau_{rz}}{3}(2N_2 + N_1) & \frac{1}{9}(N_2 - N_1)^2 + \tau_{rz}^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{9}(2N_2 + N_1)^2 \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Una vez obtenido el valor del producto interior del esfuerzo deviatorico, se procede a obtener su segundo invariante con base en la traza:

$$tr(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d) = 2\tau_{rz}^2 + \frac{2}{3}[N_1^2 + N_2N_1 + N_2^2]. \quad (59)$$

Teniendo en cuenta esta expresi3n, se puede obtener el segundo invariante:

$$J_2 = \frac{1}{2}tr(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d) = \tau_{rz}^2 + \frac{1}{3}[N_1^2 + N_1N_2 + N_2^2]. \quad (60)$$

Con la definici3n anterior, el criterio de von Mises se reduce a la siguiente expresi3n utilizada con los t3rminos expuestos anteriormente:

$$\begin{cases} \sqrt{J_2} \geq k_3 & \text{Zona fluidizada} \\ \sqrt{J_2} < k_3 & \text{Zona plástica} \end{cases}$$

Para poder introducir el criterio de Sica et al. (Sica et al., 2020) se requiere obtener el tercer invariante:

$$\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d =$$

$$\left(\begin{array}{ccc} \frac{1}{27}(2N_1 + N_2)^3 + \tau_{rz}^2(N_1 + N_2) & \frac{\tau_{rz}}{9}[(2N_2 + N_1)(N_2 - N_1) + (2N_1 + N_2)^2] + \tau_{rz}^3 & 0 \\ \frac{\tau_{rz}}{9}[(2N_2 + N_1)(2N_1 + N_2) + (N_2 - N_1)^2] + \tau_{rz}^3 & \frac{1}{27}(N_2 - N_1)^3 + \tau_{rz}^2 N_2 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{27}(2N_2 + N_1)^3 \end{array} \right)$$

(61)

Nuevamente se obtiene la traza del sistema:

$$tr(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d) = \tau_{rz}^2(N_1 + 2N_2) + \frac{3}{27}[2N_1^3 + 3N_2N_1^2 - 2N_2^3 - 3N_2^2N_1]. \quad (62)$$

Por lo que la definición del tercer invariante resulta:

$$J_3 = \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\sigma}_d) = \frac{\tau_{rz}^2}{3}(N_1 + 2N_2) + \frac{1}{27}[2N_1^3 + 3N_2N_1^2 - 2N_2^3 - 3N_2^2N_1]. \quad (63)$$

Con esta definición y la ya deducida del segundo invariante, el criterio de Sica, se reduce a la siguiente forma:

$$\begin{cases} \sqrt{J_2} - c^3\sqrt{J_3} \geq k_2, & \text{Material cediendo,} \\ \sqrt{J_2} - c^3\sqrt{J_3} < k_2, & \text{Material sin ceder,} \end{cases}$$

Para determinar el valor del parámetro c se se utilizan datos experimentales del comportamiento de ciertos fluidos viscoelastoplásticos en distintas extensiones (Sica et al., 2020).

Para ejemplificar la forma en la que se obtiene el valor del parámetro c se considerará una extensión uniaxial. Para ello cabe recordar que una extensión uniaxial posee un tensor rapidez de deformación asociado que se representa de la siguiente forma:

$$\mathbf{D} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (64)$$

Del cual se deduce que:

$$\sigma_{11} = 2\eta_{Ext}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \sigma_{22} = \sigma_{33} = -\eta_{Ext}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (65)$$

Al observar este comportamiento en el flujo extensional, queda en evidencia que, al conocer el comportamiento en la primera direcci3n, se puede deducir el tensor de esfuerzos asociado. Aplicando este principio en el punto de cedencia:

$$\boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} \sigma_{11y} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\sigma_{11y} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\sigma_{11y} \end{pmatrix}. \quad (66)$$

Con esta informaci3n, y ocupando un esfuerzo de cedencia de referencia en alguna otra deformaci3n (i.e. extensi3n planar; Sica et al., 2020) o el esfuerzo de cedencia del fluido:

$$J_2^{3/2} - cJ_3 = (\tau_y)^3, \quad (67)$$

$$c = \frac{J_2^{3/2} - (\tau_y)^3}{J_3}. \quad (68)$$

Donde el valor de los invariantes resulta de:

$$J_2 = \frac{\sigma_{11y}^2 + \left(-\frac{1}{2}\sigma_{11y}\right)^2 + \left(-\frac{1}{2}\sigma_{11y}\right)^2}{2}, \quad (69)$$

$$J_3 = \frac{\sigma_{11y}^3 + \left(-\frac{1}{2}\sigma_{11y}\right)^3 + \left(-\frac{1}{2}\sigma_{11y}\right)^3}{2}. \quad (70)$$

Para modelos o fluidos altamente elásticos y responsivos a la extensión se puede considerar un valor de la primera diferencia de esfuerzos normales en extensión como aproximación al esfuerzo de cedencia en la dirección principal:

$$\sigma_{11y} \approx N_{1y}. \quad (71)$$

El valor de N_{1y} se obtiene de manera análoga al caso del esfuerzo de cedencia; es decir, con el valor en el que existe un cambio abrupto del comportamiento de la propiedad con respecto a la rapidez de deformación. Es por ello que, con las curvas de flujo, por ejemplo aquéllas en la Figura 2.5, se pueden obtener los valores para las distintas fracciones de solvente.

2.7 Problema del alto número de Weissenberg y estabilización del sistema

En Reología Computacional al tratar de fluidos viscoelásticos, las simulaciones se han encontrado con un problema: El Problema del alto número de Weissenberg (high-Weissenberg number problem, HWNP, por sus siglas en inglés), el cual representa una pérdida de convergencia cuando existe una relativamente fuerte contribución viscoelástica no lineal (Wi o De altos; Owens & Phillips, 2002). La causa de esta divergencia en las simulaciones se puede deber tanto a limitaciones en el modelo empleado como a errores de aproximación numérica (Owens & Phillips, 2002). Al máximo valor de Wi o De para el que existe una solución estable se le conoce como Wi o De crítico, y será específico para un fluido en ciertas condiciones de flujo, configuración espacial, modelo constitutivo que lo represente y algoritmo de solución.

Al intentar incrementar el valor del De crítico se han buscado nuevas alternativas de solución que emplean métodos numéricos más robustos, como en la familia de modelos BMP (López-Aguilar et al., 2014; López-Aguilar et al., 2015; López-Aguilar et al., 2018) para los cuales se han implementado correcciones en la ecuación constitutiva (ABS-f) y condiciones de frontera complementarias que ayudan a la estabilización del sistema (VGR) (López-Aguilar et al., 2015).

La corrección ABS-f permite la regularización del sistema ya que proporciona una mejor estimación del parámetro de estructura interna (f), obteniendo resultados que siguen la Segunda Ley de la Termodinámica. Esta corrección se identifica como la función valor absoluto aplicada al funcional de estructura, y ha sido empleada a través de la traza del tensor polimérico en modelos como Phan-Thien-Tanner (PTT) y elástico no lineal finamente extensible (FENE, por sus siglas en inglés; López-Aguilar et al., 2015). Además, en la familia de modelos BMP, la corrección ABS-f se expresa en la función de disipación, alcanzando un incremento de hasta tres órdenes de magnitud en el Wi_{crit} (López-Aguilar et al., 2016 y 2016).

Por otra parte, la corrección VGR considera una extensión uniaxial no homogénea en la línea central por medio de los componentes del gradiente de velocidad. Asimismo, se propone una condición de conservación de masa que se cumple de manera discreta a lo largo de todo el dominio del flujo (López-Aguilar et al., 2015, 2016 y 2018). Esta corrección en las condiciones de frontera previene la proliferación de errores de discretización numéricos. Corrige los errores originados

por la evolución de la solución en la línea de simetría y su amplificación por el incremento de la no linealidad a través del aumento del flujo volumétrico.

Asimismo, el proceso de la solución del sistema sigue un protocolo de incremento de flujo (Q), en el cual las soluciones se obtienen incrementando esta variable. Para asegurar una correcta implementación de las condiciones a la frontera, se realiza un procedimiento de retroalimentación de las soluciones. Se utiliza la información de un paso previo en el proceso de incremento de flujo como entradas del paso siguiente.

Finalmente, las condiciones a la frontera para el flujo alrededor de esferas corresponden con un flujo completamente desarrollado lejos del obstáculo con una velocidad constante U , y condición de adherencia en la superficie. Además, se considera que la pared del tubo se mueve también con la velocidad U . De esta forma, el sistema asemeja al descenso de la esfera en un fluido sin movimiento, pero manteniendo a la esfera en un sistema de referencia Euleriano que experimenta el flujo del fluido sobre su superficie.

2.8 Algoritmo numérico

Para la obtención de simulaciones se ha utilizado un método híbrido de elementos finitos y volúmenes finitos, que genera soluciones en valores relativamente altos de De (Webster et al. 2005; López-Aguilar et al., 2014; López-Aguilar et al., 2015; López-Aguilar et al., 2018).

La discretización híbrida de elementos finitos (ecuación de balance de cantidad de movimiento y ecuación de balance de masa) y volúmenes finitos (ecuación

constitutiva) se encuentra embebida en un esquema de pasos fraccionados en el tiempo, en donde se aproxima la solución de la ecuación de balance de cantidad de momentum y la ecuación constitutiva, para después corregir la velocidad a través del cumplimiento de la ecuación de continuidad. La convergencia de este esquema numérico es cuadrática. Mayores detalles sobre el algoritmo numérico pueden encontrarse en Webster (2005), López-Aguilar et al. (2014), López-Aguilar et al. (2015) y López-Aguilar et al. (2018). La Figura 2.6 muestra las principales zonas del proceso de simulación, así como la malla empleada para el método numérico de este trabajo.

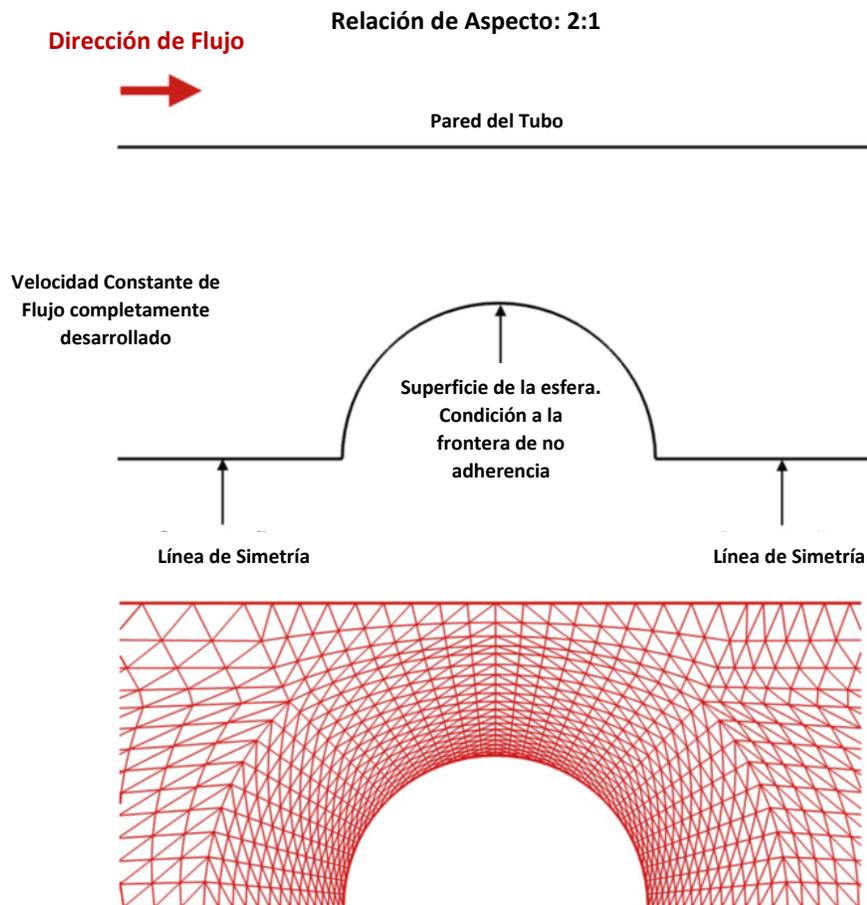


Figura 2.6. Esquema de simulación; Principales zonas y malla de elementos finitos.

3. HIPÓTESIS, JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS

En esta sección se abordarán las hipótesis, la justificación y los objetivos de este trabajo de Tesis.

3.1 Hipótesis

Las soluciones micelares de tipo gusano despliegan fenómenos reológicos de interés: i.e. cauda negativa (McKinley, 2002; Mohammadigoushki & Rothstein, 2020), oscilaciones transitorias en la velocidad de sedimentación (Jayaraman & Belmonte, 2003), adelgazamiento al corte, engrosamiento/adelgazamiento a la extensión (López-Aguilar et al., 2018; Resendiz-Tolentino, 2019). Los modelos usados para estos sistemas han ido evolucionando en versiones cada vez más sofisticadas, partiendo desde el modelo BMP (Manero et al., 2007) hasta modelos más recientes como el modelo NM_{τ_p} (López-Aguilar et al., 2015, López-Aguilar et al., 2015b) o el modelo $BMP+_{\tau_p}$ (López-Aguilar et al., 2018), probando la consistencia de este último en flujos en contracción con bordes redondeados y filosos (López-Aguilar et al., 2018), así como un estudio inicial en un sistema de flujo alrededor de esferas (Resendiz-Tolentino, 2019).

Entonces, la hipótesis principal de este trabajo es:

- El modelo $BMP+_{\tau_p}$, al ser explorado en su régimen viscoelástico a través de: el efecto de engrosamiento a la extensión (strain-hardening), la evolución del coeficiente de arrastre, el aumento del flujo volumétrico aplicado (número de Débora) y su desempeño respecto a otro modelo viscoelástico (EPTT), así como en su régimen plástico, por medio de los

frentes de cedencia y el esfuerzo de cedencia aparente, mostrará consistencia, y proporcionará un progreso en la descripción y entendimiento de la reología de fluidos micelares de tipo gusano en el flujo alrededor de una esfera confinada en un tubo cilíndrico.

Las hipótesis particulares son:

- El modelo $BMP+_{\tau_p}$ es consistente en el campo de N_1 del flujo complejo con los resultados de deformaciones simples (flujo cortante simple y flujo extensional uniaxial).
- El modelo $BMP+_{\tau_p}$ también reproduce el efecto de engrosamiento/adelgazamiento a la extensión al incrementar la rapidez de deformación en un flujo complejo.
- El perfil del parámetro de estructura f proporcionará un acercamiento a la comprensión de los fenómenos en la zona posterior de la esfera (cauda).
- En contraste con el modelo EPTT, el modelo $BMP+_{\tau_p}$ presentará respuestas con mayor afinidad a la fenomenología del flujo alrededor de esferas de soluciones micelares de tipo gusano.

3.2 Justificación

Este trabajo explora al modelo $BMP+_{\tau_p}$ en un sistema típico que posee múltiples aplicaciones, i.e. flujo de materiales tixotrópicos-viscoelastoplásticos alrededor de una esfera confinada en un canal cilíndrico, con el fin de investigar la fenomenología de flujo en la cauda del obstáculo, el coeficiente de arrastre, el campo de flujo a través de esfuerzos normales y frentes de flujo a través de un estudio sistemático

de reología computacional utilizando un algoritmo híbrido de elementos finitos/volúmenes finitos. Materiales tixoviscoelastoplásticos son ampliamente estudiados de manera experimental (Mohammadigoushki & Muller, 2016; Zhang & Muller, 2019; Holenberg et al., 2012; Rothstein & Mohammadigoushki, 2020) y con importantes usos en la industria (Yang, 2002; Dreiss, 2007).

