00568



## UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

POSGRADO EN INGENIERIA

FLUJOS EXTENSIONALES DE SOLUCIONES DILUIDAS DE POLIMEROS

T		E		S		I		S
QUE	PA	RA (	OBTEN	NER	EL	GRAD	0	DE:
MAE	STRA	Eł	<b>N</b> 1	INGE	NIERIA		UIMI	CA
(POLIMEROS)								
٢	R	Е	S	Е	N	T	A	;
I.Q.	BLA	ANCA	EST	ELA	GAI	RCIA	RO.	IAS

DIRECTOR DE TESIS: DR. ANGEL ENRIQUE CHAVEZ CASTELLANOS

MEXICO, D. F.

NOVIEMBRE, 2003

and the second s VALLA DE UNICEN



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

## DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor. Lugar donde se desarrolló el tema: Facultad de Química, Conjunto E, Ciudad Universitaria.

> Asesor de tesis: Dr. Ángel Enrique Chávez Castellanos

## Sustentante: Blanca Estela García Rojas.

#### Jurado asignado

Presidente: Vocal: Secretario: Primer Suplente: Segundo Suplente: Dr. Octavio Manero Brito Dr. Luis Felipe del Castillo Dávila Dr. Rafael Herrera Nájera Dr. Humberto Vázquez Torres Dr. Luis Vicente Hinestroza

ïLō 2ĉ 2493 ວວັ ١ċ١ 41001000 зP 1000100-0-4 4.15

Autoria (a dimensional dimensional di Brandadi di Robali di Budana di Budana di Budana di Budana di Budana di B Budana di B

بيرا		CON
TALLA	<u>b</u> Ľ	UmGEN

2

## AGRADECIMIENTOS

Sirvan estas lineas para expresar mi más profundo y sincero agradecimiento a las siguientes personas e instituciones:

A la Universidad Nacional Autónoma de México y la Facultad de Química por los conocimientos adquiridos en esta casa de estudios y darme la oportunidad de pertenecer a su comunidad universitaria.

A mi asesor Dr. Ángel Enrique Chávez por toda la dedicación, apoyo y paciencia que otorgó a la realización de esta tesis.

A Mariano Pérez Camacho por toda la ayuda, el apoyo y los comentarios que aporto a esta tesis.

A mis amigos Yenin Caram, Alfredo Tenorio, Eduardo Aguilar, Martha Roa, Claudia y Mariano Pérez por el apoyo, los comentarios y la amistad que me han brindado.

A mis compañeros de Maestría Rene, Fausto, Julio, Juan Carlos, Erik, Rodolfo, Edtson, Oscar, Bibiana, Omar, Luci, Verónica, Aili, Manuel, Pedro, Carlos y Abigail.

A mis hermanas Rosa, Lourdes y Mary por su apoyo a lo largo de mi carrera profesional.

Al Dr. Antonio Flores Tlacuhauac por el curso de métodos numéricos que tome con el en la Universidad Iberoamericana.

Al CONACYT por la beca-credito No. 159490 otorgada durante estos dos años.

3

## Resumen

En esta tesis se utilizó un gradiente de velocidades generalizado para poder obtener, a través del modelo de mancuernas de extensión finita, el comportamiento de la viscosidad extensional de distintos tipos de flujos extensionales. El gradiente de velocidades que se manejo en esta tesis fue propuesto por Meissner. Este gradiente está en función de un parámetro, el cual se puede variar entre los valores de -0.5 a 1 y así obtener un gran número de flujos extensionales, incluyendo los más conocidos como son: uniaxial, planar y biaxial. En el modelo también se variaron otros parámetros como: las condiciones iniciales, el número de Débora, la concentración de la solución y la rigidez de las moléculas.

Aunque con el modelo obtenido es posible calcular la viscosidad extensional de diversos flujos se eligieron sólo cinco de éstos: uniaxial, planar, biaxial además de otros dos flujos que están entre los flujos uniaxial y planar y planar y biaxial; esto se realizó con el fin de apreciar cómo podría verse afectada la viscosidad extensional con el tipo de flujo.

Las gráficas de viscosidad extensional contra rapidez de extensión, obtenidas al resolver numéricamente el modelo propuesto, nuestran que las curvas de la viscosidad de cada flujo exiben dos zonas en donde la viscosidad es constante; además de que, para ciertas condiciones y flujos, algunas de estas curvas presentan histéresis, la cual es caractéristica de los modelos de mancuernas de extensión finita. También en estas gráficas se puede apreciar que el tipo de flujo extensional afecta a la primera y segunda zonas de viscosidad constante, de tal manera que para m > -0.5 la viscosidad en la primera zona es mayor que para el caso uniaxial (m = -0.5), mientras que en la segunda zona la viscosidad para m > -0.5 está por debajo de la viscosidad uniaxial. Por otra parte, en los resultados obtenidos se observa que en la primera zona existe cierta simetría entre los flujos planar y los flujos intermedios, uniaxial y planar y planar y biaxial, ya que la viscosidad planar resultó ser la media aritmética de las otras dos viscosidades. En esa misma zona los datos obtenidos con el modelo predicen que, a baja rapidez de extensión, la viscosidad extensional del flujo biaxial es siempre el doble de la viscosidad uniaxial.

Otra predicción del modelo es que, en algunos casos, puede apreciarse que a alta rapidez de extensión la viscosidad planar y uniaxial tienden al mismo valor límite. Este resultado es reportado por Petrie en uno de sus artículos, en el cual muestra un análisis asintótico del comportamiento de la viscosidad planar y uniaxial a fuerza grande para varios modelos tanto fenomenológicos como moleculares de soluciones diluidas de polímeros.

Por último, al variar el número de Débora ( $\alpha$ ) en el modelo los datos muestran que para  $\alpha = 0.1$  los flujos uniaxial, biaxial y planar cumplen con la regla de Trouton. Por otra parte, para ciertos flujos, como el biaxial, planar y los otros dos que son intermedios, las gráficas en donde se varió  $\alpha$ , presentan un máximo cuando el número de Débora toma los valores de 10 y 100.



## Índice

	0.1	Introducción	7
1	Flu	jos extensionales	. 8
	1.1	Definición e importancia de los flujos	
		extensionales	9
	1.2	Características principales de los flujos	
		extensionales	9
	1.3	Medición experimental de la viscosidad	
		extensional	10
	1.4	Tipos principales de flujos extensionales	11
		1.4.1 Flujo uniaxial	12
		1.4.2 Flujo biaxial	13
		1.4.3 Flujo planar	14
	1.5	Clasificación general de los flujos extensionales	15
		1.5.1 Clasificación de Meissner	15
		1.5.2 Clasificación de Stevenson	18
2	Mo	delos de mancuernas	20
	2.1	Modelo de mancuernas	21
		2.1.1 Función de distribución de configuraciones y su ecuación de difusión	23
	2.2	Modelo de mancuernas de extensión finita.	
		"Modelo de FENE"	25
		2.2.1 Modelo de Petrie (Caso uniaxial) [21]	25
0	٦	the first of the state of the s	20
3	2 1	Modele de Petrie con un fluie de extrución	04
	0.1	roueral	22
		3.1.1 Feugeiones has del modelo	22
		$3.1.2$ Interpretación de $u_1$ y $u_2$	34
		$3 \downarrow 3$ Desarrollo del modelo	37
4	Res	ultados y análisis de resultados	48
	4.1	Resultados	49
		4.1.1 Gráficas de viscosidad extensional contra rapidez de extensión de	
		los 5 flujos extensionales para los diferentes valores de $\nu$ y $\pi$	49

TESIS CON FALLA DE URIGEN

	4.2	4.1.2 4.1.3 4.1.4 Gráfica 4.2.1 4.2.2	Gráficas de la viscosidad extensional de los 5 flujos a diferente número de Débora63Gráficas de los 5 flujos a diferentes $\beta$ 87Gráficas variando b95as de la traza y la deformación102Gráficas de la traza y la deformación caso uniaxial102Gráficas de la traza y la deformación caso biaxial108
		4.2.3	Gráficas de la traza y la deformación caso planar
5	Case 5.1	caso a 5.1.1 5.1.2 5.1.3 5.1.4 5.1.5 5.1.6	tóticos121sintótico a fuerza pequeña122Análisis a fuerza pequeña122Relación de Trouton128Análisis a número de Débora pequeño129Modelo de Maxwell130Mancuernas de Hooke $(L \rightarrow \infty)$ 133Número de Débora grande135
6	Con	clusior	138

#### 6 Conclusiones

TESIS CON FALLA DE UNIGEN

6

## 0.1 Introducción

La reología es el estudio del flujo y la deformación de la materia. Dentro de esta disciplina se estudian los flujos extensionales de fluidos no newtonianos. Los tres principales flujos extensionales son: uniaxial, biaxial y planar. Aunque este tipo de flujos han sido estudiados desde mucho tiempo atrás, no fue sino hasta mediados de los sesentas que éstos cobraron mayor importancia [1]. Esto se debe en gran medida a que la industria ha reconocido la importancia que juegan las propiedades extensionales en diversos procesos como: flujo a través de medios porosos, crecimiento de cristales y procesos poliméricos (formación de fibras sintéticas, procesamiento de bolsas de plástico, termoformado, etc.) [2].

Hasta el momento, el estudio experimental y teórico de los flujos extensionales de polímero fundido ha tenido un mayor desarrollo en relación a las soluciones polímericas, ya que experimentalmente es más fácil obtener los flujos extensionales de los polímeros fundidos, y así, con los datos que se generan, comparar con los modelos propuestos. Sin embargo, los efectos de los flujos extensionales de las soluciones poliméricas pueden ser más relevantes que los de polímeros fundidos [3]. Por ejemplo, la adición de pequeñas cantidades de polímero a un fluido puede incrementar en gran medida la viscosidad extensional mientras que no afecta a la viscosidad cortante. Este incremento de la viscosidad extensional en la solución diluida aumenta la caída de presión de un flujo a través de un medio poroso, también puede reducir la turbulencia en un flujo a través de un tubo, o bien, estabilizar un fluido [4].

En cuanto al estudio teórico de los flujos extensionales de soluciones diluidas tenemos que el modelo más utilizando para predecir la viscosidad extensional es el de mancuernas [1], el cual fue utilizando por Petrie para describir el comportamiento de una solución diluida de polímero sometida a un flujo extensional uniaxial. Aunque experimentalmente el flujo uniaxial, tanto de polímeros fundidos como de soluciones polímericas, ha sido el más estudiado, existen diversos artículos en los cuales se han tratado de desarrollar equipos con los que se pueden medir la viscosidad extensional de los flujos biaxial y planar de soluciones poliméricas, [2][4][5], ya que estos o una combinación de ellos podrían estar relacionados en diversos procesos. Por esta razón se propuso un modelo que permitiera describir el probable comportamiento de la viscosidad extensional de diversos flujos en donde se incluyan el uniaxial, biaxial y planar.

#### Objetivos

- Mediante el modelo de mancuernas y el gradiente generalizado de velocidades de Meissner, estudiar el probable comportamiento de la viscosidad extensional de las soluciones diluidas de polímero en diferentes flujos extensionales variando diversos parámetros del modelo.
- Realizar un análisis asintótico.
- Interpretar los resultados obtenidos del estudio numérico con base en información teórica y experimental contenida en la bibliografía existente.

7

FALLE DE VALGEN

# Capítulo 1 Flujos extensionales

ጣ		(COM
FALLA	DE	UnitEN

# 1.1 Definición e importancia de los flujos extensionales

Un flujo extensional es aquel en el cual una partícula material del fluido tiende a estar alineada en la dirección principal del movimiento y tensionada por el gradiente de velocidad en esa dirección [11].

En los últimos 40 años los flujos extensionales han cobrado mayor importancia debido a que están presentes en diversos procesos tales como [1]: flujo a través de un medio poroso, obtención de fibras sintéticas y en diversos procesos poliméricos como pueden ser el termoformado, la producción de espumas y el moldeo por soplado [3]. Un ejemplo clásico en el cual está presente un flujo extensional es durante el proceso de formación de una fibra.

En este proceso existe una tensión a lo largo de la fibra lo que provoca que aumente su longitud en la dirección de la tensión; por continuidad sabemos que este aumento de longitud trae como consecuencia la disminución del diámetro del filamento. Este tipo de flujo es llamado uniaxial o extensional simple el cual se presentará con más detalle en las siguientes secciones.

Los flujos extensionales también pueden manifestarse en otras operaciones de procesamiento; así, por ejemplo, un cambio abrupto en la geometría del equipo o bien un flujo a través de una contracción repentina puede generar flujos con componentes extensionales. Otros ejemplos en los cuales la viscosidad extensional tiene un efecto importante son en los procesos de calandreo y recubrimiento.

Por último se crec que el fenómeno de Toms, en el cual una solución diluida de polímero (del orden de sólo unas partes por millón) es capaz de disminuir las pérdidas por fricción en diversos procesos, puede estar ligado con la viscosidad extensional y en particular a la inhibición de formación de vórtices en la capa límite por la viscosidad extensional que es muy alta [1].

# 1.2 Características principales de los flujos extensionales

Una de las características de los flujos extensionales es que las fuerzas que actúan sobre un elemento material pueden ser de dos tipos: tensión o compresión. Estas fuerzas son siempre normales al elemento material y si se dividen entre el área a las que son perpendiculares se obtienen los llamados esfuerzos normales. Las variables reológicas de los flujos extensionales, en contraste con los flujos cortantes, siempre están asociadas a la diferencia de los esfuerzos normales. Esto se debe a que en un cuerpo que está sometido a una deformación están presentes tanto la presión hidrostática del sistema como el esfuerzo debido al movimiento, por lo que el tensor de esfuerzo total es entonces la suma de estos dos términos (ecuación 1.1)

$$\underline{\sigma} = -p\underline{I} + \underline{\tau}$$

9

(1.1)



donde  $\underline{\sigma}$  es el tensor total de esfuerzo,  $\underline{I}$  es el tensor unitario,  $-p\underline{I}$  es la presión hidrostática y  $\underline{\tau}$  es el tensor de movimiento.

En una deformación extensional sólo están presentes los esfuerzos normales y, aunque la presión hidrostática también es perpendicular a la superficie del cuerpo, esta presión no contribuye a la deformación, pues actúa de forma isotrópica en el cuerpo; entonces la deformación se debe sólo a los esfuerzos normales, por lo que, para medir dicha deformación, es necesario restar dos de los componentes del tensor de esfuerzos, eliminando así el termino de la presión. Es por esta razón que las variables extensionales están en terminos de la diferencia de esfuerzos normales.

La siguiente característica tiene que ver con la rapidez de separación entre dos puntos materiales. En una deformación extensional la rapidez de separación entre dos puntos materiales es exponencial con respecto al tiempo, mientras que en una deformación cortante simple esta rapidez de separación es proporcional al tiempo. Debido a esta característica los flujos extensionales producen una mayor orientación en las moléculas que los flujos cortantes simples [12].

Una última característica de los flujos extensionales es la viscosidad. La viscosidad en flujo cortante simple se puede definir como la relación entre el esfuerzo cortante, al cual está sometida la partícula material, y la rapidez de deformación.

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_{xy}}{\dot{\gamma}} \tag{1.2}$$

En contraste al flujo cortante, en un flujo extensional las propiedades materiales se definen en función de la diferencia de esfuerzos normales. Una de estas propiedades es la viscosidad extensional, la cual se define como la relación entre la diferencia de esfuerzos normales y la rapidez de extensión (ecuación 1.3).

$$\eta_E(\dot{\epsilon}) = \frac{\Delta\sigma}{\dot{\epsilon}} \tag{1.3}$$

donde  $\Delta \sigma = \sigma_{11} - \sigma_{22}$ .

La viscosidad extensional, al igual que la cortante, puede ser función de la temperatura, presión y de los invariantes del tensor rapidez de deformación.

# 1.3 Medición experimental de la viscosidad extensional

La medición experimental de la viscosidad extensional es bastante difícil. La dificultad radica en el hecho de que, aunque en ocasiones es posible obtener el flujo extensional al cual está sometida la muestra, muchas veces no se alcanza el estado estacionario, y más difícil aún es mantenerlo. Estos problemas son más evidentes en las soluciones poliméricas que en los polímeros fundidos [3].

Debido a las dificultades mencionadas, muchas veces uno se debe de conformar con generar flujos que están dominados por extensión y, entonces, dirigir el problema a

FALLA DE UNICE

interpretar, de la mejor manera, los datos obtenidos de las funciones materiales que son reológicamente significativas [1].

A continuación se mencionan algunos métodos para generar flujos extensionales [1][3];

#### Polímeros fundidos

- Dispositivos a tensión constante
- Métodos homogéneos de extensión
- Compresión lubricada
- Compresión planar
- Técnica de tornillos rotatorios

Los dos primeros métodos son utilizados para generar un flujo uniaxial, mientras que la compresión lubricada se utiliza para el flujo biaxial. El dispositivo de tornillos rotatorios fue ulilizado por Meissner [6] para generar diversos tipos de flujos extensionales.

#### Soluciones de polímeros

- Formación de un filamento
- Método de sifón abierto
- Colapso de una burbuja
- Flujos estancados
- Boquillas no lubricadas
- Flujos de contracción

Con los tres primeros métodos se generan flujos uniaxiales, mientras que para generar los flujos biaxial y planar se utilizan las tres últimas técnicas.

## 1.4 Tipos principales de flujos extensionales

Existen tres tipos principales de flujos extensionales: uniaxial, biaxial y planar. A continuación se hace una descripción detallada de estos flujos.

TE	13	CON
FALLA	DE	UnidEN



Figura 1.1: Deformación uniaxial

#### 1.4.1 Flujo uniaxial

Este flujo es también llamado de extensión simple, se caracteriza por aplicar una fuerza de tensión en una dirección dada, por ejemplo en  $x_1$  (figura 1.1) y tener dos fuerzas de compresión en las direcciones  $x_2$  y  $x_3$ . Estas compresiones son iguales por lo que los esfuerzos normales  $\sigma_{22}$  y  $\sigma_{33}$  tienen la misma magnitud, debido a esta razón se dice que este flujo es axialmente simétrico [13].

El flujo uniaxial se caracteriza además por tener la siguiente distribución de velocidades:

$$v_1 = \dot{\varepsilon} x_1$$
$$v_2 = -\frac{1}{2} \dot{\varepsilon} x_2$$
$$v_3 = -\frac{1}{2} \dot{\varepsilon} x_3$$

donde  $\dot{\epsilon}$  es la rapidez de extensión (que puede ser función del tiempo). Debido a que sólo existen esfuerzos normales en los flujos extensionales, los únicos

componentes del tensor de esfuerzos que no son cero son los de la diagonal principal. Como ya se mencionó para el caso uniaxial,  $\sigma_{22}$  y  $\sigma_{33}$  son iguales, por lo que se pueden definir dos diferencias de esfuerzos normales.

$$\sigma_{11} - \sigma_{22} = \sigma_{11} - \sigma_{33} = \dot{\epsilon} \eta_E(\dot{\epsilon}) \tag{1.4}$$

donde  $\eta_E$  es la viscosidad extensional uniaxial que, en general, es función de la rapidez de extensión y del tiempo.

TEX	्रम् भूमे	CON
FALLA	Di	UniUEN

Existe además, para fluidos newtonianos, una relación teórica entre la viscosidad extensional uniaxial y la viscosidad newtoniana llamada regla de Trouton.

$$\eta_E = 3\eta_o$$

en la cual  $\eta_o$  es la viscosidad newtoniana. El flujo uniaxial está presente en procesos en los cuales existen esfuerzos de tensión en una dirección, como puede ser el caso de la obtención de fibras sinteticas.

#### 1.4.2 Flujo biaxial

En este flujo se aplican dos fuerzas de tensión, por ejemplo en las direcciones  $x_1 y x_2$ , tal que los esfuerzos generan un flujo de extensión en esas direcciones y una compresión en la dirección  $x_3$  (figura 1.2). La distribución de velocidades que caracteriza este tipo de flujo es:

$$v_1 = \dot{\epsilon} x_1$$
  
 $v_2 = \dot{\epsilon} x_2$   
 $v_3 = -2\dot{\epsilon} x_3$ 

mientras que las diferencias de esfuerzos normales, tomando en cuenta que  $\sigma_{11}$  y  $\sigma_{22}$  son iguales para el caso biaxial, están representadas por:

$$\sigma_{11} - \sigma_{33} = \sigma_{22} - \sigma_{33} = \dot{\epsilon} \eta_{EB}(\dot{\epsilon})$$

donde  $\eta_{EB}$  es la viscosidad extensional biaxial. La regla de Trouton para el flujo biaxial está dada por la siguiente relación:

$$\eta_{EB} = 6\eta_o \tag{1.5}$$

Los flujos biaxiales pueden encontrarse en procesos como son: termoformado, moldeo por soplado etc [3].

Se debe de mencionar que mientras en el flujo uniaxial existe una tendencia a alinear las moléculas en la dirección paralela al eje de simetría, en el flujo biaxial la deformación promueve una orientación en el plano perpendicular al eje de simetría [13], de hecho la orientación en el flujo biaxial es menos fuerte que en el flujo uniaxial, por lo que no es necesariamente cierto que el caso biaxial es el fenómeno contrario de la extensión uniaxial [3].

ידי <mark>די</mark>	NC.	CON
FALLA	DÊ	ORIGEN



Figura 1.2: Deformación biaxial

#### 1.4.3 Flujo planar

Al igual que en el caso uniaxial se aplica una fuerza de tensión en una dirección, por ejemplo  $x_1$ ; esto provoca que exista una deformación de alargamiento en esa dirección y como consecuencia, una deformación de compresión en las otras dos direcciones. Sin embargo, en el caso planar deseamos evitar la compresión en una de estas dos direcciones, por ejemplo  $x_3$ , de tal forma que para lograrlo es necesario aplicar un esfuerzo adicional de tensión en la dirección  $x_3$ , el cual no permite el flujo en esa dirección, entonces, toda la deformación por compresión estará en la dirección  $x_2$  y será de igual magnitud que la tensión en  $x_1$  pero de signo contrario (figura 1.3). Bajo este esquema, la distribución de velocidades es la siguiente:

$$v_1 = \dot{\varepsilon} x_1$$
$$v_2 = -\dot{\varepsilon} x_2$$
$$v_3 = -\dot{\varepsilon} x_2$$

las diferencias de esfuerzos normales están representadas por:

$$\sigma_{11} - \sigma_{22} = \dot{\varepsilon} \eta_{EP}^{1}(\dot{\varepsilon})$$

у

$$\sigma_{22}-\sigma_{33}=\dot{\epsilon}\eta^2_{EP}(\dot{\epsilon})$$

Hay que destacar que el caso planar los tres esfuerzos normales son diferentes, por lo que es posible definir dos diferencias de esfuerzos normales independientes [13].

La relación de Trouton para un fluido newtoniano sujeto a una deformación planar está dada por:

$$\eta_{EP} = 4\eta_o \tag{1.6}$$

ŢŢ		CON
FALLA	ĎЕ	UsingEN



Figura 1.3: Deformación Planar

## 1.5 Clasificación general de los flujos extensionales

Existen dos clasificaciones generales de flujos extensionales en las que los flujos uniaxial, biaxial y planar son casos especiales. Una de estas clasificaciones es propuesta por Stevenson [14]. En esta clasificación el flujo depende del valor de un parámetro "m", pero además debe de estar determinado por el signo del primer componente del tensor rapidez de deformación de tal forma que los valores de "m" están comprendidos entre -1 y -0.5. La segunda propuesta fue realizada por Meissner [6] en la cual el tipo de flujo está determinado unicamente por el valor de "m" cuyo valor se encuentra entre -0.5 y 1.

A continuación se presentan con más detalle estas dos clasificaciones.

#### 1.5.1 Clasificación de Meissner

La clasificación propuesta por Meissner [6] es válida para flujos extensionales homogéneos, los cuales tienen el siguiente tensor rapidez de deformación.

$$\underline{\dot{\varepsilon}} = \frac{1}{2} [\nabla \underline{\upsilon} + (\nabla \underline{\upsilon})^T] = \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}_{11} & 0 & 0\\ 0 & \dot{\varepsilon}_{22} & 0\\ 0 & 0 & \dot{\varepsilon}_{33} \end{pmatrix}$$
(1.7)

donde  $\nabla \underline{v}$  es el gradiente de velocidad y  $(\nabla \underline{v})^T$  es su transpuesto,  $\dot{\epsilon}_{ii}$  (ii no implica suma) puede ser función del tiempo. Para flujos extensionales con rapidez de deformación constante, los componentes del tensor  $\underline{\underline{e}}$  no son función del tiempo. Además se escoge un sistema de coordenadas que esté orientado de tal manera que siempre se cumpla que:

$$11 \ge \dot{\epsilon}_{22} \ge \dot{\epsilon}_{33}$$

(1.8)



15

Ė

Suponiendo que el sistema es incompresible

$$\dot{\varepsilon}_{11} + \dot{\varepsilon}_{22} + \dot{\varepsilon}_{33} = 0 \tag{1.9}$$

Analizando las condiciones 1.8 y 1.9 se deduce que sólo son necesarios dos parámetros para caracterizar este tipo de flujos.

- 1. La máxima rapidez de deformación  $\dot{\varepsilon}_0 = \dot{\varepsilon}_{11} > 0$
- 2. La relación  $m = \frac{\xi_{22}}{\xi_{11}}$

donde  $\dot{\epsilon}_0$  es la máxima rapidez de deformación y es constante. Con estos parámetros y la función escalón unitario

$$h(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ 1 & (t > 0) \end{cases}$$
(1.10)

el tensor rapidez de deformación 1.7 para rapidez de deformación constante se puede escribir de la siguiente manera

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}(t) = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{0} h(t) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & -(1+m) \end{pmatrix}$$
(1.11)

Entonces los valores de "m" están determinados por las ecuaciones 1.8 y 1.9, de tal forma que

$$-0.5 \le m \le 1$$

Si trazamos un plano  $\dot{\epsilon}_{11}\dot{\epsilon}_{22}$  encontramos que todos los flujos con rapidez de deformación constante están localizados en un punto del área sombreada de la figura 1.4, en donde existen tres casos especiales.

- a) Flujo extensional uniaxial m = -0.5
- b) Flujo extensional biaxial m = 1.0
- c) Flujo extensional planar m = 0

Para un flujo extensional incompresible sabemos que podemos definir tres diferencias de esfuerzos normales, las cuales denotaremos como:

$$\sigma_1 = \sigma_{11} - \sigma_{33}$$
  

$$\sigma_2 = \sigma_{22} - \sigma_{33}$$
  

$$\sigma_3 = \sigma_{11} - \sigma_{22}$$

donde  $\sigma_{11}, \sigma_{22}$  y  $\sigma_{33}$  son los componentes diagonales del tensor de esfuerzos.

