PROBLEMAS DEL TIPO CONSTITUTIVO-NUMERICO EN EL MODELADO DEL FLUJO DE FLUIDOS VISCOELASTICOS

Julio A. Deiber

INTEC - UNL - CONICET
Güemes 3450 - 3000 Santa Fe
Argentina

ABSTRACT

In this work, a brief discussion on the formulation of the mathematical model that describes the dynamics of viscoelastic fluids is presented. Three fundamental concepts are analyzed: Stability, Change of Type and Loss of Evolution. Conclusions are presented in relation to the generation of numerical algorithms and to some experimental results available in the literature, which are relevant to the subject. Although the general structure of the constitutive equation to generate stable numerical algorithms is now known, it is still unclear from the physical point of view the use of associated concepts like instantaneous elasticity and material retardation time.

RESUMEN

En este trabajo, se presenta una discusión breve acerca de la formulación del modelo matemático que describe la dinámica de fluidos viscoelásticos. Se analizan tres conceptos fundamentales: Estabilidad, Cambio de Tipo y Pérdida de Evolución. Las conclusiones se presentan en relación a la generación de algoritmos numéricos y a algunos resultados experimentales importantes para el tema. Aunque la estructura general de la ecuación constitutiva que genera algoritmos numéricos estables es ahora conocida, no es todavía claro desde el punto de vista físico el uso de los conceptos asociados de elasticidad instantánea y de tiempo de retardo del material.

INTRODUCCION

La industria que procesa compuestos poliméricos, presenta problemas de la mecánica de fluidos que son de interés práctico y desafiantes. Las soluciones y resultados de estos problemas son usados directamente en las lineas de producción y en los departamentos de control de calidad y desarrollo de nuevos productos.

La solución de los problemas fluidodinámicos de fluidos newtonianos se encuentra en un estado muy avanzado, y en los últimos años se lograron resultados precisos con la ayuda de supercomputadoras vectorizadas y complejos métodos numéricos. Sin embargo, los problemas fluidodinámicos viscoelásticos son todavía motivo de intensa investigación en varios frentes fundamentales. Uno de ellos involucra la generación de métodos numéricos eficientes para problemas nolineales y complejos como los que se plantean con el flujo de compuestos poliméricos en máquinas procesadoras. Esta necesidad fue por varios años sobre-enfatizada sin escapar a la clásica polémica acerca de si el método de diferencias finitas es mejor o peor que el de elementos finitos. El hecho concreto es que la mayoría de los métodos numéricos clásicos de la mecánica de fluidos newtonianos, fallaron al pretender extenderlos y aplicarlos a la mecánica de fluidos viscoelásticos. En general se usó la conocida especulación de los términos fuentes acoplados en ecuaciones que se creían que eran de naturaleza globalmente elíptica. Luego veremos que este "rótulo elíptico" en la mayoría de los casos no necesariamente se cumple.

Actualmente existe en la literatura afín el denominado *Problema del Número de Weissenberg Grande (High Weissenberg Number Problem - HWNP)*. En efecto, el número de Weissenberg es un número adimensional que surge del proceso de adimensionalización del modelo matemático que describe el flujo de fluidos viscoelásticos. Es decir, aparte de los números adimensionales clásicos de la mecánica de fluidos newtonianos (números de Reynolds, Froude y Capilar y relaciones geométricas y fisicoquímicas) uno debe además considerar el número de Weissenberg, el cual es igual al producto del tiempo de relajamiento del fluido o material y de la velocidad de corte característica del flujo en consideración. Por consiguiente, el HWNP se refiere a que los métodos numéricos fallan en predecir una solución del problema viscoelástico para números de Weissenberg más grandes que un valor crítico, aún cuando el número de Reynolds es chico o cero. Más aún, el valor crítico depende del tipo de método y tamaño de grillas que se usan en los cálculos para una geometría prefijada. Aquí se debe notar que no se excluye el hecho de que también existe un número de Weissenberg crítico para el cual se produce una transición física - real - del problema base; en efecto, todos los experimentalistas del área han observado que en la industria procesadora de polímeros, existen fenómenos como por ejemplo la fractura del fundido (melt fracture) a un valor crítico del número de Weissenberg. Una de las dudas que surgen actualmente es si existe alguna relación entre el número de Weissenberg crítico de los métodos numéricos con el de los resultados experimentales. Este aspecto será discutido luego en relación al tema central de esta presentación.

En los últimos años se ha avanzado mucho en la solución del denominado HWNP y se encontró que existían varios aspectos fundamentales en la formulación del modelo matemático que oportunamente no se entendían bien. Estos aspectos hacían que el algoritmo numérico fracasara en los principales objetivos para el cual había sido generado. Aunque todavía algunos de estos problemas fundamentales no están resueltos, existe en la actualidad mayor información acerca de las múltiples causas por las cuales estos cálculos numéricos fallaban.

La finalidad de esta presentación, es simplemente motivar la discusión de una de estas causas que generan el HWNP. Se consideran aquí las consecuencias que tiene la selección del modelo constitutivo del fluido viscoelástico en el método numérico que se decide implementar. En ningún momento se pretende revisar exhaustivamente el tema de la modelación numérica de flujos viscoelásticos (para ello ver las revisiones de Crochet, 1989 y Keuning 1987). Se trata solo de hacer una discusión organizada de algunos resultados relevantes para lo que aquí se llama ***problemas del tipo constitutivo-numérico en el flujo de fluidos viscoelásticos.***

A continuación se presenta en forma compacta la formulación del problema fluidodinámico isotérmico de fluidos viscoelásticos (leyes, modelo constitutivo y condiciones iniciales y de contorno típicas). Seguidamente se discute la necesidad de realizar tres estudios fundamentales del modelo matemático continuo (estabilidad, cambio de tipo y pérdida de evolución) que están vinculados con tres estudios fundamentales del problema discreto (convergencia, consistencia y estabilidad).

