



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
**POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES**  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

**DINÁMICA DE GOTAS EN FLUJOS FUERTES CON  
EFECTOS DE FRONTERA**

**TESIS**

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

**DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES  
(MATERIALES COMPLEJOS)**

PRESENTA:

**CARLOS AMIR ESCALANTE VELÁZQUEZ**

TUTOR:

**DR. ENRIQUE GEFFROY AGUILAR**  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

COMITÉ TUTOR:

**DR. ROBERTO ZENIT CAMACHO**  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES  
**DR. BALTASAR MENA HINIESTA**  
INSTITUTO DE INGENIERIA

**MÉXICO, D.F. MAYO 2015**



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.

# Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) así como al Programa de becas para estudios de Posgrado de la UNAM por los apoyos económicos recibidos durante mis estudios de doctorado. Agradezco al Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales por todo el soporte recibido. También agradezco al laboratorio de Reología Óptica y al laboratorio de Investigación en Flujo y Tecnología del Petróleo, ambos del IIM-UNAM.

Agradezco al Dr. Enrique Geffroy Aguilar por todo su apoyo durante mi doctorado, así como por la revisión y corrección de este trabajo, sus consejos y su amistad. También agradezco a los miembros de mi comité tutorial, los Doctores: Roberto Zenit Camacho y Baltazar Mena Hiniesta y a los miembros del jurado, los Doctores: Fermín Viniegra Heberlein, Federico Méndez Laville, Raúl Herrera Becerra y Sergio Quiñones Cisneros, por las observaciones y comentarios hechos a este trabajo.

Agradezco al Ing. Gerardo Guevara por su asesoría y soporte técnico en cómputo. Al personal de la biblioteca del IIM, de manera particular a Angélica González. También a la Sra. María Luisa Olaguibel.

Agradezco a toda mi familia por su apoyo y amor incondicionales, mis papás Juventino y Rigoberta, a mis hermanos Abel, Magdaly y Coralito. A Sonia por su apoyo, comprensión y por todo su cariño.

Finalmente quiero agradecer a mis amigos y -en su momento- compañeros de trabajo quienes siempre me han apoyado en diferentes circunstancias y en diferentes modos: Víctor Matías, Francisco Argüelles, Nansy Sánchez, Issis Romero, Ana Muñoz y Aristeo Estrada. A mis amigos y compañeros del grupo de trabajo del Laboratorio de Reología Óptica: Alfredo, Minerva, Joana, Eduardo, en particular al Dr. Marco Reyes Huesca por todo su apoyo, comentarios y sugerencias, también a Israel por facilitarme información de su trabajo y a Fernanda por su colaboración en varios de los experimentos. Gracias.

# Dedicatoria

Dedico el presente trabajo a mis padres:

Rigoberta Velázquez Vázquez

y

Juventino Escalante Vázquez

Quienes con su forma de ser y proceder, su humildad, honestidad, coraje, orgullo, valentía, compromiso, generosidad, comprensión, y su amor incondicional me han enseñado las cosas importantes de la vida.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>v</b>
<b>1. Aspectos generales de la deformación de gotas</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	2
1.2. Deformación de una gota en flujos lineales . . . . .	4
1.2.1. Parámetros que describen la deformación de una gota . . . . .	4
1.2.2. El parámetro de tipo de flujo $\alpha$ . . . . .	6
1.2.3. Análisis de pequeñas deformaciones. Revisión de modelos teóricos . . . . .	7
1.2.4. Evolución temporal de la deformación. . . . .	15
1.3. Teoría para grandes deformaciones (Slender Body Theory) . . . . .	18
1.4. Rompimiento de una gota en flujos bidimensionales . . . . .	19
1.5. Deformación de gotas en flujos cortantes simples <i>confinados</i> . . . . .	22
1.5.1. Modelos teóricos que predicen el efecto de las fronteras . . . . .	23
1.5.2. Deformación y rompimiento de gotas. Métodos numéricos. . . . .	27
<b>2. El molino de dos rodillos (TRMs)</b>	<b>29</b>
2.1. Características generales del molino de dos rodillos . . . . .	29

2.2.	El dispositivo experimental para estudios de dinámica de gotas . . . . .	34
2.2.1.	Sistema óptico . . . . .	34
2.2.2.	Celda de flujo . . . . .	35
2.2.3.	Control de motores mediante una computadora . . . . .	37
2.2.4.	Iluminación y baño térmico . . . . .	38
2.2.5.	Procedimiento experimental . . . . .	39
2.2.6.	Propiedades de los fluidos . . . . .	41
<b>3.</b>	<b>El método de elemento de frontera y su implementación para el estudio</b>	
	<b>de dinámica de gotas.</b>	<b>43</b>
3.1.	Ecuaciones gobernantes para flujos de Stokes . . . . .	45
3.2.	Ecuaciones integrales de frontera . . . . .	46
3.2.1.	Funciones de Green . . . . .	47
3.2.2.	Representación integral de las ecuaciones de Stokes . . . . .	49
3.2.3.	Implementación numérica de BEM . . . . .	52
3.2.4.	Discretización espacial de la ecuación integral de Fredholm en 2D . . . . .	53
3.3.	Formulación de BEM para deformación de gotas en campos de flujos fuertes . . . . .	55
3.3.1.	Condiciones de frontera en la interfaz . . . . .	56
3.3.2.	Continuidad de la velocidad . . . . .	57
3.3.3.	Condición cinemática. . . . .	57
3.3.4.	Condiciones de los esfuerzos . . . . .	58
3.3.5.	Parámetros usados en el estudio de la deformación de gotas . . . . .	61
3.4.	Ecuación integral para una interfaz fluido-fluido . . . . .	62

3.4.1.	Formulación de la ecuación integral para una interfaz . . . . .	64
3.5.	La interfaz fluido-fluido cercana a fronteras sólidas . . . . .	67
3.5.1.	La ecuación integral para una interfaz fluido-fluido confinada . . . . .	69
3.6.	Solución numérica de las ecuaciones integrales para una gota viscosa en un flujo fuerte . . . . .	73
3.6.1.	Cálculo del vector normal y la curvatura media . . . . .	75
3.6.2.	Cálculo del potencial de capa simple . . . . .	76
3.6.3.	Aislando la discontinuidad en la tracción . . . . .	76
3.6.4.	Cálculo numérico directo del potencial de capa simple . . . . .	77
3.6.5.	Cálculo de la integral principal de capa doble . . . . .	78
3.7.	Descripción de la interfaz y su evolución . . . . .	79
<b>4.</b>	<b>Resultados Parte I</b>	<b>83</b>
4.1.	Validación del modelo numérico. Comparación con resultados previos . . . . .	84
4.1.1.	Caso 1. Pequeñas deformaciones y cociente de viscosidades $\lambda = 1$ . . . . .	85
4.1.2.	Caso 2. Teoría de segundo orden para pequeñas deformaciones con $\lambda = 6.4$ . . . . .	87
4.1.3.	Caso 3. La evolución temporal. Pequeñas deformaciones con $\lambda = 25$ y $Ca = 1.52$ . . . . .	87
4.2.	Pequeñas deformaciones de gotas en flujos generados por TRMs . . . . .	90
4.2.1.	Deformaciones y orientaciones estacionarias. . . . .	90
4.2.2.	Deformaciones y orientaciones de la gota como función del tiempo . . . . .	94
4.2.3.	El modelo de Cox modificado . . . . .	99

4.2.4.	Formas estacionarias de gotas deformadas . . . . .	104
4.2.5.	Valores críticos del cociente de viscosidades para diferentes tipos de flujo	106
4.3.	Conclusiones . . . . .	107
<b>5.</b>	<b>Resultados II. Gotas en canales confinados</b>	<b>109</b>
5.1.	Deformación de gotas en flujos confinados generados por el molino de dos rodillos. . . . .	110
5.1.1.	Deformaciones y orientaciones estacionarias en flujos confinados. . . .	111
5.1.2.	Deformaciones y orientaciones como función del confinamiento. . . . .	115
5.1.3.	La evolución temporal de las deformaciones y orientaciones . . . . .	120
5.1.4.	Formas estacionarias de gotas deformadas . . . . .	125
5.2.	Cinemática estacionaria alrededor de gotas deformadas . . . . .	128
5.2.1.	Líneas de corriente alrededor de gotas estacionarias deformadas. . . .	129
5.2.2.	Campos de velocidad y puntos de estancamiento alrededor de gotas estacionarias deformadas . . . . .	132
5.3.	Alcances y limitaciones del método numérico . . . . .	136
5.4.	Conclusiones . . . . .	137
<b>6.</b>	<b>Conclusiones generales</b>	<b>140</b>
<b>A.</b>	<b>Publicaciones</b>	<b>143</b>
	<b>Referencias</b>	<b>149</b>



# Resumen

En esta tesis se presentan resultados de simulaciones numéricas de la dinámica de deformación de gotas, suspendidas en un segundo fluido que impone un flujo fuerte. El presente trabajo representa un primer esfuerzo para tomar en cuenta todas las características inherentes a los flujos generados por un dispositivo denominado molino de dos rodillos, incluyendo el efecto de las fronteras sobre la deformación de gotas, en un intervalo amplio de valores de los parámetros que gobiernan la deformación de gotas.

Para el sistema bifásico estudiado, ambos fluidos tienen la misma densidad, pero en general tienen diferentes viscosidades. El flujo es generado por un molino de dos rodillos, capaz de generar un espectro amplio de diversos flujos, desde un flujo casi cortante simple (un flujo con las mismas magnitudes de rapidez de deformación y vorticidad) hasta flujos más elongacionales (relativamente con menor vorticidad). Este trabajo estudia la dinámica de gotas bidimensionales en flujos que son cercanos al flujo cortante simple.

Una primera parte de los resultados considera la deformación de gotas sin efectos de frontera y una segunda parte considera la deformación de gotas con efectos importantes por la cercanía de las fronteras. En particular, se hicieron simulaciones para el caso en que la gota es menos viscosa que el medio externo y otras cuando la gota tiene una viscosidad mucho

más grande que el medio externo. Los resultados numéricos obtenidos fueron comparados con resultados experimentales obtenidos para gotas embebidas en un fluido no-acotado – previamente reportados– y otros resultados más propios de este trabajo, observándose una coincidencia sobresaliente, tanto en la forma de las gotas como en la dinámica de las deformaciones inducidas. Asimismo, en ambos casos (con y sin fronteras) los resultados obtenidos fueron comparados con modelos teóricos existentes para flujo cortante simple. En general, los resultados numéricos muestran una concordancia muy buena con los resultados experimentales, pero no así con las predicciones teóricas.

Esto ilustra, por un lado, que el flujo generado por el molino de dos rodillos tiene características cinemáticas completamente diferentes a los flujos estudiados hasta ahora (incluyendo el flujo cortante simple) y, por otro lado, la coincidencia de ambos resultados muestra que el método numérico captura la dinámica fundamental involucrada en el fenómeno estudiado, como podrá verse a lo largo de este trabajo.

En general, el modelo numérico predice valores cuantitativamente correctos para los casos de pequeñas deformaciones. Además, el método numérico permite obtener también información complementaria sobre la dinámica y la cinemática alrededor de gotas deformadas, con y sin efectos de frontera. En el primer caso (deformación libre), “pequeñas deformaciones” describe la dinámica que se observa bajo números capilares pequeños, mientras que en los casos de deformación de la gota en flujos confinados, “pequeñas deformaciones” significa números capilares pequeños y confinamientos intermedios.

De manera adicional, para el caso de deformación libre, la buena coincidencia entre los resultados numéricos y experimentales me permite proponer un modelo teórico capaz de describir la evolución temporal de la deformación y que concuerda tanto con los resultados

numéricos como experimentales. Este modelo se basa en las ideas de Cox y Shapira-Haber, y es válido para un amplio rango de valores del cociente de viscosidades, pero de manera particular funciona para describir la deformación de gotas muy viscosas, en donde los modelos que existen actualmente fallan. Para el caso de la deformación con efectos de frontera, se propuso también un modelo modificado –como función del número capilar– que describe correctamente las deformaciones para diferentes confinamientos. Ambos modelos propuestos fueron validados, en comparación con datos experimentales, con predicciones que se ajustan bastante bien a los datos y representan una mejor alternativa a los modelos existentes en el caso en el que las gotas son más viscosas que el medio que las suspende.

# Capítulo 1

## Aspectos generales de la deformación de gotas

En este capítulo se presenta una descripción general del problema de la dinámica de deformación de una gota suspendida en un segundo fluido. También presento las definiciones de los parámetros más importantes en el estudio de deformación de gotas en flujos bidimensionales lineales. En seguida se presenta un recuento de los trabajos experimentales, teóricos y numéricos más importantes realizados con anterioridad, los cuales enfatizan la deformación de gotas en flujos cortantes simples. De la misma manera hago una breve reseña de los trabajos experimentales, teóricos y numéricos que tienen que ver con deformación de gotas en flujos cortantes simples confinados.

## 1.1. Introducción

Cuando una gota de un fluido está suspendida en un segundo fluido inmiscible, y éste último está sometido a condiciones de flujo, se genera un campo de esfuerzos sobre la gota, provocando que ésta se deforme. Si el flujo es muy fuerte ésta puede romperse en dos o más fragmentos. Los parámetros más importantes que determinan la deformación de una gota, en función del campo de deformación aplicado, son la tensión superficial, el cociente de viscosidades, el gradiente de velocidad y el cociente entre la rapidez de deformación y la vorticidad [1].

El principal interés en el estudio de la dinámica de una gota sujeta a diferentes flujos es de importancia práctica para un gran número de sistemas que involucran en general dispersión de gotas en un medio continuo. Por ejemplo, en sistemas industriales, en la preparación de emulsiones y mezclas poliméricas, en la preparación de tintas para impresión y en sistemas biológicos como la sangre [2]. En problemas de recuperación secundaria en la industria petrolera, donde gotas de aceite son desplazadas por agua en roca porosa [3]. En estudios de materiales avanzados como nanomateriales [4] y microfluidos [5], se requiere el entendimiento de mecánica de fluidos en sistemas muy pequeños, donde el volumen de las gotas es de unos cuantos picolitros.

Asimismo, desde una perspectiva de la hidrodinámica de sistemas bifásicos, el entendimiento de la dinámica de una gota inmersa en un segundo fluido representa un primer paso importante para la comprensión de sistemas de gotas más concentrados y complejos, por ejemplo, la evolución de la morfología en las operaciones de procesamiento de mezclas poliméricas, lo cual es de gran importancia en la industria. Y sin embargo, el caso de una

gota tiene una importancia directa en sistemas diluidos, en donde la fase dispersada son gotas, y el estudio de la deformación de una gota es importante para predecir propiedades reológicas del sistema como un todo [6, 7].

A continuación presento una revisión general del problema de deformación de gotas en flujos lineales, y de manera particular describo los modelos para el flujo cortante simple (en los casos libre y confinado). Dicho flujo es generado por el movimiento relativo de placas paralelas, la característica más importante es que en este flujo la magnitud de la vorticidad y la magnitud de la rapidez de deformación son iguales. Para este flujo se han publicado muchos trabajos y este flujo es un excelente caso límite para el trabajo que aquí presento: flujos cercanos a los flujos cortantes simples pero con un carácter más elongacional. Este último es generado por un molino de dos rodillos y es descrito en detalle en el Capítulo 2.

Aún más, la dinámica de deformación de gotas en medios confinados ha sido objeto de estudio, en años recientes, debido al enorme potencial de aplicaciones [5], posibles en gran medida debido al desarrollo de técnicas numéricas y experimentales. Pero hasta ahora, gran parte de los estudios (teóricos, numéricos y experimentales) de dinámica de gotas en flujos confinados se han hecho principalmente para flujos cortantes simples, cubriendo el espectro de cocientes de viscosidades pequeños, intermedios y grandes. Es importante señalar que también existen estudios de deformación de gotas en flujos similares (flujos elongaciones con vorticidad), pero éstos son generados en micro-dispositivos en forma de T (T-Shapes devices), y están pensados para aplicaciones de microfluidos [5], Para estos casos, la evolución de la gota ocurre para *condiciones de flujo no estacionarias*, y sólo por un breve periodo de tiempo, comparable con los tiempos característicos de la gota; no abundaremos en este trabajo respecto a este tipo de flujos.

## 1.2. Deformación de una gota en flujos lineales

La dinámica de la deformación de una gota inmersa en un segundo fluido inmiscible ha sido estudiada experimentalmente [8, 9, 10, 11, 12, 7], teóricamente [13, 14, 15, 16, 17, 18] y numéricamente [19, 20, 21, 22]. Los trabajos mencionados, no son los únicos pero sí son algunos de los más importantes, Además, los trabajos de Rallison [1], Stone [2] y Briscoe, et al. [23] son excelentes revisiones de los avances más importantes en la comprensión del problema. Avances posteriores fueron hechos por Greco y colaboradores [24, 7, 25, 26, 18] y también por Hu y sus colaboradores [27, 28], la importancia de sus trabajos radica en el desarrollo de metodologías experimentales novedosas y de precisión para determinar la forma final de las gotas deformadas. Además, estos estudios establecen con mayor precisión los valores del cociente de viscosidades y los valores de los números capilares para los cuales los modelos teóricos y las simulaciones numéricas resultan válidos.

### 1.2.1. Parámetros que describen la deformación de una gota

Las siguientes consideraciones constituyen la base de la mayor parte de los estudios que tratan la deformación de una gota en flujos lineales. Una gota de radio inicial  $r_d$ , viscosidad  $\mu_d$  y densidad  $\rho_d$ , está libremente suspendida en un segundo fluido inmiscible de viscosidad  $\mu_m$  y densidad  $\rho_m$ . La fase de fluido continuo está sujeta a un flujo estacionario lineal. Asumiendo que los fluidos son newtonianos e incompresibles, las ecuaciones gobernantes son la ecuación de Navier-Stokes y la ecuación de continuidad, aplicadas a la gota y al fluido externo. En la interfaz de la gota, se satisfacen las condiciones de continuidad de la velocidad y de los esfuerzos tangenciales. La discontinuidad del esfuerzo normal es balanceada por la tensión

interfacial,  $\sigma$ .

Con el objetivo de hacer un estudio completo del problema se adimensionalizan las ecuaciones de movimiento y las condiciones de frontera. Suponiendo flujos de Stokes, es decir, flujos con número de Reynolds,  $Re \approx 0$ , (en el Capítulo 3 cuando introduzco las ecuaciones gobernantes, haré una descripción completa de los flujos de Stokes o flujos lentos), los parámetros adimensionales que gobiernan la deformación y rompimiento de una gota viscosa embebida en un segundo fluido –considerando además que las densidades son iguales,  $\rho_d = \rho_m$ – son los siguientes [1]:

1. El cociente de viscosidades de la gota y del fluido externo,  $\lambda = \mu_d/\mu_m$ .
2.  $Ca$ , es el número capilar. Representa el cociente de las fuerzas viscosas con la tensión superficial.
3. El carácter tensorial de  $\nabla U$ , representado en particular por las magnitudes relativas de  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{\Omega}$  (el tensor de deformación y de vorticidad, representan la parte simétrica y antisimétrica de  $\nabla U$  respectivamente).
4. La historia del flujo especificada por  $\nabla U(t)$ .
5. La forma inicial de la gota.

El número capilar  $Ca$ , se define como el cociente de las magnitudes relativas de esfuerzos viscosos respecto a los esfuerzos interfaciales generados por el flujo. Está dado por

$$Ca = \frac{\mu_c \cdot G \cdot r_d}{\sigma}, \quad (1.1)$$



donde  $G$  define la rapidez de corte (shear rate). El grado de deformación y rompimiento de la gota en flujo dependen del número capilar  $Ca$ , el cociente de viscosidades  $\lambda$  y la magnitud del tipo de flujo  $\alpha$ , contenido en el carácter tensorial de  $\nabla U$ .

### 1.2.2. El parámetro de tipo de flujo $\alpha$

El parámetro de tipo de flujo  $\alpha$ , se define como el cociente de la magnitud de la rapidez de deformación y la magnitud de la vorticidad,

$$\frac{\text{Magnitud de la deformación}}{\text{Magnitud de la vorticidad}} = \frac{\|\mathbf{E}\|}{\|\mathbf{\Omega}\|} = \frac{1 + \alpha}{1 - \alpha}.$$

Por lo tanto,

$$\alpha = \frac{\|\mathbf{E}\| - \|\mathbf{\Omega}\|}{\|\mathbf{E}\| + \|\mathbf{\Omega}\|}.$$

Donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{\Omega}$  son los tensores de deformación y vorticidad respectivamente. Por ejemplo, si  $\|\mathbf{E}\| = \|\mathbf{\Omega}\|$ , entonces  $\alpha = 0$  y corresponde al caso de flujo cortante simple. Si en cambio se tiene un flujo sin vorticidad,  $\|\mathbf{\Omega}\| = 0$ , entonces  $\alpha = 1$  y corresponde a un flujo elongacional puro o hiperbólico; en el caso opuesto, si  $\|\mathbf{E}\| = 0$ , entonces  $\alpha = -1$  y corresponde a un flujo rotacional puro. A manera de ejemplo en la figura 1.1 se muestran las líneas de corriente (streamlines) correspondientes a diferentes tipos de flujos entre con valores de  $\alpha$  entre 0 y 1; precisamente son los flujos en este intervalo ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) los llamados flujos fuertes y es a esta clase de flujos los estudiados en este trabajo.

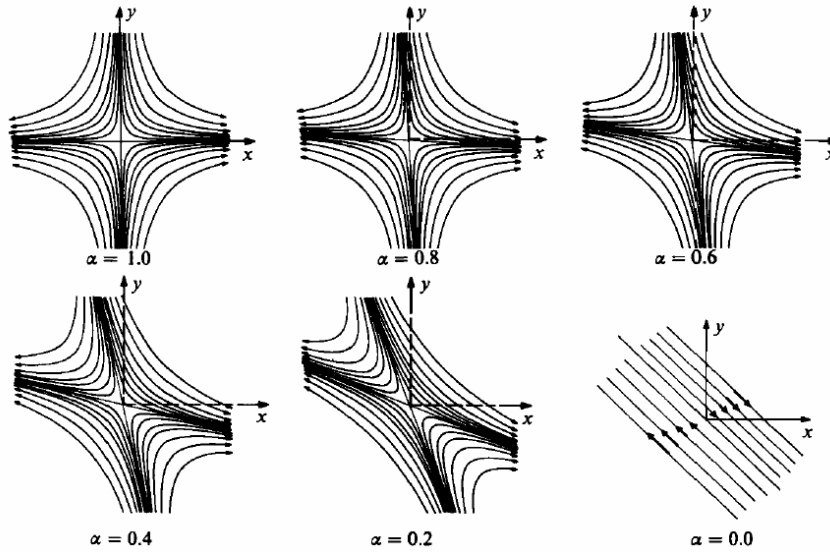


Figura 1.1: Líneas de corriente para diferentes tipos de flujo  $\alpha$  figura tomada de ([11, 12])

### 1.2.3. Análisis de pequeñas deformaciones. Revisión de modelos teóricos

Ninguno de los modelos actuales, descritos a continuación, es completo; su validez está limitada en general a pequeñas deformaciones. Pero, en general, son válidos para intervalos de los parámetros que se complementan. Aún así, es necesario conocer sus predicciones para diversas situaciones (tipo de flujo, cociente de viscosidades, número capilar, etc.) a fin de comparar los resultados experimentales y numéricos con éstas.

Se puede hablar de pequeñas deformaciones básicamente en dos situaciones: la primera, si el número capilar es pequeño ( $Ca \ll 1$ ) y valores de  $\lambda$  intermedios, o bien para valores de  $Ca$  moderados y el cociente de viscosidades tiene un valor grande ( $\lambda \gg 1$ ), esto es, si la gota es muy viscosa. En ambos casos, la forma final estacionaria que alcanza la gota es básicamente elipsoidal. En dos dimensiones la elipse puede describirse por su eje mayor  $L$ ,

su eje menor  $B$  y el ángulo de orientación  $\theta$ , medido desde el eje mayor al eje principal de flujo. Véase la figura 1.2 en donde se muestra una representación esquemática de una gota inicial esférica y una gota deformada.

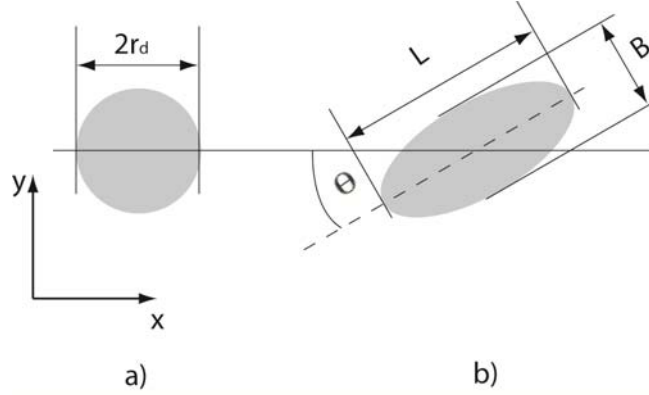


Figura 1.2: Parámetros que definen la deformación de una gota (a) forma inicial de la gota y (b) gota deformada.

Para caracterizar el grado de deformación es conveniente definir el parámetro de deformación  $D$ , originalmente propuesto por G. I. Taylor [8] para cuantificar la deformación de una gota inicialmente esférica.

$$D = \frac{L - B}{L + B}. \quad (1.2)$$

El análisis teórico de pequeñas deformaciones se basa en las ecuaciones de Stokes para geometrías esféricas. Para gotas ligeramente deformadas las condiciones de frontera se extrapolan a una esfera y la solución a las ecuaciones de flujo lento se obtiene vía una perturbación regular con una expansión en números capilares pequeños. Esto es, para flujos lentos ( $Ca \ll 1$ ), la deformación está limitada por una fuerte tensión interfacial.

G. I. Taylor [8] derivó una expresión para el parámetro de deformación  $D$ , en función del

número capilar  $Ca$  y la razón de viscosidades  $\lambda$ ; esta expresión es

$$D = Ca \cdot \frac{16 + 19\lambda}{8(1 + \lambda)} \sin(\theta) \cos(\theta). \quad (1.3)$$

De acuerdo con la ecuación 1.3, la deformación  $D$  es lineal con  $Ca$  y el efecto de la viscosidad es pequeño,  $\theta$  es el ángulo de orientación.

En el otro caso de deformaciones pequeñas (cociente de viscosidades grande y valores de  $Ca$  moderados) G. I. Taylor también dedujo una expresión, cuyo argumento principal es que, en este caso, las fuerzas debidas a la tensión superficial son ínfimas respecto a las debidas a la viscosidad. La deformación en este caso es,

$$D = \frac{5}{4\lambda}. \quad (1.4)$$

En este caso el modelo de Taylor es asintótico, en el sentido de que no hay dependencia alguna respecto a  $Ca$ , de hecho es válido cuando  $Ca \rightarrow \infty$ .

La teoría de Taylor no predice dependencia de la orientación  $\theta$  respecto a  $Ca$ , de acuerdo con Taylor el ángulo de orientación está dado por

$$\theta = \frac{\pi}{4}, \quad (1.5)$$

que corresponde a la orientación del eje principal de deformación del flujo, e implícito es el hecho de que la deformación sólo puede ser pequeña, pues la posible rotación para una forma cuasi-esférica es casi nula.

Por otro lado Chaffrey-Benner [14] desarrollaron un trabajo teórico interesante, obteniendo una expresión para el ángulo de orientación, esta está dada por la ecuación 1.6.

$$\theta = \frac{\pi}{4} - \frac{(19\lambda + 16)(2\lambda + 3)}{80(1 + \lambda)}. \quad (1.6)$$

Otro análisis teórico importante fue hecho por Cox [15], éste es un análisis de segundo orden en  $Ca$ , válido también para pequeñas deformaciones, pero sin restricciones en  $Ca$  ni en  $\lambda$ . Las expresiones para la deformación así como el ángulo de orientación derivadas por Cox, son las siguientes,

$$D = \frac{5(19\lambda + 16)}{4(\lambda + 1)\sqrt{(20Ca)^2 + (19\lambda)^2}}, \quad (1.7)$$

$$\theta = \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \arctan(19\lambda/20Ca). \quad (1.8)$$

El trabajo de Cox es relevante por varias razones, la primera porque es una teoría válida para todos los cocientes de viscosidad (pequeños, intermedios y grandes). Tal como con la teoría de Taylor, éste trabajo funciona razonablemente bien para  $\lambda$  intermedios y pequeños, pero a diferencia de la teoría de Taylor –que para el caso de  $\lambda \gg 1$  sólo da un valor asintótico (bastante bueno por cierto)– la teoría de Cox predice la dependencia de la deformación respecto a  $Ca$ . Otra razón esta es la primer teoría que incluye una descripción de la deformación y del ángulo de orientación de la gota como función del tiempo; en la siguiente sección abundaremos al respecto.

Dentro de los trabajos más recientes, señalamos el modelo derivado por Maffettone y Minale [29]. En contraste con los modelos anteriores éste no está basado en una expansión sobre el número capilar que se trunca en algún momento; se trata de un modelo fenomenológico, en el que se describe la forma de la gota por medio un tensor simétrico, positivamente definido, cuyos eigenvalores representan los cuadrados de los semiejes del elipsoide. La evolución temporal del tensor está dada por la competencia de la tensión interfacial y el arrastre ejercido por el flujo externo, presumiendo que estos efectos son aditivos. Se considera además, la conservación del volumen de la gota. Bajo éstas condiciones se obtiene un sistema de ecuaciones que describen la deformación de la gota, así como una descripción de la evolución temporal. Este modelo fenomenológico no lineal se hace coincidir con el modelo de Taylor y aplica para un rango completo de condiciones de flujo prediciendo gotas elipsoidales y sin limitaciones con respecto a valores del cociente de viscosidad, pero en realidad funciona para valores de  $\lambda$  pequeños e intermedios. Las expresiones para la deformación y el ángulo de orientación predichos por este modelo son las siguientes,

$$D = \frac{\sqrt{f_1^2 + Ca^2} - \sqrt{f_1^2 + Ca^2 - f_2^2 Ca^2}}{f_2 Ca}, \quad (1.9)$$

$$\text{y } \theta = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{f_1}{Ca}\right). \quad (1.10)$$

Donde

$$f_1 = \frac{40(\lambda + 1)}{(2\lambda + 3)(19\lambda + 16)};$$

$$f_2 = \frac{5}{2\lambda + 3}.$$

También es posible escribir las ecuaciones de Maffetone y Minale, de la misma manera que lo hizo Taylor en la ecuación 1.2; esto es, de manera equivalente ( $D = D_{MM}$ )

$$D_{MM} = (L - B)/(L + B), \quad (1.11)$$

donde L y B son los ejes mayor y menor respectivamente y están dados de acuerdo con la teoría de Maffetone y Minale como

$$L = 2R \sqrt{\frac{f_1^2 + Ca^2 + f_2 Ca \sqrt{f_1^2 + Ca^2}}{(f_1^2 + Ca^2)^{1/3} (f_1^2 + Ca^2 - f_2^2 Ca^2)^{2/3}}} \quad (1.12)$$

y

$$B = 2R \sqrt{\frac{f_1^2 + Ca^2 - f_2 Ca \sqrt{f_1^2 + Ca^2}}{(f_1^2 + Ca^2)^{1/3} (f_1^2 + Ca^2 - f_2^2 Ca^2)^{2/3}}}. \quad (1.13a)$$

Esta última representación es interesante y es uno de los aportes del modelo elipsoidal, ya que da una dependencia explícita de los ejes como función de  $Ca$  y funciones que dependen de  $\lambda$ . Sin embargo, la condición de conservación de volumen de un objeto 3-dimensional es poco verificable para los estudios experimentales.

En general, para el caso de flujo cortante simple, con números capilares pequeños ( $Ca \ll 1$ ) el ángulo de orientación es  $\theta = 45^\circ$  [1]; es decir, el eje mayor está orientado a  $45^\circ$  respecto a la dirección principal del flujo. Al aumentar el número capilar la gota se deforma más y el ángulo se aproxima a  $\theta = 0^\circ$ . Gotas muy viscosas ( $\lambda \gg 1$ ) son ligeramente deformadas

en contraste con gotas de muy baja viscosidad ( $\lambda \ll 1$ ), las cuales pueden alcanzar formas muy elongadas. En flujos elongacionales puros (flujos sin vórticidad) el eje mayor de la gota siempre está orientado en la dirección del flujo,  $\theta = 0^\circ$ , y la gotas se deforman más fácilmente (a números capilares más pequeños) que en el caso de flujos cortantes simples [1]. Debido a la complejidad del sistema de ecuaciones de Navier-Stokes, sólo se han obtenido soluciones aproximadas en casos límite de pequeñas y grandes deformaciones. En general la deformación  $D$  depende del número capilar  $Ca$ , del cociente de viscosidades  $\lambda$  y del tipo de flujo  $\alpha$ .

Basándose en el trabajo de Taylor, varios autores, entre los que podemos mencionar a Chaffey y Brenner [14], Barthes-Biesel y Acrivos [30] y Rallison [17], extendieron la aplicabilidad de la teoría de pequeñas deformaciones, de manera tal que incluyen el rompimiento de gotas (ver más adelante). Esas teorías representan un análisis tridimensional para predecir la deformación de gotas. Otro trabajo teórico importante reciente, es el hecho por Greco [18], siendo éste una expansión asintótica de segundo orden sobre el número capilar cuyo objetivo es predecir correctamente las formas finales de las gotas, dado que las teorías anteriores fallan en sus predicciones. Sin embargo, éste y los modelos previos predicen formas estacionarias irreales, aún para pequeñas deformaciones [18].

Desde el punto de vista experimental, uno de los trabajos más completos, es el realizado por Bentley y Leal [12]. Su estudio abarcó desde flujos elongacionales hasta flujos con cierta vorticidad, sin alcanzar los flujos cortantes simples (en los que hay la mismas cantidades de vorticidad y deformación), los flujos fueron generados con un molino de cuatro rodillos (FRMs, de sus siglas en inglés Four Roll Mills). Este trabajo ha sido una referencia para trabajos posteriores e inclusive para los trabajos experimentales más recientes, su importancia radica por un lado en el hecho de que se optimizó con herramientas tecnológicas más



avanzadas el trabajo experimental inicial de Taylor en 1934. También porque verificó el intervalo de validez de las diferentes teorías y modelos que habían sido desarrolladas hasta ese momento, tanto para aquellas que consideran pequeñas deformaciones como para las que consideran el rompimiento de gotas.

Es por ello que gran parte del trabajo experimental más reciente se ha centrado en algunos casos en verificar las predicciones de éstas teorías y en otros casos en aportar hechos que permitan elaborar teorías más completas. Entre los avances más importantes podemos señalar el trabajo de Greco y sus colaboradores [24, 7, 25, 26, 18] ellos probaron la validez de los modelos teóricos de Guido. Greco, Guido y sus colaboradores desarrollaron una metodología experimental basada en el análisis de imágenes para estudiar cuantitativamente la forma tridimensional de una gota deformada en un flujo cortante simple, durante un flujo estacionario y durante el transitorio cuando una gota deformada alcanza su estado de equilibrio -esférico- sin la presencia de flujo, es decir, una vez que la gota ha sido deformada se suspende el flujo y ésta regresa a su forma esférica inicial. Basándose en un desarrollo teórico de pequeñas deformaciones inducidas en gotas por flujos cortantes simples, Guido y sus colaboradores han sido capaces de medir con excelente precisión las propiedades de los fluidos tales como la viscosidad y la tensión interfacial. Asimismo, Hu y sus colaboradores han estudiado la deformación de gotas en flujos elongacionales [27, 28] verificando experimentalmente el modelo de Maffetone y Minale para un flujo elongacional, Hu y sus colaboradores han desarrollado técnicas de imagen para determinar valores de propiedades físicas de los fluidos tales como la viscosidad. Dado que las deformaciones estudiadas son pequeñas en ambos trabajos, la gota deformada mantiene una forma elíptica. La importancia de estas investigaciones en determinar con mucha precisión la forma de la gota, radica en el hecho

de que la forma de la gota –esto es, la morfología de la fase dispersada– afecta de manera significativa las propiedades reológicas macroscópicas del sistema [31, 32]. Otros modelos se han obtenido desde un punto de vista termodinámico describiendo la deformación de gotas elipsoidales, ver Allmusallam et al [33] y Edwards-Dressler [34].

#### **1.2.4. Evolución temporal de la deformación.**

Si una gota inicialmente esférica se coloca en un flujo lento (un flujo con poca cantidad de deformación), ésta se deforma y eventualmente alcanza una forma estacionaria siempre que los esfuerzos viscosos y los esfuerzos interfaciales estén balanceados. La forma que la gota tiene en este estado estacionario depende de la magnitud del tipo de flujo, entre más fuerte sea éste la gota se deformará más e incluso puede llegar a romperse para ciertos valores del tipo de flujo  $\alpha$ , cociente de viscosidades  $\lambda$  y del número capilar  $Ca$ . Además, la manera en la que se alcanza el estado estacionario es diferente, en el caso de flujo elongacional puro o hiperbólico la dependencia temporal del parámetro de deformación es siempre monótona, como lo es también en el caso de el caso de flujo cortante simple, para valores de  $\lambda$  pequeños e intermedios, mientras que para gotas muy viscosas ( $\lambda \gg 1$ ) esta evolución en el tiempo es oscilatoria hasta que el equilibrio es alcanzado [10, 19, 21], ver figura 1.3.

Uno de los modelos teóricos más importantes, es el modelo de Rallison [17], pues predice la dependencia de la deformación respecto al número capilar, ecuación 1.3, así como la evolución temporal de la deformación respecto al tiempo. La premisa fundamental del modelo es que la gota se deforma muy poco a partir de su forma esférica inicial. Es por tanto un modelo válido para pequeñas deformaciones y predice razonablemente las observaciones de laboratorio para

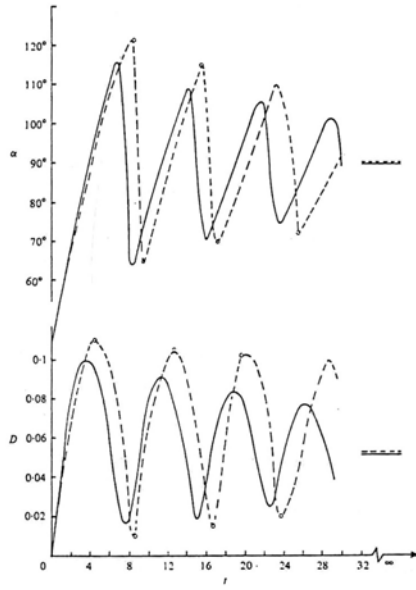


Figura 1.3: Evolución temporal de la deformación y de la orientación de una gota en un flujo cortante simple,  $\lambda = 25$ ,  $Ca = 1.5$ , - - - resultados experimentales de Torza [35], — teoría de Rallison [17]. Rallison usó un sistema de referencia desde donde el que el ángulo de orientación es  $\alpha = 90 - \theta$ , en este caso  $\theta = 0$ , por lo que  $\alpha = 90$ .

dos situaciones: (1) Para números capilares muy pequeños,  $Ca \ll 1$  y  $\lambda < 4$  y (2) Para  $Ca \leq 1$  y  $\lambda \gg 1$ .