目的 取ATILA	517 1516	
(ATTH)	שע	ORIGIN



Figura 1.4: Plano formado por  $\dot{\epsilon}_{11}\dot{\epsilon}_{22}$ 

Si, por ejemplo, tomamos una ecuación constitutiva para un líquido viscoelástico en el rango de viscosidad lineal, como es [6]:

$$\underline{\underline{\sigma}}(t) + p\underline{\underline{I}} = 2 \int_{-\infty}^{t} G(t - t') \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}(t') dt'$$
(1.12)

donde  $\underline{\sigma}$  es el tensor de esferzos total en el tiempo t, G(t-t') es el módulo de relajación, p es la presión hidrostática,  $\underline{I}$  es el tensor unitario y  $\underline{\dot{\epsilon}}(t')$  puede ser el tensor rapidez de deformación, definido en la ecuación 1.7. Entonces la primera diferencia de esfuerzos normales,  $\sigma_1$  esta representada por:

$$\sigma_1(t) = 2\underline{\dot{\varepsilon}}_0(2+m) \int_0^t G(t-t')dt' = 2\varepsilon_0(2+m)\eta(t)$$
(1.13)

de tal forma que así obtenemos la primera viscosidad extensional.

$$\eta_1(t) = \frac{\sigma_1}{2(2+m)\dot{\epsilon}_0}$$
(1.14)

 $\eta_1(t) = A_1 \frac{\sigma_1(t)}{\dot{\varepsilon}_0}$ 

De la misma manera definimos la segunda y tercera viscosidad extensional

$$\eta_2(t) = \frac{\sigma_2}{2(1+2m)\dot{\varepsilon}_0} = A_2 \frac{\sigma(t)}{\dot{\varepsilon}_0} \qquad (m \neq -0.5)$$
(1.15)

$$\eta_3(t) = \frac{\sigma_3}{2(1-m)\dot{\varepsilon}_0} = A_3 \frac{\sigma(t)}{\dot{\varepsilon}_0} \qquad (m \neq 1.0)$$
(1.16)

donde  $A_1 = \frac{1}{2(2+m)}$ ,  $A_2 = \frac{2}{2(1+2m)}$  y  $A_3 = \frac{1}{2(1-m)}$ .

ο

Debe de notarse que las tres viscosidades no son independientes, ya que una de las diferencias de esfuerzos normales se puede calcular con base en las otras dos, por

TES	SIS .	CUN
FALLA	DE	UHIGEN

17

a service a service of the	were a start of the	
$\eta_1 = \frac{\sigma_{11} - \sigma_{33}}{\epsilon_0}$	$\eta_2 = \frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\epsilon_0}$	$\eta_3 = \frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\epsilon_0}$
Extensión general con $\dot{e}$ constante $\frac{1}{2(2+m)}$	$\frac{1}{2(1+2m)}$	$\frac{1}{2(1-m)}$
Extensión uniaxial con $m = -0.5$ $\frac{1}{3}$	indefinida	1 3
Extensión biaxial con $m = 1.0$ $\frac{1}{6}$		indefinida
Extensión planar con $m = 0$ $\frac{1}{4}$	1/2	12

#### Tabla 1.1: Clasificación de Meissner

ejemplo  $\sigma_1 = \sigma_2 + \sigma_3$ , por lo cual Meissner deduce que las viscosidades extensionales se relacionan entre sí mediante la siguiente ecuación:

$$(2+m)\eta_1 = (1+2m)\eta_2 + (1-m)\eta_3 \tag{1.17}$$

La tabla 1.1 muestra las tres viscosidades extensionales a rapidez de extensión constante que se definieron previamente. En esta tabla se observa que para el caso uniaxial y biaxial tenemos dos viscosidades iguales y una que está indefinida. Este hecho se puede explicar mediante el tensor rapidez de deformación (ecuación 1.11) en donde podemos ver que para el caso uniaxial, donde m=-1/2, los componentes  $\dot{\epsilon}_{22}$  y  $\dot{\epsilon}_{33}$  tienen el mismo valor; basandose en este hecho podemos suponer que los componentes del tensor de esfuerzos,  $\sigma_{22}$  y  $\sigma_{33}$ , son iguales y, por lo tanto, la viscosidad  $\eta_2$  no existe o, según la tabla de Meissner, está indefinida, mientras que las viscosidades  $\eta_1$  y  $\eta_3$  tienen el mismo valor. El mismo argumento se aplica al caso biaxial de la tabla. En el flujo planar, los tres componentes del tensor rapidez de deformación y el de esfuerzos son diferentes (ver tensor 1.11 cuando m=0) por lo que existen tres viscosidades extensionales diferentes; sin embargo, como puede apreciarse en la ecuación 1.17, sólo dos de estas viscosidades son independientes.

#### 1.5.2 Clasificación de Stevenson

La clasificación de Steveson [14] tiene las mismas suposiciones que la de Meissner; por ejemplo, el tensor rapidez de deformación para un flujo extensional homogéneo es:

$$\underline{\underline{\Delta}} = \frac{1}{2} [\nabla \underline{\underline{\upsilon}} + (\nabla \underline{\underline{\upsilon}})^T] = \begin{pmatrix} \Delta_{11} & 0 & 0\\ 0 & \Delta_{22} & 0\\ 0 & 0 & \Delta_{33} \end{pmatrix}$$
(1.18)

donde  $\nabla \underline{v}$  es el gradiente de velocidad,  $(\nabla \underline{v})^T$  es su transpuesto y  $\Delta_{ii}$  (ii no especifica suma) son los componentes de la diagonal del tensor rapidez de deformación, estos son constantes con respecto al tiempo.



Flujo extensional	$\Delta_{11}$ $\Delta_{22}$	$\Delta_{33}$	Método $\Delta_{11}$	Propuesto "m"
Uniaxial	$a^{a} = \frac{a}{2}$	$\frac{-a}{2}$	+	-0.5
Caso1	a -0.85a	-0.15a	+	-0.85
Planar	<b>a</b> -a	0	+	-1.0
Caso2	-a 0.85a	0.15a	_	-0.85
Biaxial	-a <sup><u>a</u></sup> 2	<u>a</u> 2	+	-0.5

Tabla 1.2: Clasificación de Stevenson

 $a^{a} > 0$ 

Igualmente considera que los fluidos son incompresibles de tal forma que:

$$\Delta_{33} = -\Delta_{11} - \Delta_{22}$$

"m" queda también definida como:

$$n = -\frac{\Delta_{22}}{\Delta_{11}}$$

Sólo que la suposición de Meissner difiere de la de Stevenson de la siguiente forma:

$$|\Delta_{11}| > |\Delta_{22}| \ge |\Delta_{33}| \tag{1.19}$$

para todos los componentes no cero del tensor  $\Delta$ , y

$$\Delta_{11} > \Delta_{22} \tag{1.20}$$

$$\Delta_{33} = 0 \tag{1.21}$$

para un componente cero del tensor  $\Delta$ .

Utilizando las ecuaciones 1.19 y 1.20 y la suposición de incompresibilidad, Stevenson deduce que los valores de "m" están comprendidos entre -1 y -0.5. Pero además, para su clasificación de los flujos extensionales, propone que se tome en cuenta el signo de  $\Delta_{11}$ . La tabla 1.2 ilustra esta nueva clasificación en la que nuevamente los casos uniaxial, biaxial y planar son casos especiales.

Para fines de esta tesis se utilizará la convención de Meissner. La razón de utilizar esta clasificación es sólo por simplicidad, pues en esta clasificación sólo es necesario cambiar el valor de "m" para obtener los diferentes flujos sin necesidad de cambiar también el signo de "n", como lo propone Stevenson.

TE	313	CON
FALLA	DE	ORIGEN

# Capítulo 2 Modelos de mancuernas

![](_page_20_Picture_1.jpeg)

![](_page_21_Figure_0.jpeg)

Figura 2.1: Modelo de Mancuernas

## 2.1 Modelo de mancuernas

Los modelos más utilizados para representar soluciones diluidas de polímero son los de mancuernas, estos están basados en la teoría cinética y no obstante su sencillez, pues no consideran la naturaleza química ni la estructura de las macromoléculas, son capaces de describir cualitativamente las características de los flujos a los cuales se puede someter la solución.

La mancuerna es una representación idealizada de una macromolécula y el análisis del modelo se reduce al estudio de los cambios de conformación y orientación de la molécula (de forma de ovillo a otras completamente extendida) [15][16][17]. Los cambios de conformación de las macromoléculas están representados en el modelo por el vector de conformación  $\underline{\mathbf{R}}$  el cual posee capacidad de orientación y de extensión.

Las suposiciones en las cuales está basado el modelo son las siguientes [18]:

- 1. La mancuerna consiste de dos esferas de masa  $m_1$  y  $m_2$  y radios  $a_1$  y  $a_2$  respectivamente unidas por un resorte. Cada esfera está localizada por los vectores de posisción  $\underline{r}_1$  y  $\underline{r}_2$  en un sistema de coordenadas fijo. El vector de conformación  $\underline{R} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1$  especifica la distancia instantánea entre los centros de las esferas, además proporciona información a cerca de la orientación de las mancuernas en el espacio (ver figura 2.1).
- 2. Existen "n" mancuernas por unidad de volumen suspendidas en un disolvente newtoniano de viscosidad  $\eta_s$ . La solución se considera tan diluida que no existe interacción estre las mancuernas.

- El campo de velocidades del fluido, en el cual están suspendidas las mancuernas es homogéneo; es decir, el tensor rapidez de deformación es el mismo en todos los puntos del campo de velocidades.
- La presencia de las mancuernas no altera el campo de flujo en la vecindad de éstas.
- Las fuerzas a las cuales están sometidas las mancuernas en el campo de flujo son [15][17][18] [19]:
  - a) Fuerzas de fricción hidrodinámica  $\underline{F}_h$

Esta es la fuerza de fricción que experimentan las mancuernas por estar sumergidas en el disolvente. Se supone que está localizada en en las esferas de la mancuerna, y el efecto que tiene sobre ésta es de alargarla y orientarla.

La expresión de la fuerza está representada por la ley de Stokes que expresa que la fuerza de arrastre es proporcional a la velocidad relativa que existe entre las esferas y el disolvente; es decir

$$\underline{F}_h \propto \zeta_d \underline{V} \tag{2.1}$$

donde  $\underline{V} = (\underline{\dot{r}} - \underline{v})$  es la velocidad relativa entre una esfera y el disolvente, y  $\zeta_d$  es el coeficiente de fricción hidrodinámico que puede ser de tres diferentes tipos [15][17][19]:

I) Coeficiente de fricción independiente de la conformación e isotrópico.

- II) Coeficiente de fricción dependiente de la conformación e isotrópico.
- III) Coeficiente de fricción dependiente de la conformación y anisotrópico.
- IV) Coeficiente de fricción dependiente de la conformación e isotrópico y con ineficiencia en la deformación de la partícula durante el flujo.
- V) Coeficiente de fricción dependiente de la conformación y anisotrópico y con ineficiencia en la deformación de la partícula durante el flujo.

#### b) Fuerzas brownianas $\underline{F}_b$

La fuerza browniana ejercida por el medio circundante sobre las moléculas sumergidas es producida por el movimiento térmico aleatorio de las moléculas del disolvente. El bombardeo molecular del disolvente afecta la configuración de las cadenas por lo que las macromoléculas poseen una configuración variable.

Esta configuración variable hace necesario abordar el problema desde un enfoque estadístico, promediando los movimientos de un gran número de partículas a través de una función de distribución, la cual denotaremos como  $\psi$ ; esta función de distribución indica la probabilidad de que una partícula sea localizada en una posición específica, con una velocidad conocida y en un tiempo determinado. Entonces la fuerza browniana en términos de la función distribución está determinada por [15][17][18]:

$$\underline{F}_b = -kT\nabla\ln\psi \tag{2.2}$$

![](_page_22_Picture_17.jpeg)

El efecto que tiene la fuerza browniana en las moléculas es opuesto al de la fuerza hidrodinámica y del conector, pues tiende a desorientarlas.

#### c) La fuerza del conector $\underline{F}_c$

Es la consecuencia de la oposición de la cadena a deformarse, tiende a restaurarla a su configuración de filamento enrollado. La expresión que representa esta fuerza es,

$$\underline{F}_{c} = K\underline{R} \tag{2.3}$$

donde el factor "K" puede tomar diversas formas. La expresión más sencilla de este factor es cuando "K" es el módulo elástico, de tal forma que se obtiene la ley de Hooke, la cual expresa una relación lineal entre la fuerza elástica y la extensión de la molécula. Sin embargo, la forma de la ley de Hooke predice extensiones infinitas de las moléculas, lo cual es irreal, por lo que es necesario utilizar otras formas de mayor complejidad para "K" tal como la expresión de Warner, en la cual el factor "K" es una función no lineal de la magnitud del vector de configuración <u>R</u>. Esta expresión de Warner limita la extensión de las moléculas en el modelo.

Estas fuerzas que el modelo de mancuernas considera actúan en cada una de las moléculas y dan como resultado configuraciones de naturaleza aleatoria.

## 2.1.1 Función de distribución de configuraciones y su ecuación de difusión

Para tener en cuenta las distintas configuraciones de las moléculas es necesario definir una función de distribución de configuración. Esta función de configuración tiene las siguientes propiedades:

- 1.  $\psi(\underline{R},t)d\underline{R}$  representa el número de moléculas que pueden encontrarse en el intervalo de configuraciones <u>R</u> a <u>R</u>+d<u>R</u>.
- 2.  $\int_V \psi(\underline{R}, t) d\underline{R} = 1$  cuando se ha normalizado.
- 3.  $\langle P \rangle$  es el valor promedio de una cantidad dinámica P(R), definido por:

$$\langle P \rangle = \int_{V} P(\underline{R})\psi(\underline{R},t)d\underline{R}$$
 (2.4)

Por otra parte, la localización y orientación de las mancuernas en un determinado tiempo y un punto específico pueden obtenerse a partir de la ecuación de continuidad para  $\psi$ , la cual tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial \underline{R}} \cdot \underline{\dot{R}}\psi\right) \tag{2.5}$$

![](_page_23_Picture_14.jpeg)

La ecuación 2.5 representa la conservación de la probabilidad configuracional [18][17]. Si además realizamos un balance de las fuerzas que actúan en las moléculas, considerando que tenemos un coeficiente de fricción constante (isotrópico y sin dependencia del vector de configuración) e ignorando los términos inerciales tenemos [18]:

$$\underline{\dot{R}} = [\underline{\hat{k}} \cdot \underline{R}] - \frac{2kT}{\zeta_d} \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \ln \psi - \frac{2}{\zeta_d} \underline{F}_c \qquad (2.6)$$

donde k es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta del sistema,  $\zeta_d$  es el coeficiente de fricción hidrodinámico,  $\underline{\hat{k}}$  es el gradiente de velocidades y el término  $[\underline{\hat{k}} \cdot \underline{R}]$  la velocidad del sistema.

Si sustituimos la ecuación 2.6 en la ecuación 2.5 se obtiene la ecuación de difisión [18]:

$$\frac{\partial \psi}{dt} = -\left(\frac{\partial}{\partial \underline{R}} \cdot \left\{ [\underline{\hat{k}} \cdot \underline{R}] \psi - \frac{2kT}{\zeta_d} \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \psi - \frac{2}{\zeta_d} \underline{F}_{(c)} \psi \right\} \right)$$
(2.7)

El término del lado izquierdo de la ecuación 2.7 se refiere al cambio de las configuraciones con el tiempo. Mientras que el primer término del lado derecho tiene relación con la fuerza hidrodiámica, el segundo término está relacionado con la fuerza browniana y el último término se refiere a las fuerza del conector.

Entonces la ecuación 2.7 nos dice fisicamente que la distribución de configuraciones de las mancuernas cambia con el tiempo debido a que existen fuerzas de deformación (fuerza hidrodinámica) y de restauración (fuerzas browniana y del conector), por lo que el balance entre estas fuerzas determina las configuraciones de las mancuernas en un determinado tiempo.

Si reordenamos la ecuación 2.7 tenemos:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \left( [\underline{\hat{k}} \cdot \underline{R}] \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \psi \right) = \frac{2kT}{\zeta_d} \left( \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \psi \right) + \frac{2}{\zeta_d} \left( \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \cdot \underline{F}_{(c)} \psi \right)$$
(2.8)

Esta ecuación tiene la forma de una ecuación de difusión con el término convectivo del lado izquierdo y los términos difusivo y fuente del lado derecho.

Entonces, si se conoce la forma de la función distribución de configuraciones " $\psi$ " es posible conocer los múltiples cambios de configuración de las moléculas con respecto al tiempo. Sin embargo, manejar la ecuación en función de  $\psi$  resulta bastante difícil por lo que se prefiere manipular la ecuación de tal forma que la ecuación esté en términos del promedio de la cantidad dinámica se quiere determinar. En nuestro caso esta cantidad dinámica es la configuración de las mancuernas, es decir <u>R</u>; entonces para obtener la ecuación que describa cómo cambia el promedio de las configuraciones primero se multiplica la ecuación 2.8 por <u>RR</u> y después a la ecuación se le aplican las propiedades estadisticas de la función de distribución mencionadas al inicio de esta sección. Entonces la ecuación del promedio de configuraciones queda como:

$$\langle \underline{RR} \rangle_1 = \frac{4kT}{\zeta_d} \underline{l} - \frac{4}{\zeta_d} \langle \underline{RF}_c \rangle$$
 (2.9)

donde  $\langle \underline{RR} \rangle_1$  implica la derivada convectiva del promedio de las configuraciones.

![](_page_24_Picture_13.jpeg)

## 2.2 Modelo de mancuernas de extensión finita. "Modelo de FENE"

Un caso particular del modelo de mancuernas es aquel en el cual la fuerza del conector tiene como factor una función no lineal de la magnitud del vector de configuración. Una expresión muy utilizada de este tipo es la ley de Warner [20], de tal forma que  $\underline{F}_c$  es:

$$\underline{F}_{c} = \frac{H\underline{R}}{(1 - \frac{R^{2}}{L^{2}})}$$
(2.10)

donde H es el módulo del resorte, R es la magnitud del vector de configuración, y L es la máxima extensión de la mancuerna. Si comparamos la ecuación 2.10 con la ecuación 2.3, encontramos que, para el modelo de Warner,  $K = \frac{H}{1-R^2/L^2}$ , donde notamos que, si R es muy pequeña, entonces K=H, y se obtiene la ley de Hooke.

Los modelos de mancuernas que utilizan esta expresión son llamados modelos de mancuernas de extensión finita o modelos de "FENE – DUMBELL"<sup>1</sup> por sus siglas en inglés. Estos modelos limitan la extensión de la mancuerna.

Se debe mencionar que, en general, los modelos de mancuernas de extensión finita sometidos a flujos extensionales exhiben una curva de histéresis en la cual se observa un intervalo en el que existen tres posibles estados de las moléculas (enroscada, semienroscada y completamente extendida). El cambio de configuración de la molécula de enroscada a completamente extendida es discontinuo; es decir que es súbito, por lo que se dice que pertenece a una transición de primer orden [8].

### 2.2.1 Modelo de Petrie (Caso uniaxial) [21]

Petrie utilizó el modelo de mancuernas de extensión finita para describir cualitativamente el comportamiento de una solución polimérica diluida sometida a un flujo extensional uniaxial. Este flujo uniaxial se puede obtener en un dispositivo como el de la figura 2.2, en donde una solución diluida de polímero está contenida en un recipiente que tiene una contracción repentina; esta solución es extrudida continuamente y tensionada por un rodillo, de esta manera se genera un filamento que, como apreciamos, cambia de diámetro con la pisición x; esto se debe a que la gravedad va acelerando al filamento y, por lo tanto, el diámetro del filamento disminuye. Por otra parte, en la figura también podemos observar la zona de hinchamiento característica de las soluciones poliméricas que son sometidas a un cambio de dimensiones abrupto.

En este modelo, Petrie supone que las moléculas de polímero son representadas por mancuernas que están constituidas por dos esferas de masa  $m_1$  y  $m_2$  respectivamente; las esferas están unidas entre sí por un resorte sin masa. Sobre estas mancuernas actuán las siguientes fuerzas: 1) la fuerza hidrodinámica, cuyo coeficiente de fricción es constante, 2) la fuerza browniana y 3) la fuerza del conector, la cual está representada

TF	1771 11-	()nai
FALLA	))É	URIGEN

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Finitely Extensible Nonlinear Elastic-Dumbell

![](_page_26_Figure_0.jpeg)

Figura 2.2: Reómetro de flujo uniaxial

por la expresión de Warner, es decir, la extensión de la mancuerna es finita. Como se mencionó en las secciones anteriores, las fuerzas a las que se somenten las mancuernas hacen que éstas tengan muchas configuraciones que se representan mediante el vector de configuración  $\underline{R}$ ; por lo tanto, la dinámica del promedio de las configuraciones puede ser obtenido por una ecuación de difusión.

Por otra parte, la viscosidad extensional se define teóricamente de la siguiente manera [7]:

$$\eta_E = \lim_{t \to \infty} \left[ \frac{\sigma_E(t, \dot{\varepsilon})}{\dot{\varepsilon}} \right]$$
(2.11)

donde  $\sigma_E$  es la diferencia de esfuerzos normales.

Esta definición exige que la viscosidad extensional se determine en estado estacionario y que, al ser la viscosidad extensional una función material, el esfuerzo,  $\sigma_E$ , y la rapidez de extensión,  $\dot{\epsilon}$ , sean constantes. Sin embargo, tales condiciones son difíciles de satisfacer experimentalmente, pues, por ejemplo, en el caso de la formación de un filamento de longitud L, es decir durante una extensión uniaxial, el campo de velocidades es no homogéneo, ya que la rapidez de extensión es diferente en cada punto del filamento, por lo que se obtienen diferentes viscosidades de una misma solución polimérica (ver figura 2.2). Entonces, tenemos en realidad una viscosidad extensional dependiente de la posición y de otros paramétros. Esta viscosidad es llamada por Petrie como viscosidad del filamento [7].

$$\eta_{filamento}(X,..) = \left[\frac{\sigma_{sp}(X,..)}{\dot{\epsilon}(X,..)}\right]$$
(2.12)

Esta expresión muestra de forma más clara cómo la viscosidad extensional dependen tanto de la posición, X, como de otras variables tales como el tiempo, la temperatura, la

TT:		CON
FALLA	ĎЬ	UnivEN

composición, concentración y la presión. Como lo muestra Petrie en su artículo [7] esta definición de la viscosidad extensional es más cercana a la definición de la viscosidad extensional transitoria:

$$\eta_E^+ = \left[\frac{\sigma_E(t,\hat{\epsilon})}{\dot{\epsilon}}\right] \tag{2.13}$$

Como hemos visto en la ecuación 2.12, la viscosidad extensional de un filamento es función de la posición y, para evitar tener viscosidades extensionales diferentes en cada punto, Petrie propone tomar la viscosidad en un punto determinado. Como experimentalmente sería impráctico tomar la viscosidad cuando  $X \rightarrow \infty$  (en forma análoga al caso estacionario) Petrie propone tomar la medición de la viscosidad a la mitad del filamento [21] y así minimizar los efectos de entrada y de salida del filamento. Entonces, en el modelo de Petrie, el experimento para determinar la viscosidad extensional sería el siguiente: generar un filamento de una determinada longitud, el cual estará sometido a una fuerza externa de tensión; este procedimiento genera un flujo extensional uniaxial y la viscosidad asociada a este flujo será determinada a la mitad del filamento suponiendo estado estacionario. Después generar otro filamento sometido a una fuerza de tensión diferente y determinar nuevamente la viscosidad extensional a la mitad del filamento continuar así hasta obtener la curva completa de viscosidad. Por lo tanto, cada punto en la curva de viscosidad extensional del modelo de Petrie representa un experimento diferente.

#### 2.2.1.1 Ecuaciones del modelo de Petrie

El modelo se desarrolla en coordenadas cilíndricas, pues como puede observarse en la figura 2.2, son las más adecuadas debido a la geometría del problema. Se puede comenzar partiendo de la ecuación constitutiva del tensor de esfuerzos. En el caso de un sistema polímero solvente, este tensor es el resultado de la contribución tanto del polímero como del solvente a la tensión de la solución, por lo que la ecuación es la siguiente:

$$\underline{\sigma} = -P\underline{l} + \underline{S} + 2\eta_s \underline{D} \tag{2.14}$$

donde  $\underline{\sigma}$  es el tensor de esfuerzos, P<u>I</u> es la presión hidrostática, <u>S</u> es la contribución del polímero a la tensión y el producto  $2\eta_s \underline{D}$  es la contribución del solvente a la tensión suponiendo que el solvente es de naturaleza newtoniana. Notar que, si comparamos la ecuación 2.14 con la ecuación 1.1, el tensor de movimiento está asociado con <u>S</u> +  $2\eta_s \underline{D}$ .

La ecuación constitutiva de la contribución del polímero esta dada por:

$$\underline{\underline{S}} = \left[\frac{nH}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right] \underline{\underline{A}} - \frac{Gb}{(b+2)}\underline{\underline{I}}$$
(2.15)

Esta ecuación es el resultado de un análisis molécular basado en la teoría cinética en donde se supone que la contribución del polímero a la tensión de la solución polimérica se debe a dos mecanismos principalmente [18]:

![](_page_27_Picture_10.jpeg)

- Contribución debida a la tensión generada por el conector entre las esferas de la mancuerna.
- Contribución por el movimiento de las esferas, pues éstas transportan momentum.

Por otra parte, el tensor <u>A</u> es el tensor configuración, <u>A</u> =< <u>RR</u> >, donde <u>R</u> es el vector de configuración y el significado de <> involucra el promedio de la función distribución  $\psi(\underline{R})$  visto en la sección 2.1.1. Entonces, realizando un balance de fuerzas y utilizando la ecuación de continuidad de  $\psi$ , como se hizó en la sección 2.1.1, tenemos que el promedio de las configuraciones del sistema está determinado por:

$$\lambda \underline{\check{A}} + \left[\frac{1}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right] \underline{\underline{A}} = \frac{a^2b}{3(b+2)} \underline{\underline{I}} = \frac{Gb}{nH(b+2)} \underline{\underline{I}} = \frac{L^2}{(b+2)} \underline{\underline{I}}$$
(2.16)

La ecuación 2.16 es semejante a la ecuación 2.9 y donde  $\underline{\underline{A}}$  involucra la derivada convectiva del promedio de las configuraciones, es decir,

$$\underline{\check{A}} = \frac{\partial \underline{A}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{A} - (\underline{A} \cdot \nabla \underline{v} + (\nabla \underline{v})^T \cdot \underline{A})$$
(2.17)

donde  $(\nabla \underline{v})^T$  es el transpuesto del gradiente de velocidades. Las variables características involucrados en la ecuación 2.16 están definidas de la siguiente manera:

- $\lambda = \zeta_d/(4H)$ , es un tiempo de relajación. Este tiempo característico relaciona el equilibrio que existe entre la fuerza de arrastre que experimenta una mancuerna y la fuerza del conector.
- $\theta = L^2 \zeta_d / (12kT)$ , este es un segundo tiempo característico que relaciona el movimiento de una mancuerna totalmente extendida, es decir, es un balance entre la fuerza de arrastre y la difusión browniana, que al igual que el resorte tiende a enroscar la molécula.
- $b = 3\theta/\lambda = HL^2/kT$  es una comparación entre los tiempos característicos que da como resultado la relación que existe entre el modulo elástico (H) y la configuración de la mancuerna debido al movimiento browniano (kT).
- G = nkT donde "n" es el número de mancuernas por unidad de volumen, a una temperatura absoluta T y k es la constante de Boltzmann. Por lo tanto, G relaciona la configuración de las moléculas de polímero debido al bombardeo que sufren por parte de las moléculas de solvente una temperatura determinada.
- $a^2 = L^2 \lambda / \theta = 3G/nH$  se interpreta como una dimensión molecular característica. Esta variable relaciona la configuración de las moléculas de polímero debida al efecto térmico y el efecto elástico.