EL PROBLEMA FLUIDODINAMICO ISOTERMICO

El problema fluidodinámico isotérmico consiste en las ecuaciones de balance de materia y de cantidad de movimiento que se pueden expresar vectorialmente como sigue,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\nabla} \bullet (\rho \underline{v}) = 0 \tag{1}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{v} \bullet \underline{\nabla}\, \underline{v}\right) = -\underline{\nabla} p + \underline{\nabla} \bullet \underline{\underline{\tau}} + \rho \underline{g} \tag{2}$$

donde ρ es la densidad supuesta constante en la mayoría de los casos, p y $\underline{v}$ son los campos de presión (escalar) y de velocidad (vectorial) que se desean evaluar en todos los puntos del volumen $V(t)$ del sistema rodeado por el área $A(t)$. t es el tiempo y los efectos transitorios asociados son considerados. El material que fluye en este sistema tiene una ecuación constitutiva que evalúa el campo de tensiones definido por el tensor de tensiones simétrico $\underline{\underline{\tau}}$. Este tensor es función de la deformación del material, la cual debe ser evaluada con la cinemática que se obtiene al satisfacer las ecuaciones de balances (ecs (1) y (2)). El término $\rho\underline{g}$ representa la fuerza de gravedad u otra fuerza que proviene de un campo conservativo. En general, cuando la densidad es constante, este término se une con el gradiente del campo de presión mediante la definición de una presión generalizada en la ec. (1). En este trabajo se consideran solamente fluidos viscoelásticos dentro del contexto de la teoría que estudia la clase de ***fluidos simples*** (ver por ejemplo, Truesdell, 1977). En efecto, el tensor de tensiones se puede escribir como un funcional del tensor relativo de Cauchy $\underline{\underline{C}}_t(t')$

$$\underline{\underline{\tau}} = \aleph^{t}_{-\infty}\left(\underline{\underline{C}}_t(t')\right) \tag{3}$$

donde la historia de la deformación se representa de acuerdo a,

$$\underline{x}' = \underline{x}'_t(\underline{x}, t') \quad , \quad t' = t \quad , \quad \underline{x}' = \underline{x} \tag{4}$$

$$\underline{\underline{F}}_t = \frac{\partial \underline{x}'}{\partial \underline{x}} \quad , \quad \underline{\underline{C}}_t(t') = \underline{\underline{F}}_t^T \bullet \underline{\underline{F}}_t \tag{5}$$

Es claro entonces que t' es un tiempo generalizado comprendido entre el tiempo presente, t, y el tiempo inicial de reposo del material. Además, para resolver el problema fluidodinámico es necesario dar forma al funcional de la ec. (3). En este trabajo se estudiará el problema fluidodinámico con modelos reológicos del tipo diferencial, que son los más usados en la actualidad. Sin embargo, en la última sección se presentará una discusión breve sobre los modelos reológicos integrales en relación al problema central aquí planteado.

Las condiciones iniciales se pueden expresar como sigue,

$$\underline{v}(\underline{r},0) = \underline{v}_o(\underline{r}) \quad , \quad \underline{\underline{\tau}}(\underline{r},0) = \underline{\underline{\tau}}(\underline{r})_o \tag{6}$$

Mientras que las condiciones de contorno pueden ser de varios tipos. Por ejemplo, se puede especificar los valores de las tensiones y las velocidades en la frontera,

$$\underline{v}(\underline{r},t) = \underline{v}_A(\underline{r},t) \quad , \quad \underline{\underline{\tau}}(\underline{r},t) = \underline{\underline{\tau}}_o(\underline{r},t) \quad , \quad \underline{r} \in A(t) \tag{7}$$

También puede existir una parte de la frontera acoplada a otro fluido (interfaz) en condiciones de inmiscibilidad, donde se requiere expresar los saltos de las variables dependientes evaluadas de un lado y del otro de la interfaz, es decir

$$\begin{aligned} [p] - [\underline{\underline{\tau}} : \underline{n}\underline{n}] &= \sigma H \\ [\underline{\underline{\tau}} : \underline{n}\underline{\nu}] &= 0 \\ [\underline{v} \bullet \underline{\nu}] &= 0 \\ \underline{v} \bullet \underline{n} &= 0 \end{aligned} \tag{8}$$

donde $\underline{n}$ y $\underline{\nu}$ son los vectores unitarios perpendicular y tangente a la interfaz y H es la curvatura. Además, actualmente se ha encontrado que el fluido puede resbalar en las fronteras sólidas bajo ciertas condiciones dinámicas y fisicoquímicas, de forma tal que (Schowalter, 1988)

$$(\underline{\underline{\tau}} \bullet \underline{n} - \underline{v}) \bullet \underline{\nu} = 0$$

implicando esto que la ec. (9) es otra posible condición de contorno. No obstante, su uso en los modelos computacionales requiere todavía de la determinación precisa de las condiciones bajo las cuales el fluido en contacto con el sólido pasa a resbalar.

MODELOS CONSTITUTIVOS DIFERENCIALES

La finalidad de esta sección es presentar un modelo constitutivo diferencial, con cierto grado de generalización, de forma tal de poder discutir en las próximas secciones los tres problemas fundamentales relacionados con los modelos matemáticos continuo y discreto del problema fluidodinámico. Para ello se necesitan definiciones cinemáticas,

$$\underline{\underline{\dot{\gamma}}} = \underline{\nabla}\,\underline{v} + \underline{\nabla}\,\underline{v}^T \quad , \quad \underline{\underline{\Omega}} = \underline{\nabla}\,\underline{v} - \underline{\nabla}\,\underline{v}^T \tag{10}$$

donde $\dot{\underline{\underline{\gamma}}}$ es el tensor-velocidad de deformación y $\underline{\underline{\Omega}}$ es el tensor-vorticidad.

