

FLUJO DE UN FLUIDO NEWTONIANO REACTIVO EN UN DOMINIO MÓVIL

Pablo A. Caron, Daniel T.P. Köster y Paulo F. Porta

Unidad de Investigación, DARMEX S.A.C.I.F.I., L.M. Drago 1555, B1852LGS Burzaco, Buenos Aires, Argentina, {pcaron,pporta}@darmex-int.com, kosterdtp@ewi.utwente.nl, <http://www.darmex-int.com>

Palabras clave: Moldeo por transferencia, problema acoplado, ALBERTA Finite Element Toolbox

Resumen. Muchas piezas poliméricas alcanzan su forma final por el proceso de moldeo por compresión/transferencia. Esta técnica consiste en ubicar una cantidad de material en un molde y aplicarle al mismo una presión que obligue al material a fluir y ocupar la totalidad de la cavidad del molde. Una vez conformada la pieza se procede con la siguiente etapa, la de curado *in situ*. Con este proceso, se produce un cambio en la estructura del polímero, lo que provoca que comience a adquirir sus propiedades finales. En general el proceso termina al extraerse la pieza del molde, dejándosela enfriar: en esta etapa, denominada de post-curado, se completa el curado de polímero, aprovechando la inercia térmica y el calor que en general es producido por la reacción de curado.

La calidad y performance del producto dependen de las condiciones de llenado del molde, así como del grado de curado. Es importante conocer este proceso en detalle para establecer estrategias de control, y estimar parámetros que permitan optimizar el proceso (masa óptima, tiempo óptimo de curado *in situ*, entre otros).

En este trabajo se presenta un modelo matemático del moldeo por transferencia acoplando, para un fluido Newtoniano incompresible, las ecuaciones de movimiento (Navier-Stokes), de conservación de la masa (continuidad) y de la energía (ecuación de Fourier) con una ecuación de reacción. En la ecuación de calor, se considera un término fuente reactivo, el cual depende de la temperatura siguiendo una relación del tipo Arrhenius. Para tener en cuenta el dominio móvil se considera una transformación general (función de la posición y del tiempo) entre, un dominio de referencia (fijo en el tiempo) y el dominio real. Se detalla la formulación débil del problema, que incluye dicha transformación y se discute la implementación basada en la biblioteca ALBERTA. Se presentan ejemplos de verificación.

1. INTRODUCCIÓN

Muchas piezas poliméricas alcanzan su forma final por el proceso de moldeo por compresión/transferencia. Esta técnica consiste en ubicar una cantidad de material en un molde y aplicarle al mismo una presión que obligue al material a fluir y ocupar la totalidad de la cavidad del molde. En el caso de moldeo por compresión el material se coloca dentro de la cavidad que forma la pieza, mientras que en el caso de moldeo por transferencia se coloca en un cámara que no formará parte de la misma. En este último caso el material se transfiere a la cavidad del molde por conductos durante el cierre del molde. Una vez conformada la pieza se procede con la siguiente etapa, la de curado *in situ*. Con este proceso, se produce un cambio en la estructura del polímero, lo que provoca que comience a adquirir sus propiedades finales. Esta etapa termina al extraerse la pieza del molde, dejándosela enfriar: en esta nueva etapa, denominada de *post-curado*, se completa el curado de polímero, aprovechando la inercia térmica y el calor que en general es producido por la reacción de curado.

La calidad y performance del producto dependen de las condiciones de llenado del molde, así como del grado de curado. Por ejemplo, un diseño incorrecto puede hacer que el polímero se cure antes de llenar el molde impidiendo su correcto llenado, o un excesivo tiempo en el molde puede provocar el sobre-curado obteniendo un producto con propiedades inferiores a las deseadas. Es importante conocer este proceso en detalle para establecer estrategias de control, y estimar parámetros que permiten optimizar el proceso (masa óptima, tiempo óptimo de curado *in situ*, entre otros).

Probablemente los primeros trabajos de modelado, específicos para el análisis del flujo de goma durante su procesamiento y las implicancias de los flujos no-newtonianos sean los de Mooney (Mooney (1931)) y, Dillon y Johnston (Dillon y Johnston (1933)) de la década del 30. En la década del 50, la atención se centró en el modelado de cabezas estrusoras y en la del 60 se formularon modelos sofisticados de flujos no isotérmicos de fluidos no-newtonianos. Ejemplos de éstos son los trabajos de Griffith, Zamodits y Pearson: este último mostró en una serie de trabajos (Zamodits y Pearson (1969)), como podía utilizarse la teoría de la lubricación al diseño de moldes y cómo podían emplearse analogías de membrana en el estudio de estrudado de films o soplado. Ya en la década del 70, se centró la atención en la simulación del moldeo por inyección de termoplásticos. Durante esa década aparecieron también las primeras aplicaciones del FEM a las operaciones de procesamiento de polímeros (Caswell y Tanner (1978), Tanner (1973), Crochet (1989)): con estas técnicas se pueden superar algunas dificultades, como la representación realista de geometrías complicadas, la incorporación de relaciones constitutivas complejas, el tratamiento tanto de fronteras libres cuanto de fronteras móviles, etc. En este trabajo se presenta una versión preliminar de este tipo de modelos: una aplicación a la manufactura de partes de goma por moldeo de transferencia.

El trabajo se organiza de la siguiente forma: en la sección 2 se presentan las ecuaciones de gobierno del problema, su forma adimensional y la forma débil de las ecuaciones. En la sección 3 se presenta el tratamiento del dominio móvil y cómo se modifica

la formulación débil. En la sección 4 se presenta la discretización utilizada y se propone un algoritmo de resolución. En la sección 5 se da una breve descripción de la herramienta de elementos finitos ALBERTA. Finalmente, en la sección 6, se presentan y analizan algunos ejemplos numéricos.

2. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

2.1. Modelado físico

Considérese el flujo incompresible de un fluido Newtoniano viscoso reactivo en un dominio móvil $\Omega(t)$. El flujo se induce por el movimiento de las paredes del dominio con el tiempo, representando, por ejemplo, el movimiento de un pistón, ver Figura 1.