![](_page_28_Picture_12.jpeg)

![](_page_29_Figure_0.jpeg)

#### Tabla 2.1: Variables del modelo de Petrie

#### 2.2.1.2 Ecuaciones adimensionales del modelo de Petrie

Para obtener las ecuaciones adimensionales del modelo de Petrie se utilizan las variables adimensionales de la tabla 2.1. En esta tabla  $U_o$ , es la velocidad del filamento en x=0, donde x=0 se toma a partir de la zona en donde ya no existe el efecto de hinchamiento, L es la longitud del filamento, <u>F</u> es la fuerza a la que está sometido el filamento, Q es el flujo de la solución,  $\eta_p$  es la viscosidad del polímero y  $\eta_s$  es la viscosidad del solvente. Además Petrie define las siguientes cantidades adimensionales:

$$y = \frac{A_{xx} - A_{RR}}{L^2}$$
(2.18)

$$z = \frac{trA}{L^2} = \frac{A_{xx} + 2A_{RR}}{L^2}$$
(2.19)

donde y nos relaciona la deformación que sufre el ovillo y z es la longitud que alcanza éste; debemos notar que estas dos variables están normalizadas con respecto al cuadrado de la longitud máxima de la mancuerna, L, por lo que, el valor más alto que pueden alcanzar es uno.

Ahora bien, sustrayendo los componentes RR y XX de la ecuación 2.16 y utilizando el hecho de que, para el flujo uniaxial, los componentes del tensor deformación son:

$$D_{xx} = U'(X) \text{ y } D_{RR} = \frac{1}{2}U'(X)$$

n
<b>4</b> 2
_

TE	<u>di</u> d	CUN	
FALL	13	Under	<u>I</u>

#### tenemos que

$$\alpha u\dot{y} - \alpha(y+z)\dot{u} + \frac{y}{1-z} = 0 \qquad (2.20)$$

De igual manera tomando la traza de la ecuación 2.16

$$\alpha u \dot{z} - 2\alpha y \dot{u} + \frac{z}{1-z} = \frac{3}{b+2}$$
(2.21)

donde  $\alpha$  es el número de Debora,  $\alpha = \lambda U_o/L_s$ . Este número describe la relación entre el tiempo característico del material y su tiempo de procesamiento [23]. Hay que mencionar que para indicar la diferencial en esta tesis se utilizó la notación de Newton y que esta diferenciación es con respecto a  $\chi = X/L_s$ .

Para la ecuación de la rapidez de deformación se realiza un balance de fuerzas, el cual se adimensionaliza con los siguientes parámetros :  $S_{ii} = \frac{Q}{FU_0}\sigma_{ii}$ (donde ii no implica suma),  $\beta = \eta_p/(\eta_s + \eta_p)$ , y  $\zeta = (\eta_s + \eta_p)Q/FL_s$ , donde  $\zeta$  es el inverso de la fuerza en forma adimensional. Por otra parte, la viscosidad del polímero está determinada por  $\eta_p = \lambda G$ . Entonces la ecuación queda como sigue:

$$\frac{\alpha u}{\zeta} = \frac{b\beta y}{1-z} + 3(1-\beta)\alpha \dot{u}$$
(2.22)

Las condiciones iniciales están dadas por los valore que toman y, z y u en x = 0. Para determinar estos valores en las dos primeras variables utilizaremos las ecuaciones: 2.18, 2.19 y 2.15 de las cuales tenemos que:

$$N_1 = \frac{Q}{FU_o}(S_{XX} - S_{RR}) = \frac{b\beta\zeta}{\alpha}\frac{y}{1-z}$$
(2.23)

$$T_{p} = \frac{Q}{FU_{o}} tr \underline{\underline{S}} = \frac{b\beta\zeta}{\alpha} \left( \frac{z}{1-z} - \frac{3}{b+2} \right)$$
(2.24)

 $N_1$  corresponde a la diferencia de esfuerzos normales en su forma adimensional y  $T_p$  es la traza del tensor de esfuerzos también en su forma adimensional.

Si evaluamos  $N_1$  y  $T_p$  en x = 0 denotando a  $N_1(0) = \nu$  y  $T_p(0) = \pi$  obtenemos las condiciones iniciales cuyas expresiones son:

$$z(0)\left(\frac{b+5}{b+2} + \frac{\alpha\pi}{b\beta\zeta}\right) = \frac{3}{b+2} + \frac{\alpha\pi}{b\beta\zeta}$$
(2.25)

$$y(0) = \frac{\alpha\nu}{b\beta\zeta} [1-z(0)] \qquad (2.26)$$

Estas condiciones iniciales  $y(0) \neq z(0)$  reflejan la deformación y la longitud inicial del ovillo.

THE THE	CON
FALLE SE	UnitEN

Por otra parte, la velocidad inicial evaluada en x = 0, es la unidad, ya que como puede verse en la tabla 2.1 la velocidad adimensinal está normalizada con respecto a la velociadad que tiene el ovillo al inicio del filamento, es decir, u(0) = 1.

Por último, la viscosidad extensional uniaxial, puede calcularse como la relación entre el esfuerzo extensional adimensional y la rapidez de extensión [11]; como ya se mencionó la viscosidad extensional se evalúa a la mitad del filamento por las razones antes comentadas:

$$\eta_{sp} = \frac{u(x)}{\zeta \dot{u}(x)} \tag{2.27}$$

donde  $\eta_{sp}$  es la viscosidad extensional del filamento; esta viscosidad es adimensional y la variable característica que se utilizó para adimensionalizarla fue la viscosidad total de la solución a baja rapidez de extensión, es decir  $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$  [11]. Por lo tanto, la viscosidad extensional del filamento,  $\eta_{sp}$ , es una relación entre la viscosidad extensional, evaluada en algún punto del filamento, y la viscosidad total de la solución a baja rapidez de extensión.

Por otra parte, la viscosidad extensional promedio está determinada por [11],

$$\overline{\eta}_{sp} = \frac{1}{\zeta lnu(1)} \tag{2.28}$$

donde esta viscosidad, al igual que la anterior, es adimensional.

Las ecuaciones 2.20, 2.21 y 2.22, junto con las condiciones iniciales, forman un sistema de ecuaciones diferenciales del que está compuesto el modelo Petrie, éste es utilizado para calcular la viscosidad extensional del flujo uniaxial de una solución diluida de polímero.

Para generar cada curva de viscosidad en el artículo de Petrie [21] se varía la fuerza que se aplica al filamento,  $\zeta$ , desde 0.0007 hasta 500, además se fijan los valores de los siguientes paramétros:  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\pi$ ,  $\nu$  y b. Entonces, cada punto en la curva de viscosidad extensional corresponde a un valor del paramétro de fuerza diferente. Esto puede entenderse de la siguiente manera: se genera un flujo extensional uniaxial, utilizando una determinada fuerza de tensión, se procede a medir la viscosidad extensional uniaxial a la mitad del filamento, suponiendo que se ha alcanzado el estado estacionario, este experimento corresponde un punto en la curva de la viscosidad. Para obtener el siguiente punto de la curva se cambia la fuerza de tensión del filamento y se mide nuevamente la viscosidad extensional utilizando el procedimiento anterior. Esto se repite hasta tener un barrido en un intervalo de fuerzas que permita obtener la curva completa de la viscosidad extensional. Entonces, cada punto de la curva puede ser visto como un experimento diferente.

]]	<u> </u>	<u>uusi</u>	
<b>E</b> ALica	135	U.S. EN	Į

# Capítulo 3 Modificación al modelo de Petrie

![](_page_32_Picture_1.jpeg)

# 3.1 Modelo de Petrie con un flujo de extensión general

En el capítulo dos se realizó un resumen del modelo de mancuernas y también se presentó el modelo de Petrie para el caso del flujo uniaxial. En este capítulo se modificará el modelo de Petrie introduciendo el tensor de deformación propuesto por Meissner [6]. La razón de utilizar este tensor y no el de Stevenson [14] es por simplicidad puesto que sólo tenemos que variar el valor de "m" comprendido entre -0.5 y 1 y así obtener los diferentes flujos extensionales, es decir, el flujo uniaxial (m=-0.5), planar (m=0), biaxial (m=1) así como flujos intermedios.

Se debe de aclarar que debido a que Petrie está considerando una geometría cilíndrica de la muestra que está sometida a la deformación extensional, éste utiliza los subíndices de los componentes de los tensores como XX, RR, y  $\theta\theta$ . Sin embargo, para el desarrollo de este modelo se utilizarán subíndices numéricos, los cuales siguen la siguiente convención: se identifica como 1 a la dirección del flujo, y 2 y 3 a las direcciones neutrales.

#### 3.1.1 Ecuaciones base del modelo

Como se ha mencionado, en el modelo de Petrie las moléculas de polímero están idealizadas como mancuernas de extensión finita, por lo que utiliza un conector tipo Warner con un coeficiente de fricción constante; es decir que no depende de la conformación y es isotrópico.

Las ecuaciones base para el desarrollo del modelo modificado son:

• Ecuación constitutiva de la solución (ecuación 2.14)

$$\underline{\sigma} = -P\underline{I} + \underline{S} + 2\eta_s \underline{D} \tag{3.1}$$

• Ecuación constitutiva de la contribución del polímero al tensor de esfuerzos de la solución (ecuación 2.15).

$$\underline{\underline{S}} = \left[\frac{nH}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right]\underline{\underline{A}} - \frac{Gb}{(b+2)}\underline{\underline{I}}$$
(3.2)

• Ecuación del promedio de configuraciones (ecuación 2.16).

$$\lambda \underline{\check{A}} + \left[\frac{1}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right] \underline{\check{A}} = \frac{a^2b}{3(b+2)} \underline{\check{L}} = \frac{Gb}{nH(b+2)} \underline{\check{L}} = \frac{L^2}{(b+2)} \underline{\check{L}}$$
(3.3)

• El tensor rapidez de deformación propuesto por Meissner [6].

$$\underline{\underline{D}} = \hat{\epsilon} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & -(1+m) \end{pmatrix}$$
(3.4)

donde, si m=-0.5, se obtiene el flujo uniaxial.

24) 1 (1)	e 1931
FALLE	 MERICAL

Utilizando las mismas variables adimensionales propuestas por Petrie

$$y_1 = \frac{A_{11} - A_{22}}{L^2} \tag{3.5}$$

$$z = \frac{trA}{L^2} = \frac{A_{11} + A_{22} + A_{33}}{L^2}$$
(3.6)

Otra modificación que se realiza en el modelo de Petrie es que, se define una segunda diferencia de componentes del tensor de configuración, la cual se denota como " $y_2$ ". Esta segunda diferencia se introduce de forma análoga al artículo de Dealy [13], de tal forma que, para los casos en los cuales la deformación extensional no es axialmente simétrica, se definen dos diferencias normales de esfuerzos. Entonces, la segunda diferencia de componentes del tensor de configuración es la siguiente:

$$y_2 = \frac{A_{22} - A_{33}}{L^2} \tag{3.7}$$

en donde, para el caso uniaxial,  $A_{22} = A_{33}$ ,  $y_2 = 0$  y  $y_1 = y^{1}$ .

Por último, las variables características que se utilizan para obtener las ecuaciones adimensionales del modelo son las que se mencionan en la sección 2.2.1.2 del capítulo 2.

#### **3.1.2** Interpretación de $y_1$ y $y_2$

Una interpretación física de  $y_1$  y  $y_2$  puede darse con base en argumentos geométricos. Tomemos primero el vector de configuración que se muestra en la figura 2.1. Este vector puede situarse en el origen de un sistema coordenados de ejes fijos, y descomponerlo en sus tres componentes normales  $R_1$ ,  $R_2$  y  $R_3$  que son paralelos a los ejes de coordenadas (ver figura 3.1).

Podemos realizar la suma de los vectores normales  $\underline{R_1}$  y  $\underline{R_2}$ 

$$\underline{P} = \underline{R_1} + \underline{R_2} = [R_1, 0, 0] + [0, R_2, 0] = [R_1, R_2, 0]$$
(3.8)

así como también restarlos.

$$\underline{Q} = \underline{R_1} - \underline{R_2} = [R_1, 0, 0] - [0, R_2, 0] = [R_1, -R_2, 0]$$
(3.9)

De los vectores resultantes  $\underline{P}$  y  $\underline{Q}$  puede obtenerse el producto punto que queda como:

$$\underline{P} \cdot \underline{Q} = ([R_1, R_2, 0] \cdot [R_1, -R_2, 0] = R_1^2 - R_2^2$$
(3.10)

Por otra parte, si realizamos el producto exterior del vector R, tenemos que

$$\underline{RR} = \begin{pmatrix} R_1 R_1 & R_1 R_2 & R_1 R_3 \\ R_2 R_1 & R_2 R_2 & R_2 R_3 \\ R_3 R_1 & R_3 R_2 & R_3 R_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix}$$
(3.11)

<sup>1</sup>Los subíndices numéricos 11, 22 y 33 corresponden en la nomenclatura de Petrie a XX, RR, 00.

![](_page_34_Figure_18.jpeg)

![](_page_35_Figure_0.jpeg)

Figura 3.1: Vector de configuración

Por lo que podemos identificar a  $R_1^2$  con el primer componente de la diagonal del tensor configuración <u>RR</u> y a  $R_2^2$  con el segundo componente de la diagonal de dicho tensor. Entonces:

$$R_1^2 - R_2^2 = R_{11} - R_{22} \tag{3.12}$$

Debemos recordar que el producto punto se puede expresar también como el producto de la magnitud de los vectores involucrados por el coseno del ángulo que foman entre ellos, entonces la ecuación 3.12 puede expresarse como:

$$R_1^2 - R_2^2 = R_{11} - R_{22} = |P||Q|\cos\theta \tag{3.13}$$

Ahora bien, si al inicio el vector <u>R</u> está en su condición de equilibrio, entendiendose como equilibrio el hecho de que la magnitud de dicho vector es la que corresponde a una mancuerna que no está sometida a ningún tipo de fuerza que la deforme, entonces podemos encerrar a dicho vector en un cubo, en donde sus aristas coinciden con las componentes normales del vector <u>R</u> (ver figura 3.2). Dentro de este cubo podemos trazar la suma y resta de las componentes normales <u>R</u><sub>1</sub> y <u>R</u><sub>2</sub> que estarán sobre un plano del cubo. En las condiciones de equilibrio mencionadas, tenemos que los vectores <u>P</u> y <u>Q</u> forman un ángulo de 90 grados en el plano en el cual están situados dichos vectores. Si este mismo cubo es sometido a una fuerza que dé lugar a una deformación, por ejempo del tipo uniaxial en la cual existe una fuerza de extensión en una dirección ( $x_1$ ) y una fuerza de contracción en las otras dos direcciones, tenemos que el ángulo de los vectores <u>R</u><sub>1</sub> y <u>R</u><sub>2</sub>, deformando el plano que forman dichos vectores. Entonces, utilizando la

	-	COM .
FALLE	hà	onall


Figura 3.2:

ecuación 3.13, podemos asociar a la diferencia de  $R_{11} - R_{22}$ , que es el resultado de un producto punto entre las componentes del vector configuración, con la deformación del plano que forman los vectores  $\underline{R}_1$  y  $\underline{R}_2$ , puesto que, si el ángulo entre  $\underline{P}$  y  $\underline{Q}$  es 90°, entonces el coseno de este ánagulo es cero y, por lo tanto,  $R_{11} - R_{22} = 0$ ; es decir que no existe deformación. Pero si el ángulo es diferene de 90° el coseno es diferente de cero, y existe deformación. Se debe notar que no existe deformación en el plano que forman los vectores  $R_2$  y  $R_3$  puesto que la contracción en esas dos direcciones es la misma, como lo muestra la figura 1.1, y por lo tanto, el cambio de magnitud en esos dos vectores es el mismo, por lo que se conserva la forma.

Si hacemos el mismo ejercicio para una deformación biaxial tenemos que existen fuerzas de extensión en dos direcciones,  $x_1 \ y \ x_2$ , y una fuerza de contracción en dirección  $x_3$ . En el caso biaxial, las fuerzas de extensión son de la misma magnitud, por lo que tienden a alargar al cubo en esas dos direcciones en la misma proporción, lo cual da lugar a que el plano formado por los vectores  $R_1 \ y \ R_2$  no pierda su forma y que el ángulo formado por  $Q \ y \ P$  sea siempre de 90°; entonces, como no podemos referir la deformación que sufre el cubo mediante estos vectores se define otra cantidad que sí permita evaluar el cambio. Esta cantidad está referida a los componentes normales  $R_2 \ y \ R_3$  del vector de configuración, ya que al ser sometido el cubo a una deformación biaxial la magnitud de estos dos vectores es distinta a la inicial (ver figura 3.3).

De forma análoga al análisis anterior, tenemos que la suma y resta de dichos componentes da lugar a los vectores <u>E</u> y <u>F</u>

$$\underline{E} = \underline{R_2} + \underline{R_3} = [0, R_2, 0] + [0, 0, R_3] = [0, R_2, R_3]$$
(3.14)

У

$$\underline{F} = \underline{R_2} - \underline{R_3} = [0, R_2, 0] - [0, 0, R_3] = [0, R_2, -R_3]$$
(3.15)

Realizando el producto punto entre  $\underline{E}$  y  $\underline{F}$ 

$$R_2^2 - R_3^2 = R_{22} - R_{33} = |E||F|\cos\theta$$
(3.16)

en donde podemos identificar a los componentes diagonales de la ecuación 3.11. Los vectores  $\underline{E}$  y  $\underline{F}$  en condiciones de equilibrio forman un ángulo de 90° y al ser sometido

TES	<u>TS</u> (	NOT	
FALLA	DE	CalifEN	



a una deformación biaxial, el ángulo entre dichos vectores cambia. Por lo tanto, nuevamente el producto punto entre estos vectores nos da una idea de la deformación que está sufriendo el cubo.

En conclusión, las diferencias  $R_{11} - R_{22}$  y  $R_{22} - R_{33}$  nos proporcionan una idea de la deformación que sufre el cubo en diferentes direcciones. Si además estas diferencias se dividen entre el cuadrado de la longitud característica, tenemos, entonces, una deformación referida a una configuración básica de referencia. Por lo tanto, las ecuaciones 3.5 y 3.7 se pueden interpretar como deformaciones adimensionales en dos distintas direcciones. La ecuación 3.5 será nombrada, a lo largo de esta tesis, como deformación uno o primera deformación, mientras que 3.7 será la deformación dos, o bien, segunda deformación.

### 3.1.3 Desarrollo del modelo

En este capítulo se deducen con mayor detalle las ecuaciones del modelo.

Desarrollaremos primero los tres componentes del tensor configuración utilizando la ecuación 2.16.

Primero tomamos la definición de la derivada conformacional de  $\underline{A}$  de la ecuación 2.17, la desarrollamos en sus componentes  $\check{A}_{11}$ ,  $\check{A}_{22}$  y  $\check{A}_{33}$ , suponiendo estado estacionario.

$$\tilde{A}_{11} = v_1 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_3} - \frac{\partial v_1}{\partial x_1} A_{11} - \frac{\partial v_1}{\partial x_2} A_{21}$$

$$- \frac{\partial v_1}{\partial x_3} A_{31} - A_{11} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} - A_{12} \frac{\partial v_1}{\partial x_2} - A_{13} \frac{\partial v_1}{\partial x_3}$$

$$\tilde{A}_{22} = v_1 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_3} - \frac{\partial v_2}{\partial x_1} A_{12} - \frac{\partial v_2}{\partial x_2} A_{22}$$

$$- \frac{\partial v_2}{\partial x_3} A_{32} - A_{21} \frac{\partial v_2}{\partial x_1} - A_{22} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} - A_{23} \frac{\partial v_2}{\partial x_3}$$
(3.17)

37

$$\tilde{A}_{33} = v_1 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_3} - \frac{\partial v_3}{\partial x_1} A_{13} - \frac{\partial v_3}{\partial x_2} A_{23}$$

$$- \frac{\partial v_3}{\partial x_3} A_{33} - A_{31} \frac{\partial v_3}{\partial x_1} - A_{32} \frac{\partial v_3}{\partial x_2} - A_{33} \frac{\partial v_3}{\partial x_3}$$
(3.19)

Agrupando términos y teniendo en cuenta la simetría del tensor rapidez de deformación:

$$\check{A}_{11} = v_1 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_3}$$

$$-2A_{11} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} - 2A_{21} \frac{\partial v_1}{\partial x_2} - 2A_{31} \frac{\partial v_1}{\partial x_3}$$
(3.20)

$$\tilde{A}_{22} = v_1 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_3}$$

$$-2A_{21} \frac{\partial v_2}{\partial x_1} - 2A_{22} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} - 2A_{23} \frac{\partial v_2}{\partial x_3}$$

$$(3.21)$$

$$\dot{A}_{33} = v_1 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_3} - 2A_{31} \frac{\partial v_3}{\partial x_1} - 2A_{32} \frac{\partial v_3}{\partial x_2} - 2A_{33} \frac{\partial v_3}{\partial x_3}$$
(3.22)

Del tensor deformación sabemos que:

$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & 0 & 0\\ 0 & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} = \dot{\varepsilon} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & m & 0\\ 0 & 0 & -(1-m) \end{pmatrix}$$
(3.23)

Si  $U_o$  es la velocidad en x=0 y U es la velocidad del fluido  $0 < x \le Ls$ , entonces la derivada de la velocidad con respecto a la posición " $\dot{U}$ " es constante e igual a  $\dot{\epsilon}$ , por tanto, el tensor deformación se puede escribir como:

$$\underline{\underline{D}} = \dot{U} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & -(1-m) \end{pmatrix}$$
(3.24)

Entonces podemos concluir que,

$$\frac{\partial v_1}{\partial x_2} = \frac{\partial v_1}{\partial x_3} = \frac{\partial v_2}{\partial x_1} = \frac{\partial v_2}{\partial x_3} = \frac{\partial v_3}{\partial x_1} = \frac{\partial v_3}{\partial x_2} = 0$$

además:

1	TE			
FAI	). E	망난	UILLUEN	

$$\frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \dot{U} \quad \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = m\dot{U} \quad \frac{\partial v_3}{\partial x_3} = -(1+m)\dot{U}$$

Sustituyendo estos resultados en la ecuaciones 3.20, 3.21 y 3.22,

$$\check{A}_{11} = v_1 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_3} - 2A_{11} \dot{U}$$
(3.25)

$$\check{A}_{22} = v_1 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_3} - 2m A_{22} \dot{U}$$
(3.26)

$$\check{A}_{33} = v_1 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_3} + 2(1+m)A_{33}\dot{U}$$
(3.27)

Entonces sustituyendo las ecuaciones 3.25, 3.26 y 3.27 en la ecuación constitutiva del tensor configuración (ecuación 3.3) tenemos que los componentes de esta ecuación son:

$$\lambda \left\{ v_1 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_3} - 2A_{11} \dot{U} \right\} +$$
(3.28)  
$$\left[ \frac{1}{(1 - \frac{R^2}{L^2})} \right] A_{11} = \frac{a^2 b}{3(b+2)} \delta_{11} = \frac{Gb}{nH(b+2)} \delta_{11} = \frac{L^2}{(b+2)} \delta_{11}$$

Sabemos que  $\delta_{11} = 1$ , puesto que es uno de los componentes del tensor unidad, además si definimos  $\left[\frac{1}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right]$  como  $Z(R^2)$  donde la relación  $R^2/L^2$  se asocia con la traza (z) del tensor configuración, entonces,  $Z(R^2) = \left[\frac{1}{1-z}\right]$ , por lo que la ecuación 3.28 queda como:

$$\lambda \left\{ v_1 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_3} - 2A_{11} \dot{U} \right\} +$$

$$Z(R^2)A_{11} = \frac{a^2b}{3(b+2)} = \frac{Gb}{nH(b+2)} = \frac{L^2}{(b+2)}$$
(3.29)

Similarmente para los otros dos componentes,

$$\lambda \left\{ v_1 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_3} - 2mA_{22}\dot{U} \right\} +$$
(3.30)  
$$Z(R^2)A_{22} = \frac{a^2b}{3(b+2)} = \frac{Gb}{nH(b+2)} = \frac{L^2}{(b+2)}$$
  
$$\left\{ v_1 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_3} + 2(m+1)A_{33}\dot{U} \right\} +$$
(3.31)  
$$Z(R^2)A_{33} = \frac{a^2b}{3(b+2)} = \frac{Gb}{nH(b+2)} = \frac{L^2}{(b+2)}$$

dur alsi (	الذباء
FALLE US	EN

Restando la ecuación 3.30 a la ecuación 3.29 tenemos que

$$\lambda \left\{ v_1 \frac{(\partial A_{11} - A_{22})}{\partial x_1} + v_2 \frac{(\partial A_{11} - A_{22})}{\partial x_2} + v_3 \frac{(\partial A_{11} - A_{22})}{\partial x_3} + 2\dot{U}(mA_{22} - A_{11}) \right\} (3.32) + Z(R^2)(A_{11} - A_{22}) = 0$$

Para adimensionalizar la ecuación 3.33 utilizamos las siguentes variables adimensionales:

 $v_1 = uU_o \quad y \quad \chi = xL$ 

por lo cual

$$\frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \frac{\partial v_1}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \chi} = \frac{U_o}{L} \frac{\partial u}{\partial x_1} = \frac{U_o}{L} \dot{u}$$
(3.33)

Del tensor rapidez de deformación sabemos que  $\frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \dot{U}$ , entonces

$$\dot{U} = \frac{U_o}{L} \frac{\partial u}{\partial x_1} = \frac{U_o}{L} \dot{u}$$
(3.34)

Tomando las definiciones de las variables adimensionales tenemos

$$\frac{\partial (A_{11} - A_{22})}{\partial x_1} = \frac{\partial (A_{11} - A_{22})}{\partial y_1} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \chi} = \frac{L^2 \dot{y}_1}{L} = L \dot{y}_1$$
(3.35)

Supongamos ahora que las diferencias del tensor de configuración sólo son función de una de las coordenas. Esta suposición está basada en el hecho de que se pueden asociar las deformaciones de un elemento al cambio en una de las coordenadas. Tomemos por ejemplo el caso uniaxial, si observamos la figura 1.1 notamos que la extensión del cubo en la dirección  $x_1$  ocurre a expensas de la contracción en las otras dos direcciones y, por conservación de masa, las suma de la cantidad que se contrae debe ser igual a la cantidad que se estira; por lo tanto, basta con medir el cambio de longitud en una sola dirección para saber como se deforma la muestra; esto mismo puede aplicarse a los flujos biaxial y planar. Bajo esta suposición, podemos decir que las diferencias del tensor deformación sólo varían en la dirección  $x_1$  entonces  $(A_{11} - A_{22}) \neq f(x_2, x_3)$  y, por lo tanto, la ecuación 3.33 queda como,

$$\lambda \left\{ u U_o L y_1 - 2 \frac{U_o}{L} \dot{u} (A_{11} - m A_{22}) \right\} + Z(R^2) y_1 L^2 = 0$$
(3.36)

Si sumamos y restamos  $(A_{22})$  a la ecuación 3.36 y factorizamos términos

$$\lambda \left\{ u U_o L \dot{y}_1 - 2 \frac{U_o}{L} \dot{u} \left( A_{11} - A_{22} + (1 - m) A_{22} \right) \right\} + Z(R^2) y_1 L^2 = 0$$
(3.37)

Por otra parte, haciendo una combinación de las definiciones de  $y_1, y_2$  y z tenemos

$$y_1 - y_2 = \frac{A_{11} - A_{22}}{L^2} - \frac{A_{22} - A_{33}}{L^2} = \frac{A_{11} - 2A_{22} + A_{33}}{L^2}$$
(3.38)



y

$$y_1 - y_2 - z = \frac{A_{11} - 2A_{22} + A_{33}}{L^2} - \frac{A_{11} + A_{22} + A_{33}}{L^2} = -\frac{3A_{33}}{L^2}$$
(3.39)

por lo tanto

$$A_{22} = \frac{L^2(y_2 + z - y_1)}{3}$$
(3.40)

entonces la ecuación 3.37 queda como

$$\lambda \left\{ u U_o L \dot{y}_1 - 2 \frac{U_o}{L} \dot{u} \left( L^2 y_1 + (1-m) \frac{L^2 (y_2 + z - y_1)}{3} \right) \right\} + Z(R^2) y_1 L^2 = 0 \quad (3.41)$$

Si factorizamos y cancelamos términos

$$\frac{\lambda U_o}{L} \left\{ u \dot{y}_1 - 2 \dot{u} \left( y_1 + (1-m) \frac{(y_2 + z - y_1)}{3} \right) \right\} + Z(R^2) y_1 = 0$$
(3.42)

donde, como ya mencionamos  $\frac{\lambda U_a}{L}$  es el número de Débora, el cual denotamos como  $\alpha$ , y  $Z(R^2) = \frac{1}{1-z}$ ; por lo tanto, utilizando estos resultados y reordenando la ecuación 3.42 tenemos que

$$\alpha u \dot{y}_1 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u} \left[ y_1 (m+2) + (1-m)(y_2 + z) \right] + \frac{y_1}{1-z} = 0 \tag{3.43}$$

Se debe de observar que si m=-0.5 (caso uniaxial) y  $y_2 = 0$  (condición inicial) la ecuación 3.43 se reduce al modelo de Petrie; por lo tanto, hay consistencia con la ecuación 2.20.