Para los fines de este trabajo, usaremos el siguiente modelo diferencial,

$$\lambda^k \dot{\underline{\underline{\tau}}}_p^k + \underline{\underline{\tau}}_p^k + \alpha' \underline{\underline{\tau}}_p^k \bullet \underline{\underline{\tau}}_p^k = \eta^k \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \tag{11}$$

$$\underline{\underline{\tau}}_p = \sum_{k=0}^{K} \underline{\underline{\tau}}_p^k \tag{12}$$

$$\underline{\underline{\tau}} = \eta_s \dot{\underline{\underline{\gamma}}} + \underline{\underline{\tau}}_p \tag{13}$$

$$\lambda^k = \lambda^k(II) \quad , \quad \eta^k = \eta^k(II) \quad , \quad \alpha' = \alpha'(II) \tag{14}$$

donde,

$$II = tr(\dot{\underline{\underline{\gamma}}} \bullet \dot{\underline{\underline{\gamma}}}) \quad o \quad II = tr(\underline{\underline{\tau}} \bullet \underline{\underline{\tau}}) \tag{15}$$

además,

$$\dot{\underline{\underline{\tau}}} = \frac{d\underline{\underline{\tau}}}{dt} - [(1 - \frac{\xi}{2})\underline{\nabla}\, \underline{v}^T - \frac{\xi}{2}\underline{\nabla}\, \underline{v}] \bullet \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \bullet [(1 - \frac{\xi}{2})\underline{\nabla}\, \underline{v} - \frac{\xi}{2}\underline{\nabla}\, \underline{v}^T] \tag{16}$$

donde los parámetros reológicos pueden tomar valores positivos o nulos.

Mediante la asignación de valores adecuados a los parámetros reológicos, es fácil comprobar que el modelo constitutivo diferencial propuesto puede generar los siguientes modelos reológicos: Maxwelliano Contravariante y Covariante, Jeffreys, Johnson - Segalman y Giesekus. Cuando la funcionalidad con el segundo invariante del tensor velocidad de deformación (o el tensor de tensiones) se elimina y $\alpha' = 0$, se obtienen los modelos diferenciales cuasilineales; en caso contrario los modelos diferenciales son nolineales. Esta última clasificación tiene una importancia considerable en la metodología a seguir para el estudio del cambio de tipo y la pérdida de evolución que se analizará más adelante. Pero mucho más importante es todavía el hecho de que η_s tome valores diferentes de cero. De aquí en más, para $\eta_s = 0$ los modelos resultantes se designarán Modelos M mientras que para $\eta_s \neq 0$ se designarán Modelos J. Se puede anticipar que los Modelos M cambian de tipo aunque no pierdan evolución, necesariamente. Los Modelos J nuncan cambian de tipo.

Los Modelos J con $\alpha = 0$ y $K = 0$ tienen la siguiente forma que se puede deducir fácilmente de las ecuaciones anteriores,

$$\lambda_o \dot{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\tau}} = (\eta_o + \eta_s)[\dot{\underline{\underline{\gamma}}} + \lambda_r \dot{\underline{\underline{\gamma}}}] \tag{17}$$

$$\lambda_r = \frac{\lambda_o \eta_s}{(\eta_o + \eta_s)} \tag{18}$$

donde λ_r se denomina tiempo de retardo. Cuando el tiempo de retardo es nulo (es decir el modelo es de tipo M) se dice que el fluido o material tiene viscosidad instantánea. Actualmente no se sabe si la viscosidad instantánea corresponde a la realidad física (ver por ejemplo, Denn, 1990) aunque en principio podría explicar ciertos fenómenos viscoelásticos que involucran cambios de flujo sustanciales (Joseph et al., 1985).

TRES ESTUDIOS FUNDAMENTALES DEL PROBLEMA FLUIDODINAMICO ISOTERMICO

En esta sección se desea poner énfasis en la necesidad de realizar estudios preliminares del modelo matemático que representa el problema fluidodinámico, antes de proceder a la generación del algoritmo numérico.

En efecto, la primera etapa consiste en formular el Modelo Continuo y efectuar los siguientes tres estudios fundamentales (se supone existencia y unicidad; continuidad está asociada a la pérdida de evolución como se describe más adelante),

* Estabilidad
* Cambio de Tipo
* Pérdida de Evolución

La segunda etapa tiene como función generar el Modelo Discreto y efectuar los siguientes tres estudios fundamentales,

* Convergencia
* Consistencia
* Estabilidad

En este trabajo se presentan en forma breve los tres estudios fundamentales del Modelo Continuo. Estos estudios están fuertemente relacionados con los conceptos básicos de convergencia, consistencia y estabilidad del Modelo Discreto, los cuales no serán aquí analizados por escapar a los objetivos de esta presentación. No obstante, en términos cualitativos, es simple visualizar las consecuencias catastróficas que puede tener en la convergencia y la consistencia, por ejemplo, un cambio de tipo del modelo continuo. Tanto es así, que basta con tener experiencia en la discretización de ecuaciones en derivadas parciales para comprobar que un término laplaciano discretizado con diferencias finitas centrales es inadecuado para evaluar las variables dependientes en un cambio de tipo elíptico a hiperbólico (ver Joseph, Renardy y Saut, 1985). Por otro lado, la pérdida de evolución del Modelo Continuo, lo cual implica que el problema de las condiciones iniciales de Cauchy está mal planteado en el sentido de la variable independiente-tiempo, genera indiscutiblemente una inestabilidad numérica del Modelo Discreto. Aunque a este tipo de inestabilidad de Hadamard se le ha atribuido algún sentido físico (ver Joseph et al. 1985) también, hay investigadores que sostienen que el problema es estrictamente de índole matemática y por lo tanto solo está mal planteado (ver Dupret y Marchal, 1986). Lo importante para esta presentación es notar que un Modelo Continuo que sufre pérdida de evolución no puede ser estable a perturbaciones de longitud de ondas cortas del orden del tamaño de las grillas.

A continuación se describe brevemente la estabilidad, el cambio de tipo y la pérdida de evolución del modelo continuo en el problema viscoelástico isotérmico.