La forma de la gota se describe en todo momento por la ecuación

$$\mathbf{r} = 1 + \varepsilon \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}, \quad (1.14)$$

donde  $\varepsilon \leq 1$  y corresponde, dependiendo de la situación con  $Ca$  o  $1/\lambda$ , y  $\mathbf{x}$  es el vector de coordenadas para la gota. La deformación se expresa con el tensor de forma  $\mathbf{A}$  para el que Rallison planteó la siguiente ecuación de evolución, escrita desde un sistema de referencia sobre la gota.

$$\frac{d\mathbf{A}}{d\tau} - Ca(\boldsymbol{\Omega} * \mathbf{A} + \mathbf{A} * \boldsymbol{\Omega}) = \frac{f_1}{\varepsilon} Ca \mathbf{E} - f_2 \mathbf{A}, \quad (1.15)$$

donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{\Omega}$  son los tensores de rapidez de deformación y vorticidad respectivamente,  $Ca$  es número capilar,  $\tau$  es el tiempo adimensional, y  $f_1$  y  $f_2$  son funciones conocidas de  $\lambda$ . Dado que se trata de una ecuación tensorial, para un flujo tridimensional general la ecuación anterior en realidad plantea un sistema de nueve ecuaciones no lineales acopladas que sólo pueden ser resueltas numéricamente.

El comportamiento oscilatorio descrito inicialmente por Cox [15] y verificado experimentalmente por Torza y Cox [10] también es descrito de manera razonable por el modelo numérico de Rallison, ver figura 1.3.

Por otro lado, el modelo de Cox [15] predice analíticamente la evolución temporal de la deformación, incluyendo el comportamiento oscilatorio, observado para  $\lambda \gg 1$ . Las expresiones para el parámetro de deformación así como para el ángulo de orientación obtenidas por Cox, son las siguientes:

$$D = \frac{5(19\lambda + 16)}{4(\lambda + 1)\sqrt{(20Ca)^2 + (19\lambda)^2}} \left[ 1 - 2 \left( e^{-\frac{20Ca}{19\lambda}t} \right) \cos(t - \beta) + e^{-\frac{40Ca}{19\lambda}t} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.16)$$

$$\theta = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{19\lambda \left[ e^{-\frac{20Ca}{19\lambda}t} \cos(Gt) - 1 \right] + (20/Ca) e^{-\frac{20Ca}{19\lambda}t} \cos(Gt)}{20Ca \left[ e^{-\frac{20Ca}{19\lambda}t} \cos(Gt) - 1 \right] + 19\lambda e^{-\frac{20Ca}{19\lambda}t} \sin(Gt)} \right). \quad (1.17)$$

Cuando  $t \rightarrow \infty$ , las expresiones 1.16 y 1.17 se reducen a las expresiones de deformación y orientación estacionarias 1.7 y 1.8, respectivamente.

Como parte de los resultados numéricos y experimentales de este trabajo, en la sección

de resultados (Capítulo 4), presento una modificación al modelo asintótico de Cox. Dicho modelo de Cox modificado predice de manera correcta la evolución temporal de la deformación para el caso de gotas viscosas y predice la transición de la evolución temporal oscilatoria al caso monótono, observada alrededor de  $\lambda = 3.6$ .

### 1.3. Teoría para grandes deformaciones (Slender Body Theory)

Bentley y Leal [12] encontraron que para valores de  $\lambda < 0.05$  las gotas se deforman sustancialmente por lo que las teorías de pequeñas deformaciones no son ya apropiadas. La teoría para grandes deformaciones en flujos de Stokes se aplica cuando los cocientes de viscosidad son pequeños y los números capilares son grandes ( $\lambda \rightarrow 0$ ,  $Ca \rightarrow \infty$ ). Bajo estas condiciones, la superficie de la gota se expresa en coordenadas cilíndricas; el radio –cintura– de la gota deformada,  $r_d$ , es mucho más pequeño que su longitud  $L$ . El flujo dentro y fuera de la gota se calcula a partir de las ecuaciones para flujos lentos (veáse Capítulo 3). Mientras que en un flujo extensional la gota deformada se orienta a lo largo del eje principal de flujo, la orientación del eje mayor representa otra variable desconocida en flujos cortantes. Las soluciones teóricas del problema en flujos extensionales fueron obtenidas por Buckmaster [36], Buckmaster y Flaherty [37], Acrivos y Lo [38] y Hinch y Acrivos [39], mientras Hinch y Acrivos [40] estudiaron la deformación de gotas alargadas en flujos cortantes simples. Para estos casos, la cuantificación de la deformación a través del parámetro  $D$ , ya no la es adecuada aunque se suele seguir usando; sin embargo, algunos autores consideran conveniente usar el

cociente entre los “ejes” mayor y menor,  $L/r_d$  [40].

## 1.4. Rompimiento de una gota en flujos bidimensionales

Cuando los esfuerzos de tensión interfacial no son suficientes para resistir la deformación generada por los esfuerzos viscosos, la gota no alcanza un estado estacionario y consecuentemente pasa a un estado transitorio, alargándose continuamente hasta que eventualmente se rompe. El rompimiento de una gota depende no sólo de las condiciones de flujo, tales como el tipo de flujo y el número capilar, sino también de la evolución temporal del gradiente de velocidad que experimenta la gota [35, 40].

Desde el punto de vista teórico se han hecho esfuerzos para predecir los valores críticos de  $\lambda$  y  $Ca$  para los cuales hay rompimiento para cada tipo de flujo. Barthes-Biesel y Acrivos [30] extendieron el análisis inicial de Taylor a un modelo numérico para valores grandes del número capilar, de tal manera que pudiera predecir el rompimiento de gotas. En la Figura 1.4 se muestra la variación de la deformación como función de  $Ca$ , para un flujo elongacional puro.

El valor del número capilar para el cual ya no es posible que la gota alcance un estado estacionario, corresponde al número capilar crítico  $Ca_c$ ; éste depende del cociente de viscosidades,  $\lambda$ , y del tipo de flujo  $\alpha$ , el cual puede variar desde flujo cortante simple ( $\alpha = 0$ ) hasta flujo elongacional ( $\alpha = 1$ ). El conocimiento actual de esta dependencia está sintetizada en la Figura 1.5, donde se muestra el número capilar crítico como función de  $\lambda$  para los flujos cortante simple y flujo elongacional puro, los valores fueron obtenidos experimentalmente por Grace [41] en caso de flujo cortante simple y por Bentley y Leal [12] en el caso de flujo

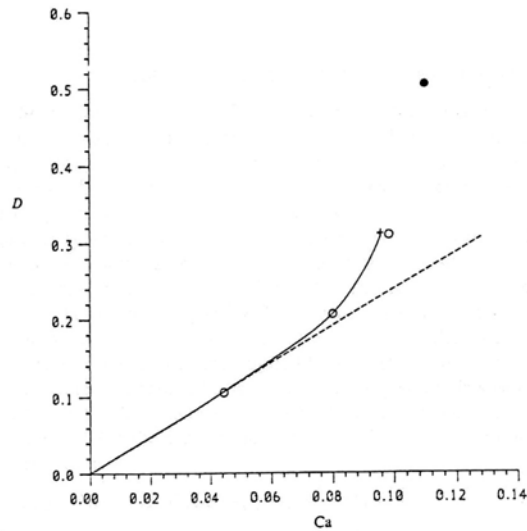


Figura 1.4: Deformación  $D$  como función del número capilar  $Ca$  para un flujo hiperbólico.  $\circ$  Datos de Rumscheidt y Mason [9],  $\bullet$  Rompimiento, - - - teoría de Taylor de primer orden en  $Ca$ , — teoría de segundo orden en  $Ca$  de Barthes-Biesel y Acrivos [30].

elongacional, así como para flujos intermedios. En estos casos la magnitud del flujo se incrementó lentamente, aumentando el número capilar, permitiendo que la gota alcanzara formas estacionarias cada vez más deformadas hasta que el punto en el que esto ya no es posible y obteniendo de este modo su rompimiento.

Como puede observarse en la Figura 1.5 para un flujo cortante simple, el número capilar crítico decrece al aumentar el cociente de viscosidades y alcanza un valor mínimo alrededor de  $\lambda = 1$ . Para valores de  $\lambda > 1$  el número capilar crítico aumenta, pero para  $\lambda \geq 3.6$ , no es ya posible el rompimiento de gotas para este tipo de flujo, independientemente de su intensidad. Mientras que en un flujo elongacional puro, el número capilar crítico decrece al aumentar el valor del cociente de viscosidades y permanece constante a partir de  $\lambda \simeq 3$ . Así pues, en un flujo hiperbólico, es factible el rompimiento de gotas en el rango completo de viscosidades, debido a la ausencia de vorticidad. Para flujos que tienen tanto vorticidad como

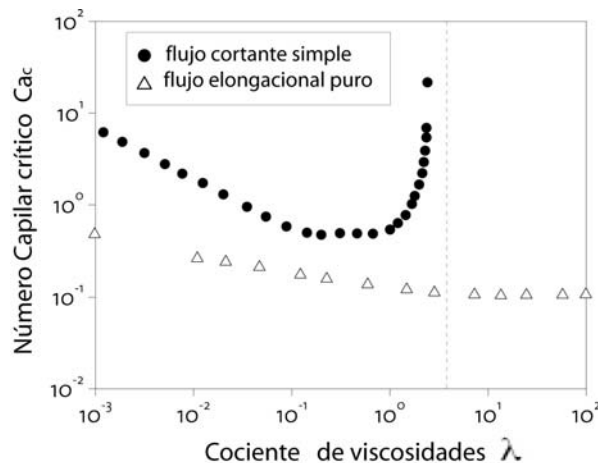


Figura 1.5: Número capilar crítico como función del cociente de viscosidades, para flujos cortante simple (●) y elongacional puro (△).

elongación, es decir, flujos que se encuentran entre el flujo cortante simple y el elongacional puro, la curva que describe la dependencia del número capilar crítico en función del cociente de viscosidades correspondería a una curva intermedia a las que aparecen en la figura 1.5 [12].

La presencia de vorticidad juega un papel crítico porque determina si existe ruptura. En un flujo extensional puro la vorticidad es nula, mientras que en un flujo cortante simple hay cantidades iguales de rapidez de deformación y de vorticidad. En un flujo cortante simple la deformación y rompimiento son resultado de la rapidez de deformación que hay en el flujo externo mientras que éstos son inhibidos por la presencia de vorticidad. Fue Taylor quién mostró que en flujo cortante simple no es posible el rompimiento de gotas para cocientes de viscosidades  $\lambda \geq 3.6$ . Para estas condiciones, una gota ligeramente deformada mantiene su forma con un ángulo de orientación  $\theta = 0$  independiente de la magnitud de la rapidez de deformación. Valores grandes de la rapidez de deformación sólo inducen una circulación



más rápida dentro de la gota. En el caso de gotas con una viscosidad muy baja se requieren grandes números capilares para su rompimiento, en esos casos la gotas alcanzan formas muy alargadas -antes de romperse- con puntas cónicas [12].

## 1.5. Deformación de gotas en flujos cortantes simples *confinados*

Por otro lado, es de interés práctico entender la deformación de gotas en presencia de fronteras cercanas. Goldsmith y Mason [42] fueron los pioneros en este campo al hacer estudios teóricos y experimentales de la deformación de objetos en un cilindro circular en un flujo de Poiseuille. Más recientemente, Sibillo, et al [43]. Vananroye, et al [44], realizaron estudios experimentales de deformación de una gota en un flujo cortante simple teniendo en cuenta el efecto de la presencia de las fronteras. Estos resultados fueron comparados con el trabajo teórico de Shapira y Haber [45], el cual toma en cuenta (a primer orden de una expansión asintótica), por un lado, la deformación de la gota debida al flujo (cortante simple) y, por otro, la deformación debida a la presencia de las paredes planas (una o dos). Otro modelo teórico al que hacen referencia algunos resultados experimentales y numéricos más recientes es el modelo de Minale [46], aunque éste es un modelo fenomenológico cuya premisa principal es que la gota deformada sólo alcanza formas elipsoidales. En este caso, pequeñas deformaciones significa números capilares pequeños y confinamientos intermedios, aunque, como en el caso libre también, las predicciones de las formas de las gotas difieren de las formas observadas experimental o numéricamente para deformaciones intermedias.

Ambos modelos son válidos para pequeñas deformaciones, para cocientes de viscosidades pequeños e intermedios, y sus predicciones son limitadas. Desde el punto de vista numérico se ha hecho un avance sustancial en esta dirección, uno de los trabajos importantes es el de Kennedy et al. [21], que presenta simulaciones de una gota 3D en la cercanía de una pared; sus resultados también fueron comparados con la teoría de Shapira y Haber [45]. Más recientemente, Anderson y colaboradores [47, 48] hicieron estudios numéricos de deformación y rompimiento de gotas en flujos cortantes simples. Dichos trabajos representan avances importantes ya que sus resultados se comparan satisfactoriamente con la teoría y con resultados experimentales. Entre varios de los estudios numéricos interesantes que involucran deformación de gotas con efectos de frontera, cabe mencionar (1) el trabajo de Coulliette y Pozrikidis [49] quienes estudiaron la deformación de gotas en un cilindro circular, y (2) más recientemente los trabajos de Davis y colaboradores [50, 51] quienes presentan resultados para la deformación de una gota tridimensional bajo un flujo de Poiseuille en un tubo con constricciones, así como de interacción de varias gotas que son transportadas a lo largo del cilindro.

### **1.5.1. Modelos teóricos que predicen el efecto de las fronteras**

El trabajo de Shapira y Haber [45] considera el efecto sobre la deformación de gotas en la cercanía de una o dos placas paralelas (flujo cortante simple) debida al movimiento relativo de las fronteras. De acuerdo con este modelo, válido para pequeñas deformaciones,

la contribución a la deformación debida a la presencia de paredes, está dado por

$$D = C_a \left( \frac{R}{2W} \right)^3 \frac{1 + 2.5\lambda}{1 + \lambda} \frac{16 + 19\lambda}{8(1 + \lambda)} \sin(\theta) \cos(\theta) C_s, \quad (1.18)$$

donde  $W$  corresponde a la separación entre las paredes y  $C_s$  corresponde a un parámetro que depende de la posición de la gota respecto a las paredes. En el caso de flujo cortante simple, si la gota está colocada equidistante de ambas placas,  $C_s = 0.69$ ; todas las demás variables de la ecuación [45] se han definido previamente.

Así pues, en un flujo cortante simple, la contribución adicional debido a la cercanía de las fronteras a la deformación de las gotas es función *del factor de confinamiento  $R/2W$  elevado al cubo*. Además, la conclusión de Shapira y Haber es que “las paredes no afectan significativamente la forma de la gota deformada”. Sin embargo, como se ha verificado en trabajos previos, dicha conclusión es errónea ya que sí se ha observado el efecto de las fronteras sobre la forma estacionaria de las gotas deformadas; de hecho, se ha observado que las gotas deformadas estacionarias tienen formas sigmoidales y no elipsoidales como en el caso de deformación libre.

Cuando se hace referencia a este modelo, hay dos aspectos importantes a tener en cuenta: el primero es que, como ya hemos dicho la expresión anterior 1.18 sólo considera el efecto de la cercanía de las fronteras; pero para considerar la deformación *total* requiere considerar también la deformación debida al flujo; el segundo aspecto del modelo de Shapira y Haber cuando las fronteras están muy lejanas o la gota es muy pequeña, esto es cuando  $R/2W \rightarrow 0$ , la deformación observada se reduce a la deformación de Taylor (Ec. 1.3). Con base en lo anterior, la expresión que considera la deformación *total* de una gota confinada en un flujo

cortante simple queda como

$$D = D_T \left( 1 + Ca \left( \frac{R}{2W} \right)^3 \frac{1 + 2.5\lambda}{1 + \lambda} C_s \right). \quad (1.19)$$

En la ecuación 1.19 hemos introducido el símbolo  $D_T$ , que corresponde a la deformación de Taylor (Ec. 1.3). De aquí en adelante, nos referiremos a este modelo, como el modelo SH-Taylor (Shapira-Haber-Taylor) o simplemente SH (Shapira-Haber).

Aún más, Minale [46], basándose en un trabajo previo [29] y en el trabajo de Shapira y Haber [45], adaptó un modelo fenomenológico para pequeñas deformaciones. La expresión para la deformación *total* de este modelo es la siguiente,

$$D = D_{MM} \left( 1 + Ca \left( \frac{R}{2W} \right)^3 \frac{1 + 2.5\lambda}{1 + \lambda} C_s \right), \quad (1.20)$$

donde  $D_{MM}$  corresponde a la deformación del modelo fenomenológico de Maffetone y Minale [29]. Como puede verse la diferencia principal consiste en que este modelo, en el caso en que no hay efectos de frontera, se reduce al modelo de Maffetone y Minale (Ec. 1.9). A lo largo de este trabajo nos referiremos a este modelo, como el modelo SH-MM (Shapira-Haber-Minale modificado).

Trabajos previos experimentales [43, 44] y numéricos [47, 48] reportan excelentes coincidencias en los casos de pequeñas deformaciones (números capilares pequeños y confinamientos intermedios), para un espectro amplio de cocientes de viscosidades. Sin embargo, parte de nuestros resultados muestran que ninguno de los dos modelos funciona razonablemente bien para el caso de cocientes de viscosidades grandes ( $\lambda > 10$ ), aún para pequeñas deformaciones. En el caso del modelo de Shapira y Haber es claro que sea así, pues está basado

en la teoría de Taylor, mientras que en el caso del modelo de Minale modificado [46] es interesante, puesto que falla en el caso en el que una de las hipótesis para considerar pequeñas deformaciones se cumple satisfactoriamente: la de  $\lambda \gg 1$ . Para salvar este detalle, propongo dos opciones, las cuales conservan el espíritu inicial de la teoría de Shapira y Haber, esto es preservando la dependencia de la deformación respecto al factor de confinamiento y respecto a  $\lambda$  (ver ecuación 1.18). La primera opción es recurrir al modelo asintótico de Taylor para valores grandes de  $\lambda$  y sustituir la expresión de la deformación (ver ecuación 1.4) en la ecuación 1.19 en lugar de la deformación de Taylor ( $D_T$ ), la segunda opción es considerar la expresión de la deformación del modelo de Cox [15, 10] y sustituirla en la ecuación 1.19, en lugar de la deformación de Taylor ( $D_T$ ). Sin duda alguna, consideramos que la segunda opción es mejor, ya que como dijimos antes, el modelo de Cox considera la dependencia inicial de la deformación respecto a  $Ca$  que no considera el modelo asintótico de Taylor para valores grandes de  $\lambda$ . De este modo, la expresión para la deformación *total* válida para cocientes de viscosidades grandes ( $\lambda > 10$ ), que proponemos y verificamos en este trabajo es la siguiente,

$$D = D_{Cox} \left( 1 + Ca \left( \frac{R}{2W} \right)^3 \frac{1 + 2.5\lambda}{1 + \lambda} C_s \right), \quad (1.21)$$

donde  $D_{Cox}$  corresponde a la deformación libre del modelo de Cox [15, 10]. A partir de aquí a éste modelo lo refiero como el modelo SH-Cox (Shapira-Haber-Cox).

En resumen, la deformación de gotas cercanas a fronteras es mayor y por lo tanto facilita el rompimiento de gotas. De hecho se ha encontrado que para  $\lambda > 0.1$  siempre es posible el rompimiento de gotas confinadas, esto es interesante porque, en el caso de flujo cortante simple libre, no es posible el rompimiento de gotas para  $\lambda > 3.6$ , ver figura 1.5. Sin embargo

en el caso de cociente de viscosidades muy pequeño ( $\lambda < 0.01$ ) se ha encontrado que se hace más difícil el rompimiento de gotas, esto es el número capilar crítico aumenta para valores pequeños de  $\lambda$  respecto a valores intermedios o grandes de  $\lambda$  [48].

### 1.5.2. Deformación y rompimiento de gotas. Métodos numéricos.

Muchos estudios sobre la deformación y el rompimiento de gotas en flujos libres o confinados se han hecho utilizando herramientas computacionales. Existen varios métodos numéricos para hacer estudios de flujos multifásicos y de manera particular el estudio de dinámica de gotas. Entre los más importantes y que han sido usados en algunos de los trabajos previamente mencionados son los siguientes: el método de las diferencias finitas (FDM, por sus siglas en inglés), el método finito de volumen (VOF, por sus siglas en inglés), el método de elemento finito (FEM, por sus siglas en inglés) y el método integral de frontera (BIM, por sus siglas en inglés). La principal ventaja del método (BIM), también conocido como método de elemento de frontera (BEM, por sus siglas en inglés), sobre los demás es que para su implementación se requiere la integración numérica *únicamente* sobre las interfaces y/o fronteras y no sobre todo el dominio. Existe una cantidad sustancial de trabajos en el tema, algunos de los importantes son los siguientes: el movimiento de una gota en la vecindad de una pared plana fue estudiado por Ascoli et al. [52], Pozrikidis et al. [21] y por Power [53]. La deformación de gotas en medios confinados dentro de un tubo circular recto fue analizado por Martínez and Udell [54] y por Pozrikidis et al. [55], la deformación de gotas en un tubo con una constricción fue estudiado por Tsai y Miksis [56]; sin embargo, esos estudios examinaron sólo flujos axisimétricos [57]. Posteriormente Khayat, et al., en una serie de tra-

bajos [58, 57] estudiaron numéricamente la deformación de una gota bidimensional en flujos confinados. Este trabajo está relacionado al problema de desplazamiento de gotas de aceite atrapadas en medios porosos. Recientemente, debido principalmente al desarrollo de las herramientas de cómputo, la aplicación de BEM ha sido exitosa en estudios de deformación y rompimiento, interacción de gotas, deformación de gotas en flujos viscoelásticos, presencia de surfactante en la interface, deformación de gotas con efectos de inercia (a números de Reynolds pequeños) [17, 21, 22, 59] y recientemente en estudios de deformación de gotas en flujos confinados [50, 51, 47, 48].

Existen dos técnicas numéricas para tratar la deformación de gotas confinadas. La primera consiste en la discretización de las fronteras [49, 50, 51], además de la obvia discretización de las interfases de los fluidos. La segunda aproximación requiere la inclusión de funciones de Green asociadas a las fronteras [47]; hasta el momento este segundo método, está limitado a placas paralelas. La primera técnica requiere de una mayor capacidad de cómputo y las simulaciones requieren mayor tiempo. Los cálculos hechos con la segunda son computacionalmente más rápidos pero su implementación requiere un entendimiento y/o desarrollo teórico profundo de las funciones de Green a fin de poder incluir geometrías más complejas. El método de elemento de frontera, con las características antes descritas, es el utilizado para los estudios de deformación de gotas en flujos generados por el molino de dos rodillos aquí presentados. En este trabajo, la inclusión de geometrías se hizo discretizando directamente las fronteras de los rodillos, limitando el estudio a la deformación de gotas bidimensionales.

En el siguiente capítulo presentamos una descripción de los componentes del molino de dos rodillos usados en los estudios experimentales, así como de los flujos que pueden ser generados en este dispositivo.

# Capítulo 2

## El molino de dos rodillos (TRMs)

En este Capítulo doy una descripción detallada de los flujos generados por el molino de dos rodillos y sus principales características. También presento una descripción general del dispositivo experimental en el que se realizaron los experimentos previos y realicé los experimentos complementarios de dinámica de gotas.

### 2.1. Características generales del molino de dos rodillos

El flujo que me interesa estudiar es aquel generado por un molino de dos rodillos (TRMs, por sus siglas en inglés, Two Roll Mills), en el que los cilindros rotan con la misma velocidad y en la misma dirección. El flujo generado es un flujo tipo elongacional con vorticidad considerable. Estos estudios están basados en una solución analítica [60, 61] y en una solución numérica que incluye fronteras cercanas [62]. Al usar estos flujos para estudios de dinámica de gotas, dichas soluciones prescriben los parámetros más relevantes que determinan las condiciones externas de esfuerzos impuestas sobre las gotas. Estas nuevas herramientas, teórica



y numérica, han permitido introducir un nuevo dispositivo experimental, conceptualmente similar al de Bentley y Leal [12] y conocido como el molino de cuatro rodillos (FRMs, por sus siglas en inglés, Four Roll Mills).

El molino de cuatro rodillos [12] cubre una amplia gama de flujos: desde flujos esencialmente elongacionales hasta flujos con vorticidad significativa, pero aún lejanos a los flujos cortantes simples. En cambio el TRMs genera flujos que se acercan monotónicamente a la cinemática de los cortantes simples. Así, el TRMs genera un flujo que es complementario al molino de cuatro rodillos. Para caracterizar dicho flujo, Bentley y Leal [12] introdujeron el parámetro de tipo de flujo  $\alpha$ , éste es una medida relativa de la intensidad de la rapidez de deformación y la vorticidad que hay en el flujo externo (ver Capítulo 1). El intervalo de valores que  $\alpha$  puede tomar es de  $-1 \leq \alpha \leq 1$ . Si el flujo es rotacional puro  $\alpha = -1$ , si el flujo es cortante simple  $\alpha = 0$ , y  $\alpha = 1$  si el flujo es extensional (deformación pura). En el molino de cuatro rodillos los flujos generados están bien caracterizados para valores de  $\alpha$  entre  $0.4 \leq \alpha \leq 1$ . En el molino de dos rodillos  $\alpha$  está determinado por la geometría de los molinos y el intervalo de valores que puede cubrir fácilmente es de  $0 \leq \alpha \leq 0.3$ . Los posibles flujos generados por TRMs, se deben considerar como un tipo de flujo cuya cinemática es diferente a los estudiados hasta ahora y puede aportar información entre esos dos tipos de flujos (flujos elongacionales y cortante simple). La contribución cinemática se debe a la vorticidad significativa presente, que impone una rotación sobre el objeto embebido. El flujo es bidimensional y permite un espectro de posibilidades: en un extremo es similar al flujo cortante simple y cubriendo, en forma continua, hasta condiciones de flujo semejantes al flujo hiperbólico. La relevancia del TRMs en el laboratorio es su capacidad para estudiar sistemas no-newtonianos o sistemas bifásicos –como los aquí presentados– cuyas ecuaciones

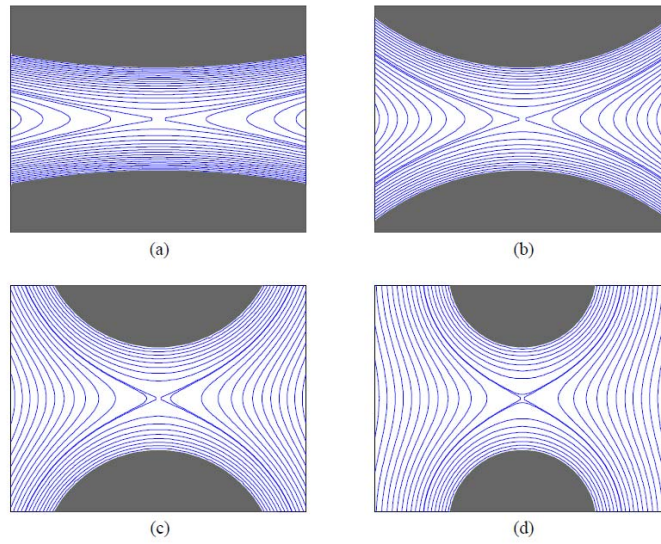


Figura 2.1: Geometrías del molino de dos rodillos que generan diferentes tipos de flujo: a)  $\alpha = 0.03$ , b)  $\alpha = 0.1$ , c)  $\alpha = 0.2$  y d)  $\alpha = 0.3$ . En cada caso se muestran las líneas de corriente obtenidas numéricamente. Figura tomada de [62].

constitutivas son muy sensibles a la deformación de la estructura interna del sistema.

Desde una perspectiva cinemática y a manera de ejemplo, en la figura 2.1, se muestran diferentes geometrías, que generan diferentes tipos de flujo:  $\alpha = 0.03, 0.1, 0.2$  y  $0.3$ ; también se muestran las líneas de corriente correspondientes.

En el flujo generado por el molino de dos rodillos (ver figura 2.1), cuando ambos rodillos rotan a la misma velocidad y en la misma dirección, existe un punto de estancamiento sobre la línea que une los centros de los rodillos, justo a la mitad entre ellos. En el punto de estancamiento las condiciones cinemáticas locales son las de un flujo elongacional con vorticidad significativa. Aún más, alrededor del punto de estancamiento hay gradientes tanto del tipo de flujo como de la rapidez de corte, alcanzando el tipo de flujo su valor máximo en el punto de estancamiento y un valor mínimo en la superficie de los rodillos a lo largo de la línea que une sus centros. En cambio, la rapidez de corte tiene un valor mínimo en el punto

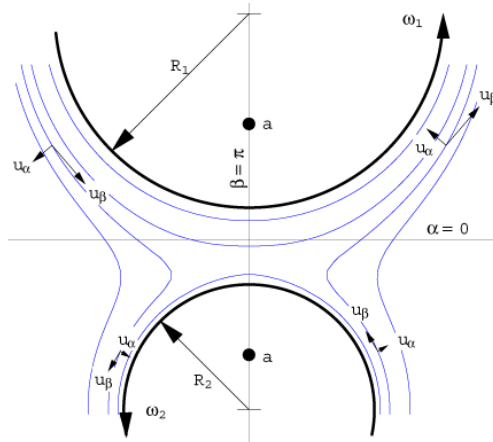


Figura 2.2: Esquema de la geometría general del molino de dos rodillos con cilindros de diámetros diferentes que giran corrotacionalmente. Dicho esquema está representado en coordenadas bipolares ( $\alpha$  y  $\beta$ ).

de estancamiento y un valor máximo sobre la superficie de los rodillos, también lo largo de la línea que une sus centros [62].

Aún en el caso más general de TRMs –de molinos asimétricos– la cinemática local está determinada únicamente por la velocidad angular de los rodillos y su geometría; esto es, el diámetro de los cilindros y su separación relativa. En la Figura 2.2 se muestra el esquema general del TRM, considerando radios de diferente tamaño  $R_1$  y  $R_2$ , y velocidades angulares  $\omega_1$  y  $\omega_2$  también diferentes. La solución analítica [62] es de carácter general y considera la posibilidad de que los rodillos tengan velocidades y radios diferentes. Así, los flujos generados por TRMs no sólo pueden inducir una dinámica (deformaciones y rotaciones) significativamente más compleja que la observada en flujos fuertes generados por el molino de cuatro rodillos o en dispositivos que generan flujos cortantes simples, sino que además las condiciones de flujo no acotado son perfectamente conocidas, con la resolución suficiente, resultado de la solución analítica. Por lo tanto, los flujos generados en este dispositivo

representan una buena opción para estudios no lineales cuyas bondades no están presentes en otras geometrías hasta ahora estudiadas [62].

El estudio de la deformación de una gota en flujos confinados es de gran importancia práctica, en la medida en la que se acerca más a flujos prevalentes en la naturaleza. Particularmente, es de importancia para la industria petrolera, en donde interesa entender la deformación, coalescencia y rompimiento de gotas en un medio poroso, y los fenómenos observados están influenciados en gran medida por la tensión superficial entre los líquidos. Asimismo y debido a la topología de la roca porosa, el flujo ocurre a través de una secuencia de canales cuyas dimensiones están descritas por una distribución aleatoria de tamaños. Los tipos de flujos presentes en esos medios son esencialmente de tipo elongacional y con una gran vorticidad debido a la presencia de fronteras, y por lo tanto, con una cinemática similar a la generada por el molino de dos rodillos.

Este nuevo dispositivo facilita contar con información experimental de la dinámica de una gota bajo condiciones que incluyen efectos de elongación con vorticidad considerable, presencia de fronteras, así como posibles estudios con presencia de surfactantes. Igualmente, es factible variar la dependencia temporal de la rapidez de corte, de modo que diversos tiempos característicos determinan los fenómenos observados. En resumen, las características analíticas y numéricas más importantes del flujo generado por TRMs, que permiten plantear un escenario experimental poco explorado previamente, son las siguientes:

- 1.- Existencia de una solución analítica para un flujo elongacional con vorticidad. Dicha solución prescribe los parámetros más relevantes que determinan las condiciones externas de flujo impuesta sobre las gotas, tales como, la magnitud de la vorticidad, la rapidez de deformación, el cociente de viscosidades y eventualmente la presencia de surfactantes.

2.- La solución analítica sirve de referencia (benchmark) para las predicciones de los flujos mediante las técnicas numéricas.

3.- Usando métodos numéricos (BEM, Boundary Element Methods), he calculado los valores de los parámetros para las mismas geometrías; estas soluciones consideran explícitamente la presencia de fronteras con una gran precisión, y puede analizarse también la interfaz de una gota deformable.

## **2.2. El dispositivo experimental para estudios de dinámica de gotas**

En esta Sección se presentan las características principales del dispositivo experimental para estudios de deformación de gotas. Una descripción detallada de los componentes, de la caracterización de los flujos, su calibración, etc., se puede consultar en el trabajo de Rosas [63]. Los componentes del sistema experimental son:

- Sistema óptico
- Celda de flujo
- interface para control de motores
- Iluminación y baño térmico

### **2.2.1. Sistema óptico**

El sistema óptico consiste en:

- Un zoom telecéntrico Navitar motorizado, con una magnificación máxima de 12X
- Un adaptador óptico Navitar 1-61390 con una magnificación de 2X
- Una cámara CCD Sony IEEE 1394, modelo XCD-X700.

El sistema óptico tiene dos propósitos principales: (a) controlar la posición del centro de masa de la gota durante los experimentos, proporcionando una secuencia de imágenes en tiempo real para el esquema de control con el fin de mantener la gota en la región del punto de estancamiento y (b) una vez que el experimento está en marcha, capturar y guardar las imágenes del proceso de deformación para su análisis posterior.

### **2.2.2. Celda de flujo**

El Laboratorio de Reología-Óptica del IIM-UNAM cuenta con dos celdas de flujo con geometrías diferentes denominadas TRM-A y TRM-B. Con estas celdas se cubre el intervalo completo de valores del parámetro del tipo de flujo en el punto de estancamiento:  $[0.03, 0.3]$ . Cada celda tiene cinco pares de cilindros de diferente diámetro, pero la distancia ( $de$ ) entre los ejes de los cilindros es fija. Las distancias entre los ejes de los cilindros de las celdas TRM-A y TRM-B son de 34.00 mm y 52.00 mm respectivamente. Los resultados que aquí reporto se obtuvieron con la celda TRM-B, así que, en adelante, sólo me refiero a ésta última. La Tabla 2.1 lista los valores de los parámetros geométricos, así como los valores analíticos del tipo de flujo para cada una de las geometrías de la celda utilizada en los experimentos. Estos parámetros proceden de una caracterización previa [63].

Geometría	cilindro	Diámetro ( $2R$ ) (mm)	Gap	Valor tipo de flujo(analítico)
A	1	41.037	10.9	0.12
	2	41.035		
B	1	42.909	9.1	0.1
	2	42.905		
C	1	47.17	4.8	0.05
	2	47.18		
D	1	49.03	3	0.03
	2	49.02		

Tabla 2.1: Características de la geometría TRM-B,  $de$  es la distancia entre los ejes de los cilindros, el gap está dado por  $gap = de - 2R$ .

La celda de flujo está hecha de aluminio anodizado negro para minimizar los reflejos de luz internos. Este cuerpo principal tiene unos canales alrededor de la pared vertical exterior por los que circula un líquido a temperatura controlada y así mantiene estable la temperatura de los fluidos. La celda tiene tres ventanas ópticas, dos laterales (una a cada lado, a lo largo del eje de visualización) y una en la parte inferior. En la tapa superior tiene una ventana de acrílico desmontable que facilita la iluminación. Un esquema del interior de la celda se muestra en la figura 2.3.

La Figura 2.4 es una representación de la celda que muestra los canales y conectores del canal de enfriamiento.

La Figura 2.5 muestra dos vistas completas de la celda de flujo, la parte óptica, los motores, los CCD's y los soportes en los se montan la celda de flujo descrita antes y el sistema de adquisición de imágenes.

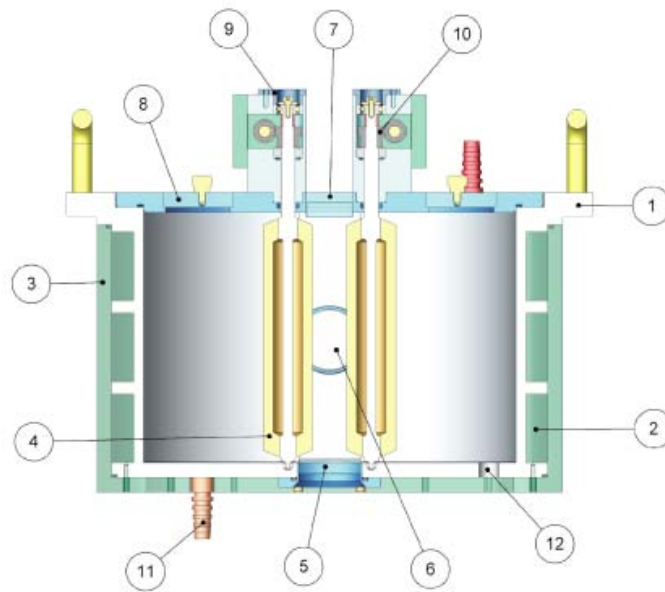


Figura 2.3: Sección de la celda de flujo TRM-B. (1) Cuerpo principal de la celda, (2) Canal de enfriamiento, (3) Cubierta externa, (4) Cilindro hueco, (5) Ventana inferior, (6) Ventana lateral, (7) Ventana superior, (8) Cubierta con ventana de acrílico, (9) Soporte de un cilindro, (10) Mecanismo de engranaje, (11) Conector al canal de enfriamiento; (12) agujero-drenaje.

### 2.2.3. Control de motores mediante una computadora

El sistema de adquisición de datos consiste en una estación de trabajo HP XW4300 con una tarjeta PCI SERCOS para los motores y una tarjeta de comunicación tipo Firewire para el sistema de captura de imágenes. Los motores Kollmorgen AKM-11B tienen una potencia de 125 W, con poca inercia, y son alimentados de las señales de desplazamiento por un controlador SERCOS SERVOSTAR 300. El controlador SERCOS se comunica a través de fibras ópticas con los controladores externos de los motores operando el movimiento de estos últimos de forma individual. La comunicación entre los controladores de movimiento y la PC es a través de una tarjeta de interfaz PCI.

Cada cilindro es accionado por un motor y acoplado por un mecanismo de engranaje



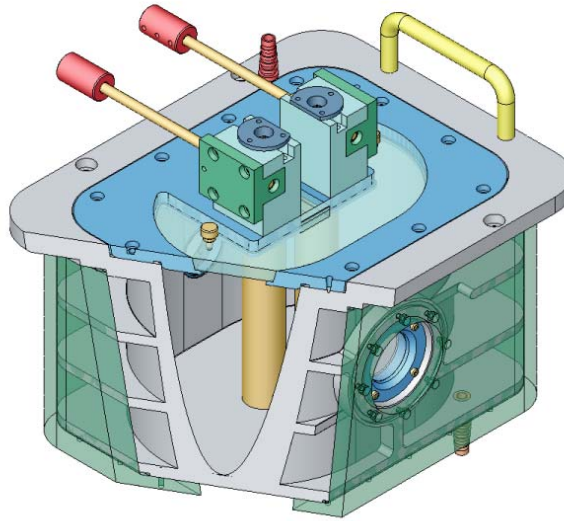


Figura 2.4: Sección de la celda de flujo, donde pueden observarse los canales de enfriamiento.

helicoidal. La estabilidad para mantener una rapidez de corte es mejor que 0.2% y depende principalmente de la precisión de los sistemas-motores para generar la velocidad de rotación necesaria. El control de los motores se puede hacer utilizando el software BASIC Moves Development Studio, proporcionado por Kollmorgen o mediante archivos API (Application Programming Interface) incorporados al programa de Visual C++ que se desarrolló para estos experimentos. El software BASIC Moves Development Studio se utilizó sólo para la correcta configuración de los motores y controladores o para realizar pruebas básicas de verificación.