3.3 Objetivos

Los objetivos generales de este trabajo son:

- Comparar los efectos del engrosamiento a la extensión y el aumento en el flujo volumétrico (número de Débora) para el modelo $BMP+_{\tau_p}$, así como un contraste respecto a otro tipo de modelo viscoelástico (EPTT).
- Explorar el régimen plástico de flujo a través de frentes de cedencia considerando distintos criterios de cedencia (Sica et al. (2020), López-Aguilar et al. (2018), y von Mises (1928)).
- Analizar aspectos mecánicos por medio de campos de flujo (primera diferencia de esfuerzos normales, N_1), propiedades reológicas (viscosidad y fluidez) y aspectos energéticos (coeficientes de arrastre) dada la evolución de los niveles de flujo volumétrico (número de Débora) con un acercamiento al entendimiento del fenómeno físico.
- Explicar desde un punto de vista teórico computacional las observaciones experimentales de frentes de cedencia reportados en la literatura para fluidos tixoviscoelastoplásticos (Holenberg et al., 2012).

4. RESULTADOS Y ANÁLISIS

En este capítulo se analizarán los resultados de las simulaciones numéricas realizadas en dos principales secciones. Por un lado, se analizarán las simulaciones en donde prevalezca el comportamiento viscoelástico; por el otro, se observarán aquéllas en las que el régimen plástico sea el más importante.

El desarrollo del trabajo se basa en un procedimiento de análisis de incrementos de flujo volumétrico, que se correlaciona con el número de Débora. Se empieza de valores pequeños como $De = 0.1$ y se va ascendiendo hasta llegar a un valor de De crítico (véase Capítulo 2). Con este procedimiento se aprovecha la información de una simulación inicial para dar lugar a una mejor convergencia de la solución subsecuente.

4.1 Régimen Viscoelástico

Se considera como régimen viscoelástico cuando se emplean valores relativamente altos de De , así como en fracciones de solvente de soluciones no concentradas ($\beta \geq 1/9$). Cabe destacar que en esta sección se explorarán los efectos del engrosamiento a la extensión (strain-hardening) y del aumento del flujo volumétrico a través del De . Esto se estudia a través de propiedades como f y N_1 . Finalmente, se realiza un contraste con otro modelo viscoelástico (modelo EPTT; Phan-Thien, 1978).

4.1.1 Efecto del nivel de engrosamiento a la extensión

Como se explicó en el Capítulo 2, existen varios niveles de engrosamiento a la extensión reproducidos a través de la modificación de los parámetros más

importantes del modelo $BMP+_{-\tau_p}$. En las siguientes soluciones numéricas ilustradas con los distintos casos de engrosamiento se analizan propiedades significativas (f y N_1).

En particular se contrastarán los resultados reportados para los casos en la Tabla 4.1.

Tabla 4.1 *Simulaciones contrastadas para el engrosamiento a la extensión*

Caso 1		Caso 2	
$\beta = 1/9$		$\beta = 0.5$	
$De = 6$		$De = 2$	
NH	MH	MH	SH

Como primer análisis se emplean los resultados para un fluido con una fracción de solvente $\beta = \frac{1}{9}$, ya que representa una solución concentrada donde predominan los efectos del soluto viscoelástico (fluido micelar). Además, es un valor empleado en otros trabajos de simulación (Tammadon-Jahromi et al., 2011; López-Aguilar et al., 2018, López-Aguilar et al., 2015; Owens & Phillips, 2002) como punto de referencia. Adicionalmente, las simulaciones analizadas son contrastadas a un $De = 6$, debido a que la primera diferencia de esfuerzos normales alcanza un mayor valor en su máximo global respecto a otros flujos (De).

La primera propiedad analizada es N_1 en dos tipos de fluidos: NH y MH, tal y como se explicó en el Capítulo 2; un caso es un fluido no engrosante y el otro con un engrosamiento moderado. Los resultados son expuestos en la Fig. 4.1.

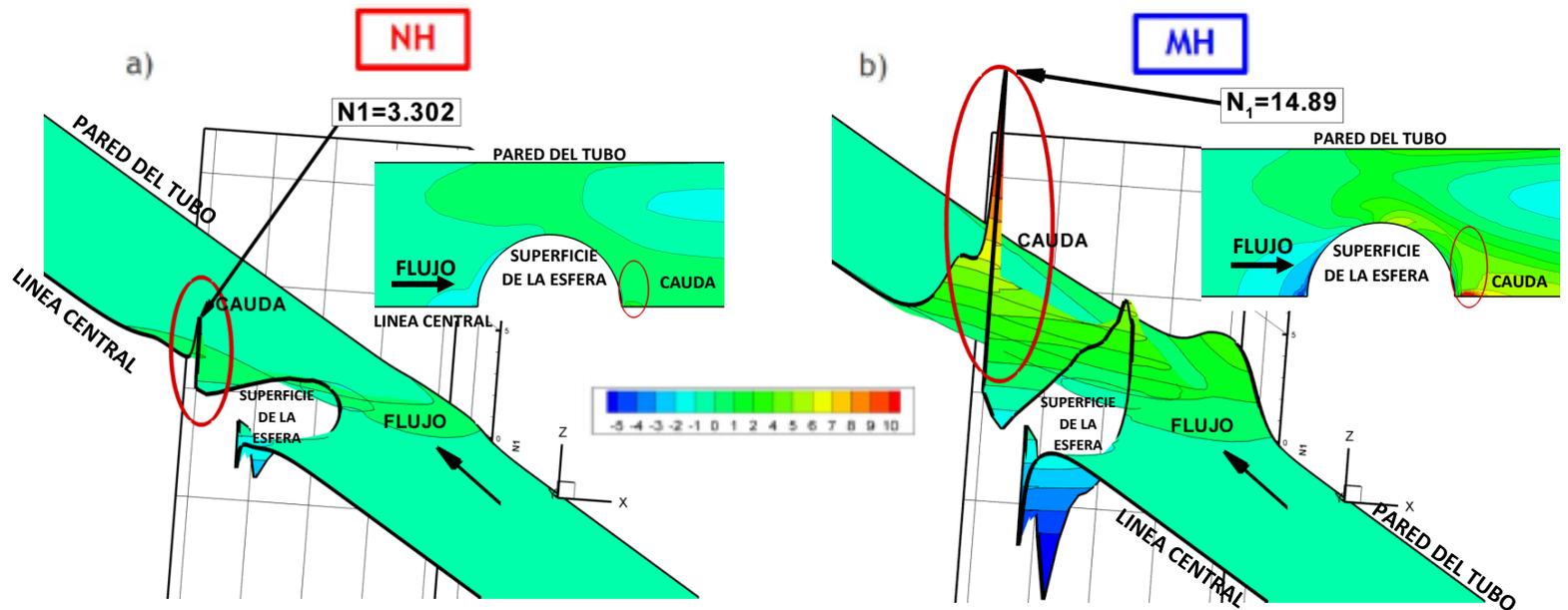


Figura 4.1 Perfil N_1 a) NH b) MH; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 6$

La Fig. 4.1 hace especial énfasis en la parte posterior de la esfera debido al perfil obtenido en esa región. Se observa que la primera diferencia de esfuerzos normales presenta máximos globales en esa área. Un fluido NH genera un pico con un valor relativamente menor sobre el resto del perfil, mientras que para el fluido MH existe una respuesta relativamente más pronunciada en esa locación. Estos resultados son acordes al comportamiento en extensión uniaxial, donde MH presenta un pico en la viscosidad extensional mayor a aquélla del fluido NH (Fig. 2.1).

El valor máximo de N_1 incrementa poco más de 3 veces al aumentar el engrosamiento y se encuentra en la línea central en la región de la cauda. Los resultados también muestran que el perfil presenta modificación en otras regiones, como en la superficie de la esfera, en la cual surge un incremento en la respuesta de N_1 .

Otra propiedad analizada es el parámetro de estructura (f) bajo las mismas condiciones de la Fig. 4.1.

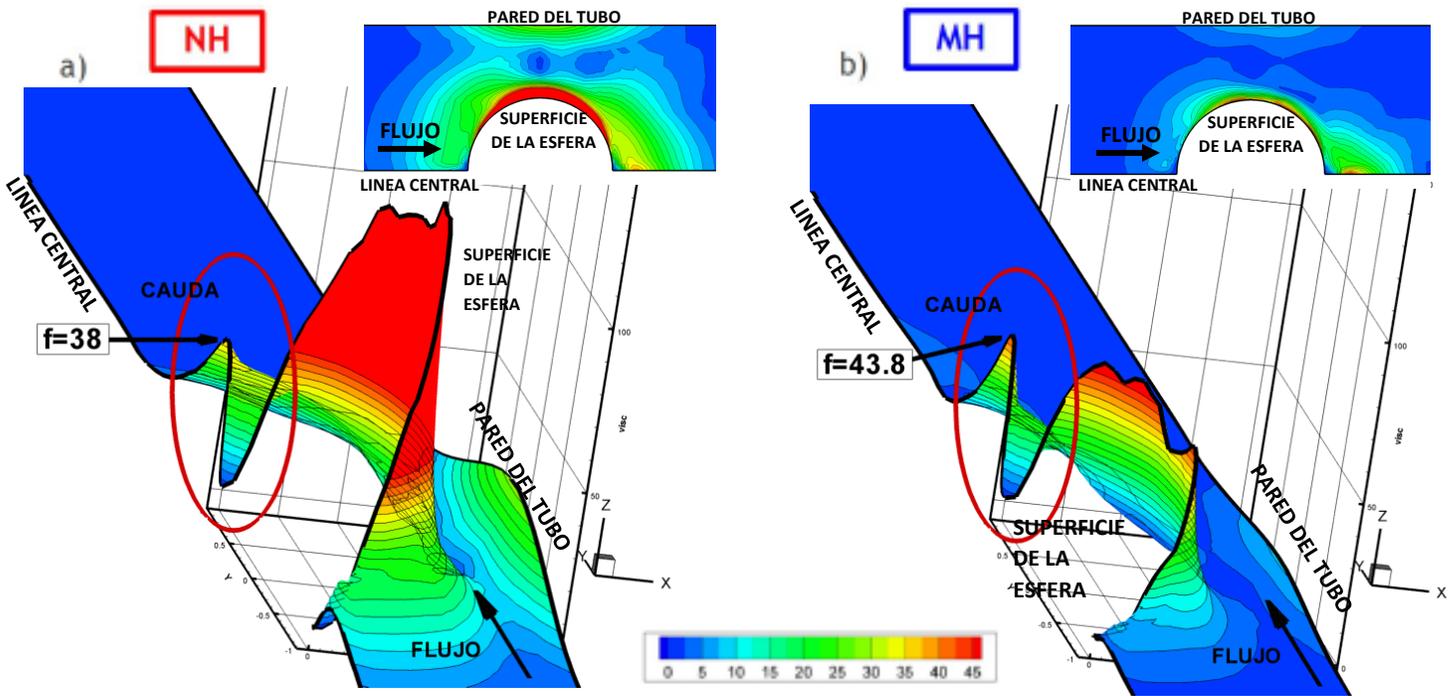


Figura 4.2 Perfil f a) NH b) MH; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 6$

En la Fig. 4.2, en la región de la cauda, existe un máximo en f en la línea central que se correlaciona directamente con lo ocurrido en el perfil de N_1 . Se observa un incremento súbito en la cauda junto a un mínimo (efecto *overshoot-undershoot*). Además, esta característica se incrementa al aumentar el nivel de engrosamiento.

La relación entre los máximos locales de ambas propiedades se debe a que f depende del tipo de deformación y su intensidad. En este caso, y como se observó en la Fig.4.1, ambos máximos son causados por una extensión uniaxial heterogénea que desencadena una respuesta en la viscosidad extensional η_{Ext} . Es decir, se genera una extensión uniaxial y el fluido responde con un incremento en su viscosidad acorde a sus características reológicas, que desaparece al alejarse de la esfera.

También se puede ver que en la superficie de la esfera existe una región de máximos globales para ambos casos. Hay una notable disminución en los valores del parámetro de estructura f (en este modelo, una fluidez adimensional) de esta región para el fluido MH, debido a que este fluido presenta fluideces menores para NH a niveles equivalentes de rapidez de deformación (ver Fig. 2.1).

El análisis de estas propiedades se completa en esta sección con un estudio de la evolución de los coeficientes de arrastre. En la Fig. 4.3 se ilustran los factores de arrastre adimensional de los dos fluidos: NH y MH. El factor de arrastre de referencia es aquel para el caso newtoniano evaluado en el mismo nivel de flujo volumétrico.

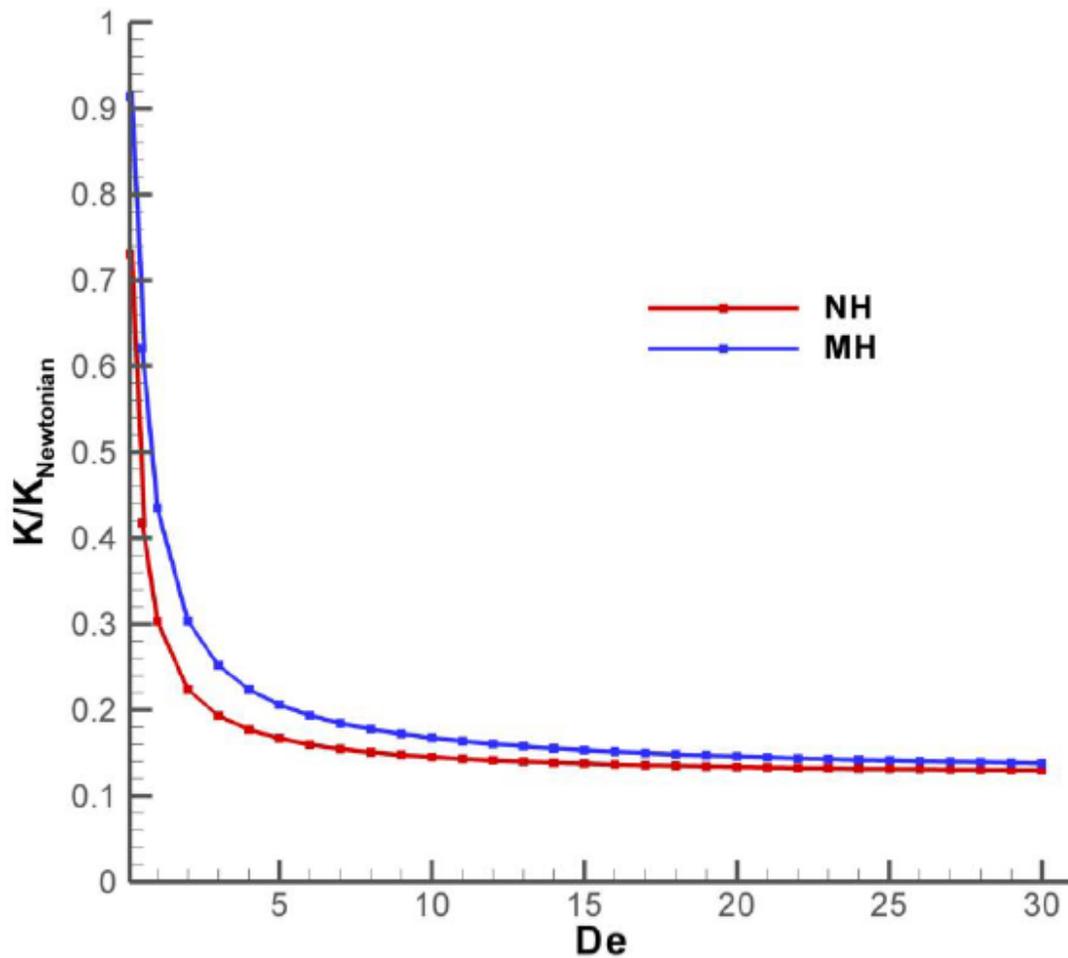


Figura 4.3 Coeficiente de arrastre respecto al aumento de De ; NH vs MH, $\beta = \frac{1}{9}$

Al analizar la evolución del coeficiente de arrastre con respecto al flujo volumétrico adimensional De para los dos fluidos, se observa una tendencia descendente hacia un valor al que convergen. Este valor corresponde a la fracción de solvente (β), en este caso $\beta = 1/9$. Finalmente, se cumplen con las características observadas en Tammadon-Jahromi et al. (2011), en donde al predominar una deformación fundamentalmente cortante no-homogénea sobre la esfera (Fig. 4.2),

el adelgazamiento al corte domina con un descenso monotónico en el coeficiente de arrastre.

