



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA MECÁNICA - TERMOFLUIDOS

**ESTUDIO REOLÓGICO APLICADO A LA PROCESABILIDAD DE
MATERIALES POR EXTRUSIÓN EN MANUFACTURA ADITIVA**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:

M.I. KAREN YESENIA PÉREZ SALAS

TUTOR

DR. JUAN PABLO AGUAYO VALLEJO
INSTITUTO DE CIENCIAS APLICADAS Y TECNOLOGÍA, UNAM

COTUTOR

DR. LEOPOLDO RUIZ HUERTA
LABORATORIO NACIONAL DE MANUFACTURA ADITIVA Y DIGITAL,
INSTITUTO DE CIENCIAS APLICADAS Y TECNOLOGÍA, UNAM

COMITÉ TUTOR

DRA. MARIA CRISTINA, PIÑA BARBA
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, AGOSTO 2023



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: Dra. Maria Cristina Piña Barba

Secretario: Dr. Leopoldo Ruiz Huerta

1er. Vocal: Dr. Juan Pablo Aguayo Vallejo

2do. Vocal: Dr. Octavio Manero Brito

3er. Vocal: Dr. Elías Zúñiga Alex

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología (ICAT), UNAM.

Laboratorio de Ingeniería de Proceso.

Laboratorio Nacional de Manufactura Aditiva y Digital (MADiT).

Tutor de la tesis:

Dr. Juan Pablo Aguayo Vallejo

Firma

Cotutor de la tesis:

Dr. Leopoldo Ruiz Huerta

Firma

Agradezco Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca No. 737007 otorgada durante la realización de este trabajo. Además de agradecer al financiamiento recibido de los proyectos:

Universidad Nacional Autónoma de México UNAM-DGAPA-PAPIIT IN108415, IN108015, IN109721, IT102423 y IG100220, Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) 314934 y Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) Ciencia de Frontera CF-MG-20191010144641770-140617.

Índice general

Introducción	1
1. Planteamiento del problema	5
1.1. Hipótesis	5
1.2. Objetivo	6
1.3. Alcances	6
1.4. Recursos	6
2. Marco teórico	7
2.1. Reología	7
2.1.1. Flujos reométricos	8
2.1.2. Viscoelasticidad lineal	11
2.1.3. Desviaciones de la linealidad	16
2.1.4. Modelos reológicos	17
2.2. Dinámica de Fluidos Computacional	20
2.3. Manufactura aditiva	22
2.4. Biomateriales	25
3. Estudio de flujo en contracción planar	27
3.1. Introducción	27
3.2. Modelado matemático y simulación	29

3.2.1. Solución analítica	31
3.3. Resultados	34
3.4. Conclusiones	40
4. Estudio de flujo en contracción axisimétrica	42
4.1. Introducción	42
4.2. Formulación matemática	47
4.2.1. Modelo lineal de Phan-Thien/Tanner	49
4.2.2. Modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner	50
4.3. Solución con condición de deslizamiento parcial en la pared	51
4.4. Resultados y discusión de resultados	53
4.5. Conclusiones	62
5. Efectos reológicos transitorios	64
5.1. Introducción	64
5.2. Modelo reológico	69
5.3. Resultados	75
5.4. Conclusiones	77
6. Caracterización reológica de hidrogel para aplicación de extrusión de material mediante manufactura aditiva	84
6.1. Introducción	85
6.2. Materiales	87
6.2.1. Reometría	88
6.2.2. Proceso de extrusión	88
6.2.3. Estudio de morfología de andamios	88
6.3. Resultados	89
6.3.1. Resultados de las mediciones reométricas	89
6.3.2. Resultados del proceso de extrusión	92

6.4. Conclusiones	97
7. Conclusiones	99

Índice de figuras

2.1. Diagrama de clasificación de fluidos.	8
2.2. Representación de una deformación cortante.	9
2.3. Representación de una deformación extensional uniaxial.	11
2.4. Espectro de regiones de un líquido viscoelástico [7].	14
2.5. Diagrama vectorial que ilustra la relación entre el módulo complejo G^* , el módulo elástico G' y el módulo viscoso G'' utilizando el ángulo de desplazamiento de fase δ	14
2.6. Barrido de amplitud, con deformación controlada y tres aumentos de amplitud.	15
2.7. Pruebas tixotrópicas. a) Perturbación de la temperatura, b) Respuesta del material a la perturbación dada.	17
2.8. Barrido de amplitud, donde se muestra el esfuerzo de cedencia τ_y y el punto de flujo τ_f	17
2.9. Elemento lineal de dos nodos [18].	22
2.10. Descripción general del proceso de extrusión.	23
3.1. Diagrama de una contracción hiperbólica planar.	30
3.2. Viscosidad cortante y extensional planar para un fluido PTT sin disolvente: a) endurecimiento moderado, ($\varepsilon_{PTT} = 0.5$); b) endurecimiento fuerte ($\varepsilon_{PTT} = 0.02$).	35
3.3. Perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 4:1, a) $We = 0$, b) $We = 0.5$, c) $We = 2$	36

3.4. Perfiles adimensionales de velocidad para el fluido en una contracción 8:1 y endurecimiento fuerte: a) $We = 0$ (fluido newtoniano) y b) $We = 0.5$; donde las líneas corresponden a la solución semi analítica y los símbolos a la solución numérica.	37
3.5. Perfiles de velocidad adimensional a la salida de la contracción con diferentes números de We : a) fluido con endurecimiento moderado contracción 4:1, y b) fluido con endurecimiento fuerte contracción 8:1; donde las líneas corresponden a la solución semi analítica y los símbolos a la solución numérica	38
3.6. Perfiles de caída de presión adimensional a lo largo de la línea central: a) fluido con endurecimiento moderado, y b) fluido con endurecimiento fuerte; donde las líneas corresponden a la solución semi analítica y los símbolos a la solución numérica.	39
3.7. Evolución de la rapidez de deformación adimensional a lo largo de la dirección χ en diferentes posiciones verticales, en la contracción 8:1	40
4.1. Diagrama de una geometría semihiperbólica axisimétrica.	48
4.2. Viscosidad cortante y extensional de un fluido sPTT sin contribución de solvente: a) endurecimiento moderado; b) endurecimiento fuerte.	53
4.3. Comparación entre la solución analítica y semianalítica con un número variable de términos en la suma, para la contracción 4:1: a) perfil de velocidades adimensional a lo largo de la línea de simetría; b) caída de presión adimensional a lo largo de la línea de simetría.	54
4.4. Perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 4:1: a) $We = 0$ (caso newtoniano), b) $We = 0.5$ y c) $We = 1$; los símbolos corresponden a la solución semianalítica; las líneas representan los resultados obtenidos con Polyflow [®]	55
4.5. Caída de presión adimensional a lo largo del eje de simetría para la contracción 4:1: a) We 0 a 0.2, y b) We 0.5 a 2.	56

4.6.	Rapidez de deformación a lo largo de la dirección Z para la contracción 4:1 : a) $We = 0$ (caso newtoniano), b) $We = 0.5$, y c) $We = 1$	57
4.7.	Perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 8:1: a) $We = 0$ (caso newtoniano), y b) $We = 0.1$; los símbolos corresponden a la solución semi-analítica y las líneas representan los resultados obtenidos con Polyflow [®]	58
4.8.	Caída de presión adimensional a lo largo del eje de simetría para la contracción 8:1.	59
4.9.	Rapidez de deformación a lo largo de la dirección Z para la contracción 8:1.	59
4.10.	Perfiles de velocidad a la salida ($Z = 1$) y caída de presión a lo largo de la línea de simetría: a) velocidad para $We = 0$ (caso newtoniano), b) velocidad para $We = 0.5$, c) caída de presión para $We = 0$ y d) caída de presión para $We = 0.5$; los símbolos llenos corresponden a los resultados sin deslizamiento, mientras que los símbolos vacíos corresponden a la condición de deslizamiento.	61
5.1.	Representación esquemática de la contracción 8:1, en ella, se muestran las principales características físicas del flujo y la densidad de malla elegida.	71
5.2.	Análisis de independencia de malla en términos de la caída de presión adimensional a lo largo de la contracción; a) en el caso de la contracción 4:1 fueron evaluadas tres mallas y b) en el caso de la contracción 8:1 fueron evaluadas dos mallas.	72
5.3.	Análisis de independencia de malla en términos de comportamiento para la contracción 4:1, de un fluido monotónico y $We = 2$; a) malla media (M2) y b) malla refinada (M3).	72
5.4.	Funciones reométricas del modelo BMP: a) viscosidad de cortante y extensional estacionaria, b) primera diferencia de esfuerzo normal estacionaria, c) viscosidad de cortante transitoria, d) primera diferencia de esfuerzo normal transitoria, y e) viscosidad transitoria. Los símbolos corresponden a el fluido con rebasamiento y las líneas al fluido monotónico.	79

5.5. Perfil de velocidad para flujo tipo Poiseuille; comparación entre la solución analítica y el modelo implementado considerando un valor de $We = 2.0$ para el caso monotónico y rebasamiento.	80
5.6. Perfil caída de presión: a) contracción 4:1 y b) contracción 8:1.	80
5.7. Caída de presión normalizada $\Delta P_{max}/\Delta P_{newt}$ a diferentes valores de We : a) contracción 4:1, y b) contracción 8:1.	81
5.8. Comportamiento de vórtices con respecto al We , para la contracción 4:1. . . .	82
5.9. Comportamiento de vórtices con respecto al We , para la contracción 8:1. . . .	83
6.1. Representación esquemática de los cambios producidos en la transición sol-gel del F127/PBS.	86
6.2. Temperatura de gelificación a diferentes concentraciones de F127/PBS.	90
6.3. Viscosidad <i>vs.</i> rapidez de corte: a) viscosidad a temperatura de gelificación y b) viscosidad a 37 °C.	90
6.4. Punto de flujo <i>vs.</i> concentración de hidrogel a la temperatura de extrusión. . .	91
6.5. Módulos <i>vs.</i> tiempo, el primer intervalo de 0.300 s está a temperatura de gelificación, mientras que el segundo intervalo de 300-600 s esta a temperatura de 37 C. a) G' (símbolos llenos) y G'' (símbolos vacíos) y b) respuesta en términos de G^*	92
6.6. Andamios de F-127/PBS: a) 20 %, b) 22.5 %, c) 25 %, d) 27.5 % y e) 30 %. . .	94
6.7. Ventana de procesabilidad del material en términos del módulo complejo y el punto de flujo, el flujo y la presión de extrusión.	95
6.8. Micrografías de las estructuras reticulares que componen los andamios. A la izquierda se muestran las imágenes por micro-CT y a la derecha, las obtenidas por SEM.	96

Introducción

Los procesos de extrusión de materiales en manufactura aditiva han atraído una considerable atención para la fabricación de estructuras debido a su capacidad de crear geometrías complejas, capa por capa, mediante la extrusión de filamentos continuos que pueden incorporar células, péptidos, proteínas, etc. Dentro de las aplicaciones en las que esta tecnología se ha utilizado son: regeneración de tejido óseo y cartílagos, biofabricación de tejido blando, liberación de fármacos e, incluso, impresión de órganos.

La formulación y el desarrollo de materiales, así como la determinación de sus parámetros de extrusión para la construcción de estructuras, es un gran desafío debido a que, los materiales no sólo deben fluir de manera uniforme, sino que también deben tener la capacidad de permitir la deposición de manera selectiva para conformar la geometría a construir. Las condiciones de extrusión como presión, temperatura y velocidad; pueden ser relacionadas con las propiedades reológicas de un material, tales como, viscosidad, esfuerzo de cedencia y el comportamiento del fluido dado por los módulos de pérdida y elasticidad, debido a que estas propiedades proporcionan una referencia que ayuda a determinar si el material puede ser depositado, y con esto, reducir el tiempo y costo de operación de una construcción.

Dependiendo del material a extruir, se cuenta con parámetros de extrusión, por ejemplo: presión, velocidad de extrusión, entre otros. Dichos parámetros son conocidos como ventanas de procesabilidad del material, las cuales relacionan algunas propiedades o parámetros de extrusión con la capacidad de formar una estructura, por ejemplo, Mouser et al. [1] investigaron la utilidad del material gelMA/gellan para la extrusión de cartílago, evaluando

diferentes concentraciones, para determinar la factibilidad de impresión del material en función de la capacidad del fluido para formar filamentos y para incorporar células, además de proponer la temperatura de extrusión de estas formulaciones. Por otro lado, Paxton et al. [2] estudiaron propiedades reológicas del material tales como: esfuerzo de cedencia, viscosidad cortante, así como pruebas de recuperación. En este trabajo se propuso una ventana de procesabilidad para los materiales estudiados en función de la presión de extrusión y el diámetro de boquillas, y basan las pruebas de recuperación del material en el comportamiento de la viscosidad con respecto al tiempo. Por otro lado, Smay et al. [3] proponen la factibilidad de impresión de forma cuantitativa mediante un parámetro que relaciona el módulo elástico, gravedad específica y parámetros geométricos del andamio a imprimir. Wei et al. [4] definieron la temperatura para depositar hidrogeles muy viscosos en función del comportamiento de la viscosidad compleja con respecto a la temperatura.

Por otro lado, Lee and Yeong [5] utilizaron el modelo de ley de potencia para describir el comportamiento del hidrogel y desarrollaron un modelo numérico que relaciona el flujo de material dispensando con la velocidad de movimiento del equipo de extrusión, lo cual permite estimar el ancho del filamento extruidos. Mackey [6], realizó una revisión del comportamiento reológico en la extrusión de material, demostrando que existen oportunidades de mejora en el proceso que necesitan una determinación reológica, interpretación, simulación y optimización para lograr manufacturar objetos en tres dimensiones más fuertes de manera oportuna. Evidenciando que, aunque los polímeros son utilizados actualmente en manufactura aditiva, no existe un estudio detallado de la interacción de las propiedades reológicas de éstos con el proceso. Aunque existen muchos estudios de optimización para la extrusión de materiales, se sabe poco sobre la forma del hidrogel extruido, lo ideal es que el filamento mantenga su forma cilíndrica al salir de la boquilla, lo cual no es posible debido a los esfuerzos elásticos a los que está sometido el hidrogel antes de salir a la plataforma de construcción.

Para obtener una mejor fidelidad en los andamios construidos mediante manufactura aditiva, es importante mejorar los modelos de flujo, ya sean teóricos o computacionales, que

permitan aproximar la presión necesaria en un geometría específica del material de estudio, y relacionar las propiedades de dicho material obtenidas de una caracterización reológica detallada. Por lo tanto, en el presente trabajo se obtuvieron soluciones semianalíticas para flujo a través de contracciones para geometrías planares y axisimétricas, en las cuales el tipo de geometría puede ser modificado para predecir la velocidad y caída de presión del fluido. Además mediante simulaciones se estudio el efecto de la propiedades reológicas transitorias y su efecto en la respuesta estacionaria. De manera experimental se caracterizó reológicamente un hidrogel termorreversible y en diferentes etapas del proceso de extrusión, lo cual permitió identificar una adecuada deposición del material en términos del punto de flujo, y módulo complejo relacionado con parámetros de extrusión como velocidad y caída de presión.

Los capítulos de está tesis están estructurados de la siguiente manera:

El planteamiento del problema, la hipótesis, así como, los objetivos y alcances de este trabajo se presenta en el capítulo 1.

En el capítulo 2, se presentan conceptos y ecuaciones básicas de reología y mecánica de fluidos. Se explican flujos reométricos, viscoelasticidad lineal y desviaciones de la linealidad, así como los modelos reológicos de Oldroyd-B, Phan-Thien/Tanner y Bautista-Manero-Puig utilizados en este trabajo. También se aborda conceptos de manufactura aditiva y biomateriales.

El estudio de flujo de un fluido viscoelástico a través de una contracción hiperbólica planar se presenta en el capítulo 3. En el cual se obtuvo una solución analítica a partir de la aproximación de lubricación para la versión lineal del modelo Phan-Thien/Tanner que permite obtener la caída de presión y velocidad del fluido.

En el capítulo 4, se presenta una solución analítica aproximada para el flujo de un fluido Phan-Thien/Tanner a través de una contracción axisimétrica. Dicha aproximación nos permite calcular la respuesta de velocidad y presión para el flujo a través de cualquier geometría; aquí se consideró la contracción semihiperbólica, debido a que alcanza una velocidad de extrusión casi constante en el centro. Además, se presenta la solución analítica y semianalítica

considerando condición de deslizamiento de Navier.

El estudio de las propiedades reológicas transitorias se presenta en el capítulo 5. Mediante el modelo Bautista-Manero-Puig es posible considerar dos fluidos que llegan al mismo estado estacionario partiendo de estados transitorios diferentes. Uno de los fluidos estudiados presenta una evolución transitoria monótonica mientras que el otro, presenta una serie de máximos (rebasamientos) y mínimos. Esta característica del modelo Bautista Manero permitió estudiar la influencia que pueden tener las propiedades transitorias en flujos estacionarios.

En el capítulo 6, se presenta la caracterización reológica realizada para estudiar la relación entre la reología y la factibilidad de extrusión y deposición del material. Los parámetros estudiados fueron viscosidad, módulo elástico, viscoso y complejo, temperatura de gelificación y tiempo de recuperación ante una variación de temperatura.

Capítulo 1

Planteamiento del problema

La extrusión de materiales para manufactura aditiva permite la deposición de filamentos capa por capa, para lo cual, es necesario mantener un flujo de extrusión constante para lograr una deposición de uniforme de capas y obtener estructuras, además se debe tener una adhesión adecuada entre las capas depositadas y la base sobre la que se deposita el material.

La viabilidad de extrusión de un material depende tanto de parámetros del proceso como: temperatura, presión, velocidad del cabezal, temperatura de la base, así como de las propiedades del material, como: esfuerzo de cedencia, viscosidad y elasticidad; lo que requiere seleccionar parámetros de proceso adecuados para cada tipo de material.

1.1. Hipótesis

La determinación de viscosidad cortante, temperatura de gelificación, los módulos de almacenamiento y pérdida, la recuperación del material ante un cambio de temperatura permitirá identificar la viabilidad de un material para ser extruido por manufactura aditiva.

1.2. Objetivo

Determinar como afecta el comportamiento reológico de un material al proceso de extrusión de material para manufactura aditiva, con el fin de determinar los parámetros adecuadas del proceso de extrusión para manufactura aditiva.

1.3. Alcances

- Realizar la determinación reológica del material (hidrogel) en flujo cortante simple y SAOS; determinar temperatura de gelificación, esfuerzo de cedencia y la influencia de la temperatura y tixotropía.
- Relacionar las propiedades reológicas con la factibilidad de extrusión y calidad de deposición del material considerando los parámetros del proceso de extrusión de material.
- Estudiar el proceso de extrusión de manera analítica y numérica, para determinar caída de presión y flujo en diferentes geometrías.
- Determinar si existe influencia de las propiedades reológicas transitorias en el proceso de extrusión de material a través de la contracción.

1.4. Recursos

- Reómetro Anton Paar[®] MCR 101.
- Licencia académica Ansys fluent[®].
- Envisiontec 3D-Bioplotter[®].
- laboratorio equipado para preparación de muestras.

Capítulo 2

Marco teórico

En esta capítulo se presentan los conceptos fundamentales de reología, manufactura aditiva y dinámica computacional de fluidos relevantes para el desarrollo de este trabajo; Además, se presentan los modelos reológicos requeridos para el desarrollo.

2.1. Reología

La palabra reología procede del griego: *rheos*, que significa “*fluir*”. Por tanto, la reología es literalmente “*ciencia del flujo*”. El término fue introducido por Bingham en 1920, para designar a la ciencia que estudia el flujo y la deformación de la materia. Comúnmente, se estudia el comportamiento del flujo de fluidos complejos como polímeros, suspensiones, emulsiones, alimentos, sistemas biológicos, pastas y otros compuestos [7]. La clasificación más general de los fluidos desde el punto de vista reológico es:

1. Newtonianos: mantienen una viscosidad constante a condiciones de temperatura y presión dadas. Generalmente son fluidos con peso molecular bajo.
2. No newtonianos: la viscosidad está en función de la rapidez de deformación, a su vez, estos se clasifican de acuerdo con su dependencia con el tiempo y a la rapidez de deformación (ver Fig. 2.1).

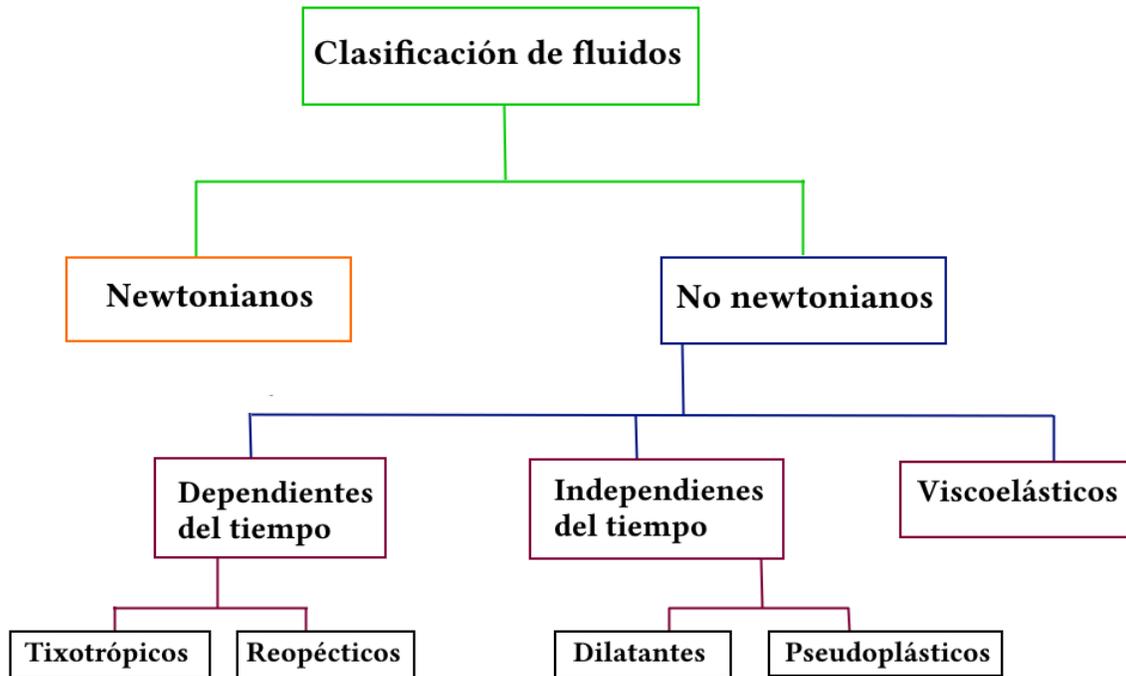


Figura 2.1: Diagrama de clasificación de fluidos.

2.1.1. Flujos reométricos

Es posible extraer propiedades reológicas de muchos tipos de flujos, sin embargo, se recomienda utilizar flujos estándar para extraer la información requerida, los cuales permiten caracterizar cómo se comporta un fluido en distintas condiciones de flujo. Para que se pueda extraer esta información, los flujos deben ser homogéneos (reométricos). Se les conoce como flujos estándar a aquellos flujos que cumplen las siguientes consideraciones [8]:

- El flujo deberá ser lo suficientemente simple, de manera que la propiedad faltante (ya sea el perfil de velocidad o el esfuerzo) pueda calcularse a partir de las ecuaciones constitutivas.
- El flujo debe poderse estudiar experimentalmente.

Flujo cortante simple y fluidos newtonianos

El flujo estándar más conocido es el flujo cortante simple, el cual se ejemplifica mediante el flujo en placas paralelas de extensión infinita, separadas por una distancia H , y la placa superior se mueve a una velocidad constante U . Para mantener la velocidad constante de la placa se debe vencer la resistencia del fluido; si el movimiento es suficientemente lento el flujo se puede interpretar como si se diera por capas (régimen laminar). En la Fig.2.2a se muestra una representación esquemática del flujo, mientras que en la Fig.2.2b se presenta la deformación del fluido al tiempo inicial t_1 , donde se observa que los ángulos internos de elemento del fluido son de 90° y al tiempo $t_2 + \Delta t$, se observa el cambio de ángulos en el elemento del fluido.

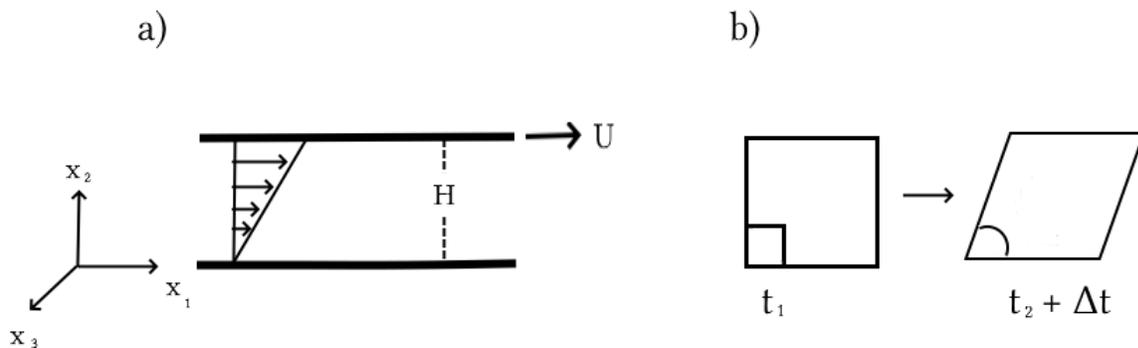


Figura 2.2: Representación de una deformación cortante.

La ecuación constitutiva reológica más simple, es el modelo de viscosidad de Newton considerando que el fluido es incompresible en forma tensorial es expresado como:

$$\underline{\underline{\tau}} = 2\mu\underline{\underline{d}}, \quad (2.1)$$

donde $\underline{\underline{\tau}}$ es el esfuerzo cortante, μ es la viscosidad y $\underline{\underline{d}}$ es la rapidez de deformación, la cual está dada por:

$$\underline{\underline{d}} = \frac{1}{2}([\nabla \underline{v}] + [\nabla \underline{v}]^T), \quad (2.2)$$

a los fluidos que cumplen con la ecuación anterior se les conoce como fluidos newtonianos.

En el flujo cortante simple se impone el perfil de velocidades, el cual es definido en coordenadas cartesianas como:

$$\nabla \underline{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}_{1,2,3} = \begin{bmatrix} \dot{\epsilon}(t)\chi_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}_{1,2,3}, \quad \underline{\underline{d}} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2}\dot{\epsilon}(t) & 0 \\ \frac{1}{2}\dot{\epsilon}(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

donde $\dot{\epsilon}(t) = \partial v_1 / \partial x_2$.

con la cinemática dada en la ecuación 2.3, la ley de viscosidad de Newton se reduce a:

$$\tau_{12} = 2\mu d, \quad (2.4)$$

donde d es la magnitud del tensor $\underline{\underline{d}}$, este flujo estándar, nos permite entonces definir a la viscosidad cortante o comúnmente conocida solo por viscosidad:

$$\mu = \frac{\tau_{12}}{2d}. \quad (2.5)$$

Flujo extensional

El flujo extensional, es una medida de la resistencia que presenta un fluido al ser deformado en una dirección en particular, como se muestra en la Fig.2.3, la cual representa un elemento de volumen inicial (marcado con línea continua), al cual se le aplica una deformación en dirección x_1 y debido a la condición de incompresibilidad, se da una deformación en las direcciones x_2 y x_3 , como se muestra en la figura con la línea punteada, además no hay deformación cortante y el volumen se mantiene.

Para el flujo extensional uniaxial se impone la siguiente cinemática:

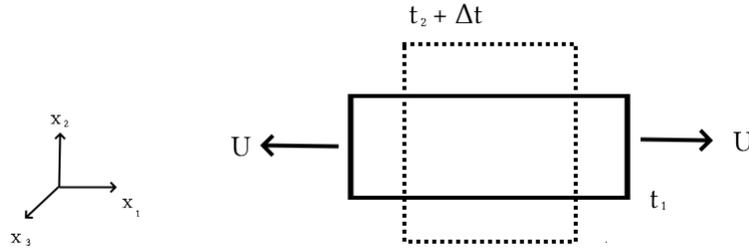


Figura 2.3: Representación de una deformación extensional uniaxial.

$$\nabla \underline{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}_{1,2,3} = \begin{bmatrix} -\frac{\dot{\epsilon}(t)}{2} \chi_1 \\ -\frac{\dot{\epsilon}(t)}{2} \chi_2 \\ \dot{\epsilon}(t) \chi_3 \end{bmatrix}_{1,2,3}, \quad \underline{\underline{d}} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \dot{\epsilon}(t) & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \dot{\epsilon}(t) & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\epsilon}(t) \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

donde $\dot{\epsilon}$ es la rapidez de extensión.

sustituyendo la ecuación 2.6 en la ecuación 2.3 y reduciendo términos se obtiene la viscosidad extensional:

$$\eta_e = \frac{\tau_{33} - \tau_{11}}{\dot{\epsilon}}, \quad (2.7)$$

para un fluido newtoniano se cumple que la viscosidad extensional es:

$$\eta_e = 3\mu, \quad (2.8)$$

mientras que, para fluidos viscoelásticos, la viscosidad está en función de la rapidez de elongación:

$$\eta_e = \eta_e(\dot{\epsilon}), \quad \eta_e > 3\eta \quad (2.9)$$

2.1.2. Viscoelasticidad lineal

Se les denomina materiales viscoelásticos a aquellos que presentan una combinación de efectos viscosos y elásticos. El comportamiento viscoso del material puede ser modelado

mediante la ley de viscosidad de Newton, por otro lado, el fenómeno elástico puede ser representado mediante la ley de Hooke. Como ejemplos de fluidos viscoelásticos están la mayoría de las emulsiones concentradas, geles y pastas, los cuales a bajas deformaciones el fluido se comporta como si fuera un sólido elástico, mientras que cuando está sometido a grandes deformaciones fluyen como si fuera líquido. Esto es posible debido a que su estructura interna es capaz de almacenar energía a bajas deformaciones, la cual libera cuando se detiene la deformación para volver a su estado original; cuando la deformación es de mayor magnitud, la estructura interna colapsa y se produce el flujo del material [9].

Ahora bien, está la teoría de viscoelasticidad lineal en la cual las deformaciones son de pequeña magnitud y por tanto en este régimen lineal el esfuerzo es directamente proporcional a la deformación, es decir, duplicar el esfuerzo al que se somete una muestra del fluido resultará en el doble de la deformación. El comportamiento viscoelástico puede ser medido experimentalmente mediante una prueba de esfuerzo oscilatorio de pequeñas amplitudes (SAOS, por sus siglas en inglés), la cual consiste en aplicar una deformación sinusoidal cortante de baja amplitud para obtener la respuesta del esfuerzo medido de las funciones materiales conocidas como módulos de almacenamiento G' y de pérdida G'' .

La deformación (ϵ) impuesta es expresada como [10]:

$$\epsilon = \gamma_0 \sin(\omega t), \quad (2.10)$$

donde γ_0 es la amplitud de la deformación y ω es la frecuencia del movimiento. La velocidad de deformación es $\partial\epsilon/\partial t$ la cual está dada por:

$$\dot{\epsilon} = \gamma_0 \cos(\omega t), \quad (2.11)$$

si un fluido se somete al movimiento dado por la ecuación (2.10) el esfuerzo de corte producido se presenta con la misma frecuencia pero normalmente fuera de fase, es decir, la onda del esfuerzo resultante está desplazada por un ángulo γ entonces el esfuerzo se expresa como:

$$\tau = \tau_0 \sin(\omega t + \delta), \quad (2.12)$$

donde τ_0 corresponde a la amplitud de la onda de esfuerzo medido y δ es el desfase. Utilizando la propiedad trigonométrica de la suma de ángulos y sustituyendo en la ecuación anterior se obtiene:

$$\tau = \tau_0 \sin(\omega t) \cos(\delta) + \tau_0 \cos(\omega t) \sin(\delta), \quad (2.13)$$

y dividiendo entre una amplitud de onda constante γ_0 :

$$\frac{\tau}{\gamma_0} = \frac{\tau_0}{\gamma_0} \sin(\omega t) \cos(\delta) + \frac{\tau_0}{\gamma_0} \cos(\omega t) \sin(\delta), \quad (2.14)$$

donde G' y G'' se definen como:

$$G'(\omega) = \frac{\tau_0}{\gamma_0} \cos(\gamma), \quad G''(\omega) = \frac{\tau_0}{\gamma_0} \sin(\gamma) \quad (2.15)$$

G' está en fase con la deformación y G'' está en fase con la rapidez de deformación.

En la Figura 2.4 se muestra la respuesta general de líquidos estructurados en los cuales se pueden diferenciar regiones específicas. La primera región es conocida como viscosa o terminal, en ella predomina el comportamiento elástico del fluido y prevalece el comportamiento viscoso. Todos los materiales tienen esta región, incluso los sólidos, pero el rango de frecuencias donde se observa es tan bajo que experimentalmente es difícil de detectar. La región de transición al flujo es llamada así porque se observa un cruce de los módulos esta dado por el tiempo de relajación del fluido λ . En la región gomosa (rubbery), el comportamiento elástico predomina y el material se comporta como un sólido. En la región de transición también se puede observar un cruce, el cual es conocido como el segundo tiempo característico del material. La región vítrea se encuentra a frecuencias más altas, donde domina de nuevo el comportamiento viscoso [7].

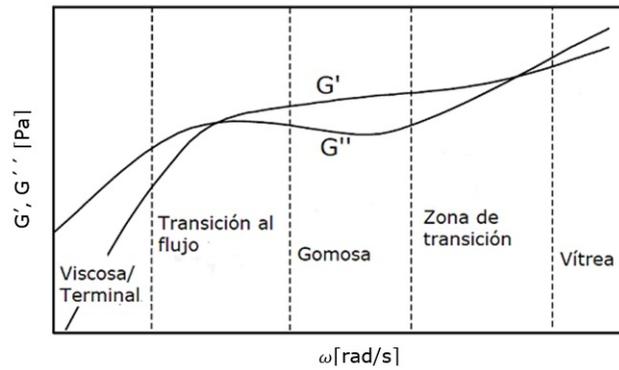


Figura 2.4: Espectro de regiones de un líquido viscoelástico [7].