ESTABILIDAD

La resolución del problema fluidodinámico para valores pequeños de los números adimensionales (aquí nos referiremos al número de Weissenberg, We, solamente) genera lo que se suele llamar la Solución Base. Esta solución, generalmente obtenida mediante métodos numéricos, puede perder estabilidad a medida que We se incrementa, generando una solución diferente en naturaleza a la que ya se había obtenido.

Lamentablemente, una teoría completa de la estabilidad de ecuaciones diferenciales parciales nolineales no existe al presente. Sin embargo el problema puede ser abordado usando la teoría lineal de estabilidad y también la teoría nolineal de bifurcaciones.

Existen métodos numéricos que no son suficientemente robustos como para computar soluciones alrededor de puntos de bifurcaciones, puntos límites y terminales. Por consiguiente toda información preliminar sobre la estabilidad de las soluciones del modelo continuo, puede ayudar a la selección del algoritmo necesario para un determinado modelo constitutivo.

Por ejemplo, para el Modelo Maxwelliano Contravariante, bajo la hipótesis de incompresibilidad, la solución base se obtiene del siguiente modelo continuo,

$$\underline{\nabla} \bullet \underline{v} = 0$$

$$\rho\left(\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{v} \bullet \underline{\nabla}\, \underline{v}\right) = -\underline{\nabla} p + \underline{\nabla} \bullet \underline{\underline{\tau}} + \rho \underline{g} \tag{19}$$

$$\lambda_o\left(\frac{d\underline{\underline{\tau}}}{dt} - \underline{\nabla}\, \underline{v}^T \bullet \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \bullet \underline{\nabla}\, \underline{v} + \underline{\underline{\tau}}\right) = \eta_o \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \tag{20}$$

$$\underline{v} = \underline{v}_o(\underline{r}) \quad , \quad \underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}(\underline{r})_o \quad , \quad \underline{r} \in V(0) \tag{21}$$

$$\underline{v} = \underline{v}_A(\underline{r}, t) \quad , \quad \underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_A(\underline{r}, t) \quad , \quad \underline{r} \in A(t) \quad , \quad t > 0 \tag{22}$$

es decir que en principio para valores bajos de We uno obtiene $\underline{\underline{\tau}}(\underline{r}, t)$, $\underline{v}(\underline{r}, t)$ y $p(\underline{r}, t)$. Esta solución base es usualmente del estado estacionario y por lo tanto la dependencia con el tiempo se puede eliminar.

La etapa siguiente es buscar la pérdida de estabilidad de la solución base al incrementar el número de Weissenberg, mediante la teoría lineal. Para ello se supone una pequeña perturbación tal que: $\underline{\underline{\tau}}(\underline{r}, t) + \underline{\underline{\tau}}'(\underline{r}, t)$, $\underline{v}(\underline{r}, t) + \underline{v}'(\underline{r}, t)$ y $p(\underline{r}, t) + p'(\underline{r}, t)$. Las variables primas son perturbaciones infinitesimales desde el punto de vista de la teoría lineal y como consecuencia de ello, se puede linealizar el problema perturbado correspondiente. Las perturbaciones tienen como condiciones iniciales y de contorno las siguientes ecuaciones,

$$\underline{v}' = \underline{v}'_o(\underline{r}) \quad , \quad \underline{\underline{\tau}}' = \underline{\underline{\tau}}'_o(\underline{r}) \quad , \quad \underline{r} \in V(0) \tag{23}$$

$$\underline{v}' = 0 \quad , \quad \underline{\underline{\tau}}' = 0 \quad , \quad \underline{r} \in A(t) \tag{24}$$

donde se puede observar que la ec. (23) introduce al instante inicial la perturbación que decrecerá (estable), aumentará (inestable) o perdurará (neutral) en el tiempo. Además, la ec. (24) demuestra que las perturbaciones no modifican las condiciones de contorno (condiciones homogéneas) generando un problema espectral. En efecto, la forma esperada de las perturbaciones son,

$$\underline{v}' = \underline{F}(\underline{r})\ e^{-\sigma t} \tag{25}$$

$$p' = P(\underline{r})\ e^{-\sigma t} \tag{26}$$

$$\underline{\underline{\tau}}' = \underline{\underline{T}}(\underline{r})\ e^{-\sigma t} \tag{27}$$

$$\sigma = \sigma_r + i\,\sigma_i \quad , \quad i^2 = -1 \tag{28}$$

donde σ se descompone en los diferentes autovalores del problema espectral y es función del We. Es decir que existe un número de Weissenberg crítico We_L para el cual la solución base está en la estabilidad neutral (parte real nula del primer autovalor del espectro). Para $We > We_L$ la solución base se destabiliza ante la perturbación infinitesimal. Se debe también observar que la parte imaginaria de los autovalores introduce evoluciones periódicas en las perturbaciones.

Para los fines de este trabajo, podemos mencionar que la solución base sigue existiendo para $We > We_L$ a pesar de que es inestable a perturbaciones infinitesimales. Por consiguiente el método numérico usado, si es suficientemente robusto, también podría computar otras soluciones estables para el mismo rango de valores del número de Weissenberg. Esta es una conclusión de singular importancia en la interpretación de resultados numéricos en general.

La pregunta que corresponde ahora formularse es la siguiente. Cuán estable es la solución base a perturbaciones finitas (no infinitesimales) ? La respuesta parece ser que en general no es muy estable. En efecto, basta con estudiar la transición del flujo laminar a flujo turbulento de un fluido newtoniano en un tubo de sección anular, circular y axialmente constante (ver Joseph, 1976). Este aspecto del problema fluidodinámico requiere ser analizado mediante la teoría de bifurcaciones. En este caso se supone que la perturbación del flujo base es finita, aunque todavía pequeña, así,

$$\epsilon = \frac{1}{V} \int (\underline{v}' \bullet \underline{v}')^{\frac{1}{2}}\ dV << 1 \tag{29}$$

donde ϵ es la energía cinética promedio de la perturbación y se la usa como parámetro pequeño para expandir en serie potencial la perturbación. Por supuesto que la perturbación de orden cero se corresponde con las perturbaciones infinitesimales de la teoría lineal de estabilidad; de allí que es necesario también expandir el número de Weissenberg como sigue,

$$We \approx We_L \pm We^{(1)}\,\epsilon \pm We^{(2)}\,\epsilon^2 ... \tag{30}$$

Para la solución del problema de estabilidad no lineal aquí planteado el lector puede recurrir a la literatura especializada en el tema (Joseph, 1976; Iooss y Joseph, 1980). En general pueden surgir dos casos. Uno corresponde a perturbaciones infinitesimales estacionarias y el otro considera las perturbaciones infinitesimales periódicas; ambas perturbaciones se estudian en la estabilidad neutral (la relación de estos casos con el valor nulo y no-nulo de la parte imaginaria del autovalor más crítico es directa).