#### **2.2.4. Iluminación y baño térmico**

La iluminación se realiza desde la parte superior de la celda usando una fibra óptica para guiar la luz de la lámpara hacia la celda de flujo. La fuente de luz es de halógeno

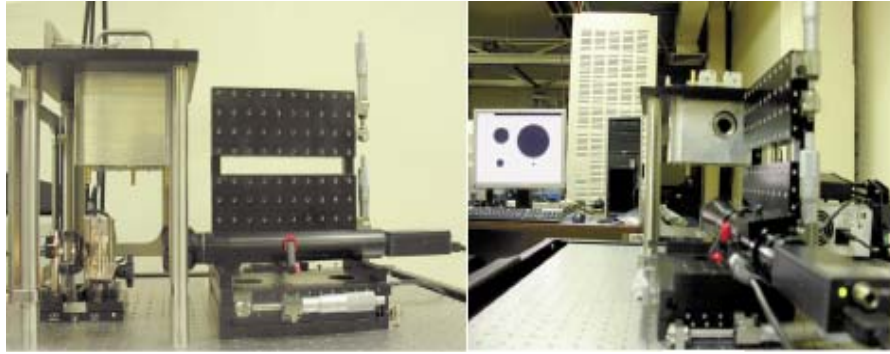


Figura 2.5: Imágenes del sistema completo de la celda de flujo del molino de dos rodillos. La imagen de la izquierda muestra una vista lateral y la de la derecha muestra una vista posterior.

(Dolan-Jenner modelo MH 100) su intensidad se controla a través de un iris manual.

Para el control de la temperatura de la celda y los fluidos se utilizó un baño térmico RM6 LAUDA. La entrada y la salida del baño se conectan a la entrada y a la salida del canal de enfriamiento, véase figura 2.3. La temperatura se mantiene constante dentro de  $\pm 0.1K$ .

La caracterización experimental de los flujos y su calibración, la determinación experimental del punto de estancamiento, el control de las velocidades angulares de los motores, así como el sistema de control de la gota, han sido objetos de estudio en trabajos previos [63].

### 2.2.5. Procedimiento experimental

El experimento consiste en introducir una gota usando una jeringa que transporta la gota de interés –previamente embebida en el líquido exterior– a la región central entre los rodillos del molino. Entonces, usando el programa de control en modo manual, la gota se reposiciona de modo que su centro de masa esté dentro de la zona de tolerancia del punto de

estancamiento. Subsecuentemente, se activa el control automático que mantiene a la gota en la vecindad del punto de estancamiento y aplica el algoritmo de captura. El experimento puede llevarse a cabo manteniendo la gota bajo las condiciones de flujo pre-establecidos (rapidez de corte). Todo el experimento es vídeo grabado para su análisis posterior. En el punto de estancamiento, la gota se puede deformar bajo diferentes valores de rapidez de corte. La velocidad de corte aplicada inicialmente es un valor pequeño, y una vez que el experimento ha durado lo suficiente –y la gota ha alcanzado un estado estacionario de deformación– el flujo se detiene; inmediatamente después, la gota deformada recupera lentamente su forma esférica. Para un nuevo experimento, se establece un valor más alto de rapidez de corte y el procedimiento se repite. Este procedimiento, puede llevarse a cabo varias veces hasta que la rapidez de corte sea lo suficientemente fuerte para causar la ruptura de la gota. De esta manera, se obtiene un archivo por cada experimento con las imágenes de la deformación, como función del tiempo y para la rapidez de corte impuesta. Cada archivo corresponde a una gota específica, con diámetro conocido. Con estos datos, los parámetros de la deformación se obtienen mediante un análisis de imagen de los archivos generados en los experimentos.

Para cada prueba, el archivo correspondiente consiste en una lista que contiene: todos los cuadros (frames), el estatus del control, así como los valores de las variables de los motores como función del tiempo. Estos datos permiten conocer cuándo se inicia exactamente el flujo y comienza el proceso de deformación, y cuando exactamente se detiene el flujo. El análisis de imágenes para la evaluación de los parámetros de deformación se lleva a cabo utilizando un programa muy similar a aquel usado durante la parte de control. Un filtro de promediado se aplica preliminarmente a la imagen para la reducción de ruido. El contorno de la gota se resalta mediante la aplicación del algoritmo de detección de bordes de Canny. Posteriormente,

se calculan los dos semiejes  $L$  y  $B$  de una elipse equivalente que tenga la misma área, así como el mismo primer y segundo momento de área. El programa analiza cada fotograma del archivo y genera una lista con las coordenadas del centro de masa, la longitud de los semiejes  $L$  y  $B$ , y el ángulo de orientación  $\theta$ . Posteriormente se calcula el parámetro de deformación de Taylor  $D$ , y también se pueden guardar las imágenes en el formato estándar \*.bmp. Los datos obtenidos durante el procesamiento de las imágenes están en píxeles, pero dado que la relación entre distancia (mm) y número de píxeles es fija y conocida y sabiendo que el video se toma a una velocidad de 15 fps, es muy fácil tener estos datos en unidades de milímetros y segundos.

Para estudiar el efecto de las fronteras, con una geometría fija del molino, el procedimiento experimental descrito antes, se repite incrementando gradualmente el tamaño de las gotas; los líquidos utilizados para el fluido exterior y de la gota se mantienen sin cambio. De esta manera es posible estudiar la deformación de gotas de diferente tamaño bajo las mismas condiciones de flujo.

### **2.2.6. Propiedades de los fluidos**

Los experimentos se llevaron a cabo para dos sistemas de fluidos, variando la relación de viscosidad  $\lambda$ : (a) un sistema con un cociente de viscosidades pequeño ( $\lambda < 1$ ) y (b) un sistema con un cociente de viscosidades grande ( $\lambda > 1$ ). En ambos casos, el fluido de suspensión utilizado fue el DMS T35, un polidimetilsiloxano (PDMS) de Gelest Inc., con una viscosidad medida  $\mu = 5.1$  Pa·s (51 Poise) y una densidad de  $\rho = 0.973$  g/ml a  $25^\circ\text{C}$ , filtrada a través de un tamiz con tamaño de poro de 3 micras. Para el sistema de cociente

de viscosidades pequeño, la gota es de aceite de canola vegetal con una viscosidad medida  $\mu = 62 \text{ mPa}\cdot\text{s}$  (0.6 poise) y una densidad  $\rho = 0.917 \text{ g/ml}$  a  $25^\circ\text{C}$ . El cociente de viscosidades para este sistema es de  $\lambda = 0.012$  y la tensión interfacial es de  $2.7 \text{ mN/m}$ . Para el sistema de cociente de viscosidad grande, la gota fluido es de PolyIsobutylene por Polysciences Inc., con una viscosidad  $\mu = 80 \text{ Pa}\cdot\text{s}$  (800 poises) y una densidad de  $\rho = 0.92 \text{ g/ml}$  a  $25^\circ\text{C}$ . El cociente de viscosidades para este sistema es de  $\lambda = 16$  y la tensión interfacial correspondiente de  $3.5 \text{ mN/m}$ . Todos los experimentos se realizaron a  $25^\circ\text{C} \pm 0.1^\circ\text{C}$ .

En este trabajo, también presento resultados de simulaciones numéricas de deformación de gotas en flujos generados por TRM. Los resultados numéricos cubren un intervalo amplio para el cociente de viscosidades y el número capilar, tanto para condiciones de flujo ilimitado –en el cual los rodillos están alejados de la gota y es válida una aproximación de flujo lineal– como para condiciones en los que las paredes de los rodillos muestran efectos sobre la deformación de la gota. Dichos resultados numéricos fueron comparados con resultados experimentales obtenidos previamente [63] y con resultados propios de este trabajo. Aquí presento únicamente información para un flujo con  $\alpha = 0.03$  (véase figura 2.1, que corresponde a la geometría D, de la Tabla 2.1); se trata de un flujo cercano al cortante simple, pero que tiene diferencias dinámicas sustanciales, pues como hemos dicho antes, alrededor del punto de estancamiento hay gradientes en el tipo de flujo y en la rapidez de corte. En el siguiente capítulo haremos una exposición detallada de las ecuaciones gobernantes, su formulación integral así como su solución numérica mediante la implementación del método de elemento de frontera.

## Capítulo 3

# El método de elemento de frontera y su implementación para el estudio de dinámica de gotas.

El problema que aquí nos ocupa involucra el movimiento de dos (o más) fluidos inmiscibles que están separados por un interfaz. Dicho fenómeno está presente en muchos problemas de interés práctico, que son especialmente difíciles de describir porque la posición y la forma de la interfaz no se conocen *a priori* y cambian como respuesta al movimiento de los dos fluidos. Esto es, en principio, las ecuaciones de Navier-Stokes pueden describir la dinámica de ambos líquidos (suponiendo que cada uno es newtoniano, con su propia viscosidad y densidad) e igualmente se pueden definir las condiciones de frontera aplicables en la interfaz, pero, la *forma* de ésta no se puede especificar en todo momento. Tales problemas se conocen como problemas de frontera libre [64].

Los problemas de frontera libre, que involucran gotas viscosas en flujos lentos externos han recibido mucha atención debido a su importancia práctica en varios campos. En la mayor parte de los artículos de la literatura científica en este campo se ha estudiado la dinámica de gotas en flujos cortantes simples y elongacionales puros (ver Stone [2] y Briscoe et al. [23]), pero pocos han considerado el efecto de la vorticidad en condiciones de flujo limitadas. El trabajo de Bentley y Leal [11] es particularmente importante porque involucra un flujo bidimensional ilimitado elongacional con vorticidad significativa.

Para describir el campo de flujo generado por la presencia de una interfaz, se debe considerar el flujo en cada lado del interfaz por separado y después se requieren condiciones de acoplamiento apropiadas para la velocidad y las fuerzas sobre la superficie. En las siguientes secciones se presentan las ecuaciones gobernantes y las condiciones en la interfaz. Para las gotas o partículas de dimensiones pequeñas sumergidas en un líquido altamente viscoso, es posible despreciar los efectos de inercia y una solución de flujo lento es útil para estudiar la dinámica de su deformación o rompimiento. En otras palabras, en el límite de número de Reynolds pequeños, el movimiento de fluidos incompresibles es gobernado por las ecuaciones de Stokes y la de continuidad.

En este Capítulo, presento la ecuación de Stokes –que gobiernan la dinámica de los llamados flujos lentos, isotérmicos, incompresibles y cuya ecuación constitutiva es la de un líquido newtoniano. Estas ecuaciones se obtienen a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes y son válidas, siempre que los efectos inerciales sean muy pequeños. Dichos efectos son cuantificados mediante el número adimensional, el número de Reynolds  $Re$ , definido como  $Re = (\rho ul/\mu)$ , donde  $u$  y  $l$  son la velocidad y la longitud características respectivamente. Por lo que hablar de flujos de Stokes (o flujos lentos) es equivalente a decir que se trata de flujos para los que el

número de Reynolds es muy pequeño  $Re \ll 1$ . Enseguida propongo una formulación integral apropiada para el tratamiento de líquidos con fronteras libres (deformables), apropiada en el caso de fluidos bifásicos y que permite estudiar la dinámica de una gota inmersa en otro fluido. Y para estudiar los casos de dinámica de fluidos bifásicos en presencia de fronteras sólidas, apropiada para el estudio de la deformación de gota en medios confinado, presento también la generalización de la formulación integral; en todos los casos se dan detalles del método de elemento de frontera (BEM, por sus siglas en inglés) para resolver numéricamente dichas formulaciones.

### 3.1. Ecuaciones gobernantes para flujos de Stokes

En esta primera parte del trabajo se considera la deformación de una gota inmersa en otro fluido ilimitado, las fuerzas inerciales se asumen insignificantes, que se cumple siempre que la viscosidad es grande o las escalas de longitud son pequeñas [65]. La dinámica está prescrita por las ecuaciones de Stokes y la de continuidad.

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{b} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad \text{y} \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.2)$$

donde  $\mathbf{u}$  es la velocidad,  $p$  es la presión,  $\mu$  y  $\rho$  son la viscosidad y la densidad, respectivamente,  $\mathbf{b}$  es la fuerza de cuerpo y  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de esfuerzos modificado dado por



$$\boldsymbol{\sigma} = -(p - \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T). \quad (3.3)$$

Algunas propiedades de las ecuaciones de Stokes son:

- Las ecuaciones de Stokes establecen que la presión, las fuerzas viscosas y las fuerzas de cuerpo están balanceadas en todo momento. Sin embargo, puede ocurrir una evolución temporal cuasi-estática debida al movimiento de la frontera o variaciones en las condiciones de frontera.
- La estructura instantánea del flujo depende únicamente de la configuración de la frontera –en ese momento– y de las condiciones sobre ésta, y es independiente de la historia de movimiento.
- No hay concentración de vorticidad en los flujos de Stokes y además la magnitud de la vorticidad alcanza valores extremos únicamente en las fronteras del flujo.

## 3.2. Ecuaciones integrales de frontera

La formulación integral de frontera para flujos de Stokes fue desarrollada teóricamente por Ladyzhenskaya [66] dentro del esquema de potenciales hidrodinámicos, pero fue Brebbia [67] quien formalizó el método de ecuaciones integrales de frontera (BIEM, por sus siglas en inglés) e introdujo la terminología método de elemento de frontera (BEM).

### 3.2.1. Funciones de Green

Una característica del método de elemento de frontera es el uso de soluciones fundamentales, las cuales son soluciones analíticas –en el espacio libre– de las ecuaciones diferenciales gobernantes bajo la acción de fuentes puntuales. El hecho de que se utilicen soluciones exactas (cuando existen) es una de las ventajas para usar BEM.

Las funciones de Green para flujos de Stokes proveen los campos de velocidad y presión que satisfacen la ecuación de continuidad. La ecuación de Stokes “singularmente forzada” es

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{b} \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}, \quad (3.4)$$

donde  $\mathbf{b}$  es el vector de fuerza de cuerpo,  $\mathbf{x}_0$  es el punto donde actúa la fuerza puntual –y es llamado polo o fuente puntual–, su posición es arbitraria y  $\delta_D$  es la función delta –bidimensional o tridimensional, según sea el problema [68]. Físicamente, la función de Green “genera” un flujo debido a una fuerza puntual localizada en  $\mathbf{x}_0$ , cuya dirección y magnitud son dadas por  $\mathbf{b}$ , en ausencia o presencia de fronteras. El punto  $\mathbf{x}$  es el punto de observación. Las funciones de Green son las soluciones fundamentales o propagadores.

Las soluciones para los campos de velocidad y presión de la Ec. 3.4 están dados por [68]

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{1}{C_D \pi \mu} \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{b} \quad (3.5)$$

y

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{C_D \pi} \mathbf{p}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{b},$$

donde  $\mathbf{G}$  es el kernel de las funciones de Green,  $\mathbf{p}$  es el vector de presión y  $C_D$  es un coeficiente que denota la dimensionalidad del flujo y está dado por

$$C_D = \begin{cases} 4 & \text{para flujos 2-D} \\ 8 & \text{para flujos 3-D} \end{cases} .$$

El tensor de esfuerzos está dado por

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{C_D \pi} \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{b}, \quad (3.6)$$

donde  $\mathbf{T}$  es un tensor de esfuerzos simétrico de rango 3:

$$T_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = -\delta_{ik} p_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) + \frac{\partial G_{ij}}{\partial x_k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) + \frac{\partial G_{kj}}{\partial x_i}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0). \quad (3.7)$$

Las funciones de Green se clasifican dependiendo de la topología del dominio de flujo en tres grupos: (a) Funciones de Green en el espacio libre para un flujo ilimitado, (b) Funciones de Green para un flujo infinito o semi-infinito limitado por una superficie sólida y (c) Funciones de Green para un flujo interno que está confinado por superficies sólidas [69]. Para los grupos (b) y (c) se requiere, por un lado, que las funciones de Green se hagan cero sobre las fronteras internas o externas y, por otro lado, que dichas funciones modificadas reduzcan el número de condiciones de frontera que deben imponerse en aplicaciones de frontera integral, simplificando por lo tanto el problema.

Las funciones de Green en el espacio libre, también llamadas *Stokeslet* o tensores de Oseen-Burger son

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \begin{matrix} -\delta_{2D} \ln r + \frac{\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}}}{r^2} & 2D \\ -\frac{\delta_{3D}}{r} + \frac{\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}}}{r^3} & 3D \end{matrix}, \quad (3.8)$$

donde el subíndice  $D$  en  $\delta$  se refiere a la dimensión de la función delta,  $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ , y  $r = \|\hat{\mathbf{x}}\|$ .

Los campos de presión asociados están dados por

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \begin{cases} 2\frac{\hat{\mathbf{x}}}{r^2} & 2D \\ 2\frac{\hat{\mathbf{x}}}{r^3} & 3D \end{cases}, \quad (3.9)$$

y los campos de esfuerzos o *Stresslet* son

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \begin{cases} -4\frac{\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}}}{r^4} & 2D \\ -6\frac{\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}}}{r^5} & 3D \end{cases}. \quad (3.10)$$

### 3.2.2. Representación integral de las ecuaciones de Stokes

Para dos campos de velocidad solenoidales  $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$  y  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}})$  y que son solución de la ecuación de Stokes, el teorema de reciprocidad de Lorentz, establece que

$$\nabla \cdot (\hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{u} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = 0. \quad (3.11)$$

Esto es, con el conocimiento de  $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$  es posible calcular una nueva solución  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}})$ .

Identificando a  $\hat{\mathbf{u}}$  and  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  con la Ec. 3.5 y Ec. 3.6, sustituyéndolas en el teorema de Lorentz

Ec. 3.11, y eliminando el vector arbitrario  $\mathbf{b}$ , entonces

$$\nabla \cdot (\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) - \mu \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)) = 0. \quad (3.12)$$

Seleccionando un volumen de control  $V$  que está delimitado por una superficie cerrada  $S$  e integrando la Ec. 3.12 sobre  $S$  y usando el teorema de divergencia, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\int_S [\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) - \mu \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)] \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} -C_D \pi \mu \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V, \quad (\text{a}) \\ -\frac{C_D}{2} \pi \mu \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S, \quad (\text{b}) \quad ; \quad (3.13) \\ \mathbf{0} & \mathbf{x}_0 \notin V, \quad (\text{c}) \end{cases}$$

donde  $\mathbf{n}(\mathbf{x})$  es un vector normal que apunta hacia dentro del volumen de control  $V$ .

Así, el flujo queda expresado en términos de –la Ecuación 3.13– dos distribuciones de singularidades en las fronteras que incluyen las funciones de Green  $\mathbf{G}$  y los tensores de esfuerzos asociados  $\mathbf{T}$ . Las densidades de esas distribuciones son proporcionales a la distribución de valores de la fuerza superficial y la velocidad en la frontera. La primera distribución está dada por el primer término en el lado izquierdo de la Ec 3.13 y se denomina potencial de capa simple (*single-layer potential*), mientras que la segunda distribución está dada por el segundo término y se le conoce como potencial de capa doble (*double-layer potential*). El potencial de capa simple representa una distribución en la frontera de fuerzas puntuales de magnitud  $-\mathbf{f}$ , mientras que el potencial de capa doble representa la suma de una distribución

de fuerzas puntuales más una distribución de dipolos simétricos puntuales.

Las Ecuaciones 3.13 prescriben el campo de velocidad  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  en cualquier punto dentro o fuera de un elemento de volumen del fluido o sobre la frontera cuando la velocidad  $\mathbf{u}(\mathbf{x}_S)$  y la tracción  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}_S) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f}$  se conocen sobre la superficie limitante. Para puntos sobre la frontera  $S$ , ésta es una ecuación integral de Fredholm de segundo tipo para la velocidad  $\mathbf{u}(\mathbf{x}_S)$  y una de primer tipo para la tracción  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}_S) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f}$ . Finalmente, la Ec. 3.13(c) es una identidad útil para el desarrollo de ecuaciones integrales con un número mínimo de incógnitas.

Los núcleos –kernels–  $\mathbf{G}$  y  $\mathbf{T}$  tienen singularidades integrables en  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_S$  y por tanto es necesario hacer la integración numérica considerando este hecho. Un procedimiento común consiste en definir una región alrededor de la singularidad y hacer una integración analítica local, el otro procedimiento consiste en sustraer la singularidad directamente en la aproximación numérica de la integral.

La Ecuación 3.13(b) impone una restricción matemática entre las distribuciones de las velocidades en la frontera y las fuerzas de superficie. Físicamente, esta restricción implica que las velocidades en la frontera y las fuerzas de superficie no se especifican independientemente o de manera arbitraria, sino que están prescritas de manera tal que la Ec. 3.13(b) se satisface [68]. Por lo tanto, si la velocidad de frontera  $\mathbf{u}_S(\mathbf{x})$  se conoce sobre  $S$ , la Ec. 3.13(b) se reduce a una ecuación integral de Fredholm del primer tipo para las fuerzas superficiales en la frontera:

$$\int_S \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}) = -\frac{C_D}{2} \pi \mu \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) + \mu \mathbf{I}^D(\mathbf{x}_0), \quad (3.14)$$

donde  $\mathbf{I}^D(\mathbf{x}_0)$  representa el potencial de capa doble que se conoce, esto es

$$\mathbf{I}^D(\mathbf{x}_0) = \int_S^{PV} \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \, dS(\mathbf{x}), \quad (3.15)$$

donde el superíndice  $PV$  indica el valor principal del potencial de capa doble, definido como el valor de la integral impropia de capa doble cuando el punto  $\mathbf{x}_0$  está justo sobre  $S$  [68].

### 3.2.3. Implementación numérica de BEM

Los pasos requeridos para la implementación numérica de BEM son los siguientes:

1. Discretización del dominio  $S$  de la ecuación integral; dicho dominio se traza con un conjunto de  $N$  puntos marcadores o nodos, utilizados para aproximar  $S$  mediante un conjunto de  $N$  elementos de frontera definidos respecto de los nodos.
2. La velocidades de frontera  $\mathbf{u}$  desconocidas (o las fuerzas superficiales  $\mathbf{f}$ ) sobre cada elemento de frontera se aproximan usando expresiones de polinomios truncados en términos de las variables de superficie bien definidas. En nuestro caso, se supone que la función de frontera desconocida es constante sobre cada elemento; por lo tanto, hay un conjunto de  $M$  coeficientes igual al número de elementos  $N$ .
3. La función desconocida se sustituye en la ecuación integral y los  $M$  coeficientes se extraen de los potenciales de capa simple y de capa doble. De esta manera una ecuación integral se convierte en una ecuación algebraica que involucra  $M$  coeficientes. Los factores que multiplican esos coeficientes son las integrales de capa simple y capa doble sobre los elementos de frontera.

4. Las expansiones locales de los coeficientes se calculan usando el método de colocación.

En éste se calcula la ecuación integral discretizada en los  $M$  puntos de colocación sobre la frontera. Como resultado, se tiene un sistema algebraico lineal de  $M$  ecuaciones para los coeficientes de la expansión local. Usando la Ec. 3.14 y estableciendo el sistema de ecuaciones para las incógnitas, el método de colocación permite el cómputo de las variables de frontera desconocidas. El principio de colocación requiere la localización de los puntos de “carga” secuencialmente en todos los nodos de la discretización de tal manera que el dominio de la variable en esos puntos coincide con el valor nodal. Debido a que los polinomios —sean lineales o de orden alto— para las funciones de forma llevan a nodos que pertenecen a más de un elemento, es útil introducir un número de nodos global ( $n = 1, \dots, N$ ) el cual no depende del elemento.

5. Finalmente, el sistema algebraico lineal de ecuaciones se resuelve para los  $M$  coeficientes de las expansiones locales. En general, el sistema de ecuaciones es denso y antisimétrico.

### 3.2.4. Discretización espacial de la ecuación integral de Fredholm en 2D

Para discretizar la Ec. 3.14, se reescribe usando notación indicial para coordenadas cartesianas en el caso bidimensional ( $j = 1, 2$ ), obteniéndose:

$$\begin{aligned} \int_C f_i(\mathbf{x}) G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dl(\mathbf{x}) = \\ = -2\pi\mu u_j(\mathbf{x}_0) + \mu \int_C^{PV} u_i(\mathbf{x}) T_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) n_k(\mathbf{x}) dl(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.16)$$



donde  $\mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ . Entonces,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \int_{C^n} f_i(\mathbf{x}) G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dl(\mathbf{x}) &= \\ &= -2\pi\mu u_j(\mathbf{x}_0) + \mu \sum_{n=1}^N \int_{C^n}^{PV} u_i(\mathbf{x}) T_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) n_k(\mathbf{x}) dl(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Usando un valor medio local para  $f_i$  y  $u_i$  sobre el segmento  $C^n$  como el valor aproximado para cada elemento, la Ecuación anterior puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N f_i^n \int_{C^n} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dl(\mathbf{x}) &= \\ &= -2\pi\mu u_j(\mathbf{x}_0) + \mu \sum_{n=1}^N u_i^n \int_{C^n}^{PV} T_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) n_k(\mathbf{x}) dl(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Utilizando el método de cuadratura de Gauss-Legendre para la integración de la Ec. 3.18 se obtiene,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0) \right) &= \\ &= -2\pi\mu u_j(\mathbf{x}_0) + \mu \sum_{n=1}^N \left( u_i^n q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0) n_k^m \right), \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde  $M$  es el grado de la cuadratura Gauss-Legendre,  $q^n$  es el factor resultante obtenido de la transformación de los límites de integración a la forma canónica para el segmento  $n$ , y  $w_m$  es el factor de peso para el  $\mathbf{x}^m$ -ésimo punto base;  $\mathbf{G}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0)$ ,  $\mathbf{T}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0)$  y  $\mathbf{n}^m = \mathbf{n}(\mathbf{x}^m)$  se evalúan en el  $\mathbf{x}^m$ -ésimo punto base.

Ahora, para cada punto de colocación se tiene una Ec. 3.19 y entonces

$$\sum_{l=1}^N \left[ \sum_{n=1}^N f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) \right) + \right. \\ \left. + 2\pi\mu u_j(\mathbf{x}_0^l) - \mu \sum_{n=1}^N \left( w_i^n q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) n_k^m \right) \right] = 0. \quad (3.20)$$

Por lo tanto, se obtiene un sistema lineal de ecuaciones de  $j \times N \times j \times N$  para las componentes de la fuerza de superficie. Este sistema es denso y asimétrico; y un método numérico general, tales como el método de eliminación de Gauss o el método iterativo de Jacobi se puede usar para resolver dicho sistema.

En la Ecuación 3.20, las integrales son singulares cuando  $l = n$  (el polo  $\mathbf{x}_0^n$  está sobre el elemento  $n$ ) y el método de “remoción de la singularidad” [69] se usa para calcular las integrales singulares. Una vez que se resuelve el Sistema 3.20, se obtiene el campo de velocidad en cualquier punto usando la Ec. 3.13a.

### 3.3. Formulación de BEM para deformación de gotas en campos de flujos fuertes

A continuación abordo la descripción de los problemas llamados de “frontera libre” descritos en la introducción de este capítulo. Dicha descripción considera las condiciones de frontera, tanto de los esfuerzos como de la velocidad, en la interfaz fluido-fluido. Como en el caso anterior se presentan la formulación integrales de las ecuaciones en base a la formulación presentada en la sección anterior. También presento la formulación de la las ecuaciones inte-

grales para el caso de general de una interfaz fluido-fluido en la cercanía de fronteras sólidas. Ambas descripciones representan la base para el estudio numérico de deformación “libre” de gotas y de la deformación de gotas confinadas.

### 3.3.1. Condiciones de frontera en la interfaz

En el estudio de flujos constituidos por dos fluidos no-miscibles, la importancia de la descripción correcta de la interfaz entre los fluidos es significativa por dos razones. Desde un punto de vista cinemático, dicha interfaz delimita la superficie permanente entre dos regiones adyacentes con propiedades físicas distintas, y desde un punto de vista dinámico, ésta es una superficie singular donde existen fuerzas concentradas. Es decir, las fuerzas superficiales que actúan en los dos lados de una interfaz tienen generalmente valores diferentes, lo que hace que exista una discontinuidad en la fuerza superficial  $\Delta \mathbf{f}$ , que depende de las características físicas de los líquidos, de la forma y también de las propiedades termodinámicas de la interfaz. Esta dependencia generalmente se expresa con una relación constitutiva que puede incluir un número de constantes físicas, incluyendo las densidades de los líquidos, la tensión superficial, los módulos superficiales de elasticidad, flexión y de dilatación, entre otros. Se dice que una interfaz es activa cuando  $\Delta \mathbf{f}$  es finita, e inactiva o pasiva cuando  $\Delta \mathbf{f} = \mathbf{0}$ . Un interfaz activa desempeña un papel principal en la determinación de la dinámica del flujo, mientras que es un interfaz pasiva es simplemente transportada por el flujo [70].

### 3.3.2. Continuidad de la velocidad

Considérese una interfaz  $S$  entre dos líquidos. Los líquidos 1 y 2 tienen viscosidades  $\mu_1$  y  $\mu_2$ , y densidades  $\rho_1$  y  $\rho_2$ . Además, la ecuación Stokes es válida para cada líquido. La continuidad de la velocidad en el interfaz  $S$  corresponde a la condición de frontera de no-deslizamiento y tiene la forma

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} \quad \text{sobre } S, \quad (3.21)$$

donde la velocidad en el fluido 1 es  $\mathbf{u}$ , y la velocidad en el fluido 2 es  $\hat{\mathbf{u}}$ .

### 3.3.3. Condición cinemática.

La condición cinemática presupone que la interfaz no es una fuente ni un sumidero de masa. Por consiguiente, la componente normal de la velocidad en  $S$ , en ambos líquidos debe ser igual a la velocidad normal en la superficie. Puesto que la superficie  $S$  se mueve y deforma como función del tiempo, la condición cinemática se puede expresar bajo la relación entre  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$  o  $\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}$  (donde  $\mathbf{n}$  es el vector normal a  $S$ ). Para expresar esta relación en forma matemática, consideremos una función  $F(\mathbf{x}, t)$  que representa la forma de la interfaz como el conjunto de puntos  $\mathbf{x}$  tal que  $F(\mathbf{x}, t) \equiv 0$ . Entonces, el vector normal  $\mathbf{n}$  a  $S$  definido en términos de  $F(\mathbf{x}, t)$  queda como [70]:

$$\mathbf{n} = \pm \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|}, \quad (3.22)$$

donde el signo se elige, por convención, y  $\mathbf{n}$  es un vector unitario positivo cuando apunta de  $S$  hacia el fluido exterior. Ahora, dado que  $F$  es una función escalar, igual a cero en cualquier punto de la interfaz –su derivada material “siguiendo” cualquier punto material sobre la superficie es igual a cero–, esto es,

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0, \text{ para cualquier punto sobre } S. \quad (3.23)$$

Sustituyendo la Ec. 3.22 en la Ec. 3.23, la condición cinemática queda como:

$$\frac{1}{\|\nabla F\|} \frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \text{ sobre } S. \quad (3.24)$$

### 3.3.4. Condiciones de los esfuerzos

Puesto que en la interfaz existen esfuerzos, es necesaria una condición de frontera sobre los esfuerzos para determinar completamente tanto el campo de la velocidad como la forma de la interfaz. Un interfaz limpia que no contiene impurezas o surfactantes se caracteriza por una tensión superficial  $\gamma$  –constante e isotrópica– actuando sobre la interfaz. Para obtener una relación entre  $\gamma$  y  $\Delta \mathbf{f}$ , considérese un elemento de área  $\Delta A$  en la interfaz, encerrada por el contorno  $C$ . Entonces, el balance de fuerzas es

$$\iint_{\Delta A} (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n} \, dS + \oint_C \gamma \mathbf{b} \, dl = \mathbf{0}, \quad (3.25)$$

donde el vector unitario  $\mathbf{b}$  está sobre el plano tangente a la interfaz y es normal a  $C$ , ver Figura 3.1.

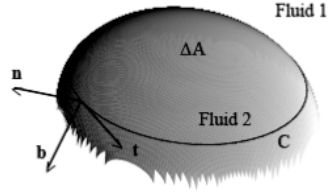


Figura 3.1: Representación de una sección tridimensional de una interface entre dos fluidos.

Usando la identidad  $\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$ , la Ec. 3.25 puede expresarse en una forma equivalente:

$$\iint_{\Delta A} (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_C \gamma \mathbf{n} \times \mathbf{t} \, dl, \quad (3.26)$$

donde  $\mathbf{n}$  y  $\mathbf{t}$  son vectores unitarios normales a la interfaz y tangentes a  $C$ , respectivamente.

Ahora aplicando una variante del teorema de Stokes:

$$\oint_C \mathbf{F} \times \mathbf{t} \, dl = \iint_{\Delta A} (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{F} - \nabla \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) \, dS, \quad (3.27)$$

puede reescribirse la integral de contorno de la Ec. 3.26 en una integral de área, se donde  $\mathbf{F}$  es una función diferenciable definida sobre todo el espacio. Extendiendo el dominio de definición del vector normal  $\mathbf{n}$  y la tensión superficial  $\gamma$  más allá de la interfaz a todo el espacio, tomando  $\mathbf{F} = \gamma \mathbf{n}$ , y usando la Ec. 3.27, obtenemos la siguiente ecuación

$$\oint_C \gamma \mathbf{n} \times \mathbf{t} \, dl = \iint_{\Delta A} (\mathbf{n} \nabla \cdot (\gamma \mathbf{n}) - \nabla(\gamma \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}) \, dS. \quad (3.28)$$

Sustituyendo la Ec. 3.28 en la Ec. 3.26, y notando que  $\nabla \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} \nabla(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{0}$ , se tiene

$$\begin{aligned}
\iint_{\Delta A} \left[ (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \nabla \cdot (\gamma \mathbf{n}) + \nabla(\gamma \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} \right] dS &= \\
= \iint_{\Delta A} \left[ (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n} - \gamma \mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla \gamma \right] dS . & \quad (3.29)
\end{aligned}$$

Dado que la última ecuación es válida para un elemento de área arbitrario  $\Delta A$ , entonces

$$(\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n} = \gamma \mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla \gamma, \quad (3.30)$$

donde  $\mathbf{I} - \mathbf{nn}$  es la componente tangencial del gradiente de la tensión superficial, y  $\mathbf{nn}$  es el producto diádico. El primer y segundo términos en el lado derecho de la Ec. 3.30 expresan discontinuidades en las direcciones normales y tangenciales, respectivamente. Cuando la tensión superficial es uniforme, la componente tangencial es cero y el salto en la tracción interfacial apunta hacia la dirección normal.

Además, la divergencia del vector normal en el lado derecho de la Ec. 3.30 es igual al doble de la curvatura media de la interfaz, denotada por  $\kappa_m$ ,

$$\nabla \cdot \mathbf{n} = 2 \kappa_m. \quad (3.31)$$

Otras ecuaciones constitutivas para la discontinuidad en la tracción interfacial,  $\Delta \mathbf{f} = (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n}$ , fueron propuestas por Aris [71] (Capítulo 10) y por Pozrikidis [68] (Sección 5.5).

### 3.3.5. Parámetros usados en el estudio de la deformación de gotas

A partir de la forma adimensional de la condición de frontera para los esfuerzos, se obtienen dos números adimensionales: el número capilar y el número de Bond. El número capilar  $Ca$  representa el cociente de las esfuerzos viscosos del flujo y la tensión superficial, y está dado por

$$Ca = \frac{r_d \dot{\gamma} \mu_1}{\gamma}. \quad (3.32)$$

El número de Bond  $B$  representa la importancia relativa de diferencia de presión hidrostática comparada con los esfuerzos por la tensión superficial:

$$B = \frac{\Delta p g r_d^2}{\gamma}. \quad (3.33)$$

Estos números adimensionales conjuntamente con el cociente de las viscosidades de la gota y del líquido externo  $\lambda$ , el carácter tensorial del  $\nabla \mathbf{u}$ , la historia del flujo y la forma inicial de la gota, gobiernan la deformación y rompimiento de la gota [1]. El carácter tensorial del  $\nabla \mathbf{u}$  determina el parámetro de tipo de flujo  $\alpha$ , como se explica en la Sec 1.2.2 Así,  $\alpha$  es una medida de “la intensidad del flujo” que hace que las gotas se deformen, mientras que la vorticidad presente en el flujo induce principalmente la rotación de las gotas y puede, entonces, inhibir el rompimiento de la gota. La historia del flujo y la forma inicial de la gota caracterizan totalmente la dinámica de la gota, determinan si los efectos transitorios conducen o no a un eventual rompimiento.

La magnitud de la deformación de la gota se caracteriza mediante el *parámetro de defor-*



*mación de Taylor D*, que es apropiado para caracterizar pequeñas deformaciones y considera que la sección transversal de la gota es elipsoidal. Así  $D$  está definido en términos de la longitud de los semiejes mayor y menor, véase Capítulo 1.

### 3.4. Ecuación integral para una interfaz fluido-fluido

Para el caso de una gota de viscosidad  $\mu_2$  inmersa en un segundo fluido inmisible de viscosidad  $\mu_1$  con un campo de la velocidad  $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$  externo impuesto, presento ahora las ecuaciones integrales para flujo lento. Las condiciones de frontera en la interfaz líquido-líquido  $S_{int}$  requieren una velocidad continua y un balance entre la tracción superficial neta y las fuerzas de tensión interfacial, entonces,

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) \text{ cuando } \|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty, \mathbf{u}_1(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) \text{ para } \mathbf{x} = \mathbf{x}_S \in S_{int}. \quad (3.34)$$

La discontinuidad en los esfuerzos  $\|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\|$ , que considera la diferencia de energías de superficie y de densidad a través de la interfaz, está dada por (la normal  $\mathbf{n}$  apunta hacia el fluido 1)

$$\|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\| = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \gamma \mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla \gamma + \Delta \rho (\mathbf{b} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{n} \quad \text{for } \mathbf{x}_S \in S_{int}, \quad (3.35)$$

donde  $\gamma$  denota la tensión superficial,  $\Delta \rho$  es la diferencia de la densidades, y  $\mathbf{x}_S$ , denota un punto sobre la interfaz. El balance de esfuerzos (Ec. 3.35) incluye una discontinuidad de

esfuerzos normales  $\gamma \mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n}$  proporcional al producto de la tensión superficial y la curvatura local y una discontinuidad tangencial de la tensión,  $-(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla \gamma$  debida a variaciones en la tensión superficial a lo largo de la superficie. Estas variaciones pueden resultar de gradientes de la temperatura o de la presencia de surfactantes en la interfaz. En tales casos, las ecuaciones adicionales de campo determinan el perfil de temperatura o la distribución del surfactante a lo largo de la interfaz. Otros esfuerzos se pueden incluir en la discontinuidad de la condición de frontera.