Modulo complejo

El módulo complejo (G^*) es una medida de la resistencia global de un material a la deformación, considerando tanto la respuesta viscosa como elástica en un mismo parámetro. Es útil de cuantificar, ya que es una medida directa de la rigidez de la estructura del material, por ello puede ser utilizado como indicador de flexibilidad o rigidez. Este número complejo se puede representar como se muestra Fig. 2.5 y se pueden expresar como:

$$G^* = G' + iG'' \tag{2.16}$$

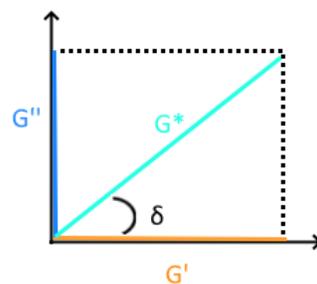


Figura 2.5: Diagrama vectorial que ilustra la relación entre el módulo complejo G^* , el módulo elástico G' y el módulo viscoso G'' utilizando el ángulo de desplazamiento de fase δ .

Ángulo de fase

El ángulo de fase es la diferencia entre el esfuerzo y la deformación en una prueba oscilatoria (ver Fig. 2.5); es una medida del comportamiento de un material: sí el valor es cercano a cero, el material se comporta como si fuera un sólido, por otro lado, si el valor está más cerca de 90° el material se comporta como líquido. Es expresado como:

$$\tan \delta = \frac{G''}{G'} \quad (2.17)$$

Barrido de amplitud

El barrido de amplitud consiste en pruebas oscilatorias realizadas manteniendo constante la frecuencia y variando la amplitud (ver Fig. 2.6). Se utiliza para determinar correctamente la región viscoelástica lineal (LVE, por sus siglas en inglés) la cual describe el comportamiento de deformación del fluido en un intervalo no destructivo [11].

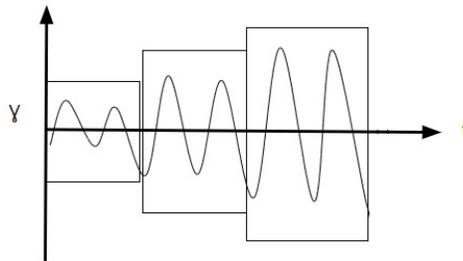


Figura 2.6: Barrido de amplitud, con deformación controlada y tres aumentos de amplitud.

Tixotropía

El término tixotropía es una combinación de palabras griegas: “*Thixis*” significa tocar, en el sentido de perturbar al poner en movimiento (por ejemplo, al remover o agitar), y “*trepein*” significa girar, cambiar o transformar. Este término podría traducirse como “cambio

estructural debido a una fuerza mecánica". En los últimos años, el análisis tixotrópico se ha centrado más en estudiar la recuperación de la estructura que en cuantificar la estructura. La tixotropía es una propiedad que caracteriza la reversibilidad de cambio en la estructura de los fluidos. Muchos de los fluidos estructurados como suspensiones, geles o dispersiones presentan comportamiento tixotrópico [12, 13].

Los experimentos de tixotropía son muy útiles para comprender los efectos de los procesos de fabricación, manipulación y dosificación de los productos. En el caso de productos tópicos, comprender estas propiedades es importante durante la aplicación y la absorción a través de la piel, ya que puede afectar la eficacia [14].

En este trabajo se realizaron pruebas de barrido de amplitud cambiando la temperatura, obteniendo el tiempo en cual la muestra recupera el valor del modulo complejo. Este estudio es útil conocer la recuperación de la estructura del material (ver Fig. 2.7b). Si bien la prueba propuesta aquí no es de tixotropía, se utiliza el mismo principio de observar el comportamiento de una propiedad respecto al tiempo.

2.1.3. Desviaciones de la linealidad

Frecuentemente los materiales semisólidos presentan el fenómeno de esfuerzo de cedencia, el cual representa valor del esfuerzo mínimo que se necesita vencer para que el material comience a fluir, cuantifica el punto de ruptura de la microestructura cuando se inicia el flujo mediante una rampa de esfuerzo de corte creciente. Este tipo de prueba se utiliza para estudiar y modelar numerosas propiedades y procesos como la facilidad de liberación del producto (jeringabilidad, inyectabilidad, untabilidad).

Una de las maneras de obtener experimentalmente el esfuerzo de cedencia es mediante pruebas de barrido de amplitud (ver Fig. 2.8), el cual permite obtener el valor del esfuerzo de cedencia τ_y en el límite del rango LVE donde $G' > G''$, y el punto de flujo τ_f cuando $G' = G''$ y el ángulo de fase es de 45° .

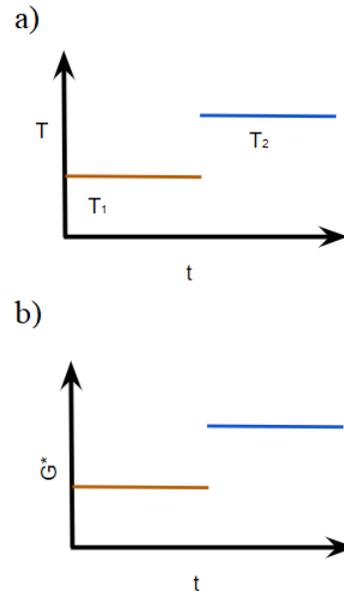


Figura 2.7: Pruebas tixotrópicas. a) Perturbación de la temperatura, b) Respuesta del material a la perturbación dada.

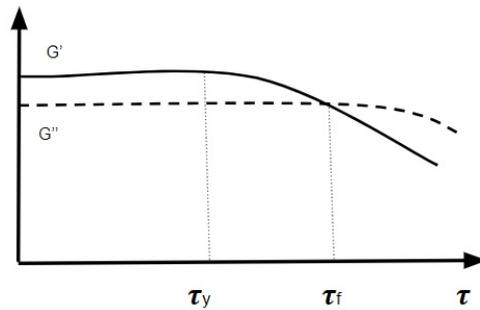


Figura 2.8: Barrido de amplitud, donde se muestra el esfuerzo de cedencia τ_y y el punto de flujo τ_f .

2.1.4. Modelos reológicos

Con el fin de representar el comportamiento de fluidos reales, se requieren modelos constitutivos no lineales que relacionen el comportamiento de esfuerzo y deformación de fluidos no newtonianos.

El flujo de fluidos viscoelásticos es descrito por las ecuaciones de conservación de masa, ecuación de cantidad de movimiento y ecuación constitutiva reológica. Considerando que los fluidos son incompresibles, y que los efectos gravitatorios no son significativos, las ecuaciones de conservación de masa y ecuación de movimiento pueden ser expresadas como:

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0, \quad (2.18)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} + \mu \nabla^2 \underline{v}, \quad (2.19)$$

donde p , \underline{v} y $\underline{\underline{\tau}}$ representan la presión hidrodinámica, el vector de velocidad y el tensor de esfuerzos en el fluido; además, ρ es la densidad del fluido, respectivamente.

Modelo de Oldroyd-B

El modelo de Oldroyd-B se utiliza para describir adecuadamente flujos con grandes deformaciones y rapidez de deformación. En el cual se representa la contribución de la parte polimérica y del solvente al esfuerzo generado, la primera mediante la ecuación convectiva superior de Maxwell y el disolvente mediante la contribución newtoniana [15]:

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = 2\eta_p \underline{\underline{d}}, \quad (2.20)$$

donde el superíndice ∇ es llamado operador derivada convectiva superior, la cual es expresada como:

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{\tau}} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{\tau}} - [\nabla \underline{v}]^T \cdot \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \cdot [\nabla \underline{v}], \quad (2.21)$$

y $\underline{\underline{\tau}}$ se separa en dos términos, mediante:

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_p + \underline{\underline{\tau}}_s, \quad (2.22)$$

donde $\underline{\underline{\tau}}_p$ es la contribución polimérica y $\underline{\underline{\tau}}_s$ la contribución del solvente.

Modelo de Phan-Thien/Tanner

El modelo simplificado de Phan-Thien Tanner (sPTT) es un modelo que considera la creación y destrucción de puntos de entrelazamientos; tiene dos parámetros libres, los cuales se pueden obtener mediante experimentos; ξ_{PTT} se obtiene a partir de flujos viscométricos, mientras que ϵ_{PTT} puede obtenerse a partir de experimentos de elongación. Esto le otorga una gran flexibilidad al modelo porque puede controlar los dos tipos de respuesta del flujo [16].

La ecuación constitutiva del modelo simplificado de sPTT es expresado como:

$$f(\underline{\underline{\tau}})\underline{\underline{\tau}} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = 2\eta_p \underline{\underline{d}}, \quad (2.23)$$

donde la función extra $f(\underline{\underline{\tau}})$ puede ser expresada de manera exponencial o de manera lineal:

$$f(\underline{\underline{\tau}}) = \begin{cases} \exp\left[\frac{\epsilon_{PTT}\lambda}{\eta_p} tr(\underline{\underline{\tau}})\right], & \text{exponencial} \\ 1 + \frac{\epsilon_{PTT}\lambda}{\eta_p} tr(\underline{\underline{\tau}}), & \text{lineal} \end{cases} \quad (2.24)$$

donde, η_p y λ representa el parámetro de viscosidad y el tiempo de relajación del fluido, respectivamente.

Modelo de Bautista-Manero-Puig

El modelo de Bautista-Manero-Puig (BMP) representa el comportamiento reológico de soluciones viscoelásticas micelares, y permite obtener la misma respuesta reológica estacionaria partiendo de una evolución transitoria diferente [17].

$$\frac{d\eta_p^{-1}}{dt} = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{1}{\eta_0} - \frac{1}{\eta_p} \right) + \left(\frac{k}{\eta_\infty} \right) \underline{\underline{\tau}}_p : \underline{\underline{d}} \quad (2.25)$$

$$\underline{\underline{\tau}}_s = 2\eta_s \underline{\underline{d}} \quad (2.26)$$

$$\underline{\underline{\tau}} + \frac{\eta_p}{G_0} \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{\tau}} = 2\eta_p \underline{\underline{d}}, \quad (2.27)$$

donde η_0 representa la contribución de viscosidad de corte cero de las micelas en forma de gusanos sin considerar el solvente, k es una constante empírica adimensional relacionada al tipo de formación micelar, G_0 es el módulo elástico y (k/η_∞) representa un solo parámetro.

2.2. Dinámica de Fluidos Computacional

La dinámica computación de fluidos (CFD por sus siglas en inglés). CFD proporciona una aproximación numérica de las ecuaciones que rigen el movimiento de los fluidos, la aplicación de CFD para analizar problemas de fluidos requiere seguir los siguientes pasos: Primero se escriben las ecuaciones matemáticas (ecuaciones diferenciales parciales) que describen el comportamiento del fluido, estas ecuaciones se discretizan para obtener un modelo numérico. Posteriormente el dominio se divide en pequeñas mallas o elementos. Por último, se utilizan condiciones iniciales y de frontera del problema para resolver las ecuaciones. El método de solución puede ser directo o iterativo [18].

Los tres elementos principales de los códigos de CFD son:

1. Pre-procesamiento empleado para delimitar la geometría, generar la malla, definir los parámetros de flujo y las condiciones de frontera del código.
2. Método de solución utilizado para resolver las ecuaciones de gobierno del flujo definido en el paso anterior. Existen cuatro métodos diferentes utilizados como método de solución de flujos: (i) método de diferencias finitas; (ii) método de elementos finitos, (iii) método de volúmenes finitos y (iv) método espectral.
3. Post-procesamiento usado para mostrar los datos en un formato gráfico.

Elemento finito

El método de elemento finito (FEM, por sus siglas en inglés) el dominio del fluido es dividido en un número finito de subdominios llamados *elementos*, los cuales forman una malla que describe el campo completo del fluido. Los elementos (en 2D) pueden ser cuadriláteros o triangulares y no es necesario que la malla esté estructurada. Las ecuaciones del modelo son aplicadas a cada uno de los subdominios. Las ecuaciones que describen el problema son multiplicadas por una función de peso antes de ser integradas sobre el dominio, resultado así, en un sistema de ecuaciones algebraicas, las cuales permiten obtener el valor de las incógnitas en los puntos nodales [18–20].

Considerando el elemento de dos nodos mostrado en la Fig. 2.9, en la cual la variable u varía linealmente dentro del elemento. Para una variación lineal de u , la primera derivada de u con respecto a x es una constante. Si se asume que u varía linealmente dentro de un elemento, no es posible definir una segunda derivada. Debido a que la mayoría de los problemas de fluidos incluyen la segunda derivada, se multiplica la ecuación diferencial por una función desconocida y, a continuación, se puede integrar toda la ecuación sobre el dominio en el que se aplica. Ahora si dividimos el dominio en varios elementos y suponemos un función para la variación de la variable u en cada elemento. Al suponer un elemento lineal de dos nodos (ver Fig. 2.9), la variación de u en cada elemento puede representarse mediante:

$$u_i = u_{i-1} + (u_{i+1} - u_{i-1}) \left[\frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right] \quad (2.28)$$

o

$$u_i = u_{i-1} \left[\frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right] + u_{i+1} \left[\frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right], \quad (2.29)$$

Los términos entre paréntesis son llamados funciones de forma y se representan por N_i . u_{i-1} y u_{i+1} son valores nodales de la variable u y son denominados como u_i . Por lo tanto la variable u puede escribirse de la siguiente forma:

$$u_i = N_{i-1}u_{i-1} + N_{i+1}u_{i+1}, \quad (2.30)$$

por lo tanto, las funciones de forma correspondientes al elemento lineal de dos nodos, representado por la ec. 2.28 son:

$$N_{i-1} = \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \quad (2.31)$$

y

$$N_{i+1} = \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \quad (2.32)$$

esta formulación se basa en una variación lineal de la variable en cada elemento. Si se utilizan variaciones de orden superior, por ejemplo, cuadráticas o cúbicas, aparecerán segundas derivadas que requieren más puntos para describirlas [18].

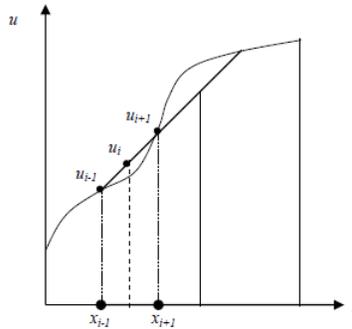


Figura 2.9: Elemento lineal de dos nodos [18].

2.3. Manufactura aditiva

La manufactura aditiva es definida por la Sociedad Americana para Pruebas y Materiales (ASTM, por sus siglas en inglés) como el proceso de unir materiales para fabricar objetos a

partir de un modelo digital en tres dimensiones, usualmente capa por capa, a diferencia de los métodos de fabricación sustractiva [21].

El proceso consiste en construir un andamio el cual debe ser diseñado mediante un modelo tridimensional digital, conocido como diseño asistido por computador (CAD, por sus siglas en inglés), estos se trasladan a un formato STL (estereolitografía), el cual mediante un programa se procesa para cortar la malla generada en capas individuales utilizadas para comunicar geometrías tridimensionales al equipo de manufactura aditiva, el cual crea el andamio mediante la adición de capas del material (ver Fig. 2.10).

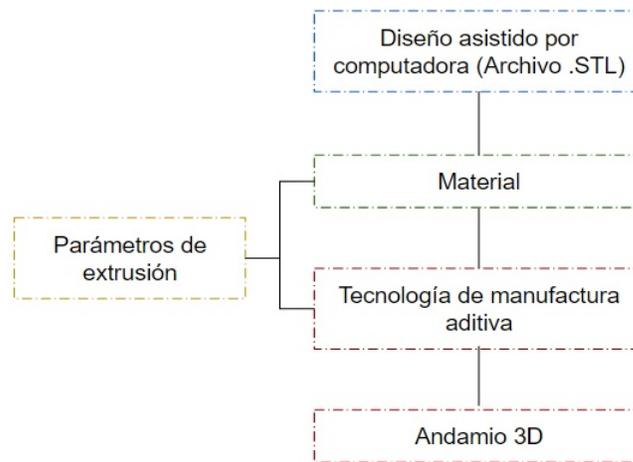


Figura 2.10: Descripción general del proceso de extrusión.

La manufactura aditiva se subdivide en categorías de acuerdo al tipo de proceso y al material empleado como [21, 22]:

1. Rociado de aglutinante: proceso de fabricación de manufactura aditiva en la cual se deposita selectivamente un agente líquido aglutinante para unir material en polvo.
2. Deposición de energía directa: proceso de fabricación de manufactura aditiva en el que se utiliza una fuente de energía (láser, haz de electrones o arco de plasma) para fundir los materiales que se están depositando.

3. Rociado de material: proceso de fabricación de manufactura aditiva en el cual se depositan selectivamente gotas de material de construcción.
4. Fusión de cama de polvo: proceso de fabricación de manufactura aditiva en el cual la energía térmica fusiona selectivamente regiones de la cama de polvo.
5. Laminación de hojas: proceso de fabricación de manufactura aditiva en el que se unen láminas de material para formar un objeto.
6. Fotopolimerización en tanque: proceso de fabricación de manufactura aditiva en el que el fotopolímero líquido de una tina se cura selectivamente mediante polimerización activada por luz UV.
7. Extrusión de material: proceso de fabricación de manufactura aditiva es dispensado selectivamente a través de una boquilla u orificio.

Dentro del proceso de extrusión de materiales, en el año 2000 fue desarrollada una nueva tecnología de prototipado rápida llamada 3D bioplotting, el cual a diferencia de las técnicas existentes permite depositar el material en estado líquido y éste puede ser solidificado por medio de reacción química, precipitación o compensación de densidades para una correcta adhesión de la primera capa en el sustrato. El espesor del material extruido puede ser modificado por el diámetro de la aguja, la presión y la velocidad de deposición. Además de permitir un intervalo de temperaturas entre los $2 - 250^{\circ}C$, con lo cual se puede procesar una amplia gama de materiales como, alginato de sodio, gelatina, colágeno entre otros [23–26].

Proceso de extrusión de materiales

El proceso consiste en descargar el material desde una jeringa utilizando aire comprimido, mientras que la jeringa se va moviendo en las tres dimensiones. Se puede procesar materiales como: cerámicos o metálicos (hidroxapatita y titanio), hidrogeles (alginatos, colágeno, gelatina, agar), termoplásticos (policaprolactona (PCL), ácido poliláctico) y otros (poliuretano, grafeno, acrilatos, silicona, etc.)

El proceso de extrusión de materiales por manufactura aditiva, es una tecnología de fabricación en la cual un material es depositado selectivamente a través de una boquilla, conforme una presión es aplicada el cabezal se desplaza en el plano (x, y) , al terminar de depositar la capa, el cabezal se desplaza hacia arriba y la siguiente capa es depositada; Debido a esto es posible hacer una deposición multimaterial y además de permitir variar la distancia entre los filamentos depositados [21].

Algunos criterios importantes para fabricar andamios adecuados son: la biocompatibilidad, biodegradabilidad y propiedades mecánicas del material. La biocompatibilidad y la biodegradabilidad son propiedades importantes que deben de poseer los materiales para garantizar que se degraden en productos no tóxicos y dejen sólo el tejido vivo deseable [27].

La desventaja que se tiene en este tipo de tecnología de fabricación es que al utilizar puntillas de diferentes tamaños afectan el esfuerzo cortante y la viabilidad celular se puede ver afectada negativamente durante el proceso de extrusión.

La selección de los materiales adecuados para utilizarlos en extrusión de material y el rendimiento de estos en aplicaciones concretas depende de varias características como: procesabilidad del material la cual depende de de propiedades reológicas (viscosidad y método de gelificación); biocompatibilidad los materiales no deben inducir respuestas indeseables del huésped y deben contribuir de forma activa a los componentes biológicos del andamio; Degradación cinética y subproductos, la rapidez de degradación debe corresponder con la aplicación deseada, los subproductos de la degradación no deben ser tóxicos; propiedades mecánicas y estructurales, los materiales deben elegirse en función de las propiedades mecánicas requeridas, desde materiales resistentes como fibras rígidas de polímeros termoplásticos hasta hidrogeles para compatibilidad celular [28].

2.4. Biomateriales

Se considera biomaterial a cualquier material destinado a interactuar con los sistemas biológicos sin provocar algún efecto local o sistémico indeseado en el huésped.

Los biomateriales generalmente se agrupan en tres clases: polímeros, cerámicos y metales. Se han realizados importantes investigaciones en las cuales se estudia la creación de compuestos de estos materiales combinando sus ventajas [29].

Para aplicaciones clinicas, es necesario que los biomateriales se puedan implantar de manera correcta; por ejemplo, el contacto adecuado entre el hueso y el implante requieren que el material permita una fácil aplicación en forma líquida (por ejemplo) y que este se transforme rápidamente en sólido o gel en el lugar adecuado [30].

Hidrogeles

Los hidrogeles están formados por redes poliméricas tridimensionales que absorben y retienen grandes cantidades de agua o fluidos biológicos que les permiten mantener su estructura; han sido utilizado ampliamente en el desarrollo de sistemas inteligentes de administración de fármacos, debido a que poseen varias características únicas, como su parecido con la matriz extracelular de los tejidos, ayudan a la proliferación y migración celular, pueden liberar de manera controlada factores de crecimiento, células y fármacos, y provocan una irritación mecánica mínima del tejido circundante [31,32]

Los hidrogeles termosensibles son de gran importancia en el área medica que buscan mejorar la administración de ingredientes farmacéuticos activos (API) a los tejidos de destino. La transición Sol-Gel de un hidrogel polimérico debe producirse a temperatura corporal con un pH y un contenido de sal fisiológicos, y poder comprobar si esto ocurre ex vivo ayuda a acelerar el estudio de este tipo de fluidos.

Además de que el hidrogel gelifique en condiciones específicas, el material también debe resistir condiciones de alto esfuerzo cortante, debido a que debe inyectarse a través de una aguja de diámetro pequeño.

Capítulo 3

Estudio de flujo en contracción planar

En este capítulo se presenta un estudio de flujo a través de una contracción hiperbólica, dicho estudio consiste en obtener una aproximación analítica del flujo de un fluido Phan-Thien/Tanner simplificado (sPTT) a través de una contracción hiperbólica planar¹.

3.1. Introducción

El flujo a través de contracciones, contracción/expansión, moldeo por inyección y en general cualquier cambio de área en la geometría del flujo implica no sólo esfuerzo cortante, si no también esfuerzos extensionales en el fluido; dichos esfuerzos dan lugar a una *resistencia al movimiento extensional o viscosidad extensional*, esta propiedad muestra una tendencia muy diferente de la viscosidad cortante para muchos fluidos no newtonianos [33].

La viscosidad extensional es una propiedad del material difícil de medir debido, en principio, a la dificultad de conseguir un estado estacionario y flujo uniforme (homogéneo) de manera experimental [33–38].

Se han diseñado varias técnicas y equipos para determinar esta propiedad reológica, las

¹El material de este capítulo ha sido adaptado del artículo *K. Y. Pérez-Salas, S. Sánchez, G. Ascanio, and J. P. Aguayo, “Analytical approximation to the flow of a sPTT fluid through a planar hyperbolic contraction,” J. Non-Newtonian Fluid Mech. 272, 104160 (2019).*

cuales pueden clasificarse como: extensión de filamentos, hilados, flujos lubricados y flujo en contracciones.

El flujo en contracciones se ha utilizado para medir la viscosidad extensional relacionando la caída de presión con el flujo y extrayendo la viscosidad de extensión requerida. El primer análisis fue realizado por Cogswell [39] quien, asumiendo un comportamiento de ley de potencia, y con una geometría cono-cilíndrica, aproxima la caída de presión para un cierto valor de rapidez de flujo. Teniendo en cuenta estas ideas, Binding [40] mejoró el análisis produciendo datos experimentales comparables con aquellos obtenidos con un reómetro comercial para soluciones de poliméricas adelgazantes al corte. Binding y Jones [34] realizaron un análisis de resultados a partir de un reómetro de flujo convergente, concluyendo que se debe considerar el nivel de elasticidad de la muestra para aproximar el flujo extensional. Jones et al. [41] realizaron una comparación entre un reómetro de flujo convergente y un reómetro de línea giratoria, obteniendo tendencias muy similares en los valores de viscosidad extensional. Gotsis y Odrizola [42] estimaron la viscosidad extensional a partir de mediciones de flujo de entrada, utilizando el modelo de ley de potencia y la aproximación de lubricación. Lubansky et al. [43], basado en el análisis de Binding, obtuvieron una solución aproximada al flujo de fluidos de Boger a través de una contracción abrupta, además, estudiaron el efecto de elasticidad en la dinámica del vórtice y concluyeron que la variable que controla la caída de presión es la viscosidad extensional.

Desde un punto de vista teórico, James [44] realizó un análisis encontrando una solución analítica para flujos en canales convergentes a bajos número de Reynolds, la viscosidad extensional fue comparada con la obtenida mediante la ecuación constitutiva presentando una buena aproximación. Después, Feigl et al. [45] realizaron simulaciones numéricas para determinar la viscosidad de elongación, asumiendo deslizamiento completo en la pared, y concluyeron que la contracción convergente semihiperbólica puede ser utilizada eficientemente para obtener mediciones de esta propiedad, asumiendo deslizamiento dentro de la geometría. Ober et al. [38] realizaron experimentos de visualización en microcanales hiperbólicos plana-

res, concluyendo que la contracción impone una velocidad de extensión casi uniforme en el centro de está. Las contracciones hiperbólicas macroscópicas también han sido objeto de estudio. Tabatabaei et al. [46] realizaron un estudio numérico del exceso de la caída de presión utilizando modelos estructurados en red. Nyström et al. [47] realizaron una serie de experimentos y simulaciones numéricas para fluidos newtonianos y fluidos viscoelásticos utilizando una contracción hiperbólica; los autores reportaron valores muy cercanos entre las caídas de presión medidas y las predichas para los fluidos de Boger. Webster et al. [48], determinaron que la rapidez de extensión en la línea central alcanza un valor asintótico una distancia muy corta del inicio de la contracción. En Nyström et al. [49] la viscosidad extensional fue tomada del cálculo numérico de un punto en particular de la línea de simetría, y fue comparada con el valor del modelo WM-FENE-CR, dando resultados satisfactorios.

En el presente trabajo se estudia el flujo de un fluido viscoelástico modelo a través de una contracción hiperbólica planar. El cual consiste en obtener una aproximación analítica del flujo de un fluido Phan-Thien/Tanner simplificado (sPTT) a través de la geometría, utilizando los criterios apropiados basados en la teoría de aproximación de la lubricación y la versión lineal del modelo sPTT.

3.2. Modelado matemático y simulación

Las ecuaciones que describen el flujo en la geometría son: conservación de masa y movimiento, las cuales se expresan mediante las ecuaciones 2.18 y 2.19, respectivamente.

La ecuación constitutiva no newtoniana utilizada es el modelo de Phan-Thien/Tanner simplificado (sPTT), en el cual el nivel de respuesta de extensión está controlado por el parámetro ϵ_{PTT} y proporciona una gran flexibilidad para modelar fluidos viscoelásticos; el modelo sPTT está dado por la ec. 2.23 y la función extra por la ec. 2.24.

Con el fin de obtener una solución analítica es recomendable expresar las ecuaciones en términos de variables adimensionales, las cuales se definen como:

$$\begin{aligned}
 \chi &= \frac{x}{L}, & Y &= \frac{y}{H_{max}}, & \bar{u} &= \frac{u}{U_c}, & \bar{v} &= \frac{vL}{U_c H_{max}}, \\
 \bar{p} &= \frac{H_{max}^2}{\eta_p U_c L} p, & \bar{\tau}_{ij} &= \frac{H_{max}}{\eta_p U_c} \tau_{ij}, \\
 Re &= \frac{\rho U_c H_{max}}{\eta_p}, & We &= \frac{U_c}{H_{max}} \lambda, & \beta &= \frac{H_{max}}{L}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde L y H_{max} son las longitudes características, U_c es la velocidad característica, \bar{p} es la presión hidrodinámica y $\bar{\tau}_{ij}$ es el esfuerzo del fluido. Además Re es el número de Reynolds, We es el número de Weissenberg y β es la relación geométrica característica.

En la Fig. 3.1 se muestra el esquema de la contracción donde se observa que H_x define la curvatura específica de la geometría.

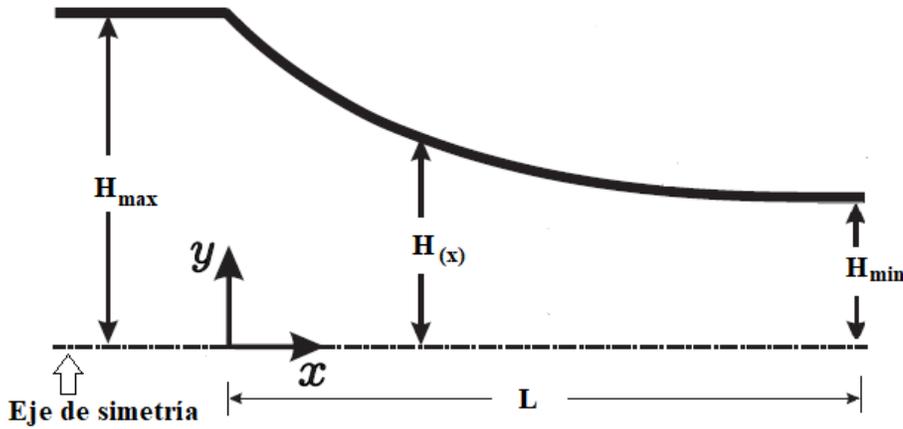


Figura 3.1: Diagrama de una contracción hiperbólica planar.

Considerando estado estacionario, fluido incompresible, flujo laminar, que no hay contribución del solvente al esfuerzo y disipación viscosa nula, y que el proceso es isotérmico. Teniendo en cuenta las suposiciones anteriores y sustituyendo las variables adimensionales de la ecuación 3.1, en las ecuaciones 2.18-2.19, se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \chi} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial Y} = 0, \tag{3.2}$$

la ecuación de movimiento para las direcciones χ y Y son, respectivamente:

$$Re\beta \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \chi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial Y} \right) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \chi} + \beta \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi\chi}}{\partial \chi} + \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi Y}}{\partial Y}, \quad (3.3)$$

$$Re\beta^3 \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \chi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial Y} \right) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial Y} + \beta^2 \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi Y}}{\partial \chi} + \beta \frac{\partial \bar{\tau}_{YY}}{\partial Y}, \quad (3.4)$$

y el modelo constitutivo para un fluido sPTT adimensional es definido mediante el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) \bar{\tau}_{\chi\chi} + We \left[\beta \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi\chi}}{\partial \chi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi\chi}}{\partial Y} \right) - 2 \left(\beta \bar{\tau}_{\chi\chi} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \chi} + \bar{\tau}_{\chi Y} \frac{\partial \bar{u}}{\partial Y} \right) \right] = 2\beta \frac{\partial \bar{u}}{\partial \chi}, \quad (3.5)$$

$$f(\underline{\bar{\tau}}) \bar{\tau}_{YY} + We\beta \left[\bar{u} \frac{\partial \bar{\tau}_{YY}}{\partial \chi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\tau}_{YY}}{\partial Y} - 2 \left(\bar{\tau}_{YY} \frac{\partial \bar{v}}{\partial Y} + \beta \bar{\tau}_{\chi Y} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \chi} \right) \right] = 2\beta \frac{\partial \bar{v}}{\partial Y}, \quad (3.6)$$

y

$$f(\underline{\bar{\tau}}) \bar{\tau}_{\chi Y} + We \left[\beta \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi Y}}{\partial \chi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\tau}_{\chi Y}}{\partial Y} \right) - \bar{\tau}_{YY} \frac{\partial \bar{u}}{\partial Y} - \beta^2 \bar{\tau}_{\chi\chi} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \chi} \right] = \frac{\partial \bar{u}}{\partial Y} + \beta^2 \frac{\partial \bar{v}}{\partial \chi}, \quad (3.7)$$

las ecuaciones (3.5-3.7), definen las contribuciones adimensionales viscoelásticas en las direcciones $\chi\chi$, YY y χY , mientras que la función extra adimensional lineal y exponencial están dadas por:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) = 1 + \varepsilon_{PTT} We (\bar{\tau}_{\chi\chi} + \bar{\tau}_{YY}) \rightarrow \text{lineal}, \quad (3.8)$$

y

$$f(\underline{\bar{\tau}}) = \exp \left[\varepsilon_{PTT} We (\bar{\tau}_{\chi\chi} + \bar{\tau}_{YY}) \right] \rightarrow \text{exponencial}. \quad (3.9)$$

3.2.1. Solución analítica

La teoría de lubricación describe el flujo en un geometría en la que una dimensión es significativamente menor que las demás, para poder aplicarla, es necesario considerar un

valor pequeño de la relación geométrica ($\beta \ll 1$) por lo cual, los términos inerciales son despreciables ($Re\beta \ll 1$ y por consecuencia $Re\beta^3 \ll 1$).

La variación de la presión en dirección Y ($\partial\bar{p}/\partial Y$) y la componente YY del esfuerzo ($\bar{\tau}_{YY}$) son aproximadamente a cero; con estas observaciones las ecuaciones resultantes son:

$$\frac{d\bar{p}}{d\chi} = \frac{\partial\bar{\tau}_{\chi Y}}{\partial Y}, \quad f(\underline{\bar{\tau}})\bar{\tau}_{\chi\chi} = 2We\bar{\tau}_{\chi Y}\frac{\partial\bar{u}}{\partial Y}, \quad \bar{\tau}_{\chi Y} = \frac{1}{f(\underline{\bar{\tau}})}\frac{\partial\bar{u}}{\partial Y}. \quad (3.10)$$

La ecuación de la función extra puede ser expresada en término del esfuerzo $\bar{\tau}_{\chi Y}$:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) = 1 + 2\varepsilon_{PTT}We\bar{\tau}_{\chi Y}^2. \quad (3.11)$$

Para resolver el modelo simplificado es necesario definir las condiciones de frontera: condición de no deslizamiento en la pared ($\bar{u}_{H(x)} = 0$) y condición de simetría ($\partial\bar{u}/\partial Y = 0$). Para facilitar el manejo de estas condiciones es necesario agregar una variable adimensional basada en la función de contracción $\xi = Y/h_{(x)}$, donde $h_{(x)}$ es la forma adimensional de definir la altura variable del canal y está dada por $h_{(x)} = H_{(x)}/H_{max}$.

