





REOMETRIA FLUIDELOR COMPLEXE ÎN PREZENȚA SUPRAFEȚELOR STRUCTURATE



PN-II-ID-PCE-2012-4-0245

RAPORT SINTETIC INTERMEDIAR III

Etapa III – Noiembrie 2015

Componența echipei științifice:

Prof. dr. ing. Corneliu Bălan (director) Conf. dr. ing. Diana Broboană Asist. dr. ing. Nicoleta Tănase Drd. Ioana Omoncea Drd. Rodica Damian Drd. Mihaela Țurcanu

Administrație proiect: dr. ing. Sanda Osiceanu (Maiduc) ing. Aurelia Gheorghe

Universitatea "Politehnica" Bucuresti Laborator REOROM - Departamentul de Hidraulică, Mașini Hidraulice și Ingineria Mediului

Introducere

Scopul central al proiectului este investigarea, analiza și modelarea influenței suprafețelor structurate asupra caracterizării reologiei fluidelor complexe în teste reometrice.

În cadrul primei etape s-au stabilit fluidele de lucru și micro-geometriile ce urmează să fie folosite în investigațiile experimentale¹. De asemenea, în prima etapă s-a definitivat structura platformei experimentale pentru studiul curgerii fluidelor în micro-canale cu suprafețe structurate.

A doua etapă a avut ca principal scop stabilirea și testarea geometriilor structurate, în particular a plăcilor prevăzute cu microcanale, în reometrul rotațional și modelarea CFD a mișcărilor induse prin rotația discului superior².

Obiectivele științifice ale celei de-a III-a etape au fost următoarele:

1. Stabilirea funcțiilor de material ce caracterizează comportamentul reologic al fluidelor în prezența suprafețelor structurate.

- 1.1 Corelarea testelor cu modelul constitutiv;
- 1.2 Comunicarea rezultatelor la conferința AERC 2015 (organizată de ESR European Society of Rheology)
- 2. Formularea modelului de reprezentare al fluidelor în vecinătatea suprafețelor structurate.
 - 2.1. Efectuare de măsuratori (construcția suprafețelor structurate, investigații experimentale și vizualizări);
 - 2.2. Formularea modelului constitutiv în vecinatatea peretelui (stabilirea procedurii și geometriei de calcul).

Aceste activități au fost completate de achiziția unor dispozitive optice necesare vizualizării mișcărilor fluide în vecinătatea pereților și a unui printer 3D pentru relizarea modelelor suprafețelor structurate³.

Activitatea depusă s-a concretizat prin înaintarea spre publicare a 3 lucrări în reviste ISI și comunicarea rezultatelor prin 5 lucrări la conferința AERC 2015 (posterele aferente lucrărilor sunt atașate raportului pe pagina de web a proiectului).

Principalul rezultat al acestei etape este stabilirea modelului și procedurii de calcul a curgerii fluidelor vâscoase în vecinătatea suprafețelor structurate. Modelul propus consideră domeniul curgerii împărțit în două zone: (i) zona din vecinătatea peretelui staționar (delimitată de micro-structuri), în care curgerea se asimilează unei curgeri printr-un mediu poros, și (ii) domeniul curgerii omogene (cuprins între structuri și discul superior mobil), în care fluidul este caracterizat de o ecuație constitutivă stabilită anterior (în urma testelor folosind suprafețele netede).

De asemenea, în acestă etapă s-au definitivat micro-geometriile ce urmează să fie realizate și investigate în faza finală a proiectului: a) suprafețe cu microcanale paralele – *channel microsurface* (geometrie studiată și în etapa precedentă²), b) suprafețe cu microcilindrii – *pillar microsurface*, geometrie în curs de realizare și modelare.

¹ Bălan C. et al. *Reometria fluidelor complexe în prezența suprafețelor structurate*, Raport etapa I, decembrie 2013

² Bălan C. et al. *Reometria fluidelor complexe în prezența suprafețelor structurate*, Raport etapa II, noiembrie 2014

³ v. Planul de realizare a proiectului – etapa 2015 (unică), anexa IV la contractul de finanțare.