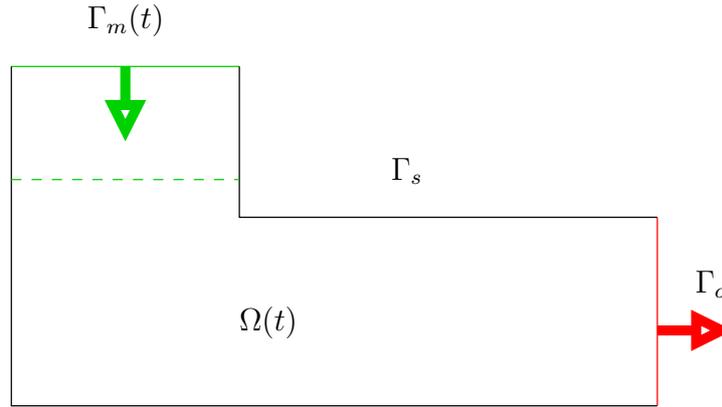


Figura 1: La figura ilustra el dominio $\Omega(t)$, la frontera $\Gamma = \Gamma_s \cup \Gamma_o \cup \Gamma_m(t)$, donde Γ_s es la porción de la frontera fija e impermeable, Γ_o representa una ventana de salida fija y $\Gamma_m(t)$ es una frontera móvil

El modelo diferencial que describe dicho flujo resulta en un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, compuesto por el sistema continuidad/Navier-Stokes, una ecuación para la energía y una ecuación para la reacción.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v} \right) &= \nabla \cdot \Sigma + \rho \mathbf{f}, \\ c_p \rho \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \theta \right) - \nabla \cdot (k_\theta \nabla \theta) &= \frac{k_v}{2} D : D + K_\theta R_\chi, \\ \frac{\partial \chi}{\partial t} - \nabla \cdot (k_\chi \nabla \chi) + \mathbf{v} \cdot \nabla \chi &= -R_\chi,\end{aligned}$$

en $\Omega(t)$ para $t > 0$. El término fuente R_χ se representa por una reacción de orden γ de tipo Arrhenius:

$$R_\chi = K_0 \exp \left(\frac{-E_\chi}{\theta} \right) \chi^\gamma.$$

junto con el modelo diferencial se suponen condiciones iniciales dadas por

$$\mathbf{v} = 0, \quad \theta = \theta_0, \quad \chi = 1, \quad \text{en } \Omega_0, \quad \text{para } t = 0,$$

y condiciones de borde

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{V} && \text{sobre } \Gamma_m(t), \text{ para } t > 0, \\ \mathbf{v} &= 0 && \text{sobre } \Gamma_s, \text{ para } t > 0, \\ \Sigma \boldsymbol{\nu} &= 0 && \text{sobre } \Gamma_o, \text{ para } t > 0, \\ \Sigma &:= -p\mathbf{I} + k_v (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T), \\ \theta &= \theta_s && \text{sobre } \Gamma_s \cup \Gamma_m(t), \text{ para } t > 0, \\ \nabla \theta \cdot \boldsymbol{\nu} &= 0 && \text{sobre } \Gamma_o, \text{ para } t > 0, \\ \nabla \chi \cdot \boldsymbol{\nu} &= 0 && \text{sobre } \Gamma(t), \text{ para } t > 0, \end{aligned}$$

con $\Gamma(t) := \partial\Omega(t)$ y, $\Gamma(t) = \Gamma_s \cup \Gamma_o \cup \Gamma_m(t)$.

Para una descripción de los símbolos utilizados cfr. Tabla 1.

Símbolo	dimensión física	significado
t	T	tiempo
\mathbf{v}	L/T	velocidad del fluido
ρ	M/L^3	densidad del fluido
p	$M/(LT^2)$	presión
Σ	L^2/T^2	tensor de tensiones
\mathbf{D}	$1/T$	tensor de deformaciones
θ	Θ	temperatura
χ	1	concentración relativa de cross-links
\mathbf{f}	L/T^2	aceleración de la gravedad
k_v	M/LT	viscosidad dinámica
c_p	$L^2/(T^2\Theta)$	calor específico a presión constante
k_θ	$ML/(T^3\Theta)$	conductividad térmica
k_χ	L^2/T	constante de difusión
K_θ	$M/(LT^2)$	entalpía de reacción
K_0	$1/T$	constante de Arrhenius
E_χ	Θ	constante de reacción cinética
γ	1	orden de reacción

Tabla 1: cantidades que aparecen en las ecuaciones del modelo.

2.2. Formulación adimensional

Se adimensionaliza el sistema anterior utilizando como escalas las indicadas en la Tabla 2.

Símbolo	Unidades físicas	Significado
L	m	escala de longitud
T	s	escala de tiempo
ρ_r	kg/m^3	densidad de referencia del caucho
c_{pr}	$J/(kg K)$	calor específico de referencia del caucho
Θ	K	escala de temperatura
$M := \rho_r L^3$	kg	escala másica

Tabla 2: Escalas de tamaño típicas.

Utilizando un pico para indicar cantidades adimensionales, se tiene, por ejemplo para el operador gradiente $\widehat{\nabla} = L\nabla$. El modelo adimensional resulta

$$\begin{aligned}
 \widehat{\nabla} \cdot \widehat{\mathbf{v}} &= 0 \\
 \frac{\rho}{\rho_r} \left(\frac{\partial \widehat{\mathbf{v}}}{\partial \widehat{t}} + (\widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}}) \widehat{\mathbf{v}} \right) - \frac{T}{\rho_r L^2} \widehat{\nabla} \cdot (k_v (\widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}} + \widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}}^T)) + \widehat{\nabla} \widehat{p} &= \frac{\rho}{\rho_r} \widehat{\mathbf{f}}, \\
 \frac{c_p \rho}{c_{pr} \rho_r} \left(\frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial \widehat{t}} + \widehat{\mathbf{v}} \cdot \widehat{\nabla} \widehat{\theta} \right) - \frac{T}{c_{pr} \rho_r L^2} \widehat{\nabla} \cdot (k_\theta \widehat{\nabla} \widehat{\theta}) - \frac{k_v}{2c_{pr} \rho_r T \Theta} (\widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}} + \widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}}^T)^2 \\
 - \frac{T}{c_{pr} \rho_r \Theta} K_\theta K_0 \widehat{R}_\chi &= 0, \\
 \frac{\partial \chi}{\partial \widehat{t}} - \frac{T}{L^2} \widehat{\nabla} \cdot (k_\chi \widehat{\nabla} \chi) + \widehat{\mathbf{v}} \cdot \widehat{\nabla} \chi + T K_0 \widehat{R}_\chi &= 0,
 \end{aligned}$$

en $\widehat{\Omega}(\widehat{t})$, para $\widehat{t} > 0$, con

$$\widehat{R}_\chi = \exp \left(\frac{-E_\chi}{\Theta \widehat{\theta}} \right) \chi^\gamma,$$

