



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA MATEMÁTICA

MODELOS EN REOLOGÍA Y APLICACIONES A FLUIDOS

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO

MANUEL ANDRÉS LARENAS ARAVENA

PROFESOR GUÍA:
CARLOS CONCA ROSENDE

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
RAMÓN FUENTES AGUILAR
RODRIGO SOTO BERTRÁN

SANTIAGO DE CHILE
MAYO 2010

Πάντα ῥεῖ καὶ οὐδὲν μένει
(*Todo fluye, nada permanece*)
- Heráclito de Éfeso

RESUMEN DE LA MEMORIA
PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO
POR: MANUEL LARENAS ARAVENA
FECHA: 26/04/2010
PROF. GUÍA: CARLOS CONCA ROSENDE

MODELOS EN REOLOGÍA Y APLICACIONES A FLUIDOS

La reología de suspensiones concentradas es un tema complejo tanto en la experimentación como en la teoría. La correcta caracterización de estas mezclas es un campo de investigación activo que tiene gran relevancia científica e industrial y donde la aplicación de la mecánica matemática permite desarrollar diseños de ingeniería más seguros y eficientes. El presente Trabajo de Título es un estudio teórico dividido en dos secciones, ambas en el marco de la reología aplicada a relaves mineros.

La primera parte está dirigida al estudio de la construcción adecuada de la curva reológica de un material a partir de mediciones experimentales obtenidas utilizando un Reómetro de Cilindros Coaxiales. El procedimiento matemático involucrado se denomina Problema Inverso de Couette y en esta Memoria se prueba que es un problema mal puesto en el sentido de la estabilidad. Además, se revisan distintas estrategias que han sido utilizadas históricamente para buscar soluciones numéricas, a saber, la aproximación newtoniana, la norma DIN, la fórmula de Krieger y Elrod, la fórmula de diferencias finitas y la regularización de Tikhonov.

Estos métodos de aproximación fueron implementados computacionalmente para ser aplicados tanto al estudio de modelos teóricos como a información experimental de relaves. En general, los resultados obtenidos fueron muy similares para todas las suspensiones de variada concentración de sólido que se analizaron.

En la segunda parte de esta Memoria se propone un modelo reológico original que da cuenta de la compleja fenomenología observada a partir de las curvas construidas en la sección anterior. El comportamiento tixotrópico que se desprende de los experimentos sugiere la existencia de un parámetro de microestructura cuya variabilidad temporal controla la superposición relativa entre un régimen viscoelástico inicial y un comportamiento posterior viscoso tipo Bingham.

El modelo resultante es de difícil empleo dada la gran cantidad de parámetros libres. Mediante la integración de los ensayos reológicos Vane y los de cilindros coaxiales es posible reducir el problema a la estimación numérica de sólo una o dos constantes. La validación de este modelo se lleva a cabo contrastando con amplia información experimental. Para el rango de datos estudiados, se observa en todos los casos un ajuste satisfactorio y resultados consistentes físicamente.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo está dedicado a mis padres, quienes han sido mi permanente apoyo y me han brindado su paciencia y confianza. Toda mi admiración hacia ustedes, Bernardita y Manuel. Este logro es tan mío como suyo.

Agradezco a mis profesores guía Carlos Conca y Don Ramón Fuentes, de quienes adquirí conocimientos y permanente inspiración para desarrollar esta Memoria. Al profesor Rafael Benguria, quien me ha acercado a oportunidades cruciales en mi vida.

A mis amigos cantineros, con quien he compartido momentos inolvidables durante la carrera: Cris, Raúl, Chask, Oskar, Gus, N, Chonak y Amaru. A la familia *Soliloquio*: Feña, Lucho, Mimo y Rod; mis hermanos en la seriedad, música y carretes.

Agradezco también a Codelco, que facilitó el acceso a información experimental que dio soporte a este trabajo.

Finalmente, toda mi gratitud hacia ti. Inefablemente has sido mi luz.

Índice general

1	Introducción	1
1.1	Contexto	1
1.2	Motivación	2
1.3	Objetivos	2
1.3.1	Objetivo General	2
1.3.2	Objetivos Específicos	3
1.4	Estructura de la Memoria	3
2	Antecedentes Teóricos	4
2.1	Mecánica de Fluidos	4
2.1.1	Leyes de Conservación	4
2.1.2	La Ecuación de Cauchy	5
2.1.3	El Sistema de Navier Stokes para Fluidos Newtonianos	6
2.1.4	El Sistema de Stokes para Fluidos Newtonianos	7
2.2	Modelos de Fluidos	7
2.2.1	Fluido newtoniano	8
2.2.2	Fluido según Ley de Potencia	8
2.2.3	Fluido Bingham	9
2.2.4	Fluido Herschel-Bulkley	10
2.2.5	Fluido Casson	10
2.2.6	Fluido Casson Generalizado	11
2.3	Elementos de Reometría	11
2.3.1	Curvas Reológicas	12
2.3.2	El Reómetro de Cilindros Coaxiales	12
2.3.3	El Problema Inverso de Couette	13
3	Aproximaciones para el Problema Inverso de Couette	18
3.1	La Aproximación Newtoniana	18
3.2	La Norma DIN	19
3.3	La Fórmula de Krieger y Elrod	20
3.4	Las Fórmulas de Diferencias Finitas	21
3.5	Regularización de Tikhonov	23

4	Implementación y Análisis de Métodos de Aproximación	26
4.1	Implementación numérica	26
4.1.1	Suavización y reducción de ruido	27
4.1.2	Programación de los métodos	28
4.2	Aplicación a modelos teóricos	30
4.2.1	Modelo de Bingham	30
4.2.2	Modelo de Casson	31
4.3	Aplicación a relaves mineros	40
4.4	Algunas estimaciones teóricas	49
4.5	Discusión de los resultados	50
5	Modelo Cinético de Microestructura para Fluidos Dependientes del Tiempo	52
5.1	Consideraciones reológicas	52
5.1.1	Suspensiones	52
5.1.2	Dependencia Temporal	53
5.2	Derivación matemática	54
5.2.1	Ecuación Cinética	55
5.2.2	Ecuación Constitutiva	55
5.3	Casos particulares	59
5.3.1	Método Vane	59
5.3.2	Rampa lineal	61
5.3.3	Régimen estacionario	62
5.4	Validación experimental	62
6	Conclusiones y Trabajo Futuro	66
	Anexos	68
	Bibliografía	72

Índice de figuras

2.3.1 Reograma ideal de fluido newtoniano y Bingham	12
2.3.2 Reómetro de cilindros coaxiales	13
2.3.3 Función regularizante de la indicatriz	16
4.1.1 Puntos experimentales (Ω_i, τ_i)	27
4.1.2 Estimador de Gasser-Müller	28
4.2.1 Reograma Bingham. Arriba: $M_B = 0$. Abajo: $M_B = 0,5$	32
4.2.2 Reograma Bingham. Arriba: $M_B = 1$. Abajo: $M_B = 2$	33
4.2.3 Error Bingham. Arriba: $M_B = 0$. Abajo: $M_B = 0,5$	34
4.2.4 Error Bingham. Arriba: $M_B = 1$. Abajo: $M_B = 2$	35
4.2.5 Reograma Casson. Arriba: $M_C = 0$. Abajo: $M_C = 2$	36
4.2.6 Reograma Casson. Arriba: $M_C = 5$. Abajo: $M_C = 10$	37
4.2.7 Error Casson. Arriba: $M_C = 0$. Abajo: $M_C = 2$	38
4.2.8 Error Casson. Arriba: $M_C = 5$. Abajo: $M_C = 10$	39
4.3.1 Granulometría de relave	40
4.3.2 Reograma relave. Arriba: $C_p = 50\%$. Abajo: $C_p = 52\%$	41
4.3.3 Reograma relave. Arriba: $C_p = 62\%$. Abajo: $C_p = 67\%$	42
4.3.4 Reograma relave. Arriba: $C_p = 71\%$. Abajo: $C_p = 74\%$	43
4.3.5 Parámetros Bingham. Arriba: μ^B . Abajo: τ_0^B	46
4.3.6 Parámetros Casson. Arriba: μ^C . Abajo: τ_0^C	47
4.3.7 Parámetros Casson Generalizado. Arriba: μ^H . Abajo: τ_0^H	48
4.3.8 Parámetro k Casson Generalizado	49
4.5.1 $\Omega(\tau)$ para el modelo de Casson	50
5.2.1 La función λ	55
5.2.2 Comportamiento viscoelástico	56
5.2.3 Regímenes de flujo como función de Wi y De	58
5.3.1 Curva experimental Vane	60
5.3.2 Ciclo de histéresis experimental de relave	61
5.4.1 Método Vane: ajuste del Modelo a datos experimentales	64
5.4.2 Rampa lineal: ajuste del Modelo a datos experimentales	65

Índice de cuadros

2.2.1 Resumen de Modelos Reológicos	11
4.3.1 Propiedades físicas de relave analizado	40
4.3.2 Bingham: viscosidad estimada	44
4.3.3 Bingham: tensión de fluencia estimada	44
4.3.4 Casson: viscosidad estimada	44
4.3.5 Casson: tensión de fluencia estimada	44
4.3.6 Casson Generalizado: viscosidad estimada	45
4.3.7 Casson Generalizado: tensión de fluencia estimada	45
4.3.8 Casson Generalizado: constante de escala estimada	45
4.5.1 Valores de M_B y M_C para relaves	51
5.4.1 Propiedades físicas de relaves analizados	62
5.4.2 Estimación de parámetros directos	63
5.4.3 Método Vane: parámetros en función de la constante c	63
5.4.4 Estimación por ajuste de c y θ	63

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto

El comportamiento reológico de suspensiones diluidas y dispersiones coloidales es un tema relativamente bien comprendido. Por el contrario, el estudio de materiales altamente concentrados ha recibido menos atención debido a la alta complejidad teórica y experimental de estos sistemas. El tipo de interacciones entre los componentes elementales de los fluidos muy concentrados permite distinguir tres categorías: pastas, materiales granulares y pastas granulares [Cou05]. Estas interacciones pueden considerarse como “duras” o “blandas” dependiendo de si las partículas sólidas entran en contacto o no.

Este Trabajo de Título se centrará en las pastas, el tipo de material concentrado donde las interacciones entre partículas son provocadas por efectos a distancia. En particular, el tipo de suspensión con el que se trabajará está constituido por partículas de gran tamaño lo cual acentúa los efectos inerciales y favorece la decantación.

La investigación en este campo tiene gran relevancia industrial en las etapas de diseño, producción, transporte y utilización de materiales comunes como, por ejemplo, concreto fresco, alimentos, tintas y cosméticos. Asimismo, existen aplicaciones al estudio del comportamiento de fluidos naturales como lavas, barros y avalanchas.

Los fluidos de alta concentración son complejos de estudiar experimentalmente. Las pruebas de análisis presentan efectos indeseados tales como deslizamiento de pared, sedimentación, migración, etc. De no ser cuantificados y controlados, estos factores pueden ser fuente de errores significativos y sistemáticos en los datos, lo cual a su vez puede repercutir en diseños de ingeniería defectuosos.

Por otro lado, la modelación matemática se ha desarrollado muy particularizada y a menudo presenta poca aplicabilidad. El modelamiento de fenómenos complejos como la tixotropía o el adelgazamiento ha generado una multitud de desarrollos teóricos que data desde hace más de cincuenta años y que aún presenta una gran variedad de problemas abiertos.

1.2. Motivación

Las suspensiones están presentes en la mayoría de los procesos mineros. La mezcla de sólido con agua se denomina *pulpa* y es utilizada para transportar material a través de tuberías a grandes distancias. La escasez de agua ha forzado a transportar suspensiones cada vez más concentradas, para lo cual ha sido necesario desarrollar una cuidadosa planificación de ingeniería.

Antiguamente los diseños se realizaban mediante ensayos directos en prototipos y plantas piloto, así como con pruebas de laboratorio y utilizando reglas empíricas. Sin embargo, investigadores modernos han evidenciado la necesidad de estudiar con profundidad la dinámica de las suspensiones como una disciplina fundamental para la comprensión de los procesos mineros.

El modelamiento conceptual y matemático de este sistema físico necesariamente comienza por estudiar la reología de las pulpas mineras. Sin embargo, existen dificultades teóricas, tecnológicas y experimentales importantes que sólo se han empezado a superar recientemente y, por lo tanto, la experiencia previa es escasa.

La motivación de esta Memoria proviene de un tipo de ensayo reológico cuyo resultado está expresado por medio de una ecuación integral. Son conocidas diversas técnicas de aproximación para resolver el problema, sin embargo, la implementación numérica de los métodos reviste dificultades técnicas y no se conoce en principio su rango de confiabilidad.

La aplicación de conceptos de la mecánica matemática a la reología de suspensiones permite la caracterización precisa de los relaves mineros y, por ende, desarrollar diseños de ingeniería más seguros y eficientes.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Este Trabajo de Título está enfocado a la caracterización de pulpas mineras a través de las curvas de flujo. Éstas representan la relación constitutiva propia del fluido en estudio y modelan la respuesta del material ante esfuerzos aplicados. Dada su relevancia, será importante construir las utilizando el método de aproximación del problema que conjugue factibilidad de implementación y mayor confiabilidad.

Conocida esta curva, será interesante dar sentido físico al comportamiento del fluido. Se trabajará en establecer un modelo matemático que dé cuenta de la fenomenología compleja que se observa en los experimentos y que naturalmente se ajuste bien a los datos. Este esfuerzo se enfocará principalmente a suspensiones concentradas, pero los resultados podrían ser aplicados a fluidos más generales.

1.3.2. Objetivos Específicos

- (1) Estudiar los modelos de fluido en régimen estacionario que han sido históricamente relevantes para las aplicaciones teóricas y prácticas.
- (2) Dar a conocer los elementos básicos de reometría atinentes al Problema Inverso de Couette. Evidenciar la dificultad en la resolución de este problema.
- (3) Exponer matemáticamente de forma rigurosa algunos métodos de aproximación para la ecuación integral. Estudiar procedimientos antiguos y modernos.
- (4) Implementar numéricamente cada uno de los métodos de análisis expuestos, indagar sus dificultades y explorar su aplicabilidad.
- (5) Evaluar el desempeño de los métodos de aproximación comparando con soluciones explícitas a modelos conocidos. Estudiar las fuentes de error.
- (6) Aplicar los métodos de aproximación a información experimental proveniente de relaves mineros. Construir reogramas comparativos.
- (7) Realizar estimaciones teóricas a fin de explicar, dentro de lo posible, las discrepancias entre los métodos de aproximación.
- (8) Desarrollar un modelo matemático original que describa el comportamiento dependiente del tiempo de los relaves analizados.
- (9) Aplicar este modelo a casos relevantes y validar experimentalmente con datos reales.

1.4. Estructura de la Memoria

El Cap. 2 reúne brevemente aspectos teóricos relativos a la mecánica de medios continuos. Primero se discuten las ecuaciones generales, para luego presentar los modelos de fluido de más amplia utilización teórica y práctica. Finalmente, se abordan conceptos básicos en reometría y se establece el Problema Inverso de Couette.

En el Cap. 3 se exponen teóricamente cinco métodos de aproximación para resolver el problema inverso.

El Cap. 4 describe la implementación numérica de estos métodos. Se comparan sus resultados sobre modelos conocidos para estudiar el error de aproximación, y luego son aplicados a información experimental.

Finalmente, el Cap. 5 presenta las bases de una ecuación constitutiva original. Se sustenta el modelo a partir de principios físicos y consideraciones fenomenológicas, y luego se aplica sobre experimentos reales a fin de estudiar su validez.

Capítulo 2

Antecedentes Teóricos

2.1. Mecánica de Fluidos

A menudo en este documento se mencionarán conceptos provenientes de la Mecánica de Fluidos. A continuación se presentarán brevemente algunas *Leyes de Conservación*, a partir de las cuales se deducirá la *Ecuación de Cauchy* y, más tarde, las *Ecuaciones de Navier-Stokes*. Luego, se describirán algunos modelos simples de fluido que serán considerados en las simulaciones y que son de amplia utilización en reología.

2.1.1. Leyes de Conservación

El *Teorema del Transporte de Reynolds* [LL87] establece una relación integral para la variación temporal de cierta propiedad intensiva L al interior de un volumen de control $\Omega(t)$. Esta variación debe ser igual a la transferencia a través de la frontera del volumen y al aporte de fuentes y sumideros dentro del dominio. Matemáticamente,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} L dV = - \int_{\partial\Omega(t)} L \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega(t)} Q dV, \quad (2.1.1)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad del fluido con respecto a Ω . Aplicando el *Teorema de la divergencia* y dado que esto es válido para cualquier volumen de control $\Omega(t)$, se deduce finalmente la *ecuación de continuidad* para L

$$\frac{\partial L}{\partial t} + \operatorname{div}(L\mathbf{v}) + Q = 0 \quad \text{en } \mathbf{R}^3. \quad (2.1.2)$$

Considerando la ecuación (2.1.2) sin fuentes externas ($Q = 0$) y aplicada a la densidad $L = \rho(\mathbf{x}, t)$, se obtiene la *conservación de la masa*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{v}) = 0 \quad \text{en } \mathbf{R}^3. \quad (2.1.3)$$

Por otro lado, utilizando nuevamente la ecuación (2.1.2) aplicada a $L = \rho \mathbf{v}$, se obtiene la *conservación del momentum*

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \mathbf{F} \quad \text{en } \mathbf{R}^3, \quad (2.1.4)$$

donde \mathbf{F} es una fuerza que aporta *momentum* al sistema (por unidad de volumen). Expandiendo las derivadas y ordenando términos resulta

$$\mathbf{v} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v}) \right) + \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \mathbf{F}. \quad (2.1.5)$$

Utilizando (2.1.3) y dado que la derivada total o *convectiva* es

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}, \quad (2.1.6)$$

se obtiene que

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} \quad \text{en } \mathbf{R}^3, \quad (2.1.7)$$

la cual corresponde a una expresión para la Segunda Ley de Newton.

2.1.2. La Ecuación de Cauchy

La fuerza neta \mathbf{F} puede separarse en dos términos: una densidad volumínica \mathbf{f} de fuerzas externas aplicadas, como por ejemplo la gravedad, y otro que describe las fuerzas provenientes de los esfuerzos internos del fluido. De acuerdo al *Postulado de Cauchy* esta última puede representarse como una densidad superficial de fuerza \mathbf{t} sobre la frontera del volumen $\Omega(t)$, y que resulta ser función de (\mathbf{x}, t) y la normal unitaria \hat{n} . De manera integral,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{f} dV + \int_{\partial\Omega(t)} \mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \hat{n}) dS. \quad (2.1.8)$$

Se prueba que \mathbf{t} resulta ser una función lineal en \hat{n} y por lo tanto puede escribirse como $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \hat{n}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \hat{n}$, donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el denominado *tensor de esfuerzos internos*. Finalmente, utilizando el Teo. de la divergencia y dado que $\Omega(t)$ es un volumen arbitrario, se deduce la denominada *Ecuación de Cauchy*

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \operatorname{Div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} \quad \text{en } \mathbf{R}^3, \quad (2.1.9)$$

donde el operador *Div* corresponde a la divergencia por filas del tensor $\boldsymbol{\sigma}$.

Físicamente, puede interpretarse a cada componente σ_{ij} del tensor $\boldsymbol{\sigma}$ como el esfuerzo aplicado a la cara cuya normal es i , en la dirección j . El Teo. de Boltzmann-Cauchy establece que $\boldsymbol{\sigma}$ es un tensor simétrico como resultado de la conservación de *momentum*

angular. Típicamente, la letra σ denota los *esfuerzos normales* y τ , los *esfuerzos de corte*. El tensor puede dividirse en dos términos:

$$\boldsymbol{\sigma} = - \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{xx} + p & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} + p & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} + p \end{pmatrix} = -pI + \mathbb{T}, \quad (2.1.10)$$

donde se define la *presión estática* $p = -\frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$. La motivación para esta separación proviene de que para un fluido en reposo se debe cumplir que $\boldsymbol{\sigma}\hat{n}$ es paralelo a \hat{n} y entonces se deduce la existencia de una función escalar p tal que $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = -p(\mathbf{x}, t)I$. Así, para este caso las únicas fuerzas internas presentes son de compresión.

2.1.3. El Sistema de Navier Stokes para Fluidos Newtonianos

Formalmente, un *fluido newtoniano* se caracteriza como aquel en que el esfuerzo de corte τ entre capas paralelas de fluido es proporcional al gradiente de velocidad perpendicular a las capas, es decir, en un flujo bidimensional que se mueve en la dirección \hat{x} ,

$$\tau = \mu \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (2.1.11)$$

El coeficiente de proporcionalidad μ es la denominada *viscosidad dinámica*, que se supone constante. Los fluidos no newtonianos exhiben relaciones más complicadas entre los esfuerzos y el gradiente de velocidad y, además, la viscosidad puede depender de algunas variables del sistema.

Se dice que un medio es *incompresible* si en su movimiento se deforma sin cambiar su volumen. Se prueba que necesariamente entonces cumple $\text{div}(\mathbf{v}) = 0$ en \mathbf{R}^3 y luego, por la ecuación (2.1.3) se tiene que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{en } \mathbf{R}^3. \quad (2.1.12)$$

Matemáticamente, para un fluido newtoniano incompresible los elementos del tensor de esfuerzos en (2.1.10) están dados por

$$\mathbb{T}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \Rightarrow \sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.1.13)$$

Reemplazando (2.1.13) en (2.1.9) se establece finalmente el *Sistema de Navier-Stokes* para un fluido incompresible, viscoso y homogéneo de densidad $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0$:

Dado Ω abierto acotado de \mathbf{R}^n , se busca $\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbf{R}^n$ y $p : \Omega \rightarrow \mathbf{R}$ tales que

$$(NS) \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nu \Delta \mathbf{v} + \frac{1}{\rho_0} \nabla p = \mathbf{f}, & \text{en } \Omega \\ \text{div } \mathbf{v} = 0, & \text{en } \Omega, \end{cases} \quad (2.1.14)$$

donde \mathbf{f} es dada y $\nu = \mu/\rho_0$ se conoce como la *viscosidad cinemática*.

Estas ecuaciones, junto a condiciones iniciales y de borde, conforma el sistema cerrado que gobierna la dinámica de esta clase de fluidos. Hay que recordar que por (2.1.6), este sistema es no lineal en \mathbf{v} , lo cual genera un complicado comportamiento físico y presenta alta complejidad desde el punto de vista del análisis matemático.

2.1.4. El Sistema de Stokes para Fluidos Newtonianos

El *flujo de Stokes* es aquel en que las fuerzas inerciales son pequeñas en comparación con las fuerzas viscosas. Se caracteriza por velocidades bajas, viscosidades altas y/o escalas de tamaño pequeñas.

Matemáticamente, corresponde al sistema en (2.1.14), pero, despreciando el término no lineal en \mathbf{v} . Así, el *Sistema de Stokes* para un fluido incompresible, viscoso y homogéneo de densidad $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0$ se establece como:

Dado Ω abierto acotado de \mathbf{R}^n , se busca $\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbf{R}^n$ y $p : \Omega \rightarrow \mathbf{R}$ tales que

$$(S) \quad \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \nu \Delta \mathbf{v} + \frac{1}{\rho_0} \nabla p = \mathbf{f}, & \text{en } \Omega \\ \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, & \text{en } \Omega. \end{cases} \quad (2.1.15)$$

2.2. Modelos de Fluidos

Dada la amplia gama de comportamientos observados en distintas clases de fluidos, ha sido necesario desarrollar variados modelos adecuados a cada caso. En general, se definen como una relación matemática algebraicamente simple entre el gradiente de velocidades o tasa de corte, que comúnmente se denota $\dot{\gamma}$ [s^{-1}], y el esfuerzo de corte $\tau(\dot{\gamma})$ [Pa]. A menudo se establecen también a través de su *viscosidad aparente* definida como

$$\eta = \frac{\tau(\dot{\gamma})}{\dot{\gamma}}, \quad (2.2.1)$$

o bien, por medio de la relación $\dot{\gamma} = f(\tau)$.

τ y $\dot{\gamma}$ son funciones unidimensionales dado que los casos simples estudiados son los fluidos que se mueven entre superficies paralelas infinitas: éstos son los llamados *Flujos de Couette*. Luego, existe sólo una tensión de corte y un elemento del gradiente de velocidades que no son idénticamente nulos.

Se presentarán a continuación los modelos de fluido para flujos estacionarios de materiales no dependientes del tiempo utilizados más ampliamente en ingeniería.

2.2.1. Fluido newtoniano

De acuerdo al modelo presentado en (2.1.11), corresponde a la relación con un parámetro libre que se establece como [New99]

$$\tau = \mu \dot{\gamma}, \quad (2.2.2)$$

o a través de la viscosidad aparente

$$\eta = \mu,$$

que resulta ser independiente de $\dot{\gamma}$. Las suspensiones en general se comportan de esta manera para muy bajas concentraciones, pero también se observa la convergencia a fluido newtoniano para materiales más complejos en presencia de muy altos esfuerzos de corte.

La ventaja de este modelo es su simplicidad, pues sólo posee un parámetro libre que es muy fácil de calcular a partir de regresión lineal. Además, permite obtener soluciones explícitas para las ecuaciones de modelamiento en ingeniería. Sin embargo, en muchos de los casos que se estudiarán en este Trabajo de Título, se observará que este modelo puede arrojar resultados significativamente erróneos al ser aplicado a fluidos complejos.

2.2.2. Fluido según Ley de Potencia

También conocido como modelo de Ostwald-de Waele [Ots25][Wae30]. Cumple la relación

$$\tau = K \dot{\gamma}^n, \quad (2.2.3)$$

donde K [$\text{Pa} \cdot \text{s}^n$] y n se denominan índice de consistencia y comportamiento, respectivamente. La viscosidad aparente está dada por

$$\eta = K \dot{\gamma}^{n-1}.$$

El valor de n determina tres tipos de comportamiento:

$n < 1$	<i>shear thinning</i> o fluido pseudoplástico
$n = 1$	fluido newtoniano
$n > 1$	<i>shear thickening</i> o fluido dilatante

El fluido pseudoplástico experimenta una disminución de su viscosidad aparente bajo niveles crecientes de esfuerzo aplicado. Es posible observar este fenómeno en materiales como el *ketchup* y algunas pinturas. Un fluido dilatante experimenta el proceso inverso, pero los ejemplos son más escasos.