Stabilirea funcțiilor de material ce caracterizează comportamentul reologic al fluidelor în prezența suprafețelor structurate.

Așa cum este cunoscut, "ideea" ce stă la baza prezentului proiect^{1,2} este *folosirea reometriei în* prezența suprafețelor cu micro-structuri controlate, ca metodă și procedură pentru caracterizarea comportamentului reologic al fluidelor în vecinătatea pereților solizi.

În particular, comportamentul reologic al fluidelor în vecinătatea pereților solizi este definit de existența sau nu a vitezei de alunecare la perete solid fix, aceasta fiind asociată unei lungimii reale de alunecare. În urma studiilor efectuate, s-au stabilit funcțiile de material staționare ce definesc comportamentul reologic al fluidului în configurația placă - placă, v. Fig. 1:

- 1. Efortul de frecare la suprafața netedă mobilă σ_0^* (corespunzător geometriei fără micrstructuri);
- 2. Efortul de frecare la suprafața netedă mobilă σ_s^* (corespunzător geometriei cu microstructuri);
- 3. Parametrul structural b^* , $b^* = \left(\frac{\sigma_0^*}{\sigma_s^*} 1\right)h$, ce definește lungimea de alunecare⁴.



Fig. 1. Mișcarea cu forfecare simplă în vecinătatea suprafeței netede și structurate². Cele două suprafețe sunt discuri atașate reometrului rotațional, în care discul inferior (pe care se construiesc micro-structurile) este fix.

Se menționează că pentru o microgeometrie dată aceste funcții de material sunt direct măsurabile cu reometrul rotațional.

Bazat pe modelul propus, studiul CFD asociat acestei dinamici va permite determinarea vitezelor V_s (viteza de alunecare la suprafața micro-structurilor) și V_{as} (viteza din interiorul fluidului omogen în limita $\delta \rightarrow H$). În etapa următoare se propune măsurarea vitezei V_{as}, mărimea acesteia (coroborată cu valorile măsurate ale efortului de frecare σ_s^*) fiind folosită pentru confirmarea și calibrarea modelului propus.

⁴ Broboana D., Tanase N.O., Balan C. (2015) *Influence of patterned surface in the rheometry of simple and complex fluids,* J. Non-Newtonian Fluid Mech. 222, 151-162, dx.doi.org/10.1016/j.jnnfm.2014.10.006

Fluidele ce se vor testa în prezența suprafețelor microstructurate vor fi fluidele caracterizate în fazele precende ale proiectului (ulei și soluții viscoelastice de ulei cu PIB), dar și fluide newtoniene obținute prin amestecul apei cu glicerină, respectiv fluide viscoelastice obținute prin amestecul de xantan-gum cu apă.

Folosind geometriile standard (netede) ale reometrului rotațional, fluidele de lucru sunt caracterizate reologic atât prin funcția de viscozitate, v. Fig. 2, cât și prin valorile modulelor dinamice obținute în testele oscilatorii.



Fig. 2. Viscozitatea soluțiilor de xantan-gum cu apă în funcție de concentrația masică (teste de forfecare și oscilație efectuate la 25º C în configurația con-placă).
Punctele sunt datele măsurate iar liniile reprezintă modelul Carreau, v. Tab. 1.

Pe baza măsurătorile efectuate, funcția de viscozitate a fluidelor, $\eta = \eta(\dot{\gamma})$, se va modela cu relația constitutivă Carreau-Yasuda (cunoscută pentru capacitatea ei de a reprezenta multiple comportamente de tip *shear thinning*),

$$\frac{\eta(\dot{\gamma}) - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^a\right]^{\frac{n-1}{a}} \tag{1}$$

unde η_0 este coeficientul de viscozitate zero, η_∞ este coeficientul de viscozite infinit, λ este timpul caracteristic, a este exponentul structural (a = 2 pentru modelul Carreau) și n este indicele de curgere ($-1 \le n < 1$ pentru fluidul shear thinning, n = 1 pentru fluidul newtonian cu viscozitatea independentă de viteza de deformație $\dot{\gamma}$, respectiv $\eta = \eta_0 = \eta_\infty$).