Restando la ecuación 3.31 a la ecuación 3.30 tenemos la segunda diferencia del tensor de configuración  $y_2$ :

$$\lambda \{ v_1 \frac{(\partial A_{22} - A_{33})}{\partial x_1} + v_2 \frac{(\partial A_{22} - A_{33})}{\partial x_2} + v_3 \frac{(\partial A_{22} - A_{33})}{\partial x_3} - (3.44)$$
  
$$2 \dot{U} (m A_{22} - (m+1)A_{33}) \} + Z(R^2) (A_{11} - A_{22}) = 0$$

Para adimensionalizar la ecuación 3.45 realizamos las siguientes operaciones:

$$\dot{U} = \frac{U_o}{L} \frac{\partial u}{\partial x_1} = \frac{U_o}{L} \dot{u}$$
(3.45)

$$\frac{\partial(A_{22}-A_{33})}{\partial x_1} = \frac{\partial(A_{22}-A_{33})}{\partial y_2} \frac{\partial y_2}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \chi} = \frac{L^2 \dot{y}_2}{L} = L \dot{y}_2$$
(3.46)

Bajo el mismo argumento que se utilizó para  $(A_{11} - A_{22})$ , suponemos nuevamente que las diferencias del tensor rapidez de deformación sólo varían en la dirección  $x_1$  entonces  $(A_{22} - A_{33}) \neq f(x_2, x_3)$ ; por lo tanto, la ecuación 3.46 queda como,

$$\lambda \left\{ u U_o L \dot{y}_2 - 2 \frac{U_o}{L} \dot{u} (m A_{22} + (m+1)A_{33}) \right\} + Z(R^2) y_2 L^2 = 0$$
(3.47)



Sumando y restando  $(mA_{33})$  a la ecuación 3.47 y factorizando términos

$$-\lambda \left\{ uU_oLy_2 - 2\frac{U_o}{L}\dot{u}\left(m(A_{22} - A_{33}) + (2m+1)A_{33}\right)\right\} + Z(R^2)y_2L^2 = 0$$
(3.48)

Por otra parte, haciendo una combinación de la definiciones de  $y_1$ ,  $y_2$  y z tenemos:

$$y_1 + 2y_2 = \frac{A_{11} - A_{22}}{L^2} + \frac{2A_{22} - 2A_{33}}{L^2} = \frac{A_{11} + 2A_{22} - 2A_{33}}{L^2}$$
(3.49)

y

$$y_1 + 2y_2 - z = \frac{A_{11} + A_{22} - 2A_{33}}{L^2} - \frac{A_{11} + A_{22} + A_{33}}{L^2} = -\frac{3A_{33}}{L^2}$$
(3.50)

por lo tanto:

$$A_{33} = \frac{L^2(z - y_1 - 2y_2)}{3} \tag{3.51}$$

entonces, la ecuación 3.48 queda como:

$$\lambda \left\{ u U_o L \dot{y}_2 - 2 \frac{U_o}{L} \dot{u} \left( m L^2 y_2 + (2m+1) \frac{L^2 (z - y_1 - 2y_2)}{3} \right) \right\} + Z(R^2) y_2 L^2 = 0 \quad (3.52)$$

Si factorizamos y cancelamos términos:

$$\frac{\lambda U_o}{L} \left\{ u \dot{y}_2 - 2 \dot{u} \left( m y_2 + (2m+1) \frac{(z-y_1-2y_2)}{3} \right) \right\} + Z(R^2) y_1 = 0$$
(3.53)

donde  $\frac{\lambda U_2}{L}$  es el número de Débora ( $\alpha$ ) y  $Z(R^2) = \frac{1}{1-z}$ . Utilizando estos resultados y reordenando la ecuación 3.53, tenemos que:

$$\alpha u y_2 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u} \left[ (2m+1)(z-y_1) - y_2(m+2) \right] + \frac{y_2}{1-z} = 0$$
 (3.54)

Se debe de observar que si m=-0.5 (caso uniaxial) y  $y_2(0) = 0$  (condición inicial) la ecuación 3.54 se anula.

Para obtener la ecuación de la traza utilizamos la ecuación 3.3, y queda:

$$\lambda \tilde{A}_{ij} + \left[\frac{1}{(1 - \frac{R^2}{L^2})}\right] A_{ij} = \frac{a^2 b}{3(b+2)} \delta_{ij} = \frac{Gb}{nH(b+2)} \delta_{ij} = \frac{L^2}{(b+2)} \delta_{ij}$$
(3.55)

Tomando la traza de la ecuación 3.55, tenemos:

$$tr\left\{\lambda\tilde{A}_{ij} + Z(R^2)A_{ij}\right\} = tr\left\{\frac{a^2b}{3(b+2)}\delta_{ij}\right\} =$$

$$tr\left\{\frac{Gb}{nH(b+2)}\delta_{ij}\right\} = tr\left\{\frac{L^2}{(b+2)}\delta_{ij}\right\}$$
(3.56)

TRAN	∩∩NI
FALLE OF	U.L. EN

Si sustituimos los resultados de las ecuaciones 3.18, 3.19 y 3.20, tenemos que:

$$\lambda \left\{ v_1 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{11}}{\partial x_3} - 2A_{11} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + v_1 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{22}}{\partial x_2} + (3.57) \frac{\partial A_{22}}{\partial x_3} - 2A_{22} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + v_1 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial A_{33}}{\partial x_3} - 2A_{33} \frac{\partial v_3}{\partial x_3} + Z(R^2) \left[A_{11} + A_{22} + A_{33}\right] = \frac{a^2b}{(b+2)} = \frac{3Gb}{nH(b+2)} = \frac{3L^2}{(b+2)}$$

Factorizando términos y suponiendo que  $(A_{11} + A_{22} + A_{33}) \neq f(x_2, x_3)$ ,

$$\lambda \left\{ v_1 \frac{\partial (A_{11} + A_{22} + A_{33})}{\partial x_1} - 2 \left( A_{11} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + A_{22} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + (3.58) \right) \right\}$$
$$A_{33} \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right\} + Z(R^2) \left[ A_{11} + A_{22} + A_{33} \right] = \frac{a^2 b}{(b+2)} = \frac{3Gb}{nH(b+2)} = \frac{3L^2}{(b+2)}$$

Del tensor rapidez de deformación sabemos que

$$A_{11}\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + A_{22}\frac{\partial v_2}{\partial x_2} + A_{33}\frac{\partial v_3}{\partial x_3} = A_{11}\dot{U} + mA_{22}\dot{U} - (m+1)A_{33}\dot{U} = (3.59)$$
$$\dot{U}(A_{11} + mA_{22} - (m+1)A_{33})$$

Utilizando la ecuación 3.34

$$A_{11}\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + A_{22}\frac{\partial v_2}{\partial x_2} + A_{33}\frac{\partial v_3}{\partial x_3} = \frac{\dot{u}U_o}{L}(A_{11} + mA_{22} - (m+1)A_{33})$$
(3.60)

Por otra parte:

$$\frac{\partial(A_{11} + A_{22} + A_{33})}{x_1} = \frac{\partial(A_{11} + A_{22} + A_{33})}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial x_1} = \frac{L^2 \dot{z}}{L} = L \dot{z}$$
(3.61)

además:

$$v_1 = uU_o$$
 y  $z = \frac{A_{11} + A_{22} + A_{33}}{L^2}$ 

Entonces, si sustituimos  $v_1$  y z, además de las ecuaciones 3.60 y 3.61 en la ecuación 3.59, tenemos:

$$\lambda \left\{ uU_o L\dot{z} - \frac{2\dot{u}U_o}{L} \left[ A_{11} + mA_{22} - mA_{33} - A_{33} \right] \right\} + Z(R^2)L^2 z = (3.62)$$
$$\frac{a^2b}{(b+2)} = \frac{3Gb}{nH(b+2)} = \frac{3L^2}{(b+2)}$$

Agrupando términos, la ecuación 3.63 queda como:

$$\lambda \left\{ uU_o L\dot{z} - \frac{2\dot{u}U_o}{L} \left[ L^2(y_1 + y_2) + mL^2 y_2 \right] \right\} + Z(R^2)L^2 z = (3.63)$$
$$\frac{a^2 b}{(b+2)} = \frac{3Gb}{nH(b+2)} = \frac{3L^2}{(b+2)}$$

Factorizando y sustituyendo el valor de  $Z(R^2)$ :

$$\frac{\lambda U_o}{L} \left\{ u\dot{z} - 2\dot{u}[y_1 + (m+1)y_2] \right\} + \frac{z}{1-z} = \frac{a^2b}{L^2(b+2)} = (3.64)$$
$$\frac{3Gb}{L^2nH(b+2)} = \frac{3}{(b+2)}$$

Sustituyendo el número de Débora:

$$\alpha u\dot{z} - 2\dot{u}[y_1 + (m+1)y_2] + \frac{z}{1-z} = \frac{a^2b}{L^2(b+2)} = \frac{3Gb}{L^2nH(b+2)} = \frac{3}{(b+2)}$$
(3.65)

### Ecuación de momentum

Para la ecuación de momentum realizamos un balance de las fuerzas a las cuales está sometida la mancuerna:

$$\underline{F} = [(\sigma_{11} - \sigma_{22}) + (\sigma_{22} - \sigma_{33})]A_s(x_1)$$
(3.66)

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\underline{p}\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}} + 2\eta_{\underline{s}}\underline{\underline{D}}$$
(3.67)

Por componentes, la ecuación 3.67 es:

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij} + 2\eta_s D_{ij} \tag{3.68}$$

Entonces:

$$\sigma_{11} = -p\delta_{11} + S_{11} + 2\eta_s D_{11} \tag{3.69}$$

$$\sigma_{22} = -p\delta_{22} + S_{22} + 2\eta_s D_{22} \tag{3.70}$$

$$\sigma_{33} = -p\delta_{33} + S_{ij} + 2\eta_s D_{ij} \tag{3.71}$$

Sustituyendo en la ecuación 3.66 tenemos:

$$\frac{F}{A_s(x_1)} = \left[-p + S_{11} + \eta_s D_{11} - (-p + S_{22} + \eta_s D_{22}) + \right]$$
(3.72)

$$(-p + S_{22} + \eta_s D_{22}) - (-p + S_{33} + \eta_s D_{33})$$

Factorizando y cancelando términos, obtenemos:

$$\frac{F}{A_s(x_1)} = \left[ (S_{11} - S_{22}) + \eta_s(D_{11} - D_{22}) + (S_{22} - S_{33}) + \eta_s(D_{22}) - D_{33}) \right] \quad (3.73)$$

Utilizando la ecuación 3.2, sabemos que:

$$S_{11} = \left[\frac{nH}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right] A_{11} - \frac{Gb}{(b+2)} \delta_{11}$$
(3.74)  
44   
TECH! (10 N

FALLA DA OSCIA

$$S_{22} = \left[\frac{nH}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right] A_{22} - \frac{Gb}{(b+2)}\delta_{22}$$
(3.75)

$$S_{33} = \left[\frac{nH}{(1-\frac{R^2}{L^2})}\right] A_{33} - \frac{Gb}{(b+2)}\delta_{33}$$
(3.76)

y  $D_{11} = \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \dot{U}$ ,  $D_{22} = \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = m\dot{U}$  y  $D_{33} = \frac{\partial v_3}{\partial x_3} = -(m+1)\dot{U}$ por lo cual, la ecuación 3.73 queda como:

$$\frac{F}{A_s(x_1)} = \left[\frac{nH}{1-z}[(A_{11} - A_{22}) + (A_{22} - A_{33})] + 2\eta_s(m+2)\dot{U}\right]$$
(3.77)

Sustituyendo las definiciones de  $y_1$  y  $y_2$ 

$$\frac{F}{A_s(x_1)} = \left[\frac{nH}{1-z}(y_1+y_2)L^2 + 2\eta_s(m+2)\dot{U}\right]$$
(3.78)

Para adimensionalizar la ecuación utilizaremos las siguientes variables de la tabla 2.1  $\zeta = \frac{\eta Q}{FL} = \frac{\eta A_s v_1}{FL}, \ \beta = \frac{\eta_p}{\eta} \ \text{y} \ v_1 = u U_o, \text{ además de } nH = \frac{bG}{L^2} \text{ y} \ \eta_p = G\lambda, \text{ por lo tanto, la}$ ecuación 3.78 queda como:

$$\frac{u}{\zeta}\alpha = \frac{\beta b}{(1-z)}(y_1+y_2) + 2(1-\beta)(m+2)\alpha \dot{u}$$
(3.79)

Para evaluar las condiciones iniciales del sistema utilizaremos el tensor de configuración, pues sus valores iniciales reflejan la longitud y deformación de la mancuerna. Las variables que se necesitan para adimensionalizar la ecuación son:

 $y_1 = \frac{A_{11} - A_{22}}{L^2}, \quad y_2 = \frac{A_{22} - A_{33}}{L^2}, \quad z = \frac{A_{11} + A_{22} + A_{33}}{L^2}, \quad a^2 = \frac{L^2 \lambda}{\theta} = \frac{3G}{nH}, \quad \alpha = \frac{\lambda U_a}{L},$  $\zeta = \frac{(\eta_s - \eta_p)Q}{FL}, \quad \beta = \frac{\eta_p}{\eta}, \quad y \quad \eta_p = \lambda G.$ 

Entonces de las ecuaciones 3.74, 3.75 y 3.76 tenemos:

$$S_{11} - S_{22} = \left[\frac{nH}{(1 - \frac{R^2}{L^2})}\right] \frac{A_{11} - A_{22}}{L^2} = bG\frac{y_1}{1 - z}$$
(3.80)

у

$$S_{22} - S_{33} = \left[\frac{nH}{(1 - \frac{R^2}{L^2})}\right] \frac{A_{22} - A_{33}}{L^2} = bG\frac{y_2}{1 - z}$$
(3.81)

Adimensionalizando la ecuación 3.80 obtenemos:

$$\frac{Q}{FU_o}(S_{11} - S_{22}) = \frac{b\beta\zeta}{\alpha} \frac{y_1}{1 - z}$$
(3.82)

Definiendo a  $N_1$  como la variable adimensional de la primera diferencia de esfuerzos, es decir

$$N_1 = \frac{Q}{FU_o}(S_{11} - S_{22}) \tag{3.83}$$

Entonces 3.82 queda como:

$$N_1 = \frac{b\beta\zeta}{\alpha} \frac{y_1}{1-z} \tag{3.84}$$

Para la ecuación 3.81 se procede de manera similar a la ecuación anterior, y se define  $N_2$  como una variable adimensional de la segunda diferencia de esfuerzos:

$$N_2 = \frac{b\beta\zeta}{\alpha} \frac{y_2}{1-z} \tag{3.85}$$

Para la condición inicial de la traza tenemos que:

$$S_{11} + S_{22} + S_{33} = tr\underline{\underline{S}} = \left[\frac{nH}{(1 - \frac{R^2}{L^2})}\right] (A_{11} + A_{22} + A_{33}) - \frac{3Gb}{B+2}$$
(3.86)

Si se adimensionaliza la ecuación tenemos:

$$\frac{Q}{FU_o} tr \underline{S} = \frac{b\beta\zeta}{\alpha} \left\{ \frac{z}{1-z} - 3b + 2 \right\}$$
(3.87)

Si definimos a  $\frac{Q}{FU_{o}}tr\underline{S}$  como  $T_{p}$ , la ecuación 3.87 queda como:

$$T_p = \frac{b\beta\zeta}{\alpha} \left\{ \frac{z}{1-z} - 3b + 2 \right\}$$
(3.88)

Evaluando la condición inicial, es decir, en x=0, y definimos a  $T_p$  como  $\pi$ ,  $N_1$  como  $\nu_1$  y  $N_2$  como  $\nu_2$  las ecuaciones 3.84, 3.85 y 3.88 quedan de la siguiente forma:

$$y_1(0) = \frac{\alpha \nu_1}{b\beta \zeta} [1 - z(0)]$$
(3.89)

$$y_2(0) = \frac{\alpha \nu_2}{b \beta \zeta} [1 - z(0)]$$
 (3.90)

$$z(0)\left(\frac{b+5}{b+2} + \frac{\alpha\pi}{b\beta\zeta}\right) = \frac{3}{b+2} + \frac{\alpha\pi}{b\beta\zeta}$$
(3.91)

Por lo tanto, el sistema de ecuaciones diferenciales que componen al modelo son las siguientes:

$$\alpha u \dot{y}_1 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u} \left[ y_1(m+2) + (1-m)(y_2+z) \right] + \frac{y_1}{1-z} = 0$$
(3.92)

$$\alpha u \dot{y}_2 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u} \left[ (2m+1)(z-y_1) - y_2(m+2) \right] + \frac{y_2}{1-z} = 0$$
(3.93)

$$\alpha u\dot{z} - 2\dot{u}[y_1 + (m+1)y_2] + \frac{z}{1-z} = \frac{a^2b}{L^2(b+2)} = \frac{3Gb}{L^2nH(b+2)} = \frac{3}{(b+2)}$$
(3.94)



46

$$\frac{u}{\zeta}\alpha = \frac{\beta b}{(1-z)}(y_1+y_2) + 2(1-\beta)(m+2)\alpha \dot{u}$$
(3.95)

Las condiciones iniciales para resolver el sistema son:

$$y_1(0) = \frac{\alpha \nu_1}{b\beta \zeta} [1 - z(0)]$$
(3.96)

$$y_2(0) = \frac{\alpha \nu_2}{b \beta \zeta} [1 - z(0)]$$
(3.97)

$$z(0)\left(\frac{b+5}{b+2} + \frac{\alpha\pi}{b\beta\zeta}\right) = \frac{3}{b+2} + \frac{\alpha\pi}{b\beta\zeta}$$
(3.98)

$$u(0) = 1 \tag{3.99}$$

Por otra parte la viscosidad extensional se evaluará de forma análoga a la viscosidad de filamento propuesta por Pretie (ecuación 2.27). De esta manera la viscosidad extensional adimensional de los diferentes flujos se determina por:

$$\eta_E^m = \frac{u(x)}{\zeta \dot{u}(x)} \tag{3.100}$$

donde E indica que la viscosidad calculada es la extensional, y m implica el tipo de flujo. Además, la viscosidad será evaluada en x = 0.5.

TESTO	abu -
FALLES	เวลาสะได้ได้

## Capítulo 4

## Resultados y análisis de resultados

48

### 4.1 Resultados

El sistema de ecuaciones diferenciales del capítulo tres se resolvió, junto con sus condiciones de frontera, de forma numérica utilizando el paquete de Mathematica. Con este programa se llevaron a cabo diferentes cálculos en donde se variaron los siguientes parámetros del modelo:

- Tipo de flujo (m)
- Condiciones iniciales  $(\pi y \nu)$
- Número de Débora  $(\alpha)$
- Rigidez de la molécula (b)
- Concentración de la solución polimérica  $(\beta)$

Aunque el modelo permite variar el parámetro "m" entre los valores de -0.5 y 1, se escogieron sólo cinco valores, de tal forma que se incluyeran los tres casos más característicos de los flujos extensionales, como son: uniaxial (m=-0.5), planar (m=0) y biaxial (m=1), los otros dos valores son: m=-0.3 y m=0.3, sin nombre específico.

Como se mencionó en el capítulo dos, los valores de la viscosidad extensional obtenidos con el programa son el resultado de resolver el sistema de ecuaciones diferenciales junto con sus condiciones iniciales, ecuaciones 3.92-3.100, variando la fuerza adimensional en un intervalo que va desde 0.0007 hasta 500 y tomando el valor de la viscosidad extensional obtenida para cada valor de la fuerza en x=0.5. Realizando estos cálculos se obtuvieron gráficas de viscosidad extensional contra rapidez de deformación que se muestra en las siguientes secciones.

# 4.1.1 Gráficas de viscosidad extensional contra rapidez de extensión de los 5 flujos extensionales para los diferentes valores de $\nu$ y $\pi$

Las gráficas 4.1, 4.2, 4.3, 4.4 y 4.5 muestran el comportamiento de la viscosidad extensional de los diferentes flujos cuando se varían los paramétros  $\nu$  y  $\pi$ . Se debe mencionar que  $\alpha$ ,  $\beta$  y b permanecieron constantes en estos cálculos.

De las gráficas se puede apreciar que la forma de las curvas de los diferentes flujos es muy semejante, pues todas presentan una forma de "S"; este tipo de comportamiento es típico de los modelos de mancuerna en los cuales se predice un ciclo de histéresis [8]. Estas curvas en forma de "S" se caracterizan por predecir un cambio abrupto de configuración de la mancuerna, ya que ésta pasa repentinamente de una configuración no extendida a otra totalmente estirada. Además presentan una región en donde la función viscosidad está multivaluada, pues para una determinada rapidez de extensión, la cual es llamada rapidez de extensión crítica [8], existen tres valores de viscosidad extensional (ver figura 4.1).

TES	37.5	CON
FALLA	DE	UNUGEN



Figura 4.1: Viscosidad extensional uniaxial, con  $\pi = 0.5$  y  $\nu_1 = 0$ , esta curva se tomó de la gráfica 4.1

Para dar una interpretación física de estos 3 puntos en la viscosidad extensional haremos uso de las figuras 4.1 y 4.2. En la figura 4.1 se muestra una de las curvas de viscosidad extensional uniaxial de la gráfica 4.1, esta curva tiene como valores de  $\pi$  y  $\nu_1$ , 0.5 y 0, respectivamente (ver gráfica 4.1).

Por otra parte, en figura 4.2 se muestran 3 curvas de la barrera potencial contra la extensión de las mancuernas. Las curvas superior e inferior en la gráfica están asociadas respectivamente a las zonas en las que la mancuerna está completamente extendida y cuando no está extendida. Mientras que la curva media pertenece a la zona en donde encontramos la rapidez de extensión crítica, en la cual la función viscosidad está multivaluada. En estas curvas el punto C representa al estado enrollado de la molécula, este punto es localmente estable. P representa un estado inestable. Finalmente el punto S, que también es localmente estable, se asocia a un estado en el cual la molécula está totalmente estirada. Para la curva intermedia notamos que en los estados marcados por C y S el mínimo tiene aproximadamente el mismo valor, lo cual prodría interpretarse como que son igualmente probables.

Haciendo un análisis cualitativo, entre la figura 4.2 y la figura 4.1, podríamos decir que las tres viscosidades extensionales que se tienen a una determinada rapidez de extensión, en la figura 4.1, están asociadas a las tres diferentes configuraciones de las moléculas señaladas en la curva intermedia de la figura 4.2. Entonces, a una determinada rapidez de extensión es probable que se tengan las tres configuraciones de las mancuernas, una configuración no extendida, una inestable y una completamente extendida.

Tanto la forma de la curva como el cambio abrupto de configuración es todavia un tema

TES	<u>, Tu</u>	COM	
FALLA		U.S.S.M	Į



Figura 4.2: Figura tomada del artículo de De Gennes[8]

controvertido, ya que como lo muestra el artículo de Carrinton y Odell [22], algunos autores creen que la forma de la curva es debido al tipo de conector utilizado en el modelo de mancuernas y que el cambio abrupto que predice este modelo no es real. Sin embargo, en este mismo artículo se mencionan a otros autores, que basándose en otros modelos, obtienen también una curva en forma de "S". Inclusive los experimentos, como el de birrefringencia, realizados para demostrar si realmente ocurre el cambio abrupto de configuración tienen diferentes interpretaciones y, para algunos, este cambio abrupto se lleva a cabo, mientras que para otros no es así [22].

Datos de un experimento realizado por Ferguson y Hudson [25] muestran que este tipo de curvas puede obtenerse experimentalmente. El experimento consiste en dejar fluir lentamente un fluido M1, que es una mezcla de 0.244 % de poliisobutileno de alto peso molecular, 7 % de keroseno y 93 % polibuteno de bajo peso molecular, a través de una bureta, la cual tiene la llave de salida parcialmente abierta. En el tope de la boquilla de la bureta se forma una gota, ésta cae por el efecto de la fuerza de gravedad y, debido a que el fluido M1 es viscoelástico, durante el trayecto de caída de la gota se forma un filamento del fluido entre la boquilla de la bureta y la gota; a un costado de la formación del filamento. La caída de la gota y la formación del filamento es registrada en video; este video se analiza después para calcular el cambio de la longitud y del diamétro del filamento con el tiempo. Entonces, como podemos apreciar este experimento es de tipo transitorio ya que con los datos obtenidos del video es posible determina el cambio en la rapidez de extensión con respecto al tiempo. También es posible, mediante un balance de las fuerzas que intervienen en el proceso de formación del filamento [25],



51



Figura 4.3: Gráfica tomada del artículo de Ferguson y Walters [26]

determinar el cambio de la viscosidad extensional con respecto al tiempo. Con estos datos pueden obtenerse gráficas de viscosidad extensional y de rapidez de extensión con respecto al tiempo. Estas dos curvas se presentan juntas en una misma gráfica en el artículo de Ferguson y Walters (ver figura 4.3) [26]. Si observamos la curva de la rapidez de extensión ésta presenta máximos y mínimos. Este comportamiento se debe a que en el experimento el filamento del fluido en determinados momentos acelera y en otros desacelera [25].