Igualmente, se analiza el comportamiento de los máximos globales de N_1 en diferentes valores de De (Fig. 4.4). Estos valores se localizan siempre en la zona posterior de la esfera como se indicó en la Fig. 4.1 y muestran un comportamiento que sigue el de la viscosidad extensional. Es decir, a bajos De , N_{1max} aumenta conforme incrementa el flujo volumétrico, hasta un valor máximo (para MH: $De = 6$) a partir del cual desciende con el De .

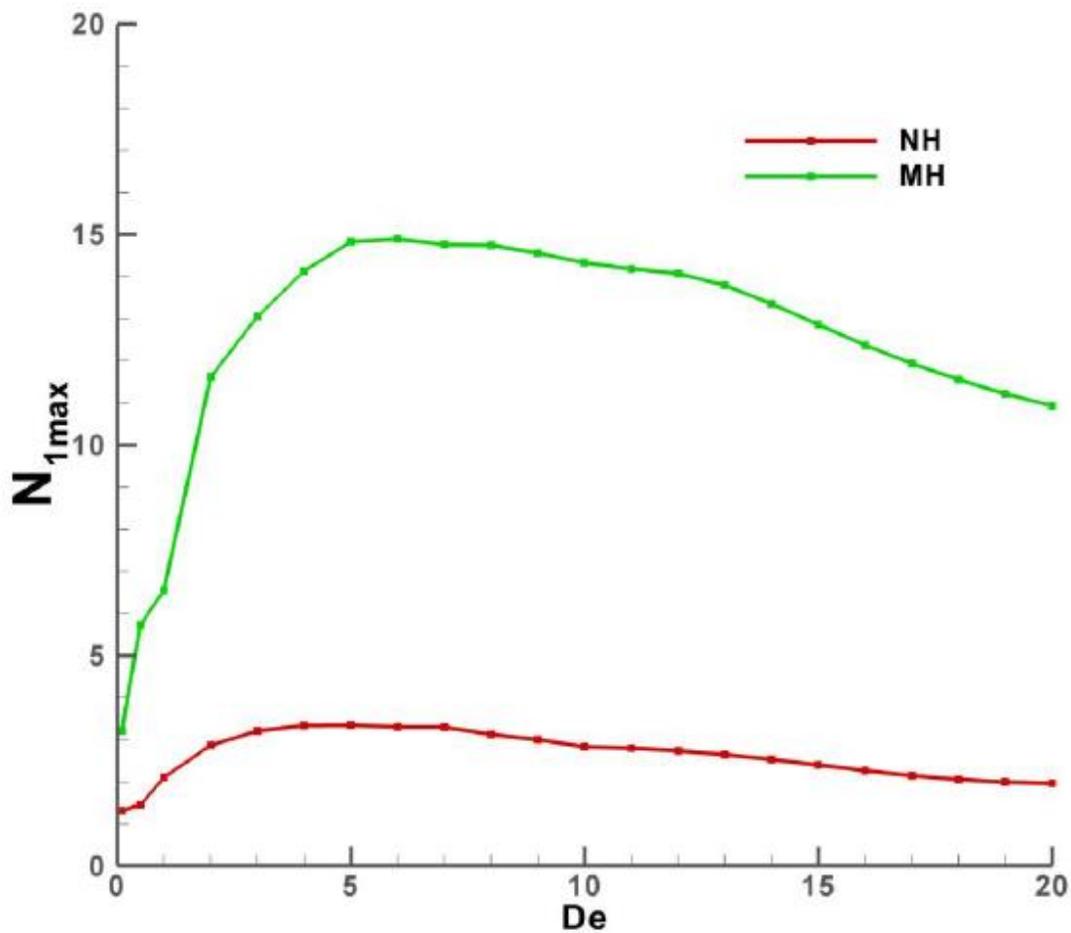


Figura 4.4 Máximos globales de N_1 respecto al aumento de De ; NH vs MH, $\beta = \frac{1}{9}$

Con toda esta fenomenología, podemos afirmar que sobre la superficie del obstáculo domina una deformación cortante no-homogénea que adelgaza la viscosidad y los esfuerzos normales con el aumento de De ; en la parte posterior de la esfera, la viscosidad extensional se manifiesta a través de la N_1 en la línea central, que sigue la tendencia de la viscosidad extensional (i.e. engrosamiento seguido de adelgazamiento a la extensión) por la deformación extensional no-homogénea detrás del obstáculo.

Por otro lado, en un segundo caso, se comparará un fluido SH con uno MH. Dada la complejidad provocada por la simulación de un fluido altamente engrosante a la extensión, es que se escoge una solución más diluida para contrastar ($\beta = 0.5$). Además, el valor de $De_{crit} = 2$ por lo que ese es el máximo valor para poder hacer la comparación (ver Tabla 4.2 para el historial de simulación).

Tabla 4.2 Máximos y mínimos de N_1 a distintas fracciones de solvente

De		N_1					
		$\beta = 1/9$		$\beta = 0.5$			$\beta = 0.9$
		NH	MH	NH	MH	SH	MH
1	Max	2.10	6.55	1.46	4.38	33.00	3.82
	Min	-1.81	-3.31	-1.34	-2.31	-4.84	-1.39
2	Max	2.87	11.62	2.01	8.41	55.23 ^e	5.69
	Min	-2.36	-4.43	-1.85	-3.76	-7.88	-1.55
3	Max	3.21	13.06	2.33	10.44		7.70
	Min	-2.58	-5.23	-2.10	-4.86		-1.89
4	Max	3.34	14.13	2.50	11.63		8.76
	Min	-2.63	-6.16	-2.28	-6.07		-2.31
5	Max	3.35	14.84	2.60	12.42		9.51
	Min	-2.81	-6.97	-2.28	-6.58		-2.54
10	Max	2.83	14.33	2.53	13.28		10.49
	Min	-3.13	-10.84	-2.45	-8.68		-2.92
15	Max	2.40	12.86	2.08	12.54		12.02
	Min	-2.50	-10.82	-2.51	-8.09		-3.50
20	Max	1.96	10.93	1.82	11.12		11.39
	Min	-3.11	-11.42	-1.86	-7.01		-5.53
25	Max	2.28	9.61	1.73	39.94 ^d		9.53
	Min	-2.62	-10.08	-3.88	-33.22		-6.85
30	Max	3.51	8.98 ^b	2.68			8.30
	Min	-2.05	-8.33	-2.89			-7.92
40	Max	1.66		6.69 ^c			6.58
	Min	-1.92		-10.50			-11.20
50	Max	8.99					5.31
	Min	-3.58					-18.32
60	Max	26.47					5.30
	Min	-7.98					-31.08
70	Max	2.50 ^a					5.26
	Min	-84.20					-49.21
80	Max						5.93 ^f
	Min						-41.36

^a $De_{crit} = 63$ (última estable; 64 solución oscilante sin converger a la tolerancia)

^b $De_{crit} = 29$ (última estable; 30 solución oscilante sin converger a la tolerancia)

^c $De_{crit} = 30$ (última estable; 31 solución oscilante sin converger a la tolerancia)

^d $De_{crit} = 21$ (última estable; 22 solución oscilante sin converger a la tolerancia)

^e $De_{crit} = 2$ (última estable; 3 diverge)

^f $De_{crit} = 80+$ (no se encontró limitación)

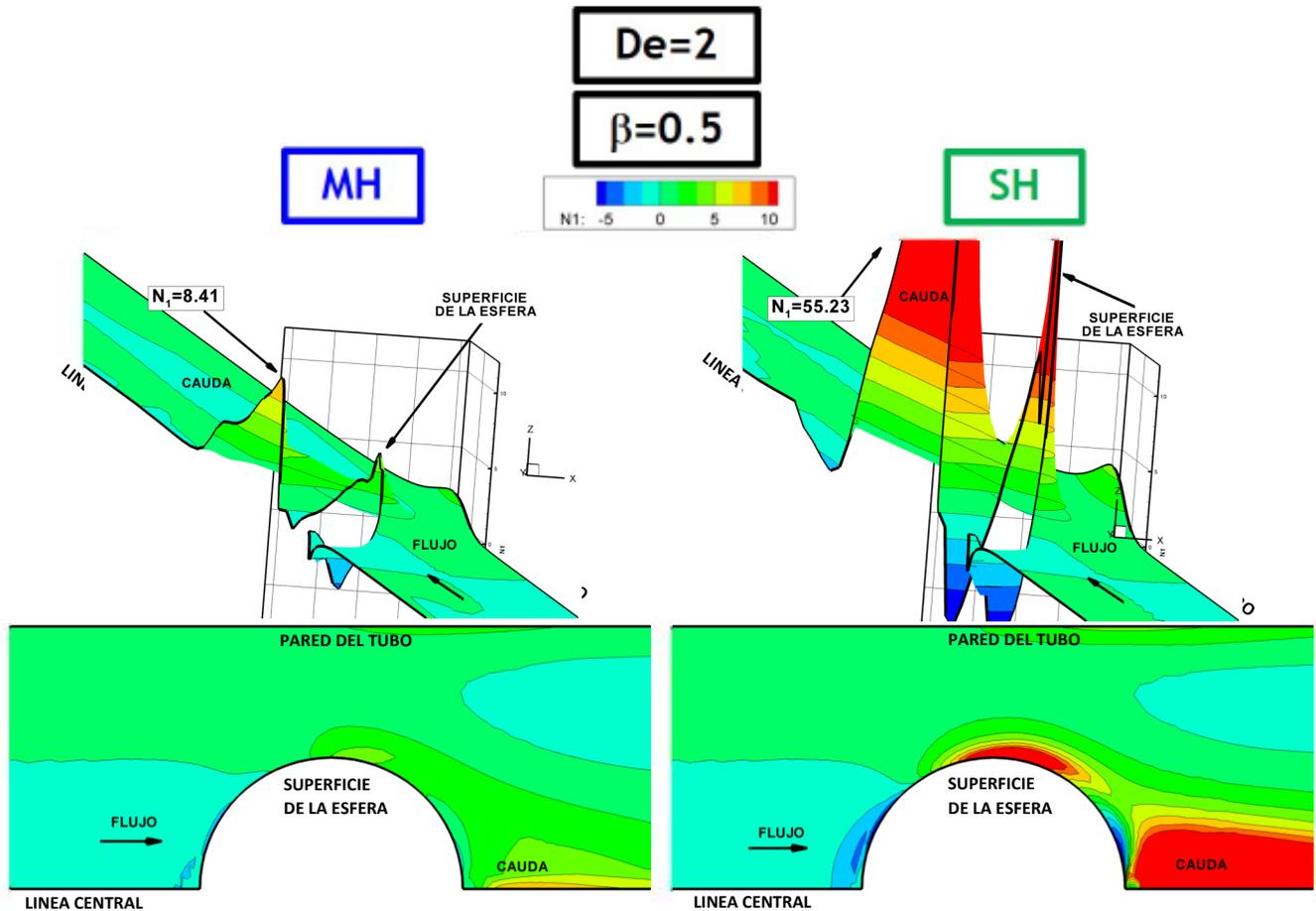


Figura 4.5 Perfil N_1 a) MH b) SH; $\beta = 0.5$; $De = 2$

La Fig. 4.5 reúne los resultados de simulación para la primera diferencia de esfuerzos normales. Se observa un cambio dramático en la región de la cauda. El pico en la línea central de la parte posterior de la esfera incrementa su valor casi 7 veces cuando el engrosamiento a la extensión se ve modificado de MH a SH. Estos resultados concuerdan con la respuesta de la viscosidad extensional en una extensión uniaxial (ver Capítulo 2, Fig. 2.1).

La región dónde se encuentran los máximos valores del perfil es menos localizada en el caso del fluido SH. Sin embargo, se preserva la región en la que se presenta el máximo global.

Se predice también un incremento de los valores en la superficie de la esfera debido a una deformación cortante en esa zona. Sin embargo, estos máximos locales nunca son mayores a los efectos de la cauda.