Valorile corespunzătoare datelor experimentale din Fig. 2 sunt prezentate în Tab. 1.

Concentration % wt	η 0 [Pas]	$oldsymbol{\eta}_{\infty}$ [Pas]	λ [1/S]	n -
0.1	0.1	0.0015	1.1	0.36
0.2	1.2	0.002	3	0.26
0.3	3.6	0.0025	7	0.27
0.4	9.8	0.0037	7	0.18
0.5	17	0.005	7	0.12
0.6	29	0.007	7	0.08
0.7	36	0.008	7	0.08
0.8	49	0.009	8	0.08
0.9	78	0.01	9	0.08

Tab. 1 Valorile constantelor de material ale modelului Carreau pentru soluțiile de xantan-gum din Fig. 2.

În modelul propus pentru descrierea mișcării în vecinătatea peretelui micro-structurat se consideră că relația constitutivă ce descrie funcția de viscozitate a fluidelor testate este stabilită.

Formularea modelului de reprezentare al fluidelor în vecinătatea suprafețelor structurate.

În urma măsurătorilor efectuate pe suprafețe netede și rugoase/microstructurate pot apărea trei situații distincte: 1) $b^* < 0, 2$) $0 < b^* < H$ și 3) $b^* > H$.

Primul caz indică o creștere a efortului de frecare datorită prezenței unei suprafețe rugoase, respectiv structurate, fenomen ce nu este asociat existenței unei viteze de alunecare.

Cazul al doilea indică o viteză de alunecare aparentă în care viteza $V_s = v(H) \ll V_{as} = v(\delta)$ cu $\delta > H$, domeniul de mișcare al fluidului omogen fiind $y \ge \delta$.

Al treilea caz indică existența unei alunecări reale, totale sau parțiale, la suprafața microstructurilor, $V_s = v(H) > 0$.

Primul caz nu este de interes pentru prezentul studiu.

Alunecarea aparentă, cazul al II-lea, se poate studia folosind diferite proceduri, autorii propunând modelul constitutiv nemonoton și instabil⁵ ce descrie comportamentul fluidului în vecinătatea peretelui, de ex. relația (1) cu n < 0, v. Fig. 3.

În cazul alunecării aparente la perete se formează așa numita curgere *shear banding* în domeniul $0 \le y \le \delta$ (ce include micro-structurile), respectiv apariția unui strat subțire de fluid la limita superioară a micro-structurii de grosime $\xi \cong \delta - H$, în care viscozitatea fluidului este mică și viteza de forfecare foarte mare (acest model este descris în detaliu în lucrarea înaintată spre publicare⁵).

Stratul de grosime δ acoperă micro-structura, viteza V_{as} purtând denumirea de viteză de alunecare la perete aparentă⁵, v. Fig. 4. Acest model nu ține cont de procesul dinamic ce are loc în domeniul micro-structurii, $0 \le y \le H$, însă pe baza lui se poate determina valoarea vitezei V_{as} ce reprezintă condiția la limită pentru domeniul $y \ge \delta$ în care fluidul omogen este definit de relația sa constitutivă (mai puțin pentru $y = \delta$). Practic, în acest model se presupune că fluidul din vecinătatea

⁵ Broboana D., Tanase N.O., Balan C. (2015) *Viscosity function of fluids which disclose shear banding in rotational rheometers*, paper JOR-15-213-SB sumitted to J. Rheology.

peretelui micro-structurat este descris de o altă relație de material, care poate să asigure în anumite condiții continuitatea parametrilor dinamici și constitutivi în domeniul de mișcare $y \ge \delta$, viteza fiind continuă pentru $y = \delta$.

În dezvoltarea acestui model se va ține seama de corelarea parametrilor relației (1) (coeficientul n < 0 și raportul η_{∞}/η_0), respectiv a grosimii δ , atât cu parametrii geometrici ai microstructurii peretelui, cât și cu relația constitutivă a fluidului omogen respectiv.