En esta tesis se tomaron los datos de las curvas mostradas en la figura 4.3, tanto de la curva de rapidez de extensión como de viscosidad extensional a un mismo valor del tiempo. Después con estos datos se realizó una gráfica de viscosidad extensional contra rapidez de extensión. La curva obtenida se muestra en la figura 4.4 y ésta muestra cierta semejanza con las curvas de la gráficas 4.1-4.5, ya que la función viscosidad también es multivaluada.

Cada punto de la curva de la figura 4.4 representa el valor de la viscosidad y la rapidez de extensión a un determinado tiempo. Entonces, aunque en esta gráfica notamos que a un determinado valor de rapidez de extensión la función viscosidad extensional es multivaluada, estas viscosidades en realidad pertenecen a diferentes tiempos del experimento, pero en los cuales la rapidez de extensión es la misma.

De la misma manera, cada punto de las curvas obtenidas en la gráfica 4.1 representan, como ya se mencionó, la viscosidad y la rapidez de extensión a un determinado valor de la fuerza, pues como se recordara, ésta se varía en un intervalo que va desde 0.0007 hasta 500. Entonces, las tres viscosidades señaladas en la figura 4.1, que representa a una de las curvas de la gráfica 4.1, pertenecen a tres diferentes valores de la fuerza

VaarEN



Figura 4.4: Viscosidad extensional uniaxial-vs-rapidez de extensión. Datos tomados del artículo de Ferguson y Walters [25]

externa aplicada al filamento, o bien puede verse como tres experimentos distintos en los que también, al igual que en el caso transitorio, la rapidez de extensión coincide para los tres distintos valores de la fuerza.

Ahora bien, ya que se explicó que es posible obtener experimentalmente este tipo de curvas, aunque se trata de experimentos diferentes, se procede a interpretarlas. Para realizar el análisis de las gráficas obtenidas es muy útil revisar simultáneamente las gráficas de traza (z) y la deformación (y) de la mancuerna contra la rapidez de extensión (ver por ejemplo gráficas 4.55 o 4.56). Así, tenemos que, en la primera zona de viscosidad constante, es decir a baja rapidez de extensión, la mancuerna permanece prácticamente en su configuración inicial ya que, como podemos apreciar en la gáfica 4.55, en esta zona, aunque existe deformación, pues la curva de y crece de forma monótona, la curva de la traza permanece sin cambio. Entonces, a baja rapidez de extensión el flujo deforma a la mancuerna pero éste no es suficiente como para estirarla y por lo tanto la viscosidad no se ve muy afectada y permanece constante.

La segunda zona se alcanza después del punto de extensión súbita, en donde ocurre un cambio repentino de configuración de las mancuernas, en esta zona la mancuerna está totalmente extendida pues, como puede apreciarse en las gráficas 4.55(flujo uniaxial)



y 4.63 (flujo biaxial) las curvas de la traza y la deformación alcanzan su valor límite, por lo que la tensión con la que contribuyen las mancuernas a la solución es máxima, y por lo tanto la viscosidad aumenta permaneciendo nuevamente constante.

Por otra parte, en todos los flujos notamos que la viscosidad extensional a baja rapidez de extensión se ve afectada principalmente por el paramétro  $\nu$  pues si tomamos, por ejemplo, las curvas que corresponden a  $\pi = 0.5 \nu = 0$  y  $\pi = 0.5 \nu = 0.5$ , en donde el valor de  $\pi$  permanece constante, observamos que la viscosidad extensional en esta zona es mayor para  $\nu = 0.5$ . El valor de  $\nu$  está relacionado con la orientación de las mancuernas, así que un valor más alto en  $\nu$  corresponde a una mayor orientación en las mancuernas, lo cual contribuye a una mayor tensión en la solución en la que están inmersas provocando que la viscosidad aumente.

Por otro lado, si comparamos las curvas en las que el valor de  $\nu$  permanece constante y  $\pi$  varía, la viscosidad extensional a baja rapidez de extensión tiene el mismo valor para las dos curvas; sin embargo, para estas mismas curvas el punto de extensión súbita si se ve afectado (ver por ejemplo gráficas 4.1 y 4.2). Entonces, el desplazamiento hacia la derecha del punto de extensión súbita en estas dos curvas está asociado al paramétro  $\pi$ . Si nos fijamos en la ecuación 3.98,  $\pi$  está relacionado con la traza, z, del tensor de configuración, por lo que un valor alto de  $\pi$ , implica un mayor valor en la traza, es decir que la mancuerna estará más extendida; entonces, si la mancuerna inicialmente está más extendida el cambio súbito de configuración ocurrirá antes que el de una mancuerna que esté menos extendida ya que ésta tiene todavía capacidad para extenderse y, por lo tanto, el punto de extensión súbita se desplaza.

Se debe de mencionar que para los flujos m=-0.3, m=0 y m=0.3 la condición inicial  $\pi = 1$  y  $\nu = 1$  utilizada por Petrie [21] para el flujo uniaxial, se cambió por  $\pi = 1$  y  $\nu = 0.6$  debido a que se presentaron problemas numéricos al evaluar el modelo. El problema que se presentó fue que, utilizando los valores de  $\pi = 1$  y  $\nu = 1$ , la viscosidad calculada de los flujos mencionados era negativa mientras que los valores de rapidez de deformación eran del orden de  $1 * 10^{40}$ . Entonces se procedió a buscar valores de  $\pi$  y  $\nu$  que permitieran realizar los cálculos sin problemas y que fueran los más cercanos a  $\pi = 1$  y  $\nu = 1$ . Estos valores resultaron ser, como ya se mencionó,  $\pi = 1$  y  $\nu = 0.6$ .

Por otra parte, en las gráficas 4.6, 4.7, 4.8 y 4.9 se compara el comportamiento de la viscosidad de los cinco flujos extensionales para un determinado valor de  $\pi$  y  $\nu$ . Para analizar estas gráficas las dividimos en dos zonas, las cuales están separadas por el punto de extensión súbita.

#### Primera zona

De las gráficas podemos observar que en la primera zona la viscosidad extensional es constante lo cual se interpreta en términos del modelo de la siguiente manera: en esta zona la mancuerna está en su configuración inicial, así que el flujo prácticamente arrastra a la mancuerna deformándola, sin que esta deformación sea muy drástica, por lo que la viscosidad no se ve afectada y permanece constante. Por otra parte, en cada gráfica podemos apreciar que para los flujos cuya m > -0.5 la viscosidad es superior a la uniaxial (m=-0.5), este hecho se puede explicar si consideramos que, por ejemplo, para el flujo biaxial existe una doble orientación en las mancuernas lo cual provoca que la tensión en la solución sea mayor y por lo tanto la viscosidad extensional aumente.

TIPATA	rinn	•
FALLER	SECON	

Por otra parte, en esta zona pueden establecerse algunas relaciones (ver tabla 1) entre los diferentes flujos como son:

- En los cinco flujos estudiados, la viscosidad extensional en la primera zona es menor si  $\nu$  dismiye y casi no se altera con la variación de  $\pi$ .
- Existe una relación de simetría entre los flujos con m = -0.3, m = 0 (caso planar) y m = 0.3, pues la viscosidad extensional planar está siempre entre los valores de los flujos m = -0.3 y m = 0.3; de hecho se encontró que el valor de la viscosidad del caso m = 0 es aproximadamente la media aritmética de las viscosidades de estos últimos.
- Otra relación importante que se encontró fue entre el flujo uniaxial y el biaxial, la cual establece que si dividimos la viscosidad extensional biaxial entre la viscosidad extensional uniaxial se obtiene como cociente un valor aproximadamente de dos. Este resultado puede compararse con el cociente que se obtiene si dividimos la relación de Truton para el caso biaxial entre la relación de Truton para el caso biaxial entre la viscos establecer las mismas relaciones entre el caso planar y el uniaxial se determina que el valor del cociente de las relaciones de Truton, entre estos dos flujos es igual 1.3333; sin embargo, en los cálculos realizados con el programa, esta relación sólo se observó para la condición de  $\pi = 0.5$  y  $\nu = 0$ .

### Punto de extensión súbita

Las gráficas 4.6, 4.7, 4.8 y 4.9 muestran que el punto de extensión súbita se ve afectado por el tipo de flujo, pero además por el valor de las condiciones iniciales. En este punto, según la interpretación de algunos autores [8], la molécula pasa repentinamente de una configuración de ovillo a la configuración de molécula totalmente extendida. El valor de extensión súbita, según estas gráficas, es más sensible al valor de  $\nu$ , así por ejemplo, si comparamos las gráficas 4.7 y 4.8 en donde  $\pi$  tiene valores distintos y  $\nu$ permanece constante observamos que el punto de extensión súbita no se ve afectado, mientras que de las gráficas 4.6 y 4.7 o 4.8 y 4.9, en las que  $\nu$  tiene valores distintos y  $\pi$  permanece constante se observa un corrimiento en el valor de este punto; de hecho para la condición en la que  $\nu = 0$  todos los puntos de extensión súbita son similares. Esta sensibilidad del modelo al valor de  $\nu$  puede explicar el porqué no se logró en todos los casos establecer la condición de  $\pi = 1$  y  $\nu = 1$ .

### Segunda zona

En esta segunda zona encontramos nuevamente que la viscosidad extensional es constante. Este límite superior se alcanza debido a que se está utilizando un conector no lineal, en este punto la mancuerna ha alcanzado su máxima extensión, pues como se puede apreciar en la gráfica 4.55 la curva de la traza ya alcanzó un valor constante lo que indica que la mancuerna está totalmente extendida.

Una tendencia que encontramos entre los diferentes flujos en esta zona es que para los flujos cuya m > -0.5 la viscosidad es menor y siempre está por debajo de la viscosidad uniaxial siendo mayor la diferencia entre las viscosidades uniaxial y biaxial. El hecho



de que la viscosidad biaxial sea menor a la uniaxial podría explicarse si tenemos en cuenta que en un flujo biaxial existe una doble orientación de las mancuernas, lo cual podría dar lugar a que la extensión en las mancuernas sea menor que en el caso uniaxial y como consecuencia la viscosidad biaxial sea menor a la uniaxial, lo mismo puede ser interpretado para los otros casos.

I	TEGES COM
ļ	FALLE MAR AND









ľ	THREE CON
	FALLER DE CALIFIEN















THIST	111577
FALLIC Dia	Chain





Ì	thege won	
	PALE to Les Quadi	ΞN

Tabla 1Viscosidad extensional para los diferentes flujos $\beta=0.373$ ,  $\alpha=1$ , b=1000

m	η (1a. zona)	η (2da. zona)	Punto extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1a. zona)	π	v
-0.5	5.426	666.1822	0.7293	1	1	1
-0.3	8.2927	654.833	4.46	1.52832658	1	0.6
0	9.7553	636.8895	1.46	1.79788058	1	0.6
0.3	11.219	613.2	1.46	2.0676373	1	0.6
1	10.8349	365.2798	1.46	1.99684851	1	0.6

		$\pi = 1$	<u>v=0.5</u>	
m	η (1a. zona)	η (2da. zona)	Punto extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>−0.5</sup> (1a. zona)
-0.5	3.2959	673.099	1.028	1
-0.3	6.1492	658.9083	1.16	1.86571195
0	7.2334	642.9884	1.16	2.1946661
0.3	8.317	618.6368	1.16	2.52343821
1	6.5917	367.9218	1.492	1.99996966

		π=0.5	v=0.5	
m	η (Ia. zona)	η (2da. zona)	Punto extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>−0.5</sup> (1a. zona)
-0.5	3.2955	672.1253	1.45	1
-0.3	6.1489	660.6142	1.73	1.86584737
0	7.2636	633.9171	1.73	2.2040965
0.3	8.3166	609.9412	1.73	2.52362312

366.73

1

6.5911

π=0.5 v=0 ון<sup>m</sup>/ון<sup>−0.5</sup> Punto η η m (la.zona) (2da. zona) extensión (1a. zona) -0.5 2.3673 690.478 0.7134 1 2.6833 1.84 688.7342 -0.3 1.13348541 0 3.1575 674.6729 1.845 1.333798 3.6317 638.5959 1.7973 1.53411059 0.3 1 4.7312 370.105 1,6679 1.99856376

2.6033

2.00003034

## 4.1.2 Gráficas de la viscosidad extensional de los 5 flujos a diferente número de Débora

Con el programa se realizaron cálculos a diferentes números de Débora para cada tipo de flujo; este tipo de cálculo se realizó a tres diferentes concentraciones de polímero en la solución, es decir a tres valores distintos de  $\beta$ , primero a  $\beta = 0.2$  después a  $\beta = 0.5$  y por último a  $\beta = 0.8$ . En este caso  $\beta = 0.2$  será la solución menos concentrada, mientras que  $\beta = 0.8$  será la más concentrada. Además de variar el número de Débora en estas gráficas también se compararon los diferentes flujos extensionales a un determinado número de Débora. Los resultados de estos cálculos se muestran a continuación.

Gráficas de los 5 flujos extensionales con $\beta=0.2$ y tomando diferentes valores del número de Débora

Las gráficas 4.10, 4.11, 4.12, 4.13 y 4.14 muestran la solución del modelo a cuatro distintos valores del número de Débora, para los cinco diferente flujos. Debemos recordar que el número de Débora está relacionado con efectos elásticos, por lo que un mayor número de Débora indica mayor elasticidad.

En particular en las gáficas 4.10 y 4.11, que corresponden a los flujos uniaxial y biaxial respectivamente, observamos que el comportamiento de las curvas es bastante similar ya que, por ejemplo, en los dos casos, conforme aumentamos el número de Débora las curvas muestran que la zona en la cual la función viscosidad es multivaluada, aumenta. Este incremento en la zona de inestabilidad podría asociarse con los experimentos reportados por Douglas y Steven [24], en los cuales, utilizando una técnica de video microscopia fluorecente, muestran que a muy altos números de Débora la conformación de las macromoléculas de DNA que más predominan son las semiextendidas; este tipo de conformación es metaestable y podrían en un determinado momento extenderse o no. Entonces, al aumentar el número de Débora aumenta la cantidad de conformaciones metaestables y por lo tanto el aumento en la zona de inestabilidad en el modelo podría asociarse a este fenómeno.

Por otra parte, en estas mismas gráficas observamos que entre menor sea el valor del  $\alpha$ , el valor de la rapidez de extensión, en donde ocurre la extensión súbita, es mayor. Esto se debe a que un menor valor en  $\alpha$  se traduce en una menor elasticidad por lo tanto el fluido necesita un mayor tiempo de procesamiento,  $\dot{\varepsilon}^{-1}$ , para manifestar sus propiedades elásticas.

Aunque notamos que la forma de las curvas de los flujos uniaxial y biaxial es muy similar existe una diferencia, ya que cuando  $\alpha$  es igual 10 y 100, es decir cuando la elasticidad es mayor las curvas de la viscosidad biaxial presentan un máximo. Este máximo puede explicarse de la siguiente manera. A baja rapidez de extensión ésta no es tan grande como para poder deformar en gran medida a las mancuernas, pero conforme se aumenta la rapidez de deformación se llega a un valor tal que súbitamente la mancuerna pasa de su configuración inicial a una configuración de mancuerna totalmente extendida. Si se realiza el experimento opuesto se conoce que los modelos de mancuerna para el caso uniaxial predicen una curva de histéresis, es decir, no se vuelve por el mismo camino con el que se inicio [8]. En el caso del flujo biaxial al haber una doble orientación en las moléculas será más difícil retornar a la configuración inicial de las moléculas y todavía

<b>m</b> ja		COK	
FA) and	$\frac{1}{2}$	: . L.	GAN

63

más difícil si la elasticidad es mayor, como puede juzgarse por la gráfica.

Por otra parte, en las gráficas 4.12, 4.13 y 4.14, que corresponden a los flujos planar, m=-0.3 y m=0.3, notamos que para los valores de  $\alpha = 10$  y  $\alpha = 100$  la viscosidad extensional de la primera zona tiene valores muy altos. Estos valores tan altos se pueden explicar mediante el análisis asintotico realizado en el capítulo 5; en éste se muestra que cuando el número de Débora es grande, la viscosidad extensional calculada con el modelo podría indeterminarse para ciertos valores de  $\nu$  que es precisamente lo que ocurrió en estas gráficas. Por otra parte, para los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 la curva en la que  $\alpha = 100$  presenta primero una zona en la que la viscosidad decae y encuentra un mínimo, después vuelve a crecer y encontrar un máximo para nuevamente volver a caer y encontrar un valor límite en el que convergen todas las curvas de los diferentes valores de  $\alpha$ . Entonces, la presencia del máximo en las curvas debe asociarse tanto a efectos de flujo como a elásticos, ya que éste se presenta cuando se tienen flujos diferentes del uniaxial y para  $\alpha > 1$ , es decir cuando se tiene una mayor elasticidad.

Existe modelos en la literatura que también predicen la presencia de máximos y mínimos en flujos extensionales, ya sea de polímero fundido o de soluciones poliméricas. Un ejemplo lo encontramos en el trabajo de W. N. Song, Z. M. Xia [10], en donde se utiliza un modelo de ocho parámetros para un sistema de polímero fundido y una extensión uniaxial; aquí el modelo predice un mínimo a baja rapidez de extensión. Otro ejemplo es el modelo de Cheryl A. Cathey and Gerald G. Fuller [4], en este artículo el sistema es una solución diluida de polímero, la cual es sometida experimentalmente a una extensión uniaxial y biaxial; tanto los datos experimentales como el modelo utilizado presentan un pequeño máximo en el flujo uniaxial.

Hay que observar que, a alta rapidez de extensión, en estas gráficas la viscosidad vuelve a ser constante y todas las curvas al parecer tienden a un valor límite, es decir, el valor límite superior de la viscosidad extensional de cualquier flujo es independiente del valor de  $\alpha$ . El hecho de que todas las curvas tiendan a un mismos valor límite es lógico pues todas las mancuernas tienen al mismo valor de longitud una vez que se han estirado por completo.

Por otra parte, si observamos la tabla dos, en la que se muestra, entre otras cosas, la viscosidad extensional a baja rapidez de extensión, notamos que para  $\alpha = 0.1$ los flujos uniaxial, biaxial y planar tiene los valores aproximadamente de 3, 6, y 4 respectivamente. Estos valores de viscosidad corresponden a los valores teóricos de la relación de Trouton. Existe evidencia experimental tanto del flujo uniaxial y planar en la que se muestra que si se gráfica la relación de Trouton contra la rapidez de extensión los valores que se obtinen son aproximadamente 3 y 4 [5][2]. Por lo tanto, el modelo es capaz de predecir el comportamiento de la viscosidad extensional para valores de clasticidad < 0.1. En estas mismas referencias se muestran las curvas completas de la relación de Trouton y se observa que existe una segunda zona en la que la viscosidad extensional es aproximadamente constante.

De las gráficas 4.15, 4.16 4.17 y 4.18 en las que se compara el comportamiento de los diferentes flujos para un determinado número de Débora, notamos que en la primera zona, donde la viscosidad es constante, se ve afectada por el tipo flujo, el comportamiento es similar al comentado en las gráficas en las que se variaron las condiciones

iniciales, es decir la viscosidad para los flujos con m > -0.5 están siempre por arriba de la viscosidad uniaxial, este comportamiento, como ya se explicó se debe a que en flujos diferentes al uniaxial la manuerna está sometida a más de una tensión lo que provoca un aumento en la viscosidad.

En cuanto a la relación que guardan la viscosidad uniaxial y biaxial se sigue conservando el factor de dos antes mencionado, al igual que la simetría observada entre los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 en donde la viscosidad planar es la media aritmética de los otros dos flujos (ver tabla 2). Por otra parte, si analizamos el punto de extensión súbita no encontramos una tendencia clara pues, cuando  $\alpha = 0.1$ , se puede decir que el punto de extensión súbita es similar para todos los flujos, pero cuando  $\alpha = 1$  este punto de extensión se alcanza primero para el flujo biaxial y para los otros flujos es practicamente el mismo y se alcanza mucho después que el biaxial, mientras que para  $\alpha$ igual a 10 y 100 el punto de extensión súbita de los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3es semejante y se alcanza antes que los de los flujos uniaxial y biaxial, los cuales en estos dos casos son iguales.

Por último, en la segunda zona de viscosidad constante la viscosidad del flujo m = -0.5, m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 tienden a un mismo valor límite, mientras la viscosidad biaxial está por debajo de estos flujos, incluso la viscosidad biaxial en esta zona es la mitad de la uniaxial, como ya se explicó el hecho de que la viscosidad biaxial esté por debajo de la uniaxial se debe a la doble orientación de las mancuernas. Un comportamiento importante a destacar es que en esta zona de alta rapidez de extensión los flujos uniaxial y planar tienden al mismo valor límite, este comportamiento está muy de acuerdo con el reportado por Petrie en donde un análisis asintótico del modelo de mancuernas de extensión finita predice que a alta rapidez de extensión la viscosidad planar y uniaxial son iguales [9].

איז	SIG	COM
PALOA	1 N.) A.#221	VALUEN



**Gráfica 4.10** Viscosidad extensional del flujo uniaxia (m=-0.5)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5,  $\beta$ =0.2, y b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).





66















ກ<sup>m</sup> ε









TEST CON FALME IN CONTEN







FA

4.55

			$\alpha = 0.1$		
 m	η (1ª. Zona)	η (2ª. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ª. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2ª. Zona)
-0.5	2.9996	361.649	17.487	1	1
-0.3	3.4045	403.18	14.782	1.135	1.115
0	4.005	402.7529	19.267	1.335	1.114
0.3	4.606	934.347	18.69	1.536	2.584
1	5.9989	202.06	23.283	2.000	0.559

				Tabla 2			
	Vis	cosidad	extensi	onal para	los difei	rentes	flujos
		π=0.5	v1=0.5,	v2=0.5, β=	=0.2yb=	1000	
	ta se la						

			α=1	ſ	
m	η (1ª. Zona)	η (2ª. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ª. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2ª. Zona)
-0.5	3.7482	391.1062	1.795	1	1
-0.3	7.2928	403.18	1.367	1.95	1.03
0	8.579	403.1225	1.473	2.29	1.03
0.3	9.8219	376.5863	1.6335	2.62	0.96
1	7.4893	204.094	2.23	2.00	0.52

			the second se	1	
			α=10		
m	η (1ª. Zona)	η (2ª. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ª. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2ª. Zona)
-0.5	4.6314	402.2	0.6288	1	1
-0.3	55.899	403.18	0.1268	12.07	1.00
0	65.7521	393.93	0.1302	14.20	0.98
0.3	75.6186	392.4232	0.1347	16.33	0.98
1	9.2609	204.739	0.719	2.00	0.51

				7	
			$\alpha = 100$		
_m	η (1ª. Zona)	η (2ª. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ª. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2ª. Zona)
-0.5	4.7827	402.2	0.259	1	1
-0.3	543.6694	403.18	0.0094	113.67	1.00
0	639.7521	393.93	0.0097	133.76	0.98
0.3	735.5276	383.2924	0.0157	153.79	0.95
1	9.5633	204.739	0.1878	2.00	0.51

TRAC	CAN
FALL	UNN
### Gráficas de los 5 flujos extensionales con $\beta = 0.5$ y tomando diferenes valores del número de Débora

Los cálculos de la sección anterior se repitieron pero con un valor de beta ( $\beta = 0.500$ ), es decir para una solución más concentrada de polímero. Los resultados de estos cálculos se muestran en las gráficas 4.19 a 4.27.

En las gráficas 4.19 y 4.20, que corresponden al flujo uniaxial y biaxial respectivamente, notamos que tienen un comportamiento muy similar pues, por ejemplo, a baja rapidez de extensión la viscosidad extensional en estos dos flujos no depende del número de Débora, sin embargo las curvas del flujo biaxial presentan un máximo cuando  $\alpha$  es igual a 10 y 100; además se debe observar que para el caso biaxial el fenómeno de histéresis se presenta incluso con  $\alpha = 0.1$ , esto ocasiona que el punto de extensión súbita se desplace hacia la derecha en dicho flujo.

De las gráficas 4.21, 4.22 y 4.23 podemos decir que muestran un comportamiento semejante al observado con  $\beta = 0.2$ ; de hecho, la curva con  $\alpha = 100$  tiene el mismo comportamiento que el de las gráficas anteriores, es decir, a baja rapidez de extensión la viscosidad disminuye ligeramente para después subir abruptamente a la zona de máxima extensión y nuevamente bajar y llegar a un valor límite de la viscosidad. Una diferencia que notamos con las gráficas del flujo uniaxial y biaxial es que para los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 la viscosidad a baja rapidez de extensión sí depende del valor de  $\alpha$ .

Por otra parte, las gráficas en las que se comparan los flujos reflejan que éste afecta a la viscosidad a baja y a alta rapidez de extensión; para la primera zona se observa que la viscosidad de los flujos con m > -0.5 está por encima de la viscosidad uniaxial, mientras que en la segunda zona el valor de la viscosidad biaxial es menor que la viscosidad uniaxial. Por último, de estas gráficas podemos observar que otra vez el punto de extensión súbita en similar para todos los flujos cuando  $\alpha = 0.1$  y conforme este paramétro aumenta los puntos de extensión súbita de los flujos uniaxial y biaxial se van haciendo muy parecidos, lo mismo ocurre con los flujos m = 0, m = -0.3y m = 0.3, que alcanzan primero dicho punto, entonces, como puede apreciarse la elasticidad y el tipo de flujo influyen en el punto de extensión súbita.

En la tabla 3 se puede observar la relación que guarda el flujo uniaxial con los otros flujos tanto en la zona inferior como en la zona superior; estos valores muestran que la relación entre la viscosidad biaxial y uniaxial es un factor de dos, mientras que en la segunda zona la viscosidad uniaxial es aproximadamente la mitad de la viscosidad uniaxial. Además en estos datos volvenos a observar que cuando el valor de  $\alpha = 0.1$  la viscosidad extensional de los flujos uniaxial, biaxial y planar es: 3, 6 y 4 respectivamente, cumpliendo así con la regla de Trouton. Por otra parte, en estos datos se puede apreciar de nuevo la simetría observada entre los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3, es decir, la viscosidad del flujo planar puede aproximarse como la media aritmética de los otros dos flujos. Finalmente se compararon en esta tabla el efecto de la concentración en la viscosidad extensional, es decir se comparan la viscosidad extensional obtenida para  $\beta = 0.2$  y  $\beta = 0.5$ . Los resultados muestran que, en general, la viscosidad extensional en la primera zona disminuye ligeramente para  $\alpha$  igual a 0.1 y en una proporción mayor para los otros valores de  $\alpha$ , mientras que para la segunda zona la viscosidad aumentó

TEEL COM FALLE LEERN aproximadamente el doble para todos los valores de  $\alpha$ . El aumento en la viscosidad en esta zona puede interpretarse de la forma siguiente: al incrementarse el valor de  $\beta$  se incrementa el número de mancuernas, puesto que este parámetro está relacionado con la concentración de las mancuernas, entonces el número de mancuernas extendidas en la segunda zona se incrementa también y éstas contribuyen a aumentar la tensión en las soluciones diluidas de polímero, lo cual se traduce en una viscosidad más alta.





**Gráfica 4.19** Viscosidad extensional del flujo uniaxial (m=-0.5)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5,  $\beta$ =0.5, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).