Definiendo

$$\begin{aligned}
 \widehat{\mu}_v &:= \frac{\rho}{\rho_r}, & \widehat{\mu}_\theta &:= \frac{c_p \rho}{c_{pr} \rho_r}, & \widehat{k}_\chi &:= \frac{T}{L^2} k_\chi, \\
 \widehat{k}_v &:= \frac{T}{\rho_r L^2} k_v, & \widehat{k}_\theta &:= \frac{T}{c_{pr} \rho_r L^2} k_\theta, & \widehat{K}_\chi &:= T K_0, \\
 \widehat{\Sigma} &:= -\widehat{p} \mathbf{I} + \widehat{k}_v (\widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}} + \widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}}^T), & \widehat{K}_\theta &:= \frac{T}{c_{pr} \rho_r \Theta} K_\theta K_0, & \widehat{E} &:= \frac{E_\chi}{\Theta}.
 \end{aligned}$$

la forma fuerte del modelo resulta

$$\widehat{\mu}_v \frac{\partial \widehat{\mathbf{v}}}{\partial t} + \widehat{\mu}_v (\widehat{\nabla} \widehat{\mathbf{v}}) \widehat{\mathbf{v}} - \widehat{\nabla} \cdot \widehat{\Sigma} = \widehat{\mu}_v \mathbf{f}_v, \quad (1a)$$

$$\widehat{\nabla} \cdot \widehat{\mathbf{v}} = 0, \quad (1b)$$

$$\widehat{\mu}_\theta \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial t} + \widehat{\mu}_\theta \widehat{\mathbf{v}} \cdot \widehat{\nabla} \widehat{\theta} - \widehat{\nabla} \cdot (\widehat{k}_\theta \widehat{\nabla} \widehat{\theta}) - \widehat{K}_\theta \exp(-\widehat{E}/\widehat{\theta}) \chi^\gamma = 0, \quad (1c)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \widehat{\mathbf{v}} \cdot \widehat{\nabla} \chi - \widehat{\nabla} \cdot (\widehat{k}_\chi \widehat{\nabla} \chi) + \widehat{K}_\chi \exp(-\widehat{E}/\widehat{\theta}) \chi^\gamma = 0, \quad (1d)$$

en $\Omega(t)$, $t > 0$. Las condiciones de borde e iniciales son:

$$\widehat{\mathbf{v}} = \widehat{\mathbf{g}}_v \quad \text{sobre } \Gamma_w(t), t > 0, \quad (1e)$$

$$\widehat{\Sigma} \boldsymbol{\nu} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_o, t > 0, \quad (1f)$$

$$\widehat{\theta} = \widehat{\mathbf{g}}_\theta \quad \text{sobre } \Gamma_w(t), t > 0, \quad (1g)$$

$$\widehat{k}_\theta \widehat{\nabla} \widehat{\theta} \cdot \boldsymbol{\nu} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_o, t > 0, \quad (1h)$$

$$\widehat{k}_\chi \widehat{\nabla} \chi \cdot \boldsymbol{\nu} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma(t), t > 0, \quad (1i)$$

$$\widehat{\mathbf{v}} = \widehat{\mathbf{v}}_0 \quad \text{para } t = 0, \quad (1j)$$

$$\widehat{\theta} = \widehat{\theta}_0 \quad \text{para } t = 0, \quad (1k)$$

$$\chi = \chi_0 \quad \text{para } t = 0, \quad (1l)$$

con $\Gamma_w(t) := \Gamma_m(t) \cup \Gamma_s$.

En adelante, suprimiremos el pico en todos los términos para simplificar la notación.

2.3. Formulación débil

Para construir la forma débil del modelo, se procede multiplicando cada ecuación con una función suave $\varphi : \Omega(t) \rightarrow \mathbb{R}$, tal que $\varphi(x) = 0$ para todo $x \in \Gamma_s \cup \Gamma_m(t)$ y luego integrando sobre $\Omega(t)$. Considérese la ecuación de la energía adimensionalizada, sin sus términos de disipación.

$$\int_{\Omega(t)} \mu_\theta \varphi \frac{\partial \theta}{\partial t} + \mu_\theta \varphi \mathbf{v} \cdot \nabla \theta + k_\theta \nabla \varphi \cdot \nabla \theta = \int_{\Omega(t)} \varphi K_\theta \exp(-E/\theta) \chi^\gamma.$$

La ecuación de la concentración (1d) se prueba análogamente con funciones suaves $\varphi : \Omega(t) \rightarrow \mathbb{R}$, teniendo valores arbitrarios en el borde del dominio:

$$\int_{\Omega(t)} \varphi \frac{\partial \chi}{\partial t} + \varphi \mathbf{v} \cdot \nabla \chi + k_\chi \nabla \varphi \cdot \nabla \chi = - \int_{\Omega(t)} \varphi K_\chi \exp(-E/\theta) \chi^\gamma.$$

Para la velocidad \mathbf{v} y la presión p la formulación débil se define multiplicando la ecuación de movimiento (1a) con una función suave $\boldsymbol{\xi} : \Omega(t) \rightarrow \mathbb{R}^d$ que satisface

$\xi(x) = 0$ para todo $x \in \Gamma_m(t) \cup \Gamma_s$, e integrando sobre $\Omega(t)$. Análogamente, se multiplica la ecuación de continuidad (1b) con una función suave $\varphi : \Omega(t) \rightarrow \mathbb{R}$. Esto conduce a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega(t)} \mu_v \xi \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mu_v \xi \cdot (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v} + \frac{k_v}{2} D(\xi) : D(\mathbf{v}) - p \nabla \cdot \xi &= \int_{\Omega(t)} \mu_v \xi \cdot \mathbf{f}_v, \\ - \int_{\Omega(t)} \varphi \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \end{aligned}$$

Aquí se usó la expresión del tensor rapidez de deformación $D(\xi) := \nabla \xi + \nabla \xi^T$. Usando esta formulación se incorpora la condición de tensión libre a la salida (1f) en la formulación débil.

3. TRANSFORMACIÓN DEL DOMINIO MÓVIL

El movimiento del dominio puede describirse por una transformación biyectiva dependiente del tiempo Φ desde un dominio de referencia fijo. Sea $[0, T_{end}]$ el intervalo de simulación y

$$G = \{(t, x) \in \mathbb{R}^{d+1} \mid t \in [0, T_{end}], x \in \Omega(t)\}$$

en el dominio espacio-tiempo. Sea

$$\begin{aligned} \Phi : [0, T_{end}] \times \tilde{\Omega} &\rightarrow G, \\ \Psi : G &\rightarrow \tilde{\Omega}, \\ \Psi(t, \Phi(t, \tilde{x})) &= \tilde{x} \quad \text{para todo } t \in [0, T_{end}], \tilde{x} \in \tilde{\Omega}. \end{aligned}$$

Esto permite traducir los términos de las derivadas que aparecen en las ecuaciones. Para $i \in \{1, \dots, d\}$, $t \in [0, T_{end}]$, $x \in \Omega(t)$, $f \in C^1(\Omega(t))$ resulta