Fig. 3. Reprezentarea⁵ curbei de curgere (*flow curve*) și a funcției de viscozitate (1) pentru modelul Carreau (formă adimensională) la diferite valori ale indicelui de curgere *n*.



Fig. 4. Separarea domeniul curgerii în două zone, fluidul fiind descris în zona cu microstructuri, $0 \le y \le \delta$, de o relație constitutivă instabilă. În acest caz viteza V_{as} (valoare comună celor două modele) este o viteză de alunecare aparentă pentru domeniul $y \ge \delta$. Pentru y = H viteza nu este zero însă $v(H) \ll v(\delta) = V_{as}$, cu $\xi \ll \delta$.

În cazul al III-lea se presupune că avem o viteză reală de alunecare a fluidului omogen pentru y = H, $V_s = v(H)$.

În aceste condiții se propune un model ce tratează curgerea lângă perete (în domeniul ocupat de micro-structuri, $0 \le y \le H$) ca o curgere într-un mediu poros (cu viteza v_p), pentru $y \ge H$ fiind considerată o curgere normală a unui fluid omogen(cu viteza v), v. Fig. 5.

Viteza pentru y = H nu este continuă, respectiv

$$\boldsymbol{v}_p(H) < \boldsymbol{v}(H) = \mathbf{V}_{\mathrm{s}} \tag{2}$$

unde se aplică condiția Beavears-Joseph⁶ de salt a vitezei la interfața mediu poros – lichid:

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{v}} = \frac{\alpha}{\kappa} \left[\boldsymbol{v}(H) - \boldsymbol{v}_p(H) \right],\tag{3}$$

 κ fiind permeabilitatea poroasă asociată micro-structurii și α un coeficient de alunecare, v. Fig. 5a.



Fig. 5. Curgerea în vecinătatea peretelui fix: a) curgerea în prezența micro-structurilor, asimilate unui mediu poros, b) curgerea omogenă (a unui fluid *shear thinning*) în apropierea unui perete neted.

În acest model distribuția de viteze în mediul poros, $0 \le y \le H$, rezultă din ecuația Brinkman-Forchheimer⁷:

$$gradp = -\frac{\eta_0}{\kappa} \boldsymbol{v}_p + \eta^* \Delta \boldsymbol{v}_p - \frac{\rho}{\kappa_1} |\boldsymbol{v}_p| \boldsymbol{v}_p, \tag{4}$$

în care η_0 este viscozitatea zero a fluidului, η^* este viscozitatea efectivă în mediul poros și κ_1 este coeficientul de permeabilitate poroasă inerțială.

O soluție numerică calitativă a ecuației (2), folosind codul *Mathematica*, este prezentată în Fig. 6.



Fig. 6. Distribuția de viteze într-un mediu poros, în domeniul $0 \le y \le H = 1$.

⁶ Beavers G.S., Joseph D.D. (1967) *Boundary conditions at a naturally permeable wall*, J. Fluid Mech. 30, 197-207.

⁷ Nield D.A., Bejan A. (2006) *Convection in porous media*, Springer, New York

Pentru obținerea soluției în întreg domeniul curgerii, ecuația (4) se va cupla cu ecuația de mișcare Cauchy:

$$\rho\left[\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v}\right] = \rho \boldsymbol{b} - gradp + di\boldsymbol{v}\mathbf{T}_{\mathrm{E}}$$
(5)

pentru $y \ge H$, unde $\mathbf{T}_{\mathrm{E}} = 2\eta(\dot{\gamma})\mathbf{D}$ reprezintă tensorul extra-tensiune pentru un fluid newtonian generalizat, $\eta(\dot{\gamma})$ fiind funcția de viscozitate caracteristică fluidului testat.

Cuplarea ecuațiilor (4) și (5) se face folosind relația (3), condiția la limită pentru (5) fiind $v(H) = V_{s.}$

Remarci finale

Se preconizează ca în geometriile 3D investigate soluția numerică a ecuațiilor (4) și (5) să fie obținută folosind codul numeric FLUENT, v. Anexa 1.