A partir de la ec. (30) es simple comprobar que a perturbaciones finitas pequeñas, la destabilización de la solución base puede ser subcrítica ($We < We_L$) o supercrítica ($We > We_L$). A su vez las perturbaciones subcríticas y supercríticas pueden ser estables o inestables. Por ejemplo, la transición a la turbulencia del flujo de un fluido Newtoniano en un tubo (ejemplo mencionado arriba) se produce por destabilización subcrítica inestable que evoluciona a una solución estable. Algunos casos de bifurcación se muestran en los textos citados. También se deben agregar en este tema los puntos terminales y puntos de retorno.

El esfuerzo invertido en esta sección describiendo brevemente los conceptos de estabilidad, es precisamente para mencionar que aunque la existencia de otras soluciones del problema fluidodinámico del fluido viscoelástico no se descartan, a juzgar por la información disponible en la bibliografía, en la mayoría de los casos se comprobó que los números de Weissenberg críticos encontrados con métodos numéricos (elementos finitos en general) son dependientes de la forma de discretización y de los tamaños de grillas (ver por ejemplo, Keunings, 1987; Josse et al., 1986). En otras palabras, al no converger el número de Weissenberg crítico a un valor definitivo con el afinamiemto de grillas, se comprobó que los puntos que involucraban cambio de solución no necesariamente pertenecían al Modelo Continuo, sino mas bien, eran el resultado espúreo del Modelo Discreto. Reflotando conceptos clásicos, se podría decir que se está ante un problema de CONSISTENCIA, es decir, el modelo discreto no converge al modelo continuo. Esto es de esperarse en cierto grado, puesto que un sistema de ecuaciones diferenciales parciales nolineal es transformado por el algoritmo numérico en un sistema de ecuaciones algebraicas, también nolineal, cuyas soluciones son ahora las múltiples raíces posibles.

El párrafo anterior remarca claramente la importancia que puede tener un análisis de estabilidad del modelo continuo antes de generar el correspondiente modelo discreto. Por supuesto, un análisis de estabilidad puede resultar ser una tarea tan compleja como la de tratar de resolver el problema numérico. No obstante, tampoco se justifica perder de vista conceptos tan importantes como son los puntos de bifurcación y puntos límites y terminales, los cuales, si pertenecen a un modelo continuo bueno, están directamente asociados a las transiciones de flujo detectadas en la experimentación y en el procesamiento, por ejemplo, de polímeros.

CAMBIO DE TIPO

Es muy conocido que el flujo isotérmico de un fluido newtoniano de densidad constante genera un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (SEDP) nolineales que se puede clasificar sin ambigüedad como elíptico. Sin embargo, cuando el problema fluidodinámico se plantea para un fluido viscoelástico, uno encuentra que la clasificación correspondiente no es tan fácil de realizar. En efecto, debido a la no linealidad introducida por los efectos de relajación y elasticidad del fluido, se puede esperar que en el SEDP aparezcan cambios de tipo; es decir, una partícula de fluido que se mueve en el dominio de flujo $V(t)$ puede pasar de un subdominio elíptico a uno hiperbólico y viceversa.

El cambio de tipo es bien conocido para el problema fluidodinámico de fluidos newtonianos incompresibles con viscosidad despreciable, donde se puede hablar de flujo subsónico y supersónico y ondas de choque (este concepto involucra el cruce de las características reales del correspondiente problema hiperbólico). Para fluidos viscoelásticos, se realiza aquí una breve descripción del análisis del cambio de tipo.

Como primera estrategia, al SEDP de segundo orden (SEDPSO), típicamente encontrado en los problemas fluidodinámicos, conviene reducirlo a un sistema de ecuaciones diferenciales parciales de primer orden (SEDPPO), el cual puede ser cuasilineal y nolineal, dependiendo de las características del modelo constitutivo. Supongamos primero que el SEDPPO es cuasilineal y que el flujo es en dos direcciones para simplificar el análisis. Por consiguiente, se puede definir un vector $\underline{q}$, cuyas componentes son las variables dependientes del problema,

$$\underline{q} = [u, v, p, \tau_1, \tau_2, \tau] \tag{31}$$

donde u y v son las componentes del vector velocidad según las coordenadas x e y, respectivamente, cuando el flujo en dos direcciones es planar. El estado de tensiones para esta cinemática tiene dos tensiones perpendiculares τ_1 y τ_2 y una tensión de corte o tangencial τ (se debe observar que en la nomenclatura los subíndices se abrevian así: $1 = xx$ y $2 = yy$). Además p es la presión del fluido.

Mediante simple algebra el SEDPPO generado es,

$$\underline{\underline{A}} \bullet \frac{\partial \underline{q}}{\partial x} + \underline{\underline{B}} \bullet \frac{\partial \underline{q}}{\partial y} + \underline{\underline{C}} \bullet \frac{\partial \underline{q}}{\partial t} = \underline{f} \tag{32}$$

donde, para el caso cuasilineal, las matrices $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ y $\underline{\underline{C}}$ y el vector $\underline{f}$ dependen solamente de $\underline{q}$. Usando ahora la teoría de ecuaciones diferenciales (ver Courant y Hilbert, 1962; Joseph et al., 1985) se puede encontrar las curvas características del problema del estado estacionario de acuerdo a las siguientes ecuaciones,

$$\alpha = -\frac{dy}{dx} \tag{33}$$

$$det\ (\alpha \underline{\underline{A}} + \underline{\underline{B}}) = 0 \tag{34}$$

donde α define los autovalores.