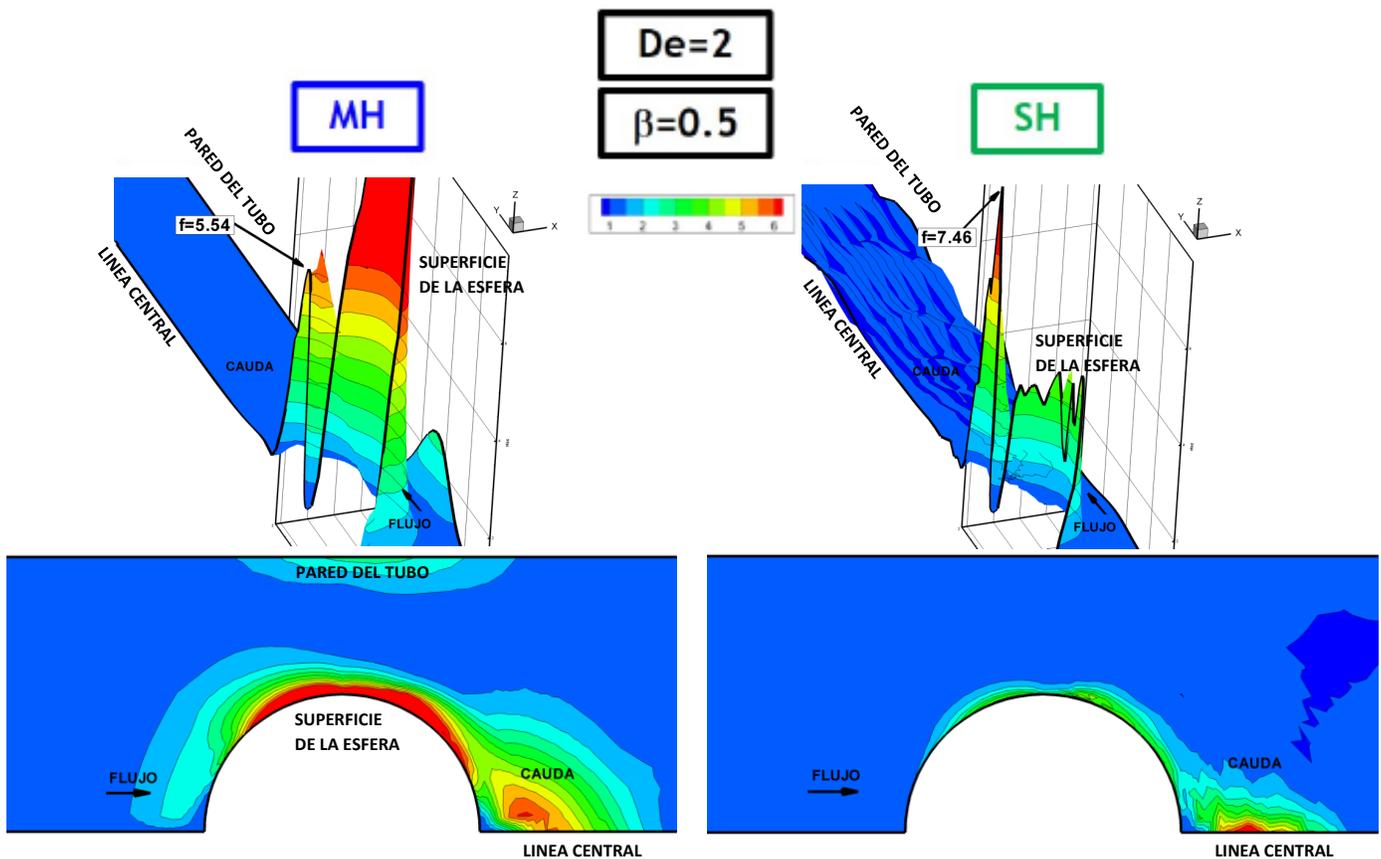


Figura 4.6 Perfil f a) NH b) MH; $\beta = 0.5$; $De = 2$

Al analizar el perfil de fluidez (Fig. 4.6) se observan varios aspectos importantes a destacar. En primera instancia, existe nuevamente una correlación entre máximos locales en la cauda para el perfil de N_1 y de f , debido a la extensión que sufre el

fluido en esa área. También se observa un efecto de *overshoot/undershoot* que se relaciona a la combinación de deformaciones que se suscitan en la superficie de la esfera y en la parte posterior.

También, el funcional f evidencia una tendencia menor a adelgazar para el caso SH (ver Fig. 2.1), ya que, en la superficie de la esfera para SH existe un máximo local menor en comparación con el caso MH.

En el perfil de SH se observa ruido en la zona posterior de la esfera que se debe principalmente a que se está trabajando en un De_{crit} .

Nuevamente, se reportan los coeficientes de arrastre en los casos correspondientes MH y SH. Se observa que la rapidez de descenso es menor a medida que incrementa la cualidad de engrosamiento a la extensión. Estos resultados verifican lo obtenido en una concentración mayor entre MH y NH, así como el adelgazamiento al corte que tiene el fluido en flujo cortante simple (véase Capítulo 2). Aunque no se poseen resultados para SH que sean superiores a $De = 2$, se puede verificar que se sigue el adelgazamiento al corte con los puntos obtenidos.

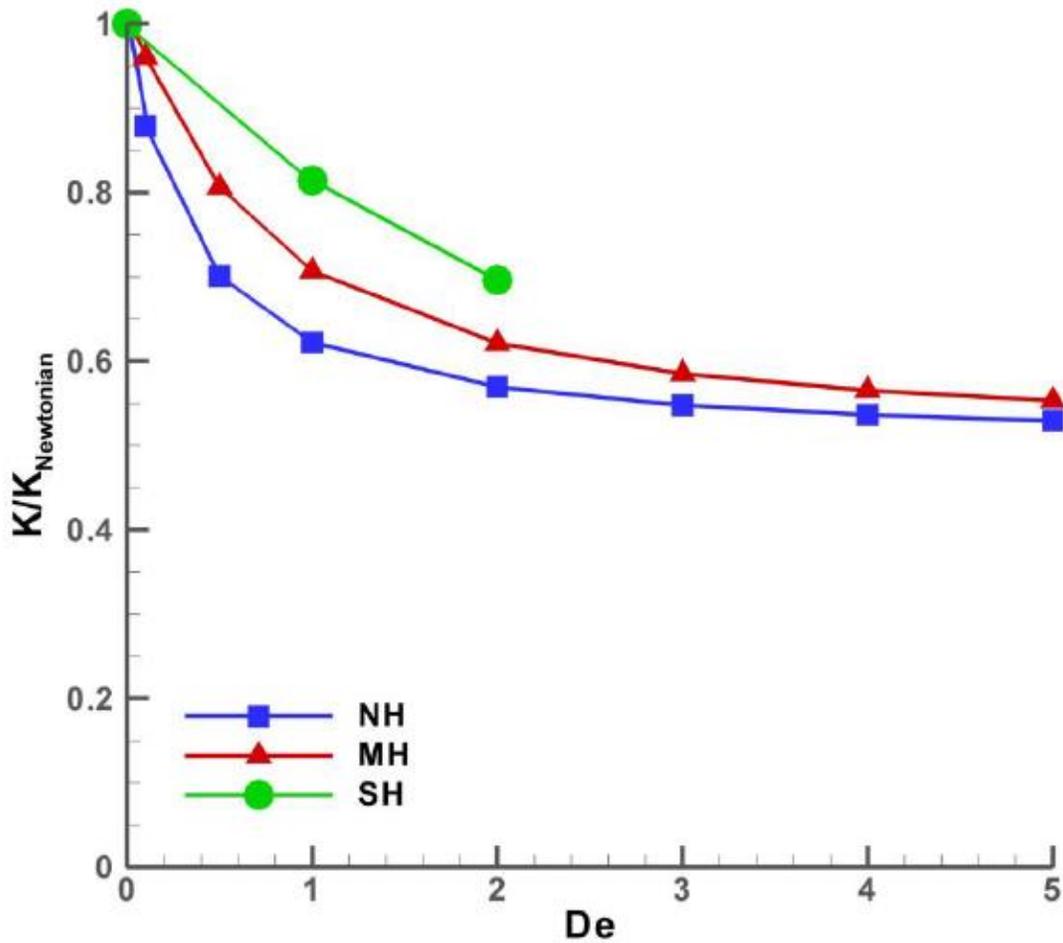


Figura 4.7 Coeficiente de arrastre respecto al aumento de De ; NH vs MH vs SH,
 $\beta = 0.5$

Para concluir con el contraste análisis entre las simulaciones realizadas para los fluidos SH y MH, se han obtenido los invariantes el tensor de conformación π . Se ha generado un perfil de sus valores propios y se ha realizado especial énfasis en el segundo valor propio s_2 , donde se ha presentado un cambio de signo. En la Fig. 4.8, inicialmente se observan regiones negativas en la parte frontal de la esfera para ambos casos, que son ocasionadas por la compresión a la que el fluido se ve sometida. Por otro lado, en el caso MH prevalecen valores positivos, mientras que

en SH existe un cambio de signo. Es importante este cambio de signo en el segundo valor propio para la pérdida de la calidad positiva definida del campo, que se relaciona con inestabilidades numéricas en los resultados (López-Aguilar et al., 2015; López-Aguilar et al., 2018), deviniendo en la localización del valor de De_{crit} para SH y $\beta = 0.5$ (ver Tabla 4.2).

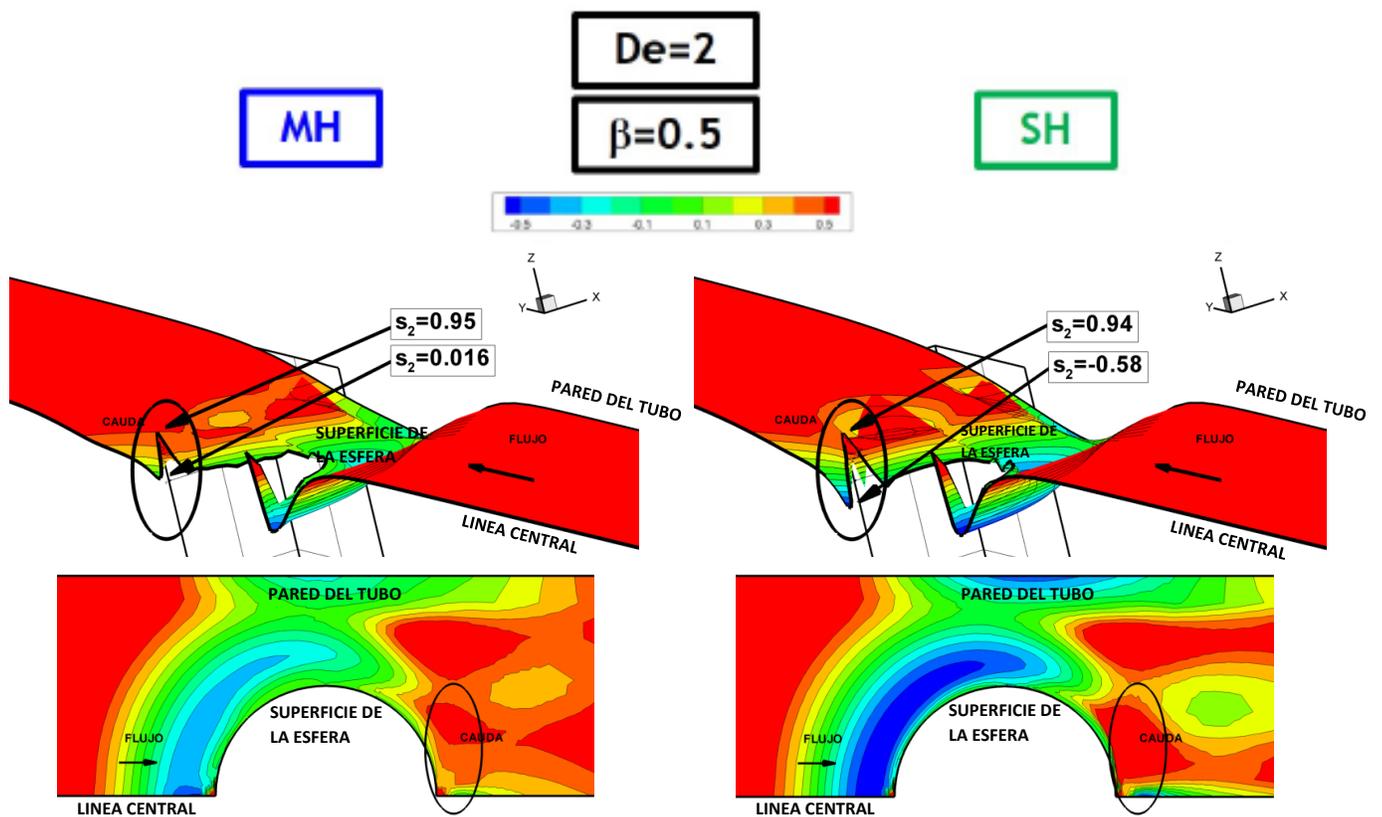


Figura 4.8 Perfil s_2 a) MH b) SH; $\beta = 0.5$; $De = 2$

En resumen, los cambios provocados en distintos niveles de respuesta a la extensión son siempre consistentes con la reología en deformaciones simples.

Existe una correlación entre máximos locales de N_1 y f para cualquier extensión situados en la zona posterior, dónde se estima una fuerte respuesta extensional.

En SH, la respuesta engrosante genera inestabilidades numéricas en la zona posterior, que se registra en el cambio del signo del segundo valor propio del tensor de conformación. Esto se refleja en el campo de la fluidez adimensional, donde oscilaciones (ruido numérico) se observan detrás del obstáculo.

4.1.2 Efecto del número de Débora

Una de las principales influencias en la evolución de los perfiles es el número de Débora, ya que, como se explicó en el Capítulo 2, la obtención de las simulaciones sigue un proceso de incremento de este número adimensional (directamente relacionado al flujo volumétrico). Para esta sección es empleada una fracción de solvente típica (Tammadon-Jahromi et al., 2011), *i.e.* $\beta = \frac{1}{9}$, que representa una solución concentrada. Además, se emplea un fluido moderadamente engrosante a la extensión (MH) a fin de poder visualizar la respuesta extensional en el perfil.

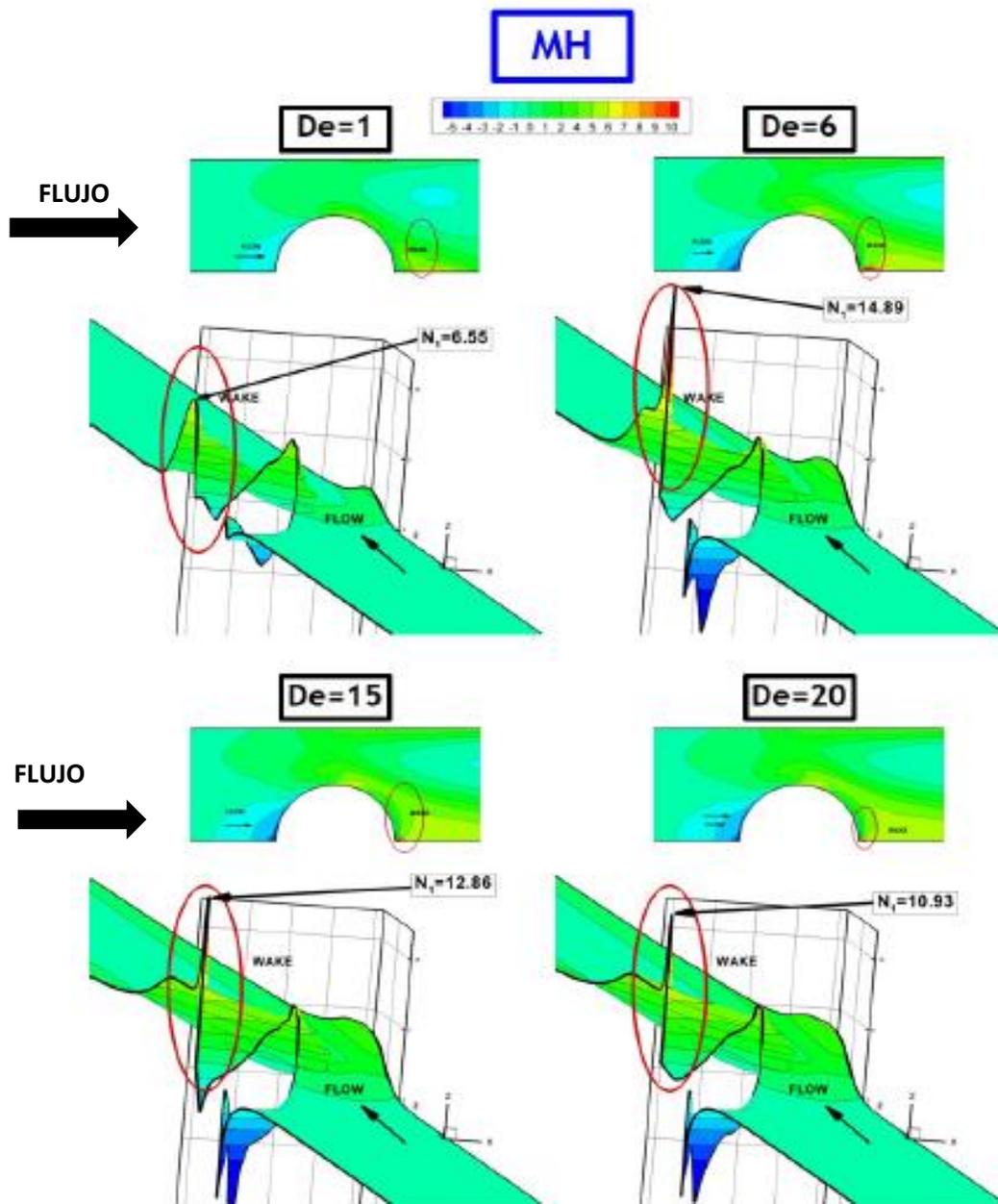


Figura 4.9 Perfil N_1 ; a distintos valores de De ; $\beta = \frac{1}{9}$; MH

En la Figura 4.9 se reúnen algunos resultados para De característicos. En el primer caso se aprecia un perfil para $De = 1$ con valores menores respecto a los demás, incluso se observa un máximo deslocalizado en la cauda.