Este modelo debe usarse para valores de $\dot{\gamma}$ en un rango acotado pues, por ejemplo, para el caso ($n < 1$) supone viscosidades arbitrariamente grandes para fluidos cerca del reposo (o que se mueven como un cuerpo rígido) y, por otro lado, para altas tasas de corte, viscosidades muy pequeñas que podrían ser incluso menores que la del fluido transportador. Otra desventaja del modelo es que las unidades de K [$\text{Pa} \cdot \text{s}^n$] no permiten darle un sentido físico claro a este parámetro, esto es lo que se denomina *inconsistencia de las unidades*.

2.2.3. Fluido Bingham

El *plástico Bingham* [Bin16] es un tipo de material viscoplástico que se comporta como un cuerpo rígido frente a esfuerzos bajos, pero fluye viscosamente ante esfuerzos altos. Es el modelo de uso típico en pulpas de la industria minera, pero también se presenta en materiales comunes como la mayonesa y la pasta de dientes.

La explicación física de este fenómeno radica en que el fluido contiene partículas en suspensión o grandes moléculas que presentan interacción mutua. Éstas crean una débil estructura sólida que se rompe al alcanzar cierto nivel de estrés denominado *tensión de fluencia* $\tau_0 > 0$. Una vez que se supera este umbral, las partículas se mueven libremente en el fluido bajo fuerzas viscosas.

La relación entre tasa de corte y esfuerzo tangencial para el plástico de *viscosidad Bingham* μ_B se establece como

$$\dot{\gamma}(\tau) = f(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau < \tau_0 \\ (\tau - \tau_0)/\mu_B & \tau \geq \tau_0, \end{cases} \quad (2.2.4)$$

o inversamente,

$$\tau = \tau_0 + \mu_B \dot{\gamma}. \quad (2.2.5)$$

De manera equivalente, a través de la viscosidad aparente

$$\eta = \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + \mu_B.$$

Para un flujo general, no necesariamente de Couette, el tensor de esfuerzos correspondiente al modelo Bingham es [DL72]

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + g \frac{D_{ij}}{D_{II}^{1/2}} + 2\mu_B D_{ij}, \quad (2.2.6)$$

donde se definen $D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$, $D_{II} = \frac{1}{2} D_{ij} D_{ij}$ y g es una constante positiva.

Finalmente, definiendo $\sigma_{II} = \frac{1}{2} \mathbb{T}_{ij} \mathbb{T}_{ij}$ se obtiene a *ley de comportamiento del fluido Bingham* dada por

$$\begin{cases} \sigma_{II}^{1/2} < g & \Leftrightarrow D_{ij} = 0 \\ \sigma_{II}^{1/2} \geq g & \Leftrightarrow D_{ij} = \frac{1}{2\mu_B} \left(1 - g/\sigma_{II}^{1/2} \right) \mathbb{T}_{ij}. \end{cases} \quad (2.2.7)$$

Se observa entonces que el fluido se comporta como un medio rígido si cierta función de los esfuerzos no supera el valor g , así como también que para g muy cercano a cero se recupera el modelo de un fluido newtoniano clásico.

2.2.4. Fluido Herschel-Bulkley

Es un modelo de tres parámetros que conjuga la tensión de fluencia proveniente del modelo Bingham y el crecimiento en Ley de Potencia [HB26]. Como tales, τ_0 , K y n tienen interpretaciones físicas equivalentes. La relación entre $\dot{\gamma}$ y τ viene dada por

$$\dot{\gamma}(\tau) = f(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau < \tau_0 \\ \frac{(\tau - \tau_0)^{1/n}}{K^{1/n}} & \tau \geq \tau_0, \end{cases} \quad (2.2.8)$$

o inversamente,

$$\tau = \tau_0 + K\dot{\gamma}^n. \quad (2.2.9)$$

De manera equivalente, a través de la viscosidad aparente

$$\eta = \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + K\dot{\gamma}^{n-1}.$$

Tal como en la Ley de Potencia, el valor de n determina el comportamiento de la viscosidad aparente en función de la tasa de corte. Este modelo también presenta la misma dificultad para valores muy pequeños y muy grandes de $\dot{\gamma}$, además de la inconsistencia de las unidades.

2.2.5. Fluido Casson

Es un modelo de dos parámetros definido por la relación [Cas59]

$$\dot{\gamma}(\tau) = f(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau < \tau_0 \\ \frac{(\sqrt{\tau} - \sqrt{\tau_0})^2}{\mu_C} & \tau \geq \tau_0, \end{cases} \quad (2.2.10)$$

o inversamente,

$$\tau^{1/2} = \tau_0^{1/2} + (\mu_C \dot{\gamma})^{1/2}. \quad (2.2.11)$$

De manera equivalente, a través de la viscosidad aparente

$$\eta = \left[\left(\frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} \right)^{1/2} + \mu_C^{1/2} \right]^2.$$

Análogamente, por debajo del nivel de esfuerzo τ_0 , el material se mantiene como un sólido rígido, pero fluye viscosamente una vez que se ha superado este umbral. Es interesante notar que para valores altos de $\dot{\gamma}$ la viscosidad aparente converge asintóticamente a la constante μ_C , lo cual es una ventaja pues representa numerosas observaciones experimentales.

El chocolate, el yogur y especialmente la sangre se representan comúnmente con este modelo.

2.2.6. Fluido Casson Generalizado

Los modelos anteriores pueden considerarse como casos particulares de un modelo general introduciendo un nuevo parámetro k denominado el *factor de escala*. Éste fue propuesto por Hallbom y Klein [HK04] y se establece como

$$\dot{\gamma}(\tau) = f(\tau) \begin{cases} 0 & \tau < \tau_0 \\ \frac{(\tau^k - \tau_0^k)^{1/k}}{\mu_\infty} & \tau \geq \tau_0, \end{cases} \quad (2.2.12)$$

o inversamente,

$$\tau^k = \tau_0^k + (\mu_\infty \dot{\gamma})^k. \quad (2.2.13)$$

De manera equivalente, a través de la viscosidad aparente

$$\eta = \left[\left(\frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} \right)^k + \mu_\infty^k \right]^{1/k}.$$

El Cuadro 2.2.1 resume las propiedades importantes de cada uno de los modelos expuestos en esta sección. Si corresponde, se incluye el valor de k en comparación con el modelo generalizado recién definido.

Cuadro 2.2.1: Resumen de Modelos Reológicos

Modelo	k	Tensión de fluencia	Parámetros libres	Consistencia de unidades	<i>Shear thinning</i>
Newtoniano	1	no	1	sí	no
Ley de Potencia	-	no	2	no	sí ($n < 1$)
Bingham	1	sí	2	sí	sí
Herschel-Bulkley	-	sí	3	no	sí ($n < 1$)
Casson	1/2	sí	2	sí	sí
Casson Generalizado	k	sí	3	sí	sí

2.3. Elementos de Reometría

La *Reometría* se refiere al conjunto de técnicas experimentales utilizadas para determinar las propiedades del flujo de materiales [Anc05a]. Un *reómetro* es un dispositivo que puede ejercer una fuerza sobre un material y medir con alta precisión la respuesta de éste en el tiempo. Se expondrá a continuación en qué consiste el tipo de *Curva Reológica* que se utiliza en este Trabajo de Título y las propiedades que se infieren de ella. Finalmente, se presentarán los principios básicos del *Reómetro de Cilindros Coaxiales* utilizado en el presente caso y cómo los resultados que éste entrega son utilizados para extraer las propiedades reológicas de interés.

2.3.1. Curvas Reológicas

Una *curva reológica* o *reograma* es el diagrama que muestra la relación entre tasa y esfuerzo de corte. Para un fluido newtoniano corresponde a una recta que pasa por el origen, de acuerdo al modelo definido en (2.1.11), y cuya pendiente es la viscosidad μ . Un plástico Bingham, de acuerdo a (2.2.4), corresponde a una recta cuya pendiente corresponde a la viscosidad Bingham μ_B y su coeficiente de posición, a la tensión de fluencia τ_0 (ver Fig. 2.3.1).

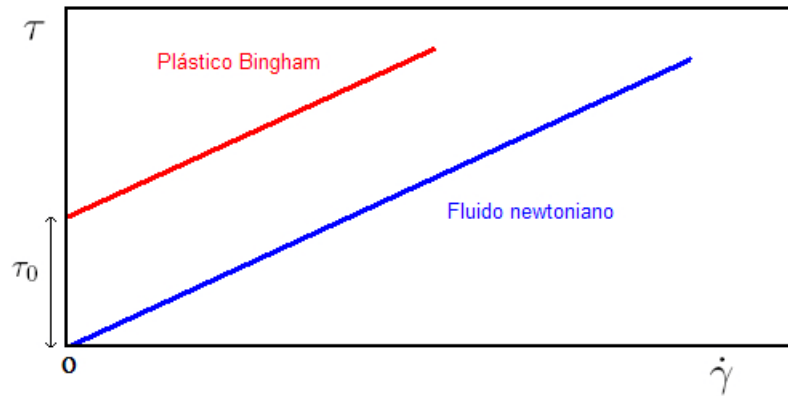


Figura 2.3.1: Reograma ideal de fluido newtoniano y Bingham

2.3.2. El Reómetro de Cilindros Coaxiales

Es un tipo de reómetro en el cual el fluido se ubica en el espacio anular ubicado entre dos cilindros concéntricos (ver Fig. 2.3.2). El dispositivo utilizado es conocido como modelo Searle, en el cual el cilindro exterior está fijo, mientras que el interno puede rotar con velocidad angular Ω ejerciendo un torque M . A partir de sucesivas mediciones del tipo (Ω_i, M_i) es posible deducir *a posteriori* la curva reológica del fluido en estudio. Cabe mencionar que, junto con estos datos, en general el *software* propio de los reómetros modernos calcula internamente las duplas $(\dot{\gamma}_i, \tau_i)$ y construye las curvas reológicas, sin embargo, suele no detallarse el procedimiento de cálculo, o bien, se utiliza la aproximación de fluido newtoniano que, como se verá más adelante, es un método deficiente para suspensiones concentradas.

Con respecto a la dinámica del reómetro se hacen las siguientes suposiciones [Oka60]:

- (i) el líquido es incompresible,
- (ii) el régimen no es turbulento,
- (iii) las líneas de flujo son círculos en planos horizontales perpendiculares al eje de rotación,

- (iv) el movimiento es estacionario,
- (v) no hay movimiento relativo entre las paredes del cilindro y el fluido inmediatamente adyacente, y
- (vi) el movimiento del fluido es el mismo en cada plano horizontal, esto es, el movimiento es bidimensional.

Las suposición (iii) corresponde a despreciar el efecto de fuerzas centrífugas que, tal como la suposición (ii), es aceptable hasta cierto valor de Ω .

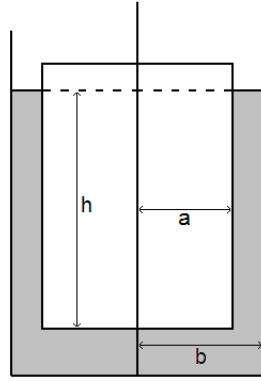


Figura 2.3.2: Reómetro de cilindros coaxiales

2.3.3. El Problema Inverso de Couette

Consideremos un reómetro de cilindros coaxiales con fluido hasta una altura h con respecto al cilindro interior (ver Fig. 2.3.2). Si denotamos por τ al esfuerzo de corte tangencial sobre la superficie cilíndrica a distancia axial r , el momento angular resultante total sobre esa superficie es $2\pi r^2 h \tau$. Denotemos los esfuerzos tangenciales sobre los cilindros interno y externo por τ_a y τ_b , respectivamente. Luego, por conservación de *momentum* angular se cumple que

$$M = 2\pi r^2 h \tau = 2\pi a^2 h \tau_a = 2\pi b^2 h \tau_b. \quad (2.3.1)$$

Por otro lado, si el cilindro interior gira con velocidad angular Ω y denotamos la velocidad angular de las partículas en el fluido a distancia axial r por $\omega(r)$, la tasa de corte está dada por

$$\dot{\gamma} = -r \frac{d\omega}{dr}. \quad (2.3.2)$$

Por la regla de la cadena y utilizando (2.3.1) en lo anterior, se deduce directamente que

$$\dot{\gamma} = f(\tau) = 2\tau \frac{d\omega}{d\tau}. \quad (2.3.3)$$

Integrando con condiciones de borde $\omega(a) = \Omega$ y $\omega(b) = 0$ se obtiene

$$\Omega(\tau_a) = \frac{1}{2} \int_{\tau_b}^{\tau_a} \frac{f(\tau)}{\tau} d\tau. \quad (2.3.4)$$

Por simplicidad de notación, cambiando el nombre de las variables y utilizando nuevamente (2.3.1) se deriva la expresión más conocida [KM51]

$$\Omega(\tau) = \frac{1}{2} \int_{\beta\tau}^{\tau} \frac{f(t)}{t} dt, \quad (2.3.5)$$

con $\beta = (a/b)^2 < 1$. Como lo que se busca es encontrar la curva reológica del fluido dada por $\dot{\gamma} = f(\tau)$, es necesario invertir esta relación integral para expresarla en función de los valores medidos experimentalmente para Ω y M . Este procedimiento matemático es el denominado *Problema Inverso de Couette*.

Se define el espacio $F = \{f \in \mathcal{C}_{[0,T]} : f(0) = 0\}$ para algún $T > 0$ y dotado de la norma infinito $\|\cdot\|_{\infty}$. La ecuación en (2.3.5) puede escribirse como $\Omega = Kf$, con $K : F \rightarrow F$ dado por

$$Kf(\tau) = \frac{1}{2} \int_{\beta\tau}^{\tau} \frac{f(t)}{t} dt. \quad (2.3.6)$$

Lema 2.3.1. *El operador K está bien definido.*

Demostración. $Kf(\tau)$ está claramente bien definido para todo $\tau \in (0, T]$, falta ver el caso $\tau \rightarrow 0$. Por el Teo. del Valor Medio para integrales (TVMI), se tiene que $\exists c_{\tau} \in (\beta\tau, \tau)$ tal que

$$\left| \int_{\beta\tau}^{\tau} \frac{f(t)}{t} dt \right| = \left| \frac{f(c_{\tau})}{c_{\tau}} \tau(1-\beta) \right| \leq |f(c_{\tau})| \frac{(1-\beta)}{\beta} \rightarrow 0 \quad \text{con } \tau \rightarrow 0,$$

lo que además prueba la continuidad en $\tau = 0$.

Sea ahora $\tau_n \rightarrow \tau$ con $\tau \neq 0$ y estimemos

$$\begin{aligned} 2|Kf(\tau_n) - Kf(\tau)| &= \left| \int_{\beta\tau_n}^{\tau_n} \frac{f(t)}{t} dt - \int_{\beta\tau}^{\tau} \frac{f(t)}{t} dt \right| = \left| \int_{\beta\tau_n}^{\beta\tau} \frac{f(t)}{t} dt + \int_{\tau}^{\tau_n} \frac{f(t)}{t} dt \right| \\ &= \left| \frac{f(c_1)}{c_1} \beta(\tau - \tau_n) + \frac{f(c_2)}{c_2} (\tau_n - \tau) \right| \\ &\leq |f(c_1)| \left| \frac{\tau}{\tau_n} - 1 \right| + |f(c_2)| \left| \frac{\tau_n}{\tau} - 1 \right| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Se usó nuevamente el TVMI para $c_1 \in [\beta\tau_n, \beta\tau]$ y $c_2 \in [\tau, \tau_n]$. Se concluye entonces que $Kf(\tau_n) \rightarrow Kf(\tau)$ cuando $\tau_n \rightarrow \tau$, lo que prueba la continuidad. \square

Lema 2.3.2. $K : F \rightarrow F$ es continuo.

Demostración. Sea $f \in F$.

$$\left| \int_{\beta\tau}^{\tau} \frac{f(t)}{t} dt \right| \leq \|f\|_{\infty} \left| \int_{\beta\tau}^{\tau} \frac{1}{t} dt \right| = \|f\|_{\infty} \log(\beta^{-1})$$

Luego, $\|Kf\|_{\infty} \leq \|f\|_{\infty} \log(\beta^{-1})$ y se concluye. \square

El Problema Inverso de Couette es una *Ecuación Integral de Fredholm de Primera Especie* cuya estructura general es de la forma

$$Kf(\tau) = \int_0^T \kappa(\tau, t) f(t) dt. \quad (2.3.7)$$

El lema a continuación es un resultado importante de análisis funcional obtenido para este tipo de operadores.

Lema 2.3.3. Si κ es continua, el operador de Fredholm $K : F \rightarrow F$ es compacto.

Demostración. Sea $U \subseteq F$ tal que $\|f\|_{\infty} \leq C$, $\forall f \in U$, para algún $C > 0$. Luego, se cumple que $|Kf(\tau)| \leq CT \max |\kappa(\tau, t)|$, $\forall \tau, t \in [0, T]$ y toda función f en U . Luego, $K(U)$ es un conjunto uniformemente acotado.

Como κ es una función definida en un compacto, es uniformemente continua y luego, para cualquier $\epsilon > 0$, existe $\delta > 0$ tal que

$$|\kappa(x, t) - \kappa(y, t)| < \frac{2\epsilon}{CT}$$

para todo x, y, t en $[0, T]$ tal que $|x - y| < \delta$. Luego, $|Kf(x) - Kf(y)| < \epsilon$ para toda f en U , lo que prueba que el conjunto $K(U)$ es equicontinuo y se concluye por el Teo. de Arzelà-Ascoli. \square

El *kernel* de integración para el Problema de Couette está dado por

$$\kappa(\tau, t) = \mathbb{1}_{[\beta\tau, \tau]}(t) \frac{1}{2t}, \quad (2.3.8)$$

donde $\mathbb{1}_{[\beta\tau, \tau]}$ representa la indicatriz del intervalo $[\beta\tau, \tau]$. Dado que κ es una función discontinua, no se puede aplicar directamente el lema precedente. Sin embargo, será posible obtener el mismo resultado definiendo la familia de funciones

$$\kappa_{\epsilon}(\tau, t) = v_{\epsilon}(\tau) \frac{1}{2t + \epsilon}, \quad (2.3.9)$$

donde v_{ϵ} aproxima suavemente a $\mathbb{1}_{[\beta\tau, \tau]}$ como se aprecia en la Fig. 2.3.3. Esta modificación en el *kernel* de integración repara el salto de discontinuidad propio de la función indicatriz y evita la divergencia del denominador para $t \rightarrow 0$. Este método de regularización en conjunto con los resultados anteriores permitirá probar el teorema a continuación.

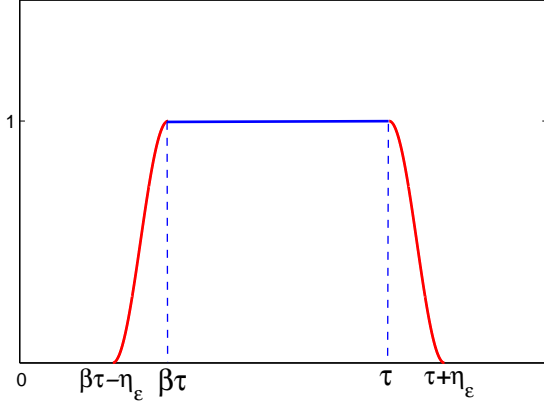


Figura 2.3.3: v_ϵ función regularizante de la indicatriz. Se elige de tal manera que se anula suavemente en un intervalo de tamaño η_ϵ . Esta distancia se hará converger a 0 como alguna potencia adecuada en ϵ para probar el Teorema de Compacidad.

Teorema 2.3.4. *El operador $K : F \rightarrow F$ del Problema Inverso de Couette es compacto.*

Demostración. Los operadores lineales K_ϵ son compactos por la continuidad de los kernel asociados κ_ϵ . Como el espacio F dotado de la norma infinito es de Banach, bastará probar la convergencia en norma de los operadores para demostrar la compacidad del límite K .

$$\begin{aligned}
 2 |K_\epsilon f(\tau) - K f(\tau)| &= \left| \int_0^M v_\epsilon(t) \frac{f(t)}{t + \epsilon} dt - \int_{\beta\tau}^\tau \frac{f(t)}{t} dt \right| \\
 &= \left| \int_{\beta\tau}^\tau f(t) \left(\frac{1}{t + \epsilon} - \frac{1}{t} \right) dt + \int_{\beta\tau - \eta_\epsilon}^{\beta\tau} v_\epsilon(t) \frac{f(t)}{t + \epsilon} dt + \right. \\
 &\quad \left. + \int_\tau^{\tau + \eta_\epsilon} v_\epsilon(t) \frac{f(t)}{t + \epsilon} dt \right| \\
 &\leq \|f\|_\infty \left[\log \left(\frac{t + \epsilon}{t} \right) \Big|_{\beta\tau}^\tau + |I_\epsilon| + |J_\epsilon| \right]
 \end{aligned}$$

Si $\tau \neq 0$, $\log \left(\frac{\beta\tau + \beta\epsilon}{\beta\tau + \epsilon} \right) \rightarrow 0$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Para el caso $\tau = 0$ se procede análogamente a la demostración del Lema 2.3.1 usando TVMI

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{\beta\tau}^\tau \frac{f(t)}{t} dt = 0, \quad \lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{\beta\tau}^\tau \frac{f(t)}{t + \epsilon} dt = 0$$

lo cual prueba que el primer término del lado derecho tiende a 0 para todo $\tau \in [0, T]$.

Por otro lado, se cumple que

$$|I_\epsilon| \leq \int_{\beta\tau - \eta_\epsilon}^{\beta\tau} \frac{1}{t + \epsilon} dt, \quad |J_\epsilon| \leq \int_\tau^{\tau + \eta_\epsilon} \frac{1}{t + \epsilon} dt$$

y tomando $\eta_\epsilon = \epsilon^2$ se obtiene por TVMI que $|I_\epsilon|, |J_\epsilon| \rightarrow 0$. Con esto, se concluye finalmente que $\|K_\epsilon - K\| \rightarrow 0$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$, lo que prueba el resultado. \square

$K : F \rightarrow F$ es compacto y F es un espacio de dimensión infinita, por lo tanto, de existir K^{-1} , sería un operador no acotado y luego el Problema Inverso de Couette es un problema *mal puesto*. En términos prácticos, esto significa que perturbaciones pequeñas en la medición de Ω provenientes, por ejemplo, de la imprecisión experimental, podrían generar fluctuaciones significativas de la solución f . Es en este punto donde radica el carácter inestable de la solución del problema.

En el capítulo siguiente del presente Trabajo de Título se describirán en profundidad algunos de los métodos que se han desarrollado para aproximar este problema inverso y que han tenido aplicaciones relevantes en ingeniería.

Capítulo 3

Aproximaciones para el Problema Inverso de Couette

3.1. La Aproximación Newtoniana

Es la aproximación más simple que se suele utilizar pues supone una relación lineal entre τ y $\dot{\gamma}$ como se describió en (2.2.2). Se cumple entonces que

$$f(\tau) = \frac{\tau}{\mu} \quad (3.1.1)$$

y reemplazando en (2.3.5) se obtiene la solución explícita para el Problema Inverso de Couette dada por ¹

$$\Omega = \frac{1}{4\pi h} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right) \frac{M}{\mu}, \quad (3.1.2)$$

o, equivalentemente, definiendo $s = b/a > 1$

$$f(\tau) = \Omega(\tau) \frac{2s^2}{s^2 - 1}. \quad (3.1.3)$$

A partir de la curva $\Omega(\tau)$, obtenida por interpolación de los datos del reómetro, es posible entonces construir el reograma de manera directa y estimar la viscosidad μ por medio de regresión lineal.

La simplicidad de esta aproximación ha permitido que su utilización sea de uso común en ingeniería y corresponde a la solución por defecto de muchos de los *softwares* asociados a los reómetros modernos. Sin embargo, como se verá más adelante, el uso indiscriminado de este modelo puede generar errores sustanciales en los resultados al ser aplicado a fluidos de comportamiento complejo.

¹Es posible obtener esta misma solución resolviendo el Sistema de Stokes estacionario de la Sección 2.1.4 con la condiciones de borde apropiadas y sin pasar necesariamente por el establecimiento del problema inverso. Este desarrollo puede consultarse en el Anexo A.

3.2. La Norma DIN

El *Deutsches Institut für Normung* (DIN) es el organismo nacional de normalización en Alemania. Elabora, en cooperación con la ciencia y la industria, estándares técnicos para la racionalización y aseguramiento de la calidad. En particular, la norma DIN 53019 [DIN80] describe los estándares para las mediciones reológicas de fluidos newtonianos y no newtonianos en reómetros de cilindros coaxiales.

En primer lugar, sugiere las relaciones entre las magnitudes propias del reómetro a utilizar. Propone, por ejemplo, que el cociente entre los radios de los cilindros cumpla $s = b/a < 1,1$, idealmente $s = 1,0847$. Además, establece el procedimiento para preparar el fluido a estudiar y la sistematización en el muestreo de datos.

El aporte más significativo de este artículo es la utilización de *valores representativos* para la tasa de corte y los esfuerzos. Se prueba [GL77] que las expresiones expuestas a continuación corresponden a aproximaciones fidedignas para curvas reológicas de fluidos regidos por variadas leyes de comportamiento.

- Tasa de corte representativa: la idea es calcular un $\dot{\gamma}$ que refleje un comportamiento promedio del sistema. En este caso, el mejor estimador corresponde a

$$\dot{\gamma}_{rep} = f_{rep} = \Omega \frac{s^2 + 1}{s^2 - 1}. \quad (3.2.1)$$

- Tensión de corte representativa: la aproximación corresponde a la media aritmética entre los esfuerzos de corte de los cilindros interno y externo

$$\tau_{rep} = \frac{\tau_a + \tau_b}{2} \quad (3.2.2)$$

o, equivalentemente, usando la tercera igualdad en (2.3.1)

$$\tau_{rep} = \frac{1 + s^2}{2s^2} \tau_a = \frac{1 + s^2}{2} \tau_b. \quad (3.2.3)$$

Finalmente, usando nuevamente (2.3.1) se tiene que

$$\tau_{rep} = \frac{1 + s^2}{2s^2} \frac{M}{2\pi h a^2 c_L}, \quad (3.2.4)$$

donde c_L es un factor de corrección geométrico. Típicamente se utiliza $c_L = 1, 10$.

De esta manera, a partir de una medición experimental de (Ω_i, M_i) utilizando las expresiones (3.2.1) y (3.2.4) se obtiene directamente la dupla asociada de valores representativos $(\dot{\gamma}_i, \tau_i)$ que será parte de la curva reológica final.