Como ejemplo se puede tomar el Fluido Maxwelliano Contravariante (ver Joseph et al., 1985). Evaluando el determinante de la ec. (34), se obtiene,

$$(\alpha u + v)^2 \quad (1 + \alpha^2) \quad [2\tau\alpha - \rho(\alpha u + v)^2 + \alpha\tau_1 + \tau_2 + (1 + \alpha^2)\mu] = 0 \tag{35}$$

de donde se pueden obtener las siguientes conclusiones:

* Las líneas de corriente son características reales dobles, es decir que al anular el primer factor de la ec. (35),

$$\frac{dy}{v} = \frac{dx}{u} \tag{36}$$

en este sentido el dominio de flujo es hiperbólico.

* El segundo factor de la ec. (35) se anula generando dos curvas características imaginarias,

$$\alpha = \pm i \tag{37}$$

en este sentido el dominio de flujo es elíptico. Sin embargo, teniendo en cuenta las ecs. (36) y (37), es claro que el dominio tiene un tipo mixto (hiperbólico y elíptico). La parte elíptica según Joseph et al. está asociada a la única componente Ω del vector vorticidad del flujo planar en dos direcciones; es decir, si Ψ es la función línea de corriente,

$$\Omega = -\nabla^2\Psi$$

* El tercer factor de la ec. (35), sin embargo, no nos permite concluir anticipadamente como lo hicimos para los dos primeros factores porque, en este caso en particular, se requiere conocer simultaneamente la solución $\underline{q}$. Este factor genera las siguientes curvas características,

$$-\frac{dy}{dx} = \frac{\rho uv - \tau}{(\mu + \tau_1 - \rho u^2)} \pm \left[\frac{\tau^2 - 2\rho\tau uv - (\mu + \tau_2)(\mu + \tau_1) + \rho u^2(\mu + \tau_2)}{(\mu + \tau_1 - \rho u^2)^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{38}$$

donde se visualiza que dependiendo del valor de las variables dependientes, las curvas características pueden ser reales o complejas. Esto implica que el SEDPPO puede cambiar de tipo en el dominio de flujo.

Joseph et al. (1985) demostró que el tercer factor del determinante está asociado a la conservación de la vorticidad. En efecto, el vector de la vorticidad $\underline{\omega}$ se define,

$$\underline{\omega} = \underline{\nabla} \times \underline{v} \tag{39}$$

Para un flujo en dos direcciones $\underline{\omega} = \Omega\underline{e}$, siendo $\underline{e}$ perpendicular al plano $x-y$. Recordando la ec. (39) y aplicando consecutivamente el operador rotor y la derivación material al balance de cantidad de movimiento, se obtiene

$$\rho\frac{d^2}{dt^2}\underline{\omega} = \underline{\nabla} \times (\underline{\nabla} \bullet \frac{d}{dt}\underline{\underline{\tau}}) \tag{40}$$

Esta ecuación para el Fluido Maxwelliano Contravariante (FMC) genera las mismas curvas características que el tercer factor de la ec. (35), lo cual es una prueba particular de que el cambio de tipo está asociado al balance de la vorticidad. En otras palabras, el balance de la vorticidad cambia de tipo cuando el modelo constitutivo es el FMC.

Es interesante mencionar, siguiendo a Joseph et al. (1985), que uno puede estudiar la ec. (38) en relación a la perturbación de un flujo base estipulado. En efecto, reemplazando directamente el flujo base en esta ecuación, se encuentran las curvas características de la perturbación y la naturaleza de su propagación en el dominio de flujo. El caso más simple es la perturbación del flujo uniforme,

$$u = U \quad , \quad v = 0 \quad , \quad \tau = \tau_1 = \tau_2 = 0 \qquad (41)$$

Combinando las ecs (38) y (41) se obtiene,

$$\frac{dy}{dx} = \pm \left(\frac{1}{[\frac{U}{C}]^2 - 1} \right)^{\frac{1}{2}} \qquad (42)$$

donde $C = (\mu/\rho)^{\frac{1}{2}}$ es la velocidad de propagación de la onda viscoelástica y $Mav = U/C$ es el número de Mach viscoelástico. Para $Mav < 1$ la perturbación del flujo uniforme es amortiguada por la viscoelasticidad del FMC.

Estudios similares se pueden realizar para flujos y ecuaciones constitutivas más complejas (ver, por ejemplo, Ahrens et al., 1987; Verdier y Joseph, 1989; Yoo et al., 1985; Yoo y Joseph, 1985). Un estudio muy interesante es el de Song y Yoo (1987) donde se computa el flujo del FMC en una constricción. La frontera que separa el dominio hiperbólico del elíptico se obtiene simultáneamente con la solución del problema. El algoritmo numérico tiene un cambio de discretización automático para el balance de la vorticidad, el cual usa diferencias finitas centrales en la zona elíptica y diferencias finitas hacia atrás para la zona hiperbólica.

El trabajo de Gaidos y Darby (1988) es remarcable en el sentido de que demuestran que los Modelos J no presentan cambio de tipo. No obstante el problema fluidodinámico correspondiente es del tipo mixto. En forma más generalizada esta misma conclusión fue discutida por Van der Zanden y Hulsen (1988). Otro trabajo relevante es el de Verdier y Joseph (1989) donde estudian el modelo de White-Metzner (nolineal) presentando un procedimiento sistemático de linealización. También corresponde destacar los resultados de Phelan et al. (1989) donde usan el modelo nolineal de Giesekus; estos autores lograron generar un SEDPPO estrictamente hiperbólico (sin cambio de tipo) mediante la consideración de una densidad que varía ligeramente con la presión (caso típicamente encontrado en el procesamiento de polímeros).