Al aumentar el flujo volumétrico a $De = 6$, se observa una localización del máximo detrás de la esfera, lo que es una predicción que refleja la naturaleza viscoelástica del fluido.

También, se puede percibir que el máximo global va en aumento en las primeras figuras ($De = 1$ y $De = 6$), pero que para flujos mayores en $De = 15$ y $De = 20$, se va reduciendo ese máximo. Esto demuestra que N_1 replica el comportamiento de la viscosidad extensional (Fig. 2.1).

Al mismo tiempo, al observar todos los perfiles en su conjunto, se aprecia que no presentan cambios considerables en el resto del campo, y que la mayor actividad se concentra en la zona posterior del obstáculo.

Para continuar con el análisis, se explora la respuesta en el perfil f , dónde se podrá comparar con el perfil de N_1 . En la Figura 4.10 se ilustran soluciones para f con los mismos flujos volumétricos que en la Fig.4.9, en los cuales se perciben dos regiones que presentan zonas con valores relativamente altos: La superficie de la esfera y la cauda.

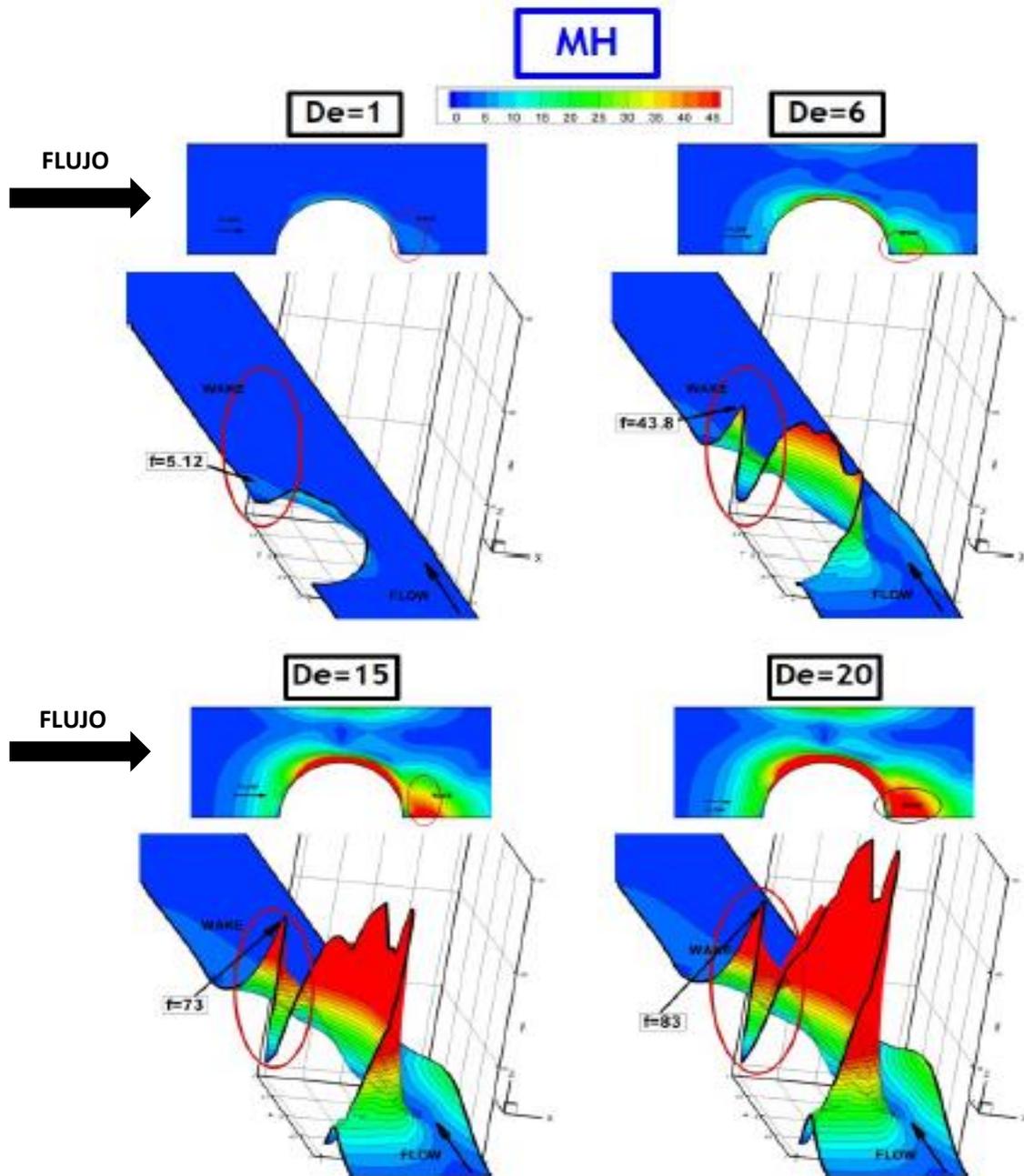


Figura 4.10 Perfil f a distintos valores de De ; $\beta = \frac{1}{9}$; MH

En el primer caso de la Fig. 4.10 ($De = 1$) se presenta un perfil con variaciones leves sobre el campo de flujo, en contraste con el resto de las imágenes expuestas. Se aprecia cómo el efecto viscoelástico generado a partir del

incremento de flujo no ha ocasionado aún una respuesta importante en el sistema. Sin embargo, empiezan a ser notorias las regiones de interés que tendrán mayor respuesta a un De más alto.

La evolución del perfil de f en la superficie de la esfera sigue el adelgazamiento al corte que presentan los fluidos micelares, ya que se notan incrementos que son graduales con respecto al aumento de De .

No obstante, el efecto de mayor interés en estos perfiles es nuevamente el que se observa en la parte de atrás de la esfera. Se genera un efecto *overshoot/undershoot* que se ve en su máximo estado en $De = 20$. Se exagera este comportamiento a medida que incrementa el flujo. Cabe señalar que la fluidez adimensional aumenta monótonicamente con el flujo volumétrico y es a través de su funcionalidad con los esfuerzos cortantes y normales en deformaciones cortantes y extensionales no-homogéneas, que las respuestas de adelgazamiento al corte sobre la esfera y de engrosamiento/adelgazamiento a la extensión detrás de la esfera se manifiestan.

4.1.3 $BMP+_{\tau_p}$ vs EPTT

Finalmente, para terminar de analizar el régimen viscoelástico, se comparan el modelo $BMP+_{\tau_p}$ contra un modelo viscoelástico: el modelo exponencial de Phan-Thien-Tanner EPTT.

Para este análisis se realiza una comparación entre el funcional de estructura adimensional del modelo EPTT con respecto al del modelo $BMP+_{\tau_p}$ y de N_1 . Se utiliza una solución concentrada con una fracción de solvente de $\beta=1/9$ y un fluido

MH, debido a que en estas condiciones son más visibles las deformaciones extensionales.

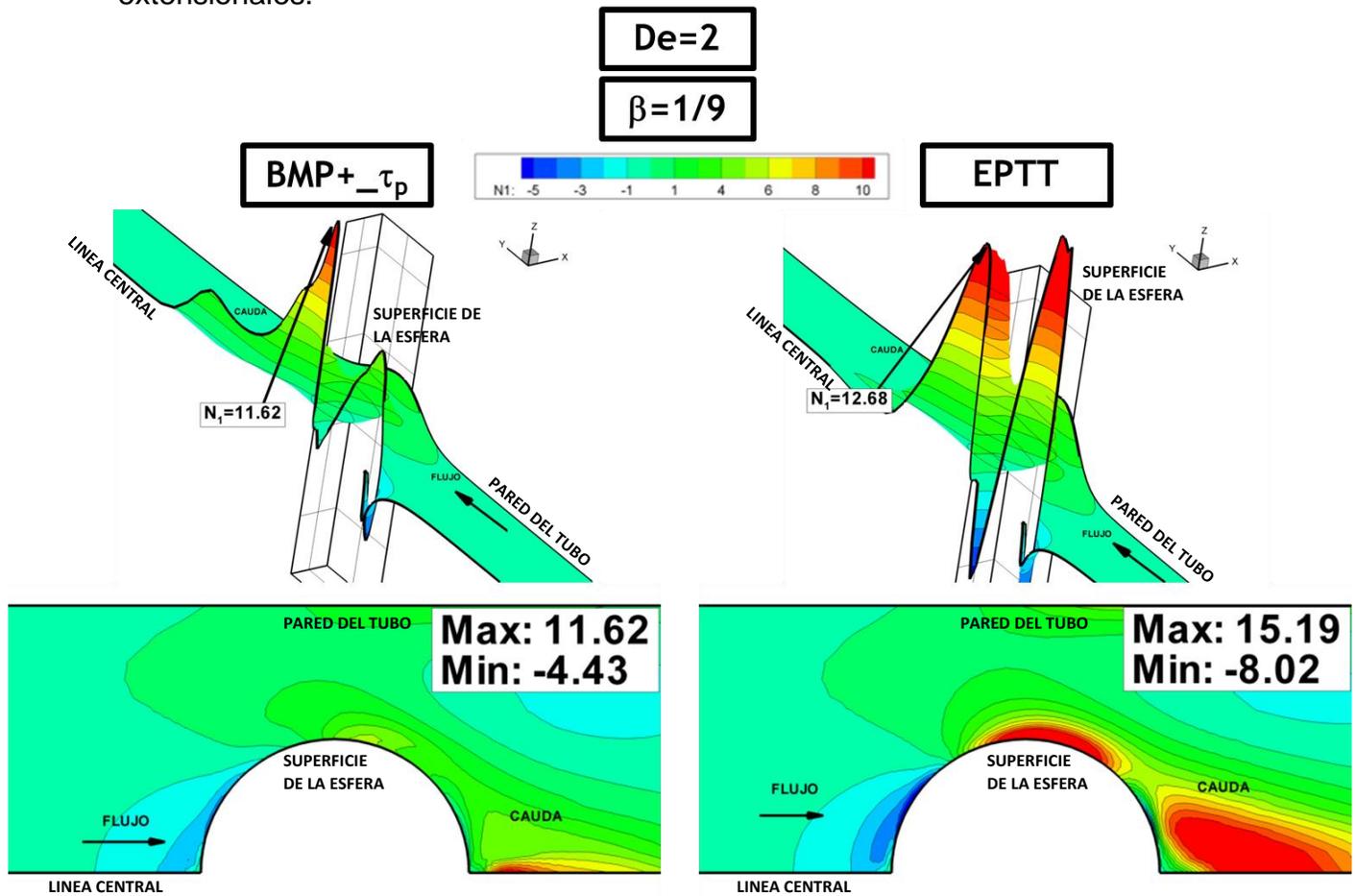


Figura 4.11 Perfil N_1 ; BMP+ $-\tau_p$ vs EPTT; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 2$

En la Fig. 4.11 se representan los perfiles de N_1 para ambos modelos. Aquí se observan máximos generados en las mismas regiones ya analizadas en varios casos previos. Sin embargo, podemos ver diferencias claras entre ambos modelos.

Para empezar, se verifica que el valor máximo global se encuentra en distintos lugares. Mientras que en el caso de $BMP+_{-\tau_p}$ está en la región posterior, en el caso de EPTT está en la superficie de la esfera.

El modelo $BMP+_{-\tau_p}$ captura la respuesta extensional del fluido al evidenciar altos valores de N_1 atrás de la esfera. Por su parte, aunque el modelo EPTT también muestra una fuerte respuesta en la zona de la cauda, que resulta menos pronunciada que en la región donde predominan los efectos cortantes. Cabe destacar que en EPTT se obtiene un valor máximo local del mismo orden que en $BMP+_{-\tau_p}$.

Otro aspecto que se debe notar son los valores mínimos globales localizados en la región frente a la esfera. Ambos modelos poseen resultados similares en la compresión que se sufre en esa zona.

Una vez analizado el perfil de N_1 se procede a buscar en las mismas condiciones las principales diferencias en el perfil del funcional f , un valor de $De = 2$ permite que se reproduzca un perfil comparable para el modelo EPTT.

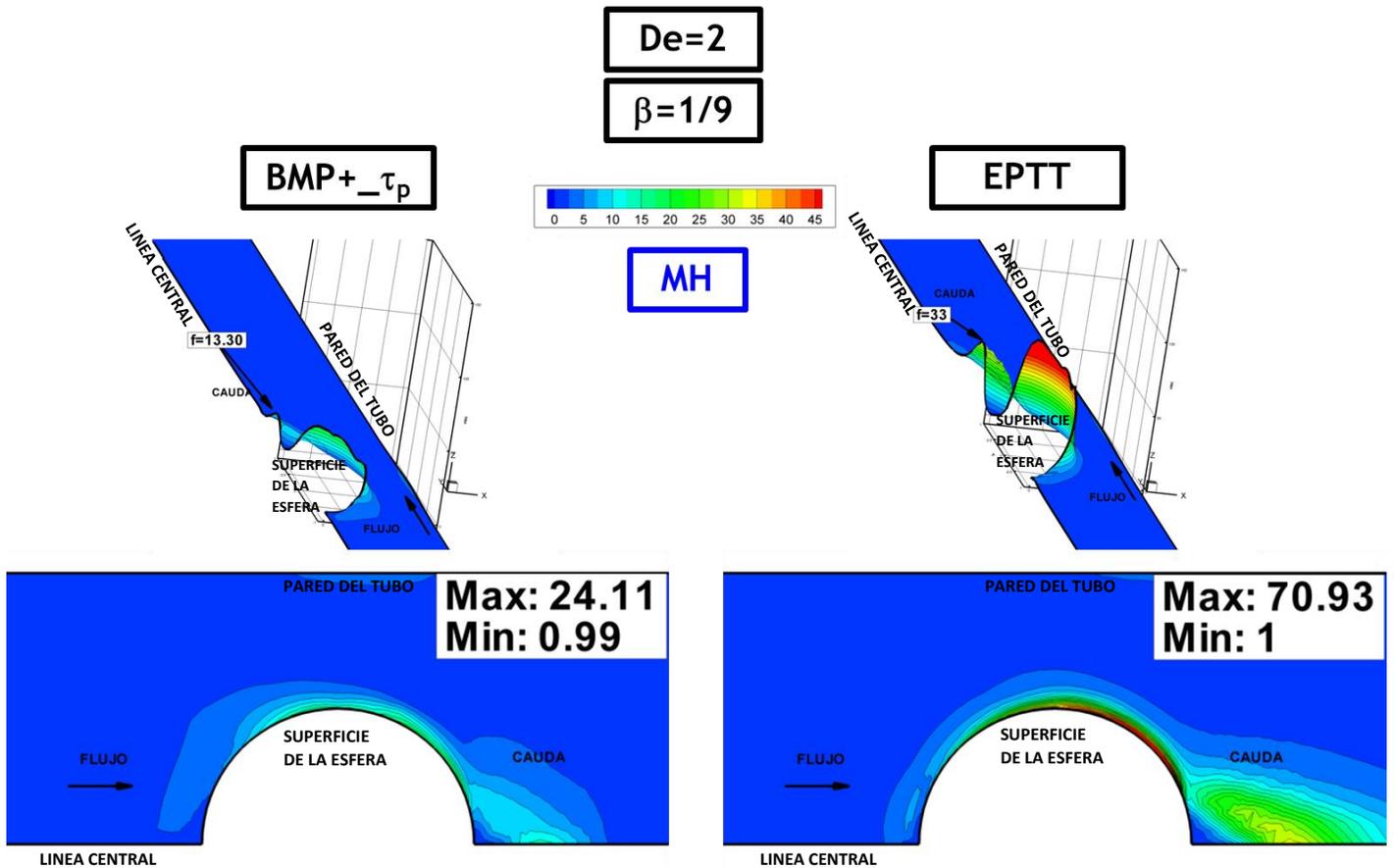


Figura 4.12 Perfil f ; $BMP+_{\tau_p}$ vs $EPTT$; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 2$

La Fig. 4.12 ilustra los perfiles de los funcionales de estructura de cada uno de los modelos. A primera vista, el modelo $BMP+_{\tau_p}$ genera un perfil con valores menores en el cual apenas destacan algunas regiones.