3.3. La Fórmula de Krieger y Elrod

Se presentará a continuación una deducción formal de la expresión asintótica conocida como *Primera Fórmula de Krieger y Elrod* [KE53]. Como lo que se busca es $f(\tau)$, la idea es derivar matemáticamente con respecto a τ la expresión (2.3.5) utilizando la regla de Leibniz, con lo que resulta

$$\frac{d\Omega}{d\tau} = \frac{1}{2\tau} [f(\tau) - f(s^{-2}\tau)] \quad \tau > 0, \quad (3.3.1)$$

donde, como antes, $s = b/a$. De esta manera, se obtiene una ecuación en diferencias que será resuelta de manera exacta. Definamos, para $\tau > 0$

$$h(\tau) = 2\tau \frac{d\Omega}{d\tau}, \quad (3.3.2)$$

que puede extenderse continuamente a $h(0) = 0$. Por (3.3.1) se tiene

$$\begin{aligned} h(\tau) &= [f(\tau) - f(s^{-2}\tau)] \\ h(s^{-2}\tau) &= [f(s^{-2}\tau) - f(s^{-4}\tau)] \\ h(s^{-4}\tau) &= [f(s^{-4}\tau) - f(s^{-6}\tau)] \\ &\vdots \end{aligned}$$

Sumando todas las ecuaciones, y dado que $s > 1$ y $f(0) = 0$ se encuentra que

$$f(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} h(s^{-2n}\tau). \quad (3.3.3)$$

La sumatoria puede ser evaluada utilizando la Fórmula de Euler-MacLaurin [JJ46], esto es, para una función g cualquiera suficientemente suave, se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^m g(n) &= \int_0^m g(x) dx + \frac{1}{2} [g(0) + g(m)] \\ &+ \sum_{k=1}^r \frac{B_{2k}}{(2k)!} [g^{(2k-1)}(m) - g^{(2k-1)}(0)] \\ &+ \sum_{i=0}^{m-1} \int_i^{i+1} P_{2r+1}(x-i) g^{(2r+1)}(x) dx, \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

donde r es un entero positivo arbitrario y B_i, P_i son los números y polinomios de Bernoulli, respectivamente. Haciendo $m \rightarrow \infty$ se usa la fórmula anterior con $g(n) = h(s^{-2n}\tau)$ y $r = 2$ a la expresión en (3.3.3) para obtener

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} h(s^{-2n}\tau) &= \int_0^{\infty} h(s^{-2x}\tau) dx + \frac{1}{2} [h(\tau) + h(0)] \\ &+ \frac{1}{12} \left[\frac{dh(s^{-2n}\tau)}{dn} \right]_{n=0}^{\infty} - \frac{1}{720} \left[\frac{d^3h(s^{-2n}\tau)}{dn^3} \right]_{n=0}^{\infty} + E_r, \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

donde E_r representa los términos de error.

La integral en (3.3.5) puede ser calculada haciendo el cambio de variable $y = s^{-2x\tau}$ y utilizando la definición en (3.3.2), con lo que resulta

$$\int_0^\infty h(s^{-2x\tau}) dx = -\frac{1}{2 \log s} \int_\tau^0 \frac{h(y)}{y} dy = \frac{\Omega}{\log s}. \quad (3.3.6)$$

Calculando el resto de los términos se concluye la *Primera Fórmula de Krieger y Elrod* (truncada a 2° orden en $\log s$)

$$f_{KE}(\tau) = \frac{\Omega}{\log s} \left[1 + \log s \cdot \frac{\tau}{\Omega} \frac{d\Omega}{d\tau} + \frac{(\log s)^2}{3\Omega} \left(\tau \frac{d\Omega}{d\tau} + \tau^2 \frac{d^2\Omega}{d\tau^2} \right) \right]. \quad (3.3.7)$$

Notar que es un desarrollo en potencias de $\log s$, por lo tanto mientras s sea más cercano a 1, menor será el error de truncatura y por ende será necesario calcular menos términos para lograr una misma precisión.

3.4. Las Fórmulas de Diferencias Finitas

Fueron desarrolladas por Hoog y Andersen [dHA05] utilizando propiedades de los polinomios de Bernoulli para estudiar la ecuación del Problema Inverso de Couette

$$\Omega(\tau) = \frac{1}{2} \int_{\beta\tau}^\tau \frac{f(t)}{t} dt.$$

Haciendo el cambio de variables $t = \exp z$ en la integral y definiendo la constante $\epsilon := -\log \beta = 2 \log s > 0$ y las funciones $g(x) := f(\exp x)$, $\omega(z) := 2\Omega(\exp z)$ resulta

$$\omega(z) = \int_{z-\epsilon}^z g(x) dx. \quad (3.4.1)$$

Se deducirán formalmente fórmulas tipo *Diferencias Finitas* a partir de la función generadora de los *Polinomios de Bernoulli* establecida por Euler

$$\frac{t \exp(xt)}{\exp(t) - 1} = \sum_{k \geq 0} B_k(x) \frac{t^k}{k!} \quad |t| \leq 2\pi, \quad (3.4.2)$$

donde $B_k(\cdot)$ denota el polinomio de Bernoulli de grado k . Definiendo los *Números de Bernoulli* como $B_k = B_k(0)$, es posible probar las relaciones

$$\begin{aligned} B_{2k+1} &= 0 & k &= 1, 2, \dots \\ B_k(1) &= (-1)^k B_k \\ B_k(1/2) &= -(1 - 2^{1-k}) B_k, \end{aligned}$$

las cuales permiten calcular indirectamente $B_k(1)$ y $B_k(1/2)$.

Por otro lado, utilizando el Teo. de Taylor para g y la serie de potencias para la función exponencial se tiene que

$$g(x + \epsilon) = \sum_{k \geq 0} \frac{\epsilon^k}{k!} g^{(k)}(x) = \left[\sum_{k \geq 0} \frac{\epsilon^k D^{(k)}}{k!} \right] g(x) = \exp(\epsilon D) g(x). \quad (3.4.3)$$

Por otro lado, dado que los operadores D y $\exp(-\epsilon \alpha D)$ conmutan, se tiene que

$$\begin{aligned} \epsilon \exp(-\epsilon \alpha D) &= \epsilon D \exp(-\epsilon \alpha D) (1 - \exp(-\epsilon D))^{-1} (1 - \exp(-\epsilon D)) D^{-1} \\ &= \epsilon D \exp(\epsilon(1 - \alpha)D) (\exp(\epsilon D) - 1)^{-1} (1 - \exp(-\epsilon D)) D^{-1} \\ &= \left[\sum_{k \geq 0} B_k(1 - \alpha) \frac{(\epsilon D)^k}{k!} \right] (1 - \exp(-\epsilon D)) D^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

Combinando (3.4.3) y (3.4.4) resulta

$$\begin{aligned} \epsilon g(x - \epsilon \alpha) &= [\epsilon \exp(-\epsilon \alpha D)] g(x) \\ &= \left[\sum_{k \geq 0} B_k(1 - \alpha) \frac{(\epsilon D)^k}{k!} \right] (1 - \exp(-\epsilon D)) D^{-1} g(x) \\ &= \sum_{k \geq 0} B_k(1 - \alpha) \frac{\epsilon^k D^k}{k!} \int_{x-\epsilon}^x g(t) dt \\ &= \omega(x) + \sum_{k \geq 1} B_k(1 - \alpha) \frac{\epsilon^k}{k!} \frac{d^k \omega(x)}{dx^k}. \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

Utilizando $\alpha = 1/2$ en la expresión anterior, se obtiene la fórmula

$$\epsilon g(x - \epsilon/2) = \omega(x) - \frac{\epsilon^2}{24} \frac{d^2 \omega(x)}{dx^2} - \sum_{k \geq 2} (1 - 2^{1-2k}) B_{2k} \frac{\epsilon^{2k}}{(2k)! k!} \frac{d^{2k} \omega(x)}{dx^{2k}}, \quad (3.4.6)$$

que tiene la ventaja de no involucrar la primera derivada de ω . Para aproximar la segunda derivada se puede utilizar el Teo. de Taylor para obtener la expresión

$$\omega(x + \epsilon) - 2\omega(x) + \omega(x - \epsilon) = \epsilon^2 \frac{d^2 \omega(x)}{dx^2} + 2 \sum_{k \geq 2} \frac{\epsilon^{2k}}{(2k)!} \frac{d^{2k} \omega(x)}{dx^{2k}}. \quad (3.4.7)$$

Reemplazando en (3.4.6) se deduce que

$$\begin{aligned} \epsilon g(x - \epsilon/2) &= -\frac{1}{24} [\omega(x + \epsilon) - 26\omega(x) + \omega(x - \epsilon)] \frac{3}{640} \epsilon^4 \frac{d^4 \omega(x)}{dx^4} \\ &\quad + \sum_{k \geq 3} \left[\frac{1}{12} - (1 - 2^{1-2k}) B_{2k} \right] \frac{\epsilon^{2k}}{(2k)!} \frac{d^{2k} \omega(x)}{dx^{2k}}. \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

Las fórmulas (3.4.6) y (3.4.8) bajo traslación en x , dan origen, respectivamente, a las dos aproximaciones

$$g(x) = \frac{1}{\epsilon} \omega \left(x + \frac{1}{2} \epsilon \right) + O(\epsilon)$$

$$g(x) = -\frac{1}{24\epsilon} \left[\omega \left(x + \frac{3}{2} \epsilon \right) - 26\omega \left(x + \frac{1}{2} \epsilon \right) + \omega \left(x - \frac{1}{2} \epsilon \right) \right] + O(\epsilon^3),$$

las cuales, en términos de las variables originales, corresponden a las Fórmulas de Diferencias Finitas

$$\dot{\gamma}(\tau) = \frac{\Omega(s \cdot \tau)}{\log s} + O(\log s) \quad (3.4.9)$$

$$\dot{\gamma}(\tau) = \frac{1}{24 \log s} \left[-\Omega(\tau \cdot s^3) + 26\Omega(\tau \cdot s) - \Omega(\tau \cdot s^{-1}) \right] + O(\log^3 s). \quad (3.4.10)$$

Cabe mencionar que estas expresiones pueden denominarse *Fórmulas de Punto Medio* ya que, por ejemplo, (3.4.9) puede interpretarse como la ecuación (3.4.1) aproximando la integral del lado derecho utilizando el valor en el punto medio $g(x - \epsilon/2)$ multiplicado por ϵ , el largo del intervalo de integración. Una representación análoga sirve para (3.4.10), pero con más precisión.

3.5. Regularización de Tikhonov

Inicialmente fue desarrollada por Y. Yeow *et al.* para el caso de viscosimetría capilar, pero sería ampliada más tarde al caso de flujo de Couette [YYT00]. Se presentará en esta sección una breve descripción del procedimiento.

Es conveniente introducir las variables adimensionales

$$\bar{\tau} = \frac{\tau - \tau_{min}}{\tau_{max} - \tau_{min}}, \quad \bar{\Omega} = \frac{\Omega}{\Omega_{max}}, \quad \bar{f} = \frac{f}{\Omega_{max}}, \quad (3.5.1)$$

donde *max* y *min* denotan los valores máximos y mínimos alcanzados por cada variable de tal manera que se cumple $0 \leq \bar{\tau}, \bar{\Omega} \leq 1$. Los valores obtenidos del reómetro se transforman a duplas de la forma $(\bar{\Omega}_i^E, \bar{\tau}_i)$, donde $i = 1 \dots N$ corresponde al índice de la muestra y el superíndice E denota los valores medidos experimentalmente.

El Problema Inverso de Couette (2.3.5) en estas variables se expresa como

$$\bar{\Omega}_i^C = \frac{1}{2} \int_{\beta \bar{\tau}_i}^{\bar{\tau}_i} \frac{\bar{f}(\bar{\tau})}{\bar{\tau} + \tau^*} d\bar{\tau}, \quad (3.5.2)$$

donde $\tau^* = \tau_{min} / (\tau_{max} - \tau_{min})$ y el superíndice C denota valor calculado por este procedimiento. A continuación, se discretizan los valores de la variable independiente en el

conjunto $\bar{\tau}_j$, con $j = 1 \dots J$ el índice de la partición, y se establece un tamaño de paso $\Delta = 1/(J - 1)$.

Con esto, se discretiza la integral en (3.5.2) resultando

$$\bar{\Omega}_i^C = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \frac{\alpha_{ij} \Delta}{\bar{\tau}_j + \tau^*} \bar{f}_j \quad i = 1 \dots N, \quad (3.5.3)$$

donde los coeficientes α_{ij} están determinados por el esquema de integración numérica que se escoja, ya sea la Regla del Trapecio, de Simpson, o alguna otra.

El objetivo de la Regularización de Tikhonov es reducir la *desviación fraccionaria*, definida como

$$\begin{aligned} \delta_i &= \frac{1}{\bar{\Omega}_i^E} (\bar{\Omega}_i^E - \bar{\Omega}_i^C) \\ &= \frac{1}{\bar{\Omega}_i^E} \left(\bar{\Omega}_i^E - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \frac{\alpha_{ij} \Delta}{\bar{\tau}_j + \tau^*} \bar{f}_j \right) \\ &= 1 - \sum_{j=1}^J A_{ij} \bar{f}_j, \end{aligned}$$

o matricialmente, $\boldsymbol{\delta} = \mathbb{1} - A\bar{\mathbf{f}}$, donde los coeficientes de la matriz A están dados por

$$A_{ij} = \frac{\alpha_{ij} \Delta}{2(\bar{\tau}_j + \tau^*)} \quad i = 1 \dots N, \quad j = 1 \dots J. \quad (3.5.4)$$

Una idea es buscar $\bar{\mathbf{f}}$ que minimice $\boldsymbol{\delta}^T \boldsymbol{\delta}$, sin embargo, esto genera una solución poco regular. Para asegurar la suavidad de $\bar{\mathbf{f}}(\bar{\tau})$, se pueden añadir condiciones sobre las derivadas de la solución. En el presente caso se escogió minimizar la suma de los cuadrados de la segunda derivada de $\bar{\mathbf{f}}$ en los puntos de discretización, es decir, la expresión $(\boldsymbol{\beta}\bar{\mathbf{f}})^T (\boldsymbol{\beta}\bar{\mathbf{f}})$, donde $\boldsymbol{\beta}$ es la matriz tridiagonal de coeficientes de aproximación por diferencias finitas de la segunda derivada, dada por

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

En la Regularización de Tikhonov se busca minimizar una combinación lineal de ambas expresiones, en este caso $Z = \boldsymbol{\delta}^T \boldsymbol{\delta} + \lambda \bar{\mathbf{f}}^T \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \bar{\mathbf{f}}$, donde λ es un parámetro de peso ajustable que controla el equilibrio entre suavidad y calidad de ajuste. El valor apropiado de λ depende de factores como el nivel de ruido, el número de puntos experimentales, etc.

La minimización de Z requiere que $\frac{\partial Z}{\partial f_j} = 0$, $j = 1 \dots J$, lo cual genera un sistema lineal de ecuaciones que se satisface con la solución

$$\bar{\mathbf{f}} = (A^T A + \lambda \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta})^{-1} A^T \mathbf{1}. \quad (3.5.5)$$

Esta expresión corresponde a la solución explícita de la Regularización de Tikhonov. La dificultad en la implementación de este método radica en que hay riesgo de que la matriz $A^T A + \lambda \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$ resulte mal condicionada y, por lo tanto, la inversión matricial involucre demasiado error numérico. Esto es otra manifestación de la naturaleza compleja del Problema Inverso de Couette.

Capítulo 4

Implementación y Análisis de Métodos de Aproximación

4.1. Implementación numérica

Los distintos métodos expuestos en el Cap. 3 se programaron en *Matlab* 7.1 a fin de estudiar su aplicabilidad, indagar las dificultades de implementación, comparar sus resultados en modelos conocidos y, finalmente, ser empleados en el análisis de información experimental proveniente de relaves mineros. En esta sección se describirá a grandes rasgos el procedimiento de preparación de los datos mediante la reducción de ruido y, posteriormente, se hará una descripción somera de la implementación de cada método.

Un aspecto que es importante de considerar es que es necesario que los datos (Ω_i, τ_i) sean compatibles con la existencia de una función aproximante. Es común en pruebas experimentales de reómetros observar comportamientos como el de la Fig. 4.1.1(a) que, a pesar de tener sentido físico, hacen imposible la existencia de una función de interpolación y por ende impiden la aplicación de los métodos antes descritos. Todos suponen la existencia *a priori* de una función $\Omega(\tau)$ y utilizando esta relación y explotando diversas técnicas matemáticas se obtiene la metodología de cálculo.

Para superar esta dificultad es necesario escoger puntos de la curva que puedan ser efectivamente aproximados por una función (datos en color rojo en la Fig. 4.1.1(a)). La información contenida en los puntos que no serán utilizados (en color azul) podría ser importante de considerar tanto en la teoría como para aplicaciones prácticas en ingeniería; esta región será tratada conceptualmente en el Cap. 5 como motivación para la proposición de una ley constitutiva original.

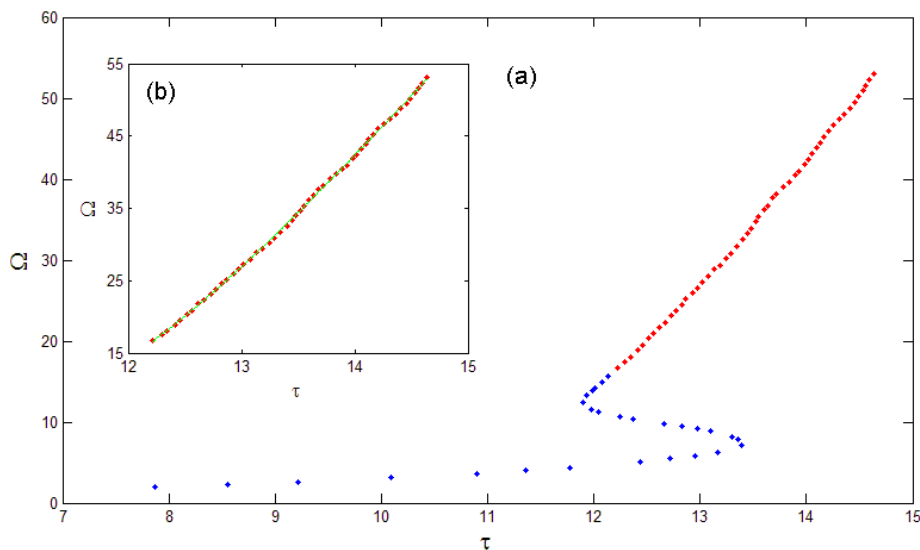


Figura 4.1.1: (a) Extracto de datos experimentales (Ω_i, τ_i) . Rojo: puntos que serán utilizados para construir el reograma. Azul: puntos que son descartados. (b) Verde: aproximación polinomial para datos escogidos.

4.1.1. Suavización y reducción de ruido

Como se mencionó en el Cap. 2, el Problema Inverso de Couette se considera *mal puesto* en el sentido de la estabilidad. Esto quiere decir que imprecisiones en los datos asociadas a la medición experimental o a dificultades tecnológicas pueden generar importantes perturbaciones en la solución final. Es necesario aplicar entonces, previo al análisis reométrico, alguna técnica de *suavización* de la información. Más precisamente, se busca remover de los datos la variabilidad que no tiene causa asignable con el objetivo de hacer más aparentes las propiedades sistemáticas del material en estudio.

Concretamente, el escenario es el siguiente: existen observaciones en duplas (Ω_i, τ_i) que se suponen siguiendo un modelo de la forma $\Omega_i = R(\tau_i) + \epsilon_i$, $i = 1 \dots N$, donde R es una función de regresión desconocida y ϵ_i son variables aleatorias representando términos de error. El objetivo es introducir una técnica de suavización *no paramétrica*, esto es, sin conocer un modelo *a priori* para R , con el propósito de estimar la tendencia general de los datos antes de la construcción del reograma.

Una de las técnicas simples de estimación no paramétrica se fundamenta en el promedio local [Har97]. Suponiendo cierta continuidad en los datos, los puntos τ_i próximos a cierto valor fijo τ deberían originar valores cercanos para los correspondientes $\Omega(\tau_i)$, sugiriendo que el promedio en una ventana de valores alrededor de τ puede ser un buen estimador para ese punto. La técnica más usada dentro de este marco es el *método de los promedios móviles*. Una estrategia más sofisticada en este contexto es la denominada *estimación con kernel* que, a grandes rasgos, corresponde a hacer un promedio con una función peso. Típicamente, los pesos más grandes son asignados a los valores de τ_i más cercanos al punto de interés.

El procedimiento seguido en el presente caso comienza reescalando los valores de τ_i al intervalo $[0, 1]$ mediante una transformación como en (3.5.1). Luego, se aplicó un método ampliamente utilizado basado en el estimador de Gasser-Müller [Gas79], esto es,

$$\hat{r}_h(\tau) = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N \Omega_i \int_{s_{i-1}}^{s_i} G\left(\frac{\tau - u}{h}\right) du, \quad (4.1.1)$$

donde $s_0 = \tau_0 = 0$, $s_i = (\tau_i + \tau_{i+1})/2$, $i = 1, \dots, N - 1$, $s_N = \tau_N = 1$, h es el ancho de banda y G es el kernel gaussiano dado por

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

El estimador de Gasser-Müller puede también ser escrito como

$$\hat{r}_h(\tau) = \frac{1}{h} \int_0^1 \Omega_n(u) G\left(\frac{\tau - u}{h}\right) du, \quad (4.1.2)$$

donde $\Omega_n(\cdot)$ es la función constante por pedazos $\Omega_n(u) = \sum_{i=1}^N \Omega_i \mathbb{1}_{[s_{i-1}, s_i)}(u)$. En otras palabras, este método corresponde a la convolución de las funciones $\Omega_n(\cdot)$ y $G(\cdot/h)/h$.

En la Fig. 4.1.2 se aprecia cómo el estimador de Gasser-Müller (puntos en rojo) suaviza los datos experimentales (en azul). Las discontinuidades de este tipo son errores experimentales comunes en reología de suspensiones.

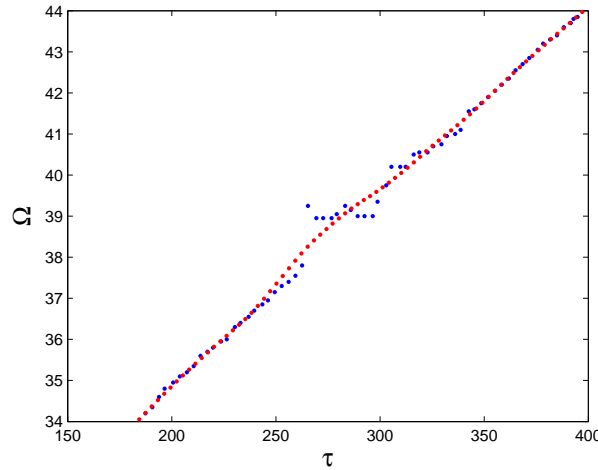


Figura 4.1.2: Azul: puntos experimentales (Ω_i, τ_i) . Rojo: datos corregidos por medio del estimador de Gasser-Müller, $h=0,05$.

4.1.2. Programación de los métodos

Las técnicas de aproximación implementadas tienen características individuales que se describirán separadamente a continuación.

- Aproximación Newtoniana

Para cada punto Ω_i se calcula el valor correspondiente de $\dot{\gamma}_i = f(\tau_i)$ por medio de la expresión en (3.1.3). Con ello se obtienen directamente las duplas $(\dot{\gamma}_i, \tau_i)$ que conforman el reograma definitivo.

- Norma DIN

En este caso, se reescalan los datos de acuerdo a las expresiones en (3.2.1) y (3.2.4). Con ello, cada dupla (Ω_i, τ_i) da origen a un punto de valores representativos $(\dot{\gamma}_i, \tau_i)$. Como se verá, esto genera un desplazamiento de la curva con respecto a los otros métodos.

- Fórmula de Krieger y Elrod

A diferencia de las otras expresiones, este método requiere el cálculo de dos derivadas de la función aproximante $\Omega(\tau)$. En la práctica, la derivación numérica presenta importantes dificultades que deben ser consideradas. Primero, se debe descartar construir la curva de aproximación a través de funciones interpolantes (pasando por todos los puntos) dado que esto fuerza a las funciones a realizar considerables variaciones en las derivadas y que, sobre todo en este caso, afectarán en gran medida el resultado. Por otro lado, como *a priori* no se conoce una ley de comportamiento general que aproxime los datos, no es posible ajustar los puntos a un modelo paramétrico simple.

Bajo estas condiciones, se decidió utilizar una función polinómica de grado adecuado que se ajusta a los datos en el sentido de los mínimos cuadrados. Como se aprecia en la Fig. 4.1.1(b) este tipo de curvas tiene la ventaja de representar correctamente la tendencia general de los datos, ignorar pequeñas fluctuaciones entre los puntos y, por ende, mantener las derivadas controladas. El proceso de derivación resulta sencillo dado que los coeficientes del polinomio aproximante son conocidos. Con todos estos cálculos previos se procede finalmente a reemplazar los datos en la expresión (3.3.7) para cada punto τ_i .

- Las Fórmulas de Diferencias Finitas

En principio este método es un cálculo directo a partir de los puntos dados, sin embargo también presenta dificultades. Como se aprecia en las expresiones (3.4.9) y (3.4.10), es necesario conocer el valor de Ω_i correspondiente al punto τ_i reescalado en alguna potencia de s , información que no siempre es posible extraer de los datos reológicos. Este requerimiento podría sugerir en qué valores exactos de τ realizar las mediciones experimentales, sin embargo este proceso es tremendamente difícil de controlar con tal precisión, incluso en reómetros modernos.

La mejor solución entonces es nuevamente utilizar el ajuste de mínimos cuadrados para los puntos (Ω_i, τ_i) por un polinomio de grado adecuado y luego, evaluar la función resultante donde corresponde.

Se eligió trabajar con la segunda fórmula de diferencias finitas pues consistentemente arrojó resultados más precisos y no involucra más complejidad ni mayor tiempo de cálculo.

- Regularización de Tikhonov

Para la discretización de la integral del Problema Inverso se utilizó en (3.5.3) la Regla de Simpson dada por los coeficientes $\alpha_{i1} = \alpha_{iN} = 1/3$, $\alpha_{ij} = 4/3$ si j es par y $\alpha_{ij} = 2/3$ si j es impar, para todo $i = 1 \dots N$. La discretización se realizó en $J = 2000$ puntos.

El parámetro λ fue variado para cada reograma construido, en general se trabajó con valores fluctuando entre $\lambda = 1e-6$ y $1e-10$, que se buscaron con tal de reducir lo más posible el condicionamiento de la matriz a invertir.

4.2. Aplicación a modelos teóricos

Se decidió comparar el desempeño de los métodos de aproximación utilizando ecuaciones constitutivas conocidas con el objetivo de poder comparar cada solución aproximada con el modelo exacto. Esto permitirá comprender mejor los resultados obtenidos cuando los métodos se apliquen a información experimental de relaves mineros de comportamiento reológico desconocido.