**Gráfica 4.20** Viscosidad extensional del flujo biaxial (m=1)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v2=0.5,  $\beta$ =0.5, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).

TROTE COM FALLS ITS CALLEN



**Gráfica4.21** Viscosidad extensional del flujo planar (m=0)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5, β=0.5, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).



**Gráfica 4.22** Viscosidad extensional del flujo m=-0.3-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\beta$ =0.5, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).

ίų.		്റി
MAL	14 17 3	



Gráfica 4.23 Viscosidad extensional del flujo m=0.3-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\beta$ =0.5, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).

ulicic.	CUN
FALLER DE	OBLGEN









Gráfica 4.26 Comparación de la viscosidad extensional de los 5 flujos para  $\alpha$ =10 y con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\beta$ =0.5, b=1000.





# Viscosidad extensional para los diferentes flujos $\pi$ =0.5 v1=0.5, v2=0.5, $\beta$ =0.5 y b=1000

			<u>α=0.1</u>				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (2da. Zona)
-0.5	3.0006	908.6	9.8795	1	1	1.0003	2.2591
-0.3	3.3917	832.836	11.487	1.1303	0.9166	0.9962	2.0657
0	3.99	734.314	11.2183	1.3297	0.8082	0.9963	1.8641
0.3	4.5887	754.7916	12.495	1.5293	0.8307	0.9212	0.8078
1	5.999	492	14.535	1.9993	0.5415	1.0000	2.4031
					Promedio	0.9982	1.8335

			<u>u=1</u>				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β≈0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β≈0.2</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (2da. Zona)
-0.5	3.0006	908.6	1.1288	1	1	0.8005	2.2591
-0.3	5.3437	832.836	1.657	1.7809	0.9166	0.7351	2.0657
0	6.286	734.314	1.5906	2.0949	0.8082	0.7355	1.8641
0.3	7.2314	754.7916	1.7053	2.4100	0.8307	1.4437	0.8078
1	5.999	492	2,4954	1.9993	0.5415	0.8006	2.4031
					Promedio	0.7680	1.8335

- 1

		·	α=10				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (2da. Zona)
-0.5	3.0006	908.6	0.7305	1	1	0.6249	2.2591
-0.3	35.55	832.836	0.2446	11.8476	0.9166	0.6360	2.0657
0	41.8192	734.314	0.2549	13.9369	0.8082	0.6360	1.8641
0.3	48.086	754.7916	0.2597	16.0255	0.8307	2.3258	0.8078
1	5.999	492	1.1246	1.9993	0.5415	0.6276	2.4031
					Promedio	0.6311	1.8335

			<u>α=100</u>				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.2</sub> (2da. Zona)
-0.5	3.0006	908.6	0.4237	1	1	0.6249	2.2591
-0.3	340.3994	832.836	0.0118	113.4438	0.9166	0.6424	2.0657
0	400.4095	734.314	0.01071	133.4431	0.8082	0.6471	1.8641
0.3	460.3521	754.7916	0.01054	153.4200	0.8307	2.4921	0.8078
1	5.999	492	0.3811	1.9993	0.5415	0.6276	2.4031
					Promedio	0.6355	1.8335

ESTA TESIS NO SALE Nº LA BIBLIOTECA

and the second se	······································		
1		的例	
PAL.	h tek		JN

## Gráficas de los 5 flujos extensionales con $\beta = 0.8$ y tomando diferenes valores del número de Débora

Los cálculos que se realizaron variando el número de Débora con  $\beta = 0.8$ , este valor de  $\beta$  corresonde a una solución de polímero concentrada y como el modelo de mancuernas es válido unicamente para soluciones diluidas la discusión de estos resultados corresponden a casos límite o hipotéticos.

Las gráficas del flujo uniaxial y biaxial son muy similares (gráficas 4.28 y 4.29) excepto por el máximo que presentan las curvas cuya  $\alpha$  es 100 y 10 en el segundo caso. Pero además en la gráfica para el flujo biaxial notamos que para  $\alpha = 1$  existe una zona en la que la viscosidad disminuye con la rapidez de extensión para después subir abruptamente y alcanzar valor límite en el que la viscosidad es constante, nótese que aqui también el fenómeno de histéresis se presenta a  $\alpha = 0.1$  en el flujo biaxial. Nuevamente la relación que guardan la viscosidad biaxial y uniaxial en la primera zona está determinada por un valor de dos. Por otra parte para los flujos de m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 el comportamiento es semejante al que se presentó con los valores anteriores de  $\beta$ . Una diferencia con las gráficas anteriores es que la curvas de  $\alpha$  correspondientes a 0.1 y 1, para los flujos m = 0, m = -0.3 y m = 0.3, tienen casi el mismo valor en la primera zona pero el punto de extensión súbita se alcanza mucho después para  $\alpha = 0.1$ . En general la viscosidad para una concentración de  $\beta = 0.8$  disminuvó en la primera zona con respecto a las viscosidades obtenidas con  $\beta = 0.5$ , este decremento en la viscosidad es más evidente conforme se aumenta la elasticidad, es decir, el valor de  $\alpha$ (ver tabla 4). En lo que respecta a la segunda zona notamos que la viscosidad aumentó en general 1.5 veces con respecto al anterior valor de  $\beta$ . Hay que notar que algunos valores de la comparación entre las viscosidades de  $\beta = 0.5$  y  $\beta = 0.8$  no aparecen en la tabla, esto se debe a que como se explicó anteriormente no fue posible hacer que el programa calculara la viscosidad para valores de fuerza más altos y no conocemos el límite al cual parece tender esta viscosidad. Por último, se debe mencionar que otra vez se cumple la relación de dos entre el flujo uniaxial y el biaxial así como también la simetría entre los flujos m = -0.3, m = 0 y m = -0.3.

Si comparamos los flujos a diferente alfa (gráficas 4.33, 4.34, 4.35 y 4.36) notamos que, al igual que los anteriores casos, para la primera zona los valores de las viscosidades de los flujos diferentes al uniaxial están por arriba de éste, mientras que para la segunda zona sus valores son menores al uniaxial. Pero además debenos observar que en las gráficas de  $\beta = 0.2$  y  $\beta = 0.5$ , donde comparamos flujos a diferentes valores de  $\alpha$ , la viscosidad extensional en la primera zona cumple que para m = -0.3 es menor que los valores correspondientes a m = 0 y es menor a la de m = 0.3 en todos los casos; sin embargo para  $\beta = 0.8$  el orden de la viscosidad cambia siendo m = 0 menor a m = 0.3 y éste menor a m = -0.3.

TEG	<u>цс</u> .	CiC M
FALLE		Castill



**Gráficas 4.28** Viscosidad extensional del flujo uniaxial (m=-0.5)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5,  $\beta$ =0.8, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).









**Gráfica 4.30** Viscosidad extensional del flujo planar (m=0)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\beta$ =0.8, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).



82 TESTS CON FALLS OF CALCEN



**Gráfica 4.32** Viscosidad extensional del flujo m=0.3-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\beta$ =0.8, b=1000, para diferentes valores del número de Débora ( $\alpha$ ).

TESIC	MUN
FALLA DR	UnitEN







TREE CON FALLE DE CHUIEN











# Viscosidad extensional para los diferentes flujos $\pi$ =0.5 v1=0.5, v2=0.5, $\beta$ =0.8 y b=1000

			$\alpha = 0.1$				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>//</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> } (2da. Zona)
-0.5	2.988	1584.9	6.7804	1	1	0.9958	1.5828
-0.3	3.3865	-	16.147	1.1334	-	0.9985	-
0	3.984	1360.87	7.5484	1.3333	0.8586	0.9985	1.4342
0.3	4.5816	-	8.932	1.5333	-	0.9985	-
1	5.9988	783.6	21.2184	2.0076	0.4944	1.0000	1.5767
				•	Promedio	0.9982	1.5312

			<u>α=1</u>				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> } (2da. Zona)
-0.5	2.6542	1600.78	0.7945	1	1	0.8846	1.5987
-0.3	3.6974		1.5841	1.3930		0.6919	-
0	4.3521	1484.216	1.1819	1.6397	0.9272	0.6923	1.5118
0.3	5.009		1.307	1.8872	-	0.6927	-
1	5.3127	801	1.7358	2.0016	0.5004	0.8856	1.5988
					Promedio	0.7694	1,5698

			$\alpha = 10$				
m	η <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β≈0.5</sub> (1ra. Zona)	໗ <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /າງ <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> } (2da. Zona)
-0.5	1.384	1599.9	0.5921	1	1	0.4612	1.6361
-0.3	15.2796	-	0.1394	11.0402	-	0.4346	•
0	17.965	1542.157	0.3878	12.9805	0.9639	0.4296	1.5539
0.3	20.6473	-	0.4547	14.9186	-	0.4294	_
1	2.7622	801.2	1.5095	1.9958	0.5008	0.4604	1.5947
					Promedio	0.4430	1.5949

			$\alpha = 100$				
m	າ <sup>m</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> (2da. Zona)	Punto de extensión	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>-0.5</sup> (2da. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> (1ra. Zona)	η <sup>m</sup> <sub>β=0.8</sub> /η <sup>m</sup> <sub>β=0.5</sub> } (2da. Zona)
-0.5	1.2187	1600.2	0.4873	1	1	0.4062	1.5995
-0.3	137.2376	-	0.00996	112.6098	-	0.4030	-
0	161.4436	1551.479	0.01822	132.4720	0.9696	0.4029	1.5604
0.3	185.6497	-	0.01615	152.3342	-	0.4029	-
1	2.4352	801	0.7955	1.9982	0.5006	0.4059	1.5942
					Promedio	0.4042	1.5847

WUN NUNET FALLA HE WAR

#### 4.1.3 Gráficas de los 5 flujos a diferentes $\beta$

Otro cálculo que se realizó con el programa fue variar el parámetro  $\beta$ , manteniendo constantes  $\alpha$ ,  $\pi$ ,  $\nu$  y b. El parámetro  $\beta$  representa la concentración del polímero y los valores con los que se realizaron los cálculos fueron los siguientes:  $\beta = 0.005$ ,  $\beta = 0.05$ ,  $\beta = 0.373$  y  $\beta = 0.990$ . Se debe de recordar que el modelo de mancuernas es válido para soluciones diluidas y valores altos de beta representan soluciones concentradas, por lo que la discusión de resultados para valores altos de beta corresponden a casos límite o hipotéticos.

Los resultados obtenidos se muestran en las gráficas 4.37-4.45. En este caso las gráficas de los flujos biaxial, planar, m = -0.3 y m = 0.3 muestran que el comportamiento de éstos son muy parecidos a la gráfica del flujo uniaxial presentado por Petrie [21] y reproducido por el modelo utilizado en esta tesis excepto por dos razones. Primero, a baja rapidez de extensión en los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 las curvas cuyas concentraciones son  $\beta = 0.373$  y  $\beta = 0.990$  están separadas mientras que para los flujos uniaxial y biaxial estas curvas en la zona mencionada están juntas, aunque hay que mencionar que para el flujo biaxial la concentración de  $\beta = 0.990$  presenta un mínimo, éste podría estar asociado a efectos de concentración. Como ya se mencionó en el artículo de W. N. Song y Z. M. Xia [10] presenta una gráfica de un flujo uniaxial, obtenida con un modelo de ocho parámetros, la cual presenta un mínimo a baja rapidez de ocho parámetros, la cual presenta un mínimo a baja rapidez de ocho parámetros.

Por otra parte, los flujos biaxial, planar, m = 0.3 y m = -0.3, cuando  $\beta = 0.005$ , se presenta una zona en la cual la viscosidad disminuye para después incrementarse y alcanzar el límite superior de viscosidad constante. Se debe notar que en la segunda zona de viscosidad constante la curva de  $\beta = 0.005$ , que representa una baja concentración, tiene el menor valor de viscosidad, mientras que la curva que representa una solución más concentrada,  $\beta = 0.99$  la viscosidad extensional en esta zona tiene el valor más alto. Esto es lógico pues, como se recordará, en esta zona las mancuernas están totalmente extendidas y entre mayor sea la cantidad de mancuernas la tensión en la solución es mayor y entonces, la viscosidad aumenta. Hay que resaltar que las curvas cuyos valores de  $\beta$  son 0.005 y 0.99 respectivamente no presentan el efecto de histéresis, por lo cual se puede decir que este efecto está asociado a la concentración y que no está presente en soluciones concentradas o muy diluidas. Por otra parte, en la curva de  $\beta = 0.990$ , el punto de extensión súbita se alcanza antes en comparación con las otras concentraciones, esto se debe en gran medida a que esta curva no presenta histéresis. Notar que en estos cálculos no aparecen máximos.

En las gráficas 4.42, 4.43, 4.44 y 4.45 se compararon los diferentes flujos para un valor determinado de  $\beta$ . Como puede observarse la viscosidad en la zona de baja rapidez de extensión de los flujos con m > -0.5 están por arriba de la viscosidad uniaxial, mientras que en la segunda zona la viscosidad de estos flujos está por debajo de la uniaxial. Además notamos que para  $\beta = 0.005$ , es decir para la concentración más baja, todos los flujos excepto el uniaxial tienen un mínimo, mientras que para  $\beta = 0.05$  y  $\beta = 0.373$  este tipo de comportamiento no existe para ningún tipo de flujo. En la gráfica 4.45 el único flujo que presenta un mínimo es el biaxial. En las gráficas 4.42, 4.43 y 4.45, que corresponden a gráficas a valores de  $\beta$  igual a 0.005, 0.05 y 0.99, el

TE	<u>SIS</u>	<u>uUli</u>
FALLA	<u>D</u> L	ONGEN

punto de extensión súbita de los diferentes flujos extensionales ocurre casi a al mismo valor de rapidez de extensión.

Por último de los datos de la tabla 5 encontramos nuevamente que la relación entre la viscosidad del flujo biaxial y uniaxial en la primera zona está determinada por un factor de dos, mientras que en la segunda zona la viscosidad biaxial es aproximadamente la mitad de la uniaxial. También encontramos nuevamente la simetría entre los flujos con m = -0.3, m = 0 y m = 0.3, en la que la viscosidad del flujo planar (m = 0) es aproximadamente la media aritmética de la de los otros dos flujos.

Alfala (	Inn
FALLS	MEM



**Gráfica 4.37** Viscosidad extensional del flujo uniaxial (m=-0.5)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0,  $\alpha$ =1.0, b=1000, para diferentes valores de concentración ( $\beta$ ).



**Gráfica 4.38** Viscosidad extensional del flujo biaxial (m=1)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0, v2=0.5,  $\alpha$ =1.0, b=1000, para diferentes valores de concentra<u>ción</u> ( $\beta$ ).

<b>h</b> ubballa	CON
FALL	CALEN



**Gráfica 4.39** Viscosidad extensional del flujo planar (m=0)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1.0, b=1000, para diferentes valores de concentración ( $\beta$ ).





JES	19	CAN
FALLE	·	· ANALARIA



**Gráfica 4.41** Viscosidad extensional del flujo m=0.3-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1.0, b=1000, para diferentes valores de concentración ( $\beta$ ).

n.E.S.	Ţſ	MULT	
FALLA	Dİ	Carden	







Gráfica 4.43 Comparación de la viscosidad extensional de los 5 flujos para  $\beta$ =0.05 y con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1, b=1000.

Ĩ	TESIS CONS	
	FALLA DE CALUEN	J



ana **DAUXEN** FALLA

# Viscosidad extensional para los diferentes flujos $\pi=0.5$ , $\nu 1=0.5$ , $\nu 2=0.5$ , $\alpha=1$ y b=1000

			β=0.005		
	η	η		η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>
m	(la. Zona)	(2a. Zona)	Punto de extensión:	(1a. Zona)	(2a. Zona)
-0.5	4.1575	12.9556	1.2692	1	1
-0.3	8.2527	13.293	1.052	1.9850	1.0260
0	10.0567	13.8563	1.064	2.4189	1.0695
0.3	11.1588	14.2182	0.9507	2.6840	1.0975
1	8.3137	10.919	0.9932	1.9997	0.8428

β=0.05

	η	η		η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>
m	(1a. Zona)	(2a. Zona)	Punto de extensión:	(1a. Zona)	(2a. Zona)
-0.5	4.1575	102.7574	1.2692	1	1
-0.3	8.2527	96.5148	1.0716	1.9850	0.9392
0	10.0567	96.8995	1.3194	2.4189	0.9430
0.3	11.1588	95.2556	1.7972	2.6840	0.9270
1	8.3137	54.4905	1.8486	1.9997	0.5303

β=373

(	η	ղ	}	ղ <sup>տ</sup> /ղ <sup>0.5</sup>	ŋ <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>
m	(la. Zona)	(2a. Zona)	Punto de extensión:	(1a. Zona)	(2a. Zona)
-0.5	2.9845	739.8	1.2692	1	1
-0.3	6.1489	660.614	1.546	2.0603	0.8930
0	7.2336	596.968	1.4422	2.4237	0.8069
0.3	8.3166	570.4212	1.7972	2.7866	0.7710
1	6.5911	358.7549	2.2093	2.2084	0.4849

β=0.99

	η	η		η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup>
m	(Ia. Zona)	(2a. Zona)	Punto de extensión:	(1a. Zona)	(2a. Zona)
-0.5	2.9845	1982	0.3885	1	1
-0.3	3.383	1287.65	0.787	1.1335	0.6497
0	3.9795	1216.494	0.825	1.3334	0.6138
0.3	4.576	1042.08	0.7354	1.5333	0.5258
1	5.965	962.5	0.6057	1.9987	0.4856

#### 4.1.4 Gráficas variando b

El último parámetro que se estudió en el modelo fue b. En el capítulo 2 se vio que  $b = HL^2/kT$ , es decir la relación del módulo elástico(H) y la energía asociada con el movimiento browniano (kT). Entonces, b puede interpretarse como la rigidez de la mancuerna, entendiéndose en esta tesis como rigidez la oposición que pone la mancuerna a deformarse. Así por ejemplo cuando  $b \to \infty$  tenemos el caso límite de la mancuerna de Hooke. El resultado de estos cálculos se muestra en las gráficas 4.46-4.54.

En las gráficas 4.46, 4.47, 4.48, 4.49 y 4.50 podemos apreciar que la primera zona no se ve afectada al variar el valor de b, mientras que la segunda zona la viscosidad aumenta con b. Este resultado es lógico, pues como se ha mencionado, en la primera zona la deformación de la mancuerna no es tan drástica y por lo tanto la rigidez de la mancuerna no afecta a la viscosidad, mientras que en la segunda zona, en donde la mancuerna se ha deformado y estirado por completo, una mayor rigidez se traduce en una viscosidad más alta, ya que entre más rigida sea la mancuerna ésta pondrá más resistencia a ser deformada. Por otro lado, el punto de extensión súbita se alcanza al mismo tiempo para los flujos uniaxial, planar, m = -0.3 y m = 0.3, mientras que para el flujo biaxial este punto ocurre primero para las moléculas con menor b.

Se debe mencionar que algunas de estas gráficas no muestran el valor límite de la viscosidad en la segunda zona debido a que, al querer llevar los cálculos a rapidez de extensión mayores, el programa presentó problemas numéricos en los que se obtenían valores de viscosidad negativos.

De las gráficas en las que se comparan los flujos con un mismo valor de b tenemos nuevamente que el tipo de flujo afecta al valor de la viscosidad tanto en la primera zona como en la segunda. Como en anteriores gráficas la viscosidad en la primera zona, para m > -0.5, es más alta que la viscosidad extensional uniaxial, mientras que en la segunda zona la viscosidad del flujo biaxial está por debajo de la viscosidad uniaxial. En cuanto al punto de extensión súbita se observa que en general éste se alcanza antes para el flujo uniaxial y el último es para el flujo biaxial, excepto para el valor más bajo de b (ver gráfica 4.51) en donde el punto de extensión súbita prácticamente es el mismo para todos, lo que indica que el valor de b afecta este punto.

Por último, de la tabla 6 podemos apreciar que nuevamente la viscosidad del flujo biaxial es el doble que la viscosidad del flujo uniaxial en la primera zona y la mitad de ésta en la segunda zona. También se sigue conservando la simetría entre los flujos m = -0.3, m = 0 y m = 0.3.



Gráfica 4.46 Viscosidad extensional del flujo uniaxial (m≃-0.5)-vs-rapidez de extensión con π=0.5, v1=0.5, α=1.0, β=0.373, para diferentes valores de b.





TESS CON
FALLE. DE CEUGEN



Gráfica 4.48 Viscosidad extensional del flujo planar (m=0)-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1.0,  $\beta$ =0.373, para diferentes valores de b.



Gráfica 4.49 Viscosidad extensional del flujo m=-0.3-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1.0,  $\beta$ =0.373, para diferentes valores de b.





**Gráfica 4.50** Viscosidad extensional del flujo m=0.3-vs-rapidez de extensión con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1.0,  $\beta$ =0.373, para diferentes valores de b.

TE	SIS	CON
FALLA	DE	UNIGEN



**Gráfica 4.51** Comparación de la viscosidad extensional de los 5 flujos para b=100 y con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1,  $\beta$ =0.373.









Gráfica 4.53 Comparación de la viscosidad extensional de los 5 flujos para b=2000 y con  $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5,  $\alpha$ =1,  $\beta$ =0.373.



# Viscosidad extensional para los diferentes flujos $\pi$ =0.5, v1=0.5, v2=0.5, $\alpha$ =1 y $\beta$ =0.373

.

			b=100		
m	η (Ia. Zona)	η (2a. Zona)	Punto de extensión:	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1a. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2a. Zona)
-0.5	3.3	73.68	1.19	1	1
-0.3	6.1715	75.4347	0.9583	1.8702	1.0238
0	7.2505	73.7018	1.2488	2.1971	1.0003
0.3	8.3336	75.192	1.1428	2.5253	1.0205
1	6.5983	40.5252	1.34	1.9995	0.5500

b=500

m	η (1a. Zona)	η (2a. Zona)	Punto de extensión:	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1a. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2a. Zona)
-0.5	3.3	366.1382	1.19	1	1
-0.3	6.1715	343.8776	0.9583	1.8702	0.9392
0	7.2505	347.1378	1.2488	2.1971	0.9481
0.3	8.3336	339.2601	1.1428	2.5253	0.9266
1	6.5983	179.9695	1.873	1.9995	0.4915

b=2000

m	η (1a. Zona)	η (2a. Zona)	Punto de extensión:	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1a. Zona)	η <sup>///η<sup>0.5</sup> (2a. Zona)</sup>
-0.5	3.3	1399.56	1.19	1	1
-0.3	6.1715	1099.701	0.9583	1.8702	0.7857
0	7.2505	938.9785	1.2488	2.1971	0.6709
0.3	8.3336	899.9771	1.1428	2.5253	0.6430
1	6.5983	710.9695	1.873	1.9995	0.5080

b=10000

m	η (Ia. Zona)	η (2a. Zona)	Punto de extensión:	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (1a. Zona)	η <sup>m</sup> /η <sup>0.5</sup> (2a. Zona)
-0.5	3.3	6706.5	1.19	1	1
-0.3	6.1715	1950.08	0.9583	1.8702	0.2908
0	7.2505	1939.3669	1.2488	2.1971	0.2892
0.3	8.3336	1930.263	1.1428	2.5253	0.2878
1	6.5983	3636.05	2.2544	1.9995	0.5422

775 1.4 FALID Juli

### 4.2 Gráficas de la traza y la deformación

Adicionalmente se realizaron cálculos de algunos flujos para estudiar el comportamiento de la traza (z), que relaciona la longitud de extensión de la mancuerna y las deformaciones  $(y_1 \ y \ y_2)$  de las mancuernas, de las cuales debemos recordar que se deben interpretar como deformaciones en dos distintas direcciones. Los resultados obtenidos se muestran a continuación.

#### 4.2.1 Gráficas de la traza y la deformación caso uniaxial

Las gráficas 4.55, 4.56 y 4.57 muestran el efecto de  $\beta$  (efecto de la concentración) en las curvas de extensión y de la primera deformación. En las tres gráficas podemos observar que en un inicio, las curvas de la traza y la deformación están separadas y tienen un comportamiento distinto, ya que mientras la curva de la traza se mantiene constante la curva de la deformación crece de forma monótona, pero después, a una determinada rapidez de extensión ( $\dot{\epsilon}$  aproximadamente 1), estas dos curvas se juntan y se comportan igual llegando las dos a un valor límite que en este caso es 1. Se debe notar que la región en la cual la traza tiene un valor constante coincide con la primera zona de las gráficas presentadas anteriormente. En esta zona la mancuerna tiene un cierto valor de extensión (determinado por las condiciones de iniciales de  $\pi$ y  $\nu$ ) pero el flujo es todavía débil como para poder extender más la mancuerna, sin embargo, si observamos la curva de la deformación ésta crece linealmente en esa zona. es decir, la configuración inicial que tiene la mancuerna se está deformando sin cambiar apreciablemente de longitud. Después de esta región las curvas crecen juntas, es decir, toda la deformación se convierte en extensión de la mancuerna hasta llegar a un punto en el cual ocurre un cambio súbito de extensión.

Por otra parte, observamos que en la gráfica 4.55 tanto la curva de la traza como la de la deformación presenta el fenómeno de históresis, mientras que para la gráfica 4.56 (la de menor concentración) este fenómeno es apenas perceptible, por su parte, en la gráfica 4.57 ( donde se tiene la concentración más alta) estas curvas no presentan históresis. Entonces, como se vio en la sección de gráficas en las que se vario  $\beta$ , al parecer la históresis está muy relacionada con el paramétro de concentración.

La gráficas 4.58 muestra nuevamente el comportamiento de la traza y la deformación contra la rapidez de extensión a un valor de  $\alpha$  igual a 100 y  $\beta = 0.2$ , es decir, las mancuernas son 100 veces más elásticas que en el caso anterior. El comportamiento de la curva de deformación es similar al de la gráfica 4.55, donde  $\alpha = 0.1$ , mientras que en la curva de la traza la zona que permanece constante es más pequeña dando lugar a que el valor de la rapidez de extensión en la cual se juntan la curva de la traza y la deformación sea menor ( $\dot{\epsilon}$  aproxiamdamene 0.015) y como consecuencia la región en la cual la mancuerna es extendida sea más grande. También obsevamos que en la gráfica 4.58 el fenómeno de histéresis es más pronunciado que en la gráfica 4.55, por lo cual asociamos también la histéresis a efectos elásticos. Este hecho se explica tomando en cuenta que al aumentar el valor de  $\alpha$  se aumenta la elasticidad de las mancuernas por lo que son más susceptibles a ser deformadas y alargadas por el flujo.

- 4	and the second s	·····
	and the second sec	िली
	FALLA DA	CantilEN

Las gráficas 4.59, 4.60, 4.61 y 4.62 muestran el comportamiento de las curvas de la traza y la deformación uno a las diferentes condiciones mencionadas con anterioridad. Estas curvas muestran de forma más clara que existe una zona en la que mientras la deformación  $(y_1)$  crece la extensión de la mancuerna, representada por la traza (z), permanece constante hasta cierto valor de  $\dot{\epsilon}$  después del cual toda deformación se transforma en extensión de la mancuerna y la traza comienza a crecer de forma monótona. Si observamos las gráficas 4.61 y 4.62 en las cuales se esta cambiando la concentración, es decir  $\beta$  no notamos ninguna diferencia entre éstas, mientras que la gráfica 4.60 (con  $\alpha$  de 100) muestra que la región en la que la traza es constante es mucho menor. Esto último podría explicarse si tenemos encuenta que la elasticiad es la capacidad que tiene la mancuerna para recuperar su forma original, entonces, entre más elástica sea la mancuerna su longitud se vera menos afectada. Por otra parte, la región en la que la traza y deformación crecen no se ve afectado por le valor de  $\alpha$  ya que la pendiente en dicha zona de es la misma.