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_i}(t, x) &= \sum_{k=1}^d \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_k}(t, \Psi(t, x)) \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_i}(t, x), \\ \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) &= \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t}(t, \Psi(t, x)) + \sum_{k=1}^d \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_k}(t, \Psi(t, x)) \frac{\partial \Psi_k}{\partial t}(t, x). \end{aligned}$$

3.1. Transformación de la formulación débil

La ecuación débil para la temperatura puede transformarse al dominio de referencia $\tilde{\Omega}$. En el primer paso se reemplaza θ por $\tilde{\theta}$:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega(t)} \tilde{\mu}_\theta(t, \Psi(t, x)) \tilde{\varphi}(\Psi(t, x)) \left[\frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t}(t, \Psi(t, x)) + \sum_{k=1}^d \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{x}_k}(t, \Psi(t, x)) \frac{\partial \Psi_k}{\partial t}(t, x) \right] dx \\
& + \sum_{i=1}^d \int_{\Omega(t)} \tilde{\mu}_\theta(t, \Psi(t, x)) \tilde{\varphi}(\Psi(t, x)) \tilde{v}_i(t, \Psi(t, x)) \sum_{k=1}^d \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{x}_k}(t, \Psi(t, x)) \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_i}(t, x) dx \\
& + \sum_{i=1}^d \int_{\Omega(t)} \tilde{k}_\theta(t, \Psi(t, x)) \left[\sum_{l=1}^d \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{x}_l}(\Psi(t, x)) \frac{\partial \Psi_l}{\partial x_i}(t, x) \right] \left[\sum_{k=1}^d \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{x}_k}(t, \Psi(t, x)) \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_i}(t, x) \right] dx \\
& = \int_{\Omega(t)} \tilde{K}_\theta(t, \Psi(t, x)) \tilde{\varphi}(\Psi(t, x)) \exp(-E/\tilde{\theta}(t, \Psi(t, x))) \tilde{\chi}(t, \Psi(t, x))^\gamma dx.
\end{aligned}$$

Luego, reemplazando el dominio $\Omega(t)$ con $\tilde{\Omega}$:

$$\begin{aligned}
& \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\mu}_\theta \tilde{\varphi} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} |\det D\Phi| d\tilde{x} \\
& + \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\mu}_\theta \tilde{\varphi} \sum_k \left[\frac{\partial \Psi_k}{\partial t}(t, \Phi(t, \tilde{x})) + \sum_i \tilde{v}_i \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_i}(t, \Phi(t, \tilde{x})) \right] \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{x}_k} |\det D\Phi| d\tilde{x} \\
& + \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{k}_\theta \sum_{i,k,l} \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_i}(t, \Phi(t, \tilde{x})) \frac{\partial \Psi_l}{\partial x_i}(t, \Phi(t, \tilde{x})) \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{x}_l} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{x}_k} |\det D\Phi| d\tilde{x} \\
& = \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{K}_\theta \tilde{\varphi} \exp(-E/\tilde{\theta}) \tilde{\chi}^\gamma |\det D\Phi|.
\end{aligned}$$

Reescribiendo estas expresiones como

$$\begin{aligned}
& \int_{\tilde{\Omega}} \nabla \tilde{\varphi} \cdot \mathbf{A}_\theta \nabla \tilde{\theta} + \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\varphi} \mathbf{b}_\theta \cdot \nabla \tilde{\theta} + \int_{\tilde{\Omega}} c_\theta \tilde{\varphi} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} \\
& = \int_{\tilde{\Omega}} K_\theta \tilde{\varphi} \exp(-E/\tilde{\theta}) \tilde{\chi}^\gamma |\det D\Phi|.
\end{aligned}$$

Análogamente, la concentración se describe por la ecuación

$$\begin{aligned}
& \int_{\tilde{\Omega}} \nabla \tilde{\varphi} \cdot \mathbf{A}_\chi \nabla \tilde{\chi} + \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\varphi} \mathbf{b}_\chi \cdot \nabla \tilde{\chi} + \int_{\tilde{\Omega}} c_\chi \tilde{\varphi} \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial t} \\
& = - \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\varphi} K_\chi \exp(-E/\tilde{\theta}) \tilde{\chi}^\gamma |\det D\Phi|,
\end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned}
A_{ij}(t, \tilde{x}) &:= \nabla \Psi_i(t, \Phi(t, \tilde{x})) \cdot \nabla \Psi_j(t, \Phi(t, \tilde{x})) |\det D\Phi(t, \tilde{x})|, \\
b_i(t, \tilde{x}) &:= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial t}(t, \Phi(t, \tilde{x})) + \sum_l \tilde{v}_l(t, \tilde{x}) \frac{\partial \Psi_i}{\partial x_l}(t, \Phi(t, \tilde{x})) \right) |\det D\Phi(t, \tilde{x})|, \\
c &:= |\det D\Phi(t, \tilde{x})|, \\
\mathbf{A}_\theta &:= \tilde{k}_\theta \mathbf{A}, \quad \mathbf{A}_\chi := \tilde{k}_\chi \mathbf{A}, \\
\mathbf{b}_\theta &:= \tilde{\mu}_\theta \mathbf{b}, \quad \mathbf{b}_\chi := \tilde{\mu}_\chi \mathbf{b}, \\
c_\theta &:= \tilde{\mu}_\theta c, \quad c_\chi := \tilde{\mu}_\chi c.
\end{aligned}$$

Para la velocidad y la presión se procede en forma análoga. Se transforma cada término de la ecuación débil individualmente y se ensambla el resultado luego. Para facilitar la notación se suprimen los argumentos.

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega(t)} \mu_v \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= \sum_k \int_{\Omega(t)} \tilde{\mu}_v \tilde{\xi}_k \left[\frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial t} + \sum_l \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_l} \frac{\partial \Psi_l}{\partial t} \right] \\
&= \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\mu}_v \sum_k \tilde{\xi}_k \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial t} |\det D\Phi| + \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\mu}_v \sum_{k,l} \tilde{\xi}_k \frac{\partial \Psi_l}{\partial t} \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_l} |\det D\Phi|, \\
\int_{\Omega(t)} \tilde{\mu}_v \boldsymbol{\xi} \cdot (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v} &= \sum_k \int_{\Omega(t)} \tilde{\mu}_v \tilde{\xi}_k \sum_{l,m} \frac{\partial \Psi_m}{\partial x_l} \tilde{v}_l \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_m} \\
&= \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\mu}_v \sum_{k,l,m} \tilde{\xi}_k \frac{\partial \Psi_m}{\partial x_l} \tilde{v}_l \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_m} |\det D\Phi|, \\
- \int_{\Omega(t)} p \nabla \cdot \boldsymbol{\xi} &= - \int_{\Omega(t)} \tilde{p} \sum_{k,l} \frac{\partial \tilde{\xi}_k}{\partial \tilde{x}_l} \frac{\partial \Psi_l}{\partial x_k} = - \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{p} \sum_{k,l} \frac{\partial \Psi_l}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\xi}_k}{\partial \tilde{x}_l} |\det D\Phi|, \\
- \int_{\Omega(t)} \varphi \nabla \cdot \mathbf{v} &= - \int_{\Omega(t)} \tilde{\varphi} \sum_{k,l} \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_l} \frac{\partial \Psi_l}{\partial x_k} = - \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\varphi} \sum_{k,l} \frac{\partial \Psi_l}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_l} |\det D\Phi|, \\
\int_{\Omega(t)} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{f}_v &= \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\boldsymbol{\xi}} \cdot \tilde{\mathbf{f}}_v |\det D\Phi|,
\end{aligned}$$