El procedimiento es el siguiente: primero, se escoge alguno de los modelos para $f(\tau)$ descritos en la Sec. 2.2. A continuación, se resuelve explícitamente la integral en 2.3.5 para obtener $\Omega(\tau)$. Luego, se elige un mallado de valores τ_i , y finalmente se construye la información experimental ficticia de pares (Ω_i, τ_i) a la que puede añadirse ruido con alguna distribución de probabilidad. A estos datos se les aplica cada uno de los métodos expuestos para encontrar una aproximación $f_{\text{aprox}}(\tau)$, que luego se contrasta en algún sentido con la expresión exacta del modelo elegido inicialmente.

4.2.1. Modelo de Bingham

Constituye el más simple de los modelos que considera el fenómeno de tensión de fluencia. Se utiliza la expresión en (2.2.4) previa adimensionalización, esto es, se definen las variables auxiliares

$$\bar{\tau}_B = 2\mu_B\Omega_{\max}, \quad M_B = \frac{\tau_0}{\bar{\tau}_B}, \quad \tau^* = \frac{\tau}{\bar{\tau}_B}, \quad \Omega^* = \frac{\Omega}{\Omega_{\max}} \quad (4.2.1)$$

donde Ω_{\max} representa el valor máximo alcanzado por Ω . De esta manera, Ω^* está normalizada y la ecuación constitutiva tiene sólo un parámetro libre M_B . Esto permite estudiar el comportamiento de los distintos métodos de aproximación explorando un rango acotado de valores de M_B que cubra gran parte de las situaciones reales.

El modelo de Bingham en la integral (2.3.5) da como resultado

$$\Omega^*(\tau^*) = \begin{cases} 0 & \tau^* < M_B \\ \tau^* - M_B (1 + \log(\tau^*/M_B)) & M_B \leq \tau^* \leq s^2 M_B \\ \tau^*(1 - 1/s^2) - 2M_B \log s & \tau^* > s^2 M_B, \end{cases}$$

donde $s = b/a$ fue escogido como $s = 1,1415$. Con esta expresión se generaron puntos (Ω_i, τ_i) para distintos valores de M_B y se añadió ruido con distribución $\mathcal{N}(0; 0,01^2)$ para dar variabilidad a los datos. Luego, se resolvió numéricamente el problema inverso con cada método de aproximación y el error relativo asociado a cada uno fue calculado como

$$e(\tau) = \frac{|\hat{\gamma}_{\text{aprox}}(\tau) - \hat{\gamma}_B(\tau)|}{\hat{\gamma}_B(\tau)}, \quad (4.2.2)$$

donde $\hat{\gamma}_B$ representa el modelo de Bingham exacto. El resultado gráfico de los métodos aplicados y el error relativo asociado para distintos valores de M_B puede consultarse en las Figs. 4.2.1 a 4.2.4.

4.2.2. Modelo de Casson

Este modelo es ampliamente utilizado en la práctica y, como se verá más adelante, se ajusta bien a la suspensiones de más alta concentración. Se utiliza la expresión (2.2.10) previa normalización usando las variables auxiliares $\bar{\tau}_C, M_C, \tau^*, \Omega^*$ definidas como en (4.2.1).

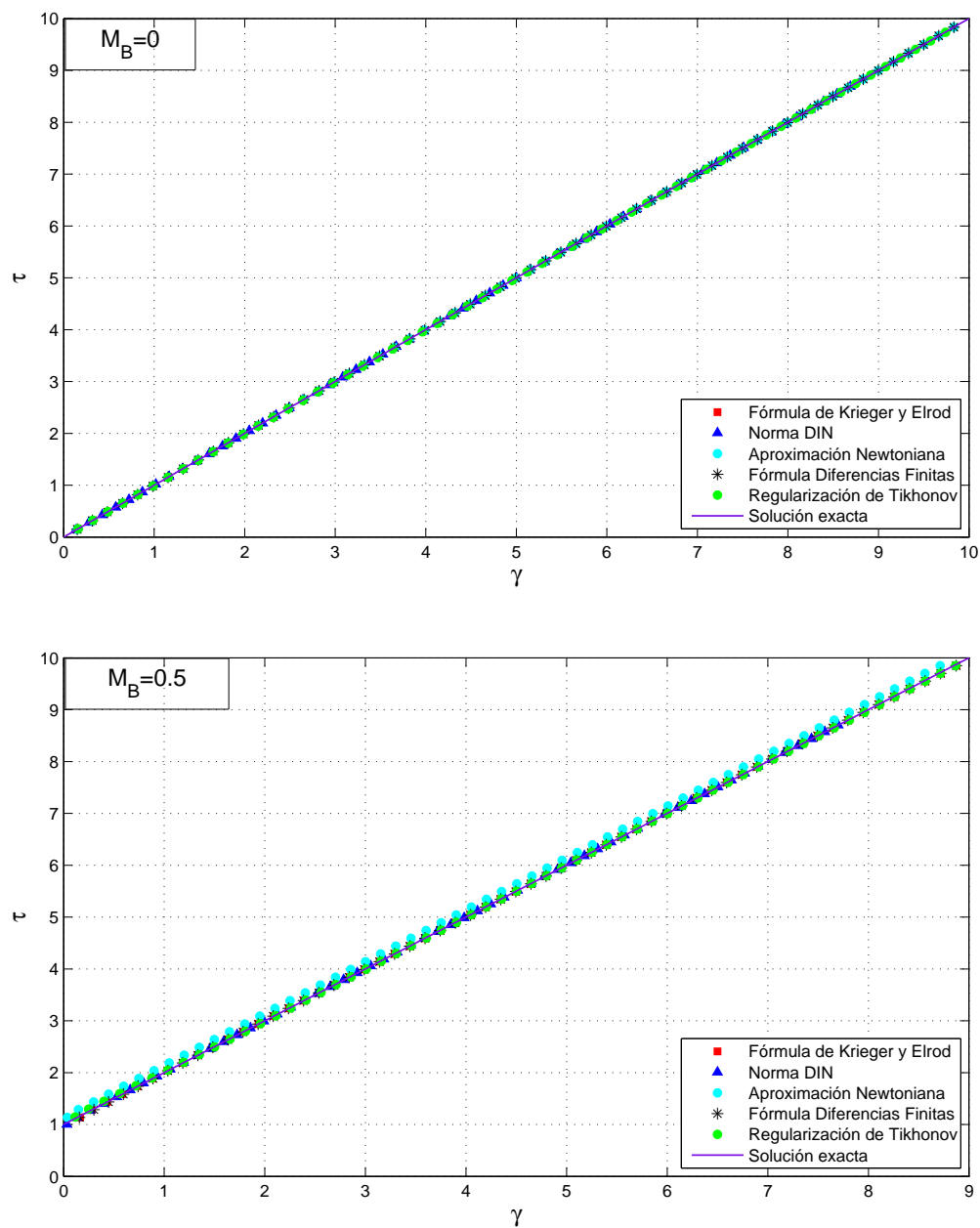
El modelo de Casson en la integral (2.3.5) da como resultado

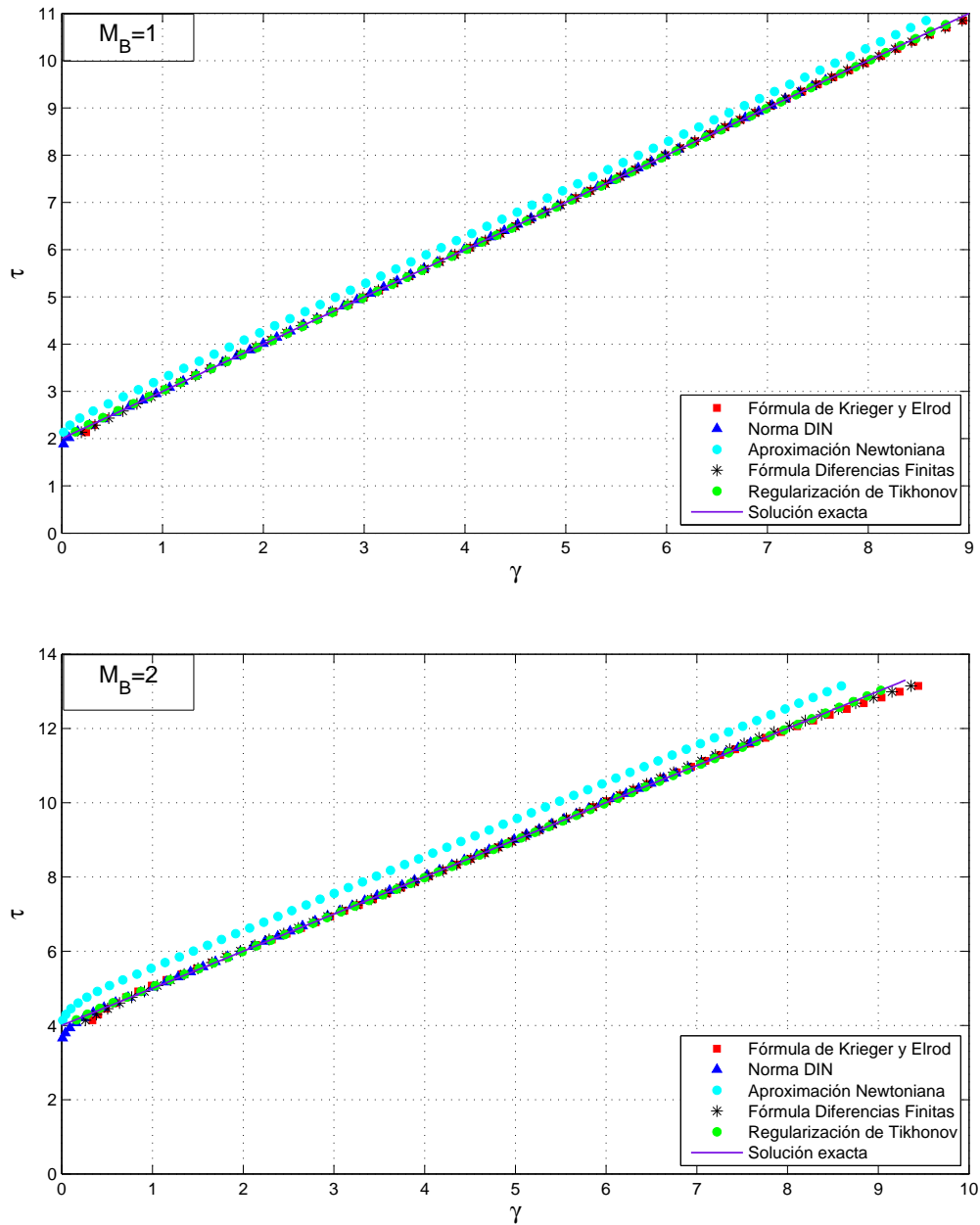
$$\Omega^*(\tau^*) = \begin{cases} 0 & \tau^* < M_C \\ \tau^* + 3M_C - 4\sqrt{M_C\tau^*} + M_C \log(\tau^*/M_C) & M_C \leq \tau^* \leq s^2 M_C \\ \tau^*(1 - 1/s^2) - 4\sqrt{M_C\tau^*}(1 - 1/s) + 2M_C \log s & \tau^* > s^2 M_C, \end{cases}$$

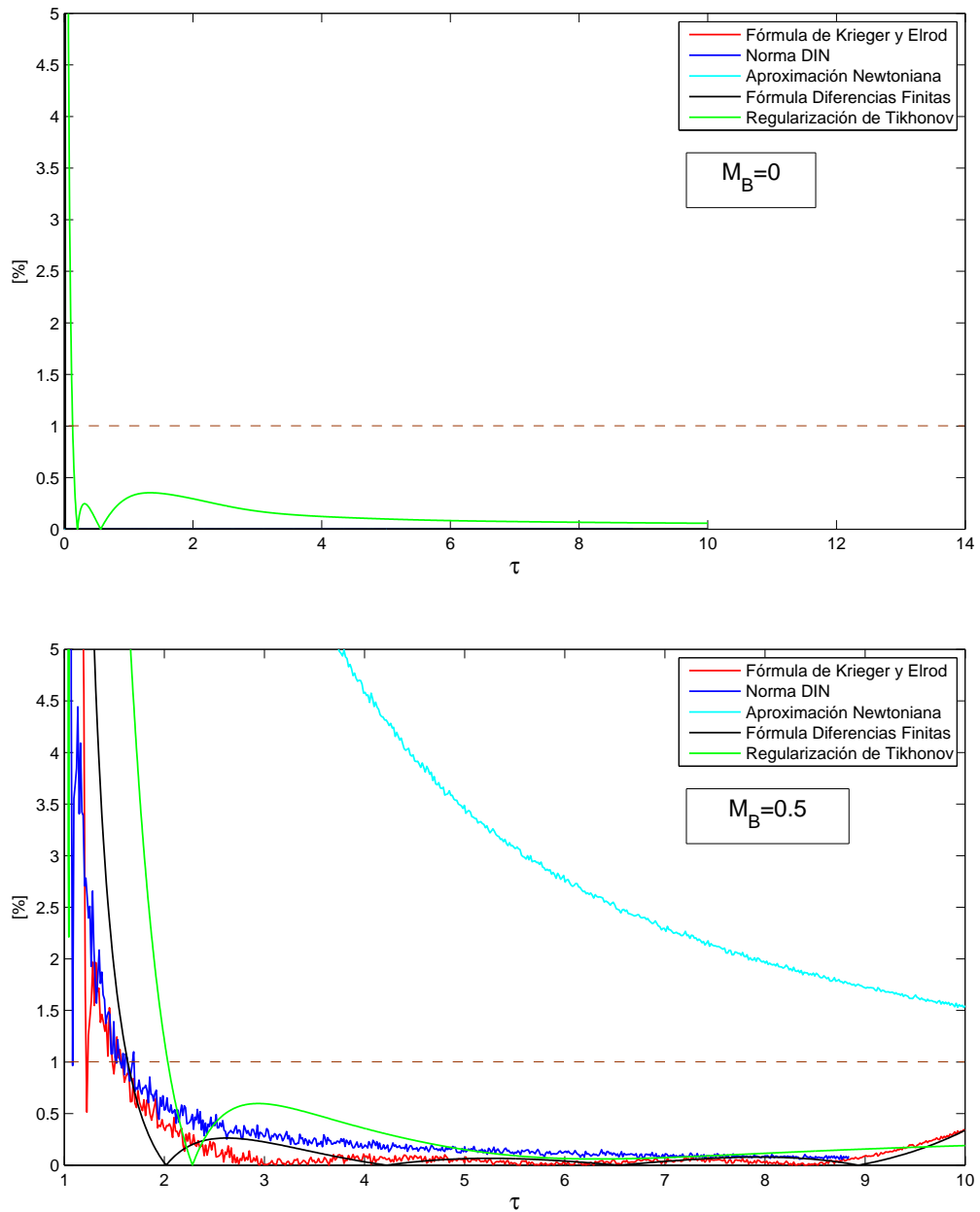
donde $s = b/a$ fue escogido como $s = 1,1415$. Con esta expresión se generaron puntos (Ω_i, τ_i) para distintos valores de M_C y se añadió ruido con distribución $\mathcal{N}(0; 0,01^2)$ para dar variabilidad a los datos. Luego, se resolvió numéricamente el problema inverso con cada método de aproximación y el error relativo asociado a cada uno fue calculado como

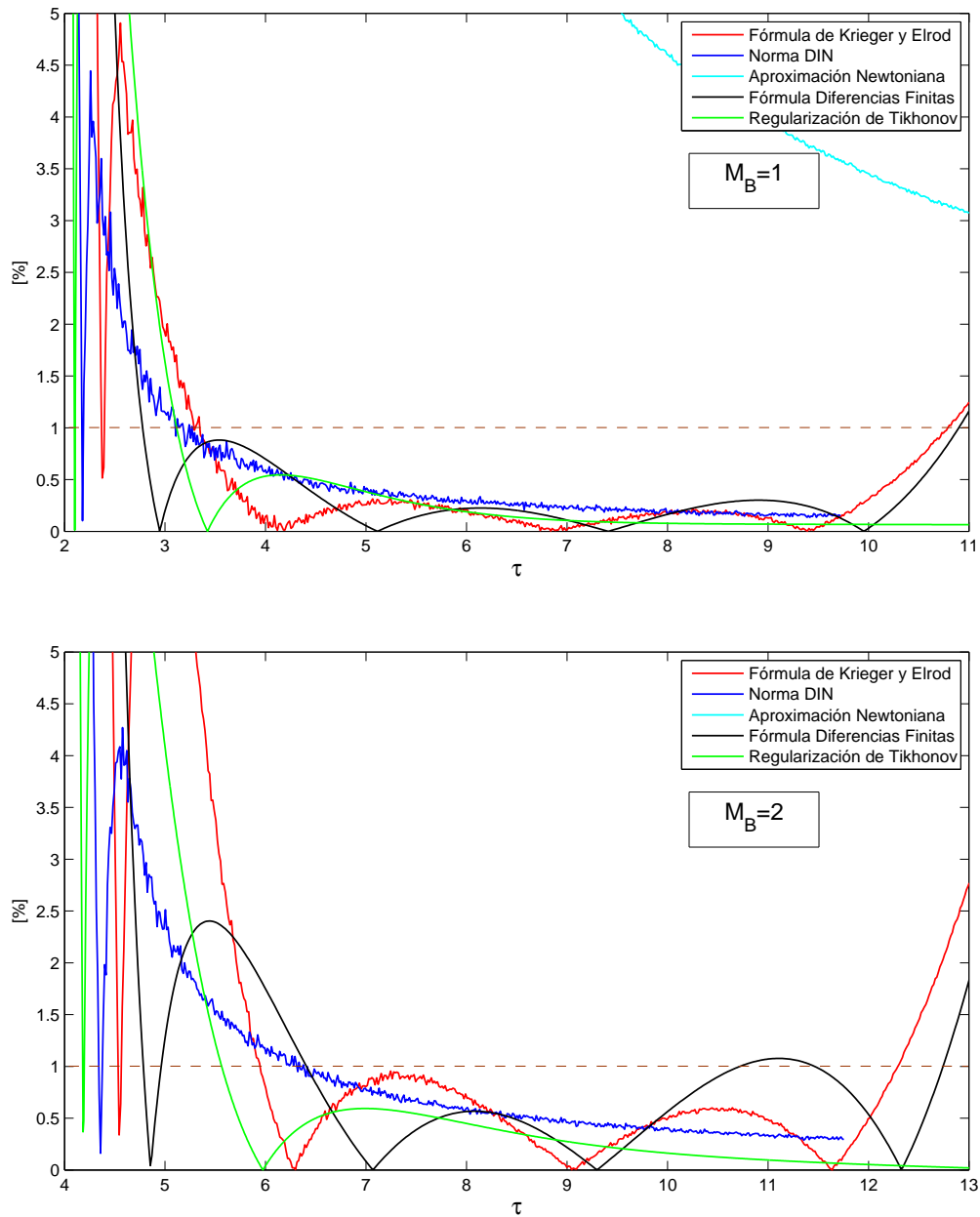
$$e(\tau) = \frac{|\hat{\gamma}_{\text{aprox}}(\tau) - \hat{\gamma}_C(\tau)|}{\hat{\gamma}_C(\tau)}, \quad (4.2.3)$$

donde $\hat{\gamma}_C$ representa el modelo de Casson exacto. El resultado gráfico de los métodos aplicados y el error relativo asociado para distintos valores de M_C puede consultarse en las Figs. 4.2.5 a 4.2.8.

Figura 4.2.1: Modelo de Bingham: reograma distintos métodos. Arriba: $M_B = 0$. Abajo: $M_B = 0, 5$.

Figura 4.2.2: Modelo de Bingham: reograma distintos métodos. Arriba: $M_B = 1$. Abajo: $M_B = 2$.

Figura 4.2.3: Modelo de Bingham: error relativo distintos métodos. Arriba: $M_B = 0$. Abajo: $M_B = 0,5$.

Figura 4.2.4: Modelo de Bingham: error relativo distintos m6todos. Arriba: $M_B = 1$. Abajo $M_B = 2$.

