

Reología extensional y caída de presión en el flujo de soluciones de moléculas lineales tipo Boger a través de una contracción-expansión 2:1:2 mediante Dinámica Molecular.

González González G.¹, Castillo Tejas J.^{1*}, Alvarado F. J.², Luna Barcenas G.³ y Manero O.⁴

¹ Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, MEXICO.

² Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Celaya, Celaya, Guanajuato, MEXICO.

³ Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Querétaro, Querétaro, MEXICO.

⁴ Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, México, D.F., MEXICO.

^{1*} jcastillotejas@yahoo.com.mx

1. Resumen

En este trabajo se utiliza la dinámica molecular de no equilibrio para simular el flujo de soluciones poliméricas tipo Boger a través de una contracción-expansión 2:1:2. Las ecuaciones de movimiento que modelan el flujo se acoplan a una dinámica de Nosé-Hoover para mantener la temperatura constante y se resuelven con un algoritmo de integración reversible *RESPA*. Por las características del fluido Boger, los resultados establecen que la concentración de la solución no tiene un efecto significativo sobre el comportamiento reológico del sistema. Sin embargo, se predice un incremento en la caída de presión adimensional por encima de la del fluido Newtoniano tipo Lennard-Jones.

2. Introducción

Uno de los problemas sin resolver en el área de la reología es la predicción de la rapidez de disipación y su relación con la caída de presión a lo largo de trayectorias de flujo que involucren cambios abruptos en la geometría. El flujo de un fluido viscoelástico a través de una contracción o contracción-expansión ha sido ampliamente estudiado [1-3]. Experimentalmente, un fluido viscoelástico experimenta un exceso en la caída de presión que no exhibe un fluido Newtoniano de viscosidad similar. Sin embargo, este comportamiento no ha sido reproducido utilizando las ecuaciones constitutivas actuales. Algunos autores asocian esta discrepancia a los procesos de disipación que ocurren en la trayectoria de flujo y su relación con la conformación molecular de no equilibrio. El objetivo del presente trabajo es predecir el aumento en la caída de presión que exhibe una solución polimérica tipo Boger utilizando dinámica molecular de no equilibrio.

3. Metodología

3.1 Ecuaciones de movimiento

La solución de las ecuaciones de movimiento [4] permite conocer la trayectoria dinámica del sistema $\Gamma(\mathbf{r}_i^N, \mathbf{v}_i^N, t)$, donde, \mathbf{r}_i es el vector de posición de las N partículas. El vector \mathbf{v}_i representa el campo de velocidad en un marco de referencia e incluye la suma de la velocidad peculiar y la velocidad de flujo. La velocidad peculiar es la velocidad de una partícula en ausencia de perturbaciones externas. Acorde con la geometría en estudio (ver Figura 1), solo la componente y del vector de velocidad desarrolla una velocidad peculiar, por lo que el termostato [4] utiliza esta componente para mantener la temperatura constante.

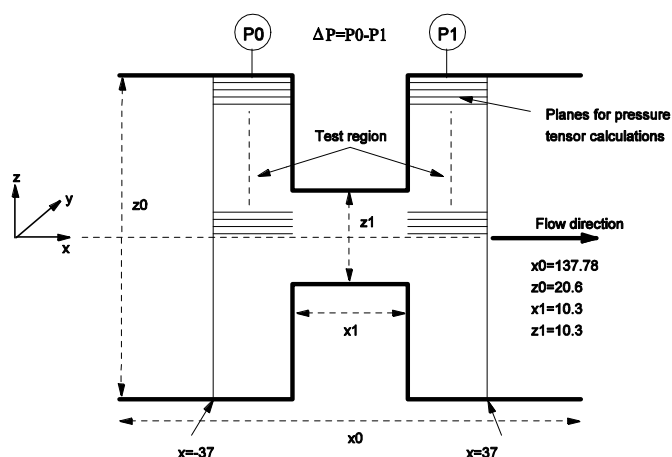


Figura 1. Representación esquemática de la región de simulación para una contracción-expansión 2:1:2.

3.2 Modelo molecular

En este trabajo, el sistema en estudio está formado por moléculas lineales en solución. Una molécula lineal es representada por el modelo *monómero-resorte* de Kremer y Grest [5], tal que, es vista como una colección de segmentos conectados por resortes no armónicos. El solvente es representado por partículas esféricas. La forma funcional del potencial intermolecular incluye dos tipos de interacciones: de enlace y no enlace. Las interacciones de no enlace (solvente-solvente, solvente-monómero y monómero-monómero no adyacentes) se consideran del tipo *van-der-Waals* y están dadas por el potencial Lennard-Jones truncado a un radio de corte $r_c = 2.5\sigma$ [4]. Las interacciones de enlace se originan entre monómeros

adyacentes y están dadas por la parte repulsiva del potencial Lennard-Jones y el potencial atractivo *FENE* [4].