Despejando $\partial\bar{u}/\partial Y$ en la ecuación 3.10 y sustituyendo la variable de la geometría original Y por la de la geometría transformada ξ , integrando la ecuación a lo largo de la dirección ξ . Aplicando las condiciones de frontera, se obtiene:

$$\bar{u} = \frac{1}{2}h_{(x)}^2\frac{d\bar{p}}{d\chi}\left(\xi^2 - 1\right) + \frac{1}{2}\varepsilon_{PTT}We^2h_{(x)}^4\left(\frac{d\bar{p}}{d\chi}\right)^3\left(\xi^4 - 1\right), \quad (3.12)$$

donde $h_{(x)}$, como se mencionó anteriormente, es una función adimensional que representa la curvatura de la geometría. La expresión (ec. 3.12) representa la solución generalizada para un campo de flujo a través de cualquier contracción. Para la curvatura hiperbólica utilizada en este trabajo, $h_{(x)}$ es:

$$H_{(x)} = \frac{M_c}{N_c + x}, \quad (3.13)$$

y la forma adimensional, $h_{(x)}$, queda expresada como:

$$h_{(x)} = \frac{1}{1 + (C_R - 1)\chi}. \quad (3.14)$$

donde C_R es la relación de contracción H_{max}/H_{min} .

Hasta este punto, hay que tener en cuenta que el valor de gradiente de presión $d\bar{p}/d\chi$ es aún desconocido y se requiere para calcular la velocidad expresada por la ec. 3.12. Para este caso, utilizando la definición de \bar{u} en la ecuación de continuidad (ec. 3.2), e integrando a lo largo de la dirección ξ desde $\xi = 1$ hasta $\xi = -1$, con el fin de obtener una expresión para el flujo volumétrico. Una vez evaluada la condición de frontera impermeable en la pared hiperbólica ($\bar{u}|_{\xi=\pm 1} = 0$), obtenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{2}{5}\varepsilon_{PTT}We^2h_{(x)}^4\left(\frac{d\bar{p}}{d\chi}\right)^3 + \frac{1}{3}h_{(x)}^2\frac{d\bar{p}}{d\chi} + \frac{\bar{Q}}{h_{(x)}} = 0, \quad (3.15)$$

donde \bar{Q} representa el flujo respecto a la función de contracción. Para este caso, retomando las definiciones adimensionales de las expresiones (ec. 3.1), las condiciones de frontera adimensionales para el campo de presión son $\bar{p}|_{\chi=0} = \Gamma$ y $\bar{p}|_{\chi=1} = 0$, respectivamente; donde $\Gamma = (P_{in} - P_{out})H_{max}^2/\eta_p U_c L$. Teniendo en cuenta la condición de frontera para resolver la ecuación, la caída de presión se define como:

$$\frac{d\bar{p}}{d\chi} = -\frac{2\sqrt[3]{5^2 h_{(x)}^4} + \sqrt[3]{5g_{(x)}^2}}{6\sqrt{\varepsilon_{PTT}We^2}\sqrt[3]{h_{(x)}^5}g_{(x)}} \quad (3.16)$$

donde

$$g_{(x)} \equiv -\sqrt{54^2\varepsilon_{PTT}We^2} + \sqrt{40h_{(x)}^4 + 54^2\varepsilon_{PTT}We^2}. \quad (3.17)$$

Para evaluar un fluido newtoniano, el perfil de velocidad puede calcularse a partir de la ecuación 3.12 dejando $We \rightarrow 0$; realizando algunas simplificaciones, el perfil de velocidad newtoniano para la contracción hiperbólica está dada por:

$$\bar{u} = \frac{3}{2}(1 - \xi^2), \quad (3.18)$$

3.3. Resultados

Los perfiles de velocidad obtenidos con la ecuación 3.12 fueron comparados con los resultados del software ANSYS Polyflow[®] el cual utiliza elementos finitos. Sin embargo, el software no dispone de la versión lineal del modelo sPTT, sólo de la exponencial, y debido a la naturaleza de la solución analítica se empleó la versión lineal. Ambas versiones del modelo reológico siguen la misma tendencia a bajas velocidades de deformación, obteniendo respuestas de endurecimiento por deformación y adelgazamiento al corte, por lo tanto, se espera que la comparación entre los resultados de la solución analítica y el simulador produzca resultados muy similares a bajos números de We , pero las tendencias deberían ser similares, incluso a valores más altos de elasticidad del fluido, donde se espera que sea más significativas las diferencias en la reología.

Se analizaron dos fluidos en dos contracciones diferentes; el primero es un fluido con endurecimiento moderado por deformación extensional ($\varepsilon_{PTT} = 0.25$), el cual se estudia empleando una contracción 4:1; y el segundo es un fluido con endurecimiento fuerte por deformación ($\varepsilon_{PTT} = 0.02$), y se estudia empleando una contracción 8:1. Las principales propiedades físicas de estos fluidos, flujos y velocidades características, así como las dimensiones geométricas se muestran en el cuadro 3.1.

En la Fig. 3.2 se muestra la viscosidad cortante y extensional planar adimensional calculadas para el modelo sPTT. Para el caso de endurecimiento moderado, los valores de viscosidad extensional teórica de ambas versiones (lineal y exponencial) son muy similares ($\lambda\dot{\varepsilon}$) hasta 0.4, mientras que la respuesta de adelgazamiento al corte es casi la misma para $\lambda\dot{\gamma} < 1$. Por otro lado, para el caso de endurecimiento fuerte, los valores con respuesta similares son $\lambda\dot{\varepsilon} < 0,7$ para el caso de extensión y para corte son $\lambda\dot{\gamma} < 2$. La principal diferencia entre la versión exponencial y lineal es que la versión lineal no presenta atenuación (softening) de la extensión.

Los resultados de los perfiles de velocidad obtenidos mediante la solución analítica y el

Cuadro 3.1: Principales propiedades físicas de los fluidos, dimensiones geométricas, flujo y velocidades características de los dos casos de estudio.

Contracción	4:1	8:1	unidades
Endurecimiento	moderado	fuerte	
η_p	10000	10000	Pa
ε_{PTT}	0.25	0.02	
ρ	1000	1000	kg·m ⁻³
Q_c	2.0 x 10 ⁻⁵	5x10 ⁻⁵	m ³ · s ⁻¹
U_c	0.002	0.003125	m·s ⁻¹
L	0.1	0.08	m
H_{max}	0.01	0.008	m
H_{min}	0.0025	0.001	m

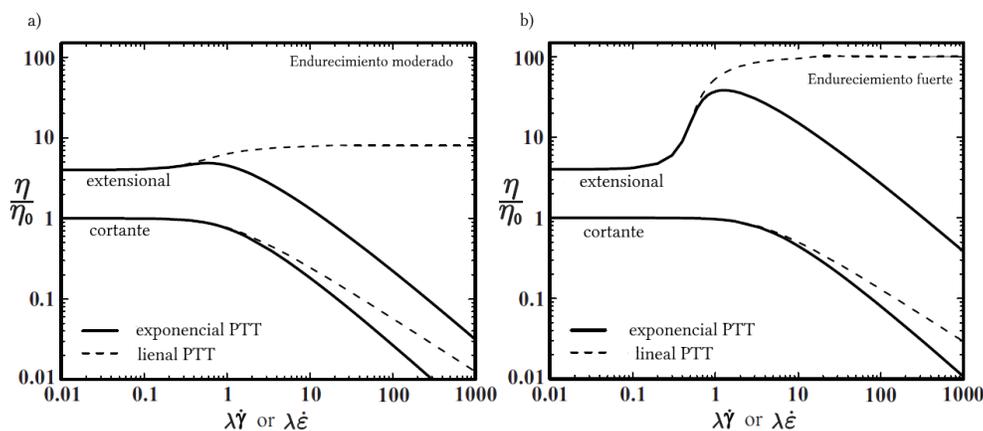


Figura 3.2: Viscosidad cortante y extensional planar para un fluido PTT sin disolvente: a) endurecimiento moderado, ($\varepsilon_{PTT} = 0.5$); b) endurecimiento fuerte ($\varepsilon_{PTT} = 0.02$).

software comercial se presentan en las Figuras 3.3 y 3.4 para fluidos que presentan diferentes niveles de elasticidad (es decir, variando el We). Para el caso de la contracción 4:1, el intervalo de We va de 0 a 2, y en el caso de la contracción 8:1 de 0 a 0.5. Podemos observar el mismo

comportamiento entre la solución analítica (líneas) y las obtenidas con Polyflow (símbolos). Se puede observar que en el caso de la solución newtoniana es igual a la simulada. Cuando se incrementa el nivel de elasticidad, se produce un adelgazamiento debido al corte; los perfiles de velocidad se hacen más planos cerca del centro de la geometría. Se observa una diferencia entre la comparación realizada a medida que la posición se aproxima a la salida de la contracción, lo que puede deberse a la naturaleza de la solución o puede ser debido a la diferencia entre el comportamiento reológico de la versión exponencial y lineal de la ecuación constitutiva del modelo sPTT.

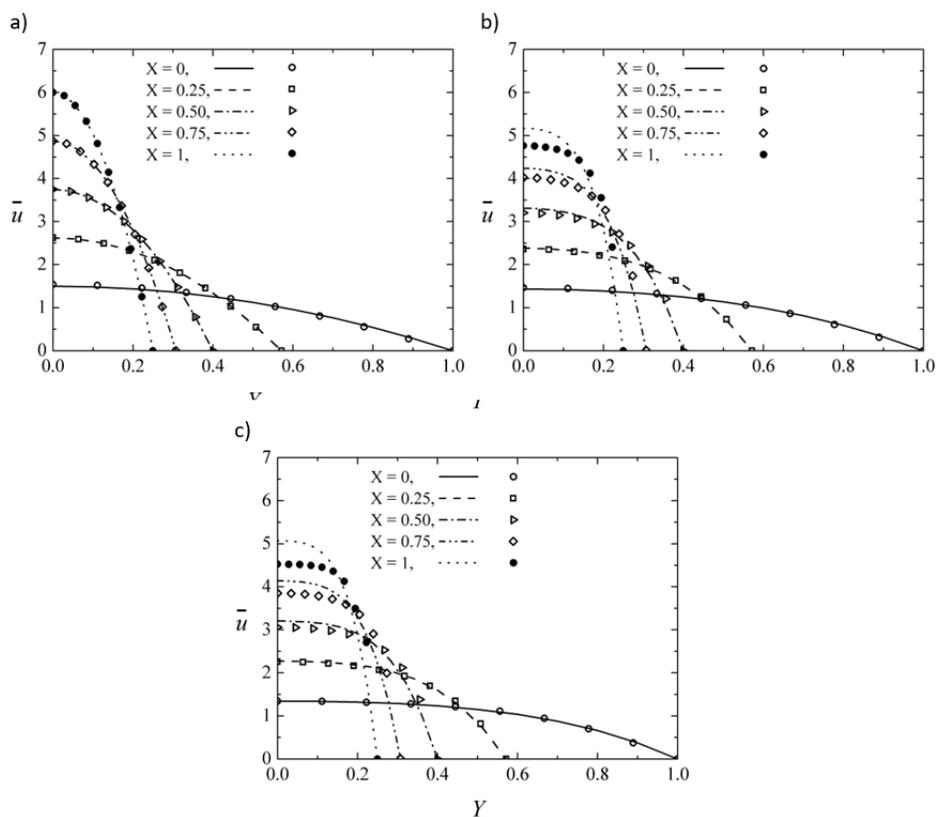


Figura 3.3: Perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 4:1, a) $We = 0$, b) $We = 0.5$, c) $We = 2$.

Aunque las simulaciones se detuvieron en $We = 0.5$ (un valor bajo de elasticidad) para

la contracción 8:1, puede observarse el mismo efecto de aplanamiento del perfil debido a la naturaleza del fluido que se adelgaza por el esfuerzo cortante. Las tendencias obtenidas en las Figuras 3.3 y 3.4 son muy similares a las reportadas por Feigl et al. [45] para el caso donde los efectos cortantes son considerados, y a los obtenidos por James et al. [50] quienes estudiaron fluidos inelásticos con adelgazamiento debido al corte modelados con la ecuación de ley de potencia.

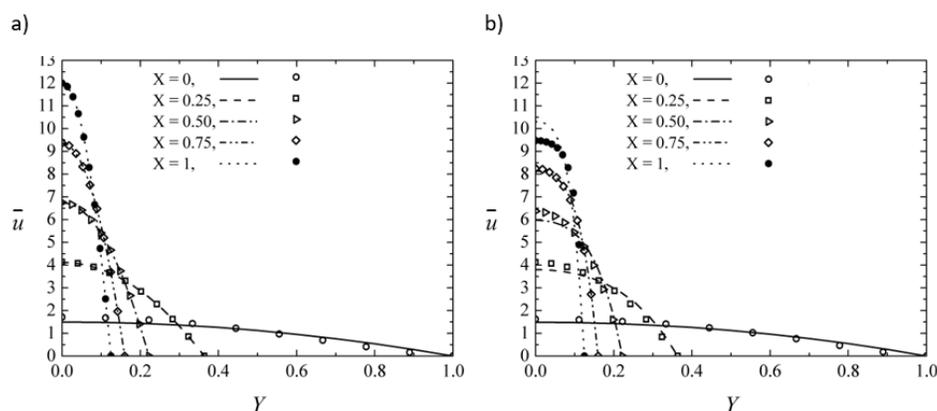


Figura 3.4: Perfiles adimensionales de velocidad para el fluido en una contracción 8:1 y endurecimiento fuerte: a) $We = 0$ (fluido newtoniano) y b) $We = 0.5$; donde las líneas corresponden a la solución semi analítica y los símbolos a la solución numérica.

El efecto de We en la velocidad de salida puede verse más claramente en la Fig. 3.5 para ambas contracciones. Para el caso newtoniano $We = 0$ no se observan diferencias significativas entre las simulaciones y la solución analítica; el efecto de aplanamiento de los perfiles de velocidad parece más pronunciados para la contracción 4:1, lo que puede ser consecuencia del nivel de elasticidad alcanzada.

En ambos casos, la caída de presión newtoniana es dominante; un aumento en la elasticidad significa un mayor grado de adelgazamiento por corte y, en consecuencia, la caída de presión disminuye. Además, se puede observar que para la contracción 8:1, la presión evaluada en la entrada para $We = 0.5$, es aproximadamente una cuarta parte de la de $We = 0$, tanto para la solución analítica como para la numérica. Por lo tanto, incluso para el valor

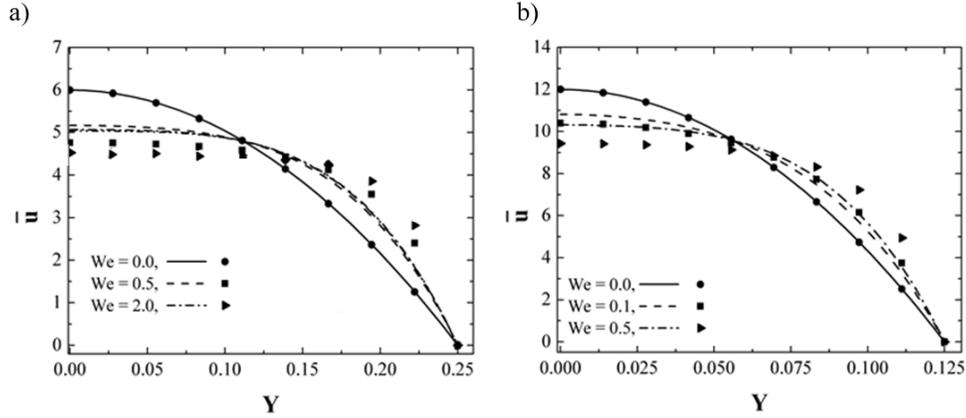


Figura 3.5: Perfiles de velocidad adimensional a la salida de la contracción con diferentes números de We : a) fluido con endurecimiento moderado contracción 4:1, y b) fluido con endurecimiento fuerte contracción 8:1; donde las líneas corresponden a la solución semi analítica y los símbolos a la solución numérica

de elasticidad $We = 0.5$ ya se ha producido un alto nivel de adelgazamiento debido al corte. Esta observación apoya la idea de que las diferencias entre las soluciones analíticas y numéricas para los mismos valores de We se deben principalmente a las diferencias reológicas y no tanto a la naturaleza aproximada de la solución analítica.

Otro aspecto a considerar es la derivada de la velocidad con respecto a la posición axial ($\partial\bar{u}/\partial\chi$). Para calcular dicha derivada, se puede utilizar la aproximación analítica de \bar{u} dada por la ecuación 3.12, sustituyendo los términos de la ecuación 3.15, obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{u}}{\partial\chi} = & \frac{1}{2}(\xi^2 - 1) \left[\frac{\partial}{\partial\chi} \left(f^2_{(x)} \right) \frac{d\bar{p}}{d\chi} + f^2_{(x)} \frac{d}{d\chi} \left(\frac{d\bar{p}}{d\chi} \right) \right] + \frac{1}{2} \varepsilon_{PTT} We^2 (\xi^4 - 1) \times \\ & \left[\frac{\partial}{\partial\chi} \left(f^4_{(x)} \right) \left(1 - \frac{5 \frac{d\bar{p}}{d\chi}}{6 \varepsilon_{PTT} We^2 f^2_{(x)}} \right) - \frac{5 f^4_{(x)}}{6 \varepsilon_{PTT} We^2} \frac{d}{d\chi} \left(\frac{\frac{d\bar{p}}{d\chi}}{f^2_{(x)}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.19)$$

A partir de la expresión anterior, se puede observar un gran número de términos; no obstante, todos los términos de la expresión se pueden calcular directamente utilizando los resultados de las ecuaciones 3.14, 3.16 y 3.17 respectivamente. El objetivo de utilizar una

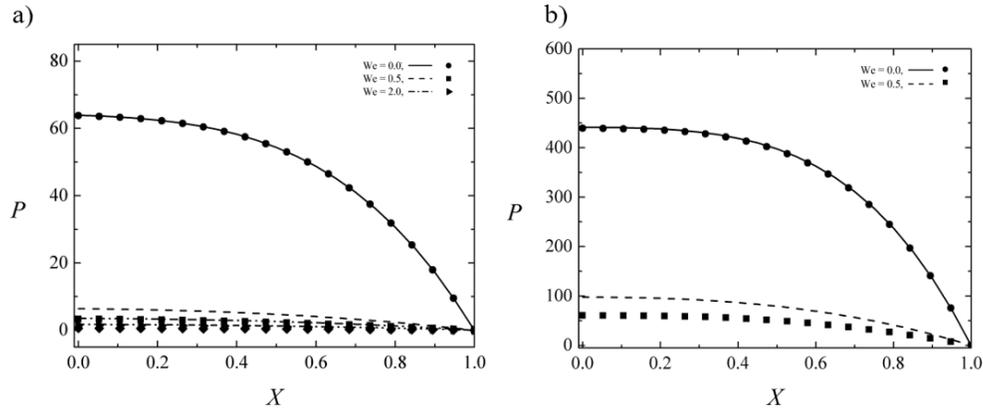


Figura 3.6: Perfiles de caída de presión adimensional a lo largo de la línea central: a) fluido con endurecimiento moderado, y b) fluido con endurecimiento fuerte; donde las líneas corresponden a la solución semi analítica y los símbolos a la solución numérica.

geometría hiperbólica es obtener una velocidad que permita tener una rapidez de extensión casi constante a lo largo de la geometría. Como demostraron numéricamente Njstrom et al. [51], esta región constante no se alcanza inmediatamente después de la entrada, sino que se requiere cierta distancia. En la Figura 3.7 se muestra la variación de rapidez de extensión a lo largo del eje- ξ donde podemos observar que en la línea central ($\xi = 0$) se obtiene la mayor rapidez de deformación, y a medida que el valor de ξ se aproxima a la pared los valores de rapidez de deformación decrecen. Además al variar el nivel de elasticidad en el flujo, se observa que a We se observa a valores de $We = 0$ la rapidez de deformación es constante e independientemente de la posición, sin embargo, al aumentar el número de Weissenberg se observa una transición en el cual la rapidez de deformación varía a lo largo del eje ξ . Se deduce que la distancia a partir de la cual la rapidez de deformación permanece constante es $\chi = 0.6$ (un poco más de la mitad de la longitud de la geometría) para $We = 0.1$, y dicha distancia se reduce a $\chi = 0.2$ para $We = 0.5$. Ahora bien, aunque las velocidades de deformación locales dependen de We , ξ y χ , el valor de $\varepsilon_{promedio}$ permanece constante, independientemente de la posición o del parámetro de elasticidad, como puede verse en los casos presentados.

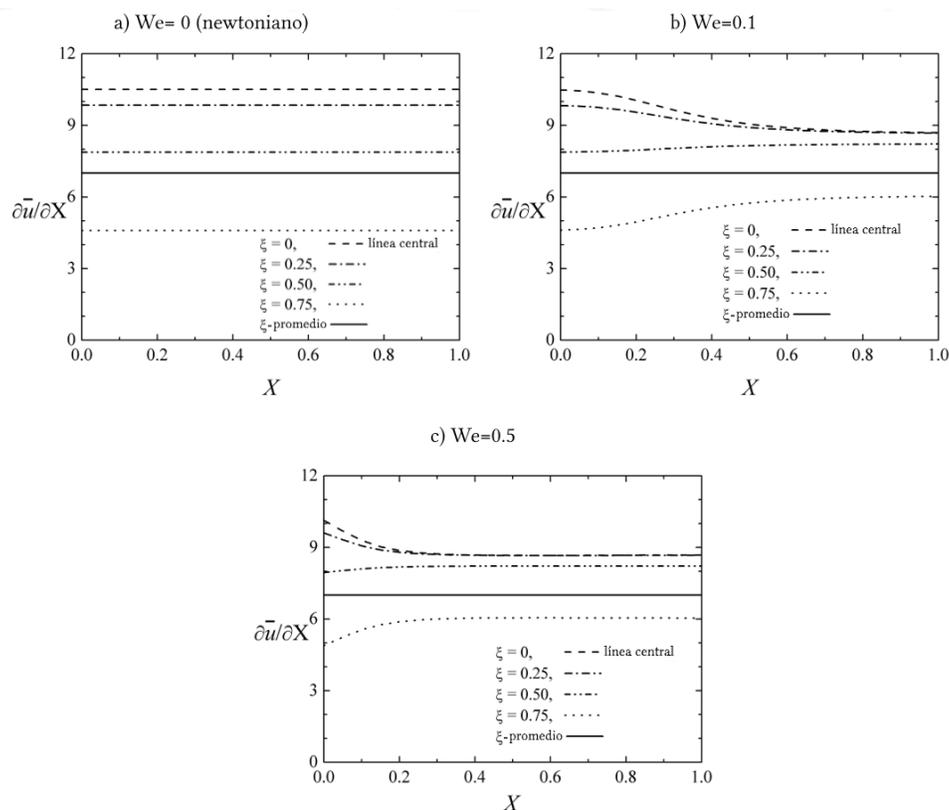


Figura 3.7: Evolución de la rapidez de deformación adimensional a lo largo de la dirección χ en diferentes posiciones verticales, en la contracción 8:1

3.4. Conclusiones

Se presentó una expresión analítica para el flujo a través de una contracción hiperbólica planar. La solución se obtuvo a partir de la aproximación de lubricación para la versión lineal del modelo simplificado de Phan-Thien/Tanner. Esta comparación indicó que la aproximación analítica es de excelente calidad pues tanto en tendencia como en valores, se acerca mucho a la solución reportada por el simulador. Además dicha solución permite estudiar fluidos newtonianos.

La solución también muestra tendencias comparables con los datos publicados de otros grupos de investigación y una aproximación de la rapidez de extensión calculada con nuestros

perfiles de velocidad arroja resultados cercanos a los obtenidos con la fórmula disponible para la contracción hiperbólica.

Capítulo 4

Estudio de flujo en contracción axisimétrica

En este capítulo se presenta una aproximación analítica para el flujo de un fluido lineal del modelo de Phan-Thien/Tanner a través de una contracción semihiperbólica axisimétrica. Además, se presenta una solución semianalítica capaz de representar la versión exponencial del modelo viscoelástico. Por otra parte, para ambos enfoques (lineal y exponencial) se resuelven las ecuaciones del modelo considerando condición de deslizamiento de Navier, lo que permite a estos modelos representar flujos con cierto nivel de deslizamiento en la pared de la geometría¹.

4.1. Introducción

Una gran cantidad de los fluidos utilizados en las industrias son viscoelásticos, por ejemplo, petróleo extrapesado, pinturas, shampoo, por mencionar algunos. Por lo general, la viscoelasticidad hace que la respuesta de los materiales a la deformación extensional difiera

¹El material de este capítulo ha sido publicado en *K. Y. Pérez-Salas, G. Ascanio, L. Ruiz-Huerta and J. P. Aguayo*, “Approximate analytical solution for the flow of a Phan-Thien-Tanner fluid through an axisymmetric hyperbolic contraction with slip boundary conditions,” *Phys Fluids* 33,053110, (2021).

significativamente de la respuesta a la deformación cortante. Por tanto, en el caso de materiales viscoelásticos, además de la viscosidad cortante, debe tenerse en cuenta la viscosidad extensional. Este término puede interpretarse como la resistencia de un fluido a la extensión, en el caso de los fluidos newtonianos la viscosidad extensional es tres veces la viscosidad cortante, independientemente de la velocidad de deformación aplicada [52]. La deformación extensional se presenta en procesos industriales como en la extrusión de materiales, moldeo por inyección e incluso en la deglución de alimentos; por lo tanto, conocer la viscosidad extensional de los fluidos mejorará la calidad de las simulaciones CFD, el dimensionamiento de los sistemas de bombeo en el moldeo de polímeros y esta respuesta a la extensión ayudará a comprender mejor muchos procesos de flujo.

Aunque existe una gran variedad de técnicas para obtener mediciones experimentales de viscosidad extensional, como el estiramiento de filamentos [53,54], el hilado de fibras [9,55,56], los flujos en punto de estancamiento [8,36,57] estas técnicas tiene el inconveniente de no poder mantener una deformación homogénea del fluido, lo que hace que la viscosidad extensional sea una propiedad reológica muy difícil de medir. El flujo a través de contracciones es una alternativa que puede utilizarse para estimar la viscosidad extensional de fluidos de baja viscosidad en términos de caída de presión y mediciones de flujo. El uso de geometrías de contracción hiperbólica para determinar viscosidad extensional ha ganado atención, debido a que produce una rapidez de extensión casi constante a lo largo de la línea central, haciendo de esta una opción viable para medir esta propiedad [44]. Sin embargo, el estudio de flujo a través de contracciones es una tarea compleja, ya que se debe considerar tanto la deformación cortante como la extensional. Uno de los primeros en estudiar las aproximaciones analíticas fue Cogswell [39], quien asumió un comportamiento de ley de potencia y una contracción cono-cilíndrica para correlacionar la caída de presión con el flujo, obteniendo así un valor de viscosidad extensional. Binding [40] presentó una solución analítica para una contracción axisimétrica planar, quien concluye que la curvatura para el flujo convergente en la contracción no esta dada por la geometría, sino por las dimensiones del vórtice ge-

nerado. Binding representó la viscosidad cortante mediante el modelo de ley de potencia y propuso la viscosidad extensional con el mismo tipo de modelo; dicho análisis permite calcular la viscosidad extensional correlacionando la caída de presión, el flujo volumétrico y los parámetros de la geometría. El modelo mencionado fue utilizado por Binding y Walters [35] quienes probaron el modelo utilizando cuatro fluidos no newtonianos y determinaron que el modelo podía predecir la viscosidad extensional de los fluidos adelgazantes al corte así como el tamaños del vórtice. Además estudiaron un fluido de Boger, el cual presentó la misma tendencia de viscosidad extensional, sin embargo presenta una desviación sustancial entre la predicción realizada con el análisis de Binding y las mediciones experimentales mediante la técnica de PIV. James [44] obtuvo una solución analítica y presentó una simulación numérica para fluidos de ley de potencia a través de un canal convergente con un perfil hiperbólico $R^2z = constante$. Concluyó que el aumento de velocidad promedio es casi constante a lo largo de la línea central.

Con respecto a los microcanales, Oliveira et al. [37] estudiaron experimental y numéricamente el comportamiento de fluidos newtonianos a través de una geometría hiperbólica planar de contracción/expansión, con el objetivo de utilizar dicha geometría como un microreómetro extensional. Sin embargo, encontraron que la velocidad de deformación en la línea central no es constante, debido a que la longitud de la geometría no era suficiente para proporcionar una región de flujo completamente desarrollada; como mencionan, esto puede resolverse utilizando un fluido viscoelástico, ya que el flujo extensional provocará esfuerzos elásticos adicionales. Como Pipe y Mckinley [58] observaron, en el flujo a través de una contracción hiperbólica, las deformaciones cortante y extensional se producen al mismo tiempo; por lo tanto, las propiedades extensionales obtenidas de estos dispositivos son sólo mediciones aparentes. Teóricamente, es posible reducir el nivel de esfuerzo cortante en la contracción hiperbólica introduciendo una longitud de deslizamiento en las paredes de la geometría. Con este fin Wang y James [59] desarrollaron una técnica experimental para aproximar la resistencia al flujo extensional de unas soluciones poliméricas diluidas, estudiando

su comportamiento en un microcanal convergente lubricado. Estos autores emplearon tanto lubricantes miscibles como inmiscibles y descubrieron que los miscibles inducían inestabilidad en el flujo, mientras que los fluidos inmiscibles permitían un flujo estable en la línea central. Ober et al. [38] desarrollaron una contracción planar microfluídica para estudiar los flujos con extensión dominantes y productos de consumo no newtonianos, empleando un “extensional viscosimeter-rheometer-on-a-chip”, EVROC. Utilizando l-PIV, confirmaron que la rapidez de extensión en la línea central de la geometría es aproximadamente constante. Para determinar la viscosidad extensional propusieron un modelo que incluye tanto la contribución de la viscosidad cortante como la extensional a la caída de presión. Ellos encontraron que la viscosidad extensional de los fluidos que contenían espesantes era casi constante, mientras que los fluidos con tensoactivos mostraban un comportamiento de ablandamiento. Lee y Muller [60] estudiaron un método para diseñar un microcanal convergente con una rapidez de extensión constante y propusieron un reómetro extensional de presión diferencial (DPER). Ellos emplearon un canal de referencia y un microcanal convergente utilizando el modelo de Giesekus-Lenov; el canal de referencia es utilizado para conocer la caída de presión viscosa, de acuerdo con los autores, esto permite obtener una mejor estimación de la contribución extensional cuando la caída de presión esta dominada por efectos viscosos y no por el efecto elástico.

Tomando en cuenta la condición de deslizamiento, Navier [61] fue el primero en proponer una condición de frontera que considera el deslizamiento en la pared, la cual no fue verificada experimentalmente. Watanabe et al. [62, 63] propusieron un estudio experimental para aclarar la teoría de Navier, reportando que la velocidad de deslizamiento es proporcional al esfuerzo de corte en la pared. Rao y Rajagopal [64] investigaron la dependencia del esfuerzo cortante y normal en la velocidad de deslizamiento. Ellos encontraron que cuando la velocidad de deslizamiento depende únicamente del esfuerzo cortante, la solución es similar a la solución de Poiseuille con la condición de no deslizamiento; sin embargo, si la velocidad de deslizamiento depende sólo de la presión, el perfil de velocidades depende de dos coordena-

das y el gradiente de presión es no lineal a lo largo del canal. Fiegl et al. [45] generalizaron la técnica de Collier et al. [65] para medir la viscosidad extensional utilizando una contracción divergente asumiendo deslizamiento en la pared. Mediante simulaciones numéricas, ellos obtuvieron la viscosidad efectiva η_{ef} dando una buena aproximación de acuerdo con la viscosidad extensional obtenida de modelos reológicos. Ríos et al. [66] hicieron un estudio experimental sobre el efecto de un recubrimiento hidrofóbico en una tubería utilizando PIV. Ellos encontraron que el recubrimiento causaba un aumento en la velocidad cercana a la pared, además reduce el esfuerzo de corte de la tubería.

Respecto a soluciones analíticas con deslizamiento en la pared, Collier et al. [65] estudiaron el flujo de polímeros diluidos a través de contracciones semihiperbólicas y desarrollaron una aproximación analítica para la viscosidad extensional aplicando la condición de deslizamiento total, atribuyendo el deslizamiento a la curvatura de la pared y a la naturaleza del fluido. Hayat et al. [67] estudiaron el efecto de la condición de deslizamiento en tres problemas de flujo (Poiseuille, Couette y Couette generalizado) utilizando el método HAM para resolver el modelo de Oldroyd de 6 constantes. Los autores encontraron que en el caso de flujo Couette y Couette generalizado, cerca del plato fijo la velocidad aumenta al aumentar el coeficiente de deslizamiento, y la velocidad disminuye cerca de la pared móvil; en el caso del flujo Poiseuille la velocidad aumenta al aumentar el coeficiente de deslizamiento. Ferrás et al. [68] presentaron una solución analítica para flujos Couette y Poiseuille para fluidos newtonianos y no newtonianos considerando la condición de frontera deslizamiento de Navier. Estos autores obtuvieron una solución analítica utilizando condiciones de deslizamiento lineales y no lineales y para el caso de fluidos no newtonianos obtuvieron una solución semianalítica para flujos tipo Poiseuille.