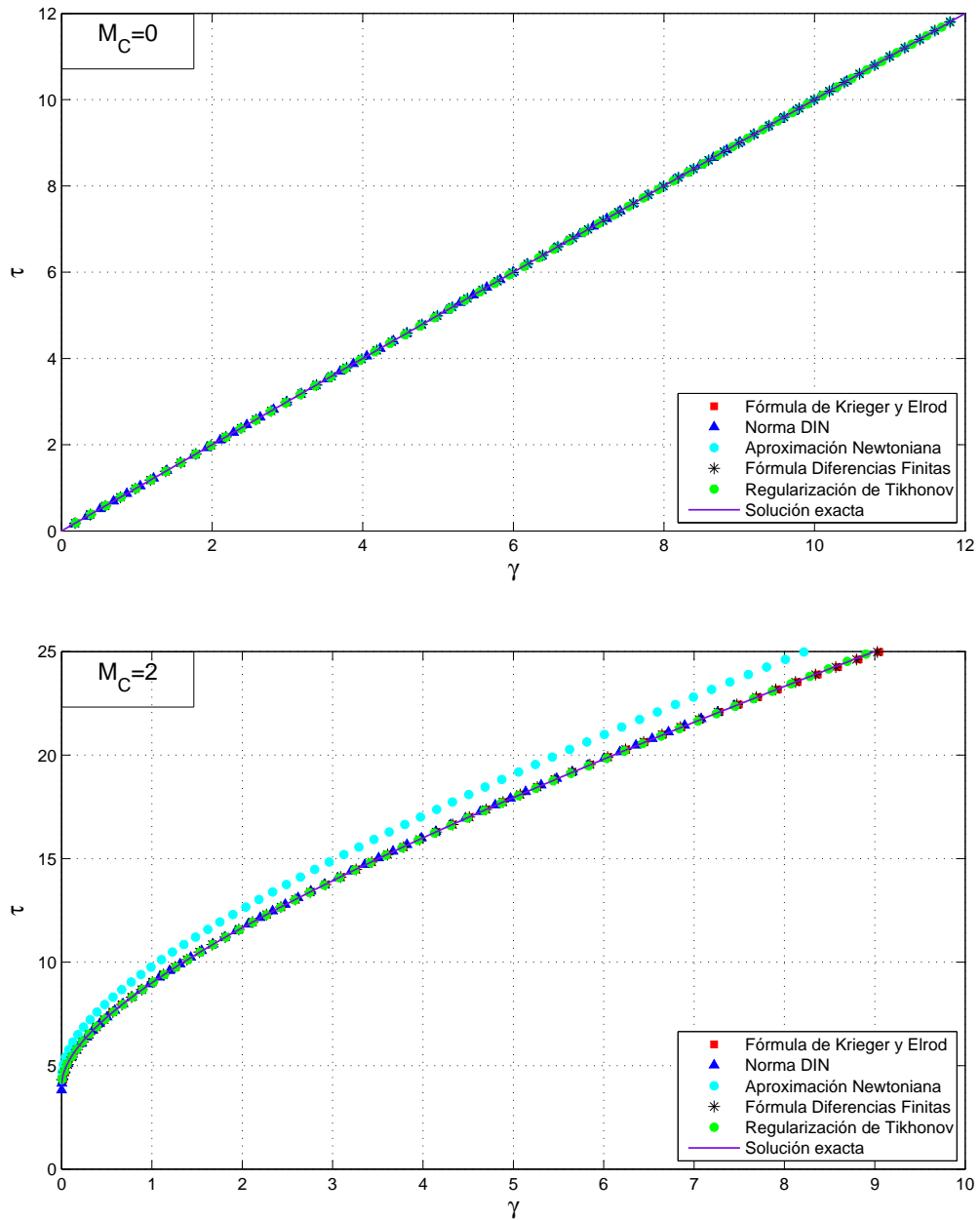
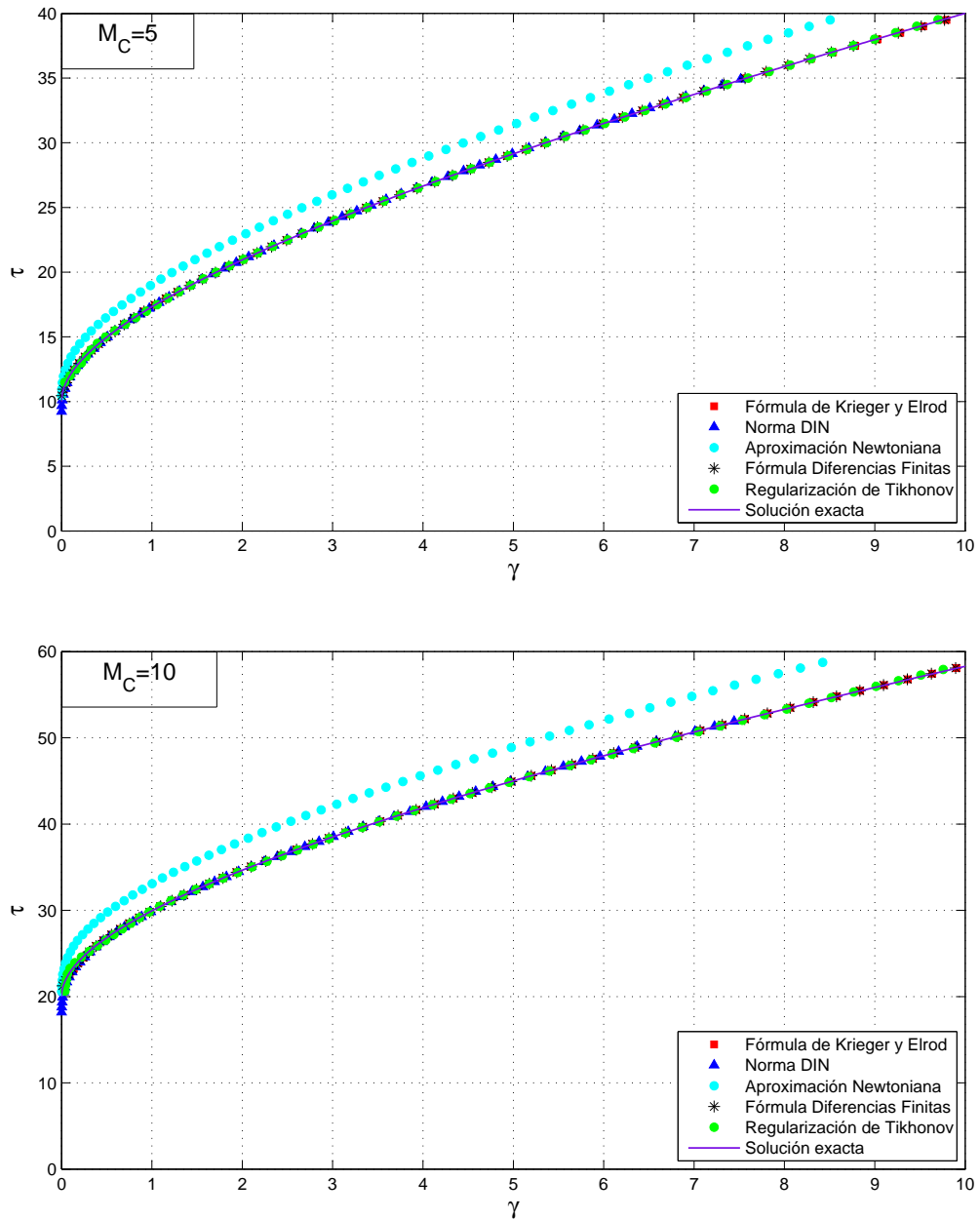
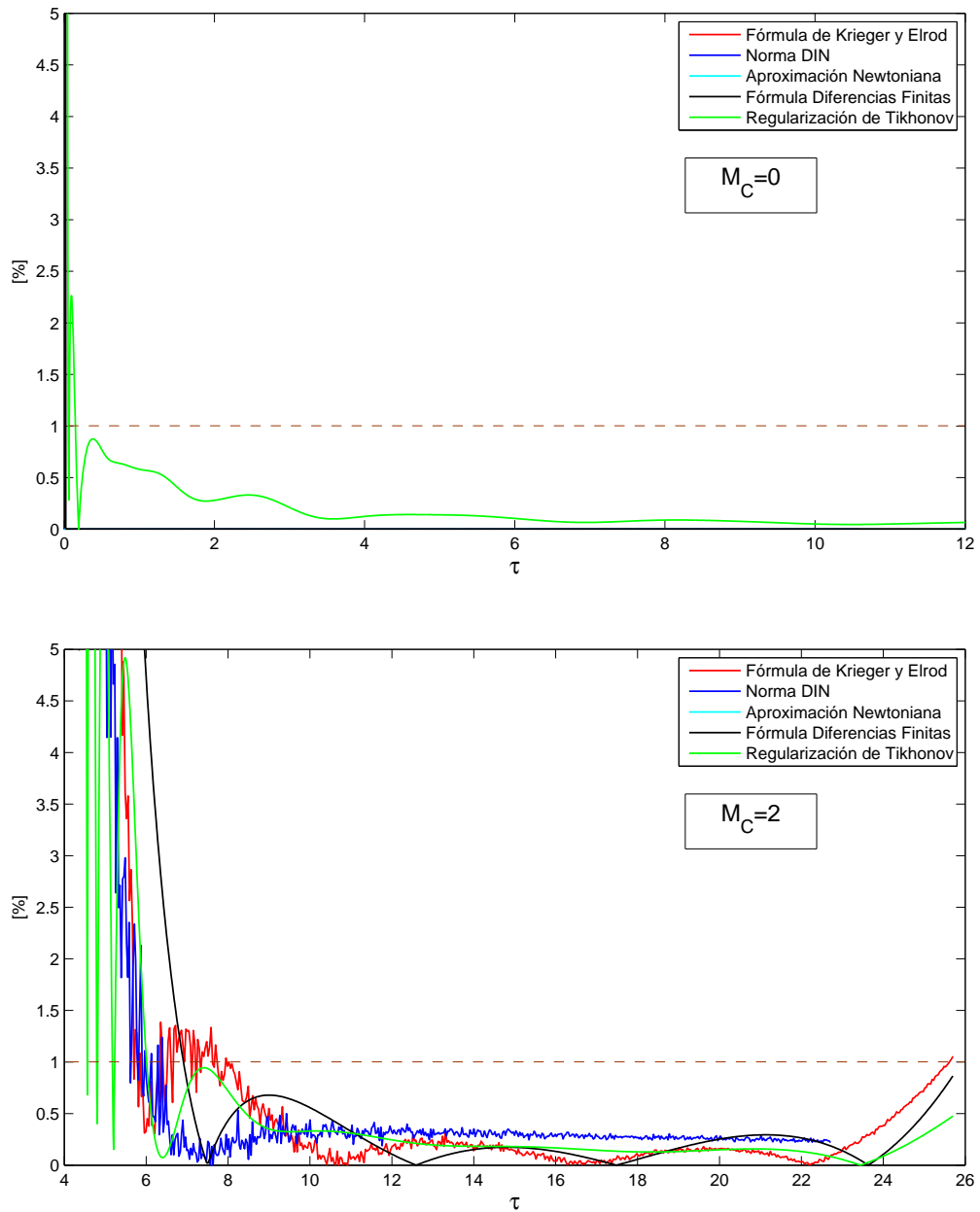
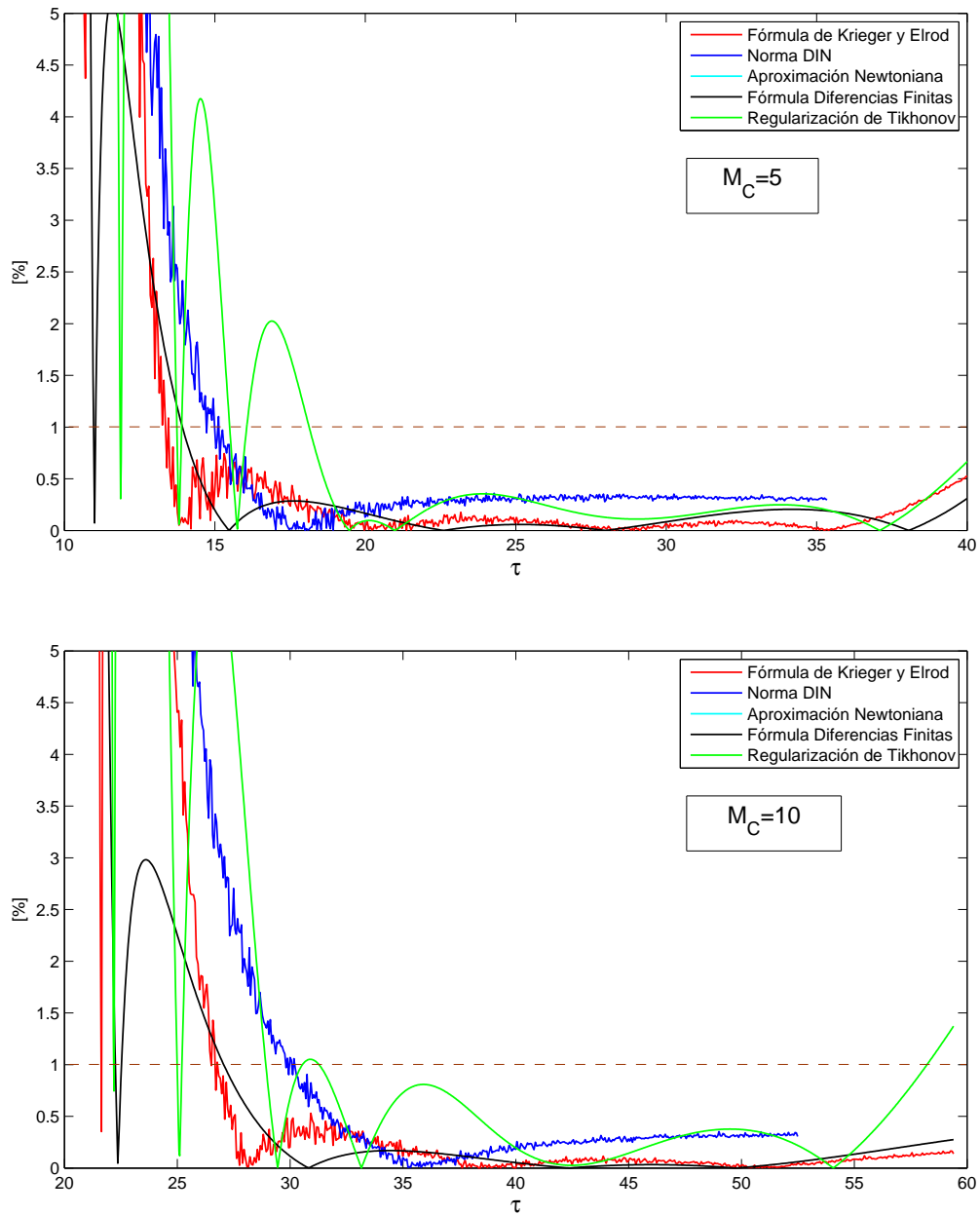


Figura 4.2.5: Modelo de Casson: reograma distintos métodos. Arriba: $M_C = 0$. Abajo: $M_C = 2$.

Figura 4.2.6: Modelo de Casson: reograma distintos métodos. Arriba: $M_C = 5$. Abajo: $M_C = 10$.

Figura 4.2.7: Modelo de Casson: error relativo distintos m6todos. Arriba: $M_C = 0$. Abajo: $M_C = 2$.

Figura 4.2.8: Modelo de Casson: error relativo distintos m6todos. Arriba: $M_C = 5$. Abajo: $M_C = 10$.

4.3. Aplicación a relaves mineros

Los métodos estudiados fueron aplicados a reologías experimentales efectuadas a relaves mineros de procedencia confidencial. Sus propiedades se describen en el Cuadro 4.3.1 y la granulometría en la Fig. 4.3.1 (la definición de estas características físicas se halla en la Sec. 5.1.1).

Gravedad específica	$2,79 \pm 0,02$
pH	9,80
d_{20}	19 [μm]
d_{50}	72 [μm]
d_{80}	247 [μm]
Concent. de sólido	50-74 % p/p

Cuadro 4.3.1: Propiedades físicas de relave analizado.

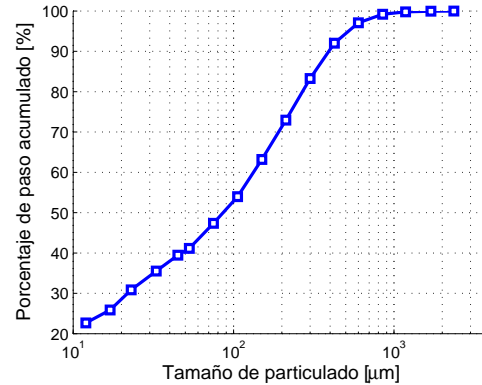


Figura 4.3.1: Granulometría de relave.

Típicamente las curvas obtenidas del reómetro tienen la apariencia de la Fig. 4.1.1(a). Como ya se discutió al principio de este Capítulo, es necesario trabajar con los puntos (Ω_i, τ_i) compatibles con la existencia de una función aproximante continua $\Omega(\tau)$. Comúnmente los puntos que se escogen son aquellos bien aproximados por una línea recta, es decir, se supone que el fluido se ajusta al modelo de Bingham en un cierto rango. Es claro que este modelo teórico no admite ningún tipo de curvatura como el que se suele observar al principio de los reogramas, sin embargo esta suposición ha probado ser robusta en el sentido práctico además de tener la ventaja de contemplar una tensión de fluencia positiva, efecto que es necesario considerar para el diseño en ingeniería. Una justificación interesante y detallada para el uso del modelo de Bingham puede ser consultada en [Sla02].

La selección de datos se hizo para cada caso eligiendo el intervalo más regular y cuidando no sobrepasar el punto crítico dado por la inestabilidad de Taylor (una breve descripción de este fenómeno físico se halla en el Anexo B). Los métodos de aproximación antes descritos fueron aplicados a seis fluidos de distinta concentración sólida. Los reogramas se encuentran entre las Fig. 4.3.2 y 4.3.4. Se observa que los fluidos de concentraciones más bajas se ajustan con mucha precisión a una línea recta, sin embargo, para altas concentraciones se aprecia una tendencia creciente hacia la convexidad de las curvas reológicas. Este resultado sugirió estudiar paralelamente la aplicabilidad de los modelos de Casson y Casson Generalizado descritos en la Sec. 2.2.

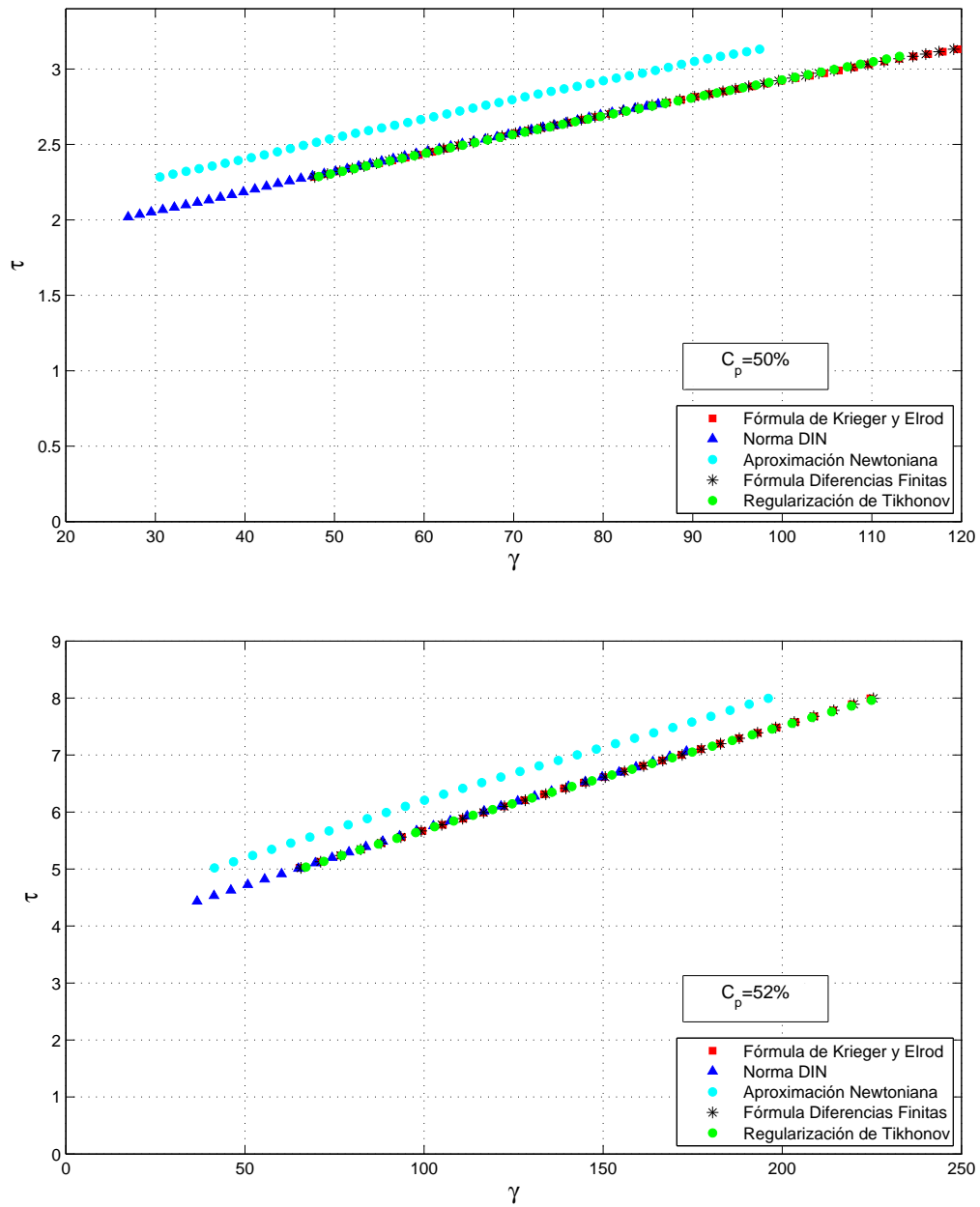


Figura 4.3.2: Reograma relave, distintos m6todos. Arriba: $C_p = 50\%$. Abajo: $C_p = 52\%$.

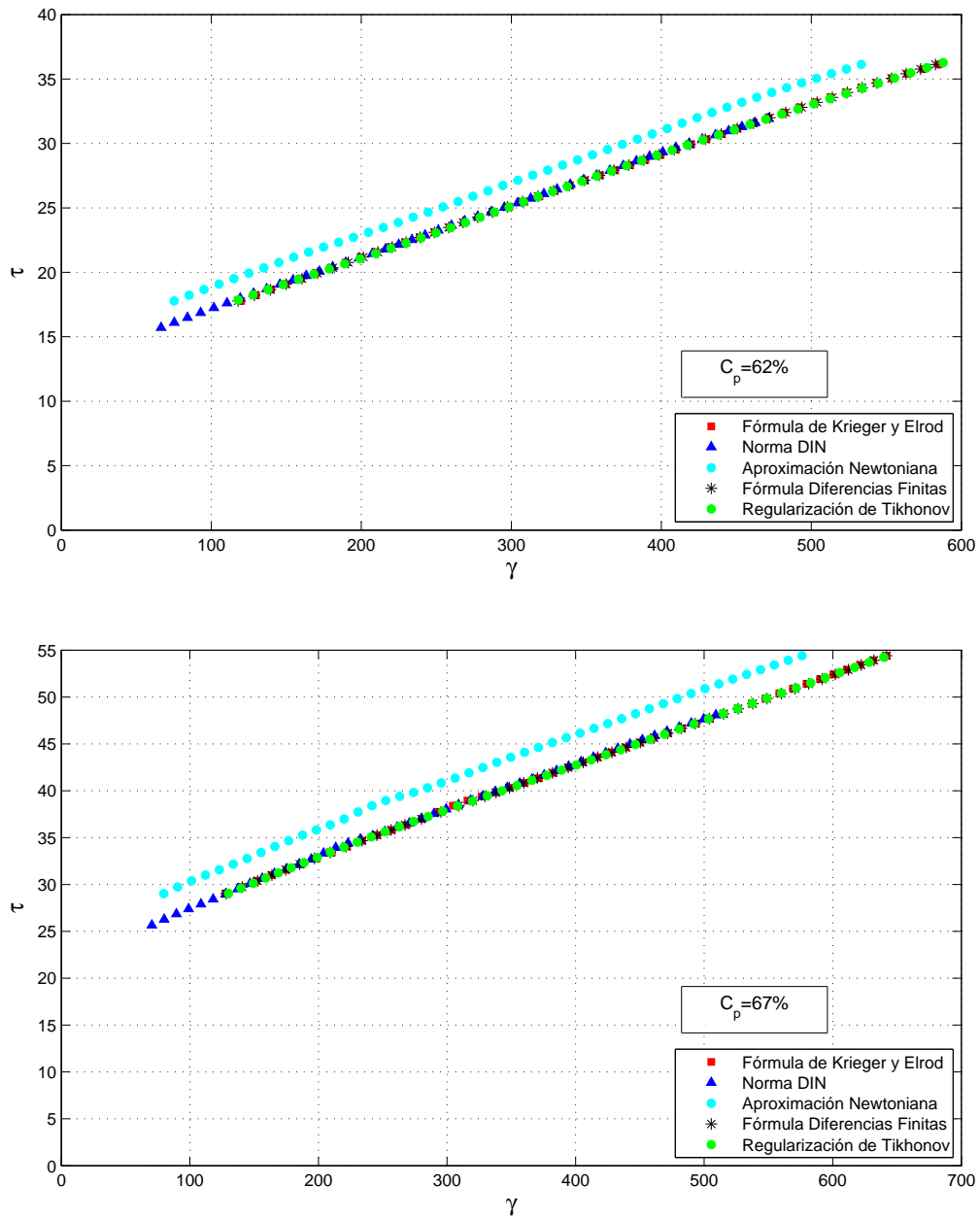


Figura 4.3.3: Reograma relave, distintos métodos. Arriba: $C_p = 62\%$. Abajo: $C_p = 67\%$.

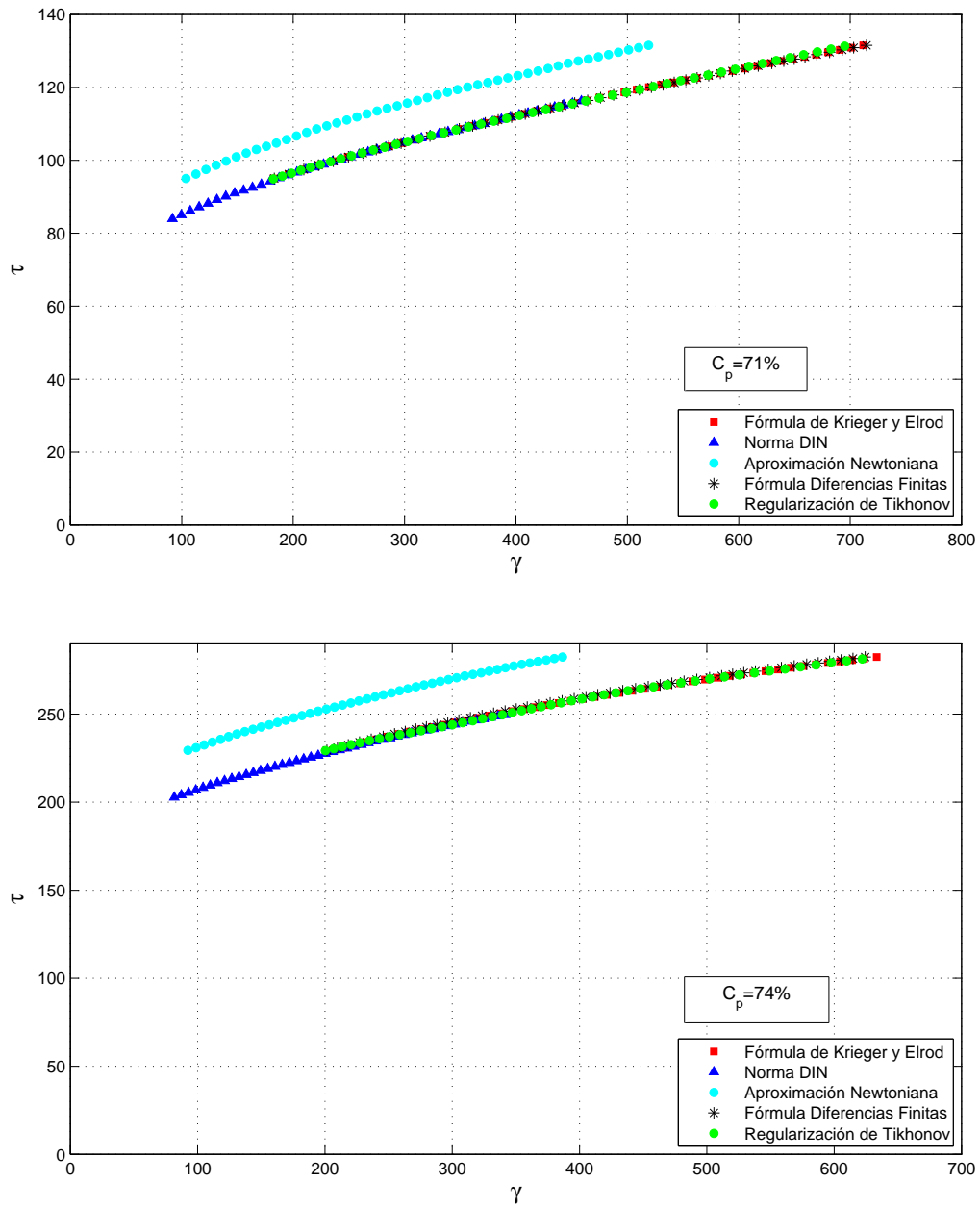


Figura 4.3.4: Reograma relave, distintos m6todos. Arriba: $C_p = 71\%$. Abajo: $C_p = 74\%$.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	0,0119	0,0128	0,0128	0,0119	0,0122
52	0,0185	0,0191	0,0191	0,0185	0,0184
62	0,0396	0,0402	0,0402	0,0396	0,0396
67	0,0488	0,0506	0,0506	0,0487	0,0488
71	0,0675	0,0851	0,0851	0,0673	0,0696
74	0,1222	0,1788	0,1788	0,1235	0,1245

Cuadro 4.3.2: Bingham: viscosidad estimada.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	1,73	1,68	1,90	1,73	1,71
52	3,82	3,77	4,27	3,83	3,83
62	13,24	13,16	14,89	13,23	13,24
67	23,18	22,68	25,66	23,19	23,13
71	88,44	78,51	88,84	84,46	83,61
74	207,86	190,67	215,76	208,09	206,71

Cuadro 4.3.3: Bingham: tensión de fluencia estimada.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	0,0042	0,0037	0,0037	0,0042	0,0042
52	0,0073	0,0062	0,0062	0,0073	0,0076
62	0,0193	0,0167	0,0167	0,0193	0,0186
67	0,0206	0,0186	0,0186	0,0206	0,0197
71	0,0170	0,0182	0,0182	0,0169	0,0173
74	0,0232	0,0278	0,0278	0,0234	0,0236

Cuadro 4.3.4: Casson: viscosidad estimada.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	1,13	1,20	1,36	1,12	1,13
52	2,34	2,59	2,93	2,34	2,29
62	6,95	7,91	8,95	6,95	7,15
67	13,66	14,90	16,86	13,68	14,05
71	63,80	62,35	70,56	63,83	63,45
74	169,17	162,03	183,35	169,55	168,35

Cuadro 4.3.5: Casson: tensión de fluencia estimada.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	0,0050	0,0101	0,0101	0,0050	0,0093
52	0,0173	0,0152	0,0152	0,0173	0,0157
62	0,0354	0,0387	0,0387	0,0356	0,0366
67	0,0428	0,0375	0,0375	0,0426	0,0419
71	0,0177	0,0074	0,0074	0,0175	0,0289
74	0,0000	0,0257	0,0257	0,0000	0,0027

Cuadro 4.3.6: Casson Generalizado: viscosidad estimada.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	1,21	1,57	1,78	1,21	1,52
52	3,69	3,49	3,95	3,69	3,53
62	11,96	12,86	14,56	12,02	12,35
67	21,38	20,06	22,70	21,35	21,10
71	64,35	54,60	61,78	64,28	70,02
74	73,33	160,93	182,10	76,74	129,16

Cuadro 4.3.7: Casson Generalizado: tensión de fluencia estimada.

C_p [%]	Krieger y E.	Norma DIN	Aprox. Newt.	Dif. finitas	Reg. Tikhonov
50	0,5452	0,8381	0,8381	0,5443	0,7880
52	0,9335	0,8311	0,8311	0,9304	0,8550
62	0,8629	0,9572	0,9572	0,8689	0,9008
67	0,8666	0,7722	0,7722	0,8632	0,8491
71	0,5077	0,3885	0,3885	0,5062	0,6108
74	0,1672	0,4898	0,4898	0,1707	0,3041

Cuadro 4.3.8: Casson Generalizado: constante de escala estimada.