El segundo término para la velocidad es mas complicado. Resulta

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \int_{\Omega(t)} k_v D(\boldsymbol{\xi}) : D(\mathbf{v}) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega(t)} \tilde{k}_v \sum_{k,l} \left(\frac{\partial \xi_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} \right) \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_l} + \frac{\partial v_l}{\partial x_k} \right) \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega(t)} \tilde{k}_v \sum_{k,l} \left(\sum_m \frac{\partial \tilde{\xi}_k}{\partial \tilde{x}_m} \frac{\partial \Psi_m}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{\xi}_l}{\partial \tilde{x}_m} \frac{\partial \Psi_m}{\partial \tilde{x}_k} \right) \left(\sum_n \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_n} \frac{\partial \Psi_n}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{v}_l}{\partial \tilde{x}_n} \frac{\partial \Psi_n}{\partial x_k} \right) \\
&= \frac{1}{2} \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{k}_v \sum_{k,l} \left(\sum_m \frac{\partial \tilde{\xi}_k}{\partial \tilde{x}_m} \frac{\partial \Psi_m}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{\xi}_l}{\partial \tilde{x}_m} \frac{\partial \Psi_m}{\partial \tilde{x}_k} \right) \left(\sum_n \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial \tilde{x}_n} \frac{\partial \Psi_n}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{v}_l}{\partial \tilde{x}_n} \frac{\partial \Psi_n}{\partial x_k} \right) |\det D\Phi|.
\end{aligned}$$

El operador completo que actúa sobre la velocidad y la presión en la ecuación de movimiento puede escribirse en notación compacta como

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega(t)} \mu_v \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mu_v \boldsymbol{\xi} \cdot (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v} + \frac{k_v}{2} D(\boldsymbol{\xi}) : D(\mathbf{v}) - p \nabla \cdot \boldsymbol{\xi} \\
= \sum_{\mu, \nu} \int_{\tilde{\Omega}} \nabla \tilde{\xi}_\mu \cdot \mathbf{A}_v^{\mu\nu} \nabla \tilde{v}_\nu + \tilde{\xi}_\mu \mathbf{b}_v^{\mu\nu}(\tilde{\mathbf{v}}) \cdot \nabla \tilde{v}_\nu + c_v^{\mu\nu} \tilde{\xi}_\mu \frac{\partial \tilde{v}_\nu}{\partial t} + \sum_\nu \int_{\tilde{\Omega}} \nabla \tilde{\xi}_\nu \cdot \mathbf{b}_p^\nu \tilde{p}
\end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned}
A_{v,ij}^{\mu\nu} &:= \tilde{k}_v \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial x_\nu} \frac{\partial \Psi_j}{\partial x_\mu} + \delta_{\mu\nu} \sum_l \frac{\partial \Psi_i}{\partial x_l} \frac{\partial \Psi_j}{\partial x_l} \right) |\det D\Phi|, \\
b_{v,i}^{\mu\nu}(\tilde{\mathbf{v}}) &:= \delta_{\mu\nu} \tilde{\mu}_v \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} + \sum_l \frac{\partial \Psi_i}{\partial x_l} \tilde{v}_l \right) |\det D\Phi|, \\
c_v^{\mu\nu} &:= \tilde{\mu}_v \delta_{\mu\nu} |\det D\Phi|, \\
b_{p,i}^\nu &:= -\frac{\partial \Psi_i}{\partial x_\nu} |\det D\Phi|.
\end{aligned}$$

Análogamente, la ecuación de continuidad se traduce a

$$\int_{\Omega(t)} \varphi \nabla \cdot \mathbf{v} = \sum_\nu \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{\varphi} \mathbf{b}_p^\nu \cdot \nabla \tilde{v}_\nu = 0.$$

En lo que sigue, se eliminan las tildes de todos los términos para mantener la notación simplificada.

4. DISCRETIZACIÓN

Para discretizar la formulación débil del problema se procede de acuerdo al método de las líneas. Así, primero se discretiza el problema en el espacio, produciendo un sistema acoplado de ODEs, el que luego se discretiza y resuelve usando un procedimiento *time-stepping*.

La discretización espacial consiste de elementos triangulares conformes con refinamiento por bisección. Sean los espacios abstractos de elementos finitos:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{V}_h &:= \text{span}\{\boldsymbol{\xi}^1, \dots, \boldsymbol{\xi}^{M_v}\} \subset \mathbf{H}^1(\Omega) && \text{para la velocidad,} \\
 \mathcal{V}_{0,h} &:= \mathcal{V}_h \cap \mathbf{H}_{0,\Gamma_w(t)}^1(\Omega), \\
 \mathcal{P}_h &:= \text{span}\{\varphi_p^1, \dots, \varphi_p^{M_p}\} \subset H^1(\Omega) && \text{para la presión,} \\
 \mathcal{T}_h &:= \text{span}\{\varphi_\theta^1, \dots, \varphi_\theta^{M_\theta}\} \subset H^1(\Omega) && \text{para la temperatura,} \\
 \mathcal{T}_{0,h} &:= \mathcal{T}_h \cap H_{0,\Gamma_w(t)}^1(\Omega), \\
 \mathcal{X}_h &:= \text{span}\{\varphi_\chi^1, \dots, \varphi_\chi^{M_\chi}\} \subset H^1(\Omega) && \text{para la concentración,} \\
 \mathcal{U}_h &:= \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h \times \mathcal{T}_h \times \mathcal{X}_h.
 \end{aligned}$$

Para una discretización temporal se elige una secuencia de pasos de tiempo variables $\tau_n > 0$, $n = 1, \dots, N$ y se fija

$$t_n := \sum_{m=1}^n \tau_m, \quad T = t_N, \quad \tau = \max_{m=1, \dots, N} \tau_m.$$

Se busca una aproximación $u_h^n := (\mathbf{v}_h^n, p_h^n, \theta_h^n, \chi_h^n) \in \mathcal{U}_h$ de la solución exacta en los tiempos discretos t_n . Como es usual, esto se alcanza reemplazando la derivada en el tiempo $u_h'(t_n)$ con el cociente de una diferencia

$$\frac{du_h}{dt}(t_n) \approx \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\tau_n}.$$

Se propone el siguiente algoritmo:

Algorithm 4.1

Dados $\mathbf{v}_h^0 \in \mathcal{V}_h$, $\theta_h^0 \in \mathcal{T}_h$, y $\chi_h^0 \in \mathcal{X}_h$ como valores iniciales, así como $\mathbf{g}_{v,h}^n \in \mathcal{V}_h$ y $g_{\theta,h}^n \in \mathcal{T}_h$ como valores de borde para $n = 1, \dots, N$.