Gráfica 4,55 Traza y primera deformación contra rápidez de extensión (caso uniaxial) π=0.5 v1=0.5 α=1.0 β=0.200 b=1000



Gráfica 4.56 Traza y primera deformación contra rápidez de extensión (caso uniaxial)  $\pi$ =0.5 v1=0.5  $\alpha$ =1.0  $\beta$ =0.05 b=1000

TE	्रमु	erny -
FALLA	<u>De</u> i	UNCEN









THE	- R	门前	
FALLA	辺辺	VIEGEN	



 $\pi=0.5 \text{ v1}=0.5 \alpha=100 \beta=0.200 b=1000$ 

		And the second s
TES	19	CON
FALLA	Û.	UniCEN



Gráfica 4.62 z contra y1 (caso uniaxial)  $\pi$ =0.5 v1=0.5  $\alpha$ =1  $\beta$ =0.990 b=1000

TES	<u>II (</u>	<u>coli</u>
FALLA	ÛΈ	UniCEN
#### 4.2.2 Gráficas de la traza y la deformación caso biaxial

Las siguientes gráficas 4.63-4.70 muestran el comportamiento del flujo biaxial con las condiciones anteriores. En estas gráficas las curvas de la traza y la deformación presentan casi el mismo comportamiento que en el caso uniaxial, es decir, existe la presencia de la curva de histéresis en las dos variables  $y_2$  y z tanto para  $\beta = 0.05$  y  $\beta = 0.2$  pero ésta desaparece en  $\beta = 0.990$ . Sin embargo, a diferencia del flujo uniaxial en las gráficas 4.63 y 4.64 las curvas de la traza y deformación dos están separadas, de hecho se puede apreciar que la curva de la traza está por encima de la curva de deformación, así que para un determinado valor de  $\dot{\epsilon}$  el valor de la traza será mayor que el de la deformación dos. El hecho de que la curva de la traza y la deformación no coincidan, como en el caso uniaxial, podría asociarse a que en el caso biaxial existe una doble orientación de las mancuernas por lo que éstas presentan una menor deformación, lo cual podría explicar el por que la viscosidad en el caso biaxial es menor que la viscosidad uniaxial.

La gráfica 4.65, en donde se ha aumentado la concentración,  $\beta = 0.990$ , muestra que las curvas de la traza y la deformación no presentan histéresis, sin embargo aquí sí existe una zona en la que la extensión y la deformación son iguales (aproximadamente a una rapidez de extensión de 1) después de la cual nuevamente las curvas se vuelven a separar y, al igual que las gráficas anteriores, la curva de la deformación está por debajo de la curva de la traza.

La gráfica 4.66, en donde se aumenta la elasticidad de la mancuerna, muestra un comportamiento similar al del caso uniaxial previamente analizado, es decir, notamos que la zona en donde la traza es constante es pequeña, mientras que la deformación va creciendo, depués de esta región la traza y la deformación crecen, pero a diferencia del caso uniaxial las curvas no se juntan y la traza siempre está por arriba de la curva de la deformación, después viene el cambio súbito de extensión y de deformación en donde nuevamente existe el desfasamiento de curvas permaneciendo la traza arriba de la deformación. Como se explicó previamente esta separación se debe seguramente a que en el flujo biaxial existen dos direcciones de orientación y por lo tanto la deformación es menor.

En las gráficas 4.67, 4.68, 4.69 y 4.70 se muestran otra vez la relación entre la traza y la segunda deformación, al igual que en el caso uniaxial existe una zona en la que la traza permanece constante mientras que la deformación crece, después la curva crece de forma mónotona, pero, a diferencia de éste, la pendiente en esta zona es aproximadamente de dos en todas las curvas, esto seguramente ligado a la relación que guarda el flujo biaxial con el uniaxial según la regla de Truton. Por otra parte, un resultado interesante lo encontramos en la gráfica 4.70 en donde observamos que cuando z es aproximadamente 0.9 tenemos dos valores de  $y_2$ . Esto sugiere que hay que hacer un análisis de estabilidad para saber si los dos valores de  $y_2$  son estables.

TEC	110	CUM
FALLA	De	UmGEN



Gráfica 4.63 Traza y segunda deformación contra rápidez de extensión (caso biaxial) =0.5 v2=0.5  $\alpha$ =1.0  $\beta$ =0.05 b=1000





TE	Sin	CON
FALLA		CARLEN .















TE	SIS	CUM	٦
FALLA	<u>)</u> .	<u>. Gen</u>	



Gráfica 4.70 z contra y2 (caso biaxial)  $\pi$ =0.5 v2=0.5  $\alpha$ =100  $\beta$ =0.200 b=1000

and the second se	1	
TESIS :	1UN	
FALLS 115	Satur	

### 4.2.3 Gráficas de la traza y la deformación caso planar

Las gráficas 4.71, 4.72 y 4.73 muestran las curvas de la traza y las dos deformaciones en el caso planar; a diferencia del caso uniaxial y biaxial notamos que tenemos una curva de deformación extra, esto se debe a que, como se recordará, en el gradiente de velocidades, del caso planar, los tres elementos de la diagonal son diferentes. Entonces, en este caso es posible definir dos diferencias de esfuerzos normales y por lo tanto dos distintas deformaciones. Las gráficas 4.71 y 4.72 muestran que las curvas asociadas a la traza y a la deformación uno  $(y_1)$  tienen un comportamiento similar al descrito en el flujo uniaxial y biaxial. En estas mismas gráficas observamos al inicio que la segunda deformación  $(y_2)$  presenta un crecimiento monótono, sin embargo, a una determinada rapidez de extensión esta curva comienza a bajar, este descenso es más notorio cuando la solución es menos concentrada, es decir para  $\beta = 0.05$ , mientras que la gráfica 4.73 donde  $\beta = 0.990$  (la solución más concentrada de polímero) el comportamiento de las curvas de la traza y la primera deformación,  $y_1$ , tienen un comportamiento similar al descrito para el flujo uniaxial y biaxial pero la curva de la segunda deformación,  $y_2$ , ya no presenta un descenso y su comportamiento es como el de la curva de la primera deformación sólo que el límite superior que alcanza es menor. Para dar una interpretación a este comportamiento de las dos deformaciones se utilizará la figura 1.3, que representa la deformación planar de un sólido, ya que es más facíl imaginar que le pasa a  $y_1$  y  $_y2$  en un sólido que a un elemento material de una solución polimérica. De hecho el diagrama podría corresponder a una muestra de polímero fundido que equivaldría a la solución más concentrada, gráfica 4.73.

Teniendo en mente que  $y_1$  y  $y_2$  representan deformaciones en dos distintas direcciones, la gráfica 4.73 muestra que en un inicio las deformaciones son simétricas es decir, las deformaciones tanto de compresión como de alargamiento que ocurre en el flujo planar son de la misma magnitud, sin embargo, después existe una zona a partir de la cual éstas comienzan a separarse (aproximadamente a  $\dot{\varepsilon} = 1.5E-2$ ) incluso a alta rapidez de extensión, como ya se mencionó,  $y_2 < y_1$  lo que daría como resultado que la deformación en una dirección sea mayor que en la otra, es decir una deformación asimétrica (ver figura 4.5). Esta deformación asimétrica, como lo sugieren las gráficas 4.71 y 4.72 en donde inclusive se observa que la segunda deformación cae a alta rapidez de extensión, será más evidente conforme la concentración sea menor, esto probablemente se debe a que, como ya se mencionó, una solución polimérica es más lábil.

En la gráfica 4.74 se cambió el número de Débora y ésta muestra que el comportamiento de las curvas de la traza y la deformación uno son similares a las descritas en los casos uniaxial y biaxial, mientras que nuevamente la deformación dos muestra un descenso a cierta rapidez de extensión, lo cual sugiere que la elásticidad tiene el mismo efecto que la concentración sobre  $y_1, y_2 y z$ .

Por último en las gráficas 4.75 a la 4.82 se observa la traza contra cada deformación para las distintas condiciones que se presentaron con anterioridad. En las gráficas 4.75, 4.77, 4.79 y 4.81, donde se muestra el comportamiento de la traza contra la primera deformación, notamos que nuevamente existe en todos los casos una región en la que la traza permanece constante hasta llegar a un punto en la que crece de forma monótona con una pendiente aproximadamente de uno. Notar que nuevamente la zona donde la

TESIS	<u>nou</u>
FALLA DE	CAGEN



Figura 4.5: Deformación planar

traza es constante disminuye cuando se eleva el valor del número de Débora, es decir cuando se incrementa la elasticidad de la mancuerna.

Por otra parte, las gráficas 4.76, 4.78, 4.80 y 4.82 en donde se observa a la traza contra la segunda deformación, muestran también una zona en la que la traza es constante para después crecer con la segunda deformación en forma monótona, sin embargo, a diferencia de las gráficas de la traza contra la deformación uno, en las gráficas 4.76, 4.78 y 4.80 notamos que a partir de un determinado valor de la segunda deformación existen dos valores de la traza (nótese que para la solución más concentrada de polímero,  $\beta = 0.99$  este fenómeno no existe).









and the second	
TESIS CO	V
FALLA DA US	Min N





Gráfica 4.74 Traza (z) y deformaciones (y1) (y2) contra rápidez de deformación (caso planar)  $\pi$ =0.5 v1=v2=0.5  $\alpha$ =100  $\beta$ =0.200 b=1000





TESIS CON FALLA DE ORGEN



TESIS CON FALLE DES CLUREN





TES	ŢĊ	NOM
FALLA	ÛB	UnidEN



 $\pi$ =0.5 v1=v2=0.5  $\alpha$ =1  $\beta$ =0.990 b=1000

TESIS CON FALLA DE UMGEN

# Capítulo 5 Casos asintóticos

de la la	1777F	يون ا	
FALLER	Day	Uniden	

## 5.1 Caso asintótico a fuerza pequeña

Se realizó un análisis asintótico de las ecuaciones del modelo matemático para determinar el comportamiento de éste en el caso límite de fuerza pequeña. Par tal fin, se realizarón expansiones asintóticas de las ecuaciones 3.92, 3.93, 3.94 y 3.95 así como a sus respectivas condiciones iniciales. Los objetivos de este análisis son:

- Determinar del modelo matemático desarrollado en el capítulo 3, las ecuaciones a orden cero y primer orden suponiendo que se aplica una fuerza pequeña, es decir a baja rapidez de extensión, y con estas ecuaciones hacer un análisis en las siguientes condiciones:
  - Número de Débora pequeño.
  - Modelo de Maxwell ( $\beta = 1$ ).
  - Mancuernas de Hooke  $(b \rightarrow \infty)$
  - Número de Débora grande.

El análisis asintótico se realizó utilizando el método de perturbaciones regulares, éste consiste en utilizar una variable que deberá estar relacionada con el paramétro con el cual queremos probar el modelo, con esta variable de perturbación se propone una solución de la ecuación diferencial. Después se sustituye la solución propuesta en la ecuación diferencial y se realizan las operaciones algebraicas correspondientes, posteriormente se eliminan los términos mayores a primer orden. Una vez que se han eliminado estos términos es posible separar a la ecuación en dos, una que será a orden cero y la otra a orden uno. Con este método se ha descompuesto la ecuación original en un sistema de ecuaciones que debe resolverse sistemáticamente, es decir primero es necesario resolver la ecuación a orden cero y así resolver a orden uno.

#### 5.1.1 Análisis a fuerza pequeña

En nuestro caso el método de perturbaciones regulares se aplicó a cada una de las siguientes ecuaciones:

$$\alpha u \dot{y}_1 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u} [(m+2)y_1 + (1-m)(y_2 + z)] + \frac{y_1}{1-z} = 0$$
 (5.1)

$$\alpha u y_2 - \frac{2}{3} \alpha u [(2m+1)(z-y_1) - (m+2)y_2] + \frac{y_2}{1-z} = 0$$
 (5.2)

$$\alpha u\dot{z} - 2\alpha \dot{u}[y_1 + (m+1)y_2] + \frac{z}{1-z} = \frac{a^2b}{b+2} = \frac{3Gb}{nH(b+2)} = \frac{3}{b+2}$$
(5.3)

$$\alpha \frac{u}{\zeta} = \frac{\beta b}{1-z} (y_1 + y_2) + 2(m+2)(1-\beta)\alpha \dot{u}$$
 (5.4)



que corresponden al sistema de ecuaciones del modelo que se desarrolló en el capítulo 3.

La última ecuación se puede escribir en términos de  $\delta$  como:

$$2(m+2)(1-\beta)\alpha \dot{u} + \frac{\beta b}{1-z}(y_1+y_2) = \alpha u\delta$$
 (5.5)

Las ecuaciones anteriores están sujetas a las siguientes condiciones de frontera u(0) = 1,  $y_1(0) = Y_{1frontera}, y_2(0) = Y_{2frontera} y z(0) = Z_{frontera}$ .

Nuestra variable de perturbación es  $\delta$ , y está relacionada con la la fuerza de extensión que se aplica a la solución,  $\delta$  se define como [21]:

$$\delta = (\zeta)^{-1}$$

esta definción de la variable  $\delta$  se debe a que, como se recordará  $\zeta = \frac{\eta Q}{FL_s}$ , entonces  $\delta = \frac{FL_s}{\eta Q}$  y por lo tanto, es proporcional a la fuerza aplicada <u>F</u>. Así que, si la fuerza es pequeña  $\delta$  también lo es y entonces podemos analizar el comportamiento del modelo en el caso límite de fuerza pequeña o bien, a baja rapidez de extensión.

Las soluciones propuestas para las ecuaciones 5.1, 5.2, 5.3 y 5.5 pueden expresarse como:

$$u = u^0 + \delta u^1 + \cdots \tag{5.6}$$

$$y_1 = y_1^0 + \delta y_1^1 + \cdots$$
 (5.7)

$$y_2 = y_2^0 + \delta y_2^1 + \cdots$$
 (5.8)

$$z = z^0 + \delta z^1 + \cdots$$
 (5.9)

Sustituyendo las soluciones propuestas 5.6, 5.7, 5.8 y 5.9 en la ecuaciones diferenciales 5.1,5.2,5.3 y 5.5, y despreciando términos mayores a primer orden, obtenemos las ecuaciones a orden cero y a orden uno.

• Ecuaciones a orden cero

$$\alpha u^0 \dot{y}_1^0 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u}^0 [(m+2)y_1^0 + (1-m)(y_2^0 + z^0)] + \frac{y_1^0}{1-z^0} = 0 \quad (5.10)$$

$$\alpha u^0 \dot{y}_2^0 - \frac{2}{3} \alpha \dot{u}^0 [(2m+1)(z^0 - y_1^0) - (m+2)y_2^0] + \frac{y_2^0}{1 - z^0} = 0 \quad (5.11)$$

$$\alpha u^{0} \dot{z}^{0} - 2\alpha \dot{u}^{0} [y_{1}^{0} + (m+1)y_{2}^{0}] + \frac{z^{0}}{1-z^{0}} = \frac{a^{2}b}{b+2} = \frac{3Gb}{nH(b+2)} = \frac{3}{b+2}$$
(5.12)

$$2(m+2)(1-\beta)\alpha \dot{u}^{0} + \frac{\beta b}{1-z^{0}}(y_{1}^{0}+y_{2}^{0}) = 0$$
 (5.13)

TES	13	CON
FALLA	1)].	UNICEEN

En donde se utiliza la notación de Newton para señalar la derivada. Se debe notar que las tres primeras ecuaciones a orden cero (5.10, 5.11 y 5.12) son similares a la ecuaciones 5.1, 5.2 y 5.3, mientras que la ecuación 5.13 es similar a la ecuación 5.5, excepto por el término  $\alpha u\delta$ , pues este pertenece a la aproximación a orden uno.

• Ecuaciones a orden uno

$$\alpha \left[ u^{0}(1-z^{0})\dot{y}_{1}^{1} + (u^{1}-u^{0}z^{1}-u^{1}z^{0})\dot{y}_{1}^{0} \right] - \frac{2}{3}\alpha$$

$$\left[ \dot{u}^{0}(1-z^{0})\left( (m+2)y_{1}^{1} + (1-m)(y_{2}^{1}+z^{1}) \right) + (\dot{u}^{1} - \dot{u}^{0}z^{1} - \dot{u}^{1}z^{0} \right) \left( (m+2)y_{1}^{0} + (1-m)(y_{2}^{0}+z^{0}) \right) \right] + y_{1}^{1} = 0 \qquad (5.14)$$

$$\alpha \left[ u^{0}(1-z^{0})\dot{y}_{2}^{1} + (u^{1}-u^{0}z^{1}-u^{1}z^{0})\dot{y}_{2}^{0} \right] - \frac{2}{3}\alpha$$

$$\left[ \dot{u}^{0}(1-z^{0}) \left( (2m+1)(z^{1}-y_{1}^{1}) - (m+2)y_{2}^{1} \right) + (\dot{u}^{1} - \dot{u}^{0}z^{1} - \dot{u}^{1}z^{0} \right) \left( (m+2)y_{2}^{0} + (2m+1)(z^{0} - y_{2}^{0}) \right) \right] + y_{2}^{1} = 0 \qquad (5.15)$$

$$\alpha \left[ (u^{0}\dot{z}^{1} + u^{1}\dot{z}^{0})(1 - z^{0}) - u^{0}z^{1}\dot{z}^{0} \right] + 2\alpha \left[ \dot{u}^{0}(1 - z^{0})[y_{1}^{1} + y_{2}^{1}] - (\dot{u}^{0}z^{1} + \dot{u}^{1}(1 - z^{0}))[y_{1}^{0} + (m + 1)y_{2}^{0}] \right] + z^{1} \left( \frac{b+5}{b+2} \right) = 0$$
(5.16)

$$2(m+2)(1-\beta)\alpha\left[\frac{\dot{u}^{1}-z^{1}\dot{u}^{0}}{(1-z^{0})}\right] + \frac{b\beta[y_{1}^{1}+y_{2}^{1}]}{(1-z^{0})} - \alpha u^{0} = 0$$
(5.17)

Altora consideraremos la forma en la que las condiciones iniciales entran en el problema. Para este fin se realizaron expansiones asintóticas de las condiciones iniciales las cuales dieron los siguientes resultados:

$$y_1(x) = \delta\left(\frac{b+2}{b+5}\right) \frac{\alpha \nu_1}{b\beta} - O(\delta^2)$$
(5.18)

$$y_2(x) = \delta\left(\frac{b+2}{b+5}\right)\frac{\alpha\nu_2}{b\beta} - O(\delta^2)$$
(5.19)

$$z(x) = \frac{3}{b+2} + \delta\left(\frac{b+2}{b+5}\right)\frac{\alpha\pi}{b\beta} - O(\delta^2)$$
 (5.20)

De estas ecuaciones podemos apreciar que a orden cero

$$y_1^0(x) = 0 \tag{5.21}$$

TESIS CON FALLA DE UNICAN

$$y_2^0(x) = 0 (5.22)$$

$$z^{0}(x) = 3/(b+5)$$
(5.23)

Utilizando estos resultados y la condición de  $u^0(x) = 1$  tenemos que las ecuaciones 5.14, 5.15, 5.16 y 5.17 se reducen a:

$$\dot{y}_1^1 = \frac{2}{3}\dot{u}^1(1-m)z^0 - \frac{y_1^1}{\alpha(1-z^0)}$$
(5.24)

$$\dot{y}_2^1 = \frac{2}{3}\dot{u}^1(2m+1)z^0 - \frac{y_2^1}{\alpha(1-z^0)}$$
(5.25)

$$\dot{z}^1 = -\frac{z^1}{\alpha(1-z^0)}$$
 (5.26)

$$\dot{u}^{1} = \frac{1}{2(m+2)(1-\beta)} - \frac{b\beta[y_{1}^{1}+y_{2}^{1}]}{2\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^{0})}$$
(5.27)

Estas ecuaciones forman un sistema lineal de primer orden. Las tres primeras ecuaciones están acopladas y deben resolverse de forma simultánea, mientras que la ecuación 5.26 es de primer orden homogénea y al no estar acoplada con las otras puede resolverse por separado. La solución de la ecuación 5.26 es la siguiente:

$$z^1 = C_1 e^{-P(x)x} (5.28)$$

donde

$$P = \frac{1}{\alpha(1-z^0)^2}$$

Utilizando la ecuación 5.20 podemos determinar la condición inicial a orden uno para z, entonces tenemos que

$$x = 0$$
  $z^{1}(x) = \left(\frac{b+2}{b+5}\right)^{2} \frac{\alpha \pi}{b\beta}$ 

Con esta condición evaluamos la constante de integración de la ecuación 5.28 y si además sustituimos la expresión a orden cero de z (ecuación 5.23) tenemos que su solución particular es:

$$z^{1} = \left(\frac{b+2}{b+5}\right)^{2} \frac{\alpha \pi}{b\beta} e^{-\left(\frac{b+5}{b+2}\right)^{2} \frac{x}{\alpha}}$$
(5.29)

TESIS CON FALLA DIS UNIDEN

Para resolver el sistema de ecuaciones acoplado procedemos a sustituir la ecuación 5.27 en las ecuaciones 5.24, 5.25 y así reducir el número de ecuaciones en el sistema, el cual queda de la siguiente forma:

$$\dot{y}_{1}^{1} = \left[\frac{2(1-m)z^{0}}{6(m+2)(1-\beta)} - \frac{2(1-m)z^{0}b\beta[y_{1}^{1}+y_{2}^{1}]}{6\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^{0})}\right] - \frac{y_{1}^{1}}{\alpha(1-z^{0})}$$
(5.30)

$$\dot{y}_{2}^{1} = \left[\frac{2(2m+1)z^{0}}{6(m+2)(1-\beta)} - \frac{2(2m+1)z^{0}b\beta[y_{1}^{1}+y_{2}^{1}]}{6\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^{0})}\right] - \frac{y_{2}^{1}}{\alpha(1-z^{0})} \quad (5.31)$$

La solución de este tipo de sistemas es similar a la de una ecuación diferencial de primer orden no homogénea, por lo tanto la solución tiene la siguiente forma:

$$\dot{\overline{w}} = e^{\underline{B}x}\overline{w}(0) + \int_{o}^{x} c^{\underline{B}(x-\xi)}\overline{b}(\xi)d\xi$$
(5.32)

donde  $\dot{w}$  es el vector de funciones,  $\overline{w}(0)$  es el vector de condiciones iniciales, $e^{\underline{B}x}$  es la matriz exponencial,  $\underline{B}$  es la matriz de coeficientes constantes y  $\overline{b}(\xi)$  es el vector no homogéneo del sistema de ecuaciones diferenciales evaluado en  $\xi$ . En este caso cada término tiene la siguiente forma:

Vector de funciones

$$\dot{\overline{w}} = \begin{pmatrix} \dot{y}_1^1 \\ \dot{y}_2^1 \end{pmatrix} \tag{5.33}$$

Matriz de coeficientes constantes

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{2(1-m)b\beta z^0}{6\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^0)} & \frac{2\alpha(1-m)(1-z^0)b\beta z^0+6\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^0)}{6\alpha^2(m+2)(1-\beta)(1-z^0)^2} \\ \frac{2(2m+1)b\beta z^0}{6\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^0)} & \frac{2\alpha(2m+1)(1-z^0)b\beta z^0+6\alpha(m+2)(1-\beta)(1-z^0)}{6\alpha^2(m+2)(1-\beta)(1-z^0)^2} \end{bmatrix}$$
(5.34)

Vector no homogéneo

$$\overline{b} = \begin{pmatrix} \frac{2(1-m)z^0}{6(m+2)(1-\beta)} \\ \frac{2(2m+1)z^0}{6(m+2)(1-\beta)} \end{pmatrix}$$
(5.35)

Vector de condiciones iniciales

$$\overline{w}(0) = \begin{pmatrix} \left(\frac{b+2}{b+5}\right) \frac{\alpha \nu_1}{b\beta} \\ \left(\frac{b+2}{b+5}\right) \frac{\alpha \nu_2}{b\beta} \end{pmatrix}$$
(5.36)

Se debe de recordar que el vector de condiciones iniciales se obtiene de las expansiones asintóticas de éstas a orden uno.

Para encontrar la solución del sistema de ecuaciones diferenciales se procedió primero a calcular la matriz exponencial, para después multiplicarla por el vector de condiciones

	TE	N.	('')	N		
E/	ITTV	ĿЛ			ΞŊ	

inciales según lo indica la ecuación 5.32, después a la variable independiente en la matriz exponencial se le restó  $\xi$  para, enseguida, multiplicar este resultado por el vector no homogémeo y realizar así la integral que señala dicha ecuación. Finalmente se sumaron los vectores resultantes de las operaciones antes mencionadas y el resultado se presenta a continuación:

$$\dot{\overline{w}} = \begin{pmatrix} k_1 e^{-k_2} x + k_3 e^{-k_4} x + k_5 \\ k_6 e^{-k_2} x + k_7 e^{-k_4} x + k_8 \end{pmatrix}$$
(5.37)

donde  $k_1$ ,  $k_2$ .... $k_8$  son el producto de una serie de operaciones algebraicas realizadas durante el proceso de solución, éstas están definidas como:

$$k_{1} = \frac{(b+2)(m-1)\alpha[-(\nu_{1}+\nu_{2})(b+5(1-\beta))+b\beta]}{b\beta(b+5)(m+2)(b+5(1-\beta))}$$

$$k_{3} = \frac{\alpha(b+2)(\nu_{1}(2m+1)+\nu_{2}(m-1))}{b\beta(b+5)(m+2)}$$

$$k_{5} = \frac{\alpha(b+2)(m-1)}{(b+5)(m+2)(b+5(1-\beta))}$$

$$k_{6} = \frac{\alpha(b+2)(2m+1)[(\nu_{1}+\nu_{2})(b+5(1-\beta))-b\beta)}{b\beta(b+5)(m+2)(b+5(1-\beta))}$$

$$k_{7} = \frac{-\alpha(b+2)(\nu_{1}(2m+1)+\nu_{2}(m-1))}{b\beta(b+5)(m+2)}$$

$$k_{8} = \frac{\alpha(b+2)(2m+1)}{(b+5)(m+2)(b+5(1-\beta))}$$

$$k_{2} = \frac{b+5(1-\beta)}{\alpha(b+2)(1-\beta)}$$

$$k_{4} = \frac{b+5}{\alpha(b+2)}$$

Sustituyendo las soluciones encontradas de  $y_1^1$  y  $y_2^1$  en la ecuación 5.27 e integrando obtenemos la siguiente solución general para  $u^1$ :

$$u^{1}(x) = k_{9}e^{-k_{2}x} + k_{10}e^{-k_{4}x} + k_{11}x + C_{2}$$
(5.38)

para evaluar la constante de integración  $C_2$  utilizamos la condición inicial  $u_1(0) = 1$ , por lo que la solución particular de esta ecuación es:

127

$$u^{1}(x) = k_{12}e^{-k_{2}x} + k_{13}e^{-k_{4}x} + k_{14}x - k_{15}$$
(5.39)

TESIA CON FALLA DE CLAGEN donde

$$= \frac{\alpha(b+2)[(\nu_1+\nu_2)(b+5(1-\beta))-b\beta]}{2(m+2)(b+5(1-\beta))^2}$$
(5.40)

$$k_{13} = 0 \tag{5.41}$$

$$k_{14} = \frac{b+5}{2(m+2)(b+5(1-\beta))}$$
(5.42)

$$k_{15} = \frac{\alpha(b+2)[(\nu_1+\nu_2)(b+5(1-\beta))-b\beta]}{2(m+2)(b+5(1-\beta))^2}$$
(5.43)

Es importante notar que cuando  $m = \frac{-1}{2}$  y con la condición inicial  $y_2^1(0) = 0$ , tenemos que  $k_6 = k_7 = k_8 = 0$ , por lo que  $y_2^1 = 0$  y entonces el sistema se reduce al caso uniaxial reportado por Petrie [21]. Si por otra parte m = 1, y utilizando la condición inicial  $y_1^1(0) = 0$  entonces  $k_1 = k_3 = k_5 = 0$  y  $y_1^1 = 0$ 

### 5.1.2 Relación de Trouton

 $k_{12}$ 

Para el modelo de mancuernas, se conoce que la relación entre la viscosidad cortante y la viscosidad total de la solución a baja rapidez de extensión tiene la siguiente expresión [18]:

$$\frac{\eta}{\eta_s + \eta_p} = 1 - \beta + \frac{b\beta}{b+5} \tag{5.44}$$

Esta ecuación define una viscosidad cortante adimensional referida a la viscosidad de la solución.