3.3 Detalles de simulación

El sistema en estudio se encuentra confinado en una región de simulación, como se ilustra en la Figura 1. Se consideran cuatro casos de estudio, cada uno, con una concentración por sitio ϕ de 0.0, 0.04, 0.08 y 0.12. La concentración por sitio es definida como $\phi = M / N$, donde, M es el número total de segmentos y N es número total de partículas del sistema (monómeros más solventes). Para todos los casos de estudio, el tamaño del sistema fue de 12500 partículas, considerando que cada molécula lineal contiene 10 monómeros o segmentos y que todas las partículas son del mismo tamaño. Las simulaciones se realizaron a una temperatura y densidad reducida de 4 y 0.84, respectivamente. Los resultados son expresados en términos de unidades reducidas [4].

4.0 Resultados y discusión

En la región de medición, la presión está dada por la componente P_{zz} del tensor de presión evaluada en la cercanía de la pared. Esta componente es calculada utilizando el método MOP [4]. La caída de presión a través de la contracción está dada por $\Delta P = P_0 - P_1$, donde $P = P_{zz,wall}$. La caída de presión adimensional Δp_{Adim} se obtiene dividiendo la caída de presión de cada sistema entre la caída de presión de un sistema de referencia, en este caso, el sistema con concentración $\phi = 0$. En la Figura 2 se presenta la variación de la presión adimensional Δp_{Adim} como una función de la velocidad promedio $\langle v \rangle$, en la línea central de confinamiento ($z=0$) y en la vecindad de la pared ($z=0.5L_z-1$). Se puede observar que a mayor concentración de solución mayor Δp_{Adim} . En la línea central de confinamiento Δp_{Adim} se incrementa hasta una velocidad promedio $\langle v \rangle$ de 1.4, partir de la cual disminuye. Para concentraciones mayores que la del sistema de referencia, en la cercanía de la pared y en el intervalo de velocidades analizadas, Δp_{Adim} es mayor que la del sistema de referencia.

5. Conclusiones

La conclusión más importante del trabajo es la predicción teórica, *por medio de dinámica molecular de no equilibrio*, de que la caída de presión adimensional Δp_{Adim} es mayor que la del fluido de referencia para todas las concentraciones de solución. Este resultado es importante porque la mayoría de las ecuaciones constitutivas actuales no predicen dicho incremento.

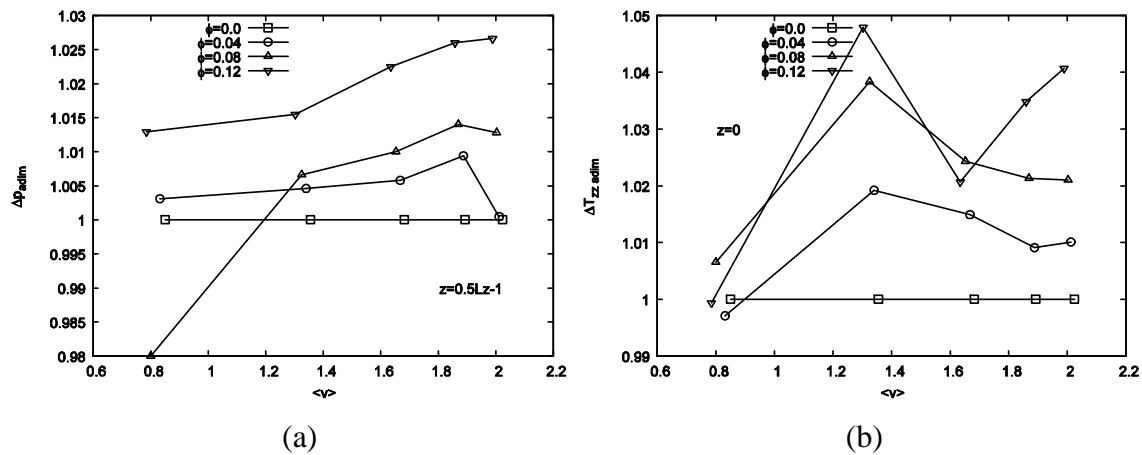


Figura 2. Caída de presión adimensional Δp_{Adim} como una función de la velocidad promedio, (a) en la pared y (b) en la línea central de confinamiento.

5. Referencias.

- [1] P. S. Doyle, E. S. G. Shaqfeh, G. H. McKinley, and S. H. Spiegelberg, Relaxation of dilute polymer solutions following extensional flow, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **76**, 79 (1998).
- [2] J. P. Rothstein and G. H. McKinley, The axisymmetric contraction-expansion: the role of extensional rheology on vortex growth dynamics and the enhanced pressure drop, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **98**, 33 (2001).
- [3] J. P. Rothstein and G. H. McKinley, A comparison of the stress and birefringence growth of dilute, semi-dilute and concentrated polymer solutions in uniaxial extensional flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **108**, 275 (2002).
- [4] J. Castillo-Tejas, J. F. J. Alvarado, G. González-Alatorre, G. Luna-Barcenas, I. C. Sanchez, R. Macias-Salinas, and O. Manero, Non-equilibrium molecular dynamics of the rheological and structural properties of linear and branched molecules. Simple shear and Poiseuille flows; instabilities and slip, *J. Chem. Phys.* **123** (2005) 054907.

- [5] K. Kremer and G. Grest, Dynamics of entangled linear polymer melts: A molecular-dynamics simulation, J. of Chem. Phys. 92 (1990) 5057-5086.