En una investigación anterior, Pérez-Salas et al. [69] se estudia el flujo a través de una contracción planar con perfil hiperbólico utilizando el modelo de Phan-Thien/Tanner. Obteniendo la velocidad y caída de presión para el flujo. Se encontró que la caída de presión es altamente dependiente de la naturaleza de adelgazamiento al corte del fluido y a su vez,

es consecuencia del nivel de elasticidad. Además, la velocidad de deformación a lo largo de la línea central es casi constante para una contracción planar. En el presente trabajo, se considera ahora una contracción semihiperbólica axisimétrica. En primer lugar, se obtuvo una aproximación analítica del flujo con un modelo simplificado lineal (IPTT) y una solución semianalítica con el modelo exponencial (ePTT) de Phan-Thien/Tanner. Estas soluciones permiten evaluar el campo de flujo y la caída de presión en la contracción. Finalmente, las soluciones fueron obtenidas considerando una condición de frontera de deslizamiento parcial.

4.2. Formulación matemática

La ecuación de continuidad y cantidad de movimiento están dadas por las ecuaciones 2.18 y 2.19, respectivamente. El modelo simplificado de Phan-Thien/Tanner (sPTT) se ha elegido como modelo constitutivo apropiado, ya que permite controlar la respuesta extensio-
nal mediante el parámetro ε_{PTT} , otorgando al modelo una gran adaptabilidad para modelar fluidos viscoelásticos. Las ecuaciones constitutivas para el modelo sPTT son 2.23 y 2.24.

Para obtener una solución analítica, por simplicidad es posible expresar las ecuaciones en términos de variables adimensionales; la velocidad característica definida en dirección r y z son: $\bar{v}_Z = \frac{v_z}{v_c}$, $\bar{v}_R = \frac{Lv_r}{R_{max}v_c}$, donde Z y R son definidas como $Z = \frac{z}{L}$, $R = \frac{r}{R_{max}}$, donde L y R_{max} son longitudes características (ver Fig. 4.1). Los números adimensionales, Weissenberg y Reynolds puede ser expresados como: $We = \frac{v_c}{R_{max}}\lambda$ y $Re = \frac{\rho v_c R_{max}}{\mu_p}$. El tensor de esfuerzo extra adimensional es $\underline{\underline{\bar{\tau}}} = \frac{R_{max}}{\mu_p v_c} \tau_{ij}$ y la presión es $P = \frac{R_{max}^2}{\mu_p v_c L} p$. En la Fig. 4.1 se muestra la contracción hiperbólica.

Las siguientes suposiciones fueron consideradas para simplificar el sistema: estado estacionario, flujo laminar, fluido incompresible, eje θ neutral, no hay disipación viscosa y no hay contribución del esfuerzo debido al solvente. Entonces las ecuaciones pueden ser reescritas como:

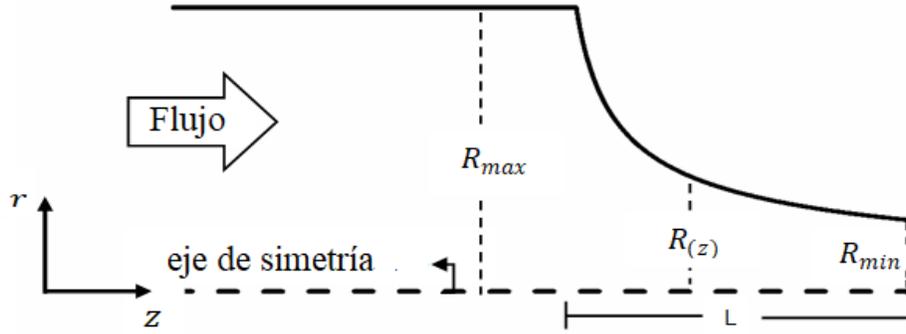


Figura 4.1: Diagrama de una geometría semihiperbólica axisimétrica.

Continuidad:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial(R\bar{v}_Z)}{\partial R} + \frac{\partial\bar{v}_Z}{\partial Z} = 0, \quad (4.1)$$

ecuación de momentum en dirección R y Z :

$$Re\beta^3 \left(\bar{v}_R \frac{\partial\bar{v}_R}{\partial R} + \bar{v}_Z \frac{\partial\bar{v}_Z}{\partial Z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial R} + \beta \frac{1}{R} \frac{\partial R \bar{\tau}_{RZ}}{\partial R} + \beta^2 \frac{\partial \bar{\tau}_{ZZ}}{\partial Z} - \beta \frac{R \bar{\tau}_{\theta\theta}}{R}, \quad (4.2)$$

$$Re\beta \left(\bar{v}_R \frac{\partial\bar{v}_Z}{\partial R} + \bar{v}_Z \frac{\partial\bar{v}_Z}{\partial Z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial Z} + \frac{1}{R} \frac{\partial R \bar{\tau}_{RZ}}{\partial R} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ZZ}}{\partial Z}, \quad (4.3)$$

y la ecuación constitutiva del modelo sPTT adimensional correspondiente esta dado por el siguiente sistema de ecuaciones:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) \underline{\bar{\tau}}_{=RR} + We\beta \left(\bar{v}_R \frac{\partial \bar{\tau}_{RR}}{\partial R} + \bar{v}_Z \frac{\partial \bar{\tau}_{RR}}{\partial Z} \right) - 2We \left(\bar{\tau}_{RR} \frac{\partial \bar{v}_R}{\partial R} + \beta \bar{\tau}_{ZR} \frac{\partial \bar{v}_R}{\partial Z} \right) = 2\beta \frac{\partial \bar{v}_R}{\partial R}, \quad (4.4)$$

$$f(\underline{\bar{\tau}}) \underline{\bar{\tau}}_{=ZZ} + We\beta \left(\bar{v}_R \frac{\partial \bar{\tau}_{ZZ}}{\partial R} + \bar{v}_Z \frac{\partial \bar{\tau}_{ZZ}}{\partial Z} \right) - 2We \left(\bar{\tau}_{RZ} \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial R} + \beta \bar{\tau}_{ZZ} \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial Z} \right) = 2\beta \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial Z}, \quad (4.5)$$

$$f(\underline{\bar{\tau}}) \underline{\bar{\tau}}_{=RZ} + We\beta \left(\bar{\tau}_{RZ} \frac{\partial \bar{v}_R}{\partial R} + \beta \bar{\tau}_{ZZ} \frac{\partial \bar{v}_R}{\partial Z} \right) - We\beta \left(\bar{\tau}_{RR} \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial R} + \beta \bar{\tau}_{ZZ} \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial Z} \right) + We\beta \left(\bar{v}_R \frac{\partial \bar{\tau}_{RZ}}{\partial R} + \bar{v}_Z \frac{\partial \bar{\tau}_{RZ}}{\partial Z} \right) = \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial R} + \beta^2 \frac{\partial \bar{v}_R}{\partial Z}. \quad (4.6)$$

Considerando un valor pequeño del factor geométrico ($\beta \ll 1$), que la inercia no es significativa ($Re < 1$) y aplicando la aproximación de lubricación, la contribución del esfuerzo es:

$$(a) \quad \bar{\tau}_{RR} = 0, \quad (b) \quad \bar{\tau}_{ZZ} = 2We\bar{\tau}_{RZ}^2, \quad (c) \quad \bar{\tau}_{RZ} = \frac{1}{f(\underline{\bar{\tau}})} \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial R}, \quad (4.7)$$

de acuerdo con esto, la variación de presión es despreciable en dirección R (dP/dR) y en dirección Z la caída de presión se puede expresar como:

$$\frac{dP}{dZ} = \frac{1}{R} \frac{\partial \bar{\tau}_{RZ}}{\partial R}, \quad (4.8)$$

integrando la ecuación a lo largo de la dirección R y substituyendo $\bar{\tau}_{RZ}$,

$$\frac{dP}{dZ} = \frac{2}{R} \frac{1}{f(\underline{\bar{\tau}})} \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial R}. \quad (4.9)$$

Para expresar las coordenadas en el espacio computacional es necesario introducir las variables (ξ, η) ; η puede expresarse como $\eta = R/f_r(\xi)$ y $\xi = z/L$. Considerando esto, la ecuación 4.9 puede expresarse como:

$$\frac{dP}{d\xi} = \frac{2}{f_r^2(\xi)\eta} \frac{1}{f(\underline{\bar{\tau}})} \frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial \eta} \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial \eta} = \frac{1}{2} f_r^2(\xi) f(\underline{\bar{\tau}}) \frac{dP}{d\xi} \eta. \quad (4.10)$$

Hasta este punto, estas expresiones son válidas tanto para la función lineal o exponencial de la función extra; para seguir resolviendo esta ecuación, consideramos las dos formas. En primer lugar, utilizaremos el modelo de PTT lineal (IPTT), debido a que esta forma nos permite obtener una solución exclusivamente analítica, y posteriormente resolveremos el modelo PTT exponencial (ePTT), que nos permite obtener una aproximación semianalítica.

4.2.1. Modelo lineal de Phan-Thien/Tanner

Para el modelo lineal de PTT, la función extra es:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) = 1 + \varepsilon_{PTT} W e (\bar{\tau}_{RR} + \bar{\tau}_{ZZ}), \quad (4.11)$$

sustituyendo el valor de $\bar{\tau}_{RR}$ y $\bar{\tau}_{ZZ}$ de acuerdo con la ecuación 4.7, la ecuación puede expresarse como:

$$\frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial \eta} = \frac{1}{2} f_r^2(\xi) \frac{dP}{d\xi} \eta + \frac{1}{4} f_r^4(\xi) \varepsilon_{PTT} W e^2 \left(\frac{\partial P}{\partial \xi} \right)^3 \eta^3, \quad (4.12)$$

donde $f_r(\xi)$ es la función adimensional que describe la curvatura de la geometría, y para el caso de la geometría semihiperbólica axisimétrica la función es:

$$f_r(\xi) = \sqrt{\frac{N_c}{N_c + \xi L}}, \quad (4.13)$$

donde $N_c = \frac{R_e^2 L}{R_0^2 - R_e^2}$, R_0 es el radio de entrada y R_e es el radio de salida.

Por lo tanto, asumiendo que el flujo es conocido y considerando que no hay deslizamiento en la pared ($\bar{v}_Z|_{\eta=1} = 0$), el perfil de velocidades es:

$$\bar{v}_Z = \frac{1}{4} f_r^2(\xi) \frac{dP}{d\xi} (\eta^2 - 1) + \frac{1}{16} f_r^4(\xi) \varepsilon_{PTT} W e^2 \left(\frac{dP}{d\xi} \right)^3 (\eta^4 - 1). \quad (4.14)$$

Al integrar el perfil de velocidades sobre el área de sección transversal da como resultado una ecuación para el flujo, el cual permite extraer el gradiente de presión a través de la contracción:

$$\frac{dP}{d\xi} = \frac{-f_r^2(\xi) + (-12\sqrt{\varepsilon_{PTT} W e^2} + \sqrt{f_r^6(\xi) + 12^2 \varepsilon_{PTT} W e^2})^{2/3}}{f_r^2(\xi) \sqrt{\varepsilon_{PTT} W e^2} (-12\sqrt{\varepsilon_{PTT} W e^2} + \sqrt{f_r^6(\xi) + 12^2 \varepsilon_{PTT} W e^2})^{1/3}}. \quad (4.15)$$

4.2.2. Modelo exponencial de Phan-Thien/Tanner

Con el objetivo de obtener una solución para la versión exponencial del modelo de PTT, se presenta una aproximación semianalítica, y su solución se expresa en términos de la serie de Taylor. La versión exponencial de la función extra es expresada por:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) = \exp(2\varepsilon_{PTT} W e^2 \bar{\tau}_{RZ}^2). \quad (4.16)$$

Es posible expresar la ecuación en función de expansión de series de Taylor, como:

$$f(\underline{\bar{\tau}}) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon_{PTT} W e^2)^j f_r^{2j}(\xi) \eta^{2j} \left(\frac{dP}{d\xi}\right)^{2j}}{j! 2^j}, \quad (4.17)$$

sustituyendo la función extra en la ecuación 4.10 de gradiente de velocidad, obtenemos:

$$\frac{\partial \bar{v}_Z}{\partial \eta} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon_{PTT} W e^2)^j f_r^{2j+2}(\xi) \eta^{2j+1} \left(\frac{dP}{d\xi}\right)^{2j+1}}{j! 2^{j+1}}, \quad (4.18)$$

integrando con la condición de no deslizamiento, el perfil de velocidades es:

$$\bar{v}_Z = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon_{PTT} W e^2)^j f_r^{2j+2}(\xi) (\eta^{2(j+1)} - 1) \left(\frac{dP}{d\xi}\right)^{2j+1}}{j! 2^{j+1} 2(j+1)}, \quad (4.19)$$

y la ecuación polinómica para resolver el gradiente de presión es siempre de grado impar y con una única solución real:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon_{PTT} W e^2)^j f_r^{2(j+2)}(\xi) \left(\frac{dP}{d\xi}\right)^{2j+1}}{j! 2^{j+1} 2(j+2)} + 1 = 0. \quad (4.20)$$

4.3. Solución con condición de deslizamiento parcial en la pared

En esta sección las ecuaciones de gobierno se integran considerando un grado de deslizamiento en la pared. Para ello se aplica la condición de frontera de Navier que considera que la velocidad en la pared es proporcional al valor local del gradiente de velocidad. La incorporación de la condición de deslizamiento en la pared de la contracción permite obtener una solución analítica que represente mejor el flujo real.

La condición adimensional de Navier es:

$$\bar{v}_Z|_{\eta=1} = \frac{-\bar{b}}{f_r(\xi)} \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial \eta} |_{\eta=1}, \quad (4.21)$$

donde \bar{b} es el parámetro de deslizamiento, $\bar{b} = b/R_{max}$.

Para el modelo lineal de PTT, la ecuación de velocidad considerando esta condición es:

$$\bar{v}_Z = \frac{1}{4} f_r^2(\xi) \frac{dP}{d\xi} \left(\eta^2 - 1 - \frac{2\bar{b}}{f_r(\xi)} \right) + \frac{1}{16} f_r^4(\xi) \varepsilon_{PTT} W e^2 \left(\frac{dP}{d\xi} \right)^3 \left(\eta^4 - 1 - \frac{4\bar{b}}{f_r(\xi)} \right), \quad (4.22)$$

y el gradiente de presión a lo largo de la contracción es:

$$\frac{dP}{d\xi} = \frac{-f_r^{10}(\xi) \left(\frac{4\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right) \left(\frac{6\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right) \varepsilon_{PTT} W e^2 + G(\xi)^{2/3}}{f_r^2(\xi) \left(\frac{6\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right) \varepsilon_{PTT} W e^2 + G(\xi)^{1/3}}, \quad (4.23)$$

la función $G(\xi)$ en esta última ecuación es únicamente para facilitar la escritura de la ecuación de caída de presión, es expresada como:

$$G(\xi) = -12 f_r^{12}(\xi) \left(\frac{6\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right)^2 \varepsilon_{PTT} W e^2 + \left(f_r^{23}(\xi) \left(\frac{6\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right) \right)^3 \varepsilon_{PTT}^3 W e^6 (f_r^7(\xi) \left(\frac{4\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right))^3 + 12^2 f_r(\xi) \left(\frac{6\bar{b}}{f_r(\xi)} + 1 \right) \varepsilon_{PTT} W e^2 \Big)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.24)$$

Para la versión exponencial del modelo de PTT, el perfil de velocidades considerando esta condición de frontera es:

$$\bar{v}_Z = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j! 2^{j+1}} (\varepsilon_{PTT} W e^2)^j f_r^{2j+2}(\xi) \left(\frac{dP}{d\xi} \right)^{2j+1} \left(\frac{\eta^{2(j+1)} - 1}{2(j+1)} - \frac{\bar{b}}{f_r(\xi)} \right), \quad (4.25)$$

y la ecuación para resolver el gradiente de presión a lo largo de la contracción está dada por:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j! 2^j} (\varepsilon_{PTT} W e^2)^j f_r^{2(j+2)}(\xi) \left(\frac{dP}{d\xi} \right)^{2j+1} \left(\frac{1}{2^2(j+2)} - \frac{\bar{b}}{2f_r(\xi)} \right) + 1 = 0, \quad (4.26)$$

en el caso de que el valor del parámetro \bar{b} en la ecuación tiende a cero, el resultado de estas ecuaciones son iguales a las obtenidas con la condición de no deslizamiento en la pared.

4.4. Resultados y discusión de resultados

Se estudiaron analítica y numéricamente dos relaciones de contracción hiperbólica axisimétrica diferentes utilizando el modelo sPTT, considerando condición de no deslizamiento y deslizamiento. El fluido a través de la contracción tiene un comportamiento de endurecimiento moderado ($\varepsilon_{PTT} = 0.25$), mientras que el que flujo a través de la contracción 8:1 presenta un comportamiento de endurecimiento severo ($\varepsilon_{PTT} = 0.02$).

En la Fig. 4.2 se observa que la viscosidad cortante para el modelo lineal y exponencial muestran una respuesta de adelgazamiento al corte. Las diferencias entre las versiones del modelo surgen a valores altos de rapidez de deformación, donde la caída de la versión exponencial es más pronunciada. En el caso de la extensión uniaxial, los modelos presentan endurecimiento por extensión y para el modelo ePTT, eso es seguido por un régimen de ablandamiento por extensión mientras que el modelo lPTT alcanza una meseta sin reblandecimiento.

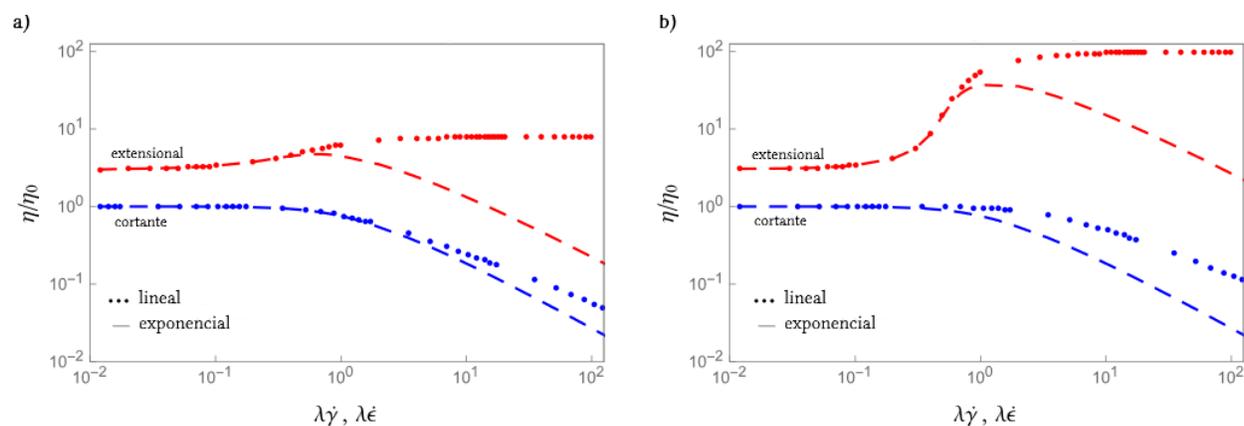


Figura 4.2: Viscosidad cortante y extensional de un fluido sPTT sin contribución de solvente: a) endurecimiento moderado; b) endurecimiento fuerte.

En la Fig. 4.3 se muestra una comparación entre la solución analítica y semianalítica. La solución analítica reproduce el flujo de la versión lineal del modelo de Phan-Thien/Tanner. La aproximación semianalítica representa la solución lineal (si consideramos un solo término)

y la exponencial añadiendo más términos a la solución. A partir de la Fig. 4.3 es posible concluir que con diez términos es suficiente para reproducir la versión del modelo ePTT tanto para la velocidad como para la caída de presión, debido a que aunque este número se aumente, no se presentan diferencias significativas en los valores obtenidos.

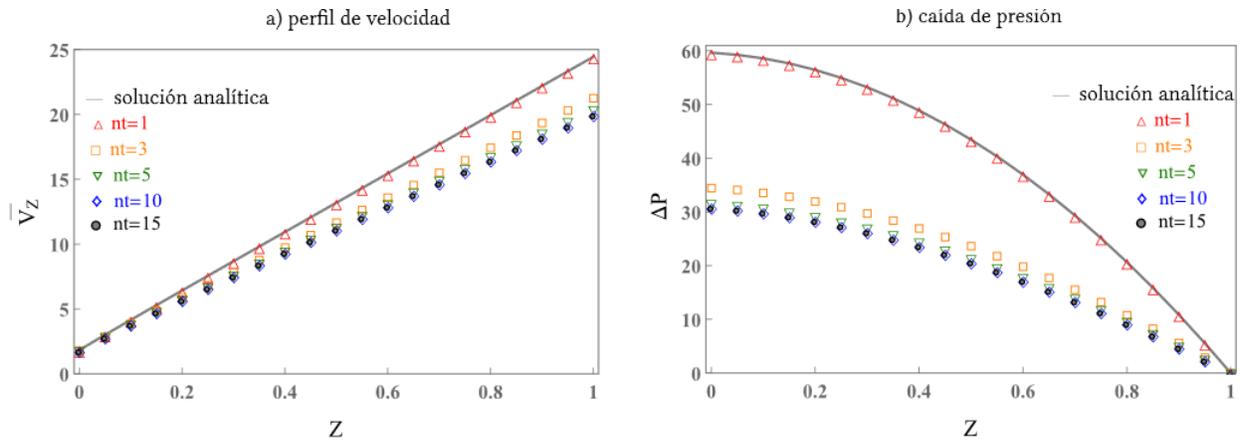


Figura 4.3: Comparación entre la solución analítica y semianalítica con un número variable de términos en la suma, para la contracción 4:1: a) perfil de velocidades adimensional a lo largo de la línea de simetría; b) caída de presión adimensional a lo largo de la línea de simetría.

En la Fig. 4.4 se muestran los perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 4:1 para fluidos con diferentes niveles de elasticidad. Los perfiles de velocidad fueron calculados con la aproximación semianalítica dada por la ecuación 4.22, y para corroborar los resultados, se realizaron simulaciones con el código comercial ANSYS Polyflow[®] el cual utiliza el modelo ePTT. Los resultados muestran una buena correlación entre la aproximación semianalítica y la solución CFD. La solución semianalítica predice bien el efecto de aplanamiento en el perfil de velocidades debido al incremento de elasticidad con algunas variaciones menores para el caso de ($We = 1$). También cabe destacar que el grado de aplanamiento en el perfil de velocidades para el fluido de endurecimiento moderado, a un Weissenberg tan bajo como 0.5, indica una fuerte respuesta elástica del flujo. En el caso de los fluidos que presentan adelgazamiento al corte a valores altos de elasticidad, la medición de viscosidad extensional

a través de contracciones semihiperbólicas sería más adecuada comparada con el caso de fluidos con viscosidad constante.

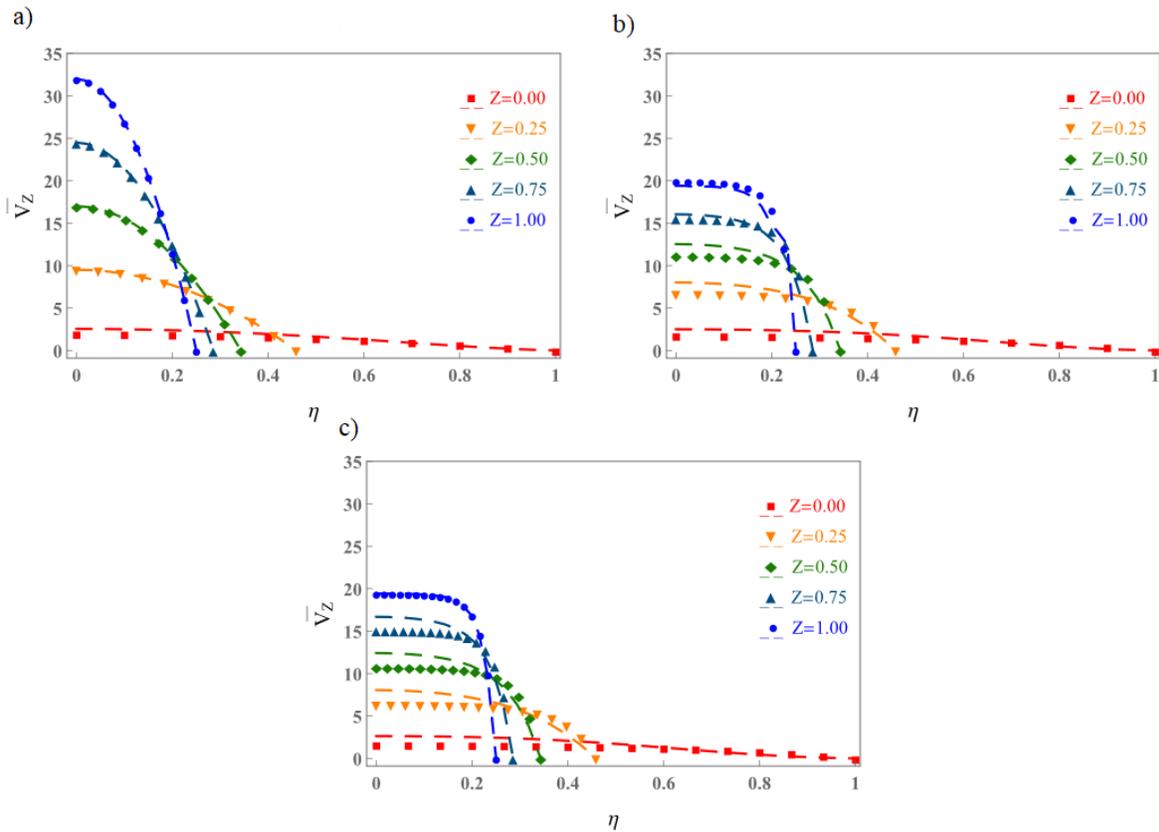


Figura 4.4: Perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 4:1: a) $We = 0$ (caso newtoniano), b) $We = 0.5$ y c) $We = 1$; los símbolos corresponden a la solución semianalítica; las líneas representan los resultados obtenidos con Polyflow[®].

El resultado de caída de presión de la contracción 4:1 para fluidos con diferentes niveles de elasticidad se presentan en la Fig. 4.5. Cabe destacar la gran disminución de la caída de presión a medida que incrementa el número de We . Para el caso newtoniano ($We = 0$) a $We = 0.5$, la caída de presión disminuye de 700 a 30 unidades.

La rapidez de deformación calculada con la aproximación analítica se muestra en la Fig. 4.6. En esta figura, la variación de $\dot{\gamma}$ vs Z se muestra gráficamente a diferentes posiciones

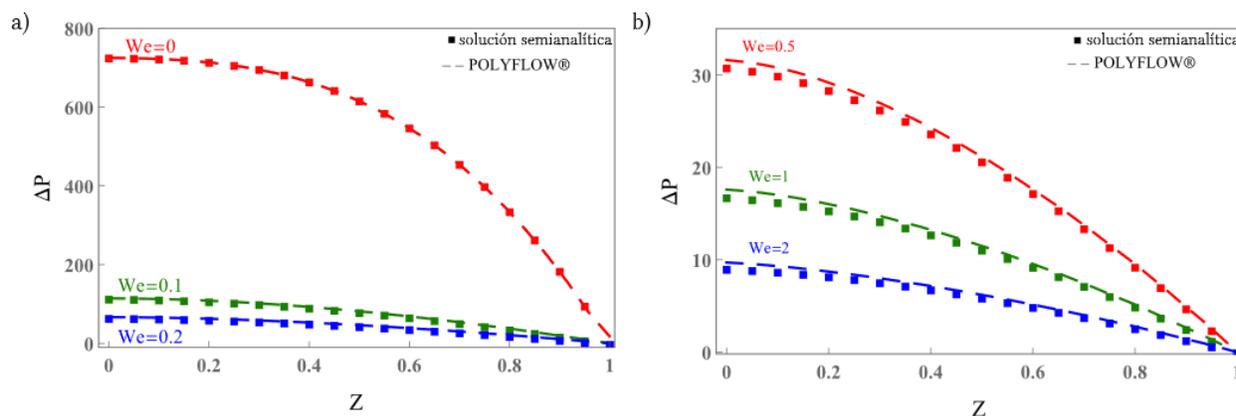


Figura 4.5: Caída de presión adimensional a lo largo del eje de simetría para la contracción 4:1: a) We 0 a 0.2, y b) We 0.5 a 2.

radiales, incluyendo la línea central ($\eta = 0$). Los valores de $\dot{\gamma}$ son casi independientes de la posición axial (Z); sin embargo, a partir de estos perfiles podemos observar que para $We = 0$, el caso inelástico, las líneas $\dot{\gamma}$ están más separadas que para el caso de $We = 0.5$ y 1. Esta respuesta es consecuencia del efecto de aplanamiento del perfil de velocidades al aumentar la elasticidad.

Como ya se ha mencionado, al dejar que $We \rightarrow 0$, la aproximación analítica presentada aquí es útil para representar fluidos newtonianos. Para la contracción 4:1 y $We = 0$ (Fig. 4.4a) muestra perfiles de velocidad equivalentes a los perfiles experimentales y numéricos de Pimenta et al. [70] considerando solo la zona de contracción. En su trabajo, se realizaron mediciones de velocidad con la técnica de velocimetría de micropartículas (l-PIV) de fluidos newtonianos en una geometría de contracción/expansión 4:1:4. Sin embargo, las velocidades de deformación calculadas a partir de datos experimentales muestran algunas oscilaciones inesperadas, aunque las velocidades de la línea central siguen una tendencia lineal; esto puede deberse a la derivación numérica de los datos experimentales. La gráfica presentada por Pimenta et al. de velocidad de deformación se aproxima a la predicción numérica, que es casi constante en la región de contracción, como lo es la velocidad de deformación calculada en este trabajo (ver la Fig. 4.6, para el caso $We=0$). Además, Faustino et al. [71] realiza-

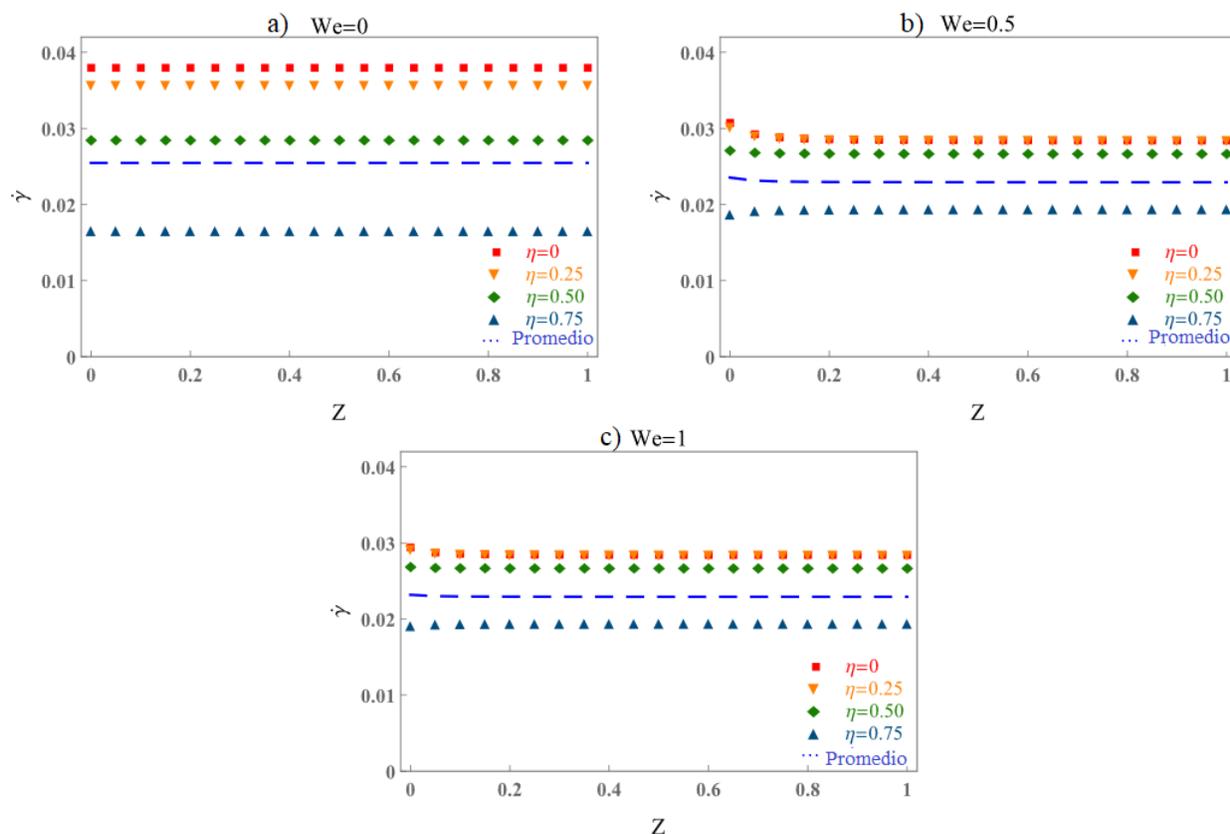


Figura 4.6: Rapidez de deformación a lo largo de la dirección Z para la contracción 4:1 : a) $We = 0$ (caso newtoniano), b) $We = 0.5$, y c) $We = 1$.

ron determinaciones experimentales de la deformabilidad de los glóbulos rojos que fluyen a través de una contracción hiperbólica; en su investigación, utilizaron este tipo de flujo para evaluar el nivel de deformabilidad de las células en flujos extensionales. Aunque utilizaron una geometría planar, la linealidad del perfil de velocidades y la rapidez de extensión casi constante son similares a los perfiles obtenidos.

Los perfiles de velocidad adimensionales de fluidos con diferentes niveles de elasticidad para la contracción 8:1 se muestran en la Fig. 4.7. En el caso de $We = 0$, no se observan diferencias significativas entre la aproximación semianalítica y las soluciones CFD. Para $We = 0.1$, podemos observar de nuevo el efecto de aplanamiento con respecto a la solución newto-

niana; para este fluido con endurecimiento fuerte, los resultados indican que a Weissenberg igual a 0.1, el nivel de elasticidad es realmente alto, a juzgar por el tamaño de la región casi constante de velocidad observada en la Fig. 4.7.