Los Cuadros 4.3.2 a 4.3.8 contienen los valores estimados de los parámetros asociados a los modelos Bingham, Casson y Casson generalizado utilizando los distintos métodos de aproximación. Las Fig. 4.3.5 a 4.3.7 grafican la información de estas tablas.

El ajuste de los reogramas a los modelos teóricos fue realizada utilizando la función `fit` de *Matlab*, definiendo previamente la ecuación paramétrica de cada modelo. Se empleó el método de mínimos cuadrados para funciones no lineales con una tolerancia de $1,0 \times 10^{-10}$ tanto para las variables como para la función objetivo.

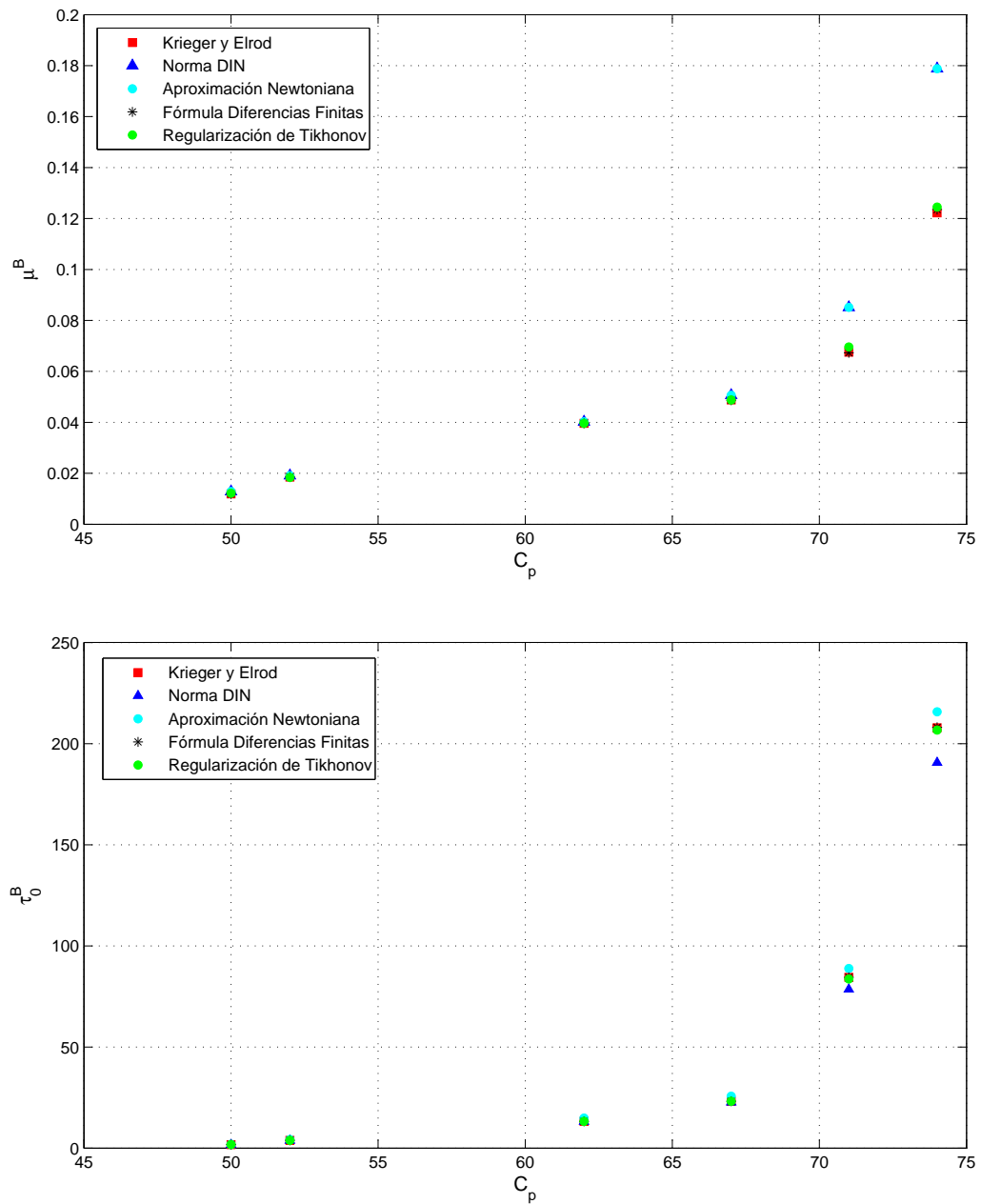


Figura 4.3.5: Estimación de parámetros modelo Bingham. Arriba: μ^B . Abajo: τ_0^B .

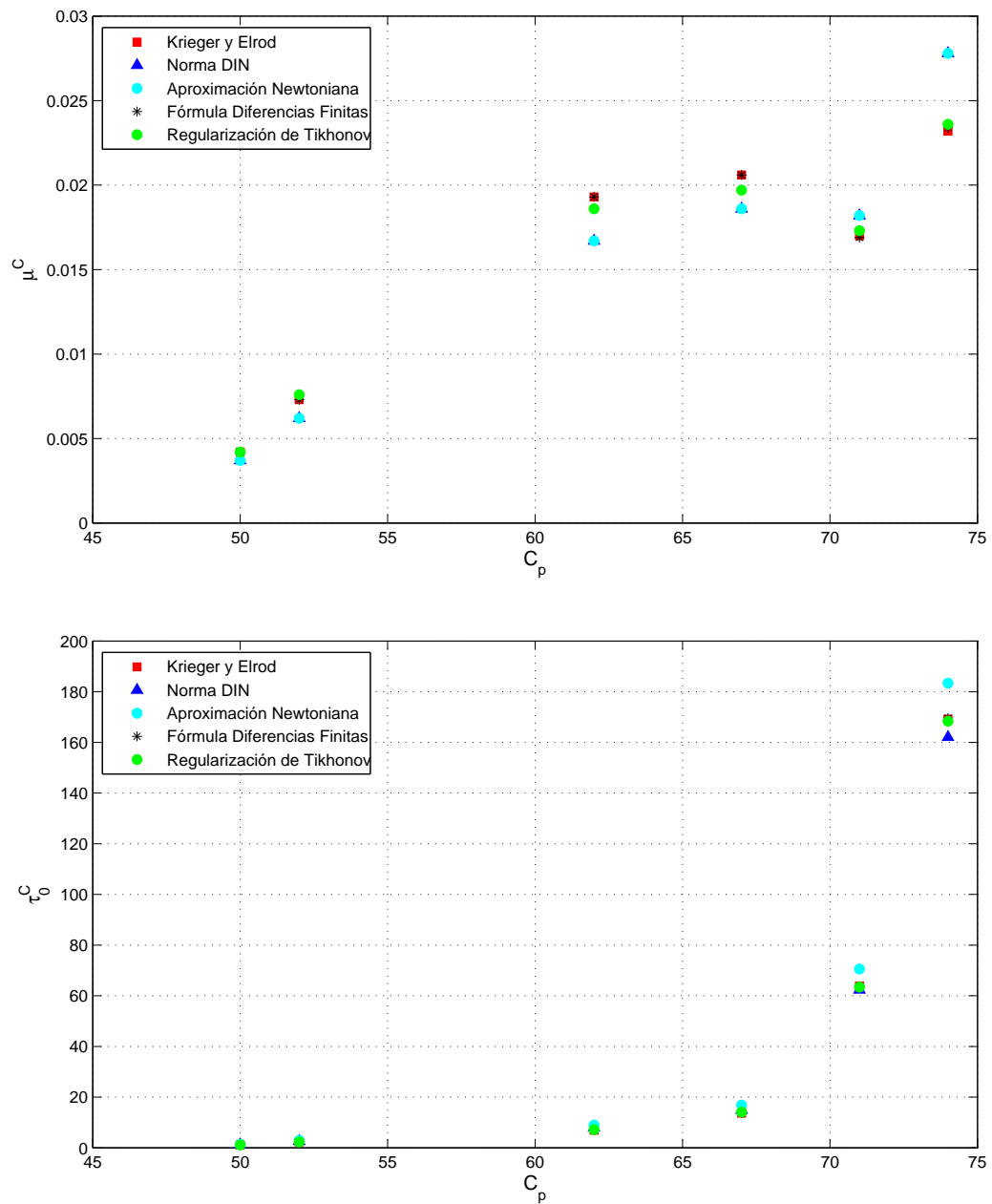


Figura 4.3.6: Estimación de parámetros modelo Casson. Arriba: μ^C . Abajo: τ_0^C .

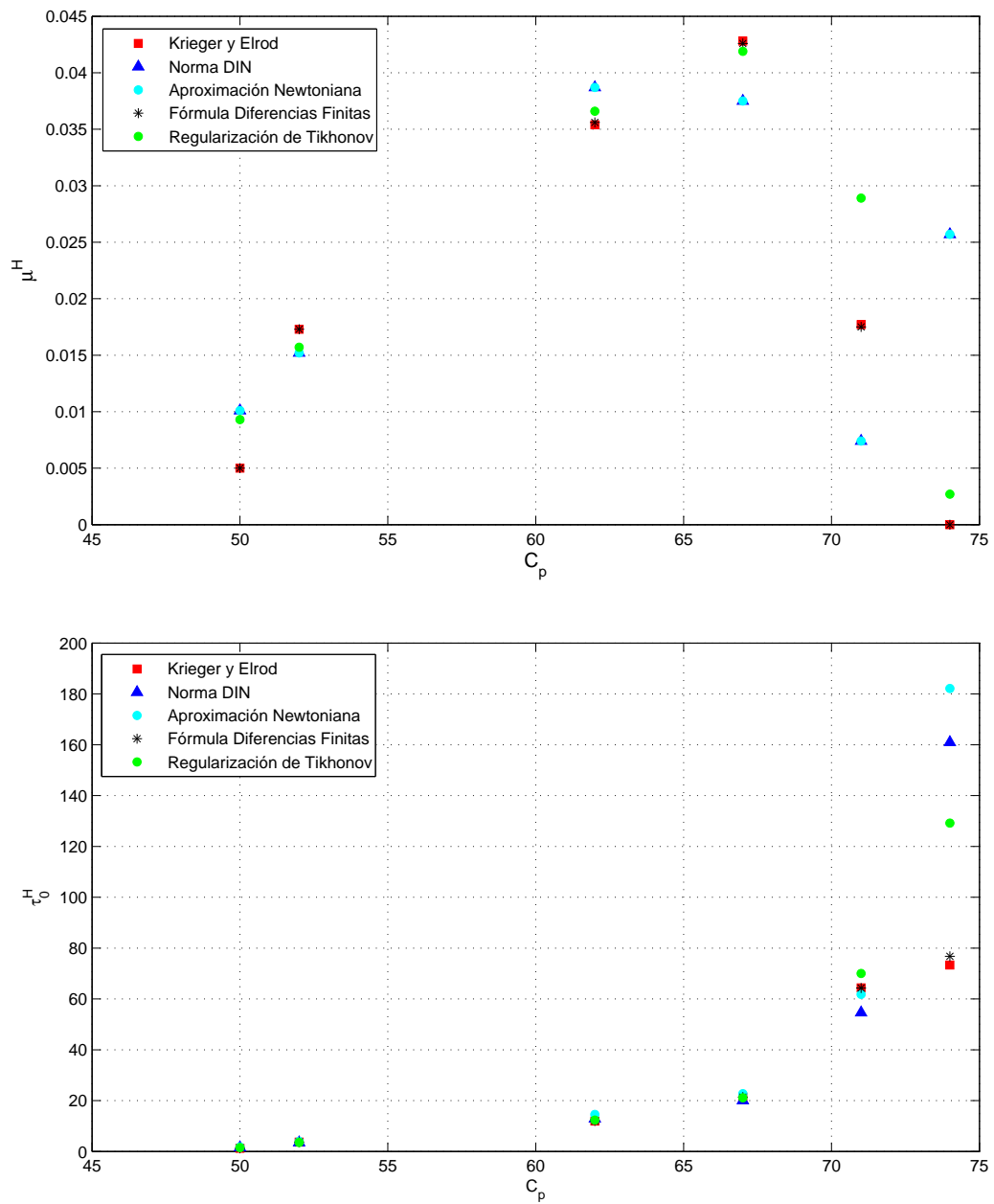


Figura 4.3.7: Estimación de parámetros modelo Casson Generalizado. Arriba: μ^H . Abajo: τ_0^H .

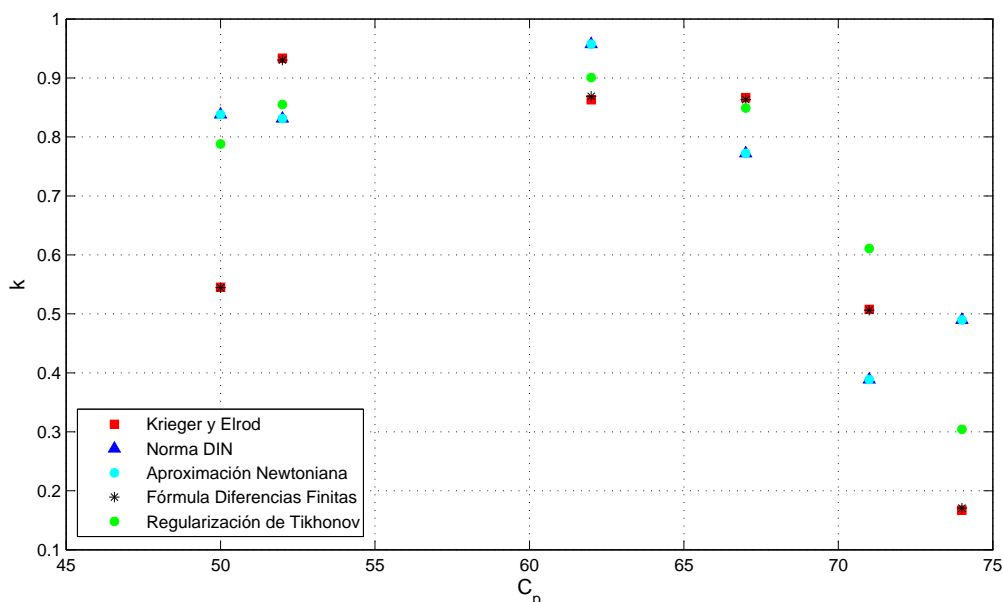


Figura 4.3.8: Modelo Casson Generalizado: estimación de parámetro k .

4.4. Algunas estimaciones teóricas

Los métodos de aproximación estudiados en esta Memoria admiten pocos resultados comparativos teóricos dado que sus formulaciones finales son de distinta naturaleza. El análisis de la convergencia del método de Tikhonov aplicado a ecuaciones de Fredholm de primera especie puede consultarse en [LE97]. Para el resto de los métodos, el cálculo de límites revela que todos resultan ser equivalentes para $s \rightarrow 1$.

Una aproximación de Taylor permite probar que el primer término de la fórmula de Krieger y Elrod (3.3.7) aplicado al modelo newtoniano cumple

$$\dot{\gamma}_{\text{KEI}}(\tau) = \dot{\gamma}_{\text{Newt}}(\tau)(1 + O(s - 1)).$$

Una estimación más fina resulta de usar la relación asintótica

$$\frac{1}{\ln s} = \frac{2s^{-1}}{1 - s^{-2}} + \frac{2s^{-1}}{6(1 - s^{-2})}(\ln s)^2 + O((s - 1)^3),$$

con la que se prueba que la fórmula de Punto Medio en (3.4.9) aplicada al modelo newtoniano satisface

$$\dot{\gamma}_{\text{PM}}(\tau) = \dot{\gamma}_{\text{Newt}}(\tau) \left[1 + \frac{1}{6}(\ln s)^2 + O((s - 1)^3) \right]. \quad (4.4.1)$$

Es decir, aplicado este caso, este último método es considerablemente más preciso.

4.5. Discusión de los resultados

En todos los análisis numéricos anteriores la primera característica que destaca es la sobrestimación sistemática del método newtoniano en las curvas reológicas. Esta aproximación es la única que supone *a priori* un comportamiento conocido del fluido pero que, sobre todo en los casos analizados, dista bastante de la situación real. Utilizar este método puede generar errores relativos superiores al 10 % en las curvas de flujo y en la estimación de la tensión de fluencia de los distintos modelos. La estimación de la viscosidad, en cambio, arroja resultados comparables.

En cuanto al estudio de los métodos aplicados a modelos teóricos, el resto de las aproximaciones entregan resultados similares en todos los aspectos. Los gráficos de error evidencian un comportamiento divergente para esfuerzos de corte cercanos a la tensión de fluencia, esto se debe principalmente a dos razones:

- el inadecuado ajuste del polinomio aproximante de los puntos (Ω_i, τ_i) en los primeros sectores de la curva, y
- la forma de cálculo del error relativo, cuyo denominador toma valores cercanos a cero acentuando los errores numéricos en el numerador.

El rango inicial de puntos (Ω_i, τ_i) corresponde al momento en el que el torque del cilindro interno apenas permite sobrepasar el esfuerzo de fluencia, por lo tanto el material entre los cilindros escurre parcialmente. Por esta razón es que las soluciones $\Omega^*(\tau^*)$ para los modelos de Bingham y Casson son funciones definidas por intervalos: el primero de ellos corresponde al fluido en reposo; el segundo, bajo cizalle parcial y el tercero, cuando todo el material está en movimiento. Naturalmente la función resultante es continua, pero presenta distintas curvaturas en cada sector y por ende el polinomio aproximante de todo el rango de datos no se adapta bien, tal como se aprecia en la Fig. 4.5.1. Todos los métodos que dependen de este polinomio presentan entonces este notorio error inicial.

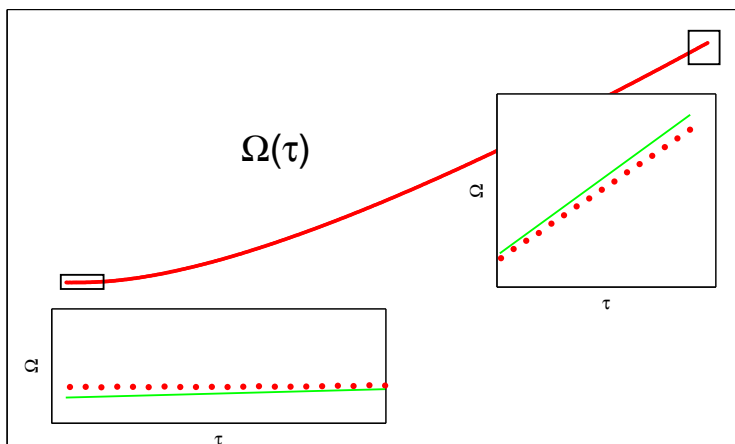


Figura 4.5.1: Rojo: $\Omega(\tau)$ para el modelo de Casson. Verde: polinomio aproximante. Las zonas destacadas corresponden a los puntos de borde donde se produce el mayor error de ajuste.

Por otro lado, para valores más grandes de τ , estos mismos métodos exhiben un comportamiento fluctuante del error debido a las oscilaciones del polinomio aproximante de los datos, sin embargo, la magnitud de la desviación que ocasionan es pequeña e inferior al 1 % de error relativo. Por último, para los valores finales de τ se observa un crecimiento significativo del error. Esto también se debe al polinomio: el alejamiento hacia los puntos experimentales finales es un efecto de borde común en la aproximación de este tipo.

La aplicación de los métodos a los relaves reales no presenta los defectos recién descritos dado que los puntos se escogieron en el sector que ya ha superado el transiente de experimentación. Por ende, los puntos (Ω_i, τ_i) se ajustan bien a un comportamiento rectilíneo o ligeramente convexo que es mejor aproximado por el polinomio. Esto permite afirmar que el error en los reogramas de relave, y en los parámetros que se infieren de ellos, está acotado por el error calculado explícitamente en los modelos teóricos. Más precisamente, para cada una de las muestras experimentales es posible calcular el valor del parámetro M_B o M_C según corresponda, para asociar luego este relave a alguna de las simulaciones teóricas que se realizó previamente. La tabla 4.5.1 resume los valores calculados utilizando la viscosidad y la tensión de fluencia obtenidas por el método de Tikhonov, y el error de cálculo aproximado que se desprende del modelo teórico que le corresponde.

C_p [%]	M	Error relativo
50	$M_B = 0,64$	$< 0,5\%$
52	$M_B = 0,47$	$< 0,5\%$
62	$M_B = 0,28$	$< 0,5\%$
67	$M_B = 0,37$	$< 0,5\%$
71	$M_C = 3,14$	$< 0,5\%$
74	$M_C = 8,21$	$< 1,0\%$

Cuadro 4.5.1: Valor del parámetro M para relaves. Se usó el modelo de Casson para las concentraciones mayores dada la notoria curvatura de los reogramas en la Fig. 4.3.4. El error relativo se refiere a la variabilidad puntual esperada en los reogramas, que es generada exclusivamente por el método de aproximación utilizado.

Históricamente se ha utilizado el modelo de Bingham para representar los reogramas de relave, sin embargo, como se aprecia en las figuras anteriores, para concentraciones crecientes se observa una ligera convexidad en las curvas de flujo. Naturalmente el modelo de Bingham no admite ningún tipo de curvatura, por lo tanto, se decidió estudiar la aplicabilidad de las ecuaciones constitutivas de Casson y Casson Generalizado. Este último modelo contiene el factor de escala k , que es un parámetro libre extra en comparación con los otros dos modelos y que le otorga mayor flexibilidad para adaptarse a diagramas de curvatura variable en función de la concentración sólida. Sin embargo, como se desprende de la Fig. 4.3.7 para μ_H , los valores de la viscosidad estimada para este modelo no son monótonos como función de C_p . Existen numerosas reglas semi-empíricas que caracterizan esta relación como un crecimiento exponencial, resultado que sí se aprecia en la Fig. 4.3.5 al ajustar los datos al modelo de Bingham.

Capítulo 5

Modelo Cinético de Microestructura para Fluidos Dependientes del Tiempo

En este capítulo se presentarán las bases de un nuevo Modelo reológico que fue motivado fundamentalmente por dos observaciones recurrentes durante este Trabajo de Título. La primera dice relación con el comportamiento de la curva $\Omega(\tau)$ para bajos esfuerzos de corte, fenómeno que, a pesar de ser ampliamente discutido cualitativamente en la literatura, no ha sido descrito matemáticamente en forma satisfactoria. La segunda motivación está relacionada con el posible comportamiento *tixotrópico* de los relaves mineros que se analizaron, fenómeno que no es considerado en ninguno de los modelos de fluido tratados en la Sec. 2.2. A continuación serán descritos algunos aspectos reológicos generales para luego establecer el Modelo nuevo en las secciones siguientes.

5.1. Consideraciones reológicas

5.1.1. Suspensiones

El Modelo propuesto está orientado a *suspensiones*, esto es, material sólido particulado disuelto en un líquido transportador. En otras palabras, corresponde a la mezcla de dos *fases* distintas, de las cuales una es asimilable a un fluido continuo (denominada fase fluida o dispersante) y la otra, a una fase discontinua (fase dispersada) repartida bajo elementos de volumen separados.

En este Trabajo no se discutirá acerca de las características individuales de las partículas (como son composición, forma o área superficial), sino que se describirá el comportamiento del sistema a partir de fenómenos globales bajo el supuesto de homogeneidad del medio a gran escala (en comparación a algún diámetro representativo del particulado que se pueda desprender de la granulometría).

La caracterización típica de este tipo de fluidos está dada por:

- **Concentración:** dada una masa m_s de material sólido seco de densidad ρ_s , y una cantidad m_0 de líquido transportador de densidad ρ_0 , se definen la *concentración en peso* $c_P = m_s/(m_s + m_0)$ y la *concentración en volumen* $c_V = v_s/(v_s + v_0)$ de la suspensión. Estas últimas cantidades están relacionadas por la expresión

$$C_v = \frac{C_p}{C_p + (1 - C_p) * (\rho_s/\rho_0)}.$$

Estos parámetros resultan ser determinantes en el comportamiento reológico porque los fluidos de alta concentración facilitan las interacciones entre las partículas transportadas, lo que se ve fuertemente reflejado en la tensión de fluencia y en la viscosidad tal como se vio en la Sec. 4.3.

- **Granulometría:** es la distribución estadística de tamaños de grano contenidos en el material. Se puede medir a través de un proceso de *tamizado* en el cual se utilizan una serie de cedazos o tamices de distintos tamaños para filtrar sucesivamente el particulado. Usualmente se utiliza la notación d_{20} , d_{50} . . . que corresponde al tamaño de partícula que marca el 20 %, 50 % . . . de densidad estadística acumulada, respectivamente.

Es una característica muy relevante de las suspensiones porque una amplia variedad de tamaños podría generar una alta *densidad de empaquetamiento*, esto quiere decir que a altas concentraciones de material, partículas pequeñas ocupan los espacios entre las grandes creando zonas de fluido “atrapado” y por ende, afectando la viscosidad aparente del material. Además, las partículas pequeñas poseen, proporcionalmente, mayor superficie exterior lo cual favorece interacciones de tipo físicoquímico.

- Otras características importantes son el pH y la temperatura. Estas no fueron variables controladas en este Trabajo de Título ni serán consideradas explícitamente en el modelo reológico que se propondrá en este Capítulo.

5.1.2. Dependencia Temporal

En la Sec. 2.2.2 se definieron los conceptos de fluido pseudoplástico y dilatante como aquellos en los que la viscosidad aparente η varía en función del esfuerzo de corte aplicado. Fenómenos distintos, aunque muchas veces ligados a los anteriores, son los de *tixotropía* y *reopectía*, en los cuales la viscosidad aparente decrece o crece como función del tiempo, respectivamente. Es un fenómeno complejo y en general reversible que se observa en muchos tipos de fluidos como petróleos y pinturas.

El comportamiento tixotrópico es experimentalmente investigado estudiando la respuesta del material ante cambios escalonados en el esfuerzo o la tasa de corte. De esta manera los efectos temporales se desacoplan experimentalmente de los esfuerzos, permitiendo identificar ambas fenomenologías independientemente. Lamentablemente existe

gran carencia de información experimental confiable publicada porque a menudo los procedimientos son cuestionables y la metodología de cálculo rara vez es explicitada.

En el presente caso, será utilizada información de reologías de relaves mineros realizadas utilizando el método Vane. Este dispositivo es un rotor de paletas que es lentamente introducido en el fluido para posteriormente hacerlo girar a una velocidad angular constante muy pequeña. La información que se utilizará para la validación experimental del modelo corresponde a duplas del tipo (τ_i, t_i) . Si el fluido no presentara un comportamiento dependiente del tiempo se esperaría observar valores constantes para τ_i dado que $\dot{\gamma}$ es mantenido fijo por el equipo. Sin embargo, se verá que existe una variabilidad temporal sistemática y de considerable magnitud, fenómeno que no es capturado por ninguna de las ecuaciones constitutivas descritas en la Sec.2.2. Esta es una de las observaciones que dio pie al desarrollo del modelo reológico que se propone en a continuación.