Finalmente corresponde aquí mencionar que antes de generar un algoritmo numérico del problema fluidodinámico de fluidos viscoelásticos, es muy conveniente hacer un estudio del cambio de tipo del SEDPPO. Por supuesto que si se trata de un Modelo J no existe posibilidad de un cambio de tipo. No obstante, desde el punto de vista físico no se tiene certeza si los fluidos viscoelásticos de interés práctico tienen elasticidad instantánea (Modelo M) o elasticidad con retardo (Modelo J).

PERDIDA DE EVOLUCION

En la sección anterior se estudió el cambio de tipo que se genera en el SEDPPO del problema fluidodinámico viscoelástico. Este análisis se realiza bajo la hipótesis del estado estacionario. Sin embargo, para considerar la pérdida de evolución, uno debe usar la ec. (32) en forma completa, es decir, la variable tiempo es aquí muy importante.

Se dice que el SEDPPO tiene evolución si para

$$det\,(\,n_1\,\underline{A} + n_2\,\underline{B} - \Lambda\,\underline{C}) = 0 \tag{43}$$

los autovalores Λ son reales para cualquier par (n_1, n_2) con $n_1^2 + n_2^2 = 1$. Es decir, el SEDPPO es hiperbólico en relación a la variable tiempo si los autovalores de la ec. (43) son reales.

La pérdida de evolución está asociada al problema de Cauchy para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. En efecto, el problema de las condiciones iniciales en el SEDPPO está mal planteado (ill posed) si existe pérdida de evolución (ver Joseph y Saut , 1986).

Lo que se dice arriba también se puede analizar desde un punto de vista físico. En efecto, para $\underline{f} = 0$ y las matrices $\underline{A}$, $\underline{B}$ y $\underline{C}$ constantes alrededor de un punto dado del dominio de flujo, el determinante de la ec. (43) implica que,

$$\underline{q} = \underline{q}_o\, e^{i(\underline{n} \bullet \underline{x} - \Lambda t)} \tag{44}$$

La ec. (44) es una onda plana (usualmente onda corta) y si Λ es real no hay destabilización del tipo de Hadamard; es decir, el sistema tiene evolución (es hiperbólico en t). Recordar aquí que las ecuaciones diferenciales de derivadas parciales elípticas no necesariamente generan un problema de Cauchy bien planteado.

Debido a que las matrices de la ec. (32) dependen del vector $\underline{q}$, el estudio de la pérdida de evolución se realiza mediante un proceso de linealización (Joseph y Saut, 1986). Así, si $\underline{q}_o$ es una solución base del estado estacionario, uno puede proponer la siguiente evolución,

$$\underline{q} = \underline{q}_o + \underline{q}_1\, e^{i(\underline{n} \bullet \underline{x} - \Lambda t)} \tag{45}$$

donde $\underline{q}_1$ es constante y depende de la solución base alrededor de un punto del dominio. Esto implica que si uno desea evaluar $\underline{q}_1$, el determinante de los coeficientes del sistema algebraico que resulta de reemplazar la ec. (45) en la ec. (32) debe ser cero. Esta condición a su vez determina si los autovalores son reales (hiperbólico) o imaginarios (elíptico).

A continuación se comentan algunos resultados publicados en la bibliografía, relacionados con la pérdida de evolución según el presente contexto de análisis:

* El Fluido Maxwelliano Contravariante y Covariante no pierde evolución. Presenta cambio de tipo.
* El Fluido de Oldroyd (incluye el Fluido Maxwelliano Corrotacional) pierde evolución cuando la deformación por elongación está presente en la cinemática del flujo. También pierde evolución en flujos irrotacionales del tipo fuente - sumidero.
* El Fluido de Bird - Deaguiar (derivado en base a la teoría cinética molecular) presenta múltiples soluciones bases para flujos de corte y de elongación simple (ver Calderer et al., 1990). En general, siempre hay una solución que no pierde evolución. A su vez esta solución presenta cambio de tipo.
* El efecto de la compresibilidad del fluido (densidad variable por efecto de la presión) genera un SEDPPO que no pierde evolución y no cambia de tipo cuando el modelo constitutivo es el Fluido de Giesekus (Phelan et al., 1989).

La pérdida de evolución de la solución base del estado estacionario, puede hacer que un algoritmo numérico sea catastróficamente inestable ante pequeñas perturbaciones del orden del tamaño de grilla (ondas cortas). Esto es más significativo cuando más se afinan las grillas. Asimismo, uno puede pensar que la pérdida de evolución del flujo del estado estacionario puede tener consecuencias físicas que son frecuentemente observadas en la experimentación. Sin embargo, como a su vez se trata de un problema transitorio mal planteado en el sentido de Cauchy, ciertos investigadores no desean asociar la pérdida de evolución con fenómenos físicos y prefieren analizar ésto en el contexto de las dificultades numéricas que se generan.

ECUACIONES CONSTITUTIVAS INTEGRALES

Las ecuaciones constitutivas integrales han recibido menos atención en la literatura, en lo que respecta al estudio del cambio de tipo y pérdida de evolución. Sin embargo se sabe que ciertas ecuaciones constitutivas diferenciales tienen una versión integral. En este caso las conclusiones que se obtienen con modelos integrales son válidas también para los modelos diferenciales respectivos. En el sentido inverso esta conclusión no necesariamente tiene validez.

Renardy (1984 y 1985) estudió ecuaciones constitutivas integrales del tipo K-BKZ y obtuvo conclusiones acerca de las condiciones matemáticas (monoticidad y convexidad) que debe cumplir la energía de deformación en este modelo, para evitar la pérdida de evolución.