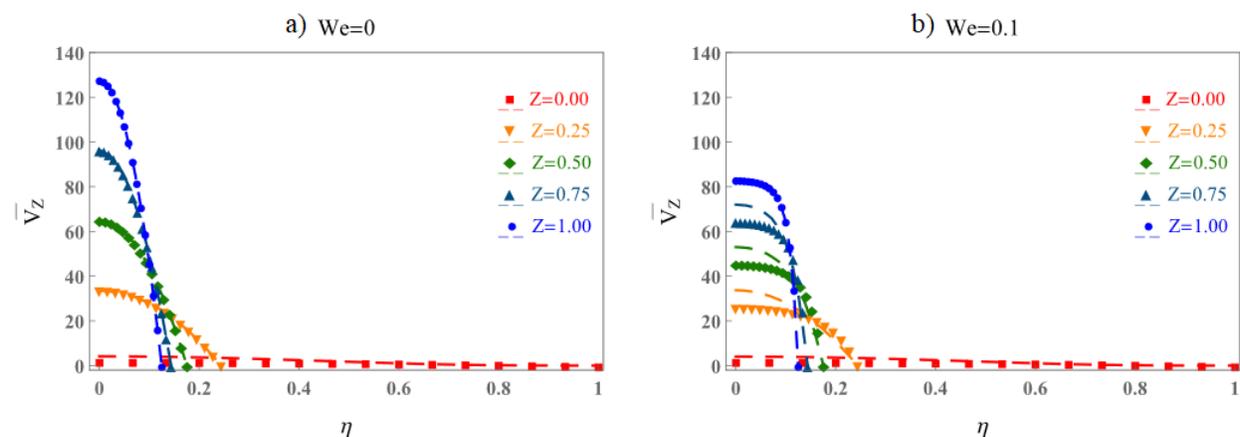


Figura 4.7: Perfiles de velocidad adimensionales para la contracción 8:1: a) $We = 0$ (caso newtoniano), y b) $We = 0.1$; los símbolos corresponden a la solución semianalítica y las líneas representan los resultados obtenidos con Polyflow[®].

En el caso de la caída de presión mostrado en la Fig. 4.8, la caída de presión inelástica (newtoniana) es once veces mayor que la caída de presión para $We = 0.1$; esta reducción se debe a la respuesta del fluido al adelgazamiento al corte.

En la Fig. 4.9 se muestra la rapidez de deformación para un fluido con endurecimiento fuerte a través de la contracción 8:1. Para el caso inelástico, la rapidez de deformación a diferente posición radial es constante, mientras que para $We = 0.1$, hay una variación del perfil en la zona de entrada, pero se alcanza un valor asintótico a partir de la posición $Z = 0.2$. Dicha variación indica que, en la entrada, la rapidez de deformación sigue evolucionando del caso inelástico al elástico. Nuevamente, la elasticidad se destaca por el hecho de que los perfiles de rapidez de deformación a diferentes valores de η están más próximos entre sí que en el caso inelástico.

De acuerdo con Hatzikiriakos [72] y Ferras et al. [73] en polímeros fundidos, soluciones

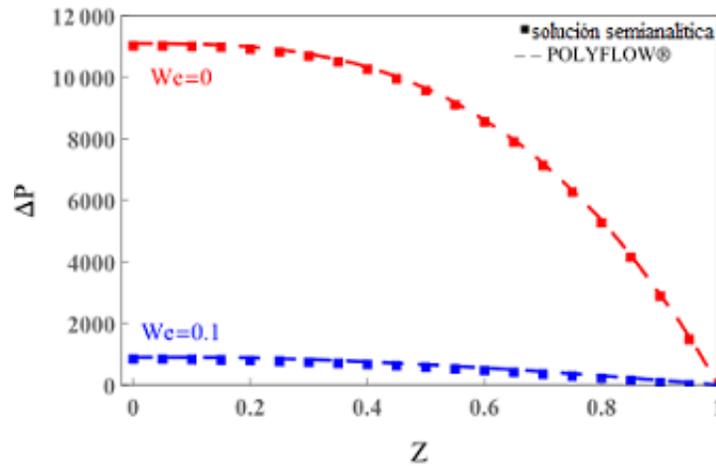


Figura 4.8: Caída de presión adimensional a lo largo del eje de simetría para la contracción 8:1.

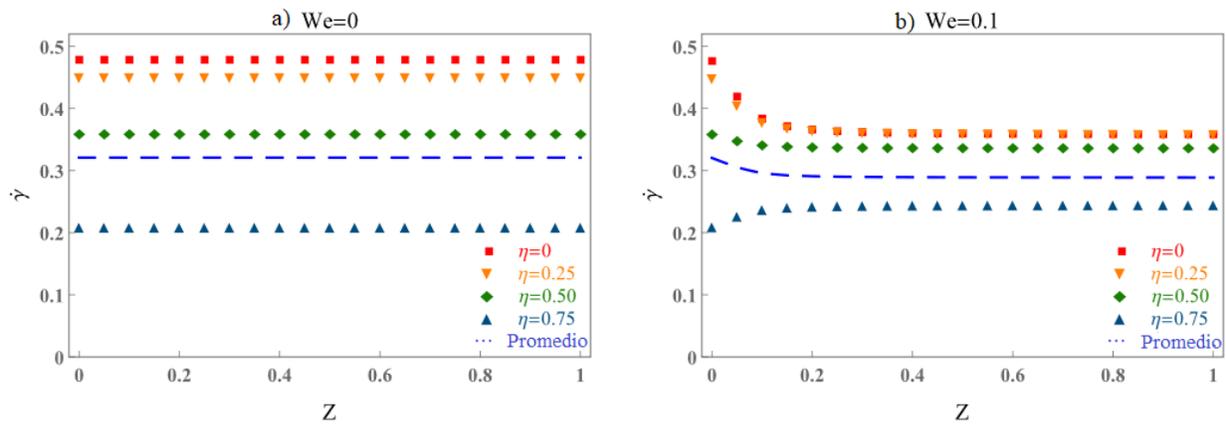


Figura 4.9: Rapidez de deformación a lo largo de la dirección Z para la contracción 8:1.

poliméricas, elastómeros, suspensiones, microgeles, pastas y espumas, se produce un cierto grado de deslizamiento, de hecho se menciona que la condición de deslizamiento es más común que la condición de frontera de no deslizamiento. Karmerkar y Edwards [73] argumentaron que para los polímeros fundidos, la geometría del flujo es también un factor que influye en el grado de deslizamiento. A partir de sus experimentos observaron que para las contracciones convergentes semihiperbólicas (SHCDs), la presencia de ácido esteárico (un agente reductor

de la viscosidad) tiene mucho menos efecto sobre el deslizamiento que en el caso de una contracción capilar de paredes rectas. Los autores concluyeron que la forma de las matrices SHCD provoca un aumento del nivel de orientación molecular, lo que se traduce en un aumento del nivel de deslizamiento en la pared. Por lo tanto, las aproximaciones analíticas y semianalíticas deben considerar algún grado de deslizamiento en la pared, para poder representar de mejor manera flujos reales. En la Fig. 4.10 se muestran los resultados para la solución con y sin deslizamiento para la contracción 4:1 (endurecimiento moderado); como ya se ha mencionado, el deslizamiento se implementó aplicando la condición de frontera de Navier. Esta figura muestra que el deslizamiento tiene un efecto significativo en el perfil de velocidad; para el caso inelástico ($We = 0$), la condición de deslizamiento se refleja en una disminución de la velocidad máxima y un cierto grado de aplanamiento, similar a la producida por adelgazamiento al corte; y para el caso de $We = 0.5$ el nivel de aplanamiento es más pronunciado y ambos perfiles de velocidad, con y sin deslizamiento, son muy similares, excepto en la pared donde presenta diferencias significativas. La condición de deslizamiento aplicada produce una velocidad distinta de cero en la pared, lo que reduce el valor máximo de la rapidez de corte y, en consecuencia, el fluido está sometido a un menor nivel de deformación cortante, nivelando el perfil de velocidades. Este efecto de aplanamiento de la velocidad al aplicar la condición de frontera de deslizamiento puede verse también en Ferras et al. [73]. Sus resultados de perfil de velocidades muestran la solución del flujo tipo Poiseuille completamente desarrollado entre placas paralelas. En su investigación, también utilizaron el modelo simplificado de Phan-Thien/Tanner (versión lineal) con $\varepsilon_{PTT} = 0.25$ que corresponde al fluido con endurecimiento moderado presentado aquí. Es de notar que emplearon la versión no lineal de la ecuación 4.21, que es una versión de ley de potencia de la condición de frontera de Navier. Ferras et al. trabajaron con una $n=1.5$ del modelo de ley de potencia. Los resultados de la Ref. [73] y este trabajo muestran tendencias muy similares aunque las diferencias en la versión de la ecuación de deslizamiento y el hecho de que en Ferras et al., la geometría del flujo es de placas paralelas mientras que aquí, los resultados son para la

salida de una contracción axisimétrica. Por último, se observa una reducción significativa de la caída de presión para el fluido newtoniano ($We = 0$), mientras que para $We = 0.5$ esta disminución entre los casos con y sin deslizamiento, no es tan evidente. Parece que a niveles elevados de elasticidad, la reducción de la viscosidad tiene un efecto más dominante sobre la presión que el del deslizamiento en la pared. Para la geometría 8:1, se aplican las mismas tendencias y, por tanto, las mismas observaciones.

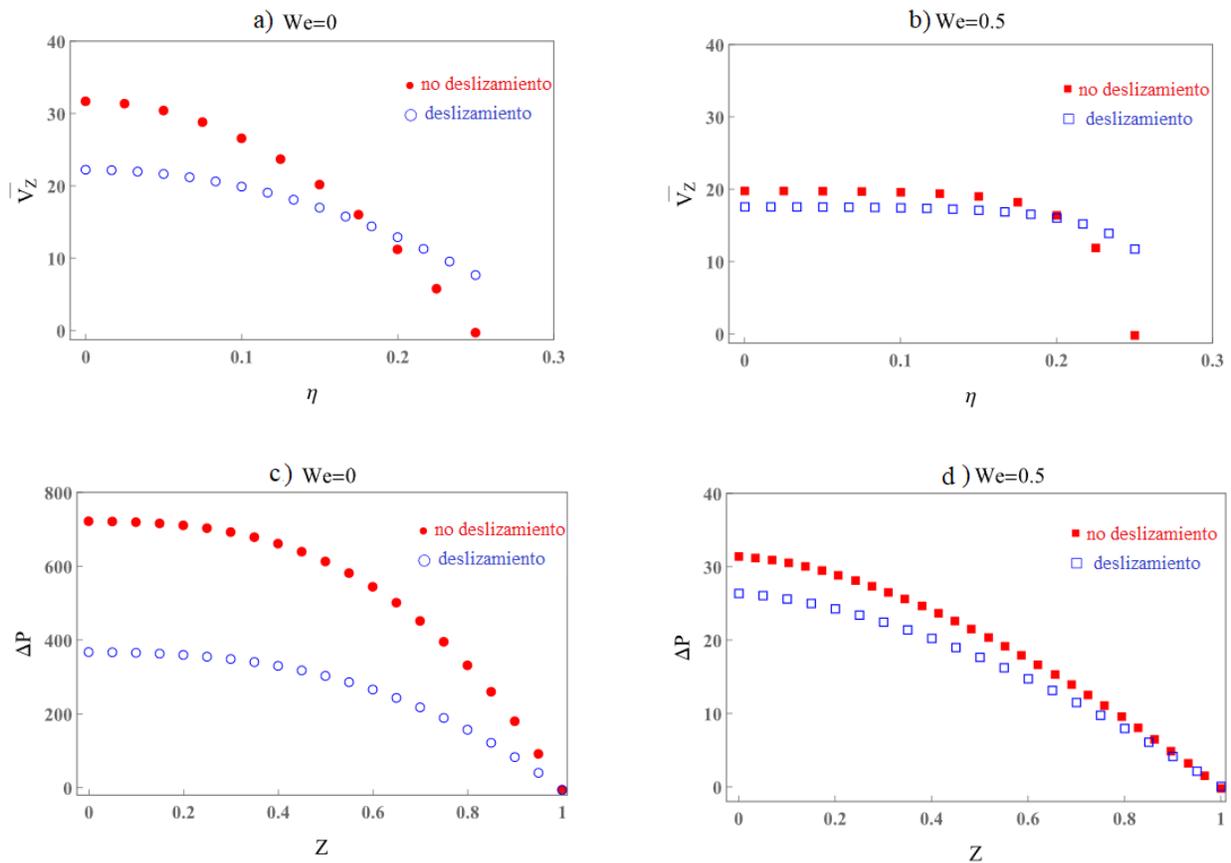


Figura 4.10: Perfiles de velocidad a la salida ($Z = 1$) y caída de presión a lo largo de la línea de simetría: a) velocidad para $We = 0$ (caso newtoniano), b) velocidad para $We = 0.5$, c) caída de presión para $We = 0$ y d) caída de presión para $We = 0.5$; los símbolos llenos corresponden a los resultados sin deslizamiento, mientras que los símbolos vacíos corresponden a la condición de deslizamiento.

4.5. Conclusiones

Las soluciones analíticas presentadas en este capítulo aproximan el flujo de un fluido Phan-Thien/Tanner a través de geometrías de contracción semihiperbólicas axisimétricas. Estas aproximaciones basadas en la aproximación de lubricación, nos permite calcular los perfiles de velocidad y caída de presión en la geometría. Los resultados del modelo semi-analítico han sido comparados con el software ANSYS Polyflow[®], obteniendo un excelente concordancia entre ambos casos. Las ecuaciones de la solución reproducen bien el efecto de aplanamiento en el perfil de velocidad, como era de esperar por la reducción de viscosidad debido a los efectos elásticos.

Además, el cálculo de la rapidez de deformación a partir de la aproximación analítica presentada da como resultado un rapidez de extensión casi constante; sin embargo, la transición de flujo inelástico a viscoelástico produce una zona en la que la velocidad de deformación varía a lo largo de la dirección axial, lo cual es consecuencia de la reducción de viscosidad.

Adicionalmente, se presenta una versión más general de las soluciones considerando ahora la condición de deslizamiento de Navier, lo que hace que los modelos puedan representar de forma más adecuada flujos con fenómenos de deslizamiento, permitiendo que los modelos representen situaciones reales de flujo. Los resultados muestran que la condición de deslizamiento aumenta el nivel del perfil de velocidades incluso para el caso inelástico. La dependencia de la caída de presión de la elasticidad es bastante significativa, y la condición de frontera de Navier genera una reducción adicional a la presión. Este efecto de aplanamiento es muy importante cuando se intenta conseguir una deformación uniaxial homogénea.

La solución analítica presentada es útil para aproximar la viscosidad extensional de los fluidos que siguen la versión lineal del modelo Phan-Thien/Tanner. Esto permitiría analizar si el deslizamiento o la elasticidad son dominantes al calcular dicha viscosidad para una velocidad de flujo y una relación de contracción determinadas. También sería útil determinar el nivel de variación de la rapidez de deformación, con el fin de evaluar el nivel de aproximación

del flujo necesario para estimar la viscosidad extensional.

Capítulo 5

Efectos reológicos transitorios

Generalmente se asume que la cinemática de estado estacionario del flujo viscoelástico en contracciones depende exclusivamente de propiedades reológicas en estado estacionario. Esta idea se ve respaldada por el gran número de referencias que explican los resultados de simulaciones estacionarias considerando únicamente funciones materiales en estado estacionario. Aún con simulaciones numéricas, sería difícil demostrar que tal afirmación es errónea. Sin embargo, utilizando el modelo de Bautista-Manero-Puig es posible obtener la misma respuesta reológica estacionaria, pero con diferente evolución transitoria. En este caso se consideran dos fluidos, uno que presenta una evolución transitoria monotónica y otro con al menos un rebasamiento (overshoot) visible en las funciones materiales¹.

5.1. Introducción

El flujo a través de contracciones ha generado gran interés científico a lo largo de los años, se ha estudiado desde puntos de vista experimental, numérico y teórico. Este tipo de flujo es complejo debido a la presencia simultánea de esfuerzos cortantes y extensionales cerca de la

¹El material de este capítulo ha sido publicado en *K. Y. Pérez-Salas, S. Sánchez, S. Velasco-Segura, G. Ascanio, L. Ruiz-Huerta and J. P. Aguayo, “Rheological transient effects on steady-state contraction flows,” Rheologica Acta 1-11, (2023).*

entrada a la zona de reducción de área. En la industria, los flujos a través de contracciones son importantes en operaciones de procesamiento de polímeros como la extrusión o inyección por moldeo, impresión por chorro de tinta [74]. y más recientemente en el campo de la manufactura aditiva [75], donde el desempeño del proceso de manufactura depende en gran medida de la reología del material para mejorar la confiabilidad del flujo y el desempeño de la deposición [76]. De acuerdo con Owens y Phillips [77], el primer trabajo experimental sobre geometrías de contracción fue reportado por Tordella [78], quien estudió la inestabilidad de polímeros extruidos a través de capilares. En general, los estudios se han concentrado en visualizar la dinámica del vórtice, y medir la caída de presión, las trayectorias de las partículas y la velocidad en la línea central [77]. Desde el trabajo de Nguyen y Boger [79], quienes utilizaron fluidos altamente elásticos con viscosidad cortante casi constante, lo que permitió eliminar experimentalmente cualquier efecto de adelgazamiento por corte, gran parte de esta investigación se centró en estudiar los denominados fluido de Boger (véanse, por ejemplo, las referencias [80–85]).

Considerando fluidos viscoelásticos con adelgazamiento al corte en flujo en contracciones, White and Kondo [86] concluyeron después de evaluar un gran número de datos experimentales que para que los polímeros fundidos presenten vórtices, es necesario un rápido aumento de viscosidad extensional. Además del estudio de vórtices de esquina (corner vortex) también se han estudiado los vórtices de borde (lip vortex), y la evolución de ambos, ha generado un gran interés, por ejemplo, Evans and Walters [87] realizaron experimentos para visualizar la dinámica de vórtices en contracciones planares para fluidos viscoelásticos con adelgazamiento al corte (soluciones acuosas de poliacrilamida). A partir de sus experimentos concluyeron que para relaciones de contracción abruptas de 2:1 y 4:1, el crecimiento del vórtice de esquina (corner vortex) era el fenómeno dominante, en contraste con el vórtice de borde; sin embargo, para los fluidos menos viscosos se observó el vórtice de borde, para el que se asume que la inercia es responsable de mantener separados los vórtices de bordes y de esquina. En los trabajos de White et al. [88] de 1987 y Owens y Phillips [77] del 2002 se pueden

encontrar excelentes revisiones sobre el tema, en relación con fluidos de Boger y los fluidos con adelgazamiento al corte. La investigación en esta área ha continuado, por ejemplo, Lee et al. [89] estudiaron el flujo de líquidos viscoelásticos en contracciones rectangulares 3D que muestran un adelgazamiento moderado por corte. Según sus resultados, a medida que aumenta el número de elasticidad, el vórtice evoluciona de vórtice de borde a esquina, luego se produce un flujo divergente seguido de un crecimiento del vórtice cuya dinámica depende de la relación de aspecto de la contracción. Además, Pérez-Camacho et al. [85] llevaron a cabo un estudio experimental para una contracción-expansión axisimétrica, analizando fluidos de Boger y fluidos elásticos con adelgazamiento al corte. Según estos autores, los fluidos que presentan magnitudes similares de N_1 presentarán tamaños de vórtice comparables.

Está claro que la relación entre la reología de los fluidos y la dinámica de vórtices es compleja. En este contexto, nuestros resultados mostrarán que la reología transitoria puede ser necesaria para lograr una mejor comprensión del fenómeno. Esta idea parece concordar con White et al. [88], que expresan la idea de que el crecimiento del vórtice está controlado por la viscosidad extensional transitoria de los fluidos.

En la literatura, el flujo en contracciones ha sido estudiado desde perspectivas teóricas, numéricas y experimentales. Desde el punto de vista teórico los flujos complejos han sido objeto de estudio de varios investigadores, por ejemplo, flujo pulsátil [90], flujo electroosmótico [91], y flujo potencial uniforme [92] por mencionar algunos. Por lo tanto, como el flujo que se evalúa en este trabajo es una mezcla de deformaciones por corte y extensión, existen varias aproximaciones analíticas que pueden utilizarse para representar un flujo tan complejo, por ejemplo, Cogswell [39] quien tal vez fue el primero en reconocer la relevancia de la viscosidad extensional en el flujo a través de contracciones, en su análisis, trató de separar las contribuciones por corte y por extensión. Años más tarde, Binding [40], [93], presentó una aproximación mejorada que se utilizó para estimar la viscosidad extensional de algunas soluciones poliméricas. Lubansky y Matthews [94] analizaron el caso de los fluidos de Boger en contracciones, obteniendo una buena concordancia cualitativa en las longitudes de vórtice y

en los cálculos de caída de presión. Más Recientemente, Pérez-Salas et al. [69] , [95], obtuvieron aproximaciones del flujo en contracciones hiperbólicas utilizando el modelo simplificado de Phan-Thien/Tanner, con resultados satisfactorios comparados con simulaciones.

Desde un punto de vista numérico, el flujo en contracción 4:1 ha sido estudiado por Debaut y Crochet [96] mostrando que los efectos extensionales son responsables del crecimiento de vórtices en contracciones circulares. Aboubacar et al. [97] simularon el flujo de los modelos Oldroyd- B y Phan-Thien/Tanner a través de contracciones 4:1, abruptas y redondeadas. Analizando un fluido Oldroyd-B, Sato y Richardson [98] captaron la presencia de un vórtice de borde que desaparece a medida que la simulación avanza en el tiempo. López-Aguilar y Tamaddon-Jahromi [99] simularon fluidos de Boger reproduciendo las líneas de corriente reportadas en la literatura para geometrías abruptas axisimétricas. En su revisión de métodos numéricos para flujos viscoelásticos, Alves et al. [100] mostraron que existe un nivel de discrepancia entre varios algoritmos numéricos al comparar longitudes de vórtices considerando datos anteriores a 2003; sin embargo, algunas implementaciones numéricas recientes muestran un nivel de correlación mucho mayor.

Respecto a soluciones micelares tipo gusano (WLM), Hashimoto et al. [101] estudiaron el comportamiento de estos flujos en contracciones axisimétricas 11:1 mediante visualización de flujo. Concluyeron que el flujo puede ser clasificado en cuatro regiones: la primera es obtenida a baja rapidez de flujo en la que se produce una respuesta newtoniana del fluidos; en la segunda aparecen vórtices independientes del tiempo, los cuales aumentan de tamaño a medida de que aumenta la rapidez de flujo; en la tercer región los vórtices son inestables y presentan fluctuaciones, y en la última, el flujo se vuelve turbulento. Lutz-Bueno et al. [102] estudiaron e flujo de soluciones WLM compuestas de bromuro de cetil bromuro de trimetilamonio (CTAB) y salicilato sódico (NaSal) en geometrías de contracción abrupta. Siguieron la alineación de las micelas mediante dispersión de neutrones de ángulo pequeño (SANS). Observaron que la formación de vórtices de estas soluciones depende de la elasticidad del fluido, que a su vez depende de la concentración. A baja rapidez de flujo, el esfuerzo

cortante es dominante, y al aumentar la rapidez la extensión adquiere mayor importancia, lo cual se refleja en el patrón de flujo y en la deformación de las micelas. En otro estudio, Hwang et al. [103] investigaron el flujo de soluciones WLM (cadenas lineales y ramificadas) alrededor de una banda microfluídica afilada mediante visualización; observaron el comportamiento del flujo a medida que aumentaba el número de Weissenberg (We); a $We = 6$ a 8 se observa la formación de vórtices de borde estables; estos vórtices permanecen independientes del tiempo hasta un valor de $We = 20$. A valores superiores de $We = 20$ a 41 , el vórtice de borde se vuelve inestable y cambia su longitud con el tiempo. Nodoushan et al. [104] llevaron a cabo un estudio de estabilidad del flujo de soluciones WLM. Ellos utilizaron tres concentraciones de soluciones de CTAB y NaSal en una contracción rectangular 8:1. Comprobaron que, para el fluido menos concentrado, los vórtices sólo aparecen en función de la elasticidad, mientras que para las otras dos soluciones, más concentradas, la dinámica de los vórtices y su estabilidad dependen de los fenómenos de bandas de corte (shear-banding phenomena) de estas soluciones.

En cuanto a los efectos transitorios, Webster et al. [105] analizaron la influencia de condiciones de frontera de entrada dependientes del tiempo y estáticas, para el fluido Oldroyd-B en geometrías de contracción. Encontraron que dichas condiciones tienen gran impacto en los patrones de vórtice; sin embargo, una vez que las simulaciones alcanzan estado estacionario en ambos casos, los resultados fueron exactamente los mismos. A partir de observaciones experimentales, Boger et al. [81] concluyeron que los datos de corte estacionario y dinámico son insuficientes para explicar la evolución de los vórtices, en consecuencia, es necesario tener en cuenta la viscosidad extensional. Al evaluar datos experimentales para explicar el origen de los vórtices en flujos planares y axisimétricos, White et al [88] llegaron a una conclusión similar. Estos autores concluyeron que la elasticidad basada en las propiedades de corte es menos significativa y la viscosidad extensional transitoria es más importante para explicar la dinámica de los vórtices. Recientemente, Davoodi et al. [106] compararon la respuesta de los modelos simplificado de Phan-Thien/Tanner y FENE-P. Para tal comparación, el compor-

tamiento reológico estacionario de ambos modelos se igualó haciendo que el parámetro de control de extensión sPTT fuera $\varepsilon = 1/L^2$ donde L^2 es el parámetro de extensibilidad del fluido FENE-P. En este procedimiento de ajuste, ellos obtuvieron el mismo valor para viscosidad de corte para η_s y N_1 y la misma viscosidad extensional η_e . Referente al comportamiento transitorio, η_e^+ siguen valores muy similares para ambos modelos, con respecto al tiempo y para todos los valores de We considerados. No obstante se encontraron algunas diferencias (menores que el 7% en η/η_0) en la viscosidad cortante transitoria η_s^+ , donde para un valor de $We = 5$, el modelo FENE-P predice un pequeño (rebasamiento) overshoot a partir del punto de $\dot{\gamma}t \sim 7$. A medida que el We aumenta, el rebasamiento aumenta considerablemente y se desplaza hacia valores mayores de $\dot{\gamma}t$. Por el contrario, ambos modelos dan los mismos resultados para valores de $We \leq 2$. En su análisis Davoodi et al. obtuvieron diferencias poco significativas entre los resultados de estado estacionario para la longitud del vórtice y las líneas de corriente cerca de la esquina reentrante.

En esta trabajo, obtenemos tendencias de vórtices y caídas de presión simulando el flujo con el modelo BMP. Fueron elegidos dos conjuntos de parámetros de manera que permitan obtener exactamente la misma respuesta en estado estacionario, pero siguiendo trayectorias muy diferentes en las funciones reológicas transitorias. Un conjunto de parámetros muestra al menos un rebasamiento en las viscosidades de corte y extensional, y en las primeras diferencias de esfuerzos normales, mientras que el segundo conjunto de parámetros produce un aumento monótonico desde el reposo hasta los valores estacionarios.

5.2. Modelo reológico

Para modelar el comportamiento reológico de soluciones micelares viscoelásticas, Bautista et al. [107] presentaron el modelo Bautista Manero-Puig (BMP). Posteriormente, Boek et al. [17] desarrollaron una versión mejorada, en la que se elimina una inestabilidad en la viscosidad extensional. Para este trabajo, debido a que se analiza la respuesta transitoria en un flujo viscoelástico a través de una contracción abrupta, se implementó la versión

mejorada del modelo BMP utilizando RheoTool, el cual es un software de código abierto basado en OpenFOAM®. En este caso, la versión del modelo existente en el programa informático se actualizó siguiendo las modificaciones propuestas por Boek et al. [17]; además, fueron consideradas las siguientes suposiciones y límites de estudio para construir el análisis numérico.

1. El dominio de estudio (malla) está representado principalmente por dos secciones, una antes de la contracción y otra después de ella. Para el primer caso, L_{in} representa la distancia necesaria para evitar cualquier efecto de la contracción en el flujo, lo que permite suponer un flujo desarrollado para el punto inicial del estudio. Asimismo, L_{out} es la longitud que permite al flujo alcanzar la condición de flujo totalmente desarrollado después de la contracción (ver Fig. 5.1). Es importante señalar que la primera sección es mayor que L_{in} para la malla computacional; esto se debe a que el software necesita una mayor longitud para generar un flujo desarrollado en el punto inicial del análisis. Este procedimiento ya ha sido utilizado y validado en trabajos anteriores (Pérez-Salas et al. [69], [95]; Bishko et al. [108]).
2. Para el estudio se construyeron dos geometrías, con relaciones de contracción de 4:1 y 8:1 entre las dos secciones transversales (H_{max}/H_{min}). Además, se evaluaron tres densidades de malla diferentes: una de baja densidad con unas 8,000 celdas (M1), una intermedia con aproximadamente 60,000 celdas (M2), y una de alta densidad con alrededor de 150,000 celdas (M3). Después de evaluar los resultados obtenidos, se determinó que la malla intermedia (M2) es la más adecuada para realizar las evaluaciones numéricas (ver Fig. 5.2). Como prueba adicional de la calidad de la malla seleccionada (M2), en la Fig. 5.3 se muestran los vórtices de esquina obtenidos con las mallas (M2) y (M3), demostrando que este tipo de vórtices no son un fenómeno numérico debido al refinamiento de malla en este trabajo.
3. Se ha supuesto que en el contorno de la contracción hay condiciones de no desliza-

miento y que la superficie es impermeable ($\underline{u} = 0$). Además, la presión de salida de la contracción es la presión atmosférica ($p|_{x=L_{in} + L_{out}} = P_{out}$), y la presión de entrada ($P|_{x=0} = P_{in}$) se calcula después de proponer la velocidad característica u_c . Lo anterior sigue la formulación teórica en Pérez-Salas et al. ([69], [95]), donde el valor de u_c se emplea para definir el valor correspondiente del número de Weissenberg (We), relación que se explica en detalle más adelante.

Aquí consideramos la versión mejorada del modelo BMP [17], que consiste en la ecuación Oldryd-B para la evolución del esfuerzo polimérico junto con una ecuación que tiene en cuenta la fluidez (inversa de la viscosidad), en términos de formación y destrucción de estructuras micelares.

Para expresar las ecuaciones del modelo en forma adimensional, H, U_c y H/U_c son la longitud característica, la velocidad y tiempo, respectivamente. El esfuerzo adimensional es $\frac{U_c}{(\varphi_0 H)}$; y la fluidez es $\varphi = \eta_T/\eta_p$. Después, las ecuaciones adimensionales para el modelo reológico se expresan como sigue:

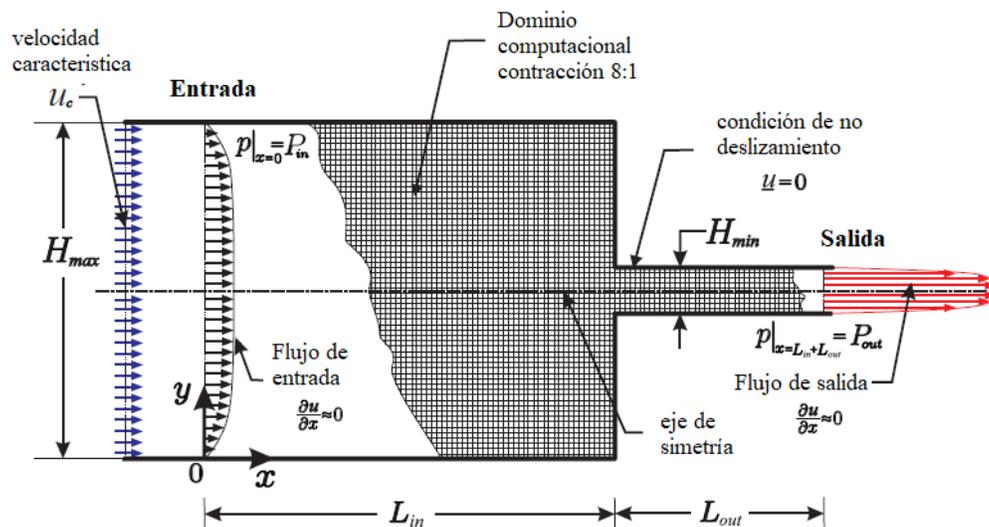


Figura 5.1: Representación esquemática de la contracción 8:1, en ella, se muestran las principales características físicas del flujo y la densidad de malla elegida.

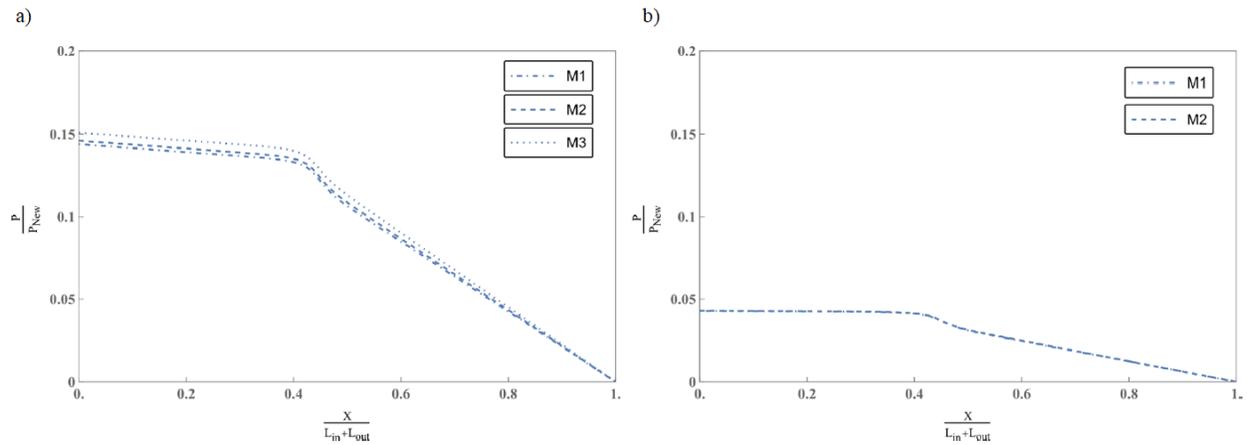


Figura 5.2: Análisis de independencia de malla en términos de la caída de presión adimensional a lo largo de la contracción; a) en el caso de la contracción 4:1 fueron evaluadas tres mallas y b) en el caso de la contracción 8:1 fueron evaluadas dos mallas.