Varias estrategias han sido desarrolladas para describir el comportamiento tixotrópico: una categoría especial de ellas es la denominada *Modelos Cinéticos de Estructura* [DM05]. En estos modelos la fenomenología es explícitamente asociada a un parámetro variable de microestructura cuya cinética gobierna el comportamiento dependiente del tiempo. Esta metodología fue adoptada en el presente caso y se describirá en detalle en las secciones siguientes.

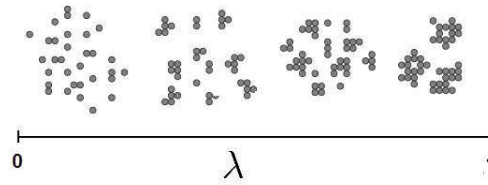
5.2. Derivación matemática

Los modelos cinéticos de estructura suponen que la dependencia temporal de las propiedades reológicas se debe a cambios en la estructura interna del material. Se define una única función escalar λ que tiene el valor 1 cuando la estructura se completa, por ejemplo, después de un prolongado tiempo en reposo, y 0 cuando la estructura está completamente destruida bajo altos esfuerzos aplicados [BQ96]. El modelo que se propondrá a continuación se enmarca en el cuadro general propuesto por Chang y Evans [CE65] que consta de las ecuaciones constitutiva y cinética siguientes

$$\tau = \tau(\lambda(t), \dot{\gamma}(t)) \quad (5.2.1)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = F(\lambda, \dot{\gamma}) - G(\lambda, \dot{\gamma}). \quad (5.2.2)$$

La tasa de cambio temporal de λ está dada por las funciones F , que representa la aglomeración o decantamiento, y G , que cuantifica el rompimiento de microestructuras. Es entonces un sistema análogo al proceso de nacimiento y muerte, ampliamente estudiado en modelos de especies biológicas. El estado estacionario, es decir $\dot{\lambda} = 0$, corresponde al balance entre ambos procesos físicos y supone, además, la existencia de una solución λ_{eq} que, al ser reemplazada en la ecuación constitutiva (5.2.1) permite obtener la relación $\tau_{eq} = \tau_{eq}(\lambda_{eq}, \dot{\gamma}_{eq})$, que corresponde a la clase general de modelos reológicos descritos en la Sección 2.2 donde la dependencia temporal no es relevante.

Figura 5.2.1: La función λ

5.2.1. Ecuación Cinética

En ausencia de una definición rigurosa del parámetro λ la elección de las funciones F y G será prácticamente arbitraria. Se buscan expresiones simples con tal de obtener una solución explícita de la ecuación diferencial. Por simplicidad, se supondrá en principio que la tasa de decantamiento o aglomeración es independiente del valor instantáneo de λ , sino que sólo dependerá del valor de $\dot{\gamma}$. Esto pretende modelar que, a altas tasas de corte, se reduce la sedimentación del fluido debido al nivel creciente de agitación de las partículas. Por otro lado, el rompimiento de estructuras se modelará como una función lineal en λ , con lo que implícitamente se impone un comportamiento exponencial en el tiempo para el nivel de microestructura del fluido.

La ecuación (5.2.2) se escribirá entonces como

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{\theta} [\alpha(\dot{\gamma}) - \lambda], \quad (5.2.3)$$

donde θ es una escala temporal que se supondrá constante y α es alguna función decreciente en $\dot{\gamma}$. Con esta proposición se observa que el sistema estacionario tiene como solución $\lambda_{eq} = \alpha(\dot{\gamma})$, lo cual impodrá condiciones sobre la función α . En primer lugar, en ausencia de esfuerzos se espera que las microestructuras se formen completamente, lo cual matemáticamente se impone como $\alpha(0) = 1$. Por el contrario, para altos valores de $\dot{\gamma}$ el nivel de estructura del material decrecerá asintóticamente hacia $\lambda = 0$, por ende, se impondrá que $\alpha(\dot{\gamma}) \rightarrow 0$ si $\dot{\gamma} \rightarrow \infty$. De las funciones simples cumpliendo estas condiciones se escogerá $\alpha(\dot{\gamma}) = e^{-c\dot{\gamma}}$, con c alguna constante positiva por determinar. Este modelo presenta características útiles que simplificarán los cálculos para la determinación de los parámetros libres del sistema cuando se apliquen a información experimental.

5.2.2. Ecuación Constitutiva

La existencia real de la tensión de fluencia ha sido un tema controversial en reología hasta nuestros días. Los reómetros antiguos eran incapaces de determinar puntos en el reograma para valores de $\dot{\gamma}$ muy cercanos a 0; en muchos casos la tendencia general de los pocos datos hacía presumir la existencia de tensión de fluencia. Los reómetros modernos tienen una alta resolución de puntos en torno al origen y muchas veces, como

en las reologías estudiadas en esta memoria, se observa que la tensión de fluencia es un fenómeno casi inexistente.

Como se aprecia en un reograma real de relave construido mediante alguna de las técnicas de aproximación (como el de la Fig. 5.3.2), la magnitud de la tensión de fluencia es muy baja, casi despreciable. La curvatura inicial para valores pequeños de $\dot{\gamma}$ en el reograma es un fenómeno recurrente en reología de suspensiones, sin embargo, al mejor de nuestro conocimiento, no existe un modelo matemático que lo describa. El resto de la curva se aproxima muy bien a un comportamiento lineal afín, por ende en la práctica se ha utilizado el modelo Bingham para caracterizar estos relaves mediante la viscosidad μ_B y la tensión de fluencia τ_0 encontrados por ajuste de estos puntos a una recta.

En concreto, el modelo supondrá que el fluido exhibe un comportamiento *viscoelástico* cuando está en un estado muy estructurado, y un régimen predominantemente viscoso cuando estas estructuras se degradan debido a los esfuerzos aplicados. Para comprender mejor la superposición de estos efectos será necesario introducir dos cantidades adimensionales comúnmente utilizadas en fluidodinámica, así como algunos conceptos básicos en viscoelasticidad lineal.

- El número de Deborah

Una motivación para la definición de esta cantidad es la respuesta viscoelástica típica de los polímeros. Éstos se modelan como estructuras en forma de largas cadenas que bajo esfuerzos aplicados se “desenrollan” para luego fluir. La Fig. 5.2.2 evidencia la existencia del tiempo característico t^* que tarda la respuesta elástica propia del sistema.

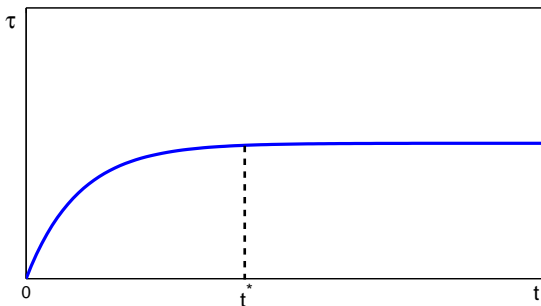


Figura 5.2.2: Comportamiento viscoelástico. Antes de t^* la respuesta del material es elástica, pero paulatinamente deviene viscosa.

Si T es el tiempo de observación o de variación de parámetros (tiempo de medición o de aplicación de esfuerzos), se define el número de Deborah como $De = t^*/T$. Si $De \ll 1$ significa que se está midiendo a tiempos muy grandes y la respuesta elástica no es apreciable. De lo contrario, la respuesta elástica es el fenómeno dominante.

- El número de Weissenberg

Para este caso se define como $Wi = t^*/t_\gamma$, donde $t_\gamma = 1/\dot{\gamma}$ se interpreta como el tiempo característico de rotación de la cadena polimérica. Si $Wi \ll 1$ significa que, durante su rotación, la estructura tiene suficiente tiempo para relajarse elásticamente, y por ende, puede considerarse siempre en equilibrio y la viscosidad del fluido es una constante. Por el contrario, para $Wi \gg 1$ el tiempo no es suficiente para la relajación y la viscosidad dependerá del valor de $\dot{\gamma}$ instantáneo.

- Viscoelasticidad lineal

El modelo de viscoelasticidad para polímeros recién mencionado puede ser aplicado a suspensiones de alta concentración sólida. La respuesta elástica de las cadenas poliméricas tiene un análogo en suspensiones a través de los efectos de inercia e interdifusión entre las partículas. Dado que su densidad es mayor, si éstas viajan a una velocidad distinta a la del fluido transportador existe un tiempo característico de respuesta al esfuerzo de corte aplicado. Este efecto es gravitante cuando las microestructuras son de tamaño grande, pero reduce su importancia cuando las partículas están muy dispersas. Además, se observa una dinámica propia entre los granos debido a interacciones físicas y químicas tales como diferencias entre cargas eléctricas superficiales, fuerzas de Van der Waals y/o movimiento browniano. Es en la modelación de este complejo sistema donde el parámetro de estructura λ cumple un rol fundamental. Será esta función la encargada de sustentar matemáticamente la transición entre el comportamiento viscoelástico de un relave muy estructurado, y la respuesta viscosa del mismo relave en estado disperso.

La viscoelasticidad lineal es un fenómeno que se estudia para $Wi \ll 1$ y $De \in (0, \infty)$, es decir, el tiempo de experimentación es suficiente para que el sistema se encuentre en equilibrio (viscosidad constante), pero también para estudiar la respuesta elástica inicial y viscosa posterior. Un esquema simple de viscoelasticidad lineal es el *Modelo de Maxwell*: si el medio se puede representar como un sistema compuesto por resortes y pistones viscosos en serie, y denotamos por γ a la deformación, se tiene que $\gamma = \gamma_R + \gamma_P$, donde γ_R y γ_P corresponden a las deformaciones del resorte y pistón, respectivamente. Asimismo, $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_R + \dot{\gamma}_P$ para las tasas de corte. Los esfuerzos están dados por $\tau_R = E \gamma_R$, $\tau_P = \nu \dot{\gamma}_P$ y en equilibrio de fuerzas se cumple que $\tau_{ve} := \tau_R = \tau_P$. E es una constante denominada *módulo de Young* y τ_{ve} representa el esfuerzo de corte en régimen viscoelástico. Con estas relaciones se deduce, para este régimen, la ecuación constitutiva

$$\dot{\tau}_{ve} = -\frac{E}{\nu}\tau_{ve} + E\dot{\gamma},$$

cuya solución, si suponemos conocido $\dot{\gamma}(t)$, es

$$\tau_{ve}(t) = \int_{-\infty}^t e^{-E/\nu(t-s)} E \dot{\gamma}(s) ds. \quad (5.2.4)$$

Como ya se ha dicho, la relación constitutiva en (5.2.1) deberá contener el régimen viscoelástico para el fluido muy estructurado, y la respuesta esencialmente viscosa para el caso disperso. La Fig. 5.2.3 caracteriza variados comportamientos generales de fluidos en función de los números Wi y De . La línea roja evidencia cómo una suspensión concentrada puede recorrer en función del tiempo varias zonas de distinta fenomenología, en particular, cruzando la región donde muy pocos modelos matemáticos apropiados se han desarrollado. En la ecuación constitutiva se utilizará el parámetro λ para modelar la transición temporal entre los distintos regímenes del fluido. Se utilizará una relación similar a la del modelo Bingham porque, como ya vimos, es robusto en cuanto a la determinación por ajuste de los parámetros libres cuando se aplica a información experimental.

Habiendo hecho todas estas consideraciones, la relación constitutiva del Modelo Cinético de Microestructura se establece finalmente como

$$\tau = \lambda \tau_{ve} + (1 - \lambda) [\tau_0 + \mu \dot{\gamma}], \quad (5.2.5)$$

donde μ corresponde a la *viscosidad asintótica*. Para valores de λ cercanos a 1 (fluido muy estructurado) el comportamiento relevante es el viscoelástico descrito por la expresión (5.2.4), en cambio, para valores de λ cercanos a 0 (fluido disperso), el modelo se aproxima hacia un régimen viscoso tipo Bingham.

Hay que notar la gran cantidad de parámetros libres que es necesario determinar para ajustar datos experimentales a este modelo. El surgimiento de las siete constantes λ_0 , c , θ , E , ν , τ_0 y μ no es extraña dado que se pretende describir una fenomenología muy compleja. En la Sec. 5.3 se propondrá un procedimiento de cálculo que permitirá reducir considerablemente el número de parámetros a estimar.

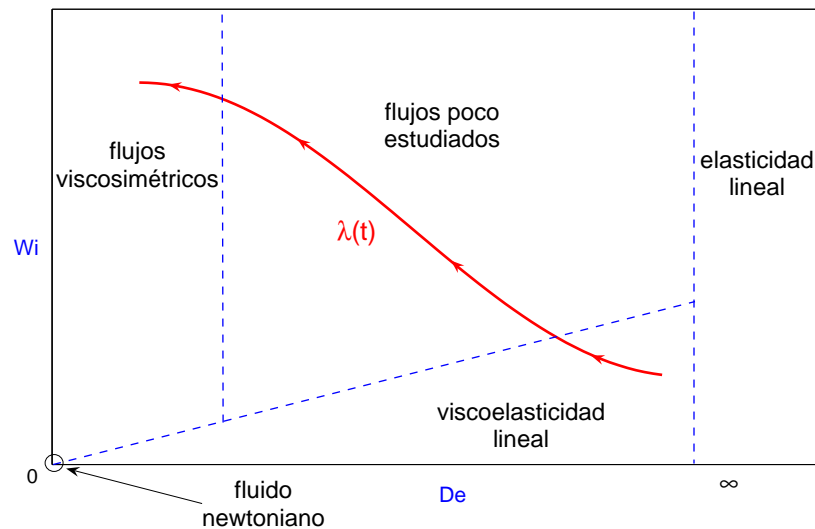


Figura 5.2.3: Tipos de flujo como función de Wi y De . La línea roja representa la transición entre los distintos regímenes que puede experimentar una suspensión concentrada bajo esfuerzos aplicados de magnitud creciente en el tiempo.

5.3. Casos particulares

Existen dos situaciones que son relevantes de estudiar: el método Vane y la rampa lineal. En general, el análisis reológico de los relaves mineros comprende la realización de ambos procedimientos. Para cada uno de estos casos existe solución explícita para los términos de la ecuación constitutiva y además, está disponible la información experimental que será útil para la validación del modelo. Por último, se estudiará la versión estacionaria para verificar la consistencia conceptual.

5.3.1. Método Vane

Se hace girar el rotor de paletas inmerso en el fluido a una velocidad muy baja y constante, en general del orden de $\Omega_0 = 0,05$ [rad/s]. Conocido el valor de $\dot{\gamma}_0$ por medio de alguno de los métodos de aproximación, es posible calcular explícitamente la integral en (5.2.4) cuyo resultado es

$$\tau_{ve}(t) = \nu\dot{\gamma}_0 [1 - e^{-E/\nu t}]. \quad (5.3.1)$$

La Fig. 5.2.2 muestra claramente la respuesta elástica dominante antes del tiempo de retardo característico $t^* = \nu/E$, y luego el comportamiento fundamentalmente viscoso.

Por otro lado, la ecuación (5.2.3) para este caso tiene como solución

$$\lambda(t) = \alpha(\dot{\gamma}_0) + (\lambda_0 - \alpha(\dot{\gamma}_0)) e^{-t/\theta}, \quad (5.3.2)$$

donde $\alpha(\dot{\gamma}_0) = e^{-c\dot{\gamma}_0}$. Una forma de evitar la estimación de la condición inicial λ_0 es suponer que el fluido antes de ser sometido al experimento se deja en reposo suficiente tiempo para que las microestructuras se formen. Con esto se puede utilizar el valor $\lambda_0 = 1$ como una aproximación para este parámetro.

La aplicación del método Vane se realiza fundamentalmente dentro del régimen viscoelástico de la suspensión. Esto quiere decir que la segunda respuesta viscosa, caracterizada por μ y contenida en el segundo término de la ecuación constitutiva (5.2.5), es despreciable. Juntando estos resultados, la ecuación constitutiva aplicada al método Vane es

$$\tau(t) = \nu\dot{\gamma}_0 [\alpha(\dot{\gamma}_0) + (\lambda_0 - \alpha(\dot{\gamma}_0)) e^{-t/\theta}] [1 - e^{-E/\nu t}]. \quad (5.3.3)$$

A este punto, existen cuatro parámetros por estimar a partir de los datos experimentales: c , θ , E y ν (λ_0 se escogerá con el valor 1). Una forma de calcularlos será estudiando la expresión (5.3.3) para tiempos pequeños en comparación a la constantes θ y ν/E . La Fig. 5.3.1 muestra una curva real típica del método Vane aplicado a una muestra de relave. Si se suponen conocidos los valores t_{\max} , τ_{\max} y τ_{∞} será posible reducir el problema a la estimación numérica de sólo un parámetro libre.

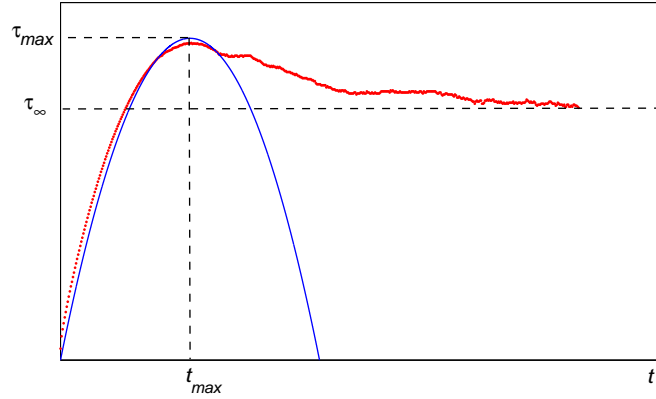


Figura 5.3.1: Rojo: curva experimental Vane. Azul: aproximación por polinomio cuadrático.

Para t/θ , $tE/\nu \ll 1$ se pueden hacer las aproximaciones a primer orden siguientes

$$\begin{aligned}\tau_{ve}(t) &= t\dot{\gamma}_0 E \\ \lambda(t) &= 1 - t(1 - \alpha(\dot{\gamma}_0)) / \theta,\end{aligned}$$

que siendo reemplazadas en (5.3.3) dan origen a la ecuación constitutiva aproximada

$$\tau_{ap}(t) = t\dot{\gamma}_0 E [1 - t(1 - \alpha(\dot{\gamma}_0)) / \theta]. \quad (5.3.4)$$

Esta expresión es un polinomio cuadrático en t que aproxima adecuadamente el primer sector de la curva. Se pueden usar los valores conocidos experimentalmente t_{max} y τ_{max} como el vértice de la parábola anterior, es decir

$$t_{max} = \frac{\theta}{2(1 - \alpha(\dot{\gamma}_0))} \quad (5.3.5)$$

$$\tau_{max} = \frac{\theta\dot{\gamma}_0 E}{4(1 - \alpha(\dot{\gamma}_0))}, \quad (5.3.6)$$

que tiene la ventaja de permitir encontrar directamente el valor de

$$E = \frac{2\tau_{max}}{\dot{\gamma}_0 t_{max}}. \quad (5.3.7)$$

Además, (5.3.5) establece una relación entre θ y c , con lo cual se escribirá el primer parámetro en función del segundo.

Por otro lado, haciendo $t \rightarrow \infty$ en (5.3.3) se obtiene que $\tau_{\infty} = \nu\dot{\gamma}_0 \alpha(\dot{\gamma}_0)$, de donde se deduce que

$$\nu = \frac{\tau_{\infty}}{\dot{\gamma}_0 \alpha(\dot{\gamma}_0)}. \quad (5.3.8)$$

Con esto, ν queda también expresado como función de c y se logra reducir el problema a sólo un parámetro libre por estimar. Esto se hará mediante ajuste numérico de los datos al modelo propuesto.

5.3.2. Rampa lineal

El modo de uso más común del reómetro de cilindros coaxiales es utilizar rampas crecientes y decrecientes para las velocidades angulares del cilindro interno. Las experiencias con las que se trabajó fueron tomadas en rangos de 100-120 [s] y son, en general, pruebas de “ida y vuelta”, es decir, se parte desde el reposo llegando hasta una velocidad angular máxima, para luego descender nuevamente. Con este procedimiento se construyen reogramas que forman un ciclo como el de la Fig. 5.3.2. Se aprecia que las curvas de subida y bajada siguen una trayectoria muy distinta, es lo que se denomina el *ciclo de histéresis* del relave. Este fenómeno evidencia la tendencia natural del fluido a conservar en el tiempo algunas de sus propiedades en ausencia del forzamiento que las generó.

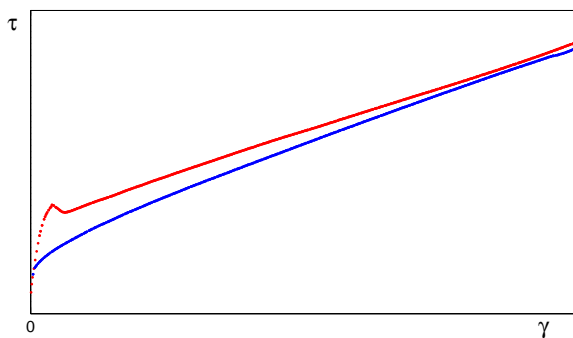


Figura 5.3.2: Ciclo de histéresis de relave. Rojo: curva de “subida”. Azul: curva de “bajada”.

El modelo se utilizará para estudiar la curva de subida hasta la aparición de la inestabilidad de Taylor (Anexo B). Un trabajo posterior podría modelar el ciclo de histéresis, por ejemplo, utilizando dos constantes distintas θ_s y θ_b en la ecuación (5.2.3) para la subida y la bajada. Esto podría reflejar que las tasas de agregación y destrucción de microestructuras son distintas en cada trayectoria debido a la “memoria” del material.

La solución aproximada del problema inverso y posterior construcción de los reogramas evidencia que una buena aproximación para modelar la curva de subida es suponer que $\dot{\gamma}(t) = at$, donde a es una constante conocida que posee unidades de aceleración [s^{-2}]. La solución de la integral en (5.2.4) resulta ser

$$\tau_{ve}(t) = avt - \frac{av^2}{E} (1 - e^{-E/\nu t}), \quad (5.3.9)$$

que, a diferencia de (5.3.1), crece linealmente con el tiempo.

Por otro lado, como ahora $\alpha(t) = e^{-act}$ la ecuación (5.2.3) tiene como solución

$$\lambda(t) = \lambda_0 e^{-t/\theta} + \frac{1}{1 - ac\theta} (e^{-act} - e^{-t/\theta}), \quad (5.3.10)$$

que en este caso es asintóticamente decreciente a cero.

Juntando estas soluciones se obtiene la versión de la ecuación constitutiva siguiente

$$\tau(t) = \lambda(t)\tau_{ve}(t) + (1 - \lambda(t)) [\tau_0 + \mu at]. \quad (5.3.11)$$

Para el caso de la rampa lineal no resulta adecuado realizar la aproximación para tiempos pequeños que se hizo en el método Vane. Esto se debe a que los términos son nulos a primer orden para $\lambda(t)$ y $\tau_{ve}(t)$, y si se trunca a segundo orden, los valores para las constantes E y c obtenidas de los experimentos no son consistentes con el orden de la aproximación. Por ello, se supondrá que los parámetros ν y E calculados para el relave por el método Vane son una propiedad intrínseca del material en estudio y, por lo tanto, independiente de la prueba experimental. Por el contrario, las constantes c y θ no tienen en principio un significado físico relevante y se estimarán por ajuste en cada caso por separado. Los parámetros μ y τ_0 se encuentran por regresión lineal aplicada al sector recto del reograma.

5.3.3. Régimen estacionario

Una primera comprobación de la consistencia del modelo pasa por estudiar el caso asintótico $t \rightarrow \infty$.

Aplicado al método Vane, la versión de la ecuación constitutiva en (5.3.3) para el régimen estacionario resulta ser $\tau_e = \nu \dot{\gamma}_0 \alpha(\dot{\gamma}_0)$, donde $\alpha(\dot{\gamma}_0) = e^{-c\dot{\gamma}_0}$. Este resultado corresponde al valor asintótico de τ que se observa comúnmente en las pruebas experimentales.

Por otro lado, para el caso de la rampa lineal se cumple que $\lambda(t)\tau_{ve}(t) \rightarrow 0$ y luego la ecuación constitutiva (5.3.11) asintóticamente se convierte en $\tau_e = \tau_0 + \mu \dot{\gamma}$, correspondiente al modelo Bingham.

5.4. Validación experimental

Para el análisis del modelo aplicado a datos experimentales se trabajó con las reologías de dos relaves mineros de procedencia confidencial. Sus características físicas relevantes se encuentran en el Cuadro 5.4.1. Los valores de las constantes de estimación directa a partir de la información experimental τ_{\max} , τ_{∞} , t_{\max} , a , $\dot{\gamma}_0$, E se encuentran en el Cuadro 5.4.2.

Nombre	pH	ρ [g/cc]	Cp [%]
Relave A	9,61	2,72	60, 65, 71
Relave B	10,50	2,68	60, 65, 71

Cuadro 5.4.1: Propiedades físicas de relaves analizados

Relave	C_p [%]	τ_{\max} [Pa]	τ_{∞} [Pa]	t_{\max} [s]	$\dot{\gamma}_0$ [s^{-1}]	a [s^{-2}]	E [Pa]
A	60	0,61	0,38	30,8	0,03	5,88	1,32
	65	2,11	1,80	30,6	0,03	5,89	4,60
	71	10,32	6,20	44,5	0,02	1,03	23,19
B	60	1,20	1,25	19,2	0,06	5,99	2,08
	65	3,21	2,90	27,4	0,03	3,01	7,81
	71	15,87	10,80	38,0	0,02	6,03	41,76

Cuadro 5.4.2: Estimación de parámetros directos.

A continuación, para ajustar el modelo a la curva experimental del método Vane, se despejan θ y ν en función de c , que es el único parámetro libre por estimar. A partir de las fórmulas (5.3.5) y (5.3.8) se obtienen las expresiones contenidas en el Cuadro 5.4.3. La ecuación constitutiva resultante se ajusta a los datos experimentales a través de la función `fit` de *Matlab*. Se utilizó el método de mínimos cuadrados con una tolerancia de $1,0E-10$ tanto para la variable como para la función objetivo. Los valores estimados de c y el resultado para ν y θ se encuentran en el Cuadro 5.4.4. Con esto, se completa el ajuste del modelo al método Vane tal como se aprecia para cada caso en la Fig. 5.4.1.

Posteriormente, preservando los valores estimados para ν y E , se ajusta el modelo como función de c y θ a los datos experimentales de la rampa lineal. Los valores calculados se encuentran también en el Cuadro 5.4.4 y el resultado gráfico en la Fig. 5.4.2.