Lazo sobre los pasos de tiempo $n = 0, \dots, N-1$. Los términos de la transformación Φ , Ψ siempre se evalúan en el tiempo actual t_{n+1} .

1. Resolver el problema de Navier-Stokes para $\mathbf{v}_h^{n+1} \in \mathbf{g}_{v,h}^{n+1} + \mathcal{V}_{h,0}$ y $p_h^{n+1} \in \mathcal{P}_h$. Esto se hace usando el algoritmo 4.2.

2. Resolver el problema de calor para $\theta_h^{n+1} \in \mathcal{g}_{\theta,h}^{n+1} + \mathcal{T}_{h,0}$:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \mathbf{A}_{\theta} \nabla \theta_h^{n+1} + \varphi \mathbf{b}_{\theta} \cdot \nabla \theta_h^{n+1} + \frac{c_{\theta}}{\tau_n} \varphi \theta_h^{n+1} \\ = \int_{\Omega} \frac{c_{\theta}}{\tau_{n+1}} \varphi \theta_h^n + K_{\theta} \varphi \exp(-E/\theta_h^n) (\chi_h^n)^{\gamma} |\det D\Phi| \end{aligned}$$

para todo $\varphi \in \mathcal{T}_{h,0}$. Usar los valores de \mathbf{v}_h^{n+1} .

3. Resolver el problema de concentración para $\chi_h^{n+1} \in \mathcal{X}_h$:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \mathbf{A}_{\chi} \nabla \chi_h^{n+1} + \varphi \mathbf{b}_{\chi} \cdot \nabla \chi_h^{n+1} + \frac{c_{\chi}}{\tau_{n+1}} \varphi \chi_h^{n+1} \\ = \int_{\Omega} \frac{c_{\chi}}{\tau_{n+1}} \varphi \chi_h^n - K_{\chi} \varphi \exp(-E/\theta_h^{n+1}) (\chi_h^n)^{\gamma} |\det D\Phi| \end{aligned}$$

para todo $\varphi \in \mathcal{X}_h$. Usar los valores de \mathbf{v}_h^{n+1} , θ_h^{n+1} .

El paso 1 requiere especificar un solver para el flujo. Sea un esquema semi-implicito de Euler con los términos no lineales de primer orden tratados explícitamente.

Algorithm 4.2

Resolver el sistema lineal, autoadjunto de Stokes para $\mathbf{v}_h^{n+1} \in \mathcal{g}_{v,h}^{n+1} + \mathcal{V}_{h,0}$ y $p_h^{n+1} \in \mathcal{P}_h$ satisfaciendo

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sum_{\mu,\nu} \nabla \xi_{\mu} \cdot \mathbf{A}_v^{\mu\nu} \nabla v_{h,\nu}^{n+1} + \frac{1}{\tau_{n+1}} c_v^{\mu\nu} \xi_{\mu} v_{h,\nu}^{n+1} + \sum_{\mu} \nabla \xi_{\mu} \cdot \mathbf{b}_p^{\mu} p_h^{n+1} \\ = \int_{\Omega} \sum_{\mu,\nu} \frac{1}{\tau_{n+1}} c_v^{\mu\nu} \xi_{\mu} v_{h,\mu}^n - \xi_{\mu} \mathbf{b}_v^{\mu\nu}(\mathbf{v}_h^n) \cdot \nabla v_{h,\nu}^n + \sum_{\mu} \mu_{\nu} \xi_{\mu} f_{v,\mu}^{n+1} |\det D\Phi| \end{aligned}$$

y

$$\sum_{\nu} \int_{\Omega} \varphi \mathbf{b}_p^{\nu} \cdot \nabla v_{h,\nu}^{n+1} = 0$$

para todo $\xi \in \mathcal{V}_{h,0}$ y $\varphi \in \mathcal{P}_h$. Los términos de la transformación Φ , Ψ se evalúan en el tiempo t_{n+1} .

5. LA HERRAMIENTA DE ELEMENTOS FINITOS ALBERTA

El método de elementos finitos calcula aproximaciones a la solución exacta de un problema débil en un espacio funcional de dimensión finita. Este espacio se construye de espacios de funciones locales, usualmente polinomios de orden bajo, sobre elementos de una partición del dominio (la malla). Un método adaptativo ajusta esta malla (o el espacio de funciones locales o ambos) a la solución del problema, basado en información de estimadores de error a posteriori.

El punto de inicio del diseño de las estructuras de datos de ALBERTA es el concepto abstracto de un espacio de elementos finitos definido como un triplo que consiste en *i*) una colección de elementos de la malla *ii*) un conjunto de funciones base locales sobre un elemento simple y *iii*) una conexión de las funciones base locales y globales dando los grados de libertad globales (Schmidt y Siebert (2005)). Esto conduce directamente a la definición de tres grupos principales de estructuras de datos *i*) estructuras de datos para la información geométrica, *ii*) estructuras de datos para la información de elementos finitos y *iii*) estructuras de datos para la información algebraica. Usando estas estructuras de datos, ALBERTA provee toda la estructura abstracta como espacios de elementos finitos y estrategias adaptativas, junto con mallas jerárquicas, rutinas para adaptar la malla, y la administración completa de los espacios de elementos finitos y los correspondientes grados de libertad durante las modificaciones de la malla.

Un problema específico puede implementarse y ser resuelto dentro de la estructura de ALBERTA solo proveyendo algunas rutinas dependientes del problema para la evaluación del operador diferencial, estimadores de error, y otros.

6. RESULTADOS NUMÉRICOS

6.1. Flujo entre dos placas

Como primer ejemplo de verificación se toma un flujo uniforme entre dos placas. El mismo simplifica las ecuaciones de Navier-Stokes de forma que se puede encontrar una solución exacta (ver por ejemplo, Malber (1969)). La expresión de la velocidad en la dirección x resultante queda en función del gradiente de presiones en los extremos, la distancia entre las placas y, la distancia desde el eje de simetría.

El objetivo es representar el flujo producido cuando se mueve un pistón desde la izquierda a velocidad constante. Luego se analizá a que distancia este flujo se aproxima al teórico antes descrito.