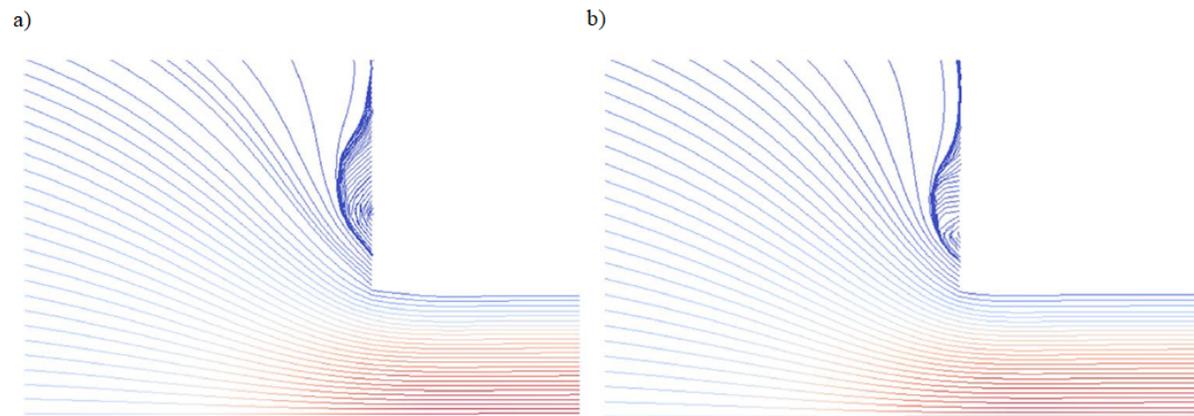


Figura 5.3: Análisis de independencia de malla en términos de comportamiento para la contracción 4:1, de un fluido monotónico y $We = 2$; a) malla media (M2) y b) malla refinada (M3).

Para el caso de la evolución de la tensión polimérica:

$$\varphi_{\underline{\tau}} + We \frac{\nabla}{\underline{\tau}} = \nabla \underline{v} + (\nabla \underline{v})^T, \quad (5.1)$$

donde la fluidez φ y la derivada convectiva superior del tensor de esfuerzo polimérico $\frac{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}_p}$ están dadas por las siguientes expresiones:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \varphi = \frac{1}{\omega} (\varphi_0 - \varphi) + \xi \underline{\underline{\tau}}_p : \underline{d}; \quad (5.2)$$

y

$$\frac{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}_p} = \frac{\partial}{\partial t} [\underline{\underline{\tau}}_p] + \underline{u} \cdot \nabla \underline{\underline{\tau}}_p - [\nabla \underline{u}]^T \cdot \underline{\underline{\tau}}_p - \underline{\underline{\tau}}_p \cdot [\nabla \underline{u}], \quad (5.3)$$

respectivamente. Además, la contribución newtoniana del solvente ($\underline{\underline{\tau}}_{solv}$) se define como:

$$\underline{\underline{\tau}}_{solv} = \frac{2}{\varphi_{solv}} \underline{d}, \quad (5.4)$$

por lo tanto, el tensor de esfuerzo total $\underline{\underline{\tau}}$ está determinado por:

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_{solv} + \underline{\underline{\tau}}_p. \quad (5.5)$$

En las ecuaciones anteriores, \underline{d} representa el tensor de esfuerzo extra y \underline{u} es el vector de velocidad. También, la fluidez a rapidez de corte cero (φ_0) y la fluidez a rapidez de corte altas (φ_∞), junto con los parámetros cinéticos para la construcción (λ) y destrucción de estructuras micelares (k), y la viscosidad dinámica del polímero (η_p) y el solvente newtoniano (η_{solv}). Asimismo, G_0 es el módulo de relajación, $\dot{\epsilon}$ es la rapidez de extensión y $\dot{\gamma}$ es la rapidez de corte.

Al expresar las ecuaciones en términos adimensionales, se definen los siguientes números:

$$We = \frac{\eta_T U_c}{G_0 H}, \quad \omega = \lambda \frac{U_c}{H}, \quad \xi = k \eta_T^2 \frac{U_c}{H}, \quad y \quad \varphi_{solv} = \frac{\eta_T}{\eta_{solv}}. \quad (5.6)$$

En estas definiciones, We es el número de Weissenberg; ω y ξ representan los términos adimensionales para la construcción y destrucción de micelas, respectivamente; y φ_{solv} corresponde a la contribución viscosa newtoniana.

Por otra parte, después de considerar un sistema de coordenadas cartesianas 2D en la contracción (x, y) , como se ilustra en la Fig. 5.1, las ecuaciones para las funciones materiales que evolucionan en el tiempo para flujo cortante simple, son:

$$\begin{aligned}
\frac{d\tau_{p_{xx}}}{dt} &= -\frac{1}{We}\tau_{p_{xx}} + 2\dot{\gamma}\tau_{p_{xy}} \quad , \\
\frac{d\tau_{p_{xy}}}{dt} &= \frac{1}{We}(\dot{\gamma} - \varphi\tau_{p_{xy}}) \quad , \\
\frac{d\varphi}{dt} &= \frac{1}{\omega}(\varphi_0 - \varphi) + \xi\dot{\gamma}\tau_{p_{xy}} \quad , \\
\eta_{shear}^+ &= \frac{\tau_{p_{xy}}}{\dot{\gamma}} + \frac{1}{\varphi_{solv}} \quad , \\
N_1^+ &= \tau_{p_{xx}},
\end{aligned} \tag{5.7}$$

y para caso de flujo extensional son:

$$\begin{aligned}
\frac{d\tau_{p_{xx}}}{dt} &= -\left(\frac{1}{we} - 2\dot{\epsilon}\right)\tau_{p_{xx}} + \frac{2}{We}\dot{\epsilon} \quad , \\
\frac{d\tau_{p_{yy}}}{dt} &= \left(\frac{1}{we}\varphi + \dot{\epsilon}\right)\tau_{p_{yy}} \quad , \\
\frac{d\varphi}{dt} &= \frac{1}{\omega}(\varphi_0 - \varphi) + \xi\dot{\epsilon}(\tau_{p_{xx}} - \tau_{p_{yy}}) \quad , \\
\eta_{ext}^+ &= \frac{\tau_{p_{xx}} - \tau_{p_{yy}}}{\dot{\epsilon}} + \frac{3}{\varphi_{solv}}.
\end{aligned} \tag{5.8}$$

En estas ecuaciones, η_s^+ , N_1^+ y η_e^+ son la viscosidad cortante transitoria, la primera diferencia de esfuerzos normales transitoria y la viscosidad extensional transitoria, respectivamente.

Como se mencionó previamente, se utilizan dos conjuntos de parámetros del modelo para realizar el análisis de la respuesta transitoria (véase el cuadro 5.1). En este caso, los nombres de los casos están en función de su respuesta reológica transitoria, es decir, monotónico o rebasamiento. Sin embargo, como puede observarse al comparar ambos casos, el producto de los parámetros cinéticos estructurales ($\omega\xi$) es el mismo (≈ 0.2808), lo que garantiza el mismo estado estacionario para ambos fluidos.

Cuadro 5.1: Parámetros del modelo adimensional BMP.

Fluido	φ_0	φ_{solv}	ω/We	ξ/We
Monotónico	1.0145	69.773	7.89×10^{-3}	35.588
Rebasamiento	1.1045	69.773	1.4226	0.19741

En la Fig. 5.4, se presentan las respuestas estacionarias y dinámicas del modelo BMP utilizado en este trabajo. La respuesta estacionaria es la misma para ambos fluidos; por lo que sólo se muestra un caso. Podemos observar que los fluidos presentan un endurecimiento moderado por extensión, seguido de un comportamiento de ablandamiento por extensión. La viscosidad cortante presenta la primera y segunda región newtoniana y una zona de adelgazamiento (ver Fig. 5.4 a). Para el caso de la primera diferencia de esfuerzo normal, aumenta a un valor asintótico para valores de $\dot{\gamma} \geq 8$ (ver Fig. 5.4 b), donde $\lambda_{relax} = \eta_p/G_0$ representa el tiempo de relajación. Además, para las funciones transitorias, podemos observar que las propiedades de corte presentan rebasamiento para $\lambda_{relax}\dot{\gamma} > 1$ (ver Fig. 5.4 c y d), mientras que la viscosidad extensional, el rebasamiento no sólo está presente a $\lambda_{relax}\dot{\epsilon} = 1$, sino que además los picos son de mayor magnitud que los observados en propiedades de corte.

5.3. Resultados

Como se detalla en los aspectos básicos de la construcción de mallas, las simulaciones parten del reposo con un perfil de velocidad plano. De forma similar a Pérez-Salas et al. [69], [95] y Bishko et al. [108]; el canal de entrada es lo suficientemente grande para permitir que el perfil de velocidad evolucione a una condición completamente desarrollada antes de interactuar con la contracción (punto inicial del estudio).

Con el fin de corroborar la solución numérica se realizó una prueba de independencia

de malla. Del mismo modo, el modelo implementado se probó con una solución analítica para el flujo Poiseuille entre placas paralelas (Aguayo-Vallejo [109]). Suponiendo un valor de $We = 2$, donde este se define como $We = U_c \lambda_{relax} / H_{max}$, el perfil de velocidad obtenido de la solución analítica y del modelo en RheoTool se presenta en la Fig. 5.5. De esta figura podemos deducir que el modelo reológico estaba bien programado. Además, los resultados muestran que ambos conjuntos de parámetros producen el mismo valor de estado estacionario para el flujo Poiseuille, en el cual el área de flujo es constante; por lo tanto, no aparecen efectos lagrangianos como ocurre en el un flujo en contracción.

A partir de los resultado más relevantes obtenidos en la evaluación numérica, la caída de presión ($\Delta P = p - P_{out}$) obtenida se muestra en la Fig. 5.6. En esta figura, se muestran los valores resultantes de caída de presión adimensional, para lo cual fue utilizada la caída de presión de un fluido newtoniano (ΔP_{Newt}) obtenidos a la menor velocidad de flujo analizada (velocidad característica U_c). De estos resultados se deduce que conforme aumenta el valor de We , la caída de presión (ΔP) es diferente para los casos monotónico y rebasamiento. En todos los casos estudiados, el fluido con rebasamiento presenta valores de caída de presión mayores que los del fluido monotónico.

Además, otra observación de la Fig. 5.6 es que la caída de presión adimensional es mayor para la contracción 4:1 que las obtenidas con la contracción 8:1. El motivo por el cual $\Delta P / \Delta P_{Newt}$ es mayor en caso de la contracción 4:1 puede ser explicada considerando que el caso 8:1 la rapidez de corte alcanza valores mayores comparada con la presentada en la contracción 4:1; esta rapidez de deformación mayor se traduce en un mayor grado de reducción de la viscosidad del fluido; por lo tanto, la caída de presión disminuye.

Para simplificar la comparación de los resultados de caída de presión, en la Fig. 5.7 se muestra la caída de presión normalizada a diferentes niveles de elasticidad $\frac{\Delta P_{max}}{\Delta P_{newt}} = \frac{P_{in} - P_{out}}{\Delta P_{newt}}$. Aquí podemos observar que para valores de We mayores, aumenta la diferencia entre el fluido monotónico y el de rebasamiento. Además el fluido que presenta un rebasamiento en las funciones reométricas parece disipar más energía.

En el mismo contexto, las diferencias de en el estado estacionario de los dos fluidos son más notables cuando se comparan los patrones de vórtices como se ilustra en la Fig. 5.8, para la contracción 4:1 y en la Fig. 5.9 para la contracción 8:1. En el caso 4:1 con fluido de rebasamiento presenta vórtices mucho mayores comparados con los del fluido monotónico. Para el caso de rebasamiento, no se generan vórtices de borde y el vórtice de esquina aumenta a medida que aumenta el Weissenberg. Una tendencia bastante diferente se observa para el caso monotónico para el cual los vórtices de esquina tienden a desaparecer durante los incrementos de We simulados. Además, para este caso monotónico, parece surgir un vórtice de borde a $We = 1.5$, y se hace más perceptible en $We = 2$. Se obtiene el mismo comportamiento, pero amplificado en la geometría 8:1 para el líquido con rebasamiento. Para este caso, los vórtices de esquina son bastante grandes, mientras que para el caso monotónico, el vórtice de esquina parece muy pequeño, y el vórtice de borde aparece en $We = 0.5$ y se hace más grande con forme aumenta la elasticidad. Como comentario adicional, cabe destacar que para el mayor número de Weissenberg simulado aquí ($We = 2$) el fluido monotónico necesitó aproximadamente la mitad del tiempo para alcanzar el flujo estacionario.

5.4. Conclusiones

Como ya se ha mencionado, Davoodi et al. [106] simularon dos modelos constitutivos diferentes (sPTT y FENE-P) con las mismas propiedades estacionarias, valores transitorios de corte muy similares al menos para $We < 20$, y para la viscosidad extensional que evoluciona en el tiempo, ambos modelos siguen un aumento monotónico de esta propiedad donde el fluido FENE-P alcanza el estado estacionario un poco antes que el sPTT. Como consecuencia de tales similitudes ellos reportaron valores de tamaño de vórtice muy similares entre ambos modelos. Aquí, debido a las variaciones mucho más significativas en la reología transitoria de los dos conjuntos de parámetros seleccionados del modelo BMP, observamos diferencias visibles en la caída de presión y diferencias más significativas en la dinámica de los vórtices.

Observando la evolución temporal de las funciones materiales (Fig. 5.4), puede concluirse

que, incluso con las diferencias en η_s^+ y en N_1^+ entre el caso monotónico y de rebasamiento, estas diferencias pueden parecer pequeñas para causar patrones distintos en la dinámica de vórtices, como los obtenidos en este trabajo. Por lo tanto, nuestras observaciones nos permiten inferir, como mencionaron White et al. [88], el efecto dominante en la evolución del vórtice es la deformación extensional, ya que es en η_e^+ donde la separación en los dos fluidos es más significativa; de hecho, en algunos casos, hay un orden de magnitud de diferencia. Además, los resultados presentados aquí parecen concordar con la observación de White y Kondo [86] quienes concluyen que es necesario un rápido aumento de la viscosidad extensional para que los polímeros fundidos presenten vórtices. En este caso, ambos fluidos presentan vórtices, pero el fluido de rebasamiento, donde la viscosidad extensional crece mucho más rápido, es el fluido que exhibe vórtices más grandes.

Esta investigación muestra diferencias significativas en los resultados de las simulaciones en estado estacionario para fluidos que presentan exactamente la misma reología estacionaria, pero con tendencias distintas en la respuesta transitoria. El fluido con el rebasamiento en las funciones dinámicas del material presenta mayores caídas de presión y grandes vórtices de esquina, mientras que, para el fluido monotónico, los vórtices de esquina son pequeños y los vórtices de borde pueden llegar a ser significativos al aumentar la elasticidad.

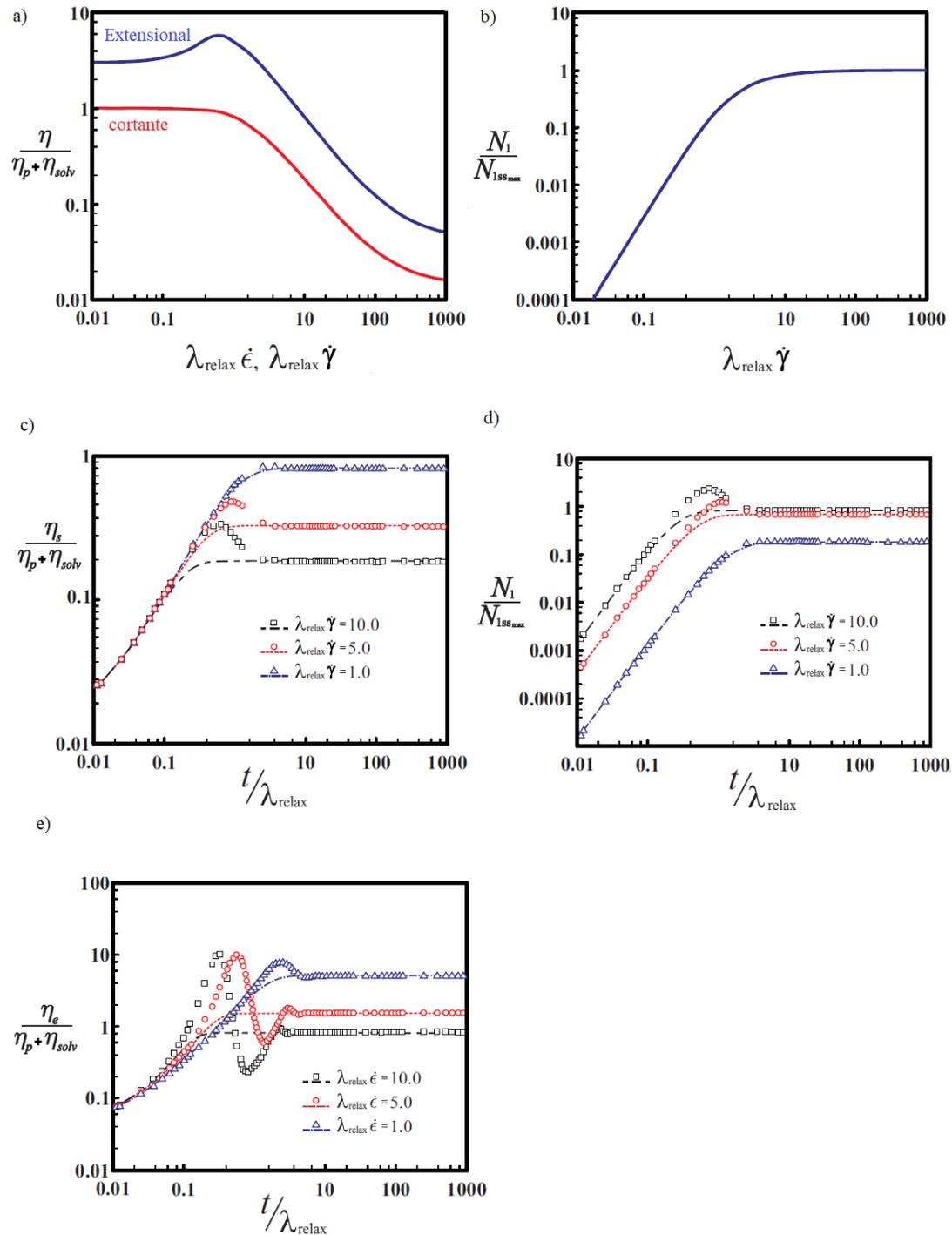


Figura 5.4: Funciones reométricas del modelo BMP: a) viscosidad de cortante y extensional estacionaria, b) primera diferencia de esfuerzo normal estacionaria, c) viscosidad de cortante transitoria, d) primera diferencia de esfuerzo normal transitoria, y e) viscosidad transitoria. Los símbolos corresponden a el fluido con rebasamiento y las líneas al fluido monotónico.

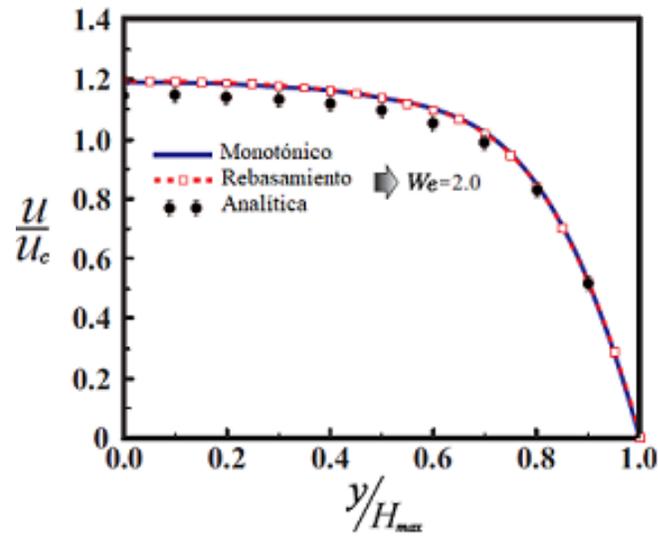


Figura 5.5: Perfil de velocidad para flujo tipo Poiseuille; comparación entre la solución analítica y el modelo implementado considerando un valor de $We = 2.0$ para el caso monotónico y rebasamiento.

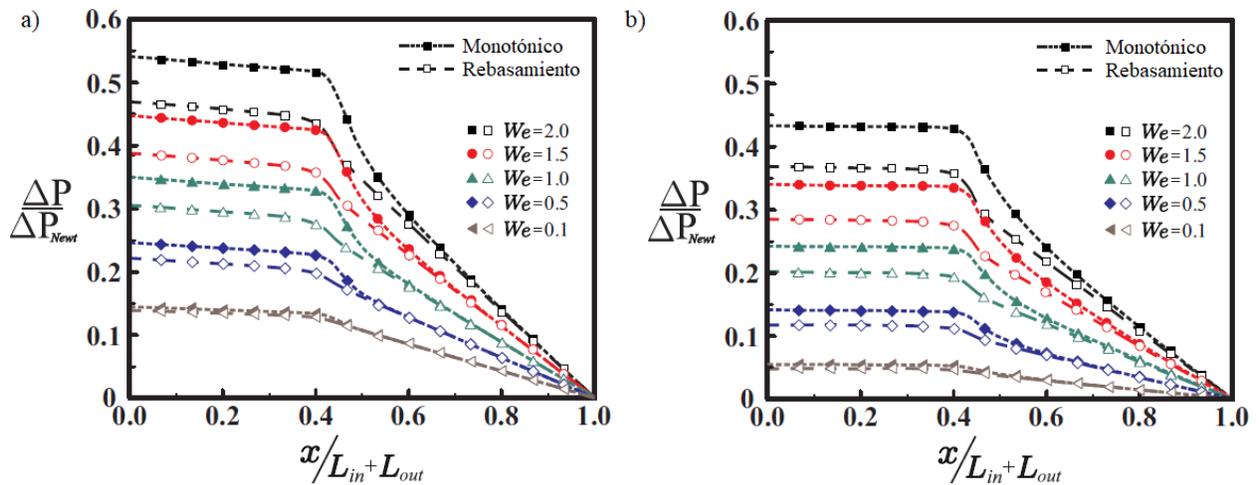


Figura 5.6: Perfil caída de presión: a) contracción 4:1 y b) contracción 8:1.

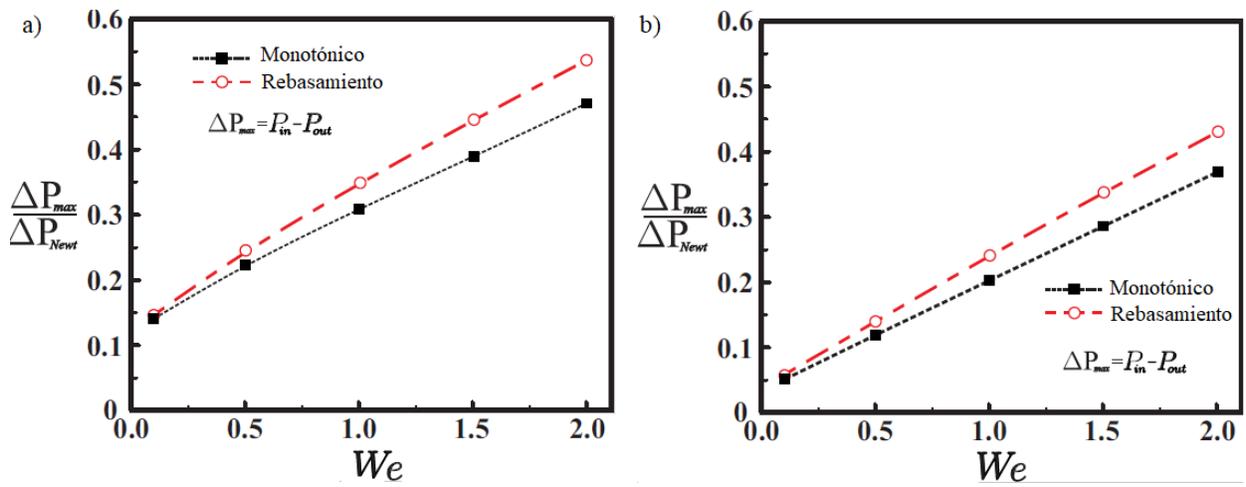


Figura 5.7: Caída de presión normalizada $\Delta P_{max}/\Delta P_{newt}$ a diferentes valores de We : a) contracción 4:1, y b) contracción 8:1.

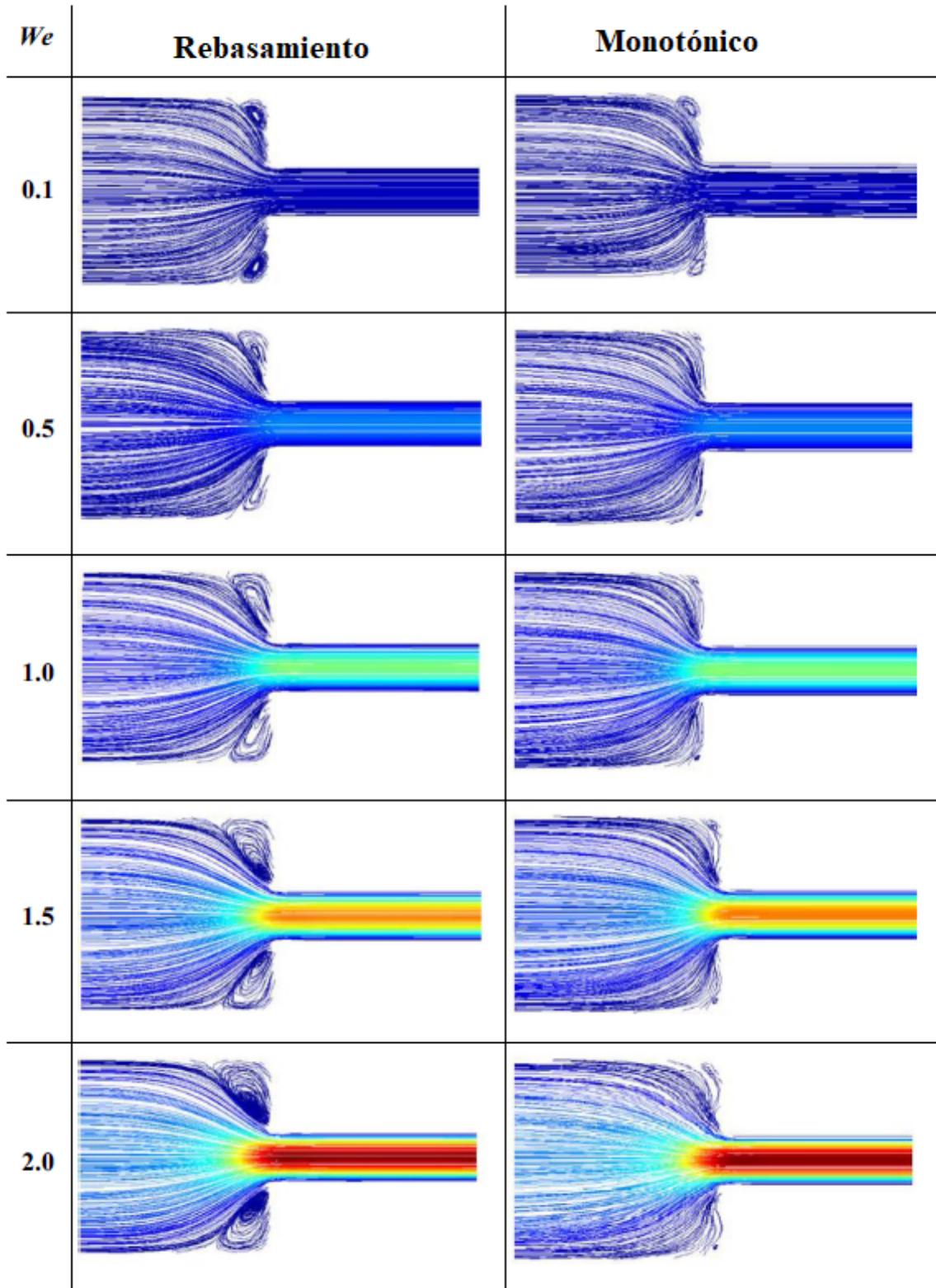


Figura 5.8: Comportamiento de vórtices con respecto al We , para la contracción 4:1.

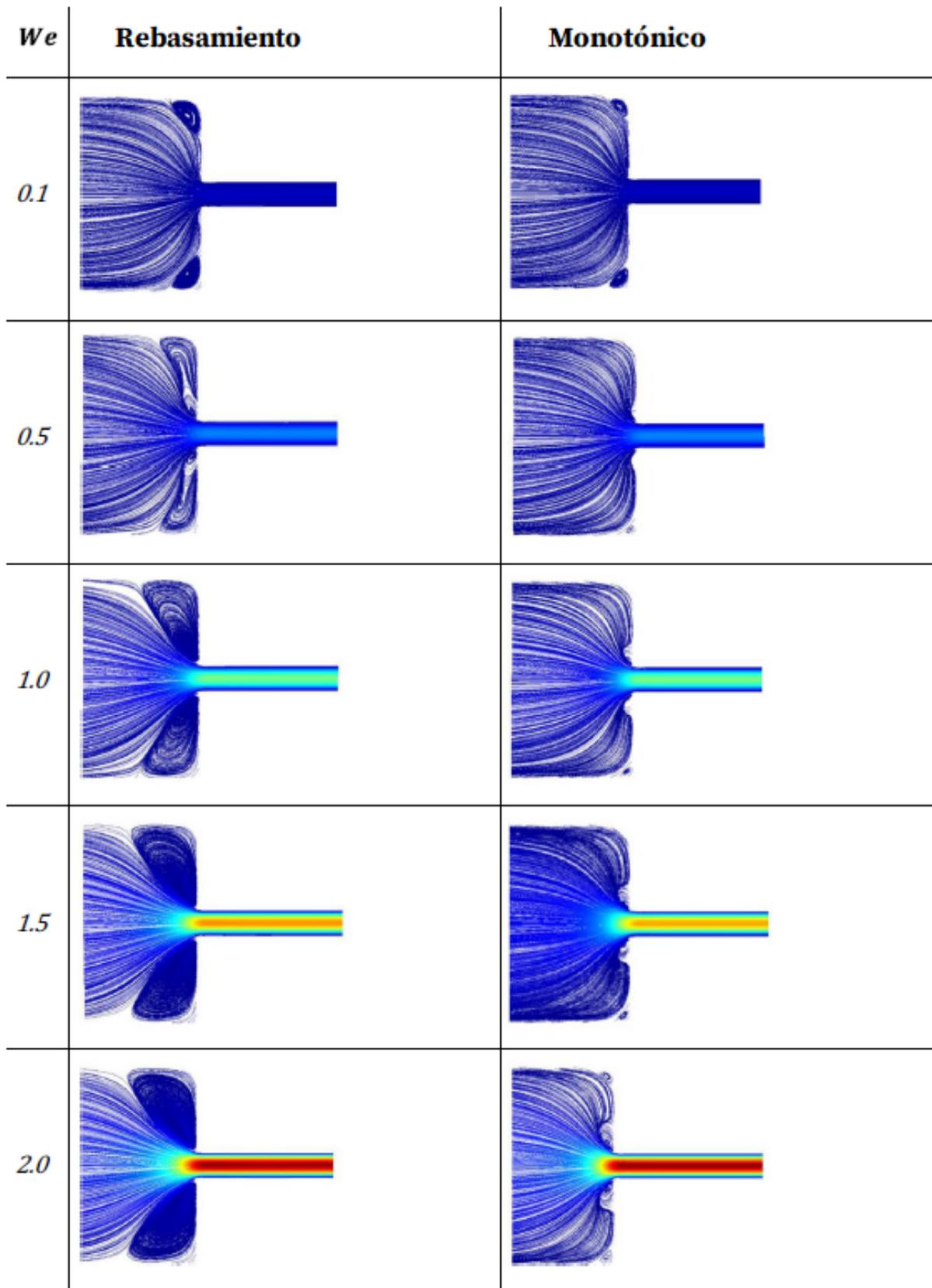


Figura 5.9: Comportamiento de vórtices con respecto al We , para la contracción 8:1.

Capítulo 6

Caracterización reológica de hidrogel para aplicación de extrusión de material mediante manufactura aditiva

En los últimos años, la extrusión de hidrogeles mediante manufactura aditiva ha atraído una atención considerable debido a su capacidad para construir estructuras complejas, como andamios 3D para el campo de ingeniería de tejidos, y a su variedad de uso médicos. Una de las tecnologías de la manufactura aditiva es la extrusión de material, que consta de dos etapas: (1) extrusión del material a través de una boquilla y (2) deposición del material. Para extruir materiales, es necesario ajustar parámetros de entrada como la temperatura, la velocidad de deposición y la presión para garantizar un flujo continuo de los materiales, y en la segunda etapa las capas depositadas deben ser lo suficientemente resistentes para mantener su forma y soportar el peso de las capas siguientes para producir un andamio. Por lo tanto, es aconsejable realizar una caracterización reológica del hidrogel antes de cualquier proceso de fabricación. Se determinaron los parámetros de entrada del equipo de extrusión.

Se realizó una caracterización reológica exhaustiva para estudiar la relación de la reología y el proceso de extrusión. Los parámetros obtenidos son viscosidad, módulo elástico, viscoso y complejo, temperatura de gelificación, recuperación ante una variación de temperatura, y sus magnitudes están asociadas a la extrusión y deposición de las soluciones de hidrogel estudiadas.