Aunque la ecuación de Stokes no considera explícitamente la dependencia temporal del campo de flujo, ésta es apropiada para estudios de distorsiones de la interfaz que tienen una dependencia temporal lenta. Por ello, bajo condiciones frecuentes durante la deformación de una gota, la restricción cinemática relaciona los cambios en la posición de la interfaz con la velocidad local. Por ejemplo, la evolución de la interfaz se puede describir en una representación Lagrangiana  $dx/dt = \mathbf{u}(\mathbf{x}_s)$ . Esta suposición cuasi-estática requiere que  $l^2/\nu \ll \tau$ , donde  $\nu$  es la viscosidad cinemática, y  $\tau$  es un tiempo característico para un cambio del flujo o de la geometría –mientras que el término izquierdo corresponde al tiempo requerido para la difusión del momentum hasta una distancia  $l$ . Generalmente,  $\tau = \min[O(\frac{l}{u_\infty}), O(\frac{l\nu}{\sigma})]$ , donde el primer término es un tiempo característico para un flujo externo, y el segundo un tiempo característico de un movimiento de tensión superficial [72]. Para la mayoría de las condiciones de flujo, el valor más grande de las viscosidades se debe utilizar para estas estimaciones. Físicamente, la aproximación cuasiestática significa que el líquido ajusta inmediatamente los cambios que ocurren en la frontera debidos a la rápida difusión de vorticidad.

### 3.4.1. Formulación de la ecuación integral para una interfaz

La formulación de las ecuación integrales son una opción natural para ciertas clase de problemas de flujos de Stokes. El método se puede aplicar tanto a flujos que implican solamente fronteras rígidas –por ejemplo una suspensión de partículas rígidas [73]– o a los problemas de frontera libre. La dificultad principal al resolver problemas de frontera libre es que la posición de la interfaz se desconoce *a priori* y se debe determinar como parte de la solución. Así, el problema de determinar la forma de la interfaz dependiente del tiempo es intrínsecamente no-lineal.

Para describir una interfaz en un campo de flujo, se debe de considerar el flujo en cada lado de la interfaz y las condiciones de frontera apropiadas para las velocidades y las fuerzas de superficie. En general, se requiere la continuidad de la velocidad a través de la interfaz, así como una relación constitutiva para la discontinuidad de la fuerza superficial. Para construir una representación integral de frontera, se necesitan dos ecuaciones integrales de frontera (una para cada campo del flujo en cada lado de la interfaz) que implican la velocidad y la fuerza interfaciales. Una vez que se establecen las condiciones de frontera en la superficie, se obtiene un sistema de ecuaciones integrales para las funciones interfaciales desconocidas.

Consideremos el caso de una gota representada por  $V_2$  en un líquido externo denotado por  $V_1$ , donde la velocidad se hace cero en infinito, como se muestra en la Figura 3.1. El cociente de viscosidades se denota por  $\lambda = \mu_d/\mu_m$ . La Ec. 3.13 se mantiene para  $\mathbf{u}$  en ambos líquidos, y solamente la interfaz  $S_{int}$  líquido-líquido falta por considerarse. Por lo tanto, recordando que  $\mathbf{n}$  está dirigido del fluido 2 al fluido 1, y dado que  $\mathbf{f} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ , las dos ecuaciones se pueden escribir como

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \int_S \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) + \\
& + \frac{1}{C_D \pi} \int_S \mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_1 \notin V_2 \\ \frac{1}{2} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S \\ \mathbf{0} & \mathbf{x}_0 \in V_2 \notin V_1 \end{cases}, \quad (3.36)
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{C_D \pi \mu_2} \int_S \mathbf{f}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) - \\
& - \frac{1}{C_D \pi} \int_S \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \mathbf{x}_0 \in V_1 \\ \frac{1}{2} \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S \\ \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_2 \notin V_1 \end{cases}. \quad (3.37)
\end{aligned}$$

Multiplicando la Ec. 3.37 por  $\lambda$ , y sumando ésta a la Ec. 3.36 se tiene

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \int_S \Delta \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) + \\
& + \frac{1-\lambda}{C_D \pi} \int_S \mathbf{u}_S(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_1 \quad (\text{a}) \\ \frac{1+\lambda}{2} \mathbf{u}_S(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S \quad (\text{b}) \\ \lambda \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_2 \quad (\text{c}) \end{cases}, \quad (3.38)
\end{aligned}$$

donde la discontinuidad en los esfuerzos  $\Delta \mathbf{f} = \mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2 = \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2)$ . Alternativamente, para

problemas con flujos externos impuestos, es más común modificar la Ec. 3.38 en términos de la velocidad interfacial y  $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ . Usando la identidad [72]

$$\int_{V_1} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}^\infty \cdot \mathbf{G} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{u}^\infty) dV = \mathbf{0}, \quad (3.39)$$

la ecuación integral queda como:

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \int_S \Delta \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) + \frac{1-\lambda}{C_D \pi} \int_S \mathbf{u}_s(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_1 \quad (\text{a}) \\ \frac{1+\lambda}{2} \mathbf{u}_s(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S \quad (\text{b}) \\ \lambda \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_2 \quad (\text{c}) \end{cases} \cdot \quad (3.40)$$

La integración numérica se lleva a cabo discretizando la Ec. 3.40(b); estas integrales se calculan usando el método de cuadratura de Gauss-Legendre, dadas por la siguiente ecuación

$$\sum_{l=1}^N \left[ \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \sum_{n=1}^N \Delta f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) \right) - u_j^\infty(\mathbf{x}_0^l) + \frac{1+\lambda}{2} u_j(\mathbf{x}_0^l) - \frac{1-\lambda}{C_D \pi} \sum_{n=1}^N \left( u_i^n q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) n_k^m \right) \right] = 0, \quad (3.41)$$

donde  $M$  es el grado de la cuadratura de Gauss-Legendre,  $q^n$  es el factor de peso resultante que se obtiene de la transformación de los límites de integración a la forma canónica para el segmento  $n$ ,  $w_m$  es el peso para el  $\mathbf{x}^m$ -ésimo punto base y  $N$  es el número de puntos de

colocación. Las funciones  $\mathbf{G}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0)$ ,  $\mathbf{T}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0)$  y  $\mathbf{n}^m = \mathbf{n}(\mathbf{x}^m)$  se evalúan en el  $\mathbf{x}^m$ -ésimo punto base.

Para un flujo externo dado y una interfaz  $S$  conocida, las Ecs. 3.38(b) o 3.40(b) son ecuaciones integrales de Fredholm de segundo tipo con la velocidad interfacial  $\mathbf{u}(\mathbf{x}_S)$  como incógnita, la cual depende del salto en el esfuerzo  $\Delta \mathbf{f}$  a través de la superficie deformable. La discontinuidad en los esfuerzos es función de la forma de la interfaz, depende de la posición, del vector normal y de la curvatura local, como lo indica la Ec. 3.35. Las ecuaciones anteriores son el punto de partida para investigaciones numéricas de un gran número de problemas de frontera libre. Adicionalmente, para una velocidad y forma interfaciales conocidas las Ecs. 3.38(a) y 3.38(c) o las Ecs. 3.40(a) y 3.40(c) determinan los campos de velocidad y presión en puntos que están fuera de la superficie y son útiles para obtener una imagen del campo de flujo completo.

La ventaja de usar esta formulación es doble: (1) El dominio de la integración de la ecuación integral se extiende solamente a  $S$  y es por lo tanto finito, en lugar de extenderse sobre un dominio infinito, como en el problema original; y (2) la dimensionalidad del problema se reduce en uno, haciendo que el costo computacional se incremente en forma moderada para un mayor número de elementos.

### **3.5. La interfaz fluido-fluido cercana a fronteras sólidas**

Las interacciones hidrodinámicas de una partícula con paredes cercanas dependen, de su separación relativa, de la forma, de la orientación y posición de la gota, así como de la geometría de las paredes. Estas condiciones afectan el movimiento y el comportamiento

dinámico de las gotas. El primer efecto debido a la presencia de una pared sólida en la cercanía de una partícula, es incrementar la fuerza de arrastre sobre ésta. Este fenómeno ocurre principalmente porque es necesario que exista un esfuerzo cortante grande para mantener una diferencia (grande) de velocidades entre la partícula y la pared. Hay otros efectos que tienen que ver con la deformación de la gota y más aún con su rompimiento. El tamaño de la gota y su posición relativa respecto a la pared es de particular importancia y esos factores determinan el dominio relativo de efectos de corte o elongacionales del fluido externo sobre la deformación de la gota.

Para flujos generados por TRMs, existe la posibilidad de evaluar los efectos de fronteras cercanas sobre la deformación de gotas. Esto puede significar una ventaja considerable cuando se compara con otros campos de flujo como aquellos generados por FRMs, debido a que para éstos la condición de “flujos bidimensionales” requiere que las gotas sean pequeñas comparadas con el gap entre los cilindros. En contraste, para TRMs no existe esta limitación, por lo que es posible incluir una gota cuyo diámetro sea comparable a la separación entre los cilindros. Los efectos de frontera en gotas viscosas se suelen cuantificar respecto al cociente  $d/H$ , donde  $d$  es el diámetro de la gota esférica estacionaria y  $H$  es la longitud característica del contenedor. En este trabajo, dicho cociente se denomina como el *factor de confinamiento*. En nuestro caso, la longitud característica está dada por,  $g$ , la separación entre los rodillos. De esta manera gotas cuyo tamaño es comparable al gap de los cilindros se consideran gotas confinadas, y se estudiaron numéricamente: Los resultados obtenidos y su comparación con resultados experimentales los presento en el Capítulo 5.

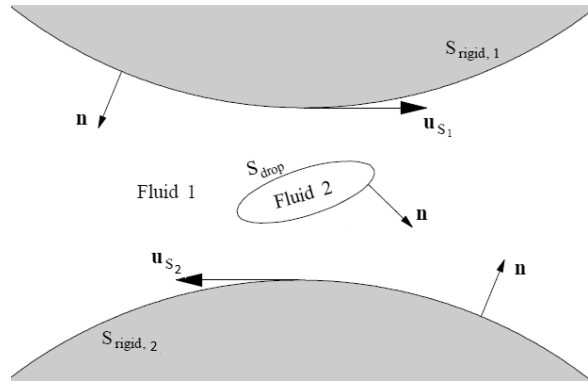


Figura 3.2: Representación de una gota deformada por el flujo generado por el movimiento de dos fronteras sólidas (2RMs)

### 3.5.1. La ecuación integral para una interfaz fluido-fluido confinada

Para evaluar los efectos de frontera –debidos a un flujo elongacional– sobre la deformación de una gota es necesario considerar explícitamente las condiciones de frontera impuestas por las superficies de los cilindros. Por lo tanto, es necesaria una ecuación gobernante para una gota de volumen  $V_2$ , en un campo de flujo generado por fronteras sólidas  $S_{rigid,1}$  y  $S_{rigid,2}$  sobre el fluido 1, con volumen  $V_1$  como se muestra en la Figura 3.2.  $S_{rigid,1}$  y  $S_{rigid,2}$  corresponden a las superficies internas de los cilindros: éstas pueden tener diferentes radios y rotar a diferentes velocidades. El TRMs genera una serie de flujos, para los que los flujos de campo de la rapidez de corte y del parámetro de tipo de flujo son muy diversos.

Las condiciones generales de frontera en las superficies rígidas  $S_{rigid,1}$  y  $S_{rigid,2}$  determinan la posición del punto de estancamiento. Ahora bien, todos los puntos a lo largo de la línea entre los ejes son posiciones posibles y válidas para el punto de estancamiento, pero asociado a la localización del punto de estancamiento existirán gradientes en la rapidez de



corte y del parámetro de tipo de flujo asimétricos, a lo largo de ésta línea. El estudio de la deformación de gotas en flujos no-homogéneos, como los que genera un TRMs no existe en la literatura científica, a pesar de sus potenciales aplicaciones.

La ecuación 3.13 se mantiene para  $\mathbf{u}$  en ambos fluidos, en la interfaz  $S_{int}$  y en la frontera sólida  $S_{rigid}$ . Por lo tanto, recordando que  $\mathbf{n}$  está dirigido del fluido 2 al fluido 1 y de la frontera sólida al fluido 1, usando que  $\mathbf{f} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ , las dos ecuaciones pueden escribirse como

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{C_D \pi \mu_1} \int_S \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \\
& + \frac{1}{C_D \pi} \int_S \mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S_{rigid}, \\ \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_1 \\ \frac{1}{2} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S_{int}, \\ \mathbf{0} & \mathbf{x}_0 \in V_2 \end{cases}, \quad (3.42)
\end{aligned}$$

donde  $S = S_{rigid} \cup S_{int}$ , y

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{C_D \pi \mu_2} \int_{S_{int}} \mathbf{f}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \\
& - \frac{1}{C_D \pi} \int_{S_{int}} \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \mathbf{x}_0 \in V_1 \\ \frac{1}{2} \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S_{int} \\ \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_2 \end{cases}. \quad (3.43)
\end{aligned}$$

Multiplicando la Ec. 3.43 por  $\lambda$ , y sumándola a la Ec. 3.42 se tiene

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \int_{S_{rigid}} \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \\
& + \frac{1}{C_D \pi} \int_{S_{rigid}} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\
& - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \int_{S_{int}} \Delta \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \\
& + \frac{1-\lambda}{C_D \pi} \int_{S_{int}} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \\
& = \begin{cases} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_1 & \text{(a)} \\ \frac{1+\lambda}{2} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S_{int} & \text{(b)} \\ \lambda \mathbf{u}_2(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in V_2 & \text{(c)} \\ \frac{1}{2} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0) & \mathbf{x}_0 \in S_{rigid}, & \text{(d)} \end{cases} \quad (3.44)
\end{aligned}$$

Para el caso de cilindros que giran con velocidades diferentes, la condición  $1/2 \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_0)$  para  $\mathbf{x}_0 \in S_{rigid}$  requiere establecer las velocidades apropiadas en ambas superficies  $S_{rigid, 1}$  y  $S_{rigid, 2}$  del fluido 1, independientemente, como se muestra en la Figura 3.2. Las características del campo de flujo en ausencia del fluido 2 ya se han discutido antes [62]. Para gotas de diámetro pequeño comparadas con el gap entre los cilindros, las predicciones de la dinámica de deformación dada por la Ec. 3.44 está de acuerdo con la predicha por la Ec. 3.38.

La representación discretizada de la ecuación integral para una interfaz fluido-fluido cerca de fronteras sólidas, es decir la discretización de las Ecs. 3.44(b) y 3.44(d), es

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{C_D \pi \mu_1} \sum_{n=1}^{N_{rigid}} f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0) \right) \\
& + \frac{1}{C_D \pi} \sum_{n=1}^{N_{rigid}} u_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0) n_k^m \right) \\
& - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \sum_{n=1}^{N_{int}} \Delta f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0) \right) \\
& + \frac{1 - \lambda_\mu}{C_D \pi} \sum_{n=1}^{N_{int}} u_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0) n_k^m \right) - g(\mathbf{x}_0) u_j(\mathbf{x}_0) = 0, \quad (3.45)
\end{aligned}$$

donde

$$g(\mathbf{x}_0) = \begin{cases} \frac{1+\lambda_\mu}{2} & \mathbf{x}_0 \in S_{int} \\ \frac{1}{2} & \mathbf{x}_0 \in S_{rigid}, \end{cases} \quad (3.46)$$

En la ecuación anterior,  $M$  es el grado de la cuadratura de Gauss-Legendre,  $q^n$  es el factor resultante que se obtiene de la transformación de los límites de integración a la forma canónica para el segmento  $n$ ,  $w_m$  es el peso para el  $\mathbf{x}^m$ -ésimo punto base,  $N_{rigid}$  es el número de elementos en superficie rígida,  $N_{int}$  es el número de elementos en la interfaz fluido-fluido.  $\mathbf{G}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0)$ ,  $\mathbf{T}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0)$  y  $\mathbf{n}^m = \mathbf{n}(\mathbf{x}^m)$  son evaluados en el  $\mathbf{x}^m$ -ésimo punto base.

Ahora, la Ecuación 3.45 se aplica para cada punto de colocación, por lo tanto

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^{N_{\text{col}}} \left[ -\frac{1}{C_D \pi \mu_1} \sum_{n=1}^{N_{\text{rigid}}} f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) \right) \right. \\
& + \frac{1}{C_D \pi} \sum_{n=1}^{N_{\text{rigid}}} u_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) n_k^m \right) \\
& - \frac{1}{C_D \pi \mu_1} \sum_{n=1}^{N_{\text{int}}} \Delta f_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m G_{ij}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) \right) \\
& \left. + \frac{1-\lambda}{C_D \pi} \sum_{n=1}^{N_{\text{int}}} u_i^n \left( q^n \sum_{m=1}^{M+1} w_m T_{ijk}(\mathbf{x}^m, \mathbf{x}_0^l) n_k^m \right) - g(\mathbf{x}_0^l) u_j(\mathbf{x}_0^l) \right] = 0, \quad (3.47)
\end{aligned}$$

donde  $N_{\text{col}}$  es el número de puntos de colocación y  $N_{\text{col}} = N_{\text{rigid}} + N_{\text{int}}$ . Por lo tanto se obtiene un sistema lineal de  $D N_{\text{col}} \times D N_{\text{col}}$  ecuaciones, donde  $D$  es la dimensionalidad del problema. Este sistema de ecuaciones evalúa las componentes  $(i, j = 1, \dots, D)$  de la fuerza de superficie o tracción  $\mathbf{f}$  en cada punto de colocación sobre la superficie rígida y las componentes de la velocidad  $\mathbf{u}$  en cada punto de colocación sobre la interfaz fluido-fluido. De nuevo, este sistema es denso y asimétrico y un método numérico general, tal como el método de eliminación de Gauss o el método iterativo de Jacobi pueden ser usados para resolver dicho sistema.

### 3.6. Solución numérica de las ecuaciones integrales para una gota viscosa en un flujo fuerte

En esta Sección se resumen los procedimientos numéricos estándares para la solución del problema de frontera libre de la deformación de una interfaz. Un procedimiento numérico para la simulación de la evolución de una interfaz, que usa un método integral de frontera,

requiere realizar tres tareas principales: (a) la representación paramétrica de la interfaz, (b) la evaluación de la representación integral o la solución de una ecuación integral para las velocidades interfaciales o para la densidad de un potencial hidrodinámico; y (c) la integración, en el tiempo, de las ecuaciones que gobiernan el movimiento de los puntos de colocación interfaciales y posiblemente la evolución dinámica de funciones superficiales relevantes. En el caso de una tensión de superficial dependiente de la temperatura o de la concentración de surfactante, las funciones dinámicas superficiales relevantes incluyen la temperatura y la concentración del surfactante. Para el caso de una interfaz consistente de una membrana elástica, las funciones dinámicas superficiales relevantes incluyen las coordenadas y la curvatura de la interfaz, en la posición de los puntos de colocación en una configuración de referencia. El método numérico, con las características antes mencionadas, se conoce como método de dinámica interfacial para flujos de Stokes [68].

Llevar a cabo tales tareas, se facilita considerablemente si se usa una interpolación numérica por segmentos, la cual es subyacente al formalismo de método de elementos de frontera. Para el caso de flujos bidimensionales o axisimétricos, la interfaz se representa como una colección de elementos planos, definidos por nodos interfaciales consecutivos, bajo la forma de segmentos rectos, arcos circulares, arcos parabólicos, cúbicos, splines cúbicos o elementos de un orden más alto. Los elementos de los splines cúbicos se describen en forma paramétrica por medio de la interpolación de splines cúbicos para las coordenadas del nodo, donde la interpolación se hace con respecto a la longitud poligonal o curvada del arco. Las características geométricas de la interfaz, incluyendo el vector normal y la curvatura, se siguen de su representación local.

### 3.6.1. Cálculo del vector normal y la curvatura media

El vector unitario normal y la curvatura media de una interfaz –para dos dimensiones o axisimétrica– se puede obtener de la representación paramétrica usando fórmulas estándares de geometría diferencial. Un método simple para calcular el vector normal unitario y la curvatura media de una interfaz tridimensional se obtiene evaluando una integral de contorno. Considérese un área interfacial  $\Delta A$  encerrada por el contorno  $C$  que contiene el punto  $\mathbf{x}_0$ . El vector  $\mathbf{b}$  tangente a  $\Delta A$  está sobre el plano que es normal a  $C$  en un punto como se muestra en la Figura 3.1; entonces,  $\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$ , donde  $\mathbf{t}$  es el vector tangente a  $C$  y  $\mathbf{n}$  es el vector normal al área interfacial. En el límite cuando el contorno  $C$  se contrae al punto  $\mathbf{x}_0$ , la integral de línea vectorial queda como

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{\Delta A} \int_C \mathbf{b}(\mathbf{x}) dl(\mathbf{x}), \quad (3.48)$$

y tiende al vector  $2\kappa_m(\mathbf{x}_0)\mathbf{n}(\mathbf{x}_0)$ , donde  $\kappa_m$  es la curvatura media de la interfaz en el punto  $\mathbf{x}_0$ , y  $\Delta A$  es la superficie. El vector normal unitario  $\mathbf{n}(\mathbf{x}_0)$  se obtiene de normalizar el vector  $\mathbf{a}(\mathbf{x}_0)$ , cerciorándose que el vector normal tenga la orientación deseada hacia el fluido externo. La curvatura media se sigue del producto interno  $\mathbf{a}(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}_0) \equiv 2\kappa_m(\mathbf{x}_0)$ . En la práctica, el contorno  $C$  se identifica con cualquiera de las secciones superficiales articuladas con coordenadas curvilíneas que definen un elemento superficial o con los grupos de bordes seleccionados de los elementos de frontera en la vecindad de un punto.

### 3.6.2. Cálculo del potencial de capa simple

Dos cálculos en principio distintos se requieren en el cómputo del potencial de capa simple: (a) la evaluación exacta del salto en la tracción interfacial  $\Delta \mathbf{f}$  y (b) la evaluación exacta de la integral singular. Estos cálculos están relacionados en el sentido de que los métodos especializados para calcular el potencial de capa simple pueden ser concebidos para expresiones particulares de  $\Delta \mathbf{f}$ .

Para el caso de flujos bidimensionales o axisimétricos, el kernel del potencial de capa simple exhibe una singularidad logarítmica que se puede integrar por varios métodos, incluyendo el uso de una cuadratura Gaussiana para un término logarítmico singular. Para los flujos tridimensionales, el kernel del potencial de capa simple exhibe una singularidad débil que se comporta como  $1/r$ . En esta sección se discuten, las estrategias pertinentes para calcular las ecuaciones integrales de flujos de Stokes.

### 3.6.3. Aislando la discontinuidad en la tracción

Considérese el potencial de capa simple sobre una sección interfacial  $\Delta A$  encerrada por el contorno cerrado  $C$ . Entonces el potencial de capa simple se expresa como

$$I_j^S(\mathbf{x}_0) \equiv \int_{\Delta A} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \Delta f_i(\mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}). \quad (3.49)$$

Se puede utilizar una aproximación trapezoidal para desacoplar el producto de las dos funciones en el integrando. Así,  $I_j^S(\mathbf{x}_0)$  se puede reescribir como

$$I_j^S(\mathbf{x}_0) \simeq \frac{1}{\Delta A} \int_{\Delta A} \Delta f_i(\mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \times \int_{\Delta A} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}). \quad (3.50)$$

Haciendo una balance de fuerzas sobre el área  $\Delta A$ , y asumiendo que la interfaz se puede descomponer en tensiones cortantes –una sobre el plano y otra transversal– se encuentra que la primera integral del lado derecho de la ecuación 3.50 es igual a

$$\int_{\Delta A} \Delta \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) = - \int_{\Delta A} \mathbf{b}(\mathbf{x}) \cdot [\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) + \mathbf{q}(\mathbf{x}) \mathbf{n}(\mathbf{x})] dl(\mathbf{x}). \quad (3.51)$$

Por ejemplo, si la interfaz tiene tensión uniforme e isotrópica  $\gamma$ ,  $\boldsymbol{\tau} = \gamma \mathbf{P}$  y  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ , donde  $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{nn}$  es la proyección tangencial; en este caso,  $\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau} = \gamma \mathbf{b}$ .

El cómputo del lado derecho de la Ec. 3.51 requiere la evaluación del tensor  $\boldsymbol{\tau}$  y del vector transversal cortante  $\mathbf{q}$  a lo largo del contorno  $C$ . En cambio, el cómputo de  $\Delta \mathbf{f}$  en el integrando en el lado izquierdo de Ec. 3.51 requiere la evaluación de la divergencia o el gradiente de  $\boldsymbol{\tau}$  y  $\mathbf{q}$  sobre  $\Delta A$ , el cual puede ser una fuente fuerte de error numérico.

#### 3.6.4. Cálculo numérico directo del potencial de capa simple

En los métodos numéricos típicos de elementos de frontera, la interfaz se discretiza en una colección de elementos de frontera, y el potencial de capa simple se calcula sobre los elementos individuales. Si el punto de evaluación  $\mathbf{x}_0$  está en el interior, a lo largo de los bordes o en el vértice de un elemento, entonces, cuando el punto de integración  $\mathbf{x}$  se acerca a  $\mathbf{x}_0$ , el integrando presenta una singularidad y el elemento se clasifica como “singular”. Para calcular el potencial de capa simple sobre un elemento singular  $E$ , se utiliza la ecuación siguiente:



$$I_j^S(\mathbf{x}_0) = \int_{\Delta A} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) [\Delta f_i(\mathbf{x}) - \Delta f_i(\mathbf{x}_0)] dS(\mathbf{x}) + \Delta f_i(\mathbf{x}_0) \int_{\Delta A} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}). \quad (3.52)$$

Cuando el punto de integración  $\mathbf{x}$  se acerca a  $\mathbf{x}_0$ , el integrando de la primera integral al lado derecho de la Ec. 3.52 tiende a un valor finito que depende de la orientación del vector  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ , y la integral se puede calcular con la precisión adecuada usando métodos de cuadratura estándares.

### 3.6.5. Cálculo de la integral principal de capa doble

Para los flujos bidimensionales o axisimétricos, el integrando de la integral del valor principal del potencial de capa doble es no-singular y se puede calcular usando un método numérico estándar. Para los flujos tridimensionales, la singularidad  $1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$  del valor principal de la integral sobre una superficie cerrada se puede remover usando una identidad vectorial, entonces

$$\begin{aligned} I_j^D(\mathbf{x}_0) &\equiv \int_{\Delta A}^{PV} q_i(\mathbf{x}) T_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) n_k(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Delta A} [q_i(\mathbf{x}) - q_i(\mathbf{x}_0)] T_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) n_k(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - 4\pi q_j(\mathbf{x}_0), \quad (3.53) \end{aligned}$$

donde  $\mathbf{q}$  es la densidad del potencial de capa doble (ver [68]). Cuando el punto de la integración  $\mathbf{x}$  se acerca al punto  $\mathbf{x}_0$  de evaluación, el integrando en el lado derecho del Ec. 3.53 tiende a un valor finito que dependa de la orientación del vector  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ ; la integral se

puede calcular con la precisión adecuada usando un método de cuadratura estándar.

### 3.7. Descripción de la interfaz y su evolución

Las ecuaciones integrales para la velocidad interfacial  $\mathbf{u}(\mathbf{x}_S)$  son ecuaciones lineales, pero son no-lineales cuando la forma de ésta es desconocida. La interfaz evoluciona de acuerdo con  $dx_S/dt = \mathbf{u}(\mathbf{x}_S)$ . Representando la interfaz con  $N$  puntos de discretización  $\mathbf{x}_S^i$ , el problema numérico es determinar la evolución de los puntos  $\mathbf{x}_S^i$  de acuerdo con el sistema de ecuaciones

$$\frac{d\mathbf{x}_S^i(t)}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_S^i) = \mathfrak{F} \left\{ \mathbf{x}_S^i, \frac{d\mathbf{x}_S^i(t)}{dt} \right\}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.54)$$

donde el funcional no-lineal  $\mathfrak{F}$  (ver Ec. 3.38(b)) depende de la forma de la interfaz (por lo tanto implica el conocimiento del vector y de la curvatura normales superficiales) y las velocidades interfaciales no conocidas. Casi todas las técnicas de solución linealizan la Ec. 3.54 relajando la condición cinemática, así que el cálculo del campo de velocidad queda desacoplado de la determinación de la interfaz desconocida [72].

Una forma de seguir el movimiento de una interfaz que se mueve consiste en usar un sistema de puntos “marcadores” de manera tal que al calcular la trayectoria de estos puntos se puede describir su evolución [68]. Es conveniente identificar los puntos marcadores usando dos variables Lagrangianas  $\zeta$  y  $\eta$  y así la velocidad se considera una función de los puntos marcadores y el tiempo.

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}(\zeta, \eta, t) = \mathbf{v}(\zeta, \eta, t). \quad (3.55)$$

La velocidad de la interfaz será dependiente de la velocidad del líquido. Interpretando la interfaz simplemente como el límite entre dos líquidos requiere que los puntos marcadores puedan deslizarse a lo largo del interfaz, pero se requiere que se muevan normalmente a la interfaz con una velocidad igual a la del elemento de fluido. Así,

$$\mathbf{v} = [\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} + \delta \mathbf{t}, \quad (3.56)$$

donde  $\mathbf{u}$  es la velocidad del fluido sobre la interfaz,  $\mathbf{t}$  es un vector tangente, y  $\delta$  puede ser elegida arbitrariamente e individualmente para cada punto de colocación. Haciendo  $\delta \mathbf{t} = \mathbf{u} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn})$ , la velocidad de los puntos de colocación es igual a la velocidad del elemento de fluido. Combinando la Ec. 3.55 y la Ec. 3.56, y notando que la velocidad  $\mathbf{u}$  depende de la configuración actual de la interfaz, se obtiene un sistema de ecuaciones no-lineales ordinario, el cual describe la trayectoria de los puntos de colocación y está dado por

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}(\zeta, \eta, t) = [\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} + \delta \mathbf{t}. \quad (3.57)$$

El estado de deformación estacionario se alcanza cuando la componente normal de la velocidad sobre la superficie de la gota es cero, es decir

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (3.58)$$

Ésta condición es una función altamente no-lineal de la rapidez de corte,  $\dot{\gamma}$  [1].

Los problemas de frontera libre en el límite asintótico para tiempos muy largos, que implican la tensión superficial, requieren la determinación precisa de las posiciones de los

vectores normales y de las curvaturas locales de la interfaz. Así, la forma de la interfaz debe tener idealmente una representación que sea dos veces diferenciable y continua. Interfaces de dos dimensiones o axisimétricas se han estudiado extensivamente, representando la superficie total como sistema de  $N$  puntos nodales discretos. La posición, el vector normal y la curvatura se pueden evaluar directamente en los nodos usando un esquema de diferencias finitas o usando una interpolación en las localizaciones internodales. Para la descripción de una superficie libre, hay varios métodos, cada uno con ventajas y desventajas [74, 75].

Dada una descripción de la interfaz, la ecuación integral Ec. 3.38 o la Ec. 3.40 se reduce a un sistema lineal de ecuaciones algebraicas para las velocidades interfaciales  $\mathbf{u}(\mathbf{x}_S^i)$ , y para el cual hay varias técnicas numéricas disponibles. La solución del sistema de ecuaciones, da las velocidades interfaciales de los puntos de colocación [68, 64].

Para el caso de un sistema que evoluciona en el tiempo, se requiere el cómputo del movimiento de una colección finita de puntos marcadores que definen los vértices de los elementos de frontera. La forma de la interfaz se actualiza con la condición cinemática dada en Ec. 3.57. Por ejemplo, cada punto marcador se avanza en el tiempo usando la velocidad local superficial (en una representación Lagrangiana). Este procedimiento tiende a desplazar—redistribuir sobre la superficie— los puntos marcadores, aún si sólo ocurren cambios pequeños en la forma. Por lo tanto, la redistribución frecuente de los puntos de colocación es necesaria.

Alternativamente, también es posible aplicar un esquema euleriano. En la práctica, los puntos en la interfaz se mueven en una dirección normal a ésta, que se calcula como la proyección normal de la velocidad superficial:  $d\mathbf{x}_S/dt = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}_S)) \mathbf{n}$ . De esta manera se tiene la ventaja de que los puntos de colocación tienden a permanecer distribuidos uniformemente. En este trabajo, utilizo un método de segundo orden de Runge-Kutta para seguir la forma

de la interfaz, y cuando la deformación de la gota es pequeña (los puntos de colocación siguen espaciados uniformemente) se usó el método de múltiples puntos de Adams-Bashforth-Moulton de cuarto orden [68]. El error numérico del método de Runge-Kutta es del orden de  $\Delta t^3$  mientras que para el método de Adams-Bashforth-Moulton es del orden de  $\Delta t^5$ . El uso de los métodos de un orden más alto no es práctico porque es necesario más tiempo del CPU que se consume en pasos exploratorios.

En la mayoría de los estudios de la dinámica de gotas, la conservación del volumen de la gota no es una restricción impuesta, pero los cambios de volumen se utilizan como medida de la exactitud del método numérico. Para  $\lambda = 1$ , los cambios de volumen son típicamente insignificantes. Sin embargo, varias investigaciones reportan cambios de volumen significativos para valores del cociente de viscosidades bajos,  $\lambda \leq 0.1$ , y se puede recurrir a un re-escalamiento para continuar las simulaciones para tiempos más largos [72].

El método del elemento de frontera fue programado en Fortran 90 para Visual Studio 2008. Para la interpolación de la interfaz de la gota, se utilizó el método de Akima [76, 77]. Este método intenta dar a la interpolación un aspecto más “natural”, es decir, una forma que sería obtenida por un método de interpolación “a mano”, dichas rutinas vienen dentro de Visual Studio 2008 y se usaron sin modificaciones. Para discretizar la superficie de la gota se usaron 256 elementos, mientras que en el caso en el que se incluyeron efectos de frontera, cada rodillo se discretizó usando 128 elementos. Las simulaciones fueron hechas en una Workstation HP, con Windows 7, con un procesador Intel pentium 4 CPU 3.8 GHz, con una memoria RAM de 6 GB.

# Capítulo 4

## Resultados Parte I

En este Capítulo presento mis resultados de simulaciones numéricas de la deformación de una gota en flujos cuasi-cortantes simples ( $\alpha = 0.03$ ) generados por el molino de dos rodillos, para los casos cuando los efectos de fronteras cercanas son despreciables. Con ese propósito, primero, presento una evaluación de la capacidad predictiva del método numérico, buscando reproducir resultados reportados previamente en otros trabajos. Para ello, he usado en mis simulaciones valores de parámetros previamente reportados en algunos experimentos, en otras simulaciones numéricas, así como comparando mis resultados con las teorías de pequeñas deformaciones descritas en el Capítulo 1. A partir de estas comparaciones, demuestro que las simulaciones aquí presentadas dan resultados correctos; nótese que dichas comparaciones sólo son para propósitos de referencia pues corresponden a flujos cortantes simples ( $\alpha = 0$ ). En segundo lugar, presento resultados de simulaciones numéricas con valores para los parámetros obtenidos de experimentos recientemente hechos en un molino de dos rodillos (TRMs). Estos resultados corresponden a dos valores del cociente de viscosidades: uno pequeño ( $\lambda = 0.012$ ) y otro más grande ( $\lambda = 16$ ). En ambos casos, se presentan la

deformación  $D$  y el ángulo de orientación  $\theta$  de una gota, como función del número capilar  $Ca$ . También presento la comparación de la evolución temporal de  $D$  y de  $\theta$  (experimental y numéricos) con las predicciones del modelo teórico de Cox. Los resultados obtenidos me permiten sugerir modificaciones al modelo asintótico de Cox, obteniendo de esta manera un modelo completo que describe correctamente, y en detalle, la deformación libre de una gota dependiente del tiempo. Finalmente muestro que el modelo numérico aplicado es capaz de predecir el “rompimiento” de gotas en un intervalo reducido de  $\lambda$  para diferentes flujos generados por el molino de dos rodillos.

## 4.1. Validación del modelo numérico. Comparación con resultados previos

En esta Sección presento resultados de las simulaciones numéricas; en éstas usé los valores de los parámetros que han sido reportados en algunos trabajos experimentales y simulaciones numéricas previos. También comparé los resultados numéricos obtenidos con algunos de los modelos teóricos descritos anteriormente. Como se expuso antes, la mayor parte del trabajo experimental, teórico y numérico se ha realizado para flujos cortante simple ( $\alpha = 0$ ) y el elongacional puro ( $\alpha = 1$ ). Aquí consideré un amplio intervalo de los valores de los parámetros por dos razones. La primera, para validar nuestro algoritmo, esperando corroborar algunos resultados previos y así contar con varios puntos de referencia que garanticen que nuestras simulaciones conducen a resultados físicos esperados. La segunda, es para conocer los límites del algoritmo, esto es, conocer el espacio de valores de los parámetros para el

que las simulaciones predicen razonablemente bien las observaciones previas. Idealmente, se busca cubrir, en lo que respecta a valores del cociente de viscosidades,  $\lambda$ , valores pequeños, intermedios y grandes.

En el Capítulo 1 de este trabajo presenté las predicciones de las teorías más importantes para pequeñas deformaciones. Dichas predicciones tienen que ver con el parámetro de deformación  $D$ , el ángulo de orientación  $\theta$  y, en otros casos (como en el modelo elipsoidal), con los semi-ejes  $L$  y  $B$ , en función del número capilar y también en algunos casos como función del tiempo. Así pues, las comparaciones aquí presentadas tienen que ver con dichos parámetros.

#### **4.1.1. Caso 1. Pequeñas deformaciones y cociente de viscosidades**

$$\lambda = 1$$

El caso cuando el cociente de viscosidades  $\lambda = 1$ , es significativo por dos razones. La primera, es porque para este valor de  $\lambda$ , el coeficiente que multiplica al potencial de capa doble en la expresión integral de la velocidad (ver Ec. 3.36) se hace cero. Esto conlleva a una simplificación en la solución del sistema de ecuaciones y, por lo tanto, a un menor tiempo de cómputo. Por esta misma razón, las primeras aplicaciones del método de elemento de frontera se hicieron para este valor de  $\lambda$  –en un flujo cortante simple ( $\alpha = 0$ )– [17, 78]. La segunda razón, es que con este valor, y para valores pequeños del número capilar, se han verificado la validez de las teorías para pequeñas deformaciones desarrolladas por Taylor [13], Cox [15], Frankel-Acrivos [16] y Barthes-Biesel y Acrivos [30]. También se cuenta con datos experimentales aportados por Rumscheidt y Mason [9]. Así pues, dada la bondad de la información para  $\lambda = 1$ , tanto teórica como experimental, éste es un punto de referencia



indispensable para validar mi método numérico. En mis simulaciones consideré valores del número capilar entre 0.1 y 0.4 –apropiados para pequeñas deformaciones–, para valores fijos de  $\lambda = 1$  y  $\alpha = 0$ . Los resultados obtenidos los comparé con las predicciones de tres teorías descritas en el Capítulo 1: las teorías de Taylor, Cox y Maffetone-Minale. Para ese intervalo de deformación de las gotas, las teorías predicen una relación lineal entre el parámetro de deformación y el número capilar. Los resultados obtenidos los presento en la Figura 4.1; como se puede ver, obtuve una dependencia cuasi-lineal de la deformación como función del número capilar, aunque con un valor menor en la pendiente respecto a las predicciones teóricas.