Se presenta una malla compuesta por 1732 elementos. Para la resolución del problema de flujo se utilizan 4096 grados de libertad para la velocidad y 1024 para la presión. En tanto que, para los problemas de temperatura y concentración se utilizaron 4096 grados de libertad. En la figuras 2 y, 3 se muestran las mallas en las posiciones inicial y final de la malla.

Como se aprecia en la figura 4, a medida que la distancia al pistón es mayor el perfil de velocidades se acerca cada vez más al correspondiente a la solución analítica.

En la figura 5 se observan dos fenómenos en la velocidad. Primero, cerca del pistón se observa que la velocidad tiene una componente en la dirección y . Este es un fenómeno físico y se debe a la formación de la capa límite. Segundo, en la sección de salida también aparece una componente en la dirección y . A diferencia del primer caso, este fenómeno no es físico sino numérico. Como se puede ver en Rannacher (1999), el mismo se debe a la forma en que se discretiza el funcional para que la condición *do-nothing* en la salida sea una condición natural.

Para observar el comportamiento de la salida proponemos lo siguiente: se toma como condición inicial para la temperatura un *bump*, el mismo deberá ser transportado

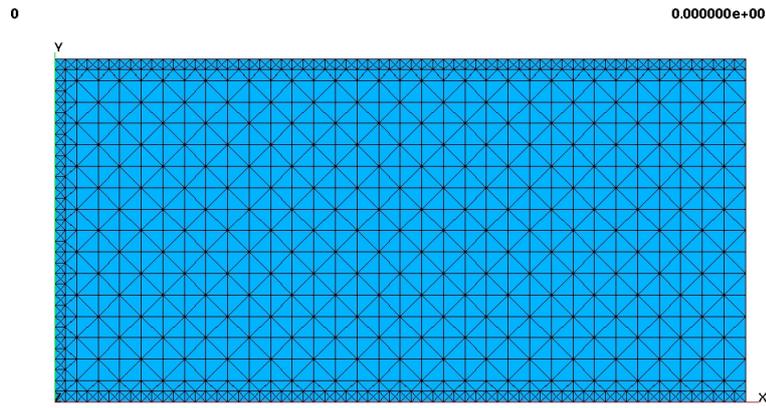


Figura 2: Malla inicial en el tiempo 0.

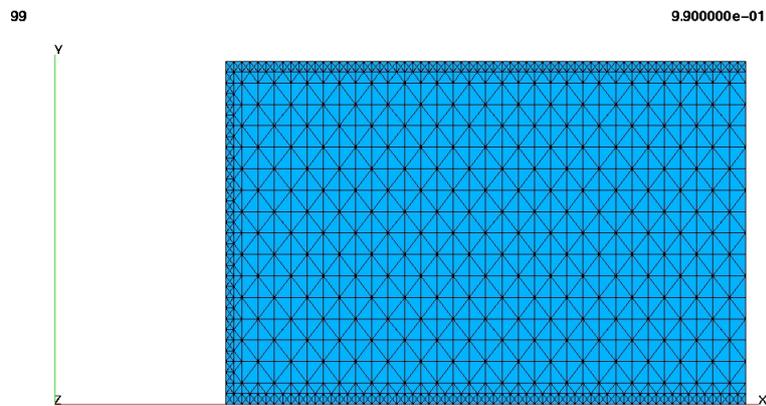


Figura 3: Malla final en el tiempo T_{end}

por el flujo hasta la salida. En la figura 6 se muestra la condición inicial y en la figura 7 se muestra el instante cuando el *bump* está atravesando la salida. Como se observa el comportamiento es correcto, ya que no se distorciona.

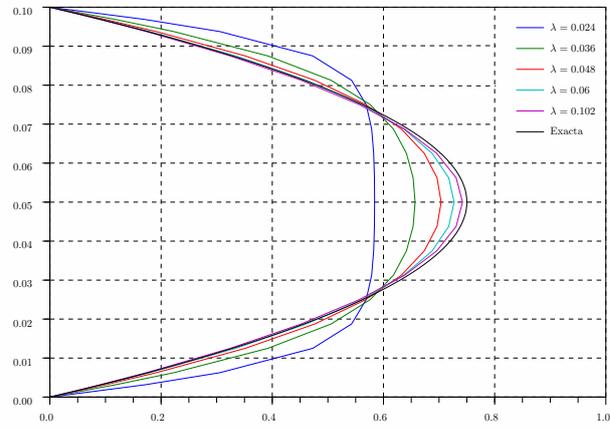


Figura 4: Perfil de velocidades en la dirección x en función de la distancia normal a las placas. Donde $\lambda = l/h$, l es la longitud desde el pistón y h es la distancia entre las placas