El modelo $EPTT$ presenta una mayor respuesta por parte del funcional. Se aprecia un máximo local importante en la región de la cauda que se correlaciona con lo observado en la propiedad anterior. No obstante, tendrá un máximo local fuera de la línea central del sistema que constituye el eje de simetría.

En los máximos locales de la parte trasera de la esfera, EPTT predice que el valor de f es poco más de dos veces mayor que el del otro modelo y está representado con un pico suavizado (deslocalizado).

También, se analiza a un flujo volumétrico mayor los resultados de ambos modelos. La Fig. 4.13 muestra nuevamente un contraste entre los modelos para el perfil de N_1 . Esta figura demuestra que en un flujo más elevado los perfiles aumentan sus respuestas, además de que siguen prevaleciendo dos máximos importantes de valores similares para el modelo EPTT.

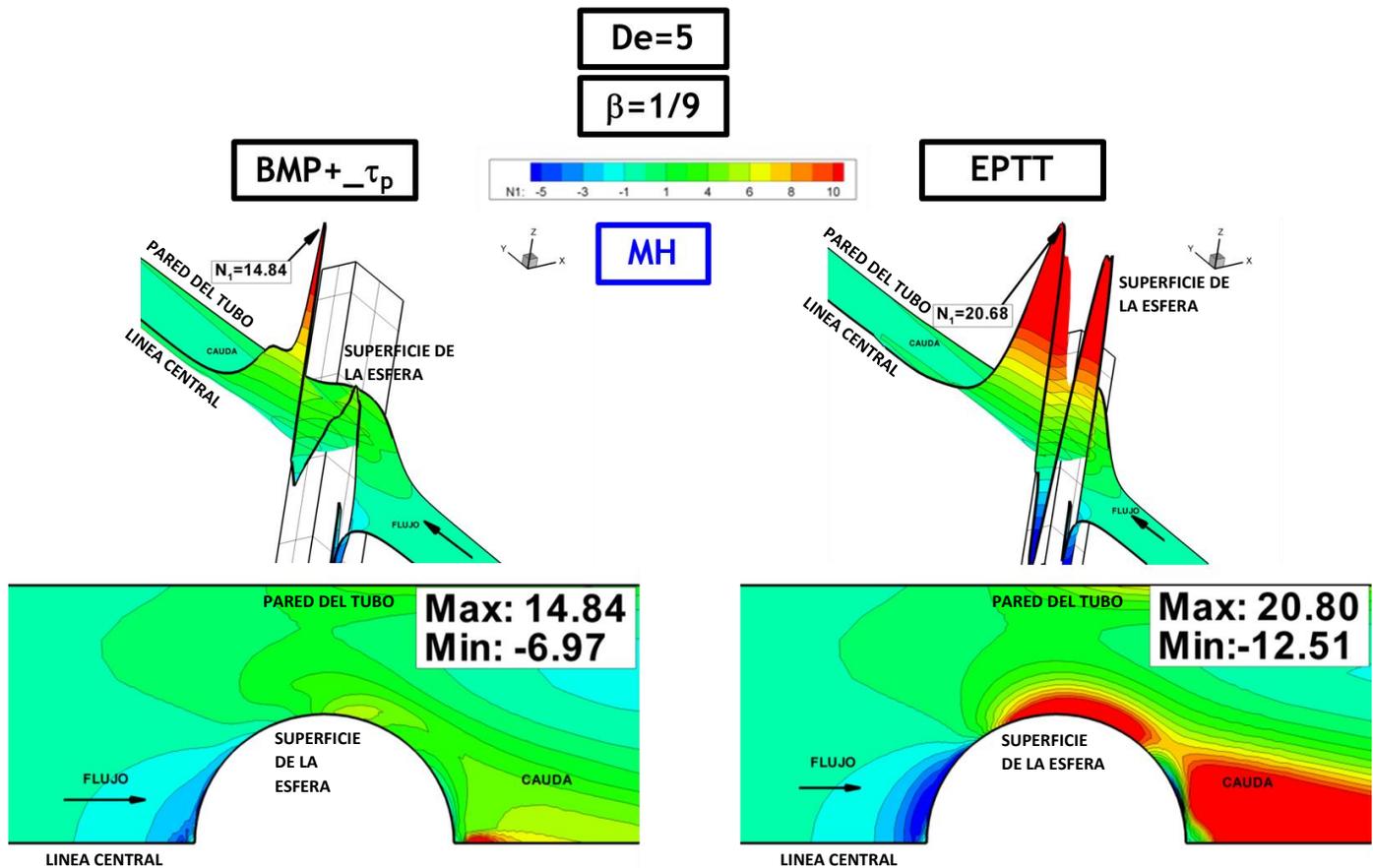


Figura 4.13 Perfil N_1 ; $BMP+_{-\tau_p}$ vs $EPTT$; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 5$

Se percibe un cambio en la localización del máximo global en EPTT que resulta acorde a lo presentado en $BMP+_{\tau_p}$. El orden de magnitud de ambos picos es el mismo, sin embargo, $BMP+_{\tau_p}$ presenta una menor respuesta.

Las regiones de máximos de ambos modelos presentan diferencias importantes con respecto a un flujo menor. Mientras que para $BMP+_{\tau_p}$ existe una disminución del área con mayores valores (el área roja se localiza), EPTT presenta regiones más amplias (deslocalización de los picos).

De lo anterior, se deduce que BMP captura la respuesta viscoelástica del fluido al observar como la deformación se concentra en un solo punto en la línea central del sistema detrás del obstáculo. EPTT predice otro comportamiento en el que N_1 tendrá una respuesta significativa independientemente de la deformación que se experimente.

Como una observación adicional, se puede decir que ambos modelos predicen un comportamiento similar en la región de contracción del fluido con valores mínimos globales que se encuentran en el mismo orden de magnitud y con un perfil similar.

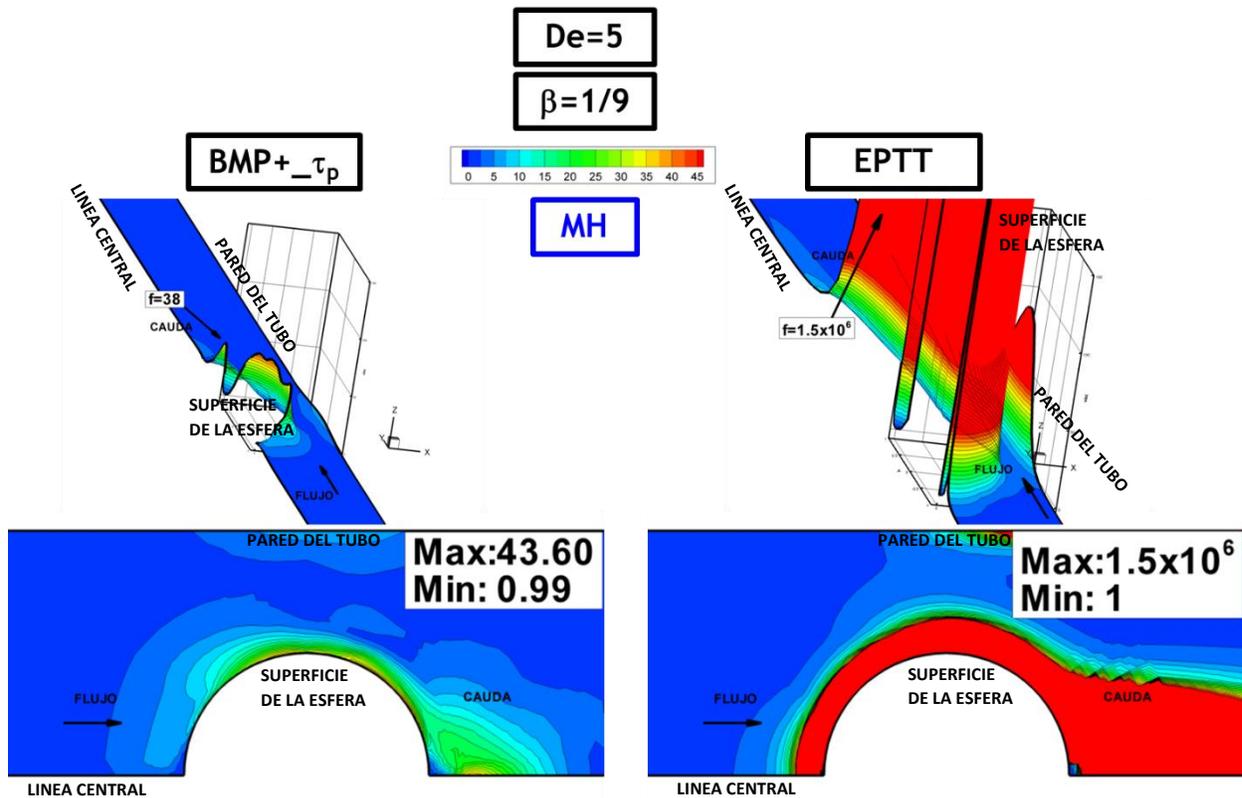


Figura 4.14 Perfil f ; $BMP+_{\tau_p}$ vs $EPTT$; $\beta = \frac{1}{9}$; $De = 5$

La Fig. 4.14 reúne la información del perfil del funcional adimensional de ambos modelos a un $De = 5$. Se presentan cambios drásticos respecto a la tendencia que existía en el caso con un flujo moderado. El modelo $BMP+_{\tau_p}$ conserva un perfil con modificaciones sutiles en su campo de flujo; no obstante, el modelo $EPTT$ modifica dramáticamente su perfil debido al comportamiento exponencial que posee su funcional, con un despliegue de valores de $f = O(10^6)$.

4.2 Régimen Plástico

Para la obtención de los resultados del régimen plástico se calcularon los criterios de cedencia en los nodos de la malla. Es decir, se post-procesaron las soluciones para generar frentes de cedencia.

El régimen plástico de las soluciones numéricas corresponderá a flujos volumétricos relativamente bajos (*De* bajos) y soluciones concentradas (valores bajos de β) en donde quedarán expuestos fenómenos relativos a la cedencia del material.

5.2.2 Criterios de cedencia

Aplicando la estimación explicada en el Capítulo 2, se obtienen valores de esfuerzo de cedencia aparente útiles en la implementación de los criterios de cedencia. Para un fluido MH con una fracción de solvente $\beta = 0.01$, se deduce que:

$$\lambda_1 \dot{\gamma}_c \approx 0.8. \quad (72)$$

Con este dato, se puede buscar el esfuerzo asociado a ese valor crítico y de esta manera poder deducir un esfuerzo de cedencia:

$$\tau_y \approx 70. \quad (73)$$

Es con este valor con el que se contrastan los resultados de los cálculos de los criterios de cedencia expuestos en el Marco Teórico, y de esta manera poder percibir los frentes de cedencia formados en el flujo alrededor de esferas.

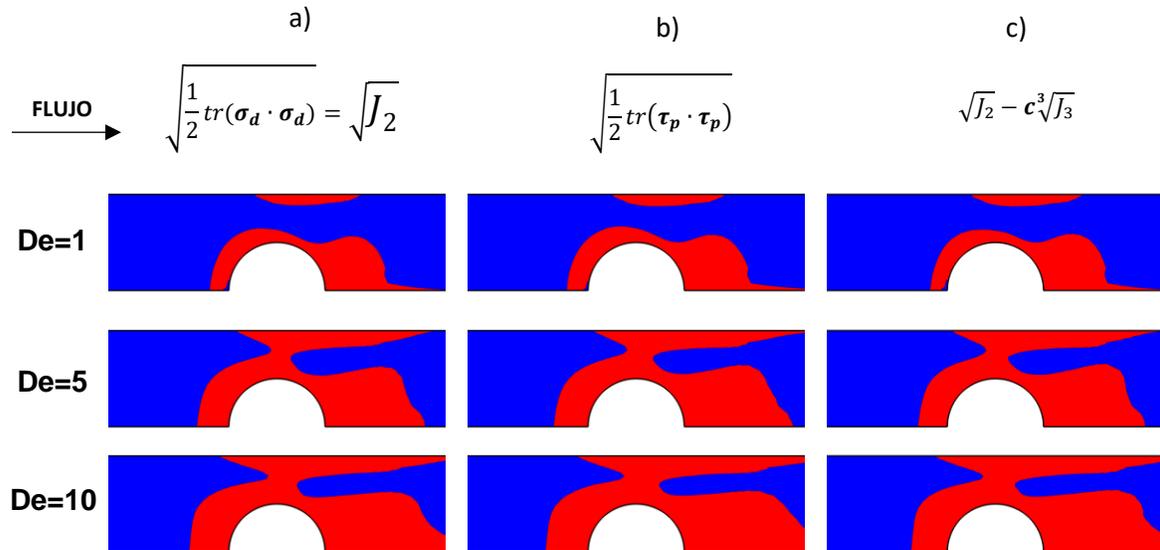


Figura 4.15 *Frentes de cedencia obtenidos para tres criterios a) von Mises b) Segundo invariante c) Sica et al. ($c=-0.1$); $\beta = 0.01$; MH*

En la Fig. 4.15 se representan los tres resultados para los criterios de cedencia con una fracción de solvente $\beta = 0.01$ (solución concentrada) y un fluido micelar MH. Para el criterio de Sica et al. (2020) se empleó un parámetro $c = -0.1$, ya que con este valor se obtiene un perfil similar al de los otros criterios.

Se indican algunos valores de De representativos, donde es importante observar los perfiles al menor valor, ya que es donde se observa de mejor forma la plasticidad del fluido micelar. Las zonas rojas representan aquellos lugares en los cuales el material se comporta como un fluido (existe deformación) y las zonas azules representan las regiones en las que no se ha superado el esfuerzo de cedencia aparente.

Las zonas rojas en los tres casos crecen a medida que el flujo lo hace, por lo que se concluye que todos los criterios responden consistentemente con el incremento de flujo.