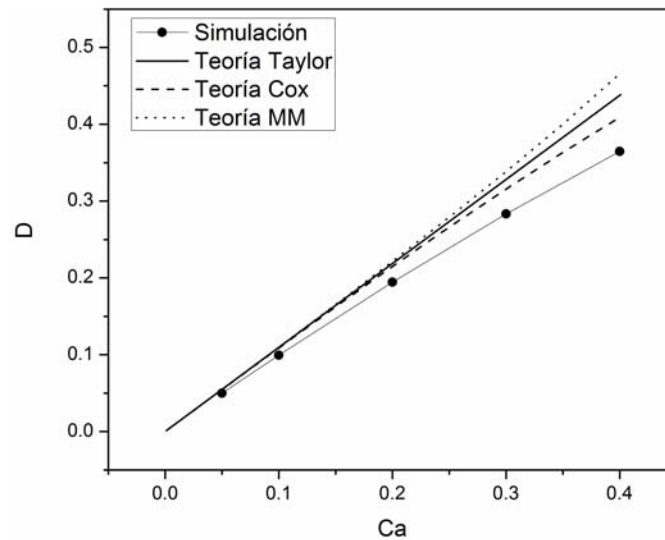


Figura 4.1: Deformación como función del número capilar,  $\lambda = 1$ . Los símbolos representan lo siguiente: (  $\bullet$  ) resultados numéricos, (  $-$  ) teoría de Taylor, (  $--$  ) teoría de Cox de segundo orden y (  $\cdots$  ) teoría de Maffetone-Minale.

### 4.1.2. Caso 2. Teoría de segundo orden para pequeñas deformaciones con $\lambda = 6.4$

El segundo caso estudia una gota con el valor  $\lambda = 6.4$  del cociente de viscosidades. Este valor se usó en los experimentos de Torza, et al, [10] –los cuales, por cierto, sirvieron para validar la teoría de Cox– y en las simulaciones de Kennedy-Pozrikidis [21]. Consideraré valores del número capilar entre 0.2 y 2.0, para valores fijos de  $\lambda = 6.4$  y  $\alpha = 0$ . La relevancia de usar estos resultados experimentales es que para este intervalo de números capilares, la teoría de pequeñas deformaciones –la teoría de Taylor, a primer orden– ya no es válida, por lo que es necesario aplicar la corrección de segundo orden desarrollada por Cox. Como puede verse en la Figura 4.2, mis resultados coinciden con las predicciones del modelo de Cox –los cuales a su vez, tienen coincidencia con los resultados experimentales [10]. En la misma Figura se muestra que la predicción del modelo de Maffetone y Minale falla, lo cual ilustra que esta teoría no es adecuada para “grandes” viscosidades  $\lambda > 4$ ; Dicha Figura muestra también las predicciones del modelo asintótico de Cox, del modelo de Taylor –que predice una relación lineal de  $D$ , respecto a  $Ca$ – y del modelo asintótico de Taylor –que no incluye la dependencia inicial de  $Ca$  pero como puede verse es correcto.

### 4.1.3. Caso 3. La evolución temporal. Pequeñas deformaciones con $\lambda = 25$ y $Ca = 1.52$

En los dos casos anteriores no menciono ninguna característica respecto de la evolución temporal, tanto del parámetro de deformación como del ángulo de orientación, porque dicha información no fue reportada en los trabajos anteriores. Los resultados para la evolución

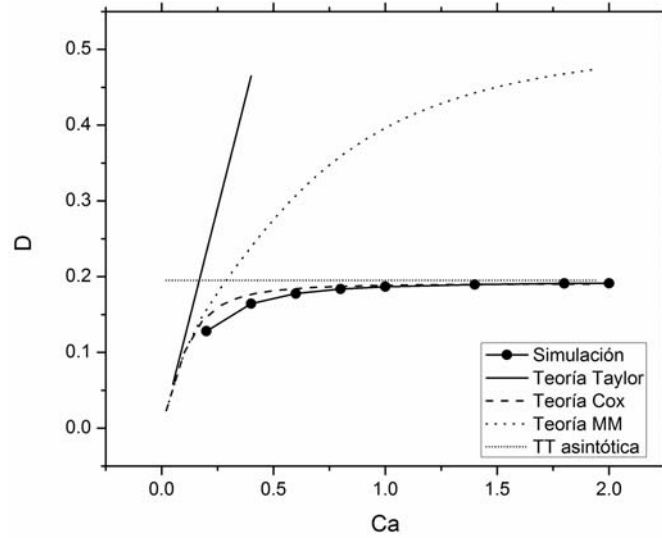


Figura 4.2: Deformación como función del número capilar,  $\lambda = 6.4$ . Los símbolos representan lo siguiente: ( ● ) resultados numéricos , ( — ) teoría asintótica de Taylor ( - - ) teoría de Cox de segundo orden y ( · · · ) teoría de Maffetone-Minale (MM).

temporal para otros valores de  $\lambda$  (incluidos los anteriores) los mostraré más adelante, como parte de los resultados. Sin embargo, un caso respecto de la evolución temporal –sobre el que se ha escrito mucho– corresponde a los siguientes valores de los parámetros:  $\lambda = 25$ ,  $Ca = 1.52$  y  $\alpha = 0$ . Los experimentos de Torza, et al., [10], que validan la teoría de Cox se hicieron con esos valores; también, las simulaciones de Rallison [17]; y más recientemente las de Kennedy [21] y de M. Reyes [62]. La relevancia de reproducir esta simulación es que para estos valores de los parámetros, la dependencia temporal del parámetro de deformación así como el ángulo de orientación es oscilatoria. Dado que en este trabajo se pone énfasis en la transición de un comportamiento asintótico a un comportamiento oscilatorio, este resultado experimental resulta importante. En la Figura 4.3 se muestran los resultados obtenidos y se comparan con el modelo teórico de Cox, la coincidencia es cualitativa. Nótese que no se realiza una comparación de la orientación de la gota que también tiene un comportamiento

oscilatorio, con la misma frecuencia base. Ahora, si el resultado numérico se compara con los resultados experimentales, la coincidencia es mejor; más adelante se presenta una comparación con resultados experimentales recientes que corroboran lo dicho antes, tanto para la deformación como para la orientación de la gota.

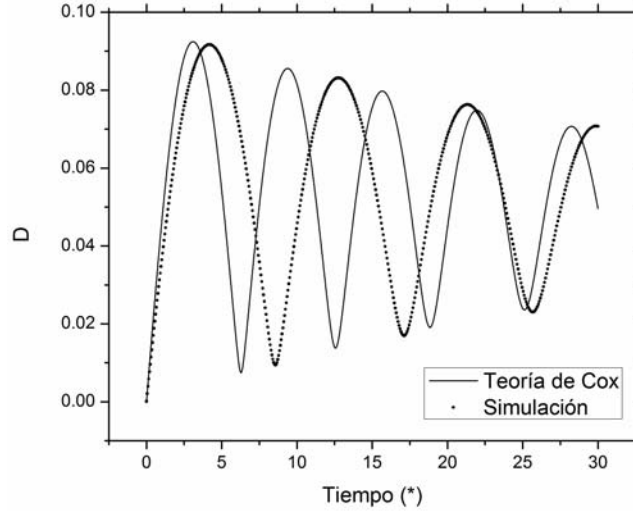


Figura 4.3: Evolución temporal del parámetro de deformación, para los parametros  $\lambda = 25$ ,  $Ca = 1.52$ , en flujo cortante simple. La simulación reproduce el comportamiento que predice la teoría de Cox.

Los resultados mostrados en la Figura 4.3 deben de compararse con la Figura 1.3 (Capítulo 1); en ésta, como menciono antes, muestra una comparación de los resultados experimentales obtenidos por Torza-Cox [10] y los resultados de la teoría de Rallison [17], también descrita en el Capítulo 1.

De los casos anteriores se puede concluir lo siguiente: el método numérico, funciona razonablemente dado que se reproducen los resultados numéricos, experimentales y teóricos previamente reportados. También sugiere que el modelo numérico es físicamente correcto, pues captura la dinámica esencial en la deformación de gotas.

## 4.2. Pequeñas deformaciones de gotas en flujos generados por TRMs

En esta Sección presento resultados de simulaciones numéricas de deformación de gotas en flujos bidimensionales generados por el molino de dos rodillos suponiendo que no hay efectos de fronteras cercanas; esto es, el flujo se supone no-acotado –implicando que la gota es relativamente muy pequeña– y los comparo con resultados experimentales obtenidos recientemente [63]. En primer lugar, el tipo de flujo generado por el TRMs corresponde a  $\alpha = 0.03$ . Éste es un flujo cercano al flujo cortante simple, se trata del valor más bajo que puede alcanzarse con 2RM y existen diferencias interesantes respecto al flujo cortante simple como veremos adelante. Las simulaciones fueron hechas para dos valores de cocientes de viscosidades  $\lambda = 0.012$  y  $\lambda = 16$ .

### 4.2.1. Deformaciones y orientaciones estacionarias.

Recientemente se presentaron resultados experimentales [63] para dos valores de cocientes de viscosidades: uno muy bajo ( $\lambda = 0.012$ ) y otro grande ( $\lambda = 16$ ); los materiales utilizados y sus propiedades físicas, se presentan en el Capítulo 2, así como también se describió la geometría utilizada para generar el flujo con  $\alpha = 0.03$ . Para las simulaciones numéricas, utilicé todos los valores de los parámetros experimentales en el código numérico. En la Figura 4.4 se muestran las deformaciones estacionarias como función del número capilar obtenidas numérica y experimentalmente para el caso de  $\lambda = 0.012$ . Aquí se comparan datos tanto de la deformación de la gota como de la orientación del eje principal de la gota, para un intervalo de números capilares más amplio. La Figura 4.4 también incluye algunas

predicciones teóricas; no hay que olvidar que éstas son válidas para flujos cortantes simples y se muestran sólo como referencia.

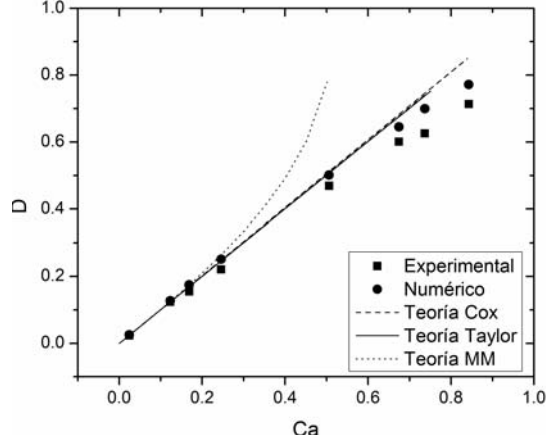


Figura 4.4: Deformación ( $D$ ) como función del número capilar ( $Ca$ ),  $\lambda = 0.012$ . Los símbolos representan lo siguiente: (■) resultados experimentales, (●) resultados numéricos, (—) teoría de Taylor, (---) teoría de Cox y (⋯) teoría de Maffettone-Minale.

Como se puede ver en la Figura 4.4, las predicciones numéricas concuerdan con los resultados experimentales así como con los modelos teóricos de Taylor y Cox. También se observa que, para este valor de  $\lambda$ , la teoría de Maffettone-Minale tiene una validez muy limitada restringida a  $Ca \leq 0.25$ .

Los resultados obtenidos para la orientación de la gota deformada como función del número capilar, para el caso de  $\lambda = 0.012$ , se muestran en la Figura 4.5, también se incluye para su comparación, las predicciones de los modelos teóricos para flujo cortante simple. Para flujos cortantes simples, la orientación de la gota debe girar más a ángulos menores con aumentos del número capilar –mayor deformación de la gota–, pero también debería deformarse menos; aquí los modelos teóricos no son cualitativamente congruentes. En este caso los modelos que mejor describen el comportamiento observado son el modelo de Chaffey-

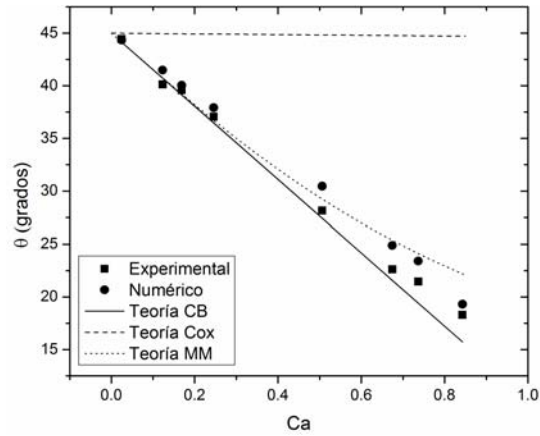


Figura 4.5: Orientación ( $\theta$ ) como función del número capilar ( $Ca$ ),  $\lambda = 0.012$ . Los símbolos representan lo siguiente: (■) resultados experimentales, (●) resultados numéricos, (—) teoría de Chaffrey-Brenner, (---) teoría de Cox y (· · ·) teoría de Maffetone-Minale.

Brenner y el de Maffetone-Minale (aunque como en el caso de la deformación, el modelo de Maffetone-Minale predice desviaciones para  $Ca \geq 0.25$ ), por otro lado el modelo de Cox, para este valor de  $\lambda$ , coincide con el modelo de Taylor que predice un orientación independiente del número capilar  $Ca$  e igual a  $\pi/4$ .

Nuevamente se observa que los resultados numéricos están en coincidencia con los resultados experimentales. Aún más, en el caso de las simulaciones, para  $Ca \geq 0.5$ , la deformación predicha es ligeramente superior y es físicamente congruente con una orientación de la gota ligeramente menos alejada de la orientación inicial de  $\pi/4$ .

Para el caso del cociente de viscosidades grande,  $\lambda = 16$ , los resultados de la deformación  $D$  como función de  $Ca$  obtenidos numéricamente, y su comparación con los resultados experimentales, se muestran en la Figura 4.6. En este caso, también presento las predicciones de la teoría de Cox y la teoría asintótica de Taylor que son las que mejor predicen lo observado, también se incluye la teoría de Maffetone-Minale aunque, como se observa también falla para

el caso de cociente de viscosidades grandes.

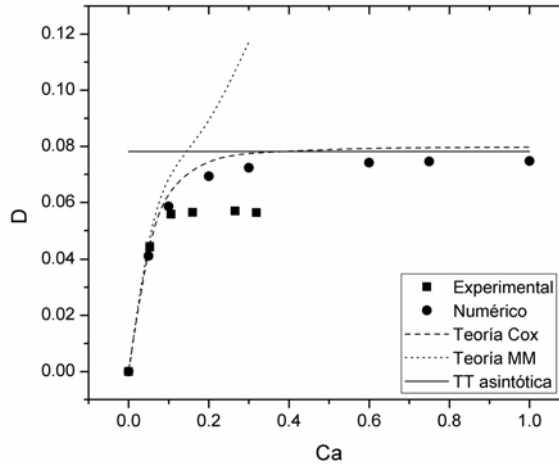


Figura 4.6: Deformación ( $D$ ) como función del número capilar ( $Ca$ ),  $\lambda = 16$ . Los símbolos representan lo siguiente: (■) resultados experimentales, (●) resultados numéricos, (—) teoría asintótica de Taylor, (— · —) teoría de Cox y (· · ·) teoría de Maffettone-Minale.

En la figura 4.7, se muestran los resultados numéricos y experimentales de la orientación de la gota deformada como función del número capilar así como la comparación con los modelos teóricos. Como puede verse en este caso, las teorías que predicen lo obtenido experimental y numéricamente, son las teorías de Cox y la teoría de Maffettone-Minale, la teoría de Chaffrey-Brenner en este caso falla.

Para una gota viscosa, es claro que la deformación máxima obtenida es menor que la predicha por la simulación numérica. Sin embargo, nuevamente los valores para la deformación y la orientación de la gota son congruentes físicamente. Aquí la explicación de la diferencia cualitativa puede ser más sutil dado que la orientación mínima alcanzada por la gota simulada es inferior a la orientación observada en el experimento; ello implica que el experimento pudo realizarse con valores ligeramente más elevados de la tensión superficial.



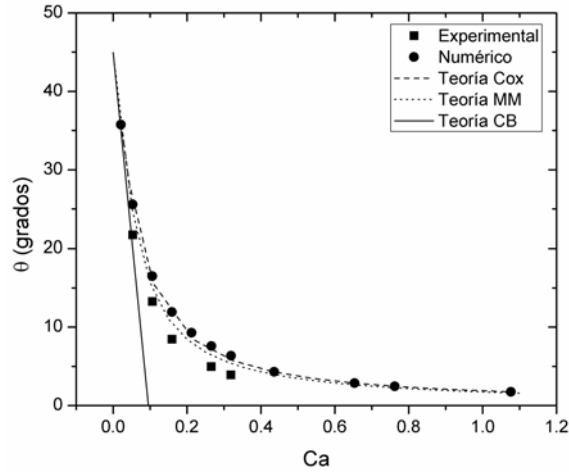


Figura 4.7: Orientación ( $\theta$ ) como función del número capilar ( $Ca$ ),  $\lambda = 16$ . Los símbolos representan lo siguiente: (■) resultados experimentales, (●) resultados numéricos, (—) teoría de Chaffrey-Brenner, (---) teoría de Cox y (⋯) teoría de Maffettone-Minale.

#### 4.2.2. Deformaciones y orientaciones de la gota como función del tiempo

La evolución temporal de la deformación tiene que ver con la manera en la que la gota alcanza un estado de deformación estacionaria para cierto valor de la rapidez de corte o de manera equivalente, para un valor fijo de número capilar. Para el caso de cociente de viscosidades pequeño,  $\lambda = 0.012$ , se observa un comportamiento monótonico en función del tiempo. Este comportamiento se explica en términos del tiempo característico de relajación capilar  $t_\sigma$  definido como [79],  $t_\sigma = \lambda a \mu_d / \sigma = Ca / G$ . Un comportamiento asintótico en el tiempo se observa siempre que  $t_\sigma < 1$ , el cual se cumple siempre que  $\lambda < 1$  (o  $Ca < 1$ ) —o para valores grandes de tensión interfacial  $\sigma$ —. En la Figura 4.8, se muestran cuatro casos correspondientes a cuatro números capilares  $Ca = 0.02, 0.12, 0.24$  y  $0.74$ . Como se ve los resultados numéricos reproducen bastante bien el comportamiento temporal observa-

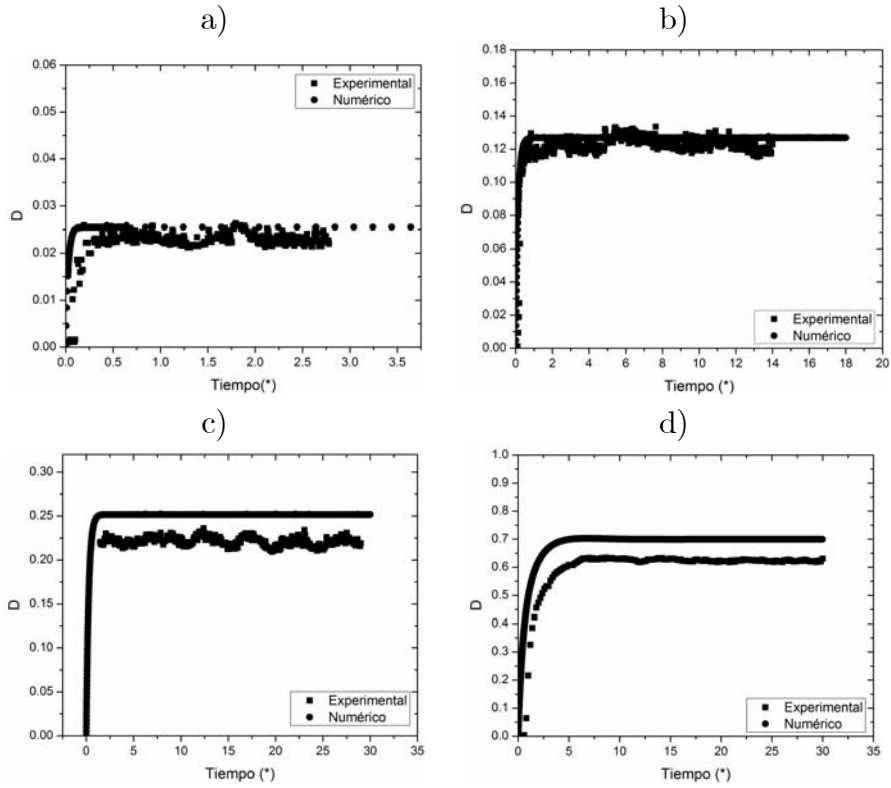


Figura 4.8: Deformaciones como función del tiempo correspondientes diferentes números capilares: (a)  $Ca = 0.02$ , (b)  $Ca = 0.12$ , (c)  $Ca = 0.24$  y (d)  $Ca = 0.74$ , para el caso de cociente de viscosidades pequeño.

do experimentalmente.

Para la evolución de la orientación como función del tiempo, los Gráficos presentados corresponden a los mismos valores del número capilar y se muestran en la Figura 4.9. Como se observa también, en este caso, ambos resultados coinciden razonablemente bien.

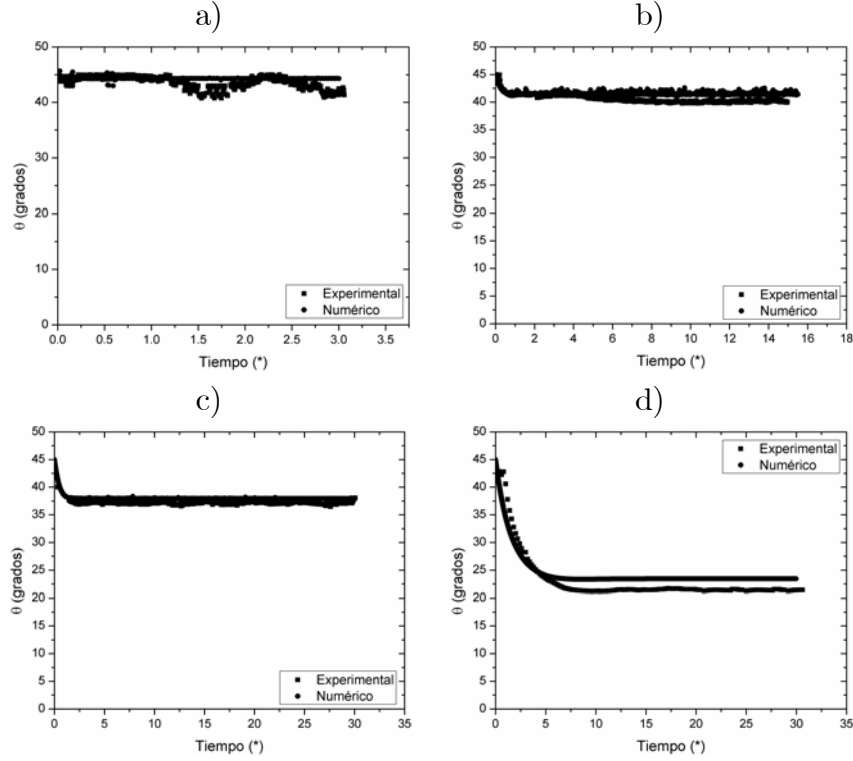


Figura 4.9: Orientaciones como función del tiempo correspondientes a diferentes números capilares: a)  $Ca = 0.02$ , b)  $Ca = 0.12$ , c)  $Ca = 0.24$  y d)  $Ca = 0.74$ , para el caso de cociente de viscosidades pequeño.

Como hemos mencionado en varias ocasiones, los resultados para el caso del cociente de viscosidades grande,  $\lambda > 3.6$  (y para flujo cortante simple), resultan más interesantes, pues a partir de cierto valor de  $Ca$  el tiempo característico de relajación capilar resulta mayor a la unidad,  $t_\sigma > 1$ . Esto es, la tensión superficial impone una dinámica que es más lenta que la rotación inducida por la vorticidad del flujo. Por lo tanto, se empieza a observar un comportamiento oscilatorio en el parámetro de deformación  $D$ , así como en la orientación  $\theta$  de la gota deformada, debido a que la máxima rapidez de deformación ocurre cuando la gota tiene una alineación cercana a  $\pi/4$ . Para orientaciones de la gota cercanas a cero –o valores negativos– la rapidez de deformación es de hecho negativa. En la Figura 4.10, se muestra la comparación de los resultados numéricos y experimentales para el caso de  $\lambda = 16$ , para

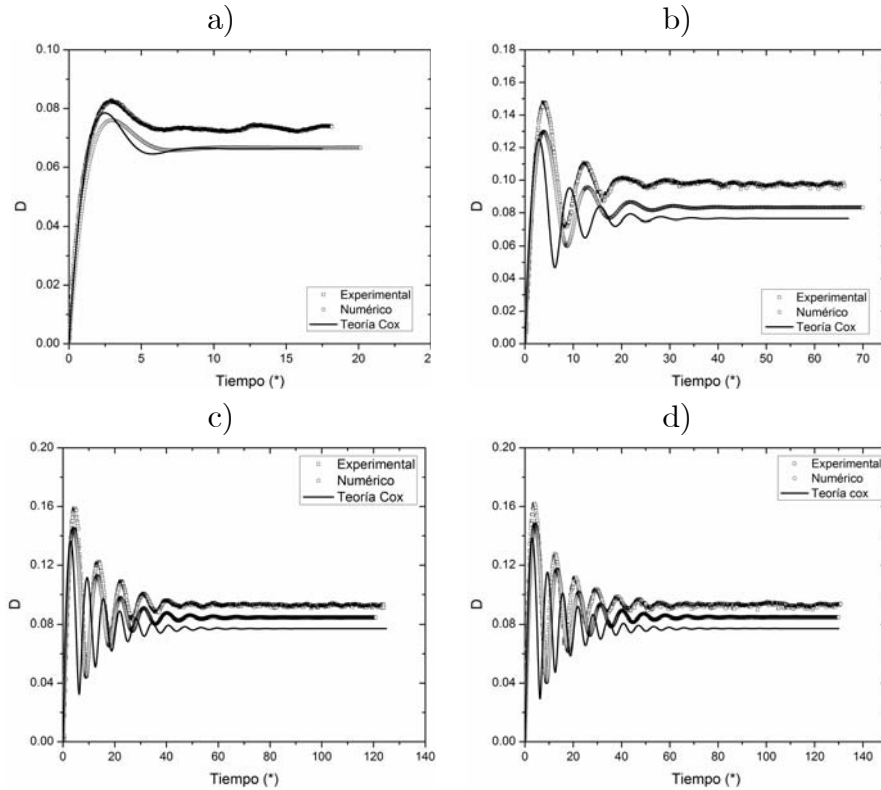


Figura 4.10: Deformaciones como función del tiempo correspondientes a diferentes números capilares: a)  $Ca = 0.02$ , b)  $Ca = 0.12$ , c)  $Ca = 0.24$  y d)  $Ca = 0.74$ , para el caso de cociente de viscosidades grande.

cuatro valores de número capilar para los cuales se manifiesta claramente el comportamiento oscilatorio.

De la misma manera que en el caso anterior, en la Figura 4.11 presentamos las gráficas correspondientes a los cuatro valores de  $Ca$ , para el caso de cociente de viscosidades mayor que la unidad. Como se observa, también en este caso la coincidencia de ambos resultados es notable, aún mayor que en el caso de cociente de viscosidades bajo, al grado tal que ambas curvas se superponen.

En general, la concordancia entre los resultados experimentales y los numéricos es muy alta; de hecho, los resultados numéricos concuerdan con los observados experimentalmente en un grado mayor a la predicción del modelo de Cox: un análisis detallado de este compor-

tamiento oscilatorio, me permite proponer una modificación al modelo de Cox que mejora –reduce– aún más las diferencias entre resultados.

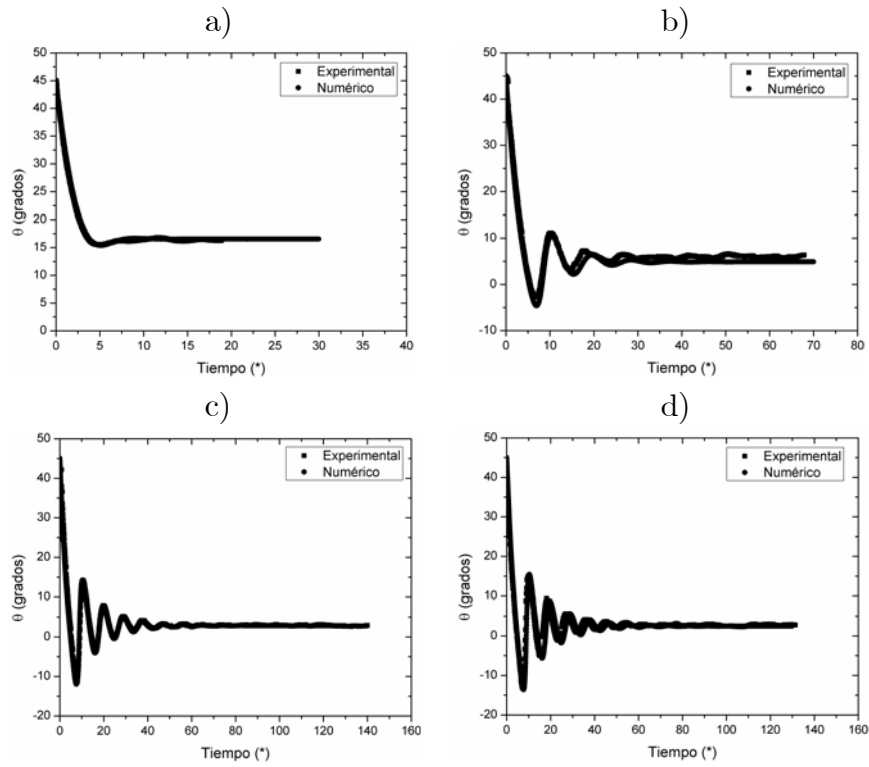


Figura 4.11: Orientaciones como función del tiempo correspondiente a diferentes números capilares: a)  $Ca = 0.02$ , b)  $Ca = 0.12$ , c)  $Ca = 0.24$  y d)  $Ca = 0.74$ , para el caso de cociente de viscosidades grande.

### 4.2.3. El modelo de Cox modificado

La teoría de Cox predice que las oscilaciones tienen un período que es función inversa de la rapidez de corte, debido a que la rapidez de rotación –o magnitud de la vorticidad– es igual a la rapidez de corte –o magnitud del gradiente de velocidad. Así, la expresión es la siguiente,

$$T = \frac{2\pi}{G}. \quad (4.1)$$

Ello implica que a mayor rapidez de corte el período es menor (o que se observan más oscilaciones); esto es cualitativamente correcto, aunque no del todo como mostramos a continuación.

A partir de los resultados experimentales y numéricos (para  $\lambda = 16$ ), es posible determinar los períodos correspondientes a diferentes valores de la rapidez de corte  $G$ . Adimensionalizando esos valores, usando como *tiempo característico* el valor de  $G^{-1}$ , el modelo de Cox –como puede verse fácilmente de la Ec. 4.1– predice un período adimensional constante e igual a  $2\pi$ . Los resultados de la adimensionalización de los diferentes períodos se muestran en la Tabla 4.1. El valor promedio de los datos experimentales para el período es de 8.336, mientras que el valor numérico del período es muy cercano, 8.259, la diferencia podría fácilmente ser resultado de pequeñas fluctuaciones de los resultados experimental y numérico. Estos dos últimos tiempos característicos son claramente mayores que  $2\pi$ .

Con base en estos resultados, analicé la posibilidad de una corrección –modificación al modelo teórico de Cox– de manera tal que no tenga esta discrepancia respecto del período de oscilación. Para ello, hice un ajuste por mínimos cuadrados, tanto a los datos numéricos

G (s <sup>-1</sup> )	T (s <sup>-1</sup> ) Teoría de Cox)	T (adimensional) Teoría de Cox	T (adimensional) Experimental	T (adimensional) Numérico
0.5	12.566	2π	8.423	8.259
0.75	8.377		8.530	
1.0	6.283		8.377	
1.25	5.026		8.418	
1.5	4.189		7.695	
1.75	3.590		8.977	
2.0	3.141		8.609	

Tabla 4.1: Valores adimensionales del período, usando como tiempo de adimensionalización el inverso de la rapidez de corte G.

G (s <sup>-1</sup> )	D <sub>0</sub>	A	b	c	f	R <sup>2</sup>
0.5	0.0865	2.088	0.334	0.746	0.556	0.97
0.75	0.0743	2.067	0.086	0.757	0.156	0.98
1.0	0.0744	2.057	0.063	0.763	0.123	0.97
1.25	0.0928	1.959	0.130	0.746	0.222	0.98
1.5	0.0925	2.079	0.098	0.816	0.162	0.99
1.75	0.0925	2.079	0.084	0.699	0.139	0.98
2.0	0.0928	1.944	0.077	0.729	0.124	0.99

Tabla 4.2: Valores de los parámetros de la forma general de Cox, que se ajustan a los datos experimentales.

como a los datos experimentales, usando la siguiente “forma general” para la evolución de la deformación, resultado de la ecuación de Cox para la evolución temporal,

$$D(t) = D_0 [1 - Ae^{-bt} \cos(c * t) + e^{-ft}]^{1/2}. \quad (4.2)$$

El ajuste, requiere el valor del parámetro,  $D_0$ , el valor de deformación estacionario, ya sea numérico o experimental; todos los demás parámetros se dejaron libres. Para evitar confusiones, escribiremos a lo que corresponde en el modelo de Cox (véase Ec. (1.16) del Capítulo 1), cada uno de los parámetros introducidos en la Ec. 4.2,  $A = 2$ ,  $b = 20G/19Ca\lambda$ ,  $c = G$  y  $f = 2b = 40G/19Ca\lambda$ . En la Tabla 4.2 se muestran los valores de los parámetros de esta forma general, ajustados a los datos experimentales.

$G (s^{-1})$	$D_0$	$A$	$b$	$c$	$f$	$R^2$
0.5	0.078	2.020	0.309	0.746	0.557	0.97
0.75	0.082	2.040	0.209	0.736	0.425	0.99
1.0	0.083	1.984	0.158	0.752	0.298	0.98
1.25	0.084	1.959	0.130	0.746	0.222	0.99
1.5	0.084	2.079	0.098	0.816	0.162	0.99
1.75	0.084	2.079	0.084	0.699	0.139	0.99
2.0	0.084	1.944	0.077	0.729	0.124	0.99

Tabla 4.3: Valores de los parámetros de la forma general de Cox, que se ajustan a los datos numéricos.

De manera equivalente, en la Tabla 4.3 se muestran los valores de los parámetros ajustados a los datos numéricos.

El primer resultado interesante es que, con base en el modelo de Cox, los valores de los parámetros se ajustan casi exactamente a lo experimentalmente observados. Esto es, de la comparación de ambas Tablas, el parámetro  $A$ , tiene un valor de casi 2 –como en el modelo de Cox–, el parámetro  $b$  también está en concordancia, mientras que el valor de  $f$  es el doble de  $b$  y está razonablemente cercano.

Aún más, el resultado más relevante de este análisis tiene que ver con el factor  $c$ , que en ambos casos tiene un valor *constante* para todos los valores de  $G$ , este parámetro está directamente relacionado con el período de oscilación; de hecho el período *adimensionalizado* está dado por  $T_a = 2\pi/c$ , que para este caso da un valor de  $T_a = 8.377$ . Dicho valor corresponde al obtenido numérica- y experimentalmente (véase la Tabla 4.1).

Sin embargo, no hay que olvidar que éste análisis se hizo para  $\lambda = 16$ . ¿Qué pasa para otros valores de  $\lambda$ ? ¿Es válido el modelo de Cox para otros valores de  $\lambda$ ? ¿Es posible obtener una expresión modificada de Cox que prediga los periodos de oscilación? ¿Qué importancia tiene? Con estas preguntas en mente y con base en la enorme coincidencia entre los resultados numéricos y los resultados experimentales mostrada previamente, llevé a cabo al-



gunas simulaciones tomando algunos datos experimentales del trabajo de Torza y Cox [35]. Consideré valores de  $\lambda = 8.8, 25$  y  $45$ , pues, por un lado, la disponibilidad de esos datos experimentales de Torza y, por otro lado, estos valores son mayores y menores al usado antes ( $\lambda = 16$ ); todos los valores cumplen además con  $\lambda \gg 1$ , que es cuando se observan oscilaciones. Aplicando el análisis anterior a los datos obtenidos numéricamente, esto es, adimensionalizados respecto de  $G^{-1}$ , realicé un ajuste de mínimos cuadrados a los datos numéricos con la ecuación “general” de Cox. Nuevamente, del mismo modo que en el caso anterior, todos los valores de los parámetros ajustados corresponden a los valores del modelo de Cox, excepto el parámetro  $c$ , que como hemos dicho, tiene que ver con el período de oscilación. Los resultados obtenidos para dichos parámetros, se muestran en la Figura 4.12, donde se muestra el valor de  $c$ , como función del cociente de viscosidades.

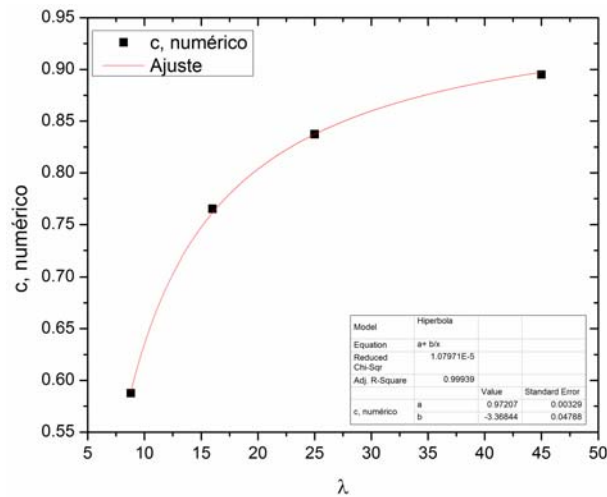


Figura 4.12: Valores del parámetro  $c$ , como función del cociente de viscosidades  $\lambda$ . Dichos valores fueron obtenidos a partir del análisis de las simulaciones numéricas.

En la misma Figura se presenta el ajuste de los datos,  $c$  como función de  $\lambda$ , proponiendo una función del tipo  $c = a + b/\lambda$ . Como se observa, dicha función se ajusta perfectamente:

los valores de  $a$  y  $b$ , se muestran en el recuadro dentro de la misma figura. Así pues, cuento con una expresión para el parámetro  $c$  (esto es para el período de oscilación como función de  $\lambda$ , a saber:  $c = 0.97 - 3.36/\lambda$ ).

¿Qué implica este resultado? Recuérdese que  $c$  es inversamente proporcional a  $T$  ( $T = 2\pi/c$ ). Cuando  $\lambda \simeq 3.36$ ,  $c \simeq 0$ , lo que a su vez implica que  $T \rightarrow \infty$ . ¿Tiene sentido? ¡Claro! Hay que recordar que de acuerdo con la literatura [8, 15], en flujo cortante simple no es posible el rompimiento de gotas para valores de  $\lambda > 3.6$ , y es también cuando se empiezan a observar oscilaciones (valores de  $T$  finitos). Así que para valores de  $\lambda$  cercanos a 3.6, el período es esencialmente nulo (no hay oscilaciones) y para valores  $\lambda < 3.6$ , el período es negativo (lo cual no tiene sentido físicamente, pero para estos casos se observa experimentalmente el rompimiento de las gotas).