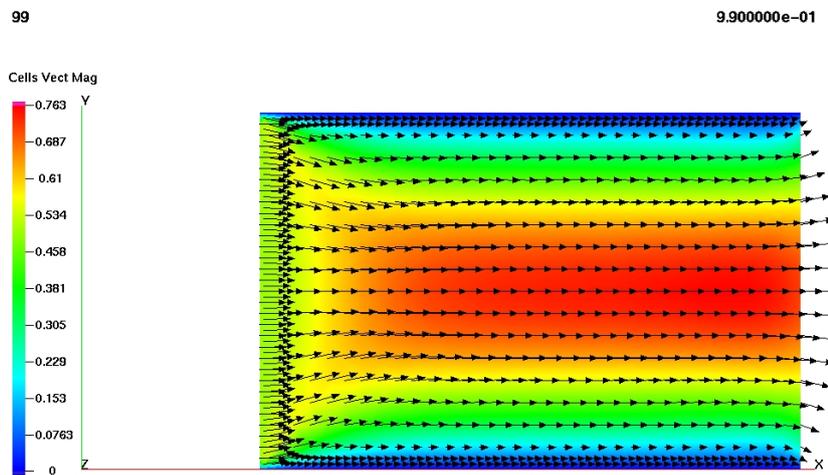


Figura 5: Magnitud de la velocidad

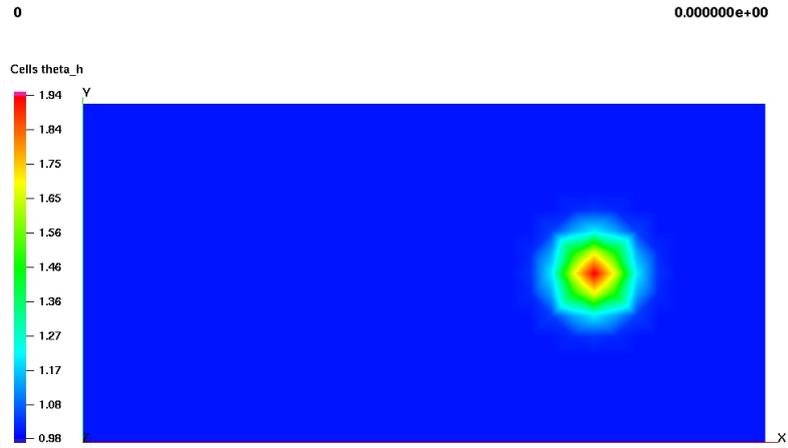


Figura 6: Distribución de temperatura

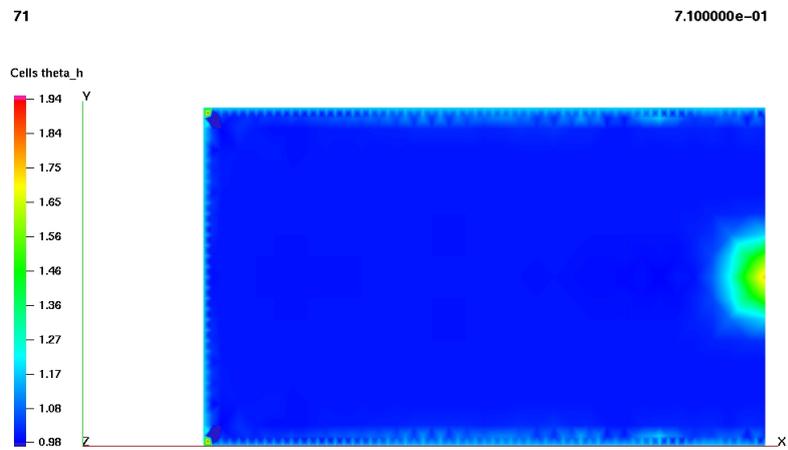


Figura 7: Distribución de temperatura

6.2. Flujo alrededor de una esquina

Como segundo ejemplo se muestra la aplicación al flujo alrededor de una esquina. El dominio consiste en una forma tipo L , siendo el conducto de salida la mitad respecto del conducto de entrada. Ver la figura 8.

En la figura 9 se puede observar la distribución de velocidades. En la misma se pone de manifiesto una mayor aceleración del flujo producto de la diferencia de secciones.

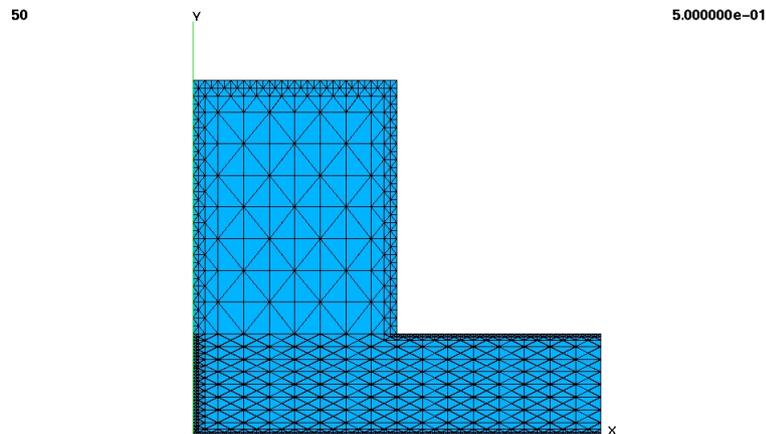


Figura 8: Malla en el tiempo $T_{end}/2$ en un dominio L

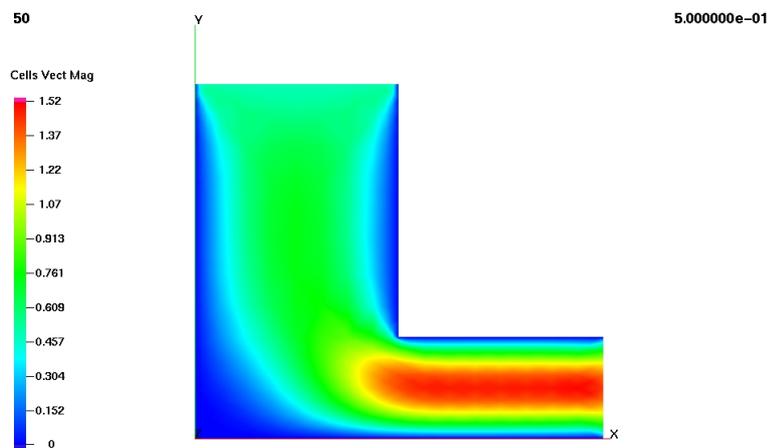


Figura 9: Magnitud de la velocidad en el tiempo $T_{end}/2$ en un dominio L .

7. CONCLUSIONES

Se construyó un modelo para resolver el flujo de un fluido Newtoniano reactivo en un dominio móvil. Para modelar el dominio móvil se propuso una transformación

biyectiva entre un dominio de cálculo fijo en el tiempo y el dominio real. El sistema de ecuaciones resultante consiste en las ecuaciones para el flujo (continuidad y movimiento), la ecuación para la energía y una ecuación para la concentración. Se propuso un algoritmo para resolver este sistema. Luego se implementó usando la herramienta de elementos finitos ALBERTA.

Se utilizó este algoritmo para resolver el flujo uniforme entre dos placas. En este ejemplo se verificó el ajuste con una solución exacta y el comportamiento de la ventana de salida. En esta ventana pudo observarse un error numérico nombrado en una de las referencias. Además se resolvió el flujo alrededor de una esquina, observándose la distribución de velocidades.

REFERENCIAS

- B. Caswell y R.I. Tanner. Wirecoating die design using finite element methods. *POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE*, 18:416–421, 1978.
- M. Crochet. Numerical simulation of viscoelastic flow: a review. *Rubber Chemistry and Technology*, 62:426–455, 1989.
- J.H. Dillon y N. Johnston. The plastic properties of several types of unvulcanized rubber stocks at high rates of shear. 4:225–235, 1933.
- L.E. Malvern. *Introduction to the mechanics of a continuous medium*. Prentice-Hall, Inc, 1969.
- M. Mooney. Explicit formulas for slip and fluidity. *Journal of rheology*, 2:210–222, 1931.
- R. Rannacher. Finite element methods for the incompressible navier-stokes equations. 1999.
- A. Schmidt y K.G. Siebert. *Design of adaptive finite element software*. Springer, Berlin, 2005.
- R.I. Tanner. U.s.-japan seminar on polymer processing and rheology. *Appl. Polym. Symp.*, 20:201, 1973.
- H. Zamodits y J.R.A. Pearson. Flow of polymer melts in extruders. part i. the effect of transverse flow and of a superposed steady temperature profile. *Trans. Soc. Rheol.*, 13:357–385, 1969.