Como primera observación, cabe resaltar que los perfiles presentan asimetrías importantes con respecto al eje de la esfera en el frente de cedencia, lo cual indica que el modelo predice cualitativamente las manifestaciones experimentales reportadas por Holenberg et al., (2012). Además, en la zona de la cauda, existe una mayor cantidad de material fluidizado.

Se puede ver que los tres perfiles presentan frentes de cedencia muy similares, demostrando que considerar el segundo invariante del tensor τ_p no modifica significativamente el frente deducido por el criterio de von Mises, el cual elimina una parte de la contribución de los esfuerzos normales.

4.2.2 Efecto de parámetro c en Criterio Sica et al.

El criterio de cedencia de Sica et al. tiene la particularidad de depender de un parámetro que se obtiene de manera experimental (c , Sica et al. 2020). Este parámetro c , como se explicó en el Capítulo 2, modula la contribución del tercer invariante en la cedencia del material. En la sección anterior se observó de una manera puntual como sería utilizar un valor escogido de c con respecto a otros criterios. Para contrastar de manera completa de qué manera se comporta el frente de cedencia dependiendo de este parámetro, se considera un fluido MH con un $\beta = 0.01$, sometido a un $De = 1$. Se reúnen los resultados de cuatro valores de

parámetro ($c = \{-2, -1, 1, 2\}$) para observar la respuesta del frente de cedencia (Fig. 4.16).

Cabe destacar que emplear el valor de cero en este contraste llevaría directamente a obtener el valor del criterio de von Mises tal y como se explica en el capítulo 2.

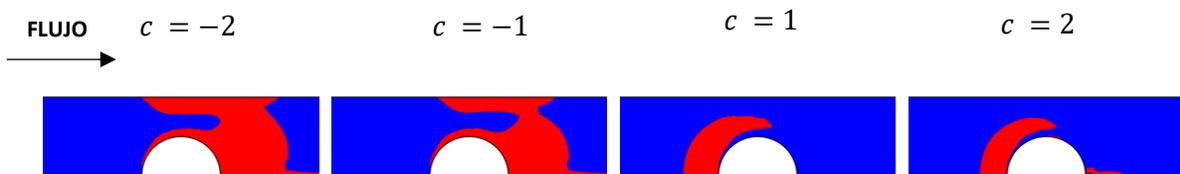


Figura 4.16 Frentes de cedencia obtenidos para distintos parámetros del criterio

Sica et al.; $De=1$; $\beta = 0.01$; MH

La Fig. 4.16 denota que uno de los aspectos que más impactan en el perfil es el del signo del parámetro. Para magnitudes iguales, i.e. $c = \{-1, 1\}$, vemos un cambio abrupto en el frente de cedencia. Mientras que en los valores positivos se observan mayores zonas fluidizadas en la parte frente a la esfera, para los valores negativos se aprecia una mayor actividad en la parte posterior.

Recordando la mecánica del flujo, una hipótesis que podría acompañar estos resultados es que el valor del parámetro c sea de carácter negativo para fluidos micelares de tipo gusano. En la siguiente sección se abordará una estimación conforme los resultados del modelo $BMP+_{-\tau_p}$.

4.2.3 Criterio de Sica et al. (2020) Estimación del parámetro c

Finalmente, otro aspecto a explorar en el régimen plástico corresponde con la deducción de un valor del parámetro c con base en la metodología explicada en el Capítulo 2.

Para ello se emplea la Fig. 2.5, escogiendo una vez más el valor de $\beta = 0.01$ como referencia de los cálculos y como primer valor a explorar. Al observar la curva de flujo asociada a esta fracción de solvente se deduce que:

$$N_{1y} \approx 200. \quad (74)$$

Con este valor se deduce el valor del parámetro, en primera instancia, se obtiene el tensor de esfuerzos para una extensión uniaxial:

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 200 & 0 & 0 \\ 0 & -100 & 0 \\ 0 & 0 & -100 \end{pmatrix}. \quad (75)$$

Con esto definido se procede a calcular el valor de los invariantes:

$$J_2 = \frac{200^2 + (-100)^2 + (-100)^2}{2} = 30000, \quad (76)$$

$$J_3 = \frac{200^3 + (-100)^3 + (-100)^3}{3} = 2000000. \quad (77)$$

Con estos valores es posible obtener el resultado del parámetro, ocupando el mismo esfuerzo de cedencia presentado en la Ec. (73):

$$c = \frac{30000^{3/2} - (70)^3}{2000000} = 2.426. \quad (78)$$

Este valor se encuentra dentro de los límites del criterio (Cazacu, 2004). Aunque es necesario llevar a cabo un experimento en el punto de cedencia del material para poder identificar por completo los valores de los parámetros (N_{1y} en extensión uniaxial) que ajusten mejor. Para este trabajo se obtiene este valor deducido de datos del mismo modelo. Cabe recordar que los resultados experimentales (Sica et al., 2020) de diversos materiales a los que se les aplicó este criterio, indicaron que aquellas sustancias que tenían valores negativos en sus parámetros eran aquellas en las que el esfuerzo de cedencia en la dirección principal de una extensión biaxial era mayor que el obtenido por una extensión uniaxial. Recordando que en el caso de flujo alrededor de esferas y con estos fluidos, una respuesta de extensión uniaxial es mucho más importante que una compresión, resulta coherente pensar que el signo del valor debe de ser positivo.

Una vez obtenido el valor del parámetro, se aplican estos cálculos en el post-procesamiento de los resultados a fin de poder generar el frente de cedencia del criterio Sica et al. (2020) con un valor aproximado del material. En la Fig. 4.17 se han vuelto a contrastar los frentes de cedencia obtenidos, solo que en este caso se ha empleado el valor del parámetro correspondiente.

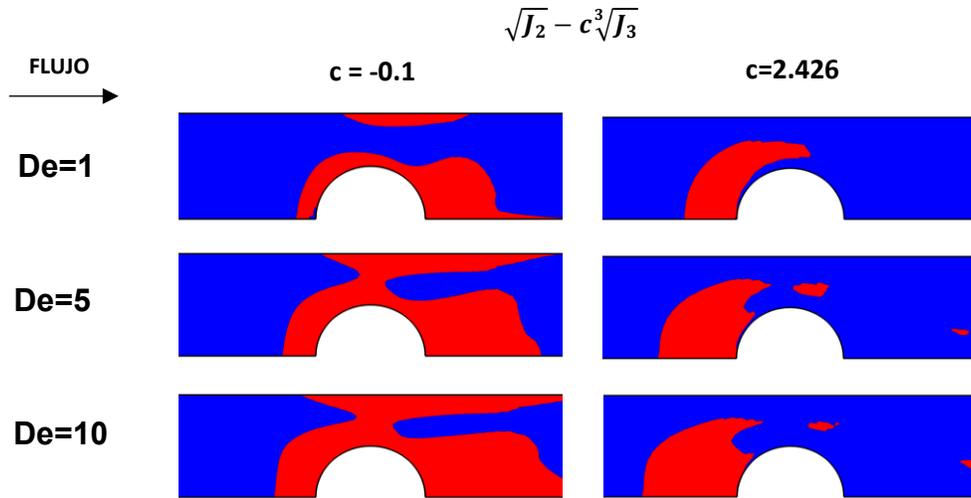


Figura 4.17 *Frentes de cedencia obtenidos para dos valores del parámetro c utilizando el criterio de Sica et al.; $\beta = 0.01$; MH*

Como se puede ver en la Fig. 4.17, el criterio de Sica et al. (2020) con este nuevo valor de parámetro $c = 2.426$ ofrece un cambio abrupto en el comportamiento de los anteriores frentes. Como ya se ha comentado con anterioridad, un valor positivo en el parámetro se ha encontrado que genera un incremento en la respuesta en la parte frontal de la esfera, así que se sigue este principio explorado en la sección anterior.

Uno de los principales aspectos a destacar es que sigue existiendo una asimetría en el resultado del frente de cedencia, lo cual es un indicativo de que existe una respuesta más cercana al fenómeno que ocurre experimentalmente. No obstante, que la zona fluidizada se presente únicamente en la parte anterior de la esfera merece una mayor exploración en un trabajo futuro que complemente el estudio de este criterio en los fluidos $BMP+_{-\tau_p}$.

4.2.4 Criterio del Segundo Invariante. Efecto de concentración

Para analizar la manera en que la concentración influye en los frentes de cedencia del modelo $BMP+_{\tau_p}$, se realiza una comparación empleando el criterio del Segundo Invariante (que no posee diferencias significativas con el de von Mises y ofrece un cómputo menor). Se emplean fluidos MH, donde queda claro que se puede observar un efecto importante del engrosamiento a la extensión. La Fig. 4.18 demuestra que la concentración impacta de manera importante a la plasticidad del material. Para casos menos concentrados (fracciones de solvente relativamente grandes), la zona roja es relativamente grande y cubre un espacio considerable alrededor del obstáculo; mientras que, a fracciones de solvente menores, la región fluidizada en rojo se confina alrededor de la esfera, por lo que existe un mayor esfuerzo de cedencia en el caso con la fracción de solvente más baja. Esto es consistente con el comportamiento de la solución, ya que recordemos que mientras exista mayor cantidad de soluto, la mezcla se comportará de manera similar a un gel (López-Aguilar et al. 2018).

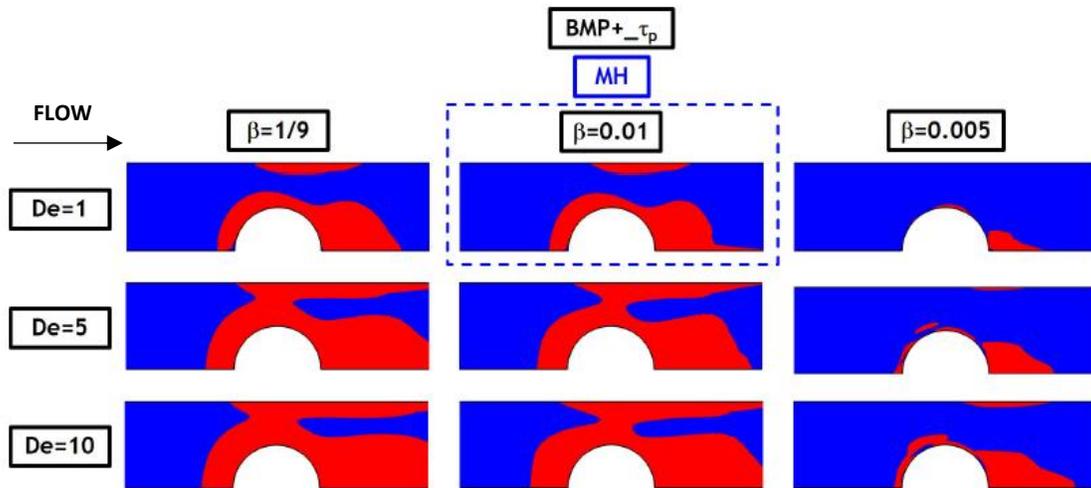


Figura 4.18 Frentes de cedencia obtenidos para distintas fracciones de solvente;

MH

Por otra parte, en la Fig. 4.18 se remarca un caso en particular que corresponde con un resultado importante de este trabajo y es el de la descripción cualitativa de uno de los trabajos experimentales de Holenberg et al. (2012). Como se puede observar, el frente de cedencia para $De = 1$ y $\beta = 0.01$ asemeja la forma reportada experimentalmente, lo que es algo que otros trabajos de simulación no habían logrado con anterioridad (Fraggedakis et al., 2016). La reproducción cuantitativa de los frentes con este modelo con las características experimentales de Holenberg et al. (2012) representa uno de los retos a atacar a futuro.

4.2.5 Criterio del Segundo Invariante. Efecto de engrosamiento a la extensión

Para finalizar este estudio del régimen plástico con el modelo $BMP+_{\tau_p}$, se analizaron los frentes de cedencia para dos diferentes casos de engrosamiento: NH y MH, con lo cual se verifica la influencia de los parámetros tixotrópicos sobre

la respuesta en extensión y el campo de flujo en el frente de cedencia. Se emplea un fluido con $\beta = 0.01$ variando nuevamente el valor de De . Asimismo, se emplea una vez más el criterio del Segundo Invariante.

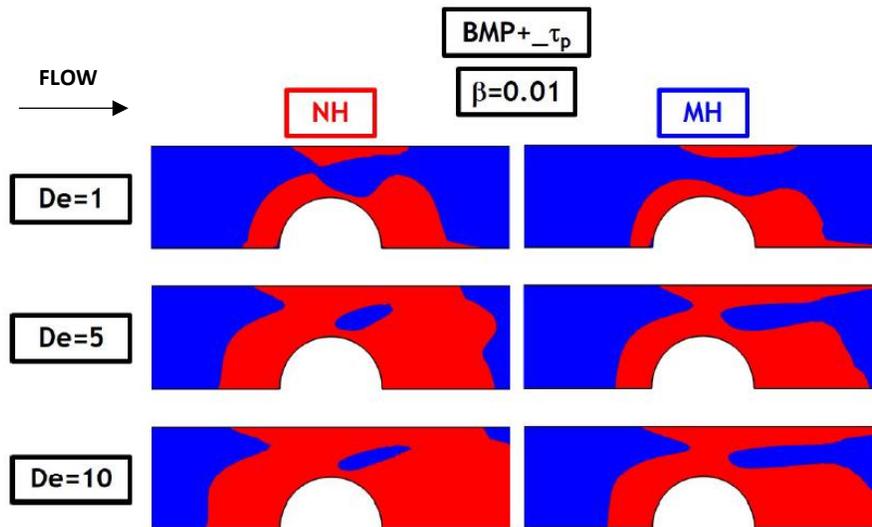


Figura 4.19 *Frentes de cedencia obtenidos para distintos niveles de engrosamiento a la extensión; $\beta = 0.01$*

Como se observa en la Fig. 4.19, el nivel de engrosamiento es directamente proporcional con el esfuerzo de cedencia, ya que, al incrementar el nivel de engrosamiento a la extensión, la zona roja es menor. Por consiguiente, la plasticidad del material también va a tener una fuerte influencia de los parámetros tixotrópicos de construcción y destrucción del modelo.

Los frentes de cedencia de ambos niveles de engrosamiento a la extensión cumplen que, al incrementar el flujo, el área azul (comportamiento similar al estado sólido) disminuya y de paso a una mayor área fluidizada.

En conclusión, la plasticidad es un fenómeno que se visualiza de manera más marcada en bajos valores de flujo volumétrico y altas concentraciones, en la que los efectos de concentración y nivel de extensión también son importantes para caracterizar a los fluidos y su comportamiento. Se ha encontrado correlación entre el nivel de flujo volumétrico y la zona cedida. El análisis de los criterios de cedencia da la posibilidad de establecer frentes de cedencia que aproximen mejor a resultados experimentales. Finalmente, cabe destacar que las soluciones del modelo $BMP+_{\tau_p}$ generan una primera aproximación cualitativa a los resultados expuestos por Holenberg et al. (2012).