6.1. Introducción

El uso de manufactura aditiva como tecnología asociada a la construcción de objetos ha evolucionado utilizando diferentes materiales de procesamiento. Un material que ha atraído mucha atención debido a que tiene aplicación en diversos campos industriales son los hidrogeles [110,111]. Los hidrogeles son redes poliméricas hidrofílicas tridimensionales capaces de absorber grandes cantidades de agua o líquidos biológicos. Además de presentar biocompatibilidad, biodegradabilidad y la capacidad de promover la adhesión y proliferación celular. Los hidrogeles pueden servir como material de relleno, construcción o sacrificio [112]. Algunos de los hidrogeles más conocidos son los de origen natural, como el colágeno/gelatina, el alginato, el ácido hialurónico y el quitosano, aunque estos carecen de propiedades mecánicas adecuadas para construir andamios. Por esta razón, se prefiere combinarlos con otros materiales para mejorar sus propiedades mecánicas [113].

Recientemente el Pluronic[®] F127 (Poloxamer 407) ha sido objeto de estudio debido a su comportamiento sólido-gel (sol-gel); para este material, se obtiene un cambio de fase tipo líquido a sólido al aumentar la temperatura, un comportamiento opuesto al que se obtiene de la mayoría de los materiales. El copolímero Pluronic F-127 es un tensoactivo no iónico, es un hidrogel de red tridimensional con una configuración de unidades hidrofílicas de óxido de polietileno (PEO) unidades a diferentes tipos de bloques hidrofóbicas como el óxido de polipropileno (PPO) y, es capaz de formar micelas en soluciones acuosas. La dependencia de la temperatura de las solubilidad de estas soluciones se basa en el contenido de PPO. Por lo tanto este tipo de hidrogeles tienen diversas aplicaciones biomédicas y farmacéuticas,

como sensores bioactivos, ensayos enzimáticos, en ingeniería de tejidos y como vehículos de fármacos [112, 114–117].

Con respecto al mecanismo de transición sol-gel: por debajo de la temperatura micelar crítica (CMT), los bloques de PEO y PPO están solvatados. Cuando la temperatura del sistema aumenta, las unidades que componen el copolímero tribloque comienzan a agregarse, deshidratando las unidades de PPO debido a un comportamiento hidrofóbico, lo que conduce a la formación de micelas con los bloques de PEO expuestos al exterior del disolvente [118]. Con un aumento continuo de la temperatura, las micelas se asocian entre sí por encima de la temperatura crítica de gelificación (CGT) formando una fase líquida cristalina. La Fig. 6.1 muestra una representación esquemática de los cambios que producen la transición sol-gel para este sistema micelar.

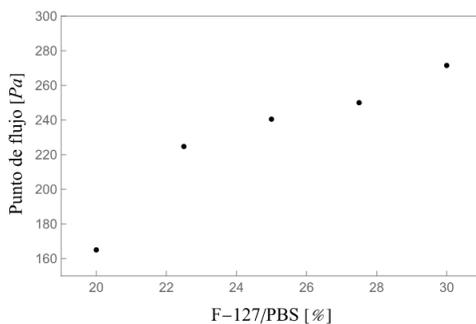


Figura 6.1: Representación esquemática de los cambios producidos en la transición sol-gel del F127/PBS.

Los hidrogeles se pueden procesar con manufactura aditiva, mediante extrusión de material, el cual permite la construcción de objetos tridimensionales y es posible trabajar con tejidos biológicos, células o moléculas bioactivas y biomateriales; el proceso de extrusión como parámetros de entrada, la presión, temperatura y velocidad de deposición adecuados para que el material pueda extruir.

La procesabilidad está definida como la capacidad de un material para ser extruido a través de una boquilla y, a continuación, mantener una geometría de estructura 3D específica.

Otra forma de definir la procesabilidad es en términos de la extrudabilidad, fidelidad del filamento e integridad estructural [114], sin embargo se puede observar que estas definiciones expresan la misma idea. La diferencia radica en los parámetros y propiedades que se considera que afectan la imprimibilidad y estos dependen del punto de vista de los diferentes grupos de investigación. Por ejemplo, Gillispie et al. [119] consideraron variables y parámetros como la presión, la temperatura, la forma y altura de la boquilla, el diseño de la trayectoria y otras condiciones. Murphy y Altala [28] dieron más importancia al tipo de gelificación y a las respuestas reológicas, en particular, la viscosidad.

Mackay señala que se debe determinar el comportamiento reológico del material, lo que representa una oportunidad para mejorar la fidelidad de la forma y la integridad estructural de los andamios [6]. Esto concuerda con la afirmación de Gillispie et al. de que las propiedades reológicas que influyen en la imprimibilidad de los materiales son poco conocidas [119]. En esta trabajo, se llevó a cabo la caracterización reológica de soluciones de hidrogel Pluronic F-127. El objetivo de dicha caracterización es determinar cómo se ve afectado el proceso de fabricación aditiva por la reología del material. El análisis permitió realizar una estimación de los parámetros de entrada adecuados para obtener una construcción de andamios. En concreto, la temperatura y el punto de flujo los cuales determinan un excelente estimado inicial para seleccionar la presión de funcionamiento de la 3D-Bioplotter para la extrusión. Y para la etapa de deposición, las propiedades reológicas relevantes son el punto de flujo (flow point), el módulo complejo y la recuperación de temperatura del material.

6.2. Materiales

Pluronic[®] F-127 y solución salina amortiguadora de fosfatos (PBS) adquiridos de Sigma-Aldrich[®] Estados Unidos.

Las muestras fueron preparadas disolviendo diferentes cantidades de Pluronic[®] F-127 en una solución amortiguadora de fosfatos (PBS, pH=4), agitando durante 10 min, después se deja reposar por 12 horas en refrigeración a 5 °C.

6.2.1. Reometría

El comportamiento reológico del material se estudió utilizando un reómetro de esfuerzo controlado Anton Paar MCR101 equipado con una configuración de placas paralelas de 25 mm con una gap de 1 mm. Para mantener constante la temperatura de la muestra y evitar la evaporación se utilizó una trampa de disolvente. Se determinó la temperatura de gelificación, el punto de flujo, la viscosidad, el ángulo de fase, el módulo de almacenamiento y el módulo viscoso, junto con el módulo complejo. Cada medición se realizó por triplicado.

6.2.2. Proceso de extrusión

Se utilizó un 3D-BioplotterTM EnvisionTEC GmbH para construir los andamios de hidrogel. Las concentraciones de hidrogel fueron del 20, 22.5, 25, 27.5 y 30% de F-127/PBS. Con el fin de manipular con facilidad el material, las muestras se mantuvieron a 5 °C durante 2 horas garantizando así que el material estaba en fase líquida y después se vertieron 10 mL de cada fluido en una jeringa Nordson[®] (30 mL) y se dispensó a través de una boquilla de acero inoxidable de precisión Optimun[®] de 0.33 mm de diámetro de salida. Para que el fluido alcanzara la temperatura de extrusión, se mantuvo dentro de la cámara de extrusión durante una hora. Se fabricaron andamios de dos modelos CAD con dimensiones (longitud x ancho x alto) de 20×20×4 mm y 10×10×10 mm

6.2.3. Estudio de morfología de andamios

La morfología superficial de todos los andamios fabricados se analizó mediante tomografía microcomputarizada (micro-CT) y microscopía electrónica de barrido (SEM). Para el SEM, las muestras se recubrieron con una fina capa de oro mediante dispersión por pulverización catódica y se observaron con un microscopio Jeol JCM 600 utilizando un haz de electrones de 10 kV con una corriente baja. En el caso del micro-CT fue utilizado un equipo Nikon XT H225ST (Nikon Metrology, Inc., Brinhton, MI, EE.UU.), con los siguientes parámetros:

Dector Perkin Elemer de 16 bits, voltaje de 200 kV, corriente de 140 μ A, tiempo de exposición de 708 ms, tamaño de píxel de 4000×4000 y una resolución de vóxel de 10 μ m. Para este equipo los andamios se analizaron sin ningún tipo de preparación.

6.3. Resultados

En esta sección se presentan los resultados de reometría en los que se obtuvieron temperatura de gelificación, viscosidad, punto de flujo y módulos del Pluronic. En el proceso de extrusión se presentan los resultados de presión, velocidad y temperatura de extrusión utilizadas. Mientras que en el proceso de deposición se muestran las imágenes obtenidas de los andamios mediante Micro-CT y SEM.

6.3.1. Resultados de las mediciones reométricas

Las soluciones de Pluronic F-127/PBS se caracterizaron mediante las siguientes pruebas: barrido de temperatura, barrido de amplitud, recuperación ante una variación de temperatura y curvas de flujo.

Primero se determinó la región viscoelástica lineal de cada solución, esto mediante pruebas de barrido de amplitud. Las temperaturas de gelificación se obtuvieron por la variación súbita de los módulos G' y G'' a partir de mediciones de barrido de temperatura; este procedimiento es similar al reportado por Chatterjee et al. [120]. Este método para la temperatura de gelificación dio resultados muy similares cuando se compara con el cambio en la viscosidad frente a la temperatura, a bajas velocidades de corte. Los resultados de temperatura de gelificación se muestran en la Fig. 6.2 se observa que a medida que aumenta la concentración de copolímero, se presenta una disminución en las temperaturas de transición. Es importante mencionar que a 37 °C (temperatura corporal) todas estas soluciones de hidrogel están muy por encima de su temperatura de gelificación correspondiente.

Además, la dependencia de la viscosidad con la rapidez de corte a la temperatura de

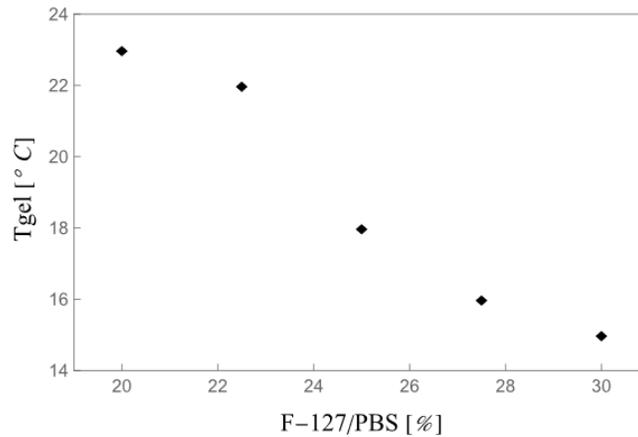


Figura 6.2: Temperatura de gelificación a diferentes concentraciones de F127/PBS.

gelificación se presenta en la Fig. 6.3a, y a 37 °C en la Fig. 6.3b. Como se puede observar, todos los fluidos muestran un comportamiento de adelgazamiento al corte, sin evidencia de una primera o segunda región newtoniana, al menos a las velocidades de corte impuestas. También hay que destacar que a 37 °C, cuanto mayor es la concentración, mayor es la viscosidad de cada fluido.

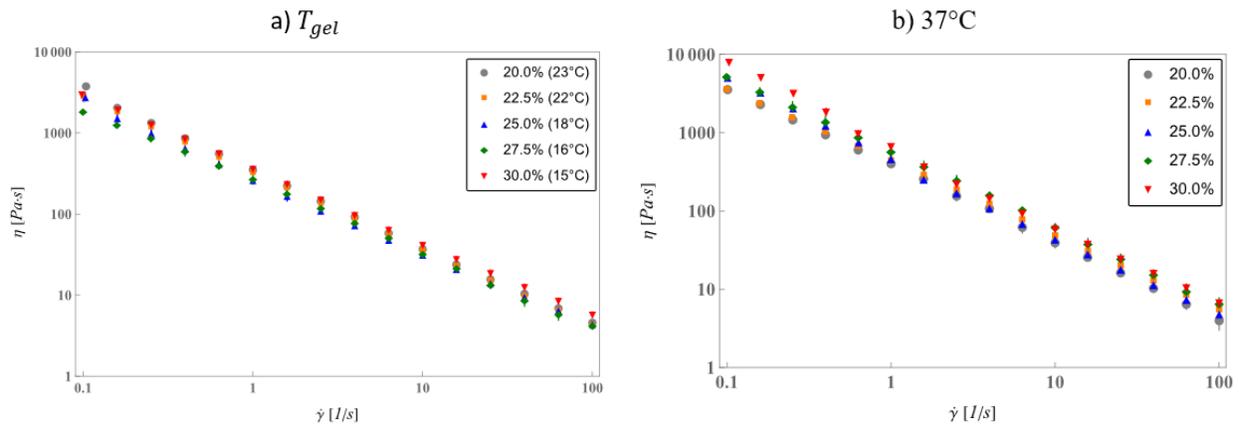


Figura 6.3: Viscosidad vs. rapidez de corte: a) viscosidad a temperatura de gelificación y b) viscosidad a 37 °C.

El punto de flujo permite estimar la presión que debe aplicarse para que el material

empiece a fluir. Se determinó mediante pruebas oscilatorias (barrido de amplitud) a la temperatura de extrusión de cada fluido estudiado aquí. Durante el barrido de amplitud, cuando los módulos dejan de presentar un comportamiento constante, se sabe que el material ya está fuera de la zona lineal, y si se sigue deformando a la muestra, se llega al punto de flujo, que corresponde al esfuerzo en la que ambos módulos, elástico y viscoso, se cruzan ($G' = G''$), es decir, el ángulo de fase alcanza un valor de 45° . Como puede observarse en la Fig. 6.4, el punto de flujo aumenta a medida que aumenta la concentración.

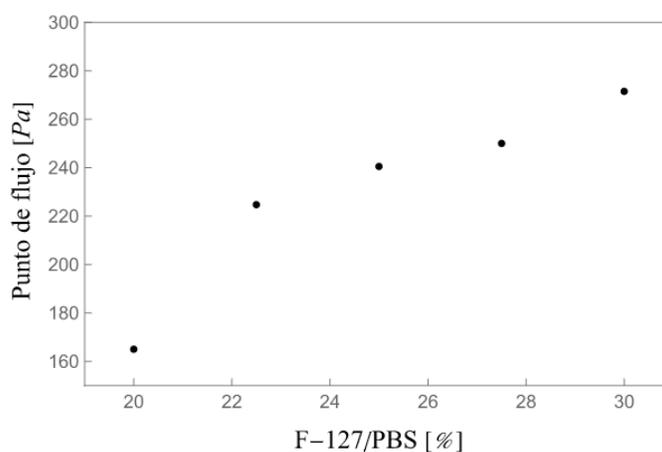


Figura 6.4: Punto de flujo *vs.* concentración de hidrogel a la temperatura de extrusión.

Las pruebas de recuperación ante una variación de temperatura consiste en someter al fluido a una deformación oscilatoria ($\gamma = 0.1\%$) e imponer un escalón de temperatura de T_{gel} a 37°C durante 300 s en cada una. Estos resultados proporcionan información sobre el tiempo necesario entre capas depositadas para permitir la recuperación de la resistencia del gel. La Fig. 6.5a muestra que después de los 60 s, todas las muestras de ensayo recuperan el valor del 80% del módulo elástico, mientras que la variación en la parte viscosa no es tan significativa como en el caso G' . De hecho, G'' parece variar muy poco, en contraste con G' , donde el aumento de temperatura casi duplica el valor. Además, los resultados de la misma prueba pero en términos del módulo complejo se muestran en la Fig. 6.5b. De estas figuras se puede observar que el módulo elástico es mucho mayor que el viscoso correspondiente,

es decir, $G' \gg G''$ o consecuencia el módulos complejo es de magnitud similar al módulo elástico ($G^* \approx G'$).

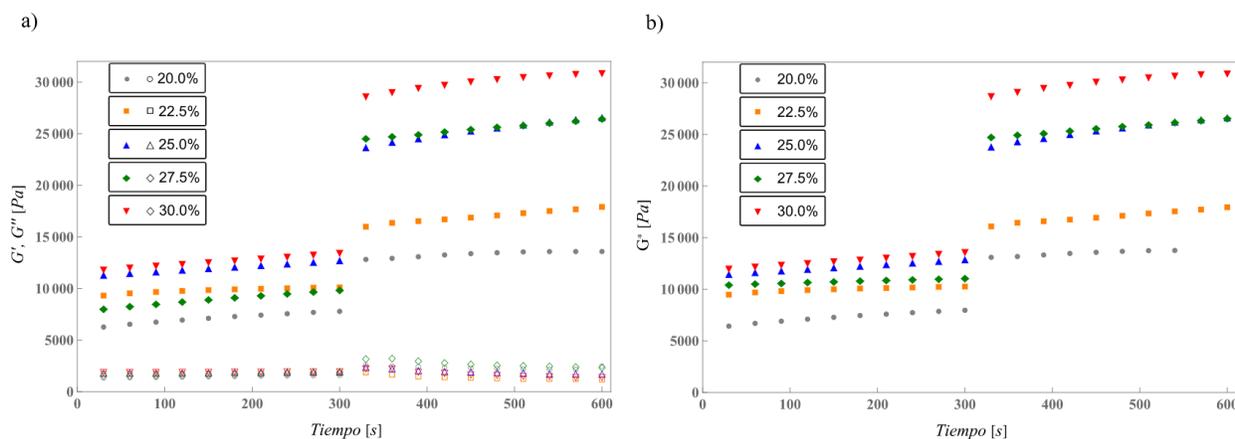


Figura 6.5: Módulos *vs.* tiempo, el primer intervalo de 0.300 s está a temperatura de gelificación, mientras que el segundo intervalo de 300-600 s esta a temperatura de 37 C. a) G' (símbolos llenos) y G'' (símbolos vacíos) y b) respuesta en términos de G^* .

6.3.2. Resultados del proceso de extrusión

Las pruebas reológicas realizadas en este trabajo fueron útiles para seleccionar las condiciones de extrusión del material utilizado. En particular, la selección del diámetro de la boquilla se realizó de forma que el fluido con mayor viscosidad, y que al mismo tiempo presenta efectos elásticos de mayor magnitud, pudiera ser extruido; entonces, si dicho fluido puede ser extruido adecuadamente, con condiciones de presión dentro del intervalo del equipo, se asume que los otros fluidos también podrían ser extruidos. Esta suposición fue válida y todos los experimentos se realizaron con la misma boquilla.

Para las soluciones de hidrogel de este estudio, la temperatura de gelificación (ver Fig. 6.2) se utilizó como la temperatura de extrusión (T_{ext}), excepto para el fluido de menor concentración (20%), que requirió un valor mucho más alto de temperatura (37 °C) para mejorar la resistencia del gel y tener andamios mejor definidos. Además, se han considerado

Cuadro 6.1: Parámetros de extrusión del fluido.

F-127/PBS [%]	Presión [<i>Bar</i>]	Velocidad [<i>mm/s</i>]	T_{ext} [°C]
20.00	0.7	5.50	37
22.50	1.5	6.25	22
25.00	1.6	8.50	18
27.50	2.0	12.0	16
30.00	2.5	12.5	15

pruebas de punto de flujo (ver Fig. 6.4) para determinar si el intervalo de presión del equipo permitiría la extrusión del material a (T_{gel}). En el cuadro 6.1 se presentan las condiciones del proceso de extrusión utilizadas en el 3D-Bioplottter, incluyendo la presión aplicada y la velocidad de deposición.

Se determinó la viscosidad a la temperatura de extrusión (ver Fig. 6.2a), el comportamiento del material puede representarse por el modelo de ley de potencia $\eta = K\dot{\gamma}^{(n-1)}$ donde k y n son parámetros de ajuste, y $\dot{\gamma}$ es la rapidez de corte; en este caso el material tiene valores de K entre 260 - 360 $Pa \cdot s$ y n entre 0.05 - 0.01. De acuerdo con Jungst et al. [121], desde un punto de vista reológico, se desea que el material presente una respuesta similar al gel antes y después de la extrusión. La respuesta del material tipo gel antes de que comience la extrusión es necesaria para evitar cualquier goteo del material, y la presión aplicada en el proceso debe romper esta fase de gel para que la muestra comience a fluir. Una vez formado el filamento, la fase gel debe recuperarse rápidamente para obtener fidelidad de la forma, evitando inestabilidades y tener el soporte suficiente para construir las capas subsecuentes. En la Fig. 6.6 se presentan los andamios obtenidos a las concentraciones de 20, 25 y 30% F-127/PBS, los primeros cuatro andamios corresponden a una geometría circular (utilizada para obtener las imágenes por micro-CT), mientras que el último andamio corresponde a una geometría cuadrada sin borde (utilizadas para la obtención de imágenes por SEM).

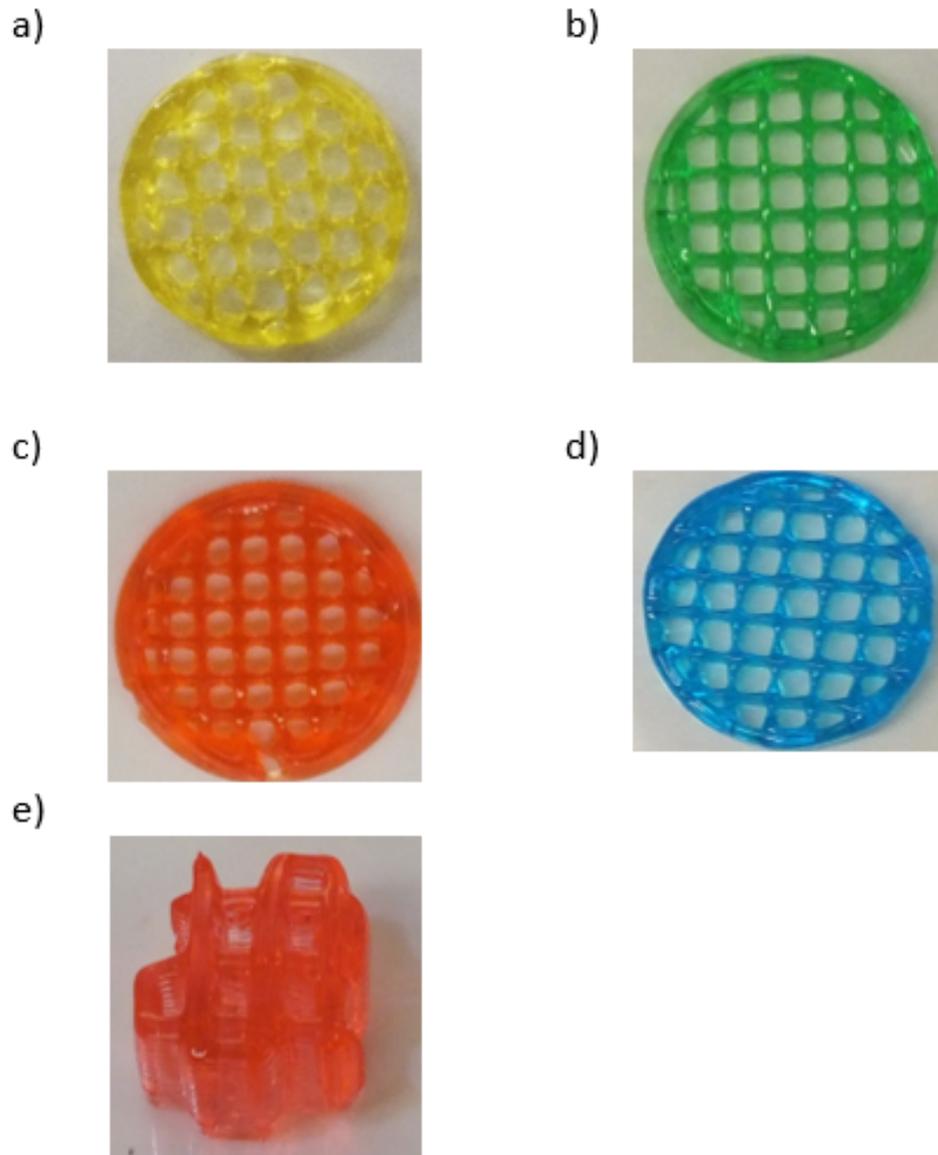


Figura 6.6: Andamios de F-127/PBS: a) 20%, b) 22.5%, c) 25 %, d) 27.5% y e) 30%.

En este proceso, la estabilidad de las capas formados para soportar las capas subsecuentes está relacionada con la rapidez con la que la muestra puede recuperar la fase de gel, es decir, valores más altos del módulo complejo. Para determinar, el tiempo en que se produce esta gelificación, se utilizaron los resultados de la Fig. 6.5, que muestran que el tiempo de

recuperación es independiente de la concentración de fluido y es de 60 s. En el presente estudio, la temperatura de la base de deposición fue de 37°C , muy por encima del punto de gelificación de cada fluido, lo que permite una mayor fidelidad de forma. Esto concuerda con las investigaciones de Ruitter et al. [122] para el estudio de gotas extruidas. Estos autores encuentran una fidelidad de forma mucho mejor si la temperatura está por encima de T_{gel} .

La figura 6.7 muestra la relación entre el módulo complejo - punto de flujo y presión - flujo másico. Por medio de inspección se observa que estas presiones son adecuadas para la extrusión de cada material, además, si hay una variación alta en la presión se producen inestabilidades en el filamento. Aunque todas las muestras pudieron extruirse, para la muestra de menor concentración, el andamio obtenido fue de muy baja calidad, por lo cual no fue posible identificar las capas extruidas. Esto corresponde a un punto de flujo inferior a 170 Pa y a un módulo complejo inferior a 15000 Pa (símbolo abierto en la Fig.6.7a). Por encima de estos valores, tanto el proceso de extrusión como el de deposición se realizaron con éxito.

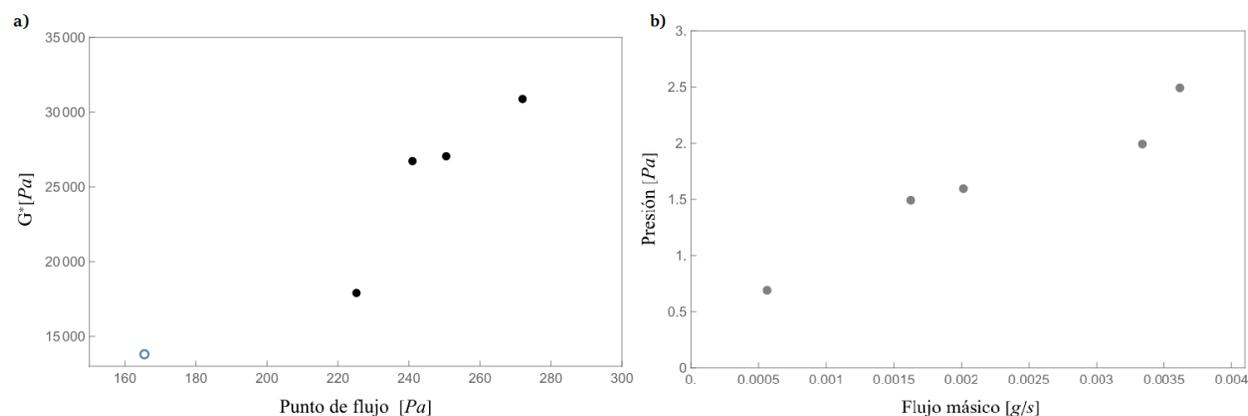


Figura 6.7: Ventana de procesabilidad del material en términos del módulo complejo y el punto de flujo, el flujo y la presión de extrusión.

La calidad de la estructura tridimensional y la morfología de la superficie se evaluó a partir de las micrografías obtenidas por micro-CT y SEM.

La concentración menor de F-127, presenta una menor interacción entre las moléculas que componen el hidrogel y un valor bajo del módulo complejo, este valor se reflejó en

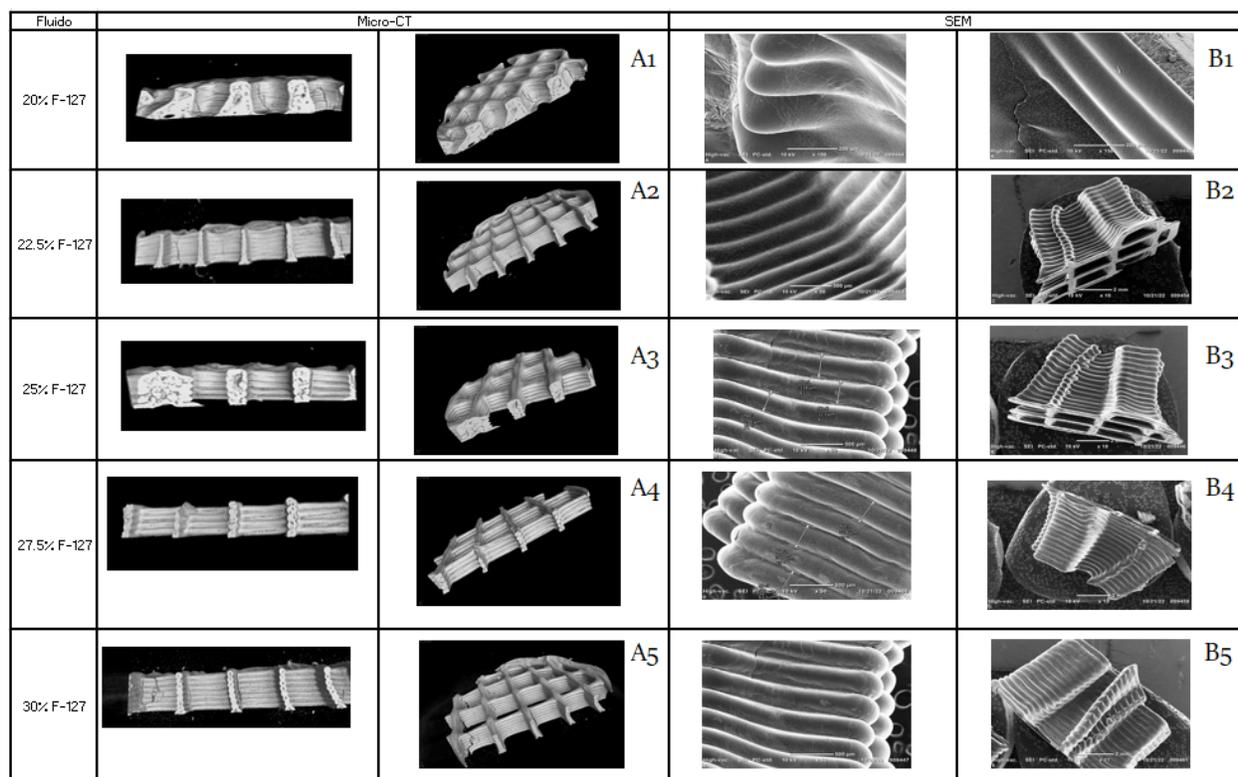


Figura 6.8: Micrografías de las estructuras reticulares que componen los andamios. A la izquierda se muestran las imágenes por micro-CT y a la derecha, las obtenidas por SEM.

a fragilidad del material, lo que dificultó su manipulación; también en la falta de calidad del andamio construido, donde la capas no fueron capaces de mantener su estructura y se fusionaron. Esta falta de integridad se observa en las imágenes de micro-CT y SEM, figuras 6.8 A1 y B1, respectivamente. Considerando ahora el fluido 22.5% figuras 6.8 A2 y B2 muestran que el colapso de las capas depositadas está asociado al módulo complejo de las soluciones de hidrogeles utilizados para la construcción del andamio. Se puede observar que la cara superior de la estructura reticulada que la capa tienen una forma aplanada y ondulada. Mientras tanto, los otros tres andamios (25, 27.5 y 30 % F-127/PBS) presentan una estructura reticular bien definida, con capas uniformes a lo largo de toda la estructura y es posible apreciar la separación definida entre capas. El análisis de las imágenes obtenidas

por micro-CT y SEM, permite hacer las mismas observaciones sobre la morfología de los andamios, sin embargo, con las imágenes SEM, obtenemos información adicional sobre la morfología de la superficie, como la rugosidad de la superficie (que sugiere que podría ser ventajosa en contacto con el medio celular para promover la adhesión celular) y la redondez de los filamentos presentes en los andamios que es una consecuencia de la geometría de la aguja.

6.4. Conclusiones

En este estudio se realizó la caracterización reológica de un hidrogel termoreversible, a partir del cual es posible conocer el comportamiento del material uniforme

El determinar la transición sol-gel a través de la variación de la viscosidad respecto a la temperatura, permitió establecer la temperatura de gelificación y ayudó a tener una pauta para fijar la temperatura de extrusión del material y la temperatura de la cama de deposición, de forma que el material se encuentre cerca del punto de gel durante la extrusión, mientras que en la zona de deposición este en fase gel.

Los resultados de viscosidad, muestran una tendencia adelgazante al corte para todas las muestras estudiadas. La magnitud de viscosidad de las muestras a temperatura de extrusión es de 2,000 - 5,000 $Pa \cdot s$, pero se hace la observación de que esta propiedad (viscosidad) no fue determinante en el proceso de extrusión del presente trabajo, debido a que todas las muestras se pueden extruir de manera adecuada, sin embargo, no todas fueron capaces de formar andamios estables.

El hidrogel a las concentraciones estudiadas, presenta un punto de flujo de 150 - 270 Pa . Lo cual significa que los fluidos presentan el fenómeno de esfuerzo de cedencia cuando se encuentra en las jeringas de extrusión; esto evita que el material comience a gotear o incluso a fluir a menos que se le aplique una presión que pueda vencer el esfuerzo de fluencia, además dicho punto de fluencia, permite estimar la presión del hidrogel extruido en la dirección de flujo en el proceso de extrusión.

Con respecto a los módulos viscoso y elástico a la temperatura de extrusión, las muestras presentaron valores del módulo viscoso entre 1,000 y 2,000 Pa , sin embargo, los valores del módulo elástico es entre 6,000 y 12,000 Pa . Es posible relacionar los módulos viscoso y elástico mediante el módulo complejo, el cual varía de 10,500 a 30,000 Pa .

Sobre la elección de la boquilla de extrusión, el conocer la viscosidad del material permite tener un criterio para la elección del tamaño de boquilla de extrusión, es decir, si el material tiene una viscosidad dentro del intervalo de 0 - 100 $Pa \cdot s$, la boquilla de 0.1 mm de diámetro será adecuada para su extrusión, mientras que cuando se está en un intervalo de viscosidad mayor (dependiendo del esfuerzo de fluencia del material) será necesario una boquilla de mayor diámetro. Otro de los puntos a considerar para la elección de la forma de la boquilla (metálica o cónica) es el valor del módulo elástico: si el fluido de trabajo tiene elasticidad considerable es recomendable utilizar una boquilla cónica, debido a que esta permitirá que el cambio de diámetro sea gradual y el fluido pueda ser extruido de manera continua sin sufrir un ensanchamiento/acumulación en la salida de la boquilla.