En el otro extremo ¿qué pasa si  $\lambda \rightarrow \infty$ ? Esto implica que  $c \simeq 1$ , lo que a su vez implica que  $T = 2\pi$ . ¿Y esto que significa? Ésta es la expresión de Taylor para el período (adimensionalizado con  $G$ , claro está); dicho de otro modo, significa que la teoría de Cox predice correctamente el valor asintótico de  $T$ , cuando  $\lambda \rightarrow \infty$ . Así pues, estos resultados me permiten sugerir una corrección a la expresión de original de Cox, para el parámetro de deformación como función del tiempo, que predice favorablemente el comportamiento oscilatorio para  $\lambda > 3.6$ .

$$D(t) = D_0[1 - 2e^{-20/19Ca\lambda} \cos((1 - 3.6/\lambda) * t) + e^{-40G/19Ca\lambda}]^{1/2}. \quad (4.3)$$

Este resultado es de particular importancia, pues se ha demostrado que a partir de resultados experimentales y numéricos es posible modificar y, por lo tanto, mejorar modelos

teóricos que fueron obtenidos con métodos asintóticos y que pierden información relevante para valores intermedios de los parámetros sobre los cuales se hace la suposición asintótica, en particular, en este caso, el modelo teórico supone valores de  $\lambda \gg 1$ .

#### 4.2.4. Formas estacionarias de gotas deformadas

La forma que adquiere una gota al ser deformada como función del flujo externo que actúa sobre ella es parte de la investigación de deformación de gotas. Todos los modelos teóricos consideran pequeñas deformaciones, lo cual significa que la gota deformada solo se desvía ligeramente de su forma esférica inicial, observándose formas elipsoidales. Sin embargo, en muchos casos en los que se satisface(n) la(s) condición(es) de pequeñas deformaciones los modelos teóricos predicen formas de gotas deformadas que no son realistas [18]. Mientras que por otro lado, se ha reportado que los métodos numéricos dan resultados que están en coincidencia con lo observado experimentalmente. Los resultados numéricos -respecto a las formas estacionarias de las gotas deformadas- para los dos valores de cociente de viscosidades, están en coincidencia con los resultados experimentales. En la figura 4.13, se muestra la comparación entre las formas finales obtenidas numéricamente y las obtenidas experimentalmente, para dos números capilares,  $Ca = 0.24$  y  $0.74$ , para el caso de  $\lambda = 0.012$ .

Mientras que en la figura 4.14, se muestra la comparación entre las formas finales obtenidas numéricamente y las obtenidas experimentalmente, para tres números capilares,  $Ca = 0.11$ ,  $0.43$  y  $0.87$ , en el caso de cociente de viscosidades grande,  $\lambda = 16$ .

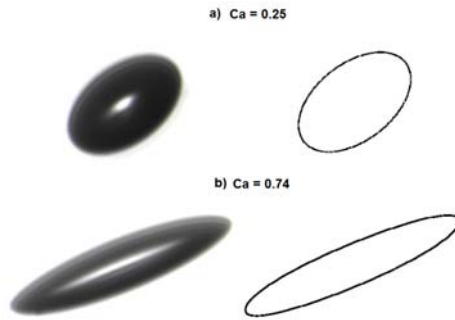


Figura 4.13: Comparación de formas estacionarias de gotas deformadas, obtenidas experimentalmente (imágenes a la izquierda) y numéricamente (imágenes a la derecha), para a)  $Ca = 0.25$  y b)  $Ca = 0.74$ , sin confinamiento.

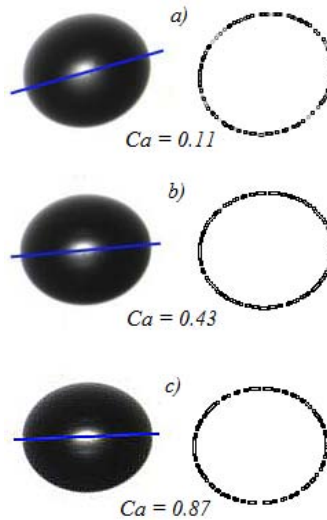


Figura 4.14: Formas estacionarias de gotas deformadas, para el caso de  $\lambda = 16$ , a diferentes valores de  $Ca$ , a)  $Ca = 0.11$ , b)  $Ca = 0.43$  y c)  $Ca = 0.87$ . Las imágenes a la izquierda corresponden a fotografías obtenidas del experimento, mientras que las de la derecha corresponden a los perfiles numéricos, sin confinamiento.

### 4.2.5. Valores críticos del cociente de viscosidades para diferentes tipos de flujo

Como hemos visto hasta ahora el modelo numérico representa bastante bien la dinámica de deformación de gotas en flujos generados por el molino de dos rodillos, pero, ¿describe el rompimiento de gotas? Como se sabe este tópico está relacionado con la formación de emulsiones. También como se explicó en el capítulo 1, para el caso de flujo cortante simple ( $\alpha = 0$ ), no es posible el rompimiento de gotas cuando  $\lambda > 3.6$ , mientras que en el caso del flujo elongacional puro ( $\alpha = 1$ ), siempre es posible el rompimiento para todo valor de  $\lambda$ . El trabajo de Bentley-Leal, consistió -en parte- precisamente en determinar los valores críticos de cocientes de viscosidades,  $\lambda_c$ , más allá de los cuales, para un tipo de flujo constante, no es posible el rompimiento.

Como parte del trabajo de investigación nos propusimos, encontrar los intervalos reducidos entre los que se encuentre  $\lambda_c$  para cada tipo de flujo. La intención era la de probar si con nuestro método numérico podíamos reproducir los valores que han sido reportados [12] y si estos resultados son razonables, entonces, “predecir” los valores de  $\lambda_c$ , que no han sido reportados y son de interés en nuestro estudio. Se conocen experimental y numéricamente los valores de  $\lambda_c$  para  $\alpha = 0, 0.2$  y  $0.4$  [12]. Lo que hicimos fue lo siguiente, para un valor fijo del tipo de flujo, hicimos simulaciones con valores de  $\lambda$ , alrededor de los valores conocidos. Los resultados para diferentes tipos de flujo se muestran en la tabla 4.4.

Los valores de  $\lambda_c$  conocidos están dados dentro del intervalo que reportamos, dado que no nos interesa una comparación cuantitativa, si no más cualitativa. Lo que resulta interesante es que los valores críticos de los cocientes de viscosidades para  $\alpha = 0$  y  $0.4$  están dentro

Tipo de Flujo	Intervalo de rompimiento
$\alpha = 0.00$	$3 < \lambda < 4$
$\alpha = 0.03$	$5 < \lambda < 6$
$\alpha = 0.05$	$6 < \lambda < 7$
$\alpha = 0.075$	$7 < \lambda < 8$
$\alpha = 0.10$	$9 < \lambda < 9.5$
$\alpha = 0.15$	$13 < \lambda < 14$
$\alpha = 0.20$	$18 < \lambda < 19$
$\alpha = 0.25$	$24 < \lambda < 25$
$\alpha = 0.30$	$35 < \lambda < 36$
$\alpha = 0.40$	$56 < \lambda < 58$

Tabla 4.4: Intervalos de valores de cocientes de viscosidad críticos, obtenidos numéricamente, para los cuales hay rompimiento, correspondientes a diferentes valores de tipo de flujo.

del intervalo que encontramos, para  $\alpha = 0$  se sabe que  $\lambda_c = 3.6$  y para  $\alpha = 0.4$ ,  $\lambda_c = 57$ . Sin embargo, el valor de  $\lambda_c$  que Bentley-Leal reportaron ( $\lambda_c = 14.7$ ) para  $\alpha = 0.2$ , no cae dentro de nuestro intervalo de predicción. Creemos que esta diferencia se debe a que el flujo con  $\alpha = 0.2$ , generado con FRMs, es inestable ya que para generar ese tipo de flujo, dos rodillos deben estar girando muy despacio respecto a los otros dos rodillos y su presencia afecta el flujo, así en general creemos que los valores para  $\alpha = 0.2$ , reportada por Bentley-Leal no es muy confiable. Esta idea es reforzada con el hecho de que para un flujo más elongacional ( $\alpha = 0.4$ ), el valor crítico que ellos reportaron sí está dentro del nuestro intervalo de predicciones.

### 4.3. Conclusiones

En términos generales podemos decir que los resultados numéricos obtenidos están en concordancia con los resultados disponibles en la literatura, en un amplio espectro de parámetros (del número capilar,  $Ca$  y del cociente de viscosidades  $\lambda$ ). Además dichas simulaciones

reproducen bastante bien la dinámica de deformación de gotas observada experimentalmente en flujos generados por TRMs. En el caso de  $\lambda \gg 1$ , el análisis de ambos resultados nos llevó a proponer una modificación al modelo de Cox que describe el comportamiento oscilatorio y la transición a monotónico. Por otro lado, el modelo numérico también es capaz de describir el rompimiento de gotas, en un intervalo reducido de valores de  $\lambda$ , para valores fijos de  $\alpha$ . La validez de dichas predicciones se basa en que se reproducen los valores experimentales para tipos los extremos de los flujos simulados  $[0, 0.4]$ .

La excelente coincidencia de los resultados aquí presentados nos llevó a plantearnos la posibilidad de hacer simulaciones para un caso de interés en estudios experimentales recientes en TRMs, se trata del caso de deformación de gotas con efectos de fronteras. Dichos resultados se presentan en el capítulo siguiente.

# Capítulo 5

## Resultados II. Gotas en canales confinados

En este capítulo presento resultados de simulaciones numéricas y de resultados experimentales, de la deformación de gotas en flujos fuertes generados por el molino de dos rodillos, considerando los efectos de frontera sobre la deformación de la gota. Las simulaciones numéricas se realizaron para los mismos parámetros que se usaron en los experimentos; los resultados aquí presentados corresponden a dos valores del cociente de viscosidades, uno pequeño ( $\lambda = 0.012$ ) y otro grande ( $\lambda = 16$ ). En ambos casos, se presentan la deformación  $D$  y el ángulo de orientación  $\theta$  como función del número capilar  $Ca$ , para diferentes confinamientos. Estos resultados los comparo con las diferentes teorías existentes, en particular con el modelo de Shapira-Haber y la extensión que aquí hago de dicho modelo y que denomino como el modelo Shapira-Haber-Cox, pues en éste último incorporo los resultados presentados en el Capítulo 1 –apropiados para gotas muy viscosas–. También presento resultados de la deformación y orientación de gotas como función del tiempo, para diferentes factores de confinamiento.



entos. Los resultados corresponden a un tipo flujo  $\alpha = 0.03$ , y de la misma manera que en el Capítulo anterior, las teorías con las que hice las comparaciones corresponden a modelos para un flujo cortante simple, por tanto, sólo se presentan como referencia. El método numérico da resultados cuantitativamente correctos en el caso de pequeñas deformaciones –que en este caso significan: números capilares pequeños y confinamientos intermedios–; además, el método numérico reproduce satisfactoriamente una serie de fenómenos derivados del efecto de confinamiento.

## **5.1. Deformación de gotas en flujos confinados generados por el molino de dos rodillos.**

Para considerar el efecto del confinamiento sobre la dinámica de deformación en flujos generados por el molino de dos rodillos, consideré un flujo elongacional caracterizado por  $\alpha = 0.03$ . Se trata del valor más bajo que puede alcanzarse con el molino de dos rodillos (TRMs). En este caso, la separación (gap) entre los rodillos es de 3 mm y experimentalmente es fácil colocar gotas en la región entre los rodillos cuyos diámetros sean comparables con dicho gap para así considerar efectos de frontera. Para flujos más elongacionales ( $\alpha > 0.03$ ), el gap es mayor y experimentalmente es más “difícil” el estudio de los efectos de frontera. A continuación presento los resultados obtenidos, respecto a deformaciones y orientaciones estacionarias y también como función del tiempo. Ambos resultados, experimentales y numéricos son comparados con las teorías existentes para deformación en flujos cortantes simples confinados. A pesar de la cercanía del tipo de flujo estudiado ( $\alpha = 0.03$ )

respecto al cortante simple ( $\alpha = 0.0$ ), una reducción relativa de la vorticidad del orden del 5–6% induce diferencias significativas en la evolución de la dinámica de las gotas, derivadas de las características dinámicas impuestas por el molino de dos rodillos (fronteras curvas), además de una vorticidad menor.

### 5.1.1. Deformaciones y orientaciones estacionarias en flujos confinados.

Para hacer el estudio numérico considerando efectos de frontera, el código numérico incorpora ahora los radios de los rodillos (los cuales determinan el valor del tipo de flujo  $\alpha$ ), el tamaño de las gotas en los experimentos; los valores del cociente de viscosidades ( $\lambda = 0.012$  y  $\lambda = 16$ ), los materiales utilizados en los experimentos así como sus propiedades físicas, fueron descritas en el Capítulo 1. En la Fig. 5.1 se muestran las deformaciones estacionarias como función del número capilar  $Ca$ , obtenidas numérica y experimentalmente para el caso de  $\lambda = 0.012$ , también se incluyen las predicciones teóricas para flujos cortantes simples. El confinamiento es tomado en cuenta a través del factor de confinamiento  $d/g$ , que corresponde al cociente del diámetro de la gota entre la separación (gap) entre los cilindros,  $g$ .

Para el caso cuando el confinamiento es holgado,  $d/g = 0.12$ , –ver Fig. 5.1a) –, los valores numéricos de  $D$  y  $\theta$  vs.  $Ca$  coinciden bastante bien con los resultados experimentales en todo el intervalo de valores del número capilar  $(0, 1)$ , mientras que los modelos teóricos de Shapira-Haber (SH) y el modelo Shapira-Haber-Cox (SH-Cox) propuesto en este trabajo, también ofrecen una descripción adecuada y prácticamente coinciden entre sí. Sin embargo, para  $Ca > 0.6$  ambos modelos predicen valores de deformación más grandes respecto a los

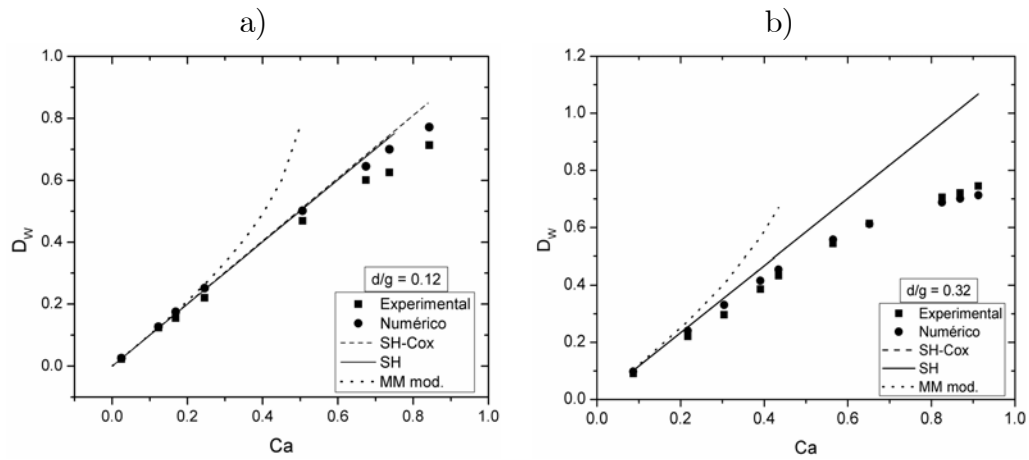


Figura 5.1: Deformación como función del número capilar, correspondientes a dos factores de confinamiento: (a)  $d/g = 0.12$  y (b)  $d/g = 0.32$ . Para el caso del cociente de viscosidades pequeño.

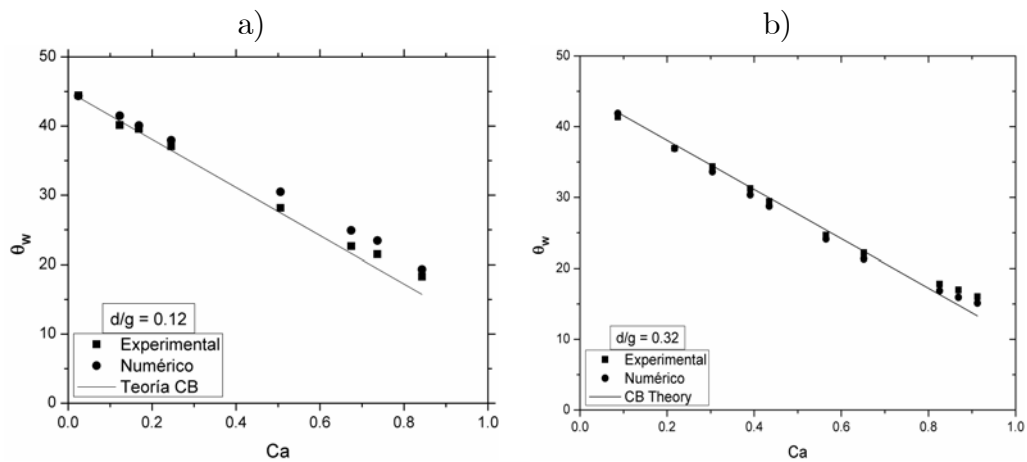


Figura 5.2: Orientación como función del número capilar, correspondientes a dos factores de confinamiento: (a)  $d/g = 0.12$  y (b)  $d/g = 0.32$ . Caso del cociente de viscosidades pequeño.

valores obtenidos experimental y numéricamente. Por lo tanto para  $Ca < 0.6$ , el método numérico puede considerarse como correcto dado que coincide con los resultados asintóticos. En la misma Figura, se observa que, de manera similar al caso de deformación sin efecto de fronteras, la teoría de Minale modificada (SH-MM), tiene una validez limitada para valores de  $Ca \leq 0.25$ .

Para el caso de un confinamiento más pronunciado,  $d/g = 0.32$ , los resultados numéricos coinciden muy bien con los experimentales, como puede verse en la Fig. 5.1b). En cambio, las teorías de Shapira-Haber (SH) y Shapira-Haber-Cox coinciden entre sí pero sólo ofrecen resultados correctos para  $Ca < 0.45$ , aproximadamente. Nuevamente, el modelo de SH-MM, tiene una validez limitada para valores de  $Ca \leq 0.25$ . Esta discrepancia de los resultados numéricos y experimentales, respecto de las predicciones teóricas, ya se había hecho notar previamente en otros trabajos [47, 44]. Los resultados numéricos y experimentales de la deformación como función del número capilar para confinamientos intermedios, Fig. 5.1b), implican que cuando el cociente de viscosidades es pequeño, la deformación de la gota deja de ser proporcional al número capilar. Es decir, de una manera más general, este resultado implica que, para valores pequeños de  $\lambda$ , el confinamiento inhibe de manera no-lineal la deformación de la gota.

Los resultados numéricos y experimentales obtenidos para la orientación de la gota deformada como función del número capilar, para el caso de  $d/g = 0.12$ , se muestran en la Fig. 5.2a). Nuevamente se observa que los resultados numéricos coinciden con los resultados experimentales. Los resultados para el caso de un mayor confinamiento,  $d/g = 0.32$ , se muestran en la Fig. 5.2b). Como se muestra de estos resultados, no hay efecto considerable del confinamiento sobre la orientación. En ambos casos el modelo que mejor describe el

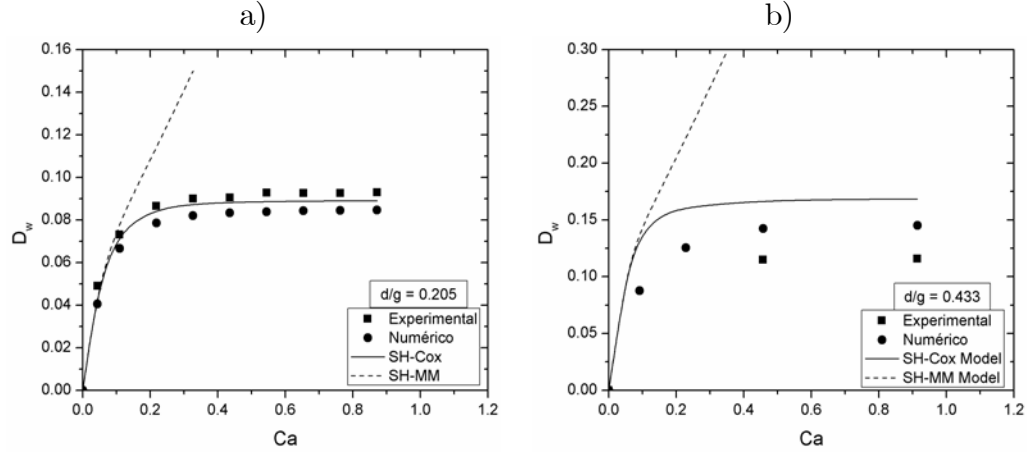


Figura 5.3: Deformación como función del número capilar, correspondientes a dos factores de confinamiento: a)  $d/g = 0.205$  y b)  $d/g = 0.433$ . Para el caso de cociente de viscosidades grande.

comportamiento observado es el modelo teórico de Chaffey-Brenner [14], válido también en el caso de deformación libre.

Para el caso del cociente de viscosidades grande,  $\lambda = 16$ , los resultados de la deformación  $D$  como función de  $Ca$ , obtenidos numéricamente y su comparación con los resultados experimentales se muestran en la Fig. 5.3a) cuando el factor de confinamiento  $d/g = 0.205$ , y en la Fig. 5.3b) para el caso de un factor de confinamiento de  $d/g = 0.433$ . Ambos casos los comparo con el modelo propuesto en este trabajo: Shapira-Haber-Cox (SH-Cox). Recordemos que la teoría de Shapira-Haber (SH) no funciona correctamente, pues preserva la linealidad de la deformación como función del número capilar; también se incluye la teoría de Minale modificada aunque, como se observa, también falla para el caso del cociente de viscosidades grandes.

En la Figura 5.4, muestro los resultados numéricos y experimentales de la orientación de la gota deformada como función del número capilar, para diferentes factores de confinamiento. La Fig. 5.4a) muestra resultados numéricos y la Fig. 5.4b) muestra resultados experimentales;

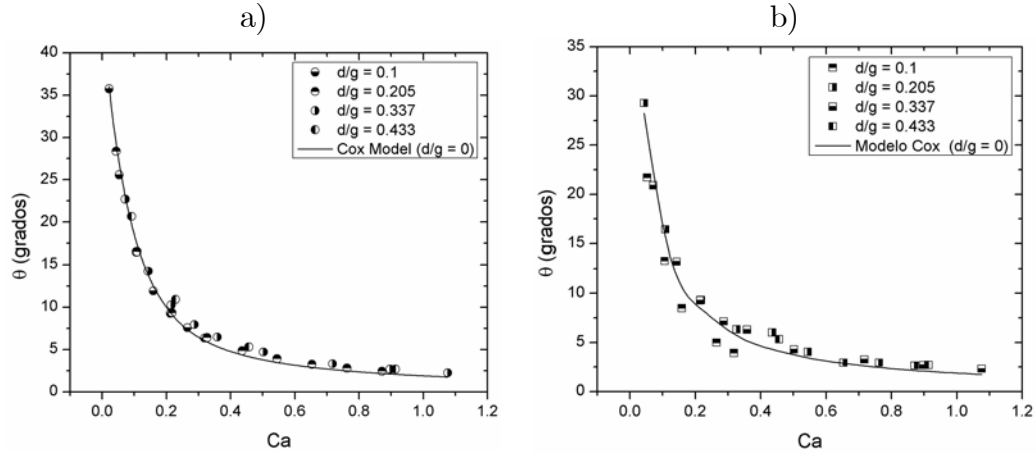


Figura 5.4: Orientación como función del número capilar, correspondientes a diferentes factores de confinamiento,  $d/g = 0.1, 0.205, 0.337$  y  $0.433$ . Para el caso de cociente de viscosidades grande. La figura a) corresponde a resultados numéricos y la figura b) corresponde a resultados experimentales.

ambos casos son comparados con la teoría de Cox que es la que mejor describe el comportamiento de la orientación como función del número capilar para este valor de  $\lambda$ . Nuevamente, los resultados numéricos concuerdan muy bien con lo observado experimentalmente y como se observa, de la misma manera que el caso del cociente de viscosidades pequeño, no hay efecto del confinamiento sobre la orientación final de la gota.

### 5.1.2. Deformaciones y orientaciones como función del confinamiento.

En el Capítulo 1, describí los modelos teóricos de la deformación de la gota, como función del confinamiento. En resumen, se puede afirmar que la deformación es una función cúbica del factor de confinamiento  $d/g$ , así como una función lineal respecto al número capilar,  $Ca$ . Para el caso de cocientes de viscosidades muy pequeño ( $\lambda \ll 1$ ) y un flujo cortante simple, varios trabajos reportan excelente coincidencia entre resultados experimentales, numéricos y

la teoría. En nuestro caso encontramos por un lado excelente coincidencia entre los resultados numéricos y los resultados experimentales y una coincidencia parcial con la teoría, la cual resulta válida para confinamientos intermedios y además números capilares pequeños ( $Ca < 0.4$ ). En la Fig. 5.5, se muestran la deformación como función del confinamiento, para dos números capilares  $Ca = 0.17$  y  $Ca = 0.43$ , correspondientes al valor del cociente de viscosidades más pequeño,  $\lambda = 0.012$ . Para este valor de  $\lambda$ , todos los modelos teóricos –incluyendo el modelo modificado de Cox propuesto en este trabajo– coinciden y están representados por la línea punteada. En esta Figura también se incluyen los valores de deformación numéricos y experimentales correspondientes a dos valores de confinamiento,  $d/g = 0.12$  y  $d/g = 0.32$ .

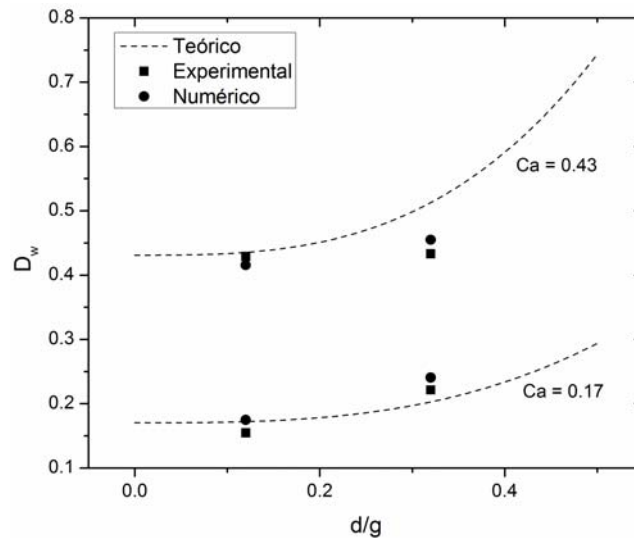


Figura 5.5: Deformación  $D_w$  como función del confinamiento  $d/g$ , para dos valores de número capilar,  $Ca = 0.17$  y  $0.43$ . Para el caso de cociente de viscosidades,  $\lambda = 0.012$ . Los símbolos corresponden como sigue: (■) resultados experimentales, (●) resultados experimentales, (- -) Teorías SH, SH-MM, SH-Cox.

A partir de la Figura 5.5, se observa que para el caso del capilar más pequeño ( $Ca = 0.17$ ) hay una buena concordancia entre los resultados experimentales y los numéricos con la

teoría. Sin embargo, para un número capilar de  $Ca = 0.43$ , los resultados numéricos y los experimentales coinciden, pero ambos se separan de las predicciones teóricas; esto no es sorprendente, pues en muchos casos las teorías son válidas para  $Ca < 0.4$ , pero con efectos de frontera intermedios, esta validez, de acuerdo a nuestras observaciones para este valor de  $\lambda$ , se ve reducida para valores de  $Ca < 0.25$ .

En la Figura 5.6 se muestran resultados numéricos de la orientación estacionaria  $\theta_W$  de gotas deformadas como función del factor de confinamiento  $d/g$ , para diferentes valores del número capilar. Cuando el factor de confinamiento es intermedio ( $d/g < 0.5$ ), no hay efecto del confinamiento sobre la orientación de la gota deformada para números capilares pequeños ( $Ca < 0.1$ ) y ésta se orienta de manera similar al caso de deformación libre. En cambio, cuando el confinamiento es grande ( $d/g \geq 0.5$ ) se presentan efectos importantes, para los mismos valores de  $Ca$ . Para valores del número capilar más grandes ( $Ca > 0.1$ ), aún para valores de confinamiento intermedio ( $d/g \simeq 0.4$ ), la orientación estacionaria de la gota muestra un alineamiento del eje mayor de gota más cercano a la dirección principal del flujo. En estos casos, la deformación de la gota es ligeramente mayor que lo observado, y por tanto, difícilmente puede atribuirse a la vorticidad del flujo nominal dicho alineamiento; es posible sin embargo, que dado que la vorticidad aumenta en la cercanía de las fronteras, entonces existe una vorticidad extra que se aplica sobre las regiones extremas de la gota que es superior a la que ocurre en el punto de estancamiento.

La Figura 5.7, muestra una aportación de resultados experimentales, centrales de este trabajo. Estos experimentos corresponden a la deformación como función del factor de confinamiento, pero para el caso de  $\lambda = 16$ . Este caso es interesante pues los modelos existentes tanto el de Shapira-Haber como el de Minale Modificado (SH-MM) fallan al describir



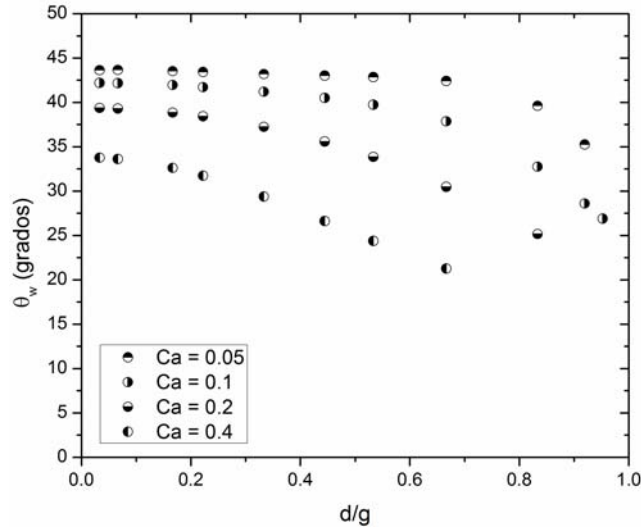


Figura 5.6: Resultados numéricos de la orientación de las gotas deformadas como función del confinamiento para diferentes valores del número capilar, para el caso de cociente de viscosidades,  $\lambda = 0.012$ .

el comportamiento observado, además de que no existen resultados experimentales previos para este valor de  $\lambda$ .

En la Figura 5.7 se comparan los resultados numéricos y experimentales con el modelo de Shapira-Haber-Cox propuesto en este trabajo. Como puede verse, este modelo resulta válido para confinamientos intermedios  $d/g \leq 0.4$ ; en la misma figura se incluye el modelo de Minale modificado (SH-MM), para mostrar que las predicciones de dicho modelo fallan. Como puede verse también, el modelo numérico está limitado a dar resultados cuantitativamente correctos para confinamientos intermedios. Claramente, para confinamientos mayores ( $d/g \geq 0.4$ ) las simulaciones numéricas predicen deformaciones más grandes a las observadas.

De la misma manera que en el caso del cociente de viscosidades pequeño, en la Fig. 5.8, se muestran resultados numéricos de la orientación estacionaria  $\theta_w$  de gotas deformadas como función del factor de confinamiento  $d/g$ , para diferentes valores del número capilar.

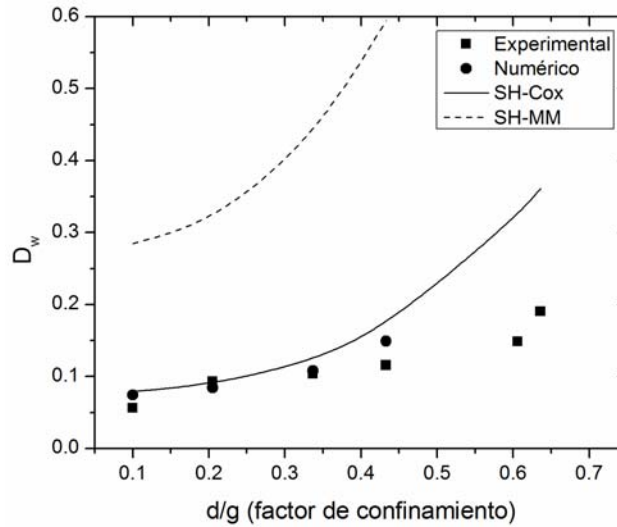


Figura 5.7: Deformación  $D_w$  como función del factor de confinamiento  $d/g$ , para el caso de  $\lambda = 16$ . Los símbolos corresponden como sigue: (■) resultados experimentales, (●) resultados experimentales, (- -) modelo SH-MM y (—) modelo SH-Cox.

En este caso, se observa que, para todos los números capilares, no hay efectos considerables del confinamiento sobre la orientación de las gotas cuando dicho factor  $d/g < 0.4$ , mientras que para valores más grandes,  $d/g > 0.4$  empiezan a notarse los efectos. Nuevamente, el efecto del confinamiento sobre la orientación de las gotas es alinear el eje más deformado de la gota en la dirección principal del flujo, como se ve en la Fig. 5.8; todas las curvas correspondientes a diferentes números capilares “convergen” a un mismo valor de  $\theta_w$ . Para valores grandes de confinamiento, éste valor del ángulo corresponde al ángulo de salida del flujo. Para valores pequeños de número capilar ( $Ca < 0.3$ ), se aprecia un valor máximo de la orientación para confinamientos grandes  $0.6 < d/g < 0.85$ . Muchas veces debido a dificultades experimentales no siempre es posible observar este tipo de detalles, que sí pueden obtenerse numéricamente y que pueden aportar información complementaria.

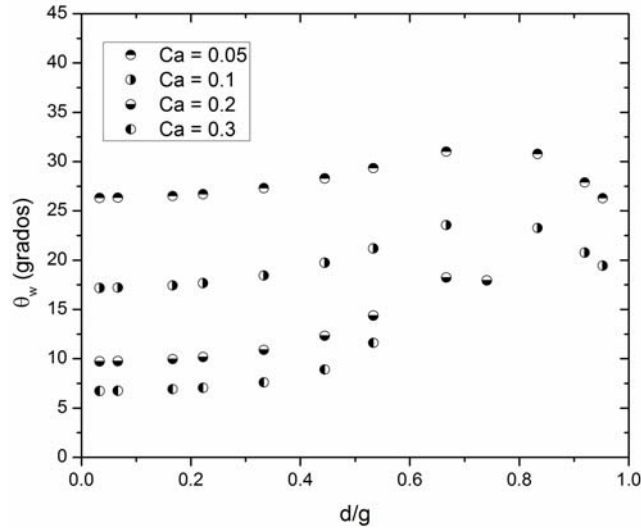


Figura 5.8: Orientación de las gotas deformadas como función del confinamiento para diferentes valores del número capilar, para el caso de cociente de viscosidades,  $\lambda = 16$ . Resultados numéricos.

### 5.1.3. La evolución temporal de las deformaciones y orientaciones

En el caso de deformación libre de gotas poco viscosas,  $\lambda = 0.012$ , se observó que el parámetro de deformación tiene un comportamiento monótonico como función del tiempo. Este comportamiento es similar al observado en el caso de factores de confinamiento pequeños. Sin embargo, en el caso de factores de confinamiento intermedios, se observan ciertas diferencias. En la Fig. 5.9, se muestran los resultados numéricos y experimentales de la evolución temporal del parámetro de deformación para siete números capilares  $Ca = 0.087, 0.22, 0.3, 0.39, 0.56, 0.65$  y  $0.91$ , correspondientes a un factor de confinamiento,  $d/g = 0.32$ . Como se observa en los experimentos numéricos (Fig. 5.9a)), a partir de cierto número capilar, se observa un domo al arranque del proceso – conocido como *overshot* en la literatura inglesa. Dicho comportamiento ha sido reportado previamente por otros autores [47, 43], en experimentos y simulaciones de deformación de gotas en flujos o en estudios de

líquidos no-newtonianos bajo condiciones de flujo cortante simple. Los resultados numéricos aquí presentes considero que son correctos porque ante un ligero aumento de la deformación de la gota, el torque que ejerce la vorticidad sobre el elipsoide es significativo, ocasionando su giro; pero a medida que se aleja del eje principal de deformación la gota se deforma por el flujo más lentamente, y entonces se logra una configuración de equilibrio.

Pero el problema es más complejo que lo antes expuesto, pues si se analizan los resultados para flujos en molinos TRMs –en especial los casos de soluciones poliméricas– los resultados experimentales indican que para flujos con un parámetro  $0.05 < \alpha < 0.2$  los overshoots persisten. Para estos líquidos no-newtonianos la microestructura es muy deformable, y así es factible que el overshoot sea más significativo. En cambio, los resultados experimentales (Fig. 5.9b)) para gotas poco viscosas, dicho *overshot* no se observa, y podría ser resultado de una alta elasticidad de la gota debido a la tensión superficial, que es mayor que para elasticidad entrópica de los líquidos poliméricos. También es importante recordar las limitaciones del TRMs: hago notar que el sistema de control del molino –para mantener la gota en el punto de estancamiento– no es suficientemente preciso bajo las condiciones expuestas –la gota sufre perturbaciones por las imperfecciones del giro de los cilindros, resultado del tamaño grande de la gota. Ello podría ser una razón de la atenuación parásita y aleatoria de la deformación instantánea, lo que dificulta la detección de los detalles finos en la evolución de la deformación de la gota.

La orientación de las gotas como función del tiempo, correspondientes a los mismos números capilares de la Figura anterior, se muestran en la Fig. 5.10. Nuevamente, los datos numéricos (Fig. 5.10a) muestran *overshots* que no se observan en los datos experimentales (Fig. 5.10b), pero ambos resultados coinciden cualitativamente.

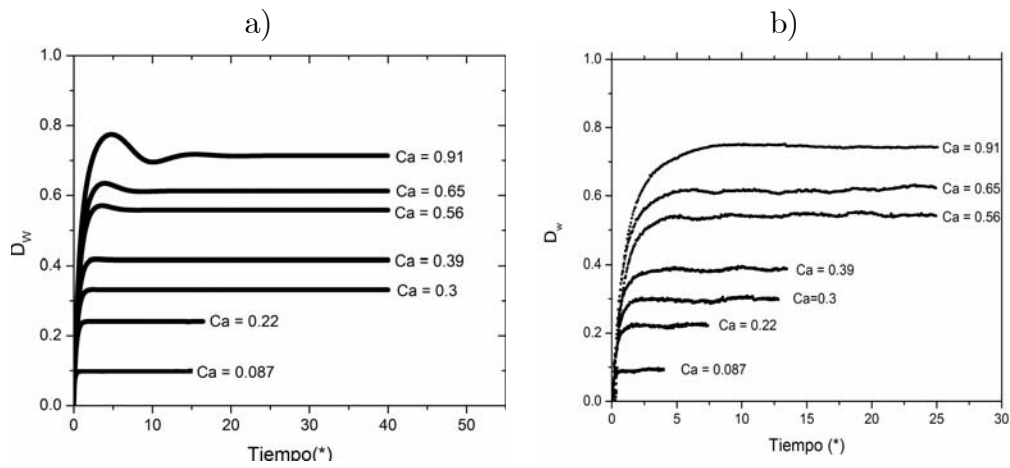


Figura 5.9: Deformación como función del tiempo para diferentes números capilares. Correspondientes al caso de cociente de viscosidades pequeño, a) resultados numéricos y b) resultados experimentales.