De todos modos, interesa aquí en particular preguntarse también si la viscosidad adicional η_s del Modelo J tiene sentido físico en los modelos integrales. El hecho concreto es que existen dos modelos integrales rigurosamente derivados con teorías cinéticas moleculares. Uno es el modelo de Doi-Edwards (se usa el concepto de reptación molecular) y el otro es el modelo de Curtiss-Bird (se introduce en forma similar el concepto de reptación pero además se agrega el coeficiente de tensión de cadena molecular). Solamente el segundo modelo permite la aparición de la viscosidad adicional que da origen al tiempo de relajamiento de retardo, el cual tiene consecuencias favorables para evitar el cambio de tipo. Esto fue mencionado en la sección correspondiente de este trabajo al referirnos al trabajo de Gaido y Darby (1988) y Van der Zanden y Hulsen (1988).

Antes de terminar esta sección, corresponde mencionar que (ver Larson, 1988) la existencia del tiempo de relajamiento de retardo no tiene sustentación experimental porque en principio, este término violaría la ley que relaciona la tensión y el índice de refracción (stress-optic law). Es decir que uno podría pensar que la elasticidad instantánea es controlante en los modelos constitutivos para fundidos y concentrados. No obstante, se requiere experimentación adicional para concluir rotundamente en este aspecto.

En la actualidad se están obteniendo resultados numéricos de flujos viscoelásticos en dos direcciones con ecuaciones constitutivas integrales para valores grandes del número de Weissenberg, demostrando estos resultados ciertas características favorables para el uso de estos modelos en los algoritmos numéricos. No obstante, se debe aclarar que los modelos integrales requieren un esquema robusto de seguimiento de partículas para poder computar iterativamente el tensor de Cauchy.

CONCLUSION

Antes de generar un algoritmo numérico para la solución del problema fluidodinámico viscoelástico e isotérmico, es muy aconsejable realizar tres estudios fundamentales (al menos cualitativamente) del Modelo Continuo. Ellos son : Estabilidad y Bifurcaciones, Cambio de Tipo y Pérdida de Evolución. A su vez estos conceptos están relacionados con la Convergencia, Consistencia y Estabilidad del Modelo Discreto. El Modelo Continuo se debe escribir como un sistema de ecuaciones de derivadas parciales de primer orden (SEDPPO) para analizar estos conceptos. Sin embargo, el cambio de tipo y la pérdida de evolución se pueden generalmente estudiar desde el balance de la vorticidad, el cual es una ecuación en derivadas parciales de segundo orden en el tiempo y en las coordenadas espaciales cuando hay efectos de relajamiento del fluido. Tanto es así que la selección de la ecuación constitutiva (Modelos M y J) tiene un papel preponderante en las curvas características que permiten clasificar el Modelo Continuo en hiperbólico y elíptico.

El éxito de un algoritmo que resuelve el problema fluidodinámico viscoelástico depende sustancialmente de que se consideren los estudios fundamentales señalados en forma breve en esta charla. La misma conclusión puede ser extendida a problemas termodinámicos de alta complejidad (flujos multifásicos en medios porosos, fluidodinámica de lechos fluidizados con transformaciones químicas, etc.).

Al presente no es claro todavía si la pérdida de evolución del Modelo Continuo puede ser interpretada físicamente. En el mismo marco de duda entra el concepto de la elasticidad instantánea asociada a los Modelos M. Asimismo, las teorías cinéticas moleculares de fluidos viscoelásticos concentrados (la viscosidad de solvente está ausente) presentan dificultades en justificar el tiempo de retardo. Las publicaciones sobre el tema han demostrado que la resolución del problema viscoelástico es una tarea multidisciplinaria y que resultados experimentales pueden arrojar luz a las incertidumbres físicas y matemáticas.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo económico recibido del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y de la Universidad Nacional del Litoral (UNL). En particular deseo agradecer a R. A. Bortolozzi y M. B. Peirotti por leer y corregir gentilmente el manuscrito.

REFERENCIAS

* Ahrens Y. J., J. Yoo y D. D. Joseph, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 24 (1987) 67.
* Calderer M. C., L. P. Cook y G. Schleiniger *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 31 (1989) 209.
* Courant R. y D. Hilbert, **Methods of Mathemathical Physics, Vol. 2**, Interscience, New York (1962).
* Crochet M. J., *Rubber Chem. and Tech.*, 62 (1989) 426.
* Denn M. M., *Annual Reviews of Fluid Mech.* (1990).
* Dupret F. y J. M. Marchal, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 20 (1986) 143.
* Gaidos R. E. y R. Darby, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 29 (1988) 59.
* Iooss G. y D. D. Joseph, **Elementary Stability and Bifurcation Theory**, Springer Verlag, New York (1980).
* Joseph D. D., **Stability of Fluid Motions**, Springer Verlag, New York (1976).
* Joseph D. D., M. Renardy y J. C. Saut, *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 87 (1985) 213 .
* Joseph D. D. y J . C. Saut, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 20 (1986) 117.
* Joseph D. D. y K. Chen, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 28 (1988) 47.
* Josse S. L., K. Ch. Lee y B. Finlayson, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 20 (1986) 257.
* Keunings R., *Simulation of Viscoelastic Fluid Flow* en **Fundamentals of Computer Modelling for Polymer Processing**, C. L. Tucker (Ed.), Carl Hauser Verlag (1987).
* Larson R. G., **Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions**, Butterworths, Boston (1988).
* Phelan Jr. F. R., M. F. Malone y H. H. Winter, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 32 (1989) 197.
* Renardy M., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 29 (1988) 11.
* Renardy M., *SIAM J. Math. Anal.*, 15 (1984) 333.
* Schowalter W. R., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 29 (19880 25.
* Song J. H. y J. Y. Yoo, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 24 (1987) 221.
* Truesdell, C., *A First Course in Rational Continuum Mechanics*, Academic Press, New York - San Francisco - London (1977).
* Van der Zanden J. y M. Hulsen, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 29 (1988) 93.
* Verdier C y D. D. Joseph, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 31 (1989) 325.
* Yoo J. Y. , M. Ahrens y D. D. Joseph, *J. Fluid Mech.*, 153 (1985) 203.
* Yoo J. Y. y D. D. Joseph, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 19 (1985) 15.