La procesabilidad del hidrogel depende de la magnitud del módulo complejo; a medida que aumenta el valor del módulo complejo, se obtiene una mejor resolución de los andamios. Además, se observó que al cambiar la temperatura del fluido, G^* se estabiliza casi de inmediato en las soluciones estudiadas, esto es importante debido a que permite hacer la deposición de las capas del material de manera continua. ya que cuando se deposite la siguiente capa el fluido ya habrá recuperado el valor de $G^* > 15,000 Pa$, dicho valor es necesario para construir andamios estables. La excepción es el fluido al 20 % para el cual el módulo complejo nunca alcanza este valor umbral, y los andamios no presentaron una integridad estructural adecuada.

Capítulo 7

Conclusiones

En el presente trabajo se estudió el comportamiento reológico de materiales en procesos de extrusión para manufactura aditiva, de manera analítica, numérica y experimental.

Se realizó el análisis de flujo a través de una contracción hiperbólica planar del cual se obtuvo una aproximación analítica de un fluido Phan-Thien/Tanner (sPTT); fueron analizados dos fluidos, el primero con endurecimiento moderado por deformación extensional, el cual se estudia en una contracción 4:1, mientras que el segundo fluido presenta endurecimiento fuerte ante una deformación extensional y se estudia empleando una contracción 8:1. Los resultados obtenidos de perfiles de velocidad y caída de presión fueron comparados con los resultados obtenidos de ANSYS Polyflow[®]; Para el caso newtoniano, no se aprecia diferencia entre los perfiles de velocidad obtenidos con la solución analítica y con los obtenidos con la simulación. A niveles bajos de elasticidad, los resultados analíticos siguen siendo muy parecidos a los reportados por el simulador. Sin embargo, conforme se incrementa el We , las desviaciones entre simulación y aproximación analítica empiezan a ser visibles. Estas diferencias son atribuidas principalmente a que el simulador solo tiene codificada la versión exponencial del modelo viscoleástico de Phan-Thien/Tanner mientras que la solución analítica se obtiene para la versión lineal de dicho modelo. En el caso de la caída de presión, para $We = 0$ (caso newtoniano) la caída de presión es dominante, y conforme se incrementa

el nivel de elasticidad se obtiene un mayor adelgazamiento por corte y, en consecuencia se presenta una disminución de la caída de presión.

Se obtuvieron aproximaciones semi analíticas para el flujo en una contracción axisimétrica de un fluido Phan-Thien/Tanner (lineal y exponencial), además contemplan la condición de deslizamiento de Navier, lo que permite representar flujos con cierto nivel de deslizamiento en la pared de la geometría. Los resultados de perfil de velocidad muestran una buena correlación entre la solución analítica y la solución CFD. La solución semi analítica predice bien el efecto de aplanamiento en el perfil de velocidades debido al incremento de elasticidad. Mientras en el caso de caída de presión, se obtiene una disminución de ésta a medida que se incrementa el valor del We . Para el cálculo de rapidez de deformación se obtiene una rapidez de extensión casi constante en el centro de la contracción. Cuando se considera la condición de deslizamiento de Navier, los resultados muestran un aplanamiento en el perfil de velocidad, y en el caso de caída de presión genera una reducción adicional a la presión.

Se estudió el efecto de las propiedades reológicas transitorias utilizando el modelo de Bautista-Manero-Puig. Se implementó la versión mejorada del modelo utilizando RheoTool, el cual es un software de código abierto basado en OpenFOAM[®]. Fueron estudiados dos conjunto de parámetros, el primero presenta al menos un rebasamiento en las viscosidades de corte y extensional, mientras que el segundo produce un aumento monotónico desde el reposo hasta los valores estacionarios. Se obtuvo que conforme aumenta el valor de We la caída de presión es diferente para los casos monotónico y rebasamiento. En todos lo casos estudiados el fluido con rebasamiento presenta valores de caída de presión mayores que el fluido monotónico. Las diferencias en el estado estacionario de los fluidos estudiados son más notables cuando se comparan patrones de vórtices, en el caso del fluido con rebasamiento presenta vórtices mucho mayores comparados con el monotónico. Para el caso del fluido con rebasamiento, no se generan vórtices de borde y el vórtice de esquina aumenta a medida de que aumenta el Weissenberg. Mientras que en el fluido monotónico los vórtices de esquina tienden a desaparecer a medida que incrementa el valore de We . En este estudio se muestra

una diferencia significativa en los resultados de las simulaciones en estado estacionario para fluidos que presentan la misma reología estacionaria, pero con distinta respuesta transitoria.

De manera experimental se obtuvo que para extruir materiales es deseable que estos tengan un comportamiento de viscosidad adelgazante al corte, lo que permite al fluido ser extruido. Además, el conocer el comportamiento de la viscosidad permite tener un criterio para la elección del tamaño de boquilla a utilizar, mientras que la forma de la boquilla (cónica o abrupta) está relacionada con el tipo de material que se trabaja y el valor de la elasticidad a las condiciones de extrusión. Mientras que el conocer el valor de la temperatura de gelificación y el esfuerzo de cedencia del material permiten determinar si el intervalo de presión de operación del equipo es suficiente para vencer el esfuerzo de cedencia y que el fluido comience a depositarse. Para el caso de estudio el hidrogel(F127/PBS), presenta un punto de flujo de $150 - 270 Pa$ lo cual indica que el material puede ser manipulado en la jeringa sin que este fluya, además indica que la presión del equipo es suficiente para vencer el esfuerzo inicial y realizar la deposición del material. En cuanto a la viscosidad, se tiene un comportamiento adelgazante al corte en todas las muestras estudiadas y los valores están en el mismo intervalo, por lo que no es un factor determinante en el proceso de extrusión. La procesabilidad de este material depende de la magnitud del módulo complejo; a medida que aumenta el valor del módulo complejo, se obtiene una mejor resolución de los andamios obtenidos, además se observó que al cambiar la temperatura del fluido el valor del módulo se estabiliza casi de inmediato, lo que permite hacer la deposición de capas de manera continua, para el material F127/PBS es necesario un valor del módulo mayor a $15,000 Pa$ para obtener andamios estables.

Lista de Publicaciones

1. K. Y. Pérez-Salas, S. Sánchez, G. Ascanio, and J. P. Aguayo,
“Analytical approximation to the flow of a sPTT fluid through a planar hyperbolic contraction”,
J. Non-Newtonian Fluid Mech. 272, 104160 (2019).
2. K. Y. Pérez-Salas, G. Ascanio, L. Ruiz-Huerta and J. P. Aguayo,
“Approximate analytical solution for the flow of a Phan-Thien-Tanner fluid through an axisymmetric hyperbolic contraction with slip boundary conditions”,
Phys Fluids 33,053110, (2021).
3. K. Y. Pérez-Salas, S. Sánchez, S. Velasco-Segura, G. Ascanio, L. Ruiz-Huerta and J. P. Aguayo,
“Rheological transient effects on steady-state contraction flows”,
Rheologica Acta 1-11, (2023).
4. SOMIXXXVI Congreso de Instrumentación, Caracterización reológica de hidrogeles para aplicaciones en manufactura aditiva por extrusión de material”. Virtual, Octubre (2022).

Bibliografía

- [1] V. H. Mouser, F. P. Melchels, J. Visser, W. J. Dhert, D. Gawlitta, and J. Malda, “Yield stress determines bioprintability of hydrogels based on gelatin-methacryloyl and gellan gum for cartilage bioprinting,” *Biofabrication*, vol. 8, no. 3, p. 035003, 2016.
- [2] N. Paxton, W. Smolan, T. Bock, F. Melchels, J. Groll, and T. Jungst, “Proposal to assess printability of bioinks for extrusion-based bioprinting and evaluation of rheological properties governing bioprintability,” *Biofabrication*, vol. 9, no. 4, p. 044107, 2017.
- [3] J. E. Smay, J. Cesarano, and J. A. Lewis, “Colloidal inks for directed assembly of 3d periodic structures,” *Langmuir*, vol. 18, no. 14, pp. 5429–5437, 2002.
- [4] J. Wei, J. Wang, S. Su, S. Wang, J. Qiu, Z. Zhang, G. Christopher, F. Ning, and W. Cong, “3d printing of an extremely tough hydrogel,” *Rsc Advances*, vol. 5, no. 99, pp. 81324–81329, 2015.
- [5] J. M. Lee and W. Y. Yeong, “A preliminary model of time-pressure dispensing system for bioprinting based on printing and material parameters: This paper reports a method to predict and control the width of hydrogel filament for bioprinting applications,” *Virtual and Physical Prototyping*, vol. 10, no. 1, pp. 3–8, 2015.
- [6] M. E. Mackay, “The importance of rheological behavior in the additive manufacturing technique material extrusion,” *Journal of Rheology*, vol. 62, no. 6, pp. 1549–1561, 2018.

- [7] H. Barnes, *A Handbook of Elementary Rheology*. Raymond F. Boyer Library Collection, University of Wales, Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2000.
- [8] F. A. Morrison, *Understanding Rheology*. Oxford University Press, 2001.
- [9] H. Barnes, J. Hutton, and K. Walters, *An Introduction to Rheology*. Elsevier Science, 1989.
- [10] B. Carreón-Calderón, V. Uribe-Vargas, and J. P. Aguayo, *Thermophysical Properties of Heavy Petroleum Fluids*. Springer, 2021.
- [11] T. G. Mezger, *The Rheology Handbook*. Vincentz Network GmbH and Co. KG, Hanover, 2014.
- [12] A. B. Howard, “Thixotropy—a review,” *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, vol. 70, pp. 1–33, 1997.
- [13] R. G. Larson and Y. Wei, “A review of thixotropy and its rheological modeling,” *Journal of Rheology*, vol. 63, no. 3, pp. 477–501, 2019.
- [14] T. T. Chen, “Introduction to thixotropy analysis using a rotational rheometer,” *TA Instruments*, no. RH106, pp. 1–3.
- [15] J. G. Oldroyd, “On the formulation of rheological equations of state,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 200, no. 1063, pp. 523–541, 1950.
- [16] N. P. Thien and R. I. Tanner, “A new constitutive equation derived from network theory,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 2, no. 4, pp. 353–365, 1977.
- [17] E. Boek, J. Padding, V. Anderson, P. J. Tardy, J. Crawshaw, and J. A. Pearson, “Constitutive equations for extensional flow of wormlike micelles: stability analysis of the bautista–manero model,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 126, no. 1, pp. 39–46, 2005.

- [18] N. Ashgriz and J. Mostaghimi, *An introduction to computational fluid dynamics*, vol. 1. Citeseer, 2002.
- [19] N. Ashgriz and J. Mostaghimi, *An introduction to computational fluid dynamics*, vol. 1. Citeseer, 2002.
- [20] J. F. Wendt, *Computational fluid dynamics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2008.
- [21] “Standard terminology for additive manufacturing general principles terminology,” *Stand. Terminol. Addit. Manuf. Gen. Princ. – Terminol*, vol. ISO/ASTM 5, pp. 2–4, 2016.
- [22] S. C. Ligon, R. Liska, J. Stampfl, M. Gurr, and R. Muulhaupt, “Polymers for 3d printing and customized additive manufacturing,” *Chemical reviews*, vol. 117, no. 15, pp. 10212–10290, 2017.
- [23] R. Landers and R. Mulhaupt, “Desktop manufacturing of complex objects, prototypes and biomedical scaffolds by means of computer-assisted design combined with computer-guided 3d plotting of polymers and reactive oligomers,” *Macromolecular Materials and Engineering*, vol. 282, no. 1, pp. 17–21, 2000.
- [24] A. Pfister, R. Landers, A. Laib, U. Hubner, R. Schmelzeisen, and R. Mulhaupt, “Bio-functional rapid prototyping for tissue-engineering applications: 3d biplotting versus 3d printing,” *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, vol. 42, no. 3, pp. 624–638, 2004.
- [25] A. L. Rutz, K. E. Hyland, A. E. Jakus, W. R. Burghardt, and R. N. Shah, “A multi-material bioink method for 3d printing tunable, cell-compatible hydrogels,” *Advanced Materials*, vol. 27, no. 9, pp. 1607–1614, 2015.

- [26] J. Jia, D. J. Richards, S. Pollard, Y. Tan, J. Rodriguez, R. P. Visconti, T. C. Trusk, M. J. Yost, H. Yao, R. R. Markwald, *et al.*, “Engineering alginate as bioink for bioprinting,” *Acta biomaterialia*, vol. 10, no. 10, pp. 4323–4331, 2014.
- [27] A. V. Do, B. Khorsand, S. M. Geary, and A. K. Salem, “3d printing of scaffolds for tissue regeneration applications,” *Advanced healthcare materials*, vol. 4, no. 12, pp. 1742–1762, 2015.
- [28] S. V. Murphy and A. Atala, “3d bioprinting of tissues and organs,” *Nature biotechnology*, vol. 32, no. 8, pp. 773–785, 2014.
- [29] I. Sheikh and Y. Dahman, “Chapter 2 - applications of nanobiomaterials in hard tissue engineering,” in *Nanobiomaterials in Hard Tissue Engineering* (A. M. Grumezescu, ed.), pp. 33–62, William Andrew Publishing, 2016.
- [30] D. G. Anderson, J. A. Burdick, and R. Langer, “Smart biomaterials,” *Science*, vol. 305, no. 5692, pp. 1923–1924, 2004.
- [31] A. Sivashanmugam, R. A. Kumar, M. V. Priya, S. V. Nair, and R. Jayakumar, “An overview of injectable polymeric hydrogels for tissue engineering,” *European Polymer Journal*, vol. 72, pp. 543–565, 2015.
- [32] D. R. Nisbet, K. E. Crompton, M. K. Horne, D. I. Finkelstein, and J. S. Forsythe, “Neural tissue engineering of the cns using hydrogels,” *Journal of Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials: An Official Journal of The Society for Biomaterials, The Japanese Society for Biomaterials, and The Australian Society for Biomaterials and the Korean Society for Biomaterials*, vol. 87, no. 1, pp. 251–263, 2008.
- [33] D. James and K. Walters, “A critical appraisal of available methods for the measurement of extensional properties of mobile systems,” *Techniques in rheological measurement*, pp. 33–53, 1993.

- [34] D. Binding and D. Jones, "On the interpretation of data from converging flow rheometers," *Rheologica acta*, vol. 28, pp. 215–222, 1989.
- [35] D. Binding and K. Walters, "On the use of flow through a contraction in estimating the extensional viscosity of mobile polymer solutions," *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 30, no. 2-3, pp. 233–250, 1988.
- [36] C. J. Petrie, "Extensional viscosity: A critical discussion," *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 137, no. 1-3, pp. 15–23, 2006.
- [37] M. S. N. Oliveira, M. A. Alves, F. T. Pinho, and G. H. McKinley, "Viscous flow through microfabricated hyperbolic contractions," *Experiments in fluids*, vol. 43, pp. 437–451, 2007.
- [38] T. J. Ober, S. J. Haward, C. J. Pipe, J. Soulages, and G. H. McKinley, "Microfluidic extensional rheometry using a hyperbolic contraction geometry," *Rheologica Acta*, vol. 52, no. 6, pp. 529–546, 2013.
- [39] F. N. Cogswell, "Converging flow of polymer melts in extrusion dies," *Polymer Engineering and Science*, vol. 12, no. 1, pp. 64–73, 1972.
- [40] D. Binding, "An approximate analysis for contraction and converging flows," *Journal of non-Newtonian fluid mechanics*, vol. 27, no. 2, pp. 173–189, 1988.
- [41] D. Jones, K. Walters, and P. R. Williams, "On the extensional viscosity of mobile polymer solutions," *Rheologica Acta*, vol. 26, pp. 20–30, 1987.
- [42] A. D. Gotsis and A. Odriozola, "The relevance of entry flow measurements for the estimation of extensional viscosity of polymer melts," *Rheologica acta*, vol. 37, pp. 430–437, 1998.

- [43] A. Lubansky, D. Boger, C. Servais, A. Burbidge, and J. Cooper-White, “An approximate solution to flow through a contraction for high trouton ratio fluids,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 144, no. 2-3, pp. 87–97, 2007.
- [44] D. F. James, “Flow in a converging channel at moderate reynolds numbers,” *AICHE journal*, vol. 37, no. 1, pp. 59–64, 1991.
- [45] K. Feigl, F. Tanner, B. Edwards, and J. Collier, “A numerical study of the measurement of elongational viscosity of polymeric fluids in a semihyperbolically converging die,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 115, no. 2-3, pp. 191–215, 2003.
- [46] S. Tabatabaei, J. E. López-Aguilar, H. R. Tamaddon-Jahromi, M. F. Webster, and R. Williams, “Modified bautista–manero (mbm) modelling for hyperbolic contraction–expansion flows,” *Rheologica Acta*, vol. 54, pp. 869–885, 2015.
- [47] M. Nystrom, H. Tamaddon Jahromi, M. Stading, and M. Webster, “Simulation of extensional flow through contractions towards a measuring system for extensional viscosity,” *Trans. Nordic Rheol. Soc*, vol. 19, 2011.
- [48] M. Nystrom, H. T. Jahromi, M. Stading, and M. Webster, “Extensional flow through hyperbolic contraction studied both numerically and experimentally,” *Annual Transactions of the Nordic Rheology Society*, vol. 21, no. 3, pp. 15–20, 2013.
- [49] M. Nystrom, H. R. Tamaddon Jahromi, M. Stading, and M. F. Webster, “Extracting extensional properties through excess pressure drop estimation in axisymmetric contraction and expansion flows for constant shear viscosity, extension strain-hardening fluids,” *Rheologica Acta*, vol. 55, pp. 373–396, 2016.
- [50] S. Sánchez, G. Ascanio, F. Sánchez-Minero, F. Méndez, J. Aguayo, E. Ramírez-Jiménez, and G. Alonso-Ramírez, “Conjugate thermal-hydrodynamic model for the study of heavy oil transport,” *Journal of Petroleum Science and Engineering*, vol. 179, pp. 997–1011, 2019.

- [51] M. Nystrom, H. Tamaddon Jahromi, M. Stading, and M. Webster, “Hyperbolic contraction measuring systems for extensional flow,” *Mechanics of Time-Dependent Materials*, vol. 21, pp. 455–479, 2017.
- [52] F. T. Trouton, “On the coefficient of viscous traction and its relation to that of viscosity,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 77, no. 519, pp. 426–440, 1906.
- [53] A. Bach, H. K. Rasmussen, and O. Hassager, “Extensional viscosity for polymer melts measured in the filament stretching rheometer,” *Journal of Rheology*, vol. 47, no. 2, pp. 429–441, 2003.
- [54] G. H. McKinley and T. Sridhar, “Filament-stretching rheometry of complex fluids,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 34, no. 1, pp. 375–415, 2002.
- [55] J. Yang, J.-Z. Liang, and F.-J. Li, “Melt strength and extensional viscosity of low-density polyethylene and poly (butylene succinate) blends using a melt-spinning technique,” *Journal of Macromolecular Science, Part B*, vol. 51, no. 9, pp. 1715–1730, 2012.
- [56] N. Ramesh and S. Lee, “Blowing agent effect on extensional viscosity calculated from fiber spinning method for foam processing,” *Journal of cellular plastics*, vol. 36, no. 5, pp. 374–385, 2000.
- [57] H. Winter, C. Macosko, and K. Bennett, “Orthogonal stagnation flow, a framework for steady extensional flow experiments,” *Rheologica Acta*, vol. 18, no. 3, pp. 323–334, 1979.
- [58] C. J. Pipe and G. H. McKinley, “Microfluidic rheometry,” *Mechanics research communications*, vol. 36, no. 1, pp. 110–120, 2009.

- [59] J. Wang and D. F. James, “Lubricated extensional flow of viscoelastic fluids in a convergent microchannel,” *Journal of Rheology*, vol. 55, no. 5, pp. 1103–1126, 2011.
- [60] H. S. Lee and S. J. Muller, “A differential pressure extensional rheometer on a chip with fully developed elongational flow,” *Journal of Rheology*, vol. 61, no. 5, pp. 1049–1059, 2017.
- [61] C. L. M. H. Navier, “in memoires de l’academie royale des sciences de l’institute de france,” pp. 414–416, 1998.
- [62] K. Watanabe, H. Mizunuma, *et al.*, “Slip of newtonian fluids at solid boundary,” *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering*, vol. 41, no. 3, pp. 525–529, 1998.
- [63] K. Watanabe, Y. Udagawa, and H. Udagawa, “Drag reduction of newtonian fluid in a circular pipe with a highly water-repellent wall,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 381, pp. 225–238, 1999.
- [64] I. Rao and K. Rajagopal, “The effect of the slip boundary condition on the flow of fluids in a channel,” *Acta Mechanica*, vol. 135, no. 3-4, pp. 113–126, 1999.
- [65] J. R. Collier, O. Romanoschi, and S. Petrovan, “Elongational rheology of polymer melts and solutions,” *Journal of Applied Polymer Science*, vol. 69, no. 12, pp. 2357–2367, 1998.
- [66] A. Ríos-Rodríguez, C. Palacios-Morales, E. Bernal, G. Ascanio, and J. Aguayo-Vallejo, “Effect of hydrophobic coating on hagen-poiseuille flows,” *Journal of Applied Fluid Mechanics*, vol. 9, no. 3, pp. 1035–1040, 2016.
- [67] T. Hayat, M. Khan, and M. Ayub, “The effect of the slip condition on flows of an oldroyd 6-constant fluid,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 202, no. 2, pp. 402–413, 2007.

- [68] L. Ferrás, J. Nóbrega, and F. Pinho, “Analytical solutions for newtonian and inelastic non-newtonian flows with wall slip,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 175, pp. 76–88, 2012.
- [69] K. Y. Pérez-Salas, S. Sánchez, G. Ascanio, and J. P. Aguayo, “Analytical approximation to the flow of a sptt fluid through a planar hyperbolic contraction,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 272, p. 104160, 2019.
- [70] F. Pimenta, K. Toda-Peters, A. Q. Shen, M. A. Alves, and S. J. Haward, “Viscous flow through microfabricated axisymmetric contraction/expansion geometries,” *Experiments in Fluids*, vol. 61, pp. 1–16, 2020.
- [71] V. Faustino, D. Pinho, T. Yaginuma, R. C. Calhelha, G. M. Kim, S. Arana, I. C. Ferreira, M. S. Oliveira, and R. Lima, “Flow of red blood cells suspensions through hyperbolic microcontractions,” *Visualization and simulation of complex flows in biomedical engineering*, pp. 151–163, 2014.
- [72] S. G. Hatzikiriakos, “Slip mechanisms in complex fluid flows,” *Soft Matter*, vol. 11, no. 40, pp. 7851–7856, 2015.
- [73] L. Ferrás, A. Afonso, J. Nóbrega, and F. Pinho, “A numerical and theoretical study on viscoelastic fluid slip flows,” *Physics of Fluids*, vol. 29, no. 5, p. 053102, 2017.
- [74] D. Lee, Y. Kim, and K. H. Ahn, “Effect of elasticity number and aspect ratio on the vortex dynamics in 4:1 micro-contraction channel flow,” *Korea-Australia rheology journal*, vol. 26, pp. 335–340, 2014.
- [75] C. J. Petrie, “Extensional flow—a mathematical perspective,” *Rheologica acta*, vol. 34, pp. 12–26, 1995.
- [76] T. Van Waeleghem, F. H. Marchesini, L. Cardon, and D. R. D’hooge, “Melt exit flow modelling and experimental validation for fused filament fabrication: From newtonian

- to non-newtonian effects,” *Journal of Manufacturing Processes*, vol. 77, pp. 138–150, 2022.
- [77] R. Owens and T. Phillips, “Computational rheology. imperial college press,” 2002.
- [78] J. Tordella, “Capillary flow of molten polyethylene—a photographic study of melt fracture,” *Transactions of the Society of Rheology*, vol. 1, no. 1, pp. 203–212, 1957.
- [79] H. Nguyen and D. Boger, “The kinematics and stability of die entry flows,” *Journal of non-Newtonian fluid mechanics*, vol. 5, pp. 353–368, 1979.
- [80] D. Boger, D. Hur, and R. Binnington, “Further observations of elastic effects in tubular entry flows,” *Journal of non-Newtonian fluid mechanics*, vol. 20, pp. 31–49, 1986.
- [81] D. Boger, “Viscoelastic flows through contractions,” *Annual review of fluid mechanics*, vol. 19, no. 1, pp. 157–182, 1987.
- [82] B. Yesilata, A. Oztekin, and S. Neti, “Instabilities in viscoelastic flow through an axisymmetric sudden contraction,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 85, no. 1, pp. 35–62, 1999.
- [83] J. P. Rothstein and G. H. McKinley, “The axisymmetric contraction–expansion: the role of extensional rheology on vortex growth dynamics and the enhanced pressure drop,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 98, no. 1, pp. 33–63, 2001.
- [84] S. Nigen and K. Walters, “Viscoelastic contraction flows: comparison of axisymmetric and planar configurations,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 102, no. 2, pp. 343–359, 2002.
- [85] M. Pérez-Camacho, J. López-Aguilar, F. Calderas, O. Manero, and M. Webster, “Pressure-drop and kinematics of viscoelastic flow through an axisymmetric contraction–expansion geometry with various contraction-ratios,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 222, pp. 260–271, 2015.

- [86] J. L. White and A. Kondo, “Flow patterns in polyethylene and polystyrene melts during extrusion through a die entry region: measurement and interpretation,” *Journal of non-Newtonian fluid mechanics*, vol. 3, no. 1, pp. 41–64, 1977.
- [87] R. Evans and K. Walters, “Further remarks on the lip-vortex mechanism of vortex enhancement in planar-contraction flows,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 32, no. 1, pp. 95–105, 1989.
- [88] S. White, A. Gotsis, and D. Baird, “Review of the entry flow problem: experimental and numerical,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 24, no. 2, pp. 121–160, 1987.
- [89] D. Lee, Y. Kim, and K. H. Ahn, “Effect of elasticity number and aspect ratio on the vortex dynamics in 4: 1 micro-contraction channel flow,” *Korea-Australia rheology journal*, vol. 26, pp. 335–340, 2014.
- [90] K. Fernández, L. Miranda, and U. Torres-Herrera, “Nonlinear wave interactions in pulsatile nanofluidics due to bending nanotube vibration: Net flow induced by the multiple resonances of complex pressure gradients and coupled fluid-tube forces,” *Physics of Fluids*, vol. 33, no. 7, p. 072015, 2021.
- [91] P. Goswami and S. Chakraborty, “Semi-analytical solutions for electroosmotic flows with interfacial slip in microchannels of complex cross-sectional shapes,” *Microfluidics and nanofluidics*, vol. 11, pp. 255–267, 2011.
- [92] D. G. Crowdy, “Analytical solutions for uniform potential flow past multiple cylinders,” *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, vol. 25, no. 4, pp. 459–470, 2006.
- [93] D. Binding, “Further considerations of axisymmetric contraction flows,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 41, no. 1-2, pp. 27–42, 1991.

- [94] A. S. Lubansky and M. T. Matthews, “On using planar microcontractions for extensional rheometry,” *Journal of Rheology*, vol. 59, no. 3, pp. 835–864, 2015.
- [95] K. Y. Pérez-Salas, G. Ascanio, L. Ruiz-Huerta, and J. P. Aguayo, “Approximate analytical solution for the flow of a phan-thien–tanner fluid through an axisymmetric hyperbolic contraction with slip boundary condition,” *Physics of Fluids*, vol. 33, no. 5, p. 053110, 2021.
- [96] B. Debbaut and M. Crochet, “Extensional effects in complex flows,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 30, no. 2-3, pp. 169–184, 1988.
- [97] M. Aboubacar, H. Matallah, and M. Webster, “Highly elastic solutions for oldroyd-b and phan-thien/tanner fluids with a finite volume/element method: planar contraction flows,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 103, no. 1, pp. 65–103, 2002.
- [98] T. Sato and S. M. Richardson, “Explicit numerical simulation of time-dependent viscoelastic flow problems by a finite element/finite volume method,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 51, no. 3, pp. 249–275, 1994.
- [99] J. E. López-Aguilar and H. R. Tamaddon-Jahromi, “Computational predictions for boger fluids and circular contraction flow under various aspect ratios,” *Fluids*, vol. 5, no. 2, p. 85, 2020.
- [100] M. Alves, P. Oliveira, and F. Pinho, “Numerical methods for viscoelastic fluid flows,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 53, pp. 509–541, 2021.
- [101] T. Hashimoto, K. Kido, S. Kaki, T. Yamamoto, and N. Mori, “Effects of surfactant and salt concentrations on capillary flow and its entry flow for wormlike micelle solutions,” *Rheologica acta*, vol. 45, pp. 841–852, 2006.

- [102] V. Lutz-Bueno, J. Kohlbrecher, and P. Fischer, “Micellar solutions in contraction slit-flow: Alignment mapped by sans,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 215, pp. 8–18, 2015.
- [103] M. Y. Hwang, H. Mohammadigoushki, and S. J. Muller, “Flow of viscoelastic fluids around a sharp microfluidic bend: Role of wormlike micellar structure,” *Physical Review Fluids*, vol. 2, no. 4, p. 043303, 2017.
- [104] E. Jafari Nodoushan, Y. J. Lee, G.-H. Lee, and N. Kim, “Quasi-static secondary flow regions formed by microfluidic contraction flows of wormlike micellar solutions,” *Physics of Fluids*, vol. 33, no. 9, p. 093112, 2021.
- [105] M. Webster, H. Tamaddon-Jahromi, and M. Aboubacar, “Transient viscoelastic flows in planar contractions,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 118, no. 2-3, pp. 83–101, 2004.
- [106] M. Davoodi, K. Zografos, P. Oliveira, and R. Poole, “On the similarities between the simplified phan-thien–tanner model and the finitely extensible nonlinear elastic dumbbell (peterlin closure) model in simple and complex flows,” *Physics of Fluids*, vol. 34, no. 3, p. 033110, 2022.
- [107] F. Bautista, J. De Santos, J. Puig, and O. Manero, “Understanding thixotropic and antithixotropic behavior of viscoelastic micellar solutions and liquid crystalline dispersions. i. the model,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 80, no. 2-3, pp. 93–113, 1999.
- [108] G. Bishko, O. Harlen, T. McLeish, and T. Nicholson, “Numerical simulation of the transient flow of branched polymer melts through a planar contraction using the pom–pom’ model,” *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 82, no. 2-3, pp. 255–273, 1999.

- [109] J. P. A. Vallejo, *Prediction of viscoelastic fluid flow in contractions*. Swansea University (United Kingdom), 2006.
- [110] P. Kesharwani, A. Bisht, A. Alexander, V. Dave, and S. Sharma, “Biomedical applications of hydrogels in drug delivery system: An update,” *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, vol. 66, p. 102914, 2021.
- [111] E. Caló and V. V. Khutoryanskiy, “Biomedical applications of hydrogels: A review of patents and commercial products,” *European polymer journal*, vol. 65, pp. 252–267, 2015.
- [112] M.-Y. Yeh, J.-Y. Zhao, Y.-R. Hsieh, J.-H. Lin, F.-Y. Chen, R. D. Chakravarthy, P.-C. Chung, H.-C. Lin, and S.-C. Hung, “Reverse thermo-responsive hydrogels prepared from pluronic f127 and gelatin composite materials,” *RSC advances*, vol. 7, no. 34, pp. 21252–21257, 2017.
- [113] M. Sarker, S. Naghieh, A. D. McInnes, L. Ning, D. J. Schreyer, and X. Chen, “Bio-fabrication of peptide-modified alginate scaffolds: Printability, mechanical stability and neurite outgrowth assessments,” *Bioprinting*, vol. 14, p. e00045, 2019.
- [114] Z. Fu, S. Naghieh, C. Xu, C. Wang, W. Sun, and X. Chen, “Printability in extrusion bioprinting,” *Biofabrication*, vol. 13, no. 3, p. 033001, 2021.
- [115] R. Suntornmond, J. An, and C. K. Chua, “Bioprinting of thermoresponsive hydrogels for next generation tissue engineering: a review,” *Macromolecular Materials and Engineering*, vol. 302, no. 1, p. 1600266, 2017.
- [116] B. Shriky, A. Kelly, M. Isreb, M. Babenko, N. Mahmoudi, S. Rogers, O. Shebanova, T. Snow, and T. Gough, “Pluronic f127 thermosensitive injectable smart hydrogels for controlled drug delivery system development,” *Journal of colloid and interface science*, vol. 565, pp. 119–130, 2020.

- [117] H. Herrada-Manchón, D. Rodríguez-González, M. A. Fernández, N. W. Kucko, F. Barrere-de Groot, and E. Aguilar, “Effect on rheological properties and 3d printability of biphasic calcium phosphate microporous particles in hydrocolloid-based hydrogels,” *Gels*, vol. 8, no. 1, p. 28, 2022.
- [118] X. Gao, G. Ji, and T. Peng, “The state equation of aggregation behaviours for poly (oxyethylene)-poly (oxypropylene)-poly (oxyethylene) tri-block copolymers in aqueous solution,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 97, pp. 308–313, 2018.
- [119] G. Gillispie, P. Prim, J. Copus, J. Fisher, A. G. Mikos, J. J. Yoo, A. Atala, and S. J. Lee, “Assessment methodologies for extrusion-based bioink printability,” *Biofabrication*, vol. 12, no. 2, p. 022003, 2020.
- [120] S. Chatterjee, P. C.-l. Hui, C.-w. Kan, and W. Wang, “Dual-responsive (ph/temperature) pluronic f-127 hydrogel drug delivery system for textile-based transdermal therapy,” *Scientific reports*, vol. 9, no. 1, pp. 1–13, 2019.
- [121] T. Jungst, W. Smolan, K. Schacht, T. Scheibel, and J. Groll, “Strategies and molecular design criteria for 3d printable hydrogels,” *Chemical reviews*, vol. 116, no. 3, pp. 1496–1539, 2016.
- [122] R. De Ruyter, L. Royon, J. H. Snoeijs, and P. Brunet, “Drop spreading and gelation of thermoresponsive polymers,” *Soft Matter*, vol. 14, no. 16, pp. 3096–3104, 2018.