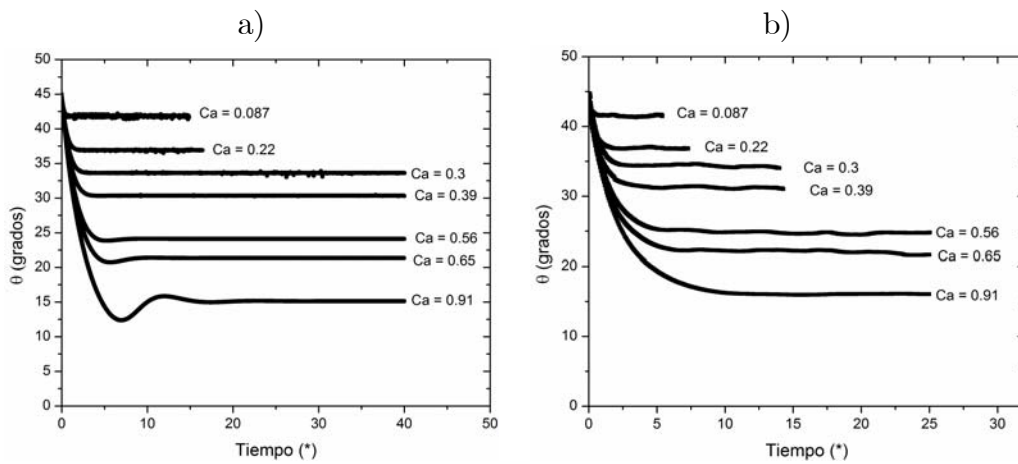


Figura 5.10: Orientación como función del tiempo para diferentes números capilares. Correspondientes al caso de cociente de viscosidades pequeño, a) resultados numéricos y b) resultados experimentales.

Nuevamente el caso del cociente de viscosidades grande,  $\lambda \gg 1$ , como en el caso de flujo cortante simple, muestra resultados interesantes. Con base a los resultados previos o a partir de los modelos teóricos, el efecto de la presencia de fronteras cercanas provoca una deformación mayor sobre la gota, aun manteniendo el número capilar constante. Esto conlleva al posible rompimiento de gotas para valores del número capilar menores, como efecto exclusivo del confinamiento. Este hecho tiene implicaciones importantes para el caso de  $\lambda \gg 1$ , pues recordemos que es bien conocido el hecho de que no es posible romper gotas en flujos cortantes simples si  $\lambda > 3.6$ .

En la Figura 5.11, se muestra una comparación de las simulaciones numéricas –Fig. 5.11a)– y los datos experimentales (Fig. 5.11b)) de la deformación como función del tiempo cuando el número capilar es constante,  $Ca = 1$ , y correspondientes a tres valores de confinamiento,  $d/g = 0.205, 0.337$  y  $0.433$ . Primero, se observa que la coincidencia entre ambos resultados es buena, y por otro lado, dichos resultados muestran el incremento de la deformación por efecto del confinamiento a tal punto que es posible el rompimiento de la gota. En la Fig. 5.11 también se observa la transición del comportamiento oscilatorio inicial (sin efectos de frontera) a un incremento gradual del “período” de oscilación, entrecomillamos la palabra período pues tanto los resultados numéricos como los resultados experimentales muestran un comportamiento ciertamente alejado de un comportamiento oscilatorio puro.

De la misma manera que en el caso anterior, en la Fig. 5.12 presento las gráficas de la orientación como función del tiempo correspondientes a tres valores de confinamiento,  $d/g = 0.205, 0.337$  y  $0.433$ , para gotas con un cociente de viscosidades grandes. También en este caso la coincidencia de ambos resultados es notable: ambos predicen un valor estacionario igual, lo que significa, como ya se había dicho en la sección anterior, que tampoco aparece un

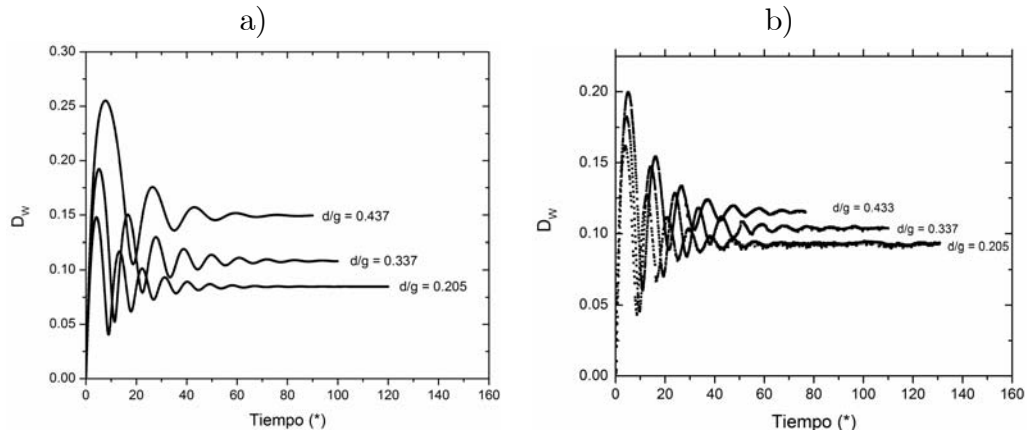


Figura 5.11: Deformación como función del tiempo correspondiente a diferentes confinamientos, pero con un mismo valor de número capilar ( $Ca = 1$ ), para el caso de cociente de viscosidades grande, a) resultados numéricos y b) resultados experimentales.

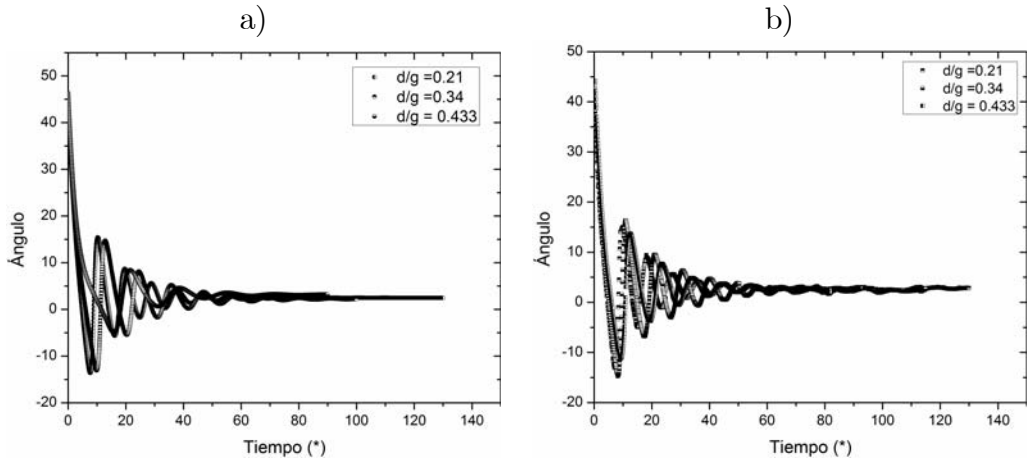


Figura 5.12: Orientación como función del tiempo correspondiente a diferentes factores de confinamiento  $d/g = 0.205$ ,  $0.337$  y  $0.433$  para un mismo valor de número capilar,  $Ca = 1.0$ , a) resultados numéricos y b) resultados experimentales, ambos correspondientes al caso de cociente de viscosidades grande.

efecto del confinamiento sobre la orientación de las gotas para este valor de  $\lambda$ . A partir de dichas gráficas, también se observa que el período se incrementa al aumentar el confinamiento.

#### 5.1.4. Formas estacionarias de gotas deformadas

Como hemos dicho antes, la forma que toma una gota cuando se deforma bajo la acción de un flujo externo débil (capilares pequeños) como ha sido verificado experimental y numéricamente suele ser elipsoidal, también como se dijo en la sección anterior, los modelos teóricos existentes aún para pequeñas deformaciones predicen formas irreales. Para el caso del cociente de viscosidad pequeño,  $\lambda = 0.012$ , en la Fig. 5.13, se muestra la comparación entre las formas finales obtenidas numéricamente y las obtenidas experimentalmente, para un confinamiento intermedio ( $d/g = 0.3$ ) y dos números capilares,  $Ca = 0.65$  y  $0.95$ .

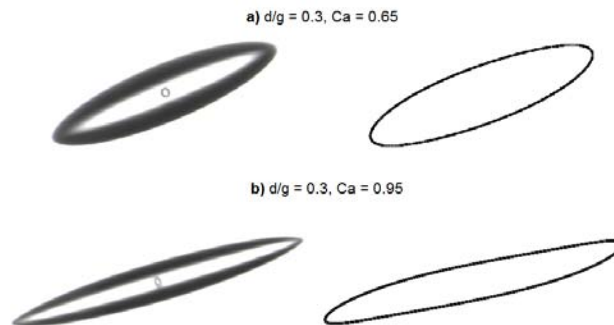


Figura 5.13: Comparación de formas estacionarias de gotas deformadas, obtenidas experimentalmente (imágenes a la izquierda) y numéricamente (imágenes a la derecha), para un confinamiento intermedio, para el caso de cociente de viscosidades grande.

En la Figura 5.14 se muestra una comparación de las formas finales estacionarias de las gotas deformadas obtenidas numéricamente y su comparación con las formas experimentales para tres valores de confinamiento,  $d/g = 0.21$ ,  $0.34$  y  $0.43$ , para el caso de cociente de



viscosidades grande,  $\lambda = 16$ .

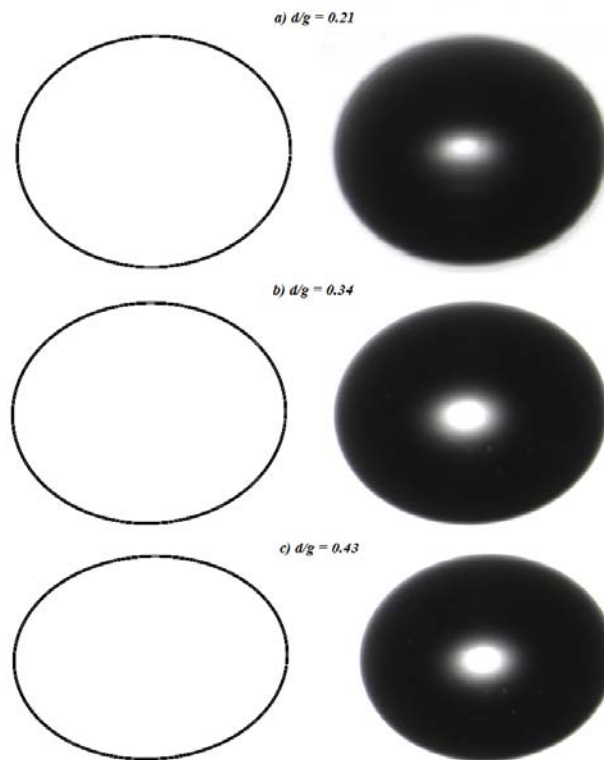


Figura 5.14: Formas estacionarias de gotas deformadas correspondientes a tres valores de confinamiento. Los perfiles de la izquierda fueron obtenidos numéricamente, mientras que las de la derecha corresponden a los obtenidos experimentalmente.

Las Figuras 5.13 y 5.14 –para ambos cocientes de viscosidades– muestran los resultados numéricos que reproducen bastante bien lo observado experimentalmente. La coincidencia entre ambos resultados es notable pues se observan formas idénticas. Tampoco existen diferencias importantes respecto del caso libre (sin fronteras), ya que se siguen observando formas elipsoidales.

Recuérdese que, en otros trabajos [47, 43] se ha reportado que el efecto de la presencia de fronteras sobre la forma de las gotas es que éstas alcanzan formas sigmoidales preferentemente, en lugar de elipsoidales. El hecho de que en los resultados aquí presentados se

sigan observando formas elipsoidales, puede deberse a: (a) que en general las deformaciones observadas son menores respecto a las obtenidas en flujo cortante simple, y (b) dado que la simulación es bidimensional, cuantificar efectos para mayores deformaciones es todavía muy complejo, sin que a la fecha exista información experimental de formas 3D de gotas. Aun así, mi método numérico también es capaz de reproducir lo que ocurre en los casos reportados; como muestra de ello en la Fig. 5.15 se muestra una comparación de las formas estacionarias obtenidas experimental y numéricamente por Anderson, *et al.*, [47] y las obtenidas numéricamente con mi código numérico, para  $\lambda = 1$  y  $Ca = 0.2$ , y correspondientes a dos factores de confinamiento,  $d/g = 0.18$  y  $0.8$ .

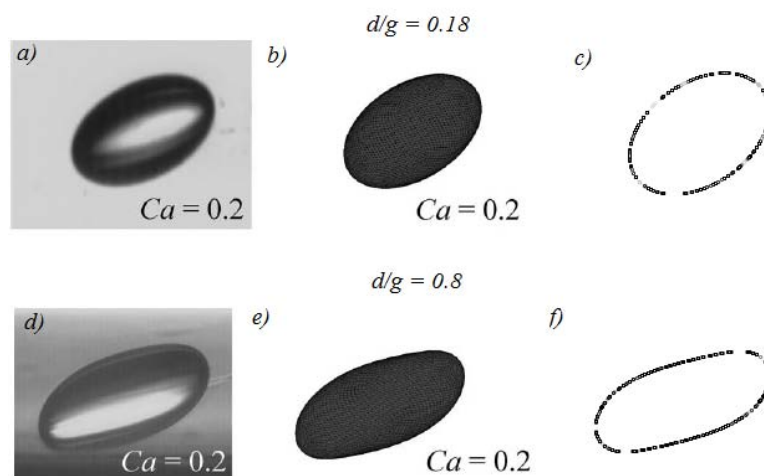


Figura 5.15: Formas estacionarias de gotas deformadas para  $\lambda = 1$  y  $Ca = 0.2$ , reportadas por Anderson y Janssen [49], para dos factores de confinamiento. Los resultados obtenidos con nuestro método (figuras c) y f)) reproducen lo observado.

Para este caso, mis resultados numéricos también reproducen lo observado. Esta coincidencia obviamente es limitada: en el caso de mayores confinamientos (esto es, mayores deformaciones), las formas obtenidas numéricamente con el método aquí propuesto son más



Figura 5.16: Formas de gotas deformadas obtenidas por Anderson et al. (a y b) y la obtenida en este trabajo (c), para  $\lambda = 1$ ,  $Ca = 0.2$  y  $d/g = 0.9$ .

deformadas respecto a las numéricas o experimentalmente previamente reportadas. Es claro que esto sea así, pues mis simulaciones conservan área en lugar de volumen. Como muestra de ello en la Fig. 5.16, se muestran los resultados con los mismos parámetros que los de la Fig. 5.15 ( $\lambda = 1$  y  $Ca = 0.2$ ) pero para un factor de confinamiento mayor,  $d/g = 0.9$ , entre mis simulaciones y los reportados por Anderson *et al.*, [47].

## 5.2. Cinemática estacionaria alrededor de gotas deformadas

El estudio numérico de deformación de gotas con la técnica de BEM, permite además obtener información adicional acerca de la cinemática (campos de velocidad, líneas de corriente, puntos de estancamiento) dentro y fuera de la gota, una vez que ha alcanzado el estado estacionario de deformación.

### 5.2.1. Líneas de corriente alrededor de gotas estacionarias deformadas.

La Figura 5.17 muestra las líneas de corriente alrededor y dentro de una gota bajo diferentes condiciones. En la Fig. 5.17a) se muestran las líneas de corriente para dos valores de confinamiento,  $d/g = 0.08$  y  $0.32$  para un mismo valor de número capilar  $Ca = 0.23$ , mientras que la Fig. 5.17b) la gota bajo los mismos valores de confinamiento pero para un valor de  $Ca = 0.74$ ; ambos casos para un valor de  $\lambda = 0.012$ .

De manera similar, la Figura 5.18 muestra el caso cuando el valor de cociente de viscosidades es grande ( $\lambda = 16$ ). La Fig. 5.18a) muestra las líneas de corriente para el caso de dos confinamientos  $d/g = 0.205$  y  $0.45$  para un mismo valor de número capilar  $Ca = 0.25$  y la Fig. 5.18b) muestra las líneas de corriente de una gota deformada bajo los mismos valores de confinamiento, pero con un número capilar  $Ca = 0.9$ . La comparación de las dos Figuras anteriores, no muestra diferencias significativas entre los casos de cociente de viscosidad pequeño (Fig. 5.17) y grande (Fig. 5.18). Tampoco se observan muchas diferencias, entre el caso de confinamiento pequeño y el caso intermedio. En cada uno de los casos, el comportamiento es similar al caso de deformación de gotas sin presencia de fronteras.

Dado que el flujo cortante simple posee las mismas magnitudes de rapidez de deformación y vorticidad, se alcanzan elongaciones proporcionales al número capilar, con una rotación considerable que genera líneas de corriente cerradas en el interior de la gota, alrededor del punto de estancamiento, Para el caso de  $\lambda \gg 1$ , existen líneas cerradas alrededor de la gota deformada, ya que dicho comportamiento resulta parecido a la rotación de un sólido en un fluido.

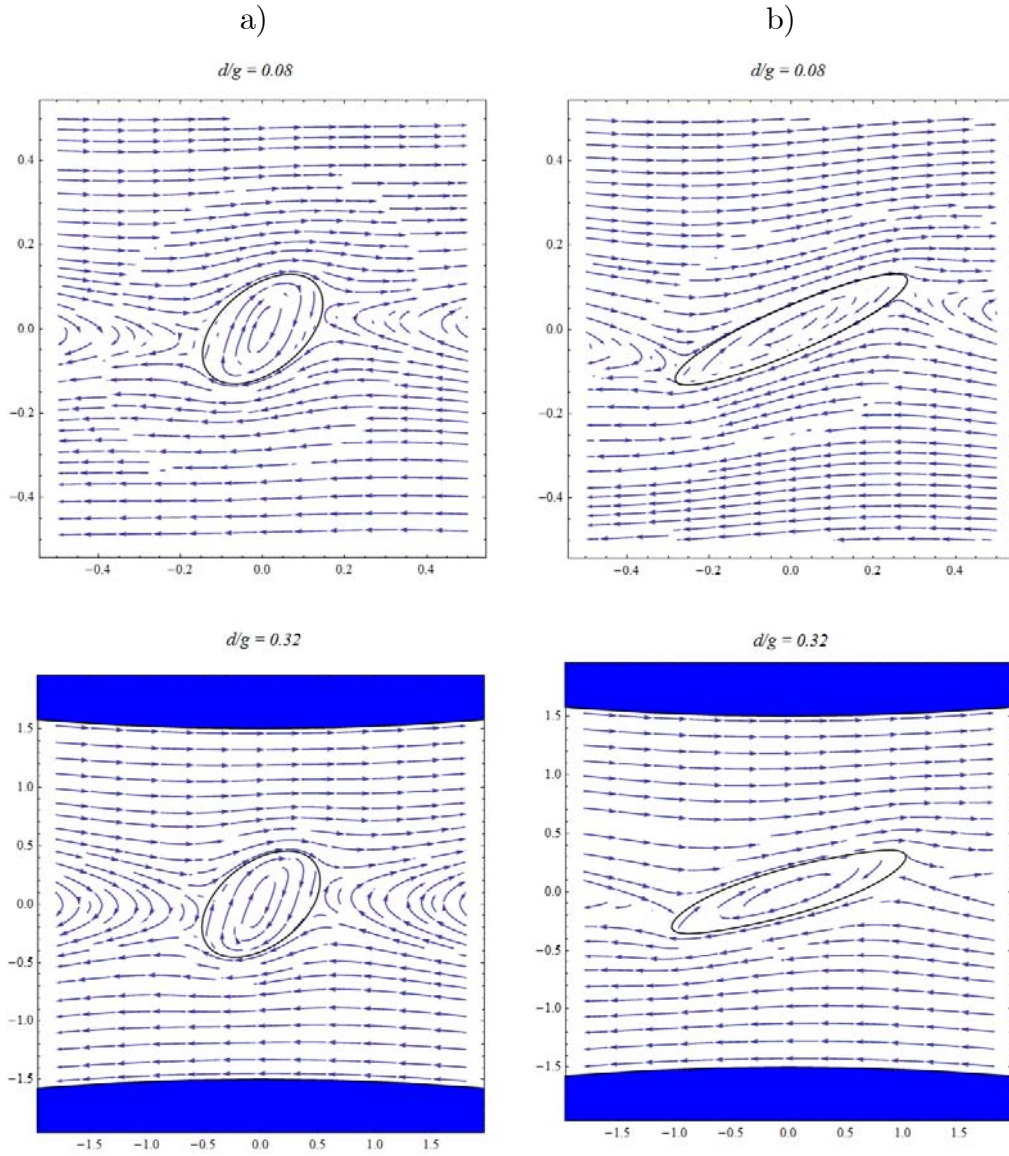


Figura 5.17: Líneas de corriente alrededor de gotas deformadas con diferentes confinamientos,  $d/g = 0.08$  y  $0.32$  para dos valores del número capilar a)  $Ca = 0.24$  y b)  $Ca = 0.8$ , b) para el caso de cociente de viscosidades pequeño, en las figuras inferiores aparecen las fronteras de los rodillos.

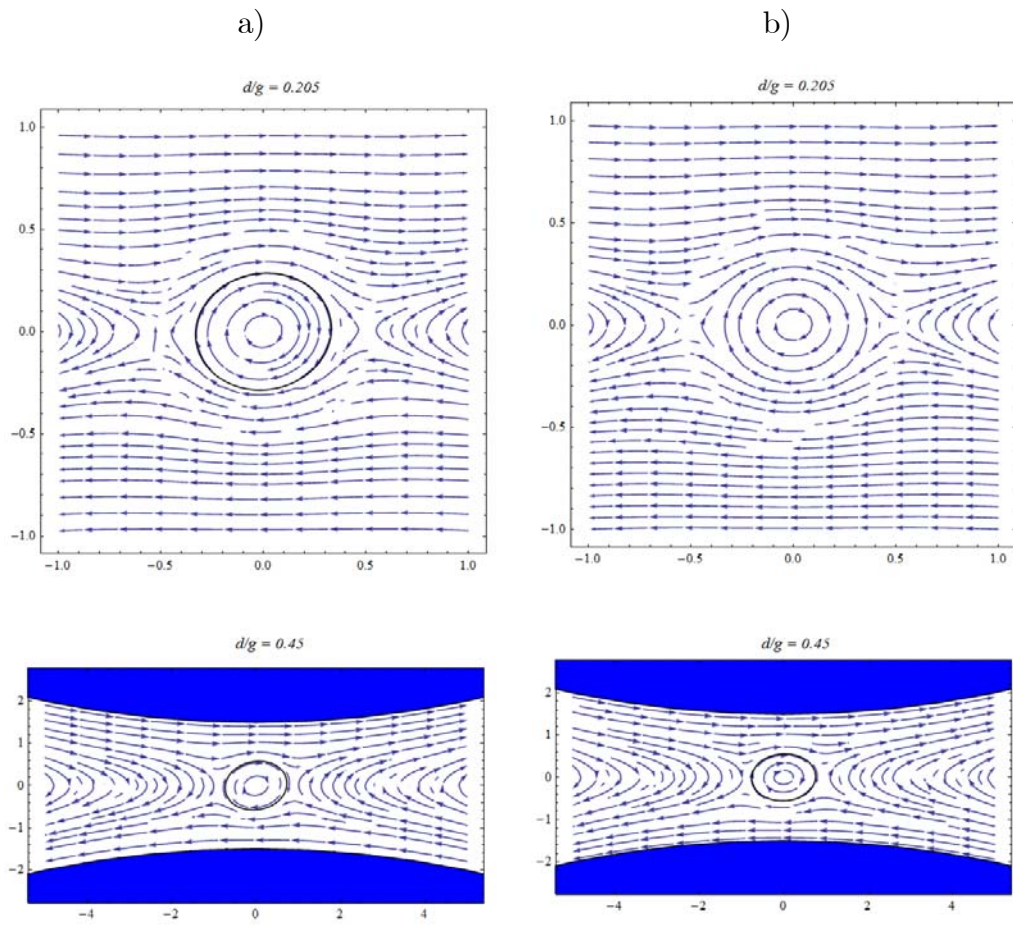


Figura 5.18: Líneas de corriente alrededor de gotas deformadas con diferentes confinamientos,  $d/g = 0.205$  y  $0.45$  para dos valores de número capilar a)  $Ca = 0.24$  y b)  $Ca = 0.8$ , b) para al caso de cociente de viscosidades grande.

## 5.2.2. Campos de velocidad y puntos de estancamiento alrededor de gotas estacionarias deformadas

Otro aspecto interesante respecto a la cinemática que se observa de los resultados de las simulaciones numéricas, tiene que ver con existencia de múltiples puntos de estancamiento y los campos de velocidad alrededor de gotas deformadas.

Para ilustrar los perfiles de los campos de velocidad así como la existencia y ubicación puntos de estancamiento alrededor de gotas deformadas me limito al caso de  $\lambda = 1$ ; en general, lo que ocurre no depende mucho del valor de  $\lambda$ , así que este caso es suficiente para mostrar la riqueza de fenómenos presentes. La información que se muestra a continuación corresponde a estados estacionarios. En la Fig. 5.19a), se muestran, para cuatro valores del número capilar  $Ca = 0.1, 0.2, 0.3$  y  $0.4$ , los campos de la *magnitud* de la velocidad, para el caso de confinamientos pequeños, que es idéntico al caso libre (sin fronteras cercanas). Superpuestos a estas Figuras, de manera similar que en las Figuras anteriores (5.17 y 5.18) se muestran las líneas de corriente y las formas finales estacionarias de las gotas deformadas, dichos campos de velocidad se muestran ahora con una función de color o tono que es función de su magnitud: valores bajos de la magnitud de la velocidad corresponden a un tono rojo, mientras que valores grandes (valores cercanos a la magnitud de la velocidad sobre los rodillos) corresponden a un tono azul, en el extremo izquierdo de la Fig. 5.19a) se incluye la representación la magnitud de la velocidad como función de la coloración.

La Figura 5.19b) muestra las líneas de corriente, pero además he superpuesto los perfiles numéricos de los campos de velocidad en las direcciones  $X$  y  $Y$  correspondientes a un valor cero de las velocidades correspondientes  $V_x$  (línea continua en color azul) y  $V_y$ , (líneas con-

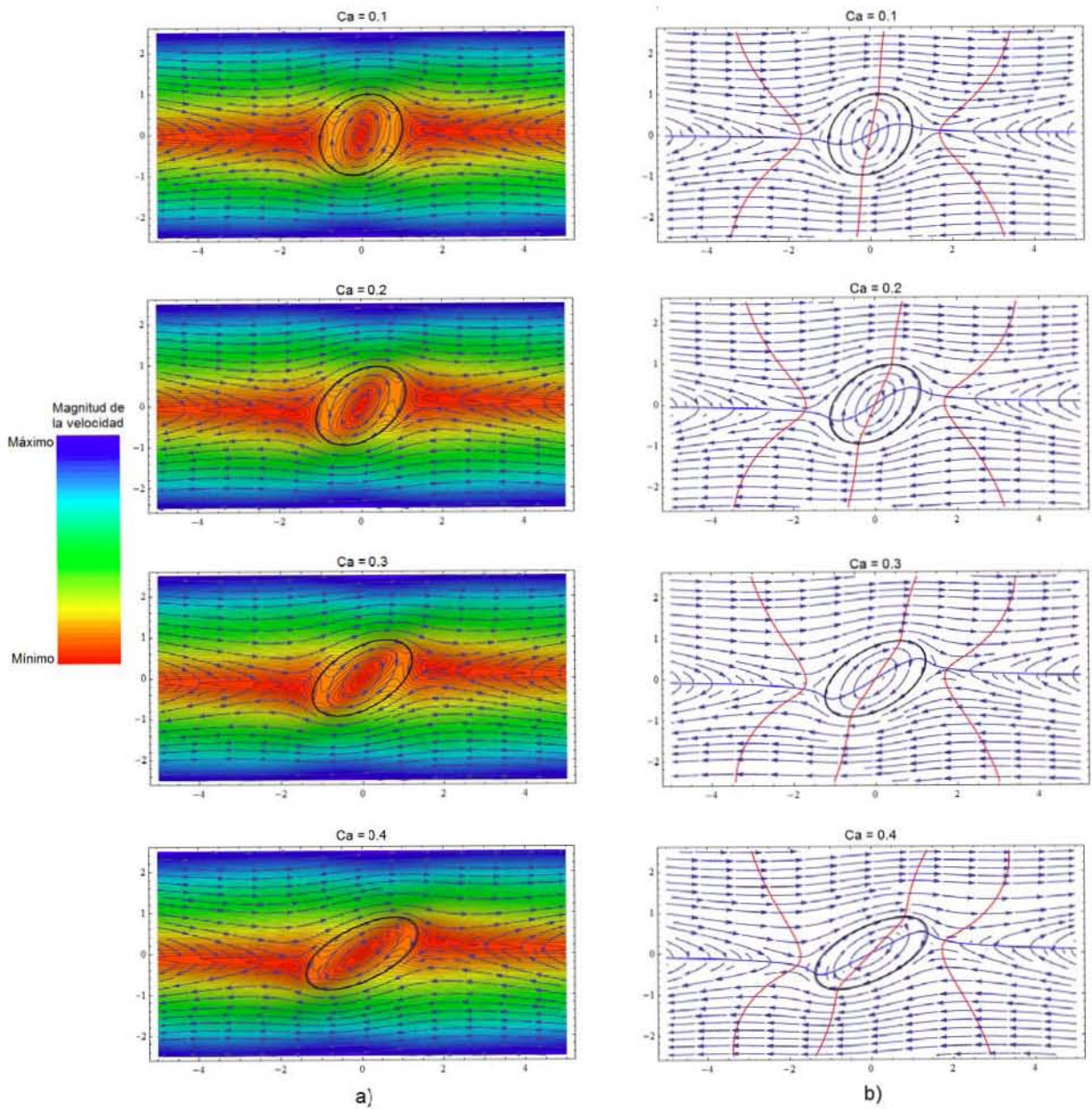


Figura 5.19: a) Campos de velocidad, forma final de la gota deformada y líneas de corriente alrededor de gotas deformadas para diferentes números capilares,  $Ca = 0.1, 0.2, 0.3$  y  $0.4$ . En este caso no hay efecto de fronteras.



tinuas en color rojo) la intersección de dichos perfiles determina la ubicación de puntos de estancamiento.

Como puede observarse, existen tres puntos de estancamiento, el principal corresponde al centro de la gota y dos puntos externos, ambos casi sobre el eje horizontal. Nótese que no hay cambios significativos debido al incremento del número capilar; el cambio más significativo tiene que ver con la alineación del perfil de velocidad cero en la dirección  $X$  (línea continua en color azul) con el eje mayor de la gota, dicha orientación como sabemos es función del número capilar.

La Figura 5.20 muestra los cambios observados en los campos de velocidad y en los puntos de estancamiento para el caso de un confinamiento estrecho,  $d/g = 0.83$ , para los tres primeros números capilares anteriores,  $Ca = 0.1, 0.2$  y  $0.3$ , para el mismo valor de  $\lambda$  ( $\lambda = 1$ ). En la Fig. 5.20a) se muestran los campos de velocidad, las líneas de corriente y la formas deformadas estacionarias y en la Fig. 5.20b) se muestran las líneas de corriente, las formas estacionarias deformadas y los perfiles de velocidad cero en sus componentes  $X$  y  $Y$ . La representación de la magnitud de la velocidad, así como los perfiles de velocidad cero, siguen la nomenclatura anterior.

Ahora se observan diferencias interesantes respecto al caso en el que el confinamiento es holgado. La primer diferencia corresponde a los campos de magnitud de velocidad, en el caso en confinamiento pequeño, toda región a lo largo del eje horizontal (zona en color rojo) tiene una magnitud de la velocidad baja, como es de esperarse. En cambio, cuando el confinamiento es considerable, la magnitud de la velocidad se ve afectada por la presencia de la gota y por la cercanía de las fronteras, se observan magnitudes de velocidad (zonas en color amarillo) más altas.

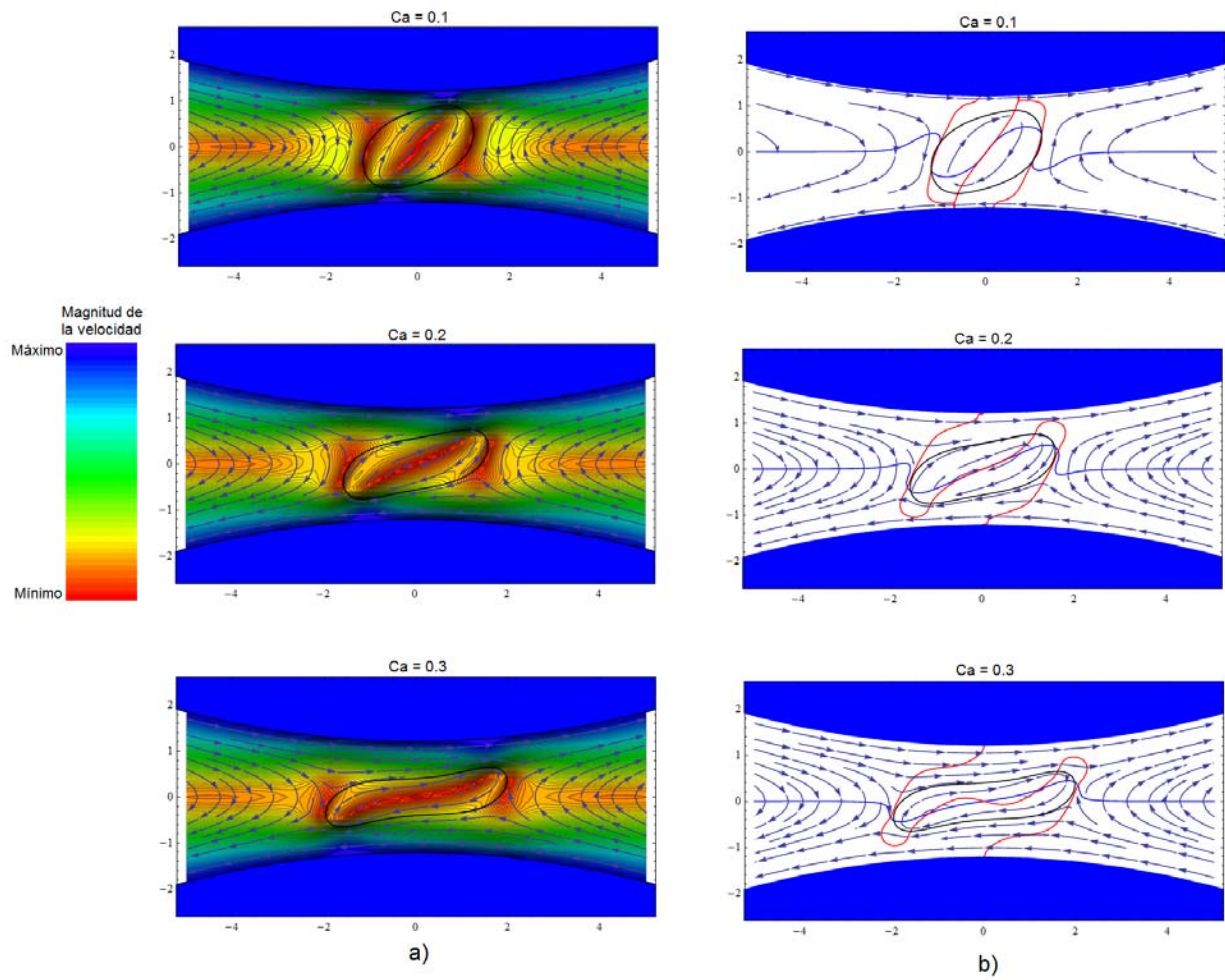


Figura 5.20: a) Campos de velocidad, forma final de la gota deformada y líneas de corriente alrededor de gotas deformadas para diferentes números capilares,  $Ca = 0.1, 0.2$  y  $0.3$ . En este caso hay un efecto de fronteras considerable,  $d/g = 0.83$ .

Respecto a los puntos de estancamiento, la presencia cercana de fronteras provoca que, en el caso de capilares pequeños ( $Ca < 0.1$ , primera Fig. de 5.20 b)), el punto de estancamiento en el centro de la gota aparente ser en realidad una *línea de estancamiento*, observándose a lo largo del eje principal de deformación y otras dos líneas a los costados de las gotas, orientadas casi perpendicularmente al eje horizontal. Mientras que para un capilar mayor ( $Ca = 0.2$ , segunda Figura de 5.20 b)), se sigue observando la *línea de estancamiento* en el interior de la gota, las líneas que estaban sobre la gota en el caso de capilares más pequeños se convierten en puntos de estancamiento ubicándose fuera de la gota en la zonas cercanas en donde existe mayor deformación. Al aumentar aún más el número capilar a un valor de  $Ca = 0.3$  (tercer Figura de 5.20 b)), se observan un total de cinco puntos de estancamiento, tres dentro de la gota deformada y dos externos. La *línea de estancamiento* en el interior de la gota deviene en la formación de tres puntos de estancamiento (dentro de la gota), mientras que los dos puntos externos permanecen sin muchos cambios. Los fenómenos antes descritos sólo se observan cuando hay efectos de frontera. En la Fig. 5.20 no se incluyó el caso de  $Ca = 0.4$ , pues para este caso no se observa un estado estacionario, si no que bajo esas condiciones se observa el rompimiento de la gota equi-viscosa.

### 5.3. Alcances y limitaciones del método numérico

Los alcances del método numérico han quedado claramente establecidos en las secciones previas, respecto al estudio de dinámica de deformación de gotas en flujos correspondientes a  $\alpha = 0.03$ . Para ambos cocientes de viscosidades estudiados ( $\lambda = 0.012$  y  $\lambda = 16$ ) se tienen coincidencias cuantitativas con un errores porcentuales menores al 8% para confinamientos

intermedios  $d/g \leq 0.4$ . Para confinamientos mayores, los resultados numéricos sólo ofrecen una coincidencia cualitativa. Como se comentó antes, éste valor de tipo de flujo es el más pequeño que se puede generar con el molino de dos rodillos con el que se dispone en el laboratorio, como se ha dicho también, otros flujos que pueden generarse en dicho dispositivo corresponden a valores  $\alpha > 0.03$ , los cuales tienen un carácter más elongacional y por lo tanto son capaces de producir mayores deformaciones. Estos flujos también pueden ser simulados mediante el código numérico actual y también se pueden considerar efectos de frontera. Sin embargo, dado que las gotas se deforman más –debido a que el flujo es “más elongacional” así como también debido a la presencia de las fronteras– dicho código ve reducido el espacio de parámetros  $(Ca, d/g)$  para los cuales ofrece resultados cuantitativos correctos, ofreciendo en gran medida resultados cualitativos confiables. Finalmente, debido a que por el momento no existen datos experimentales para flujos más elongaciones al aquí estudiado, que consideren efectos de frontera evitamos presentar resultados numéricos para esos flujos.