Relave	C_p [%]	ν	θ
A	60	$12,6 \exp(0,03c)$	$61,6 [1 - \exp(-0,03c)]$
	65	$60,0 \exp(0,03c)$	$61,2 [1 - \exp(-0,03c)]$
	71	$310,0 \exp(0,02c)$	$89,0 [1 - \exp(-0,02c)]$
B	60	$20,8 \exp(0,06c)$	$38,4 [1 - \exp(-0,06c)]$
	65	$96,7 \exp(0,03c)$	$54,8 [1 - \exp(-0,03c)]$
	71	$540,0 \exp(0,02c)$	$76,0 [1 - \exp(-0,02c)]$

Cuadro 5.4.3: Método Vane: parámetros en función de la constante c .

Relave	C_p	Método Vane			Rampa lineal	
		c [s]	θ [s]	ν [Pa·s]	c [s]	θ [s]
A	60	51,06	48,29	58,60	1,10 E+05	0,37
	65	38,65	42,01	191,30	1,17 E+05	0,37
	71	79,83	70,97	1530,23	1,23 E+05	0,85
B	60	19,82	26,71	68,43	3,01 E+05	0,31
	65	33,59	34,79	264,80	2,00 E+05	0,28
	71	75,32	59,15	2435,65	3,50 E+05	0,32

Cuadro 5.4.4: Estimación por ajuste para el método Vane y rampa lineal. Cálculo de ν .

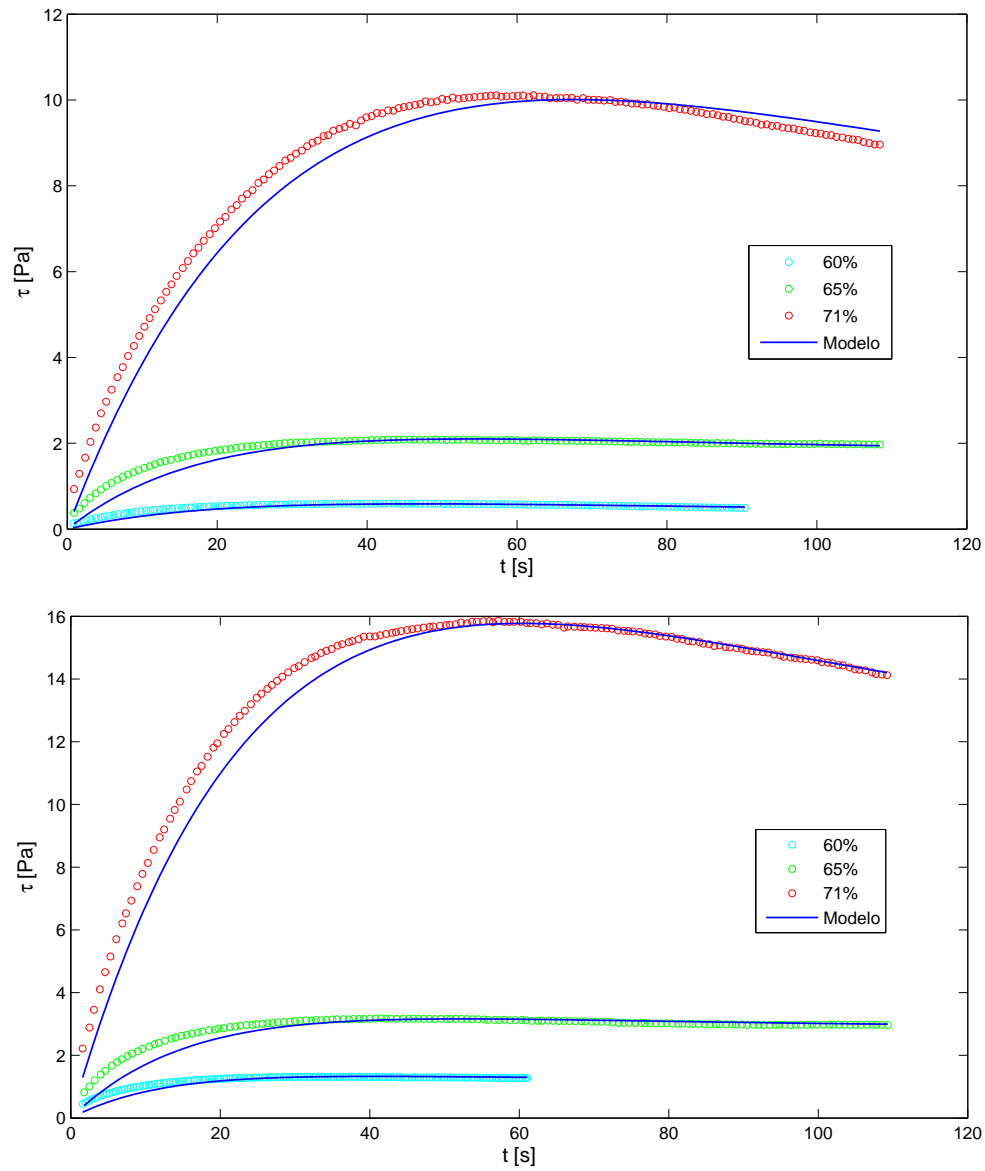


Figura 5.4.1: Método Vane: ajuste del Modelo a datos experimentales. Arriba: relave A. Abajo: relave B.

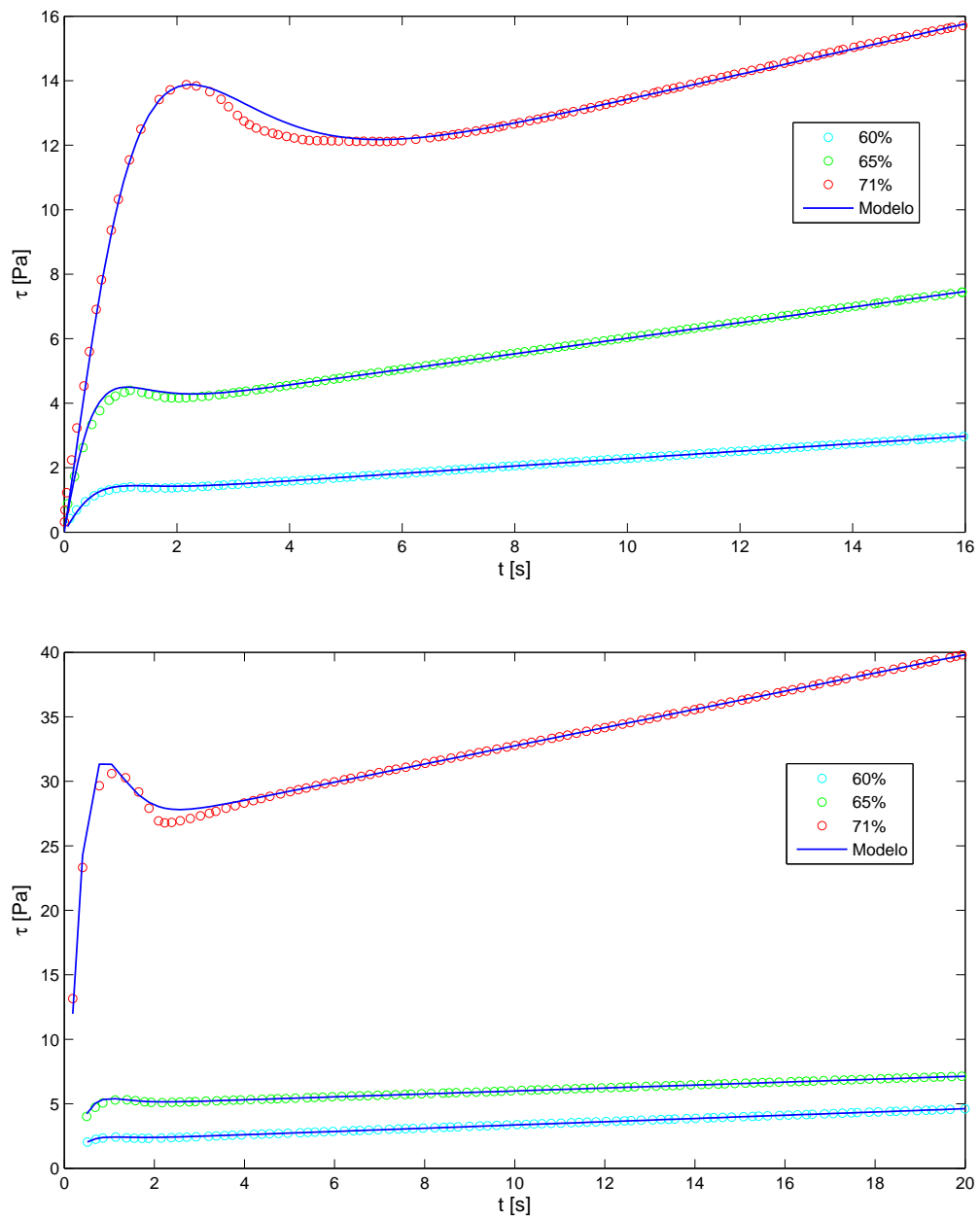


Figura 5.4.2: Rampa lineal: ajuste del Modelo a datos experimentales. Arriba: relave A. Abajo: relave B.

Capítulo 6

Conclusiones y Trabajo Futuro

La recopilación de algunos modelos de fluido para régimen estacionario permitió evidenciar que en general estas leyes constitutivas son fundamentalmente observacionales. A pesar de que no corresponden a modelos de origen físico, su simplicidad les ha valido una utilización amplia en la caracterización de fluidos no newtonianos.

El análisis matemático realizado al operador integral del Problema Inverso de Couette confirma que las inestabilidades numéricas que presentan los métodos de aproximación poseen un trasfondo complejo y que no radica sólo en las dificultades técnicas de su implementación sino en una inestabilidad intrínseca de la ecuación.

Los desarrollos teóricos asociados a los métodos de aproximación se expusieron describiendo las diversas herramientas matemáticas en las que se basan tales como la fórmula de Euler-MacLaurin, propiedades de los polinomios de Bernoulli y la discretización de la integral. A pesar de que sus formulaciones finales son de distinta naturaleza y requieren distintas técnicas de implementación, a excepción de la aproximación newtoniana, entregan resultados comparables.

La implementación de los métodos y su posterior aplicación a modelos teóricos permitió estudiar su desempeño y costo computacional de manera precisa. La caracterización de los modelos de Bingham y Casson a través de un solo parámetro M_B y M_C , respectivamente, permite estimar una cota del error cuando los métodos se aplican a información experimental proveniente de relaves reales cuyo comportamiento real es desconocido. Con la implementación que se hizo en esta Memoria, el error puntual relativo en los reogramas fue inferior al 1 % para todos los métodos aplicados a los fluidos de distinta concentración sólida que se analizaron.

Una vez construidos los reogramas, el ajuste de los resultados a los distintos modelos en régimen estacionario reveló interesantes propiedades. El modelo Bingham fue el único que presentó un comportamiento exponencial de la viscosidad y tensión de fluencia como funciones de la concentración. Esta consistencia de los parámetros es una propiedad importante a exigir en el análisis reológico, lo cual, para el rango de datos seleccionado en

esta Memoria, impide la utilización de otras ecuaciones constitutivas que parecieran ser más adecuadas en principio.

El nuevo modelo reológico propone la superposición entre los flujos viscoelástico y viscoso tipo Bingham, cuya transición en el tiempo está dada por una función de nivel de microestructura. Esta transformación de régimen paulatina fue pensada para interpretar las observaciones experimentales que presentan comportamientos que no son capturados por los modelos en régimen permanente descritos con anterioridad. La incorporación de una ecuación cinética para λ y la aplicación del modelo de elasticidad lineal permitieron encontrar soluciones explícitas de la ecuación constitutiva para las pruebas reológicas de uso común en relaves mineros.

Mediante una aproximación para tiempos pequeños fue posible disminuir la cantidad de parámetros libres del modelo aplicado a casos simples. La estimación a partir de los experimentos de las constantes τ_{max} , t_{max} y τ_{∞} reduce la dificultad del ajuste a encontrar una o dos variables libres para el método Vane y la rampa lineal, respectivamente. Los resultados obtenidos para las constantes de elasticidad E y viscosidad ν arrojan resultados aceptables desde el punto de vista físico y son compatibles con la aplicación del modelo a las dos soluciones que se estudiaron. La calidad del ajuste de la nueva ecuación constitutiva a las curvas de fluido reales resulta satisfactoria para ambos métodos experimentales aplicados a las distintas concentraciones de sólido que se analizaron.

Se plantean fundamentalmente dos tareas para un eventual trabajo posterior. La primera dice relación con la aplicación del método de aproximación para el problema inverso basado en la descomposición en *wavelet-vaguelette* [Anc05b]. Durante el trabajo de esta Memoria se revisó de manera teórica esta metodología, sin embargo, por razones de tiempo no fue posible indagar sistemáticamente su aplicabilidad a datos reales. La implementación numérica de este método de aproximación está disponible en lenguaje *Mathematica* y su adaptación no presenta inconvenientes considerables.

Por otro lado, se plantea ampliar el estudio del modelo propuesto en esta Memoria. Por ejemplo, utilizar un modelo distinto para el régimen viscoelástico o proponer una ecuación constitutiva más general para el término viscoso. Será importante además estudiar los valores de los parámetros de ajuste cuando el modelo se aplica a un mayor rango de concentraciones de sólido, y determinar si existe alguna correlación entre estas constantes que pudiera eventualmente modelarse matemáticamente.

Anexo A: Navier-Stokes para Cilindros Coaxiales

Consideremos el movimiento en régimen estacionario de un fluido entre dos cilindros concéntricos infinitos de radios a y b ($b > a$) que rotan entorno al eje común con velocidades angulares Ω_a y Ω_b . Usaremos coordenadas cilíndricas r, θ, z y por simetría necesariamente se cumple que $v_r = v_z = 0$ y $v_\theta = v(r)$, $p = p(r)$.

Las ecuaciones de Navier-Stokes (2.1.14) expresadas en coordenadas cilíndricas [LL87] resultan ser para este caso

$$\begin{aligned} \frac{d^2 v}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} - \frac{v}{r^2} &= 0 \\ \frac{dp}{dr} &= \rho \frac{v^2}{r}. \end{aligned}$$

La primera ecuación tiene soluciones de la forma $v(r) = r^n$ y reemplazando se obtiene

$$v(r) = Ar + \frac{B}{r}.$$

Las constantes se encuentran usando las condiciones de borde $v(a) = a\Omega_a$, $v(b) = b\Omega_b$. Con ellas se calcula finalmente la distribución de velocidades

$$v(r) = \frac{\Omega_b b^2 - \Omega_a a^2}{b^2 - a^2} r + \frac{(\Omega_b - \Omega_a) a^2 b^2}{b^2 - a^2} \frac{1}{r}.$$

La componente del tensor de esfuerzo en el cilindro interno se calcula como

$$\begin{aligned} [\tau_{r\theta}]_{(r=a)} &= \mu \left[\frac{dv}{dr} - \frac{v}{r} \right]_{(r=a)} \\ &= 2\mu \frac{(\Omega_b - \Omega_a) b^2}{b^2 - a^2}, \end{aligned}$$

y luego el momento total de la fuerza ejercida por un segmento de altura h está dado por

$$\begin{aligned} M &= 2\pi h a^2 \tau_{r\theta} \\ &= 4\pi h \mu \frac{(\Omega_b - \Omega_a) b^2 a^2}{b^2 - a^2}. \end{aligned}$$

Para el caso del reómetro de cilindros coaxiales se cumple que $\Omega_a = \Omega$, $\Omega_b = 0$ y reemplazando resulta

$$\Omega = \frac{1}{4\pi h} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right) \frac{M}{\mu}.$$

Anexo B: Inestabilidad de Taylor

El fluido entre dos cilindros concéntricos ha resultado ser particularmente apropiado para el estudio de estabilidad frente a perturbaciones infinitesimales. En su artículo clásico, Taylor presenta un análisis matemático de estabilidad y contrasta sus resultados con observaciones de laboratorio [Tay23].

Este problema fue estudiado anteriormente de manera experimental por Couette (1890) y Mallock (1896). Se observó que el torque necesario para hacer rotar un cilindro crecía linealmente con su velocidad angular, hasta cierto punto donde el torque empezaba a crecer más rápido. Este cambio se debía a la transición de flujo estable a inestable a partir de cierta velocidad angular crítica.

Se presentará a continuación un esquema del análisis perturbativo realizado por Taylor para el caso de fluido newtoniano.

Inestabilidad de Taylor-Couette

Consideremos una perturbación pequeña de la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes en (2.1.14). Es decir, $\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{v}'$, $p = p_s + p'$, donde $\mathbf{v}_s = v(r)\mathbf{e}_\theta = (Ar + B/r)\mathbf{e}_\theta$ como se encontró en el Anexo A. Linearizando las ecuaciones en el orden en la perturbación resulta

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v}' &= 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \nabla \mathbf{v}' \right) &= -\nabla p' + \mu \Delta \mathbf{v}'. \end{aligned}$$

Las observaciones experimentales de Taylor revelaban que la primera perturbación en aparecer poseía simetría axial, es decir, era independiente de θ . Se buscan entonces soluciones periódicas en z de la forma

$$(v'_r, v'_\theta, v'_z, p') = e^{st}(V_r \cos kz, V_\theta \cos kz, V_z \sin kz, P \cos kz).$$

El exponente s determina la tasa de crecimiento de la perturbación con el tiempo. Taylor observó que bajo cierta velocidad crítica de rotación el flujo es estable, es decir $s < 0$, y la perturbación decae en el tiempo. Por el contrario, por sobre este umbral de velocidad, el flujo se vuelve inestable y $s > 0$. El objetivo es determinar el criterio de estabilidad marginal para el cual $s = 0$ dado un cierto k . Para el caso axisimétrico observado el estado marginal es estable. La constante s en principio no se supone compleja ya que esto implicaría oscilación temporal del régimen, fenómeno que no es observado experimentalmente.

Reemplazando la solución propuesta en la ecuación linearizada con las condiciones de borde se obtiene un problema de valores propios con condiciones de borde homogéneas. Haciendo la aproximación de separación pequeña entre cilindros (que Taylor también

realizó, además de haber resuelto el problema general) e imponiendo $s = 0$ para estudiar el estado marginal, el sistema de cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) puede reducirse a una sola EDO de grado seis. Esta ecuación tiene solución a partir de ciertos valores de la constante T , denominada *número de Taylor* y definida como

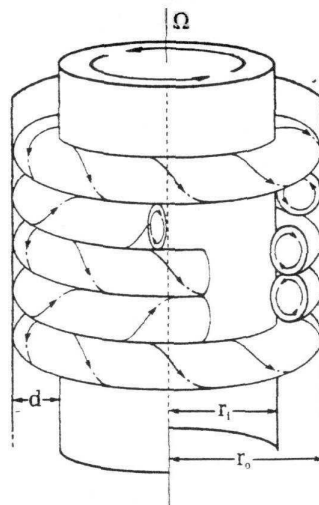
$$T = \frac{4(b-a)^4 \Omega_a A}{\nu^2}. \quad (.0.1)$$

Numéricamente se encuentra que su valor mínimo se alcanza para $kd \approx 3,12$ y toma el valor $T \approx 3430/(1 + \mu)$, para $0 < \mu < 1$.

El número de Taylor entrega entonces la velocidad angular crítica que causa la aparición de este segundo modo estacionario. La figura de más abajo es una muestra esquemática de los vórtices toroidales que se observan experimentalmente. La escala de tamaño de estos vórtices está descrita por su número de onda dado por

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

Con las constantes obtenidas por Taylor se deduce que $\lambda \approx 2d$. En efecto, los vórtices observados experimentalmente suelen ser aproximadamente dos veces más grandes que el ancho de separación entre los cilindros.



Aplicación a reología de Couette

El reómetro de cilindros concéntricos permite obtener la curva reológica de fluidos en general, no necesariamente newtonianos. En particular, las pulpas analizadas en esta Memoria se ajustan relativamente bien al modelo de Bingham. El criterio de Taylor recién expuesto fue deducido para fluidos newtonianos y pierde validez para este caso, sin

embargo, la aparición de la inestabilidad es un fenómeno que se puede observar experimentalmente en reología de suspensiones concentradas.

Existen pocos estudios previos sobre la inestabilidad del escurrimiento para fluidos Bingham y éstos han sido realizados recientemente. Entre ellos, el trabajo de Graebel [Gra64] y el análisis matemático de Laundry [Lan03] han entregado las primeras luces al respecto.

El criterio utilizado para la construcción de los reogramas en esta Memoria fue el sugerido por Schlichting (1968). Para el caso newtoniano se define el *número de Taylor crítico* como

$$Ta = \frac{\rho\Omega a^2}{\mu}(s - 1)^{3/2}$$

que toma el valor $Ta = 41,3$ para fluidos con tensión de fluencia nula. Para el presente caso, se aplicó este criterio utilizando $\mu = \mu_B$, la viscosidad Bingham del fluido. Uno de los resultados del trabajo de Laundry es que la existencia del fenómeno de tensión de fluencia aumenta el valor del punto crítico, otorgando mayor estabilidad al sistema. Luego, la aproximación utilizada es un criterio conservador que se condice con los resultados observados experimentalmente.

Bibliografía

- [Anc05a] C. Ancey, *Notebook: Introduction to Fluid Rheology*, 2005. [11](#)
- [Anc05b] C. Ancey, *Solving the Couette inverse problem using a wavelet-vaguelette decomposition*, *Journal of Rheology* **49** (2005), 441–+. [67](#)
- [Bin16] E.C. Bingham, *An Investigation of the Laws of Plastic Flow*, U.S. Bureau of Standards Bulletin **13** (1916), 309–353. [9](#)
- [BQ96] C. Baravian and D. Quemada, *Modeling thixotropy using a novel structural kinetics approach: basis and application to a solution of iota carrageenan*, *Journal of Texture Studies* **27** (1996), 371. [54](#)
- [Cas59] N. Casson, *A flow equation for pigment-oil suspensions of the printing ink type*, *British Society of Rheology Proceedings, Rheology of Disperse Systems* (1959), 84–104. [10](#)
- [CE65] D. H. Cheng and F. Evans, *Phenomenological characterization of the rheological behaviour of inelastic reversible thixotropic and antithixotropic fluids*, *British Journal of Applied Physics* **16** (1965), no. 11, 1599–1617. [54](#)
- [Cou05] Philippe Coussot, *Rheometry of Pastes, Suspensions and Granular Materials*, John Wiley & Sons, 2005. [1](#)
- [dHA05] F.R. de Hoog and R.S. Andersen, *Approximate Solutions for the Couette Viscometry Equation*, *Bull. Austral. Math. Soc.* **72** (2005), 461–470. [21](#)
- [DIN80] DIN, *Determination of viscosities and flow curves using standard design rotary viscometers with a standard geometry measuring system*, 53019-T01-80 ed., mayo 1980. [19](#)
- [DL72] G. Duvaut and J.L. Lions, *Les inéquations en mécanique et en physique*, Dunod, 1972. [9](#)
- [DM05] K. Dullaert and J. Mewis, *Thixotropy: Build-up and breakdown curves during flow*, *Journal of Rheology* **49(6)** (2005). [54](#)

- [Gas79] Gasser, T. and Muller, H., *Kernel Estimation of Regression Functions: Smoothing Techniques for Curve Estimation*, Proceedings of a Workshop Held in Heidelberg, April 2-4, 1979 (1979), 23–68. 28
- [GL77] H. Giesekus and G. Lager, *Die Bestimmung der wahren Fließkurven nicht-newtonscher Flüssigkeiten und plastischer Stoffe mit der Methode der repräsentativen Viskosität*, *Rheological Acta* **16** (1977), no. 1, 1. 19
- [Gra64] P.G. Graebel, *The hydrodynamic stability of a Bingham fluid in Couette flow*, International Symposium on 2nd order effects in elasticity, plasticity and fluid dynamics (1964). 71
- [Har97] J. Hart, *Nonparametric Smoothing and Lack-of-Fit Tests*, Springer, 1997. 27
- [HB26] W.H. Herschel and R. Bulkley, *Konsistenzmessungen von Gummi-Benzollösungen*, *Kolloid Zeitschrift* **39** (1926), 291–300. 10
- [HK04] D.J. Hallbom and B. Klein, *Flow array for nickel laterite slurry*, TMS International Nickel Symposium, Charlotte NC (2004), 415–428. 11
- [JJ46] J. Jeffreys and B.S. Jeffreys, *Methods of Mathematical Physics*, 1946. 20
- [KE53] I. M. Krieger and H. Elrod, *Direct Determination of the Flow Curves of Non-Newtonian Fluids. II. Shearing Rate in the Concentric Cylinder Viscometer*, *Journal of Applied Physics* **24** (1953), no. 2, 134–136. 20
- [KM51] I. M. Krieger and S.H. Maron, *Direct Determination of the Flow Curves of Non-Newtonian Fluids.*, *Journal of Applied Physics* **23** (1951), no. 1, 147–149. 14
- [Lan03] M.P. Landry, *Taylor-Couette Instability of a Bingham Fluid*, Master's thesis, Department of Mathematics. The University of British Columbia, 2003. 71
- [LE97] Patricia K. Lamm and Lars Eldén, *Numerical Solution of First-Kind Volterra Equations by Sequential Tikhonov Regularization*, *SIAM J. Numer. Anal.* **34** (1997), no. 4, 1432–1450. 49
- [LL87] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, second ed., Butterworth-Heinemann, 1987. 4, 68
- [New99] I. Newton, *The Principia: Mathematical Principles of Natural Philosophy (1687)*, University of California Press, 1999. 8
- [Oka60] S. Oka, *The Principles of Rheometry*, *Rheology: Theory and Applications* (F.E. Eirich, ed.), vol. 2, New York, Academic Press, 1960. 12
- [Ots25] W. Otswald, *Über die Geschwindigkeitfunktion der viskosität disperser systeme*, *Kolloid Zeitschrift* **36** (1925), 99–117. 8

- [Sla02] P.T. Slatter, *The Bingham plastic rheological model: friend or foe?*, Proceedings of The 15th International Symposium on Hydrotransport (2002), 315–327. [40](#)
- [Tay23] G.I. Taylor, *Stability of a Viscous Liquid Contained between Two Rotating Cylinders*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A **223** (1923), 289–343. [69](#)
- [Wae30] A. De Waele, *Plastic and pseudo-plastic flow*, Journal of Rheology **1** (2) (1930), 139–148. [8](#)
- [YYT00] W. Ko Y. Yeow and P. Tang, *Solving the inverse problem of Couette viscometry by Tikhonov regularization*, J. Rheol **44** (2000), no. 6, 1335–1351. [23](#)