5. CONCLUSIONES

Este trabajo de tesis reúne los resultados más importantes de una serie de simulaciones realizadas en el flujo alrededor de esferas de fluidos tixoviscoelastoplásticos caracterizados por la ecuación de estado reológica $BMP+_{\tau_p}$ (López-Aguilar et al., 2018; Resendiz-Tolentino, 2019; López-Aguilar et al., 2021). El estudio de dos principales regímenes; el viscoelástico y el plástico, han llevado a las siguientes conclusiones:

- La respuesta a la deformación extensional se correlaciona con la estructura interna al observar máximos localizados de N_1 y f en la misma locación (cauda; extensión uniaxial).
- Al incrementar el engrosamiento a la extensión, de un fluido NH a MH con $\beta = 1/9$ y $De = 6$ el máximo global de N_1 se sitúa en la misma zona con un incremento del 400%.
- Al incrementar el engrosamiento a la extensión, de un fluido MH a SH con un $\beta = 0.5$ y $De = 2$ el máximo global de N_1 se encuentra en la misma zona con aumentando casi 6 veces su valor.
- Existe un cambio en el signo del segundo eigenvalor (s_2) del tensor de conformación al modificar el engrosamiento a la extensión en la zona posterior de la esfera.
- Los máximos localizados de ambas propiedades N_1 y f se sitúan en una región donde existe un cambio de deformación no-homogénea súbito de cortante a extensional.

- El comportamiento del máximo local de N_1 conforme al incremento de De (*flujo volumétrico adimensional*) primero es directamente proporcional hasta alcanzar un máximo alrededor de un $De = 6$ y después disminuye, lo cual es un comportamiento análogo al que sigue la viscosidad extensional.
- El modelo $BMP+_{-\tau_p}$ en comparación con el modelo EPTT, genera picos más localizados en la zona posterior de la esfera y genera máximos globales en esa área. En ambos casos se obtienen máximos globales en el mismo orden de magnitud; 11.62 para $BMP+_{-\tau_p}$ y 15.19 para EPTT.
- El criterio del Segundo Invariante del tensor asociado al soluto presenta desviaciones menores respecto al criterio de von Mises. Por otro lado, el criterio de Sica et al. (2020) depende fuertemente del parámetro c .
- El frente de cedencia en el criterio de Sica et al. depende fuertemente del signo del parámetro c . En valores positivos la mayor zona cedida es la zona de en frente de la esfera, mientras que en valores negativos es la posterior.
- Los fluidos con mayor concentración presentan frentes de cedencia mayores. Asimismo, los frentes de cedencia presentan asimetrías importantes que se atribuyen a la viscoelasticidad y la tixotropía expresadas en el modelo.
- Se logra reproducir de manera cualitativa uno de los frentes obtenidos de manera experimental por Holenberg et al. (2012) para el descenso de esferas lisas en carbopol. Se obtiene uno de los frentes asimétricos debido a la implementación de un modelo que contempla un material tixoviscoelastoplástico.

- El esfuerzo de cedencia es directamente proporcional al nivel de engrosamiento.

6. TRABAJO FUTURO

El análisis realizado en esta tesis constituye la base de posibles trabajos futuros.

Ejemplos de ellos son:

- Comparación con otros modelos para fluidos micelares de tipo gusano, e.g. modelos Vasquez-Cook-McKinley (VCM) y modelo de Giesekus.
- Simulación de nuevas geometrías de flujo complejo con el modelo $BMP+_{\tau_p}$ i.e. flujo alrededor de cilindros, flujo en ranura cruzada.
- Contraste de simulación numérica con evidencia experimental en parámetros ajustados, buscando la predicción cuantitativa de datos reportados en la literatura (Holenberg et al. 2012).
- Desarrollo de nuevos modelos constitutivos para materiales tixoviscoelastoplásticos e.g. fluidos micelares de tipo gusano.

7. PRODUCTIVIDAD: LISTA DE ARTÍCULOS Y CONGRESOS

- [1] López-Aguilar, J.E., Resendiz-Tolentino, O., Tamaddon-Jahromi, H.R., Ellero, M., Manero, O., Flow past a sphere: Numerical predictions of thixo-viscoelastoplastic wormlike micellar solutions, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* (2022) *En Revisión*.
- [2] López-Aguilar, J.E., Resendiz-Tolentino, O., Tamaddon-Jahromi. Thixo-viscoelastoplastic constitutive modelling using a new elastic energy-dissipation measure and its validation in complex flow. 18th International Congress on Rheology, Rio de Janeiro, Brasil, Diciembre 2020.
- [3] López-Aguilar, J.E., Resendiz-Tolentino, O., Tamaddon-Jahromi, H.R., Ellero, M., Manero, O. Numerical simulation of complex fluids flow past sphere. MACROMEX 2021, Riviera Maya, Mexico, Noviembre 2021.

8. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Alves, M., Oliveira, P., Pinho, F., Numerical Methods for Viscoelastic Fluid Flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 53, 509–541, 2021
- [2] Barnes, H. & Walters, K., The Yield Stress Myth?, Rheol. Acta 24., 323-326., 1985.
- [3] Barnes, H., The ‘yield stress myth?’ paper –21 years on, Appl. Rheol. 17., 43110-1-43110-5., 2007.
- [4] Barnes, H., The yield stress –a review or ‘*παντα ρει*’ –everything flows? J. Non-Newtonian Fluid Mech. 81., 133–178., 1999.
- [5] J.-F. Berret, R. Gamez-Corrales, S. Lerouge, J.-P. Decruppe, Shear-thickening transition in surfactant solutions: new experimental features from rheology and flow birefringence, Eur. Phys. J. E 2 (4) 343, 2000.
- [6] Bingham, E., An Investigation of the Plastic Flows. Bull. US Bur. Stand. 13, 1916, 309.
- [7] Cates, M. E. Reptation of living polymers: dynamics of entangled polymers in the presence of reversible chain-scission reactions. Macromolecules, 20. 2289-2296, 1987.
- [8] Cazacu, O., Barlat, F., A criterion for description of anisotropy and yield differential effects in pressure-insensitive material. International Journal of Plasticity. 20, 2027-2045, 2004.
- [9] Chilcott, M.D., Rallison, J.M., Creeping Flow of Dilute Polymer Solutions Past cylinders and spheres, J. Non-Newtonian Fluid Mech, 29, 1988, pp. 381-432.
- [10] Dreiss, C.A., Wormlike micelles: where do we stand? Recent developments, linear rheology and scattering techniques, Soft Matter 3, 2007, pp. 956-970.

- [11] Dupret, F. Marchal, J.M., Loss of evolution in the flow of viscoelastic fluids, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 20, 1986, pp. 143–171.
- [12] Dutta, S., Graham, M. D., Mechanistic constitutive model for wormlike micelle solutions with ow-induced structure formation, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 251, 2018, pp. 97-106.
- [13] Enders, F., Merker, D., Kolano, M., Bořhm, L., & Kraume, M. Numerical characterization of the bubble rise behavior in viscoelastic liquids. *Chemical Engineering & Technology*, 42(7), 2019, 1395–1403.
- [14] Ferrás, L.L., Morgado, M.L., Rebelo, M., McKinley, G.H., Afonso, A.M., A generalised Phan–Thien —Tanner model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, 269, 2019, pp. 88-89.
- [15] Fraggedakis, D., Dimakopoulos, Y., Tsamopoulos, J., Yielding the yieldstress analysis: a study focused on the effects of elasticity on the settling of a single spherical particle in simple yield-stress fluids, *Soft Matter* 12, 2016, pp. 1-24.
- [16] Fraggedakis, D., Dimakopoulos, Y., Tsamopoulos, J., Yielding the yield stress analysis: A thorough comparison of recently proposed elasto-viscoplastic (EVP) fluid models, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 238, 2016, 170-188.
- [17] Frigaard, I. A., Paso, K. G., de Souza Mendes, P. R., Bingham's model in the oil and gas industry, *Rheol. Acta* 56, 2017, 259-282.
- [18] Germann, N., Cook, L.P., Beris, A.N., Nonequilibrium thermodynamic modeling of the structure and rheology of concentrated wormlike micellar solutions, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 196, 2013, pp. 51-57.
- [19] Goosens, W.R.A., Review of the empirical correlations for the drag coefficient of rigid spheres, *Powder Technology* 352, 2019, pp. 350-359.

- [20] Hill, R., The mathematical theory of plasticity, Clarendon Press, Oxford, 1998.
- [21] Holenberg, Y., Lavrenteva, O. M., Shavit, U., Nir, A., Particle tracking velocimetry and particle image velocimetry study of the slow motion of rough and smooth solid spheres in a yield-stress fluid, *Phys. Rev. E* 86, 2012, 066301.
- [22] Hommel, R. J., Graham, M. D., Constitutive modeling of dilute wormlike micelle solutions: Shear-induced structure and transient dynamics, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 295, 2021, 104606.
- [23] Hooshyar, S., Germann, N., Shear banding in 4:1 planar contraction, *Polymers* 11, 2019, 417.
- [24] Hooshyar, S., Germann, N. Shear banding of semidilute polymer solutions in pressure-driven channel flow, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 242, 2017, pp. 1-10.
- [25] Hulsen, M.A., A sufficient condition for a positive definite configuration tensor in differential models, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 38, 1990, pp. 93–100.
- [26] Jayaraman, A., Belmonte, A., Oscillations of a solid sphere falling through a wormlike micellar fluid, *Phys. Rev. E* 67, 2003, 065301.
- [27] Leal, L. G., Denn, M. M., & Keunings, R., Lake arrowhead workshop special issue papers—introduction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29, 1–8., 1988.
- [28] Livescu, S., Mathematical modelling of thixotropic drilling mud and crude oil flow in wells and pipelines-a review, *J. Petrol. Sci. Eng.* 98-99, 2012, 174-184.
- [29] López-Aguilar, J.E., Resendiz-Tolentino, O., Tamaddon-Jahromi, H.R., Ellero, M., Manero, O., Flow past a sphere: Numerical predictions of thixo-viscoelastoplastic wormlike micellar solutions, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* (2022) *En Revisión*.

- [30] López-Aguilar, J. E., Tamaddon-Jahromi, H. R. Computational Predictions for Boger Fluids and Circular Contraction Flow under Various Aspect Ratios. *Fluids*, 5(85), 85., 2020
- [31] López-Aguilar, J. E., Webster, M. F., Tamaddon-Jahromi, H. R., & Manero, O., Predictions for circular contraction-expansion flows with viscoelastoplastic & thixotropic fluids, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2018.
- [32] López-Aguilar, J. E., Webster, M. F., Tamaddon-Jahromi, H. R., & Manero, O., High-Weissenberg predictions for micellar fluids in contraction–expansion flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 222, 2015, pp. 190–208.
- [33] López-Aguilar, J. E., Webster, M. F., Tamaddon-Jahromi, H. R., & Manero, O., A new constitutive model for worm-like micellar systems – Numerical simulation of confined contraction–expansion flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 204, 2014, pp. 7–21.
- [34] López-Aguilar, J.E., Webster, M.F., Tamaddon-Jahromi, H.R., Manero, O., Binding, D.M., Walters, K., On the use of continuous spectrum and discrete-mode differential models to predict contraction-flow pressure drops for Boger fluids, *Phys. Fluids*, 29, 2017, pp.121-613.
- [35] López-Aguilar, J.E., Webster, M.F., Tamaddon-Jahromi, H.R., Pérez-Camacho, M., Manero, O., Contraction-ratio variation and prediction of large experimental pressure-drops in sharp-corner circular contraction-expansions–Boger fluids, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, 237, 2016, pp. 39–53.

- [36] Manero, O., Pérez-López, J. H., Escalante, J. I., Puig, J. E., Bautista, F., A thermodynamic approach to rheology of complex fluids: The generalized BMP model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, 246, 1-3, 2007, pp. 22-29.
- [37] Martinie, L., Buggisch, H., Willenbacher, N. Apparent elongational yield stress of soft matter. *Journal of Rheology* 57, 627, 2013.
- [38] McKinley, G.H., *Steady and Transient Motion of Spherical Particles in Viscoelastic Liquids, Transport Processes in Bubbles, Drops & Particles*, USA, 2002, pp.338-375.
- [39] Niedzwiedz K., Buggisch, H. Willenbacher, N., Extensional Rheology of concentrated emulsions as probed by capillary breakup elongational rheometry (CaBER), *Rheol Acta* 49:1103–1116, 2010.
- [40] Owens, R. G., Phillips, T.N. *Computational Rheology*, Imperial College Press, UK, 2002.
- [41] Ovarlez, G., Barral, Q., Coussot, P., Three-dimensional jamming and flows of soft glassy materials, *Nat. Mater.*, 2010, 9, pp. 115–119
- [42] Phan-Thien, N. Tanner, R.I., A new constitutive equation derived from network theory, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 2, 1977, pp. 353-365.
- [43] Phan-Thien, N., A nonlinear network viscoelastic model, *J. Rheol.* 22, 1978, pp. 259–283.
- [44] Resendiz-Tolentino, O. *Simulación Numérica de flujo de fluidos viscoelásticos alrededor de esferas*. Tesis de Licenciatura. Universidad Nacional Autónoma de México, 2019.

- [45] Saramito, P., A new constitutive equation for elastoviscoplastic fluid flows, J. Non-Newton. Fluid Mech. 145, 2007, pp. 1-14.
- [46] Saramito, P., A new elastoviscoplastic model based on the Herschel-Bulkley viscoplastic model, J. Non-Newton. Fluid Mech. 158, 2009, pp. 154-161.
- [47] Sasmal, C., Unsteady motion past a sphere translating steadily in wormlike micellar solutions: A numerical analysis, J. Fluid Mech. 912, 2021, A52.
- [48] Sica L., De Souza-Mendes, P., Rooney, T., Is the von Mises criterion generally applicable to soft solids?, Soft Matter, 2020.
- [49] Sica, L., An experimental study of the validity of the von Mises yielding criterion for elasto-viscoplastic materials. Tesis de Doctorado. Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2017.
- [50] Tamaddon-Jahromi, H.R., Webster, M.F., Williams, P. R., Excess pressure drop and drag calculations for strain-hardening fluids with mild shear-thinning: Contraction and falling sphere problems, J. Non-Newton. Fluid Mech. 166, 2011, pp. 939-950.
- [51] Varchanis, S., Makrigiorgos, G., Moschopoulos, P., Dimakopoulos, Y., Tsamopoulos, J., Modeling the rheology of thixotropic elasto-visco-plastic materials, J. Rheol. 63, 2019, pp. 609-639.
- [52] Vasquez, P. A., McKinley, G. H., Cook, L. P., A network scission model for wormlike micellar solutions I. Model formulation and viscometric flow predictions, J. Non-Newton. Fluid Mech. 144, 2007, pp. 122-139.
- [53] Von Mises R. Mechanik der plastischen formänderung von kristallen. Zeitschrift Für Angew Math Und Mech 1928; 8:161 – 85.

- [54] Webster, M. F., Tamaddon-Jahromi, H. R., Aboubacar, M., A second order hybrid finite-element/volume method for viscoelastic flows, *Numer. Meth. Partial Differ. Equations* 21, 2005, pp. 272-296.
- [55] Yang, J., Viscoelastic wormlike micelles and their applications, *Curr. Opin. Colloid Interface.* 7. 2002, pp. 276-281.
- [56] Zhang, Q., Liu, W., & Dahi Taleghani, A., Numerical study on non-Newtonian Bingham fluid flow in development of heavy oil reservoirs using radiofrequency heating method, 2022, *Energy*, 239 (Part E).
- [57] Zhang, X., Fadoul, O., Lorenceau, E. , Coussot, P. Yield and flow of soft-jammed systems in elongation, 120, 048001, 2018.
- [58] Zhou, L., McKinley, G. H., Cook, L. P., Wormlike micellar solutions: III. VCM model predictions in steady and transient shearing flows, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 211, 2014, pp. 70-83.