## 5.4. Conclusiones

Los resultados numéricos reproducen razonablemente bien lo observado experimentalmente cuando el confinamiento es moderado, independientemente del valor del cociente de viscosidades ( $\lambda = 0.012$  y  $\lambda = 16$  respectivamente). En el caso de  $\lambda = 0.012$ , los resultados numéricos y experimentales concuerdan extraordinariamente entre sí, a diferencia de los modelos teóricos. Este hecho me permite sugerir que el modelo numérico reproduce muy bien la dinámica generada por el molino de dos rodillos. Cuando los confinamientos son considerables,  $d/g > 0.4$ , el modelo numérico sobreestima las deformaciones observadas. Por

otro el modelo de Shapira-Haber-Cox (SH-Cox) propuesto en este trabajo describe razonablemente bien la dependencia de la deformación como función del número capilar para factores de confinamiento pequeños e intermedios, pero limitados a números capilares,  $Ca \leq 0.6$  en el primer caso y para  $Ca \leq 0.3$  en el segundo caso, coincidiendo además con el modelo de Shapira-Haber. En cambio, en el caso de  $\lambda = 16$ , los resultados numéricos y experimentales coinciden bastante bien, para confinamientos moderados ( $d/g \leq 0.4$ ). Por otro lado, el modelo propuesto de Shapira-Haber-Cox (SH-Cox) ofrece una descripción razonablemente correcta, siendo la descripción más adecuada hasta el momento para cocientes de viscosidades de ese orden.

Además muestro que el código numérico reproduce bastante bien varios de los efectos derivados del confinamiento, tales como alteraciones temporales del parámetro de deformación (respecto al comportamiento en deformación libre), formas estacionarias sigmoidales en lugar de elipsoidales, inhibición del rompimiento para valores pequeños de cociente de viscosidades y mejoramiento del rompimiento para valores grandes de cociente de viscosidades. Con base en estos resultados me permito concluir que el método numérico tiene un carácter predictivo confiable para valores intermedios de cociente de viscosidades como los aquí estudiados, que pueden ser de interés en estudios experimentales.

Finalmente, con la información obtenida mediante las simulaciones numéricas se ha demostrado la posibilidad de obtener información acerca de la cinemática alrededor de una gota deformada con efectos de fronteras considerables. Parte de la información cinemática que puede obtenerse se ilustró, para el caso una gota equi-viscosa, con efectos de frontera pequeños hasta valores considerables, determinando la magnitud del campo de velocidad alrededor de gotas deformadas estacionarias, líneas de corriente y puntos de estancamiento,

encontrando una riqueza de fenómenos que no existen en el caso de deformación libre.

# Capítulo 6

## Conclusiones generales

En este trabajo presento resultados de simulaciones numéricas de la deformación de gotas inducidas por flujos fuertes generados por un molino de dos rodillos (TRMs), enfatizando dos casos hasta ahora poco estudiados: uno, cuando el tamaño de las gotas es muy pequeño respecto a las longitudes características del dispositivo y por lo tanto no hay efectos de frontera apreciables –y corresponde al caso límite en el que la deformación inducida es por un flujo elongacional lineal–, y el segundo caso, cuando la gota es deformada, a segundo orden, por los efectos de frontera cercanos –en este caso el tamaño de la gota es del orden de la separación entre los rodillos. De manera particular, se hicieron simulaciones para dos valores del cociente de viscosidad,  $\lambda = 0.012$  y  $\lambda = 16$ . Los resultados obtenidos los comparé con predicciones de modelos teóricos apropiados así como con datos experimentales publicados recientemente y con resultados experimentales propios de este trabajo.

Para los casos de deformación libre –sin efectos de frontera–, los resultados numéricos obtenidos, por un lado, concuerdan con los resultados (teóricos, experimentales y numéricos) reportados en otros trabajos, para un amplio espacio de valores de los parámetros

(número capilar,  $Ca$  y del cociente de viscosidades  $\lambda$ ) y, por otro lado, las simulaciones aquí presentadas reproducen bastante bien la dinámica de deformación de gotas observada experimentalmente en flujos generados por TRMs. En el caso en el que la viscosidad de la gota es mucho mayor a la viscosidad del medio en el cual está suspendida ( $\lambda \gg 1$ ) la coincidencia entre ambos resultados (experimentales y numéricos) nos llevó a proponer una modificación al modelo de Cox que describe la deformación como función del tiempo, válida para un intervalo amplio de valores de  $\lambda$ . Dicho modelo modificado es ahora un híbrido de un modelo asintótico mejorado a partir de datos experimentales reales, que puede ser una prescripción precisa de la dinámica del sistema. Además, para el mismo caso de deformación libre, el modelo numérico también es capaz de proporcionar información respecto a las condiciones límite que conllevan al rompimiento de gotas; numéricamente, fue posible predecir valores de  $\lambda$  (en un intervalo reducido) en el que se predice el rompimiento, para diferentes valores fijos de  $\alpha$ . La validez de dichas predicciones se basa en que se reproducen los valores experimentales de  $\lambda$  para los que hay rompimiento, en los valores extremos de los flujos simulados  $[0, 0.4]$ .

En el caso de deformación de gotas con efectos de frontera, los resultados numéricos reproducen bastante bien lo observado experimentalmente hasta grados de confinamiento moderados; para ambos cocientes de viscosidades ( $\lambda = 0.012$  y  $\lambda = 16$ ). En el caso de  $\lambda = 0.012$ , los resultados numéricos y experimentales tienen una concordancia extraordinaria entre sí, pero no así con los modelos teóricos. Este hecho me permite concluir que el modelo numérico claramente reproduce la dinámica generada por el molino de dos rodillos. Para condiciones en las que el confinamiento es estrecho,  $d/g > 0.4$ , el modelo numérico sobrestima las deformaciones observadas. Mientras que para el caso de  $\lambda = 16$ , los resultados



numéricos y experimentales coinciden bastante bien, limitados a confinamientos intermedios ( $d/g \leq 0.4$ ). Por otro lado, el modelo aquí propuesto –de Shapira-Haber-Cox (SH-Cox)– ofrece una descripción razonablemente correcta, que considero es la descripción más adecuada hasta el momento para cocientes de viscosidades de ese orden ( $\lambda = 16$ ).

Además el código desarrollado me permitió mostrar una serie de efectos derivados del confinamiento, tales como alteraciones en la evolución temporal de la deformación, efectos sobre las formas estacionarias de las gotas deformadas, inhibición del rompimiento para valores pequeños del cociente de viscosidades y mejoramiento del rompimiento para valores grandes del cociente de viscosidades. Además, con la información obtenida de las simulaciones he mostrado que es posible obtener información acerca de la cinemática alrededor de una gota deformada, tal como la magnitud del campo de velocidad alrededor de gotas deformadas estacionarias, líneas de corriente y puntos de estancamiento, encontrando una posible riqueza de fenómenos que no observan en el caso de deformación libre.

Así pues, en este trabajo mostré la aplicación del método de elemento de frontera para hacer estudios numéricos de dinámica de deformación de gotas en flujos que no han sido sistemáticamente estudiados hasta ahora, y que podrían ser de un gran interés práctico en diferentes aplicaciones muy relevantes a la industria petrolera. A partir de la coincidencia entre resultados numéricos y experimentales, se verificó el carácter predictivo confiable del modelo numérico para valores intermedios del cociente de viscosidades a los aquí estudiados; además, mediante el modelo numérico, es posible obtener información complementaria que muchas veces por limitaciones del laboratorio no es posible obtener experimentalmente.

# Apéndice A

## Publicaciones

En esta apéndice contiene el siguientes artículo: C. A. Escalante-Velázquez, M. A. Huesca-Reyes, I. Yescas Rosas and E. Geffroy "Drop deformation in two-roll mills considering wall effects" *Journal of Physics: Conference Series* 582 (2015) 012014

## Drop deformation in two-roll mills considering wall effects

C A Escalante-Velázquez<sup>1</sup>, M A Huesca-Reyes<sup>2</sup>, I Yescas Rosas<sup>1</sup> and E Geffroy<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

<sup>2</sup> Departamento de Termofluidos, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

E-mail: cescalante@ciencias.unam.mx

**Abstract.** Experimental, theoretical and numerical results of dynamics of drop deformation in strong flows generated by a co-rotating two-roll mill and considering the influence of near rigid walls are presented. The drop dynamics is altered, with respect to a drop free of wall effects, by the proximity of the rigid boundaries as well as caused by a non-linear and non-uniform flow due to gradients of flow-type parameter and shear rate. Simulations were carried out using the Boundary Element Method (BEM). Since the inclusion of the whole boundaries (drop and rollers surfaces) is not an easy and trivial task, bi-dimensional numerical simulations was performed as a first approach. The experimental and numerical results were obtained for a flow type of  $\alpha = 0.03$  and two values of viscosity ratio  $\lambda = 0.012$  and 16. In general, numerical results for the stationary deformation parameters, up to intermediate confinements, are in agreement with the experiments, with and without wall effects. Since the case of drops with a high viscosity ratio did not match existing theoretical models, the wall-effect theory of Shapira and Haber was modified, considering Cox's second-order theory as the converging theory without wall effects. From low to intermediate confinements, the new Cox-Shapira-Haber model fitted the observed experimental deformations.

### 1. Introduction

Deformation and breakup of a droplet in a continuous immiscible liquid phase under confined flow is of interest in several applications, such as microfluidics technologies and emulsion processing [1], among many other where the flow dynamics can be significantly altered by the presence of channel walls.

Most of previous studies have investigated the deformation of drops in confined simple shear flows (which corresponds to  $\alpha = 0$ ) by the relative motion of parallel plates [2-4]. The experimental [2, 3] and numerical [4] results remit to Shapira and Haber theory (SH model) [5] that is valid for small deformations. This theory predicts the *total* deformation of a drop under simple shear flow given by:

$$D_0 = D_0 \left( 1 + \left( \frac{R}{W} \right)^3 \frac{1+2.5\lambda}{1+\lambda} C_s \right), \quad (1)$$

where  $D_0$  correspond to deformation parameter of Taylor [6] —being a function of the capillary number  $Ca$ —,  $R$  is the initial radius of drop,  $W$  is the separation between the walls,  $\lambda$  is the viscosity ratio, and  $C_s$  is the so-called shape factor, which depends on the position of the drop. Recently, Maffetone and Minale [7] adapted this model (we will call it SH-MM Model), where  $D_0$  corresponds to the deformation of ellipsoidal drops proposed previously by them [8].

Experimental and numerical studies [2-4] have compared the SH theory and found it valid for small capillary numbers ( $Ca < 0.3$ ) and intermediate ratios of confinement ( $2R/W < 0.35$ ). Beyond these limits the shapes of stationary drops shift from ellipsoidal to sigmoidal.

In this work, the flows are non-linear, two-dimensional and capable of generating a wide spectrum of values of its kinematic parameters: in one extreme the flow is very close to simple shear, sweeping smoothly towards the other end where significant elongation effects can be present. The flow generated by two-roll mills (2RM's), has been studied analytically and numerically in the past, with general solutions being available [9, 10, 11] and more recently experimentally [12] as well. The size of the cylinders and their separation determine the value of the flow-type parameter  $\alpha$  at the stagnation point, while the shear rate  $\gamma$  also at the stagnation point depends on the angular velocities of the cylinders. For 2RM's, the shear rate has a minimum value at the stagnation point and a maximum value on the surface of the cylinders while the flow-type has a maximum value at the stagnation point and a minimum value on the cylinders surface [9, 10].

In order to study the effect of walls on drops, the size of the drop (diameter) must be comparable to the gap between the rolls. Under those conditions, the drop deforms in flow fields with gradients on the flow-type parameter  $\alpha$  and the shear rate  $\gamma$  around the stagnation point. This combination of features makes the dynamics of droplets influenced by wall effects a non-idealized system not fully analysed up to date.

Since the experimental and numerical results of this work did not match the space of parameters of existing studies, a model that preserves the dependence of the confinement factor on deformation (in the spirit of the initial model) is developed, assuming as well drops with high viscosity ratios. Thus,  $D_0$  corresponds now to the steady free deformation of Cox theory [13].

## 1. Experimental

An extensive description of the 2RM flow can be found in [9-12]. The radius of the cylinders was 49 mm, with a separation between their centers of 52 mm giving a gap (g) of 3 mm. The experiments were carried out for two viscosity ratio ( $\lambda = 0.012$  and  $16$ ). In both cases the suspending fluid was PolyDiMethylSiloxane (PDMS), DMS T35 from Gelest Inc., with viscosity  $\mu_m = 51$  Poise and relative density  $\rho_m = 0.973$  at  $25^\circ\text{C}$ . For the low viscosity ratio system the drop fluid consisted of vegetable canola oil with a viscosity  $\mu_{d1} = 0.6$  Poise and a relative density  $\rho_{d1} = 0.917$  at  $25^\circ\text{C}$ . The interfacial tension for this system was  $2.7$  mN/m. For the high viscosity ratio system the drop fluid consisted in PolyIsobutylene by Polysciences Inc., with a viscosity  $\mu_{d2} = 816$  Poise and a relative density  $\rho_{d2} = 0.92$  at  $25^\circ\text{C}$ . The corresponding interfacial tension was  $3.5$  mN/m. All experiments were performed at  $25^\circ\text{C} \pm 0.1^\circ\text{C}$ .

## 2. Numerical method

The boundary integral equations take into account explicitly the presence of rigid surfaces and deformable fluid interfaces, simulating the deformation of a drop between two cylinders. The integral equation for the flow field within the drop,  $\mathbf{u}_2(\mathbf{x})$ , or exterior to the drop in the matrix fluid,  $\mathbf{u}_1(\mathbf{x})$ , will be dependent upon boundary integrals taken on the drop interface  $S_{\text{drop}}$  as well as on the cylinder surfaces  $S_{\text{rigid},1}$  and  $S_{\text{rigid},2}$ . These integral equations can be found in reference [14].

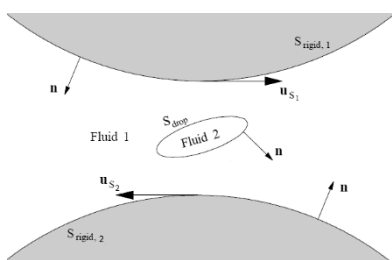


Figure 1. Liquid-drop interface deformed by the flow field generated by solid boundaries. In the middle of the rollers there is a stagnation point where the drop is initially placed.

In Figure 1, a schematic representation is depicted. We assume a Newtonian, inertial-less drop with initial radius  $R$  and viscosity  $\mu_{\text{drop}}$ —located between the two cylinders— and immersed in

a Newtonian matrix fluid of viscosity  $\mu_m$ . The viscosity ratio was  $\lambda = \mu_{\text{drop}}/\mu_m$ . The position of the stagnation point is located exactly halfway between the cylinders when the angular velocities are same.

### 3. Results

The numerical and experimental results obtained in a two-roll mill device for stationary drop deformation values are presented as a function of capillary number and also compared with theoretical models of: (a) small deformation Cox theory [13], (b) Chaffey and Brenner model [15], for angle orientation in the free case, and (c) SH-Cox model, adapted here in the case of confined drop deformation.

#### 3.1. Stationary Drop deformation. The case of Low viscosity ratios

The lowest viscosity ratio ( $\lambda = 0.012$ ) was studied experimental and numerically for different capillary numbers (between 0.05-0.8). Figure 2 shown the deformation and orientation for the stationary drop deformation as a function of capillary number for two confinement factors  $d/g = 2R/g$ .

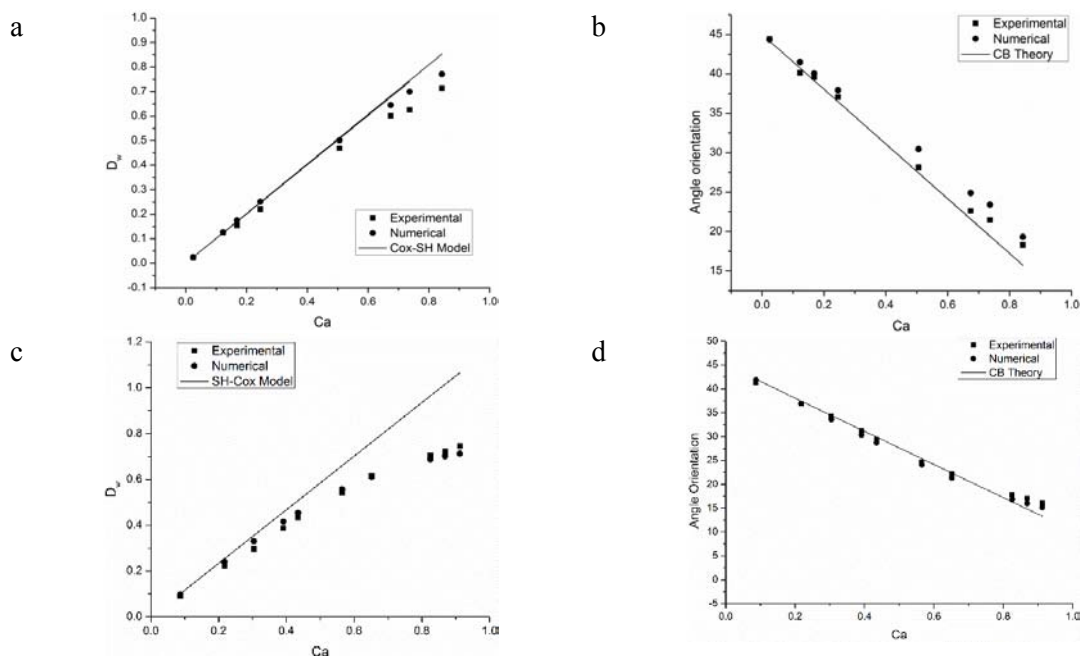


Figure 2. Deformation and orientation angle for the stationary drop deformation as a function of capillary number. (a) and (b) corresponds to  $d/g = 0.08$ , (c) and (d) to  $d/g = 0.3$ : ■, experimental results; ●, numerical results; —, SH-Cox model (a) and (c), Chaffey and Brenner theory (b) and (d).

For weak confinement a good agreement was found between the experimental, numerical, and theoretical models. In the numerical results, when  $Ca > 0.8$ , no stationary deformation was observed (drop break up occurs), whereas in the experimental results the critical capillary was found around  $Ca = 0.95$ . In Figures 2c and 2d a good agreement between numerical and experimental results can be observed in the case of confined drops, whereas the SH-Cox model exhibited a higher deviation with respect to the experimental results for  $Ca > 0.4$  whereas no change was observed in the final angle orientation due to confinement. It was corroborated that there is not difference in the use of the Taylor, SH-MM or Cox theories for these viscosity ratios. Such theories coincided and predicted a linear dependence between capillary number and the deformation parameter.

#### 3.2. Stationary Drop deformation. High viscosity ratio case

For weaker confinements,  $d/g = 0.1$ , the numerical results agreed with the values obtained using SH-Cox model, as it can be seen in Figure 3a; however, numerical and theoretical results gave larger deformation values. This discrepancy might be the result of the experimental control system that tends to enhance the flow vorticity, thus inhibiting slightly the experimental drop deformation. On the other hand, good agreement for  $d/g = 0.205$  can be observed in Figure 3b. Numerical results and the SH-Cox model were very close to experimental results. Under this condition, the non-linear effects of the walls may mitigate the non-idealities of the control scheme of the flow

For a higher confinement,  $d/g = 0.337$ , a good agreement was also found, as it is shown in Figure 3c. However, the theoretical models predict larger deformation than experimental or numerical data. For more pronounced confinement effects,  $d/g = 0.433$ , Figure 3d is shown. In this last case the numerical simulations and theory gave deformations larger than those occurring in experimental results. Both, SH and SH-MM models fail to predict this asymptotic behavior observed for high viscosities, even in the no-wall effects case, that's because these model preserves in some way, the linear dependence on Ca. Alternatively it is possible use the Taylor asymptotic model [6] but this not describe the initial dependence on Ca.

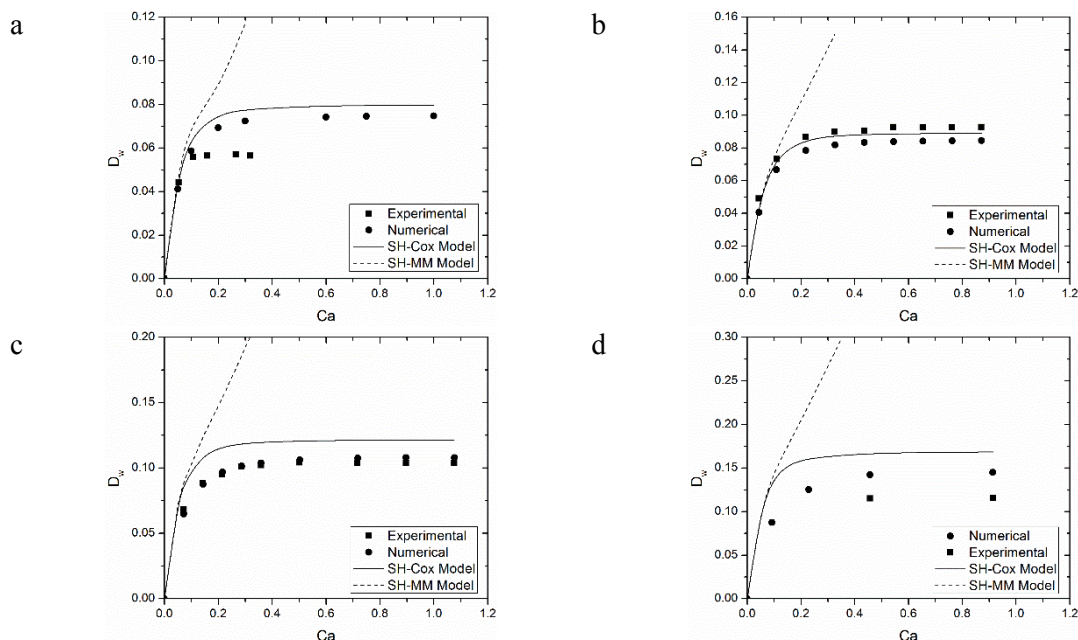


Figure 3. Stationary deformation versus capillary number. Comparison of experimental (■), numerical (●) and theoretical (—, SH-Cox model), (- -, SH-MM model) for four confinements factors,  $d/g = 0.1$  (a),  $d/g = 0.205$  (b),  $d/g = 0.337$  (c) and  $d/g = 0.433$  (d).

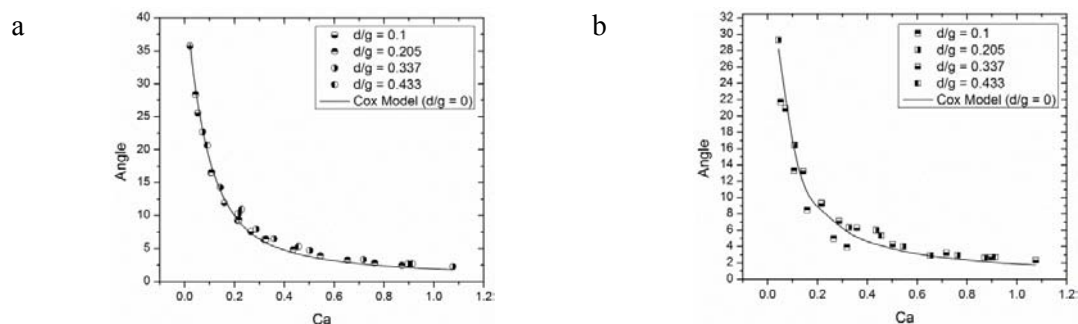


Figure 4. Comparison of theoretical model (Cox theory) with numerical (a) and experimental (b) results obtained for the orientation angle of the stationary drop deformation in a flow field generated by the two-roll mill device for different confinement factors.

The steady state orientation angle of the deformed drops did not manifest wall effects, for neither the experimental or numerical results. In fact, both methods agreed with Cox Theory [13] as it can be seen in Figure 4. A comparison of numerical, experimental and theoretical results for stationary drop deformation values, as a function of confinement for high viscosity ratio, is shown in Figure 5. It can be observed that the agreement with predictions of the SH-Cox model were mostly qualitative. This difference may be attributed to the flow dynamics of the non-linear flow of the 2RM's.

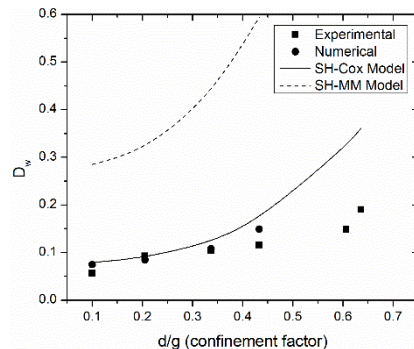


Figure 5. Stationary drop deformation vs. the confinement factor. SH-Cox model predicts a larger deformation than numerical and experimental data. It can be also observed that the SH-MM model fails to predict at high viscosity cases.

#### 4. Conclusions

Numerical simulations using BEM in the study of stationary drop deformation with confinement effects showed a noticeable agreement with experimental results obtained in a device able to generate non-idealized flows (non-linear flow fields with gradients in shear rate and flow type, and curved walls). All phenomena observed in the experiment were reproduced numerically. Despite the bi-dimensional simulations nature, the numerical model captured the basic hydrodynamics, which confirm its predictive nature, mainly due to the fact that drop deformation remain small for most experimental conditions, and the drop curvature is quasi-homogenous. This work is the first effort to encompass the full kinematics existing in the two roll mills in the study of confined drop deformations. The adapted model SH-Cox model predicts the drop deformation on intermediate confinements and small deformations, covering the full regime of high viscosities drop deformations under wall effects.

#### 6. Acknowledgments

The first author (Escalante-Velázquez) is thankful to National Council of Science and Technology (CONACYT) and PCEIM-UNAM for providing the financial support for his PhD studies at UNAM.

#### 5. References

- [1] Stone H A, Stroock A D and Ajdari A 2004 *Ann. Rev. Fluid Mech.* **36** 81—411
- [2] Sibillo V, Pasquariello G, Simeone M Cristini V and Guido S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 054502
- [3] Vananroye A, Van Puyvelde P and Moldenaers P 2007 *J. Rheol.* **51** 139-53
- [4] Janssen P J A and Anderson P D 2007. *Phys. Fluids*, **19** 043602
- [5] Shapira M and Haber S 1990 *Int. J. Multiphase Flow* **16** 305-21
- [6] Taylor G I 1932 *Proc. Roy. Soc. A* **138**, 41.
- [7] Minale M 2008 *J Rheologica Acta* **47** 667-75
- [8] Maffettone P and Minale M 1998 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **78** 227-41
- [9] Reyes M A H and Geffroy E 2000 *Phys. Fluids*, **12** 2372-75
- [10] Reyes M A H and Geffroy E 2000 *Rev. Mex. Fis.* **46** 135-47
- [11] Reyes M A H 2005 PhD thesis, UNAM, México
- [12] Rosas Y I 2013 PhD thesis, UNAM, México
- [13] Cox R G 1969 *Journal of Fluid Mechanics* **37** 601-23
- [14] Pozrikidis C 1992. *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow* (Cambridge University Press)
- [15] Chaffey C E and Brenner H 1967 *J. Colloid Interface Sci.* **24** 258-69

# Referencias

- [1] J. M. Rallison. The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **16**:45–66, 1984.
- [2] H. A. Stone. Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **26**:65–102, 1994.
- [3] A. C. Payatakes. Dynamics of oil ganglia during immiscible displacement in water-wet porous media. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **14**:365–393, 1982.
- [4] S. C. Jana, G. Metcalfe, and J. M. Ottino. Experimental and computational studies of mixing in complex stokes flows: the vortex mixing flow and multi-cellular cavity flow. *J. Fluid Mech.*, **269**:199–246, 1994.
- [5] H. A. Stone, A. D. Stroock, and A. Ajdari. Microfluidics toward a lab-on-a-chip. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **36**:381–411, 2004.
- [6] W. R. Schowalter, C. E. Chaffey, and H. Brenner. Rheological behavior of a dilute emulsion. *J. Colloid Interface Sci.*, **26**:152–160, 1968.
- [7] S. Guido, F. Greco, and ;M. Villone. Experimental determination of drop shape in slow steady shear flow. *J. Colloid and Interface Science*, **219**:298–309, 1999.



- [8] G. I. Taylor. The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A146**, 1934.
- [9] F. D. Rumscheid and S. G. Mason. Deformation and burst of fluid drops in shear and hyperbolic flow. *J. Colloid Science.*, **16**:238–261, 1961.
- [10] S. Torza, R. G. Cox, and S. G. Mason. Transient and steady deformation and burst of liquid drops. *J. Colloid and Interface Science*, **38**(2), 1972.
- [11] B. J. Bentley and L. G. Leal. A computer-controlled four-roll for investigations of particle and drop dynamics in two-dimensional shear flows. *J. Fluid Mech.*, **167**:219–240, 1986.
- [12] B. J. Bentley and L. G. Leal. An experimental investigation of drop deformation and breakup in steady, two-dimensional linear flows. *J. Fluid Mech.*, **167**:241–283, 1986.
- [13] G. I. Taylor. The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid. *Proc. Roy Soc. (London)*, **A138**, 1932.
- [14] C. E. Chaffey and H. Brenner. A second-order theory for shear deformations drops. *J. Colloid Interface Sci.*, **24**:258–269, 1967.
- [15] R. G. Cox. The deformation of a drop in a general time-dependent fluid flow. *J. Fluid Mech.*, **37**:601–623, 1969.
- [16] N. A. Frankel and A. Acrivos. The constitutive equation for a dilute emulsion. *J. Fluid Mech.*, **44**:65–78, 1970.

- [17] J. M. Rallison. Note on the time-dependent deformation of a viscous drop which is almost spherical. *J. Fluid Mech.*, **98**:625–633, 1980.
- [18] F. Greco. Second-order theory for the deformation of a newtonian drop in a stationary flow field. *Physics of Fluids*, **14**(3), 2002.
- [19] J. M. Rallison and A. Acrivos. A numerical study of deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow. *J. fluid Mech.*, **89**:115–127, 1978.
- [20] J. M. Rallison. A numerical study of deformation and burst of a viscous drop in general shear flows. *J. Fluid Mech.*, **109**:465–482, 1981.
- [21] M. R. Kennedy, C. Pozrikidis, and R. Sakalak. Motion and deformation of liquid drops, and rheology of dilute emulsions in simple shear flow. *Comput. Fluids*, **23**(2):251–278, 1994.
- [22] V. Cristini, J. Blawdziewicz, and M. Loewenberg. Drop breakup in three-dimensional viscous flow. *Physics of Fluids*, **10**(8):1781–1873, 1998.
- [23] C. J. Lawrence, B. J. Briscoe, and W. G. P. Mietus. A review of immiscible fluid mixing. *Adv. in colloid and interface science*, **81**(1), 1999.
- [24] S. Guido and M. Villone. Three-dimensional shape of a drop under simple shear flow. *J. Rheology*, **42**(2), 1998.
- [25] F. Greco. Single drop immersed in a moving fluid: Analytic solution for slow flows of second-order fluids. *International congress on Rheology*, 2000.

- [26] S. Guido and F. Greco. Drop shape under slow steady shear flow and during relaxation. experimental results and comparison with theory. *Rheol. Acta*, **40**:176–184, 2001.
- [27] Y. T. Hu and A. Lips. Determination of viscosity from drop deformation. *J. Rheol.*, **45**(6):1453–1463, 2001.
- [28] Y. T. Hu and A. Lips. Transient and steady state three-dimensional drop shapes and dimensions under planar extensional flow. *J. Rheol.*, **47**(2), 2003.
- [29] P. L. Maffettone and M. Minale. Equation of change for ellipsoidal drops in viscous flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **78**:227–241, 1998.
- [30] D. Barthes-Biesel and A. Acrivos. Deformation and burst of liquid droplet freely suspended in a linear shear field. *J. Fluid Mech.*, **61**:1–21, 1973.
- [31] N. Grizzuto and O. Bifulco. Effects of coalescence and breakup on steady-state morphology of an immiscible polymer blend in shear flow. *Rheol. Acta*, **36**:406–415, 1997.
- [32] I. Vinckier, P. Moldenaers, and J. Mewis. Relationship between rheology and morphology of model blends in steady shear flow. *J. Rheol.*, **40**:613–631, 1996.
- [33] A. S. Allmusallam, R. G. Larson, and M. J. Solomon. A constitutive model for the prediction of ellipsoidal droplets shapes and stresses in immiscible blends. *J. Rheol.*, **44**(5), 2000.
- [34] Edwards B. J and Dressler M. A rheological model with constant approximate volume for immiscible blend of ellipsoidal drops. *Rheol. Acta*, **42**, 2003.

- [35] S. Torza, R. G. Cox, and S. G. Mason. Particle motions in sheared suspensions: Xxvii. transient and steady deformation and burst of liquid drops. *J. Colloid and Interface Science*, **38**:395–411, 1972.
- [36] J. D. Buckmaster. Pointed bubbles in slow viscous flow. *J. Fluid Mech.*, **55**:385–400, 1972.
- [37] J. D. Buckmaster and J. E. Flaherty. Pointed bubbles in slow viscous flow. *J. Fluid Mech.*, **60**:625–639, 1973.
- [38] A. Acrivos and T. S. Lo. Deformation and breakup of a single slender drop in an extensional flow. *J. Fluid Mech.*, **86**, 1978.
- [39] E. J. Hinch and A. Acrivos. Steady long slender droplets in a two-dimensional straining motion. *J. Fluid Mech.*, **91**, 1979.
- [40] E. J. Hinch and A. Acrivos. Long slender drops in simple shear flow. *J. Fluid Mech.*, **98**, 1980.
- [41] H. P. Grace. Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and applications of static mixers as dispersion devices in such systems. *Chem. Eng. Commun.*, **14**:225–277, 1982.
- [42] H. L. Goldsmith and S. G. Mason. The flow of suspensions through tubes. i. single spheres, rods, and discs. *Journal of Colloid Science*, **17**(5):448 – 476, 1962.
- [43] V. Sibillo, G. Pasquariello, M. Simeone, V. Cristini, and S. Guido. Drop deformation in microconfined shear flow. *Physical Review Letters*, **97**(5), 2006.

- [44] A. Vananroye, P. Van Puyvelde, and P. Moldenaers. Effect of confinement on the steady-state behavior of single droplets during shear flow. *Journal of Rheology*, **51**(1):139–153, 2007.
- [45] M. Shapira and S. Haber. Low reynolds number motion of a droplet in shear flow including wall effects. *International Journal of Multiphase Flow*, **16**(2), 1990.
- [46] M. Mario. A phenomenological model for wall effects on the deformation of an ellipsoidal drop in viscous flow. *Rheologica Acta*, 47(5-6):667–675, 2008.
- [47] P. J. A. Janssen and P. D. Anderson. Boundary-integral method for drop deformation between parallel plates. *Physics of Fluids*, **19**(4), 2007.
- [48] A. Vananroye, P. J. A. Janssen, P. D. Anderson, P. Van, and P. Moldenaers. Microconfined equiviscous droplet deformation: Comparison of experimental and numerical results. *Physics of Fluids*, 20(1), 2008.
- [49] C. Coulliette and C. Pozrikidis. Motion of an array of drops through a cylindrical tube. *Journal of Fluid Mechanics*, **358**:1–28, 1998.
- [50] R. H. Davis A. Z. Zinchenko. A boundary-integral study of a drop squeezing through interparticle constrictions. *Journal of Fluid Mechanics*, **564**:227–266, 2006.
- [51] R. H. Davis A. J. Griggs, A. Z. Zinchenko. Low-reynolds-number motion of a deformable drop between two parallel plane walls. *International Journal of Multiphase Flow*, **33**:182–206, 2007.

- [52] E. P. Ascoli, D. S. Dandy, and L. G. Leal. Boundary-driven motion of a deformable drop toward a planar wall at low reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, **213**:287, 1990.
- [53] H. Power. The interaction of a deformable bubble with a rigid wall at small reynolds number: A general approach via integral equations. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **19**:291, 1997.
- [54] M. J. Martinez and K. S. Udell. Axisymmetric creeping motion of drops through circular tubes. *Journal of Fluid Mechanics*, **210**:565, 1990.
- [55] C. Pozrikidis. The buoyancy-driven motion of a train of viscous drops within a cylindrical tube. *Journal of Fluid Mechanics*, **237**:627, 1992.
- [56] T. M. Tsai and M. J. Miksis. Dynamics of a drop in a constricted capillary tube. *Journal of Fluid Mechanics*, **274**:197, 1994.
- [57] R. E. Khayat, A. Luciani, L. A. Utracki, F. Godbille, and J. Picot. Influence of shear and elongation on drop deformation in convergent-divergent flows. *International Journal of Multiphase Flow*, **26**:17, 2000.
- [58] R. E Khayat, A. Luciani, and L. A Utracki. Boundary-element analysis of planar drop deformation in confined flow. part 1. newtonian fluids. *Engineering analysis with boundary elements*, **19**(4), 1997.
- [59] I. B. Bazhlekov, P. D. Anderson, and H. E. H. Meijer. Nonsingular boundary integral method for deformable drops in viscous flows. *Physics of Fluids*, **19**(4), 2004.

- [60] M. A. H. Reyes and E. Geffroy. A corotating two-roll mill for studies of two-dimensional elongational flows with vorticity. *Physics of Fluids*, **12**(10):2372–2375, 2000.
- [61] M. A. H. Reyes and E. Geffroy. Study of low reynolds number hydrodynamics generated by symmetric corotating two-roll mills. *Revista Mexicana de Fisica*, **46**(2):135–147, 2000.
- [62] M. A. H. Reyes. *Hydrodynamics of deformable objects in linear creeping flows*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 2005.
- [63] Rosas Y. Israel. *Experimental study of a drop in an elongational flow with vorticity*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 2013.
- [64] C. Pozrikidis. Interfacial dynamics for stokes flow. *Journal of Computational Physics*, **169**:250, 2001.
- [65] J. Happel and H. Brenner. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, The Netherlands, 1991.
- [66] O. A. Ladyzhenskaya. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*. Gordon and Breach, U. K., 1969.
- [67] C. A. Brebbia. *The Boundary Element Method for Engineers*. Pentech Press, London, England, 1978.
- [68] C. Pozrikidis. *Boundary Integral And Singularity Methods For Linearized Viscous Flow*. Cambridge University Press, 1992.

- [69] C. Pozrikidis. *A Practical Guide to Boundary Element Methods with the Software Library BEMLIB*. Chapman and Hall/CRC, 2002.
- [70] Gary L. Leal. *Laminar Flow and Convective Transport Processes. Scaling Principles and Asymptotic Analysis*. Butterworth-Heinemann, Boston, USA, 1992.
- [71] R. Aris. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover, USA, 1989.
- [72] J. Tanzosh, M. Manga, and H. A. Stone. Boundary integral methods for viscous free-boundary problems: Deformation of single and multiple fluid-fluid interface. In C. A. Brebbia and M. S. Ingber, editors, *Boundary Element Technology VII*, USA, 1992. Computational Mechanics Publications.
- [73] S. Kim and S. J. Karrila. *Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications*. Butterworth-Heinemann, USA, 1991.
- [74] J. Crank. *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, Northern Ireland, 1984.
- [75] R. Scardovelli and Stéphane Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **31**:567, 1999.
- [76] Hiroshi Akima. A method of univariate interpolation that has the accuracy of a third-degree polynomial. *ACM Transactions on Mathematical Software*, **17**(3):341, 1991.



- [77] Hiroshi Akima. ALGORITHM: 697. a method of univariate interpolation that has the accuracy of a third-degree polynomial. *ACM Transactions on Mathematical Software*, **17**(3):341, 1991.
- [78] A. Acrivos. "the breakup of small drops and bubbles in shear flows". *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, **404**:1–11, 1983.
- [79] J. Blawdziewicz, Vittorio Cristini, and Michael Loewenberg. Multiple stationary states for deformable drops in linear stokes flows. *Physics of Fluids*, **15**(5):37, 2003.