Evident, problema principală a modelului (ce rămâne deschisă pentru ultima etapă a proiectului) este determinarea coeficienților de permeabilitate poroasă și a viscozității efective în funcție de geometria micro-structurilor⁸.

În urma măsurării eforturilor de frecare pe discul mobil se va putea aprecia valoarea coeficientului de alunecare din (3), calibrarea întregii soluții fiind obținută prin determinarea experimentală a vitezei v(H), respectiv prin măsurarea distribuției de viteze v(y), y > H.

În etapa finală a proiectului studiile experimentale se vor realiza pe două configurații:

- 1. Geometria reometrică placă placă;
- 2. Microcanale tip cruce de secțiune pătrată.

Suprafețele micro-structurate ce vor fi testate sunt:

- a) Suprafețe cu micro-cilindrii de diferite forme și densități (o parte fiind realizate în această etapă în cadrul Laboratorului de Microfludică de la Institutul IEMN, Lille, Franța, v. Anexa 1);
- b) Suprafețe cu micro-canale paralele (similare suprafețelor studiate în faza precedentă a proiectului).

Pe lângă mișcările de forfecare asociate configurațiilor prezentate se preconizează și două studii complementare: (i) impactul jeturilor pe suprafețe micro-structurate, v. Anexa 2; (ii) curgerea în vecinătatea corpurilor cu suprafețe micro-structurate, v. Anexa 3.

30 Noiembrie. 2015

Director de proiect,

Smelin polan

Prof. Corneliu Bălan

⁸ Durlofsky L., Brady J. F. (1987) *Analysis of the Brinkman equation as a model for flow in porous media*, Phys. Fluids 30(11), 3329-3341

Liu H., Patil P.R., Narusawa U. (2007) On Darcy-Brinkman equation: viscous flow between two parallel plates packed with regular square arrays of cylinders, Entropy 9, 118-131

Mario Minale M. (2014) *Momentum transfer within a porous medium. I. Theoretical derivation of the momentum balance on the solid skeleton*, Phys. Fluids **26**, 123101





Simularea numerică 3D a curgerii generată de rotația unei plăci plane netede în vecinătatea unei plăci micro-structurate, v. Fig. 4 și Fig. 5.a.

Anexa 1 - Suprafețe micro-structurate cu cilindrii de diferite forme și dimensiuni. Se prezintă caracteristicile geometrice și ungiul de contact al apei pe suprafețe (caracter pronunțat hidrofob).

G3 – Piloni

dreptunghiulari

Θ

G2 – Piloni cilindrici

0

0

C

G1 – Piloni cilindrici

C

0

G4 – Piloni

triunghiulari

Anexa 2 – Impactul unui jet de apă pe suprafațe structurate cu microcanale comparativ cu o suprafață netedă (vizualizaări după 625 ms de la impact).



Anexa 3 – Studiul curgerii în jurul corpurilor cu suprafețe structurate⁹



Dimensiunea cilindrului cu suprafață structurată (lățimea este de 15 mm).



Soluții numerice și vizualizări experimentale pentru curgerea apei și soluției de polimeri PAA în jurul cilindrului cu pereți structurați.

Cylinders - fluids	Pressure force [N]	Viscous force [N]	Total force [N]	Pressure coefficient [-]	Viscous coefficient [-]	Total coefficient [-]
smooth - water	2.0686	0.0441	2.1127	3.3774	0.07198	3.4494
smooth - PAA	2.0764	0.1163	2.1928	3.3901	0.18998	3.5801
grooved - water	2.0879	0.0276	2.1155	3.4088	0.0451	3.454
grooved - PAA	2.22239	0.08083	2.30322	3.62839	0.13197	3.76037

Compararea forțelor ce acționează pe cilindrul neted și cilindrul structurat pentru parametrii identici ai curgerii⁹.

⁹ Tanase N.O., Broboana D., Balan C. (2015) *Numerical and experimental investigations of the flow configuration in vicinity of immersed smooth and patterned cylinders*, submitted for publication in Proc. Rom. Acad.