Utilizando la ecuación 3.100 y los resultados de las expansiones asintóticas a orden uno tenemos que:

128

$$\eta_E = \frac{\delta u(x)}{\dot{u}(x)} \tag{5.45}$$

$$\dot{u}(x) = \delta \dot{u}^1(x) \tag{5.46}$$

У

$$\delta u(x) = \delta u^0(x) \tag{5.47}$$

Entonces si sustituimos 5.47 y 5.46 en 5.45

$$\eta_E = \frac{\delta u^0(x)}{\delta \dot{u}^1(x)} \tag{5.48}$$

TESIS CON FALLE DE DEUGEN cancelando  $\delta$  y sabiendo que  $u^0(x) = 1$ 

$$E = \frac{1}{\dot{u}^1(x)} \tag{5.49}$$

Similarmente para la viscosidad extensional promedio tenemos

$$\overline{\eta}_E = \frac{\delta}{\ln[u_0(1) + \delta u_1(1) + \cdots]}$$
(5.50)

Si tomamos sólo hasta orden uno y además sustituimos el valor de  $u_0$  que es igual a uno, la ecuación 5.50 queda como

$$\vec{\eta}_E = \frac{1}{u_1(1)}$$
(5.51)

Ahora tomando derivada de la ecuación 5.39 y sustituyendo en la ecuación de  $\eta_E$ 

$$\eta_E = \frac{1}{-k_2 k_{12} e^{-k_2 x} - k_4 k_{13} e^{-k_4 x} + k_{14}}$$
(5.52)

Si sustituimos las expresiones de  $k_2$ ,  $k_{12}$ ,  $k_4$ ,  $k_{13}$  y  $k_{14}$  y realizamos las operaciones algebraicas obtenemos que,

$$\eta_E = \frac{2(m+2)(b+5(1-\beta))}{(b+5)-(\nu_1+\nu_2)(b+5(1-\beta)-b\beta)}$$
(5.53)

Las ccuaciones de las viscosidades cortante (ecuación 5.44) y extensional (ecuación 5.53) se pueden comparar ya que se utilizó la misma variable caracteristica para hacerlas adimensional, es decir las dos están divididas entre la viscosidad total de la solución [11], sin embarago, hasta el momento no es posible determinar si se cumple la relación de Truton. Para tal fin es necesario especificar las condiciones a las cuales se obtiene dicha relación.

#### 5.1.3 Análisis a número de Débora pequeño

En esta sección consideramos el caso en el que el número de Débora ( $\alpha$ ) es pequeño, es decir cuando se tiene baja elasticidad de las mancuernas. Tomando la derivada con respecto a x de la ecuación 5.39:

$$u^{1}(x) = -k_{2}k_{12}c^{-k_{2}x} - k_{4}k_{13}e^{-k_{4}x} + k_{14}$$
(5.54)

Si el  $\alpha \to 0$  entonces  $k_2 \to \infty$  y  $k_4 \to \infty$  por lo tanto  $e^{-k_2x} \to 0$  y  $e^{-k_4x} \to 0$ Por lo tanto, en las ecuaciones 5.39 y 5.54, los términos con las exponenciales se cancelan lo que da como resultado:

$$\dot{u}^1(x) = k_{14} \tag{5.55}$$

y

$$u^{1}(x) = k_{14}x - k_{15}$$
 (5.56)

TESIS CON PALLA DA DARSEN

Por lo que la viscosidad de extensión y el promedio de esta viscosidad quedan de la siguiente manera:

$$\eta_E^m = \frac{1}{\dot{u}^1} = \frac{1}{k_{14}} \tag{5.57}$$

$$\overline{\eta}_E^m = \frac{1}{u^1(1)} = \frac{1}{k_{14}(1) - k_{15}}$$
(5.58)

Sustitiyendo el valor de  $k_{14}$  y haciendo álgebra en 5.57 llegamos a

$$\eta_E^m = \frac{2(m+2)(b+5(1-\beta))}{b+5}$$
(5.59)

Evaluando para los casos uniaxial, biaxial y planar los resultados son los siguientes:

$$\eta_E^{-0.5} = 3(1 - \beta + \frac{b\beta}{b+5})$$
(5.60)

$$\eta_E^1 = 6(1 - \beta + \frac{b\beta}{b+5}) \tag{5.61}$$

$$\eta_E^0 = 4(1 - \beta + \frac{b\beta}{b+5}) \tag{5.62}$$

El factor entre parentesis del lado derecho de estas tres últimas ecuaciones es la viscosidad relativa a baja rapidez de extensión, definida en la ecuación 5.44. En estas ecuaciones notamos que para los tres casos, en los que el números de Débora se supone pequeño, el modelo sí cumple con la relación de Truton [12] en donde la viscosidad extensional es tres veces la viscosidad cortante para el caso uniaxial, seis veces la viscosidad cortante para el caso biaxial y cuatro veces la viscosidad cortante para el caso planar.

#### 5.1.4 Modelo de Maxwell

Este caso corresponde al valor de  $\beta = 1$ , es decir, cuando no hay contribución del solvente o bien la solución es muy concentrada. Si bien es cierto, el modelo de mancuernas está restringida a sistemas de soluciones diluidas de polímero, pero el análisis asintótico nos permite conocer los límites de éste. Si reordenamos las ecuaciones 5.24,5.25 y 5.27 tenemos,

130

$$\alpha \dot{y}_{1}^{1} - \frac{2}{3} \alpha \dot{u}^{1} (1-m) z^{0} + \frac{y_{1}^{1}}{(1-z^{0})} = 0$$
 (5.63)

$$\alpha \dot{y}_{2}^{1} - \frac{2}{3} \alpha \dot{u}^{1} (2m+1) z^{0} + \frac{y_{2}^{1}}{(1-z^{0})} = 0$$
 (5.64)

TESIS CON FALLA DE UNGEN

$$2(m+2)(1-\beta)\alpha \dot{u}^{1} + \frac{b\beta[y_{1}^{1}+y_{2}^{1}]}{(1-z^{0})} = \alpha$$
(5.65)

Si  $\beta = 1$  la ecuación 5.65 queda como:

$$[y_1^1 + y_2^1] = \frac{\alpha(1 - z^0)}{b}$$
(5.66)

El lado derecho de esta ecuación es una constante así, derivándola queda como:

$$[\dot{y}_1^1 + \dot{y}_2^1] = 0 (5.67)$$

Ahora bien, sumamos las ecuaciones 5.63 y 5.64 obtemenos,

$$\alpha[\dot{y}_1^1 + \dot{y}_2^1] - \alpha \frac{2}{3} \dot{u}^1 z^0(m+2) + \frac{[y_1^1 + y_2^1]}{1 - z^0} = 0$$
(5.68)

Utilizando los resultados de las ecuaciones 5.66 y 5.67 la ecuación 5.68 queda como,

$$\frac{2}{3}\dot{u}^{1}z^{0}(m+2) - \frac{1}{b} = 0$$
 (5.69)

Despejando  $\dot{u}^1$  y sustituyendo  $z^0 = \frac{3}{b+5}$ 

$$\dot{u}^1 = \frac{b+5}{2(m+2)b} \tag{5.70}$$

sabemos que

$$\eta_E = \frac{1}{\dot{u}^1(x)} \tag{5.71}$$

Sustituyendo  $\dot{u}^1$  de la ecuación 5.70 en esta última ecuación encontramos que la viscosidad extensional es:

$$\eta_E^m = \frac{2(m+2)b}{(b+5)}$$
(5.72)

de esta ecuación se deduce que la viscosidad extensional uniaxial, biaxial y planar son:

$$\eta_E^{-0.5} = \frac{3b}{(b+5)} \tag{5.73}$$

$$\eta_E^1 = \frac{6b}{(b+5)} \tag{5.74}$$

$$\eta_E^0 = \frac{4b}{(b+5)}$$
(5.75)

गमः	ald.	MAN
FALLA	j)y	CONTRACTION NO.

Por otra parte, si en la ecuación 5.44 hacemos  $\beta = 1$  tenemos que

$$\frac{\eta}{\eta_s + \eta_p} = \frac{b}{(b+5)} \tag{5.76}$$

Entonces comparando las ecuaciones 5.73, 5.74 y 5.75 con 5.76 concluimos que incluso para soluciones muy concentradas donde  $\beta = 1$  a baja rapidez de extensión o bien a fuerza pequeña, se cumple la regla de Truton para los casos uniaxial, biaxial y planar. Además tomando el límite de la ecuación 5.76 cuando  $b \to \infty$ , es decir para macuernas muy rigidas, tenemos que b/(b+5) tiende a uno. Con este resultado la viscosidad extensional uniaxial, biaxial y planar de las ecuaciones 5.73, 5.74 y 5.75 son las siguientes:  $\eta_E^{-0.5} = 3$ ,  $\eta_E^1 = 6$  y  $\eta_E^0 = 4$ . Estos resultados pueden ser comparados con las gráficas 4.37, 4.38 y 4.39 en las cuales b = 1000. Se debe observar que la curva que representa la mayor concentración, es decir  $\beta = 0.990$ , cumple con la regla de Truton, pues notamos que a baja rapidez de extensión el valor de la viscosidad extensional es aproximadamente 3 para el caso uniaxial, 6 para el caso biaxial y 4 para el caso planar. Entonces estos resultados nos indican que aunque el modelo de mancuernas es para soluciones diluidas de polímero la regla de Truton se cumple incluso en soluciones muy concentradas si el valor de "b" es muy grande, es decir cuando las mancuernas están totalmente extendidas.

Para calcular la viscosidad extensional promedio utilizamos la ecuación 5.39 de la cual podemos concluir que si  $\beta = 1$   $k_2 \rightarrow \infty$  y  $e^{-k_2} \rightarrow 0$  por lo tanto dicha ecuación queda como

$$u^{1}(x) = k_{17}x - k_{18}$$
 (5.77)

Si evaluamos  $u^{1}(1)$  y además se supone que  $\alpha = 0$  entonces  $k_{18} = 0$  y  $u^{1}(1) = k_{17}$ . Sustituyendo este resultado en la ecuación 5.51 obtenemos la viscosidad extensional promedio

$$\overline{\eta}_E^m = \frac{1}{u^1(1)} = \frac{1}{k_{17}} = 2(m+2)\frac{(b+5(1-\beta))}{b+5}$$
(5.78)

Si  $\beta = 1$  entonces

$$\overline{\eta}_E^m = \frac{2(m+2)b}{b+5}$$
(5.79)

У

$$\eta_E^m = \overline{\eta}_{sp}^m \tag{5.80}$$

Entonces las observaciones hechas anteriormente para la viscosidad extensional uniaxial, biaxial y planar son válidas también para la viscosidad extensional promedio de dichos flujos.

A REAL PROPERTY AND ADDRESS OF TAXABLE PROPERTY.	And a state of the
TESIS (	10)M
FALLS DE	UMBEN

## 5.1.5 Mancuernas de Hooke $(L \rightarrow \infty)$

Dentro de este análisis asintótico se consideró también el caso cuando b  $\rightarrow \infty$ . Si b tiende a infinito L, que es la longitud de la mancuerna, alcanza su valor máximo y se considera que la mancuerna se comporta como una mancuerna rígida.

Si b  $\rightarrow \infty$  entonces la viscosidad cortante definida por la ecuación 5.44 toma el valor de la unidad. Para comprobar esto derivamos con respecto a b la ecuación 5.44 y después tomamos el límite de esta derivada cuando b  $\rightarrow \infty$ . Entonces el resultado de la derivada es:

$$\frac{d\left(\frac{\eta}{\eta_s+\eta_p}\right)}{db} = \frac{d\left(\frac{(1-\beta)(b+5)+b\beta}{(b+5)}\right)}{db} = \frac{d\left([(1-\beta)(b+5)+b\beta](b+5)^{-1}\right)}{db}$$
(5.81)

$$\frac{d\left(\frac{\eta}{\eta_{\star}+\eta_{p}}\right)}{db} = -\left[(1-\beta)(b+5)+b\beta\right]\left\{(b+5)^{-2}(1)\right\} + \left[(1-\beta)+\beta\right] \quad (5.82)$$

Cancelando términos y reordenando la ecuación 5.82

$$\frac{d\left(\frac{\eta}{\eta_s + \eta_p}\right)}{db} = \frac{-(1-\beta)}{(b+5)} - \frac{b\beta}{(b+5)^2} + 1$$
(5.83)

Tomando el límite de la ecuación 5.83 cuando b $\rightarrow \infty$ , tenemos que los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación van a cero y por lo tanto

$$\lim_{b \to \infty} \frac{d\left(\frac{\eta}{\eta_s + \eta_p}\right)}{db} = 1$$
 (5.84)

Ahora la viscosidad extensional y extensional promedio están definidas por  $\eta_E^m = 1/\dot{u}^1(x)$  y  $\overline{\eta}_E^m = 1/u^1(1)$  por lo que en este caso debemos también tomar límites de  $\dot{u}^1$  y  $u^1$  cuando  $b \to \infty$  y sustituir en  $\eta_E^m$  y  $\overline{\eta}_E^m$ .

Entonces, si derivamos la ecuación 5.39 con respecto a x y tenemos en cuenta que  $k_{13}$  es igual a cero obtenemos que la expresión de  $u^1$  es

$$\dot{u}^1 = -k_2 k_{12} e^{-k_2 x} + k_{14} \tag{5.85}$$

Tomamos ahora el límite cuando  $b \rightarrow \infty$  de cada término de la expresión 5.85

$$k_2 k_{12} = \frac{\left[(\nu_1 + \nu_2)(b + 5(1 - \beta)) - b\beta\right]}{2(m + 2)(1 - \beta)(b + 5(1 - \beta))}$$
(5.86)

Haciendo algebra y tomando el límite cuando  $b \to \infty$  la ccuación 5.86 queda como,

$$\lim_{b \to \infty} (k_2 k_{12}) = \frac{[(\nu_1 + \nu_2) - \beta]}{2(m+2)(1-\beta)}$$
(5.87)

Tomando el límite de  $k_{14}$  y  $k_2$  cuando  $b \rightarrow \infty$ 

$$\lim_{b \to \infty} (k_{14}) = \frac{1}{2(m+2)}$$
(5.88)

$$\lim_{b \to \infty} (k_2) = \frac{1}{\alpha(1-\beta)}$$
(5.89)

Sustituyendo en la expresión 5.85

$$\lim_{b \to \infty} (\dot{u}^1) = \frac{1}{2(m+2)} - \left[ \frac{\left[ (\nu_1 + \nu_2) - \beta \right]}{2(m+2)(1-\beta)} \right] e^{\frac{-x}{\alpha(1-\beta)}}$$
(5.90)

o bien, podemos expresar la ecuación 5.90 como

$$\lim_{b \to \infty} (\dot{u}^1) = \frac{(1-\beta) - [(\nu_1 + \nu_2) - \beta] e^{\frac{-\tau}{\alpha(1-\beta)}}}{2(m+2)(1-\beta)}$$
(5.91)

Por lo tanto, la viscosidad extensional queda como,

$$\eta_E^m = \frac{2(m+2)(1-\beta)}{(1-\beta) - [(\nu_1 + \nu_2) - \beta]e^{\frac{-\tau}{\alpha(1-\beta)}}}$$
(5.92)

La viscosidad extensional promedio se deduce de la misma forma en que se hizo con la viscosidad extensional, por lo que la ecuación resultante es,

$$\overline{\eta}_{E}^{m} = \frac{2(m+2)}{1 - \alpha \left[ (\nu_{1} + \nu_{2}) - \beta \right] \left\{ 1 - e^{\frac{-\pi}{\alpha(1-\beta)}} \right\}}$$
(5.93)

Utilizando estas dos últimas ecuaciones tenemos que la viscosidad extensional y extensional promedio de los flujos uniaxial, biaxial y planar está representada por

$$\eta_{E}^{-0.5} = \frac{3(1-\beta)}{(1-\beta) - [\nu_{1} - \beta]e^{\frac{-2}{\alpha}(1-\beta)}}$$
(5.94)

$$\overline{\eta}_{E}^{0.5} = \frac{3}{1 - \alpha \left[\nu_{1} - \beta\right] \left\{1 - e^{\frac{-x}{\alpha(1-\beta)}}\right\}}$$
(5.95)

$$\eta_E^1 = \frac{6(1-\beta)}{(1-\beta) - [\nu_2 - \beta]e^{\frac{-\tau}{\alpha(1-\beta)}}}$$
(5.96)

$$\overline{\eta}_{E}^{1} = \frac{6}{1 - \alpha \left[\nu_{2} - \beta\right] \left\{1 - e^{\frac{x}{\alpha(1-\beta)}}\right\}}$$
(5.97)

\_

$$\eta_E^0 = \frac{4(1-\beta)}{(1-\beta) - [(\nu_1 + \nu_2) - \beta]e^{\frac{-x}{\alpha(1-\beta)}}}$$
(5.98)

TES	IS (	MOT
FALLA	DE	URIGEN

$$\overline{\eta}_{E}^{0} = \frac{4}{1 - \alpha \left[ (\nu_{1} + \nu_{2}) - \beta \right] \left\{ 1 - e^{\frac{-\bar{x}}{\alpha (1 - \bar{\omega})}} \right\}}$$
(5.99)

Notar en este caso que la viscosidad extensional de los flujos uniaxial, biaxial y planar está en función, entre otras cosas, de las condiciones iniciales  $\nu_1$  y  $\nu_2$ . Además se debe observar que para el flujo uniaxial (ecuación 5.94)  $\nu_1 = \beta$  entonces la viscosidad extensional a baja rapidez de extensión es independiente del número de Débora, lo mismo puede decirse del flujo biaxial (ecuación 5.96) en donde si  $\nu_2 = \beta$  la viscosidad extensional biaxial es independiente del Débora. En las gráficas 4.19 y 4.20, que corresponden a los casos uniaxial y biaxial, coincide que  $\nu$  y  $\beta$  son iguales y observamos que a baja rapidez de extensión la viscosidad es independiente del número de Débora, lo cual está de acuerdo con las conclusiones asintóticas mencionadas. Sin embargo, para el caso planar la predicción sólo es válida a bajo número de Débora ( $\alpha = 0.1$ ) como puede observarse de la gráfica 4.21, esto también está de acuerdo con la predicción asintótica, pues si  $\alpha \rightarrow 0$  la exponencial de la ecuación 5.98 tiende también a cero y por lo tanto la viscosidad extensional planar tiende a 4, mientras que para altos valores de  $\alpha$  la viscosidad planar depende, tanto de las condiciones iniciales  $\nu_1 \neq \nu_2$ , como del valor de  $\beta$  y  $\alpha$ , esto puede explicar el por que a baja rapidez de extensión y  $\alpha > 0.1$ las curvas de la gáfica 4.21 están se desplazadas hacia valores más altos de viscosidad.

#### 5.1.6 Número de Débora grande

Finalmente consideramos el caso en el cual el número de Débora es muy grande. Partimos de las ecuaciones de  $\dot{u}^1$  y  $u^1$ .

$$\dot{u}^1 = -k_2 k_{12} e^{-k_2 x} + k_{14} \tag{5.100}$$

donde  $k_2k_{12}$  puede escribirse como

$$k_2 k_{12} = \frac{1}{2(m+2)(1-\beta)} \left\{ (\nu_1 + \nu_2) - \frac{b\beta}{(b+5(1-\beta))} \right\}$$
(5.101)

у

$$k_{14} = \frac{b+5}{2(m+2)(b+5(1-\beta))}$$
(5.102)

Sumando y restando el término  $[1 - (\nu_1 + \nu_2)]/2(m + 2)(1 - \beta)$  a la ecuación 5.100 tenemos que

$$\dot{u}^{1} = \frac{b+5}{2(m+2)(b+5(1-\beta))} - \frac{[1-(\nu_{1}+\nu_{2})]}{2(m+2)(1-\beta)} + (5.103)$$
  
$$\frac{[1-(\nu_{1}+\nu_{2})]}{2(m+2)(1-\beta)} - \frac{1}{2(m+2)(1-\beta)} \left\{ (\nu_{1}+\nu_{2}) - \frac{b\beta}{(b+5(1-\beta))} \right\} e^{-k_{2}x}$$

TESIS CON				
	FALLA	DE	UniGEN	

La suma de los dos primeros términos de lado derecho de la ecuación 5.104 da como resultado

$$\frac{\frac{b+5}{2(m+2)(b+5(1-\beta))} - \frac{[1-(\nu_1+\nu_2)]}{2(m+2)(1-\beta)}}{\frac{1}{2(m+2)(1-\beta)}} = (5.104)$$

$$\frac{1}{2(m+2)(1-\beta)} \left\{ (\nu_1+\nu_2) - \frac{b\beta}{[b+5(1-\beta)]} \right\}$$

Sustituyendo la ecuación 5.104 en la ecuación 5.100 y factorizando terminos tenemos que

$$\dot{u}^{1} = \frac{\left[1 - (\nu_{1} + \nu_{2})\right]}{2(m+2)(1-\beta)} + \frac{1}{2(m+2)(1-\beta)} \left[ (\nu_{1} + \nu_{2}) - \frac{b\beta}{[b+5(1-\beta)]} \right] (5.105)$$

$$\left\{ 1 - exp(\frac{-[b+5(1-\beta)]x}{\alpha(b+2)(1-\beta)}) \right\}$$

Si realizamos una expansión en serie de potencias del término exponencial de la ecuación 5.106 y despreciamos los términos de la serie que estén divididos entre potencias de  $\alpha$  mayores a 0, puesto que estamos considerando que este parámetro es muy grande, tenemos que el resultado es

$$\dot{u}^{1} = \frac{[1 - (\nu_{1} + \nu_{2})]}{2(m+2)(1 - \beta)}$$
(5.106)

Entonces la viscosidad extensional queda como

$$\eta_E^m = \frac{1}{\dot{u}^1} = \frac{2(m+2)(1-\beta)}{[1-(\nu_1+\nu_2)]}$$
(5.107)

Siguiendo el mismo procedimiento, la viscosidad extensional promedio es

$$\overline{\eta}_E^m = \frac{1}{u_1(1)} = \frac{2(m+2)(1-\beta)}{[1-(\nu_1+\nu_2)]}$$
(5.108)

De tal manera que la viscosidad extensional y extensional promedio son iguales. Entonces, las viscosidades uniaxial, biaxial y planar quedan como

$$\eta_E^{-0.5} = \frac{3(1-\beta)}{(1-\nu_1)} \qquad \nu_1 \neq 1 \tag{5.109}$$

$$\eta_E^1 = \frac{6(1-\beta)}{(1-\nu_2)} \qquad \nu_2 \neq 1 \tag{5.110}$$

$$\eta_E^0 = \frac{4(1-\beta)}{[1-(\nu_1+\nu_2)]} \qquad (\nu_1+\nu_2) \neq 1 \tag{5.111}$$

Como puede observarse la viscosidad extensional de cada flujo, a baja rapidez de extensión y para número de Débora grande, es función tanto del parámetro  $\beta$  como de las condiciones iniciales. Es importante notar que para los casos uniaxial y biaxial la condición inicial no debe ser la unidad pues la ecuación se indetermina. Mientras que para el caso planar la suma de estas condiciones no debe ser la unidad. Sin embargo, los calculos numéricos del modelo presentados en la sección anterior muestran que los valores de  $\nu_1$  y  $\nu_2$  son 0.5, lo cual hace que según la ecuación 5.111 la viscosidad se indetermine, esto puede explicar el por que las gráficas en el número de Débora es grande ( $\alpha > 1$  en estos casos) la viscosidad tiene valores muy altos (ver gráficas 4.10-4.32). Por lo tanto, existen ciertos valores de los parámetros  $\nu_1$  y  $\nu_2$  para los cuales el modelo predice viscosidades muy grandes. Entonces el valor de la viscosidad a baja rapidez de extensión y Débora grande está determinada en gran medida por el valor de estos parámetros.

La razón de que se haya escogido a 0.5 como los valores iniciales de  $\nu_1$  y  $\nu_2$  es por que se pretendía justificar el modelo de flujos generalizado con los resultados obtenidos por Petrie para el caso uniaxial [7], en donde el valor de  $\nu$  es precisamente 0.5.



# Capítulo 6 Conclusiones



Se utilizó el modelo de mancuernas para describir los diferentes tipos de flujos extensionales en soluciones diluidas de polímero. Para generalizarlo se aprovechó el gradiente de velocidades propuesto por Meissner [6], en el que sólo es necesario dar valores al parámetro "m" y así obtener los diferentes tipos de flujos; para este tensor no es necesario modificar el signo del paramétro "m" como sucede en la propuesta de Stevenson [14]. Debido a que para ciertos flujos en el tensor rapidez de deformación el valor de los componentes de la diagonal principal son diferentes entre sí, se propuso una segunda diferencia del tensor de conformación  $(y_2)$ , lo que concuerda con la propuesta de Meissner [6], en la que también para los casos no simétricos propone dos viscosidades extensionales. Aunque el parámetro "m" puede tomar valores entre -0.5 y 1 se eligieron sólo cinco de estos valores, tres de ellos representan los flujos más conocidos, es decir, m = -0.5 flujo uniaxial, m = 1 flujo biaxial y m = 0 flujo planar; los otros dos flujo se eligieron de forma que fueran valores simétricos al flujo planar y de signos contrarios; de esta forma se aseguró que los flujos elegidos estuvieran entre el flujo uniaxial y planar, m = -0.3 y el flujo planar y biaxial, m = 0.3.

Se comprobó que el modelo generalizado se reduce en todo momento al caso uniaxial resuelto por Petrie [21].

Para todos los tipos de flujo las curvas obtenidas tienen una forma de "S", la cual caracteriza al modelo de mancuernas. En esta tesis se hizo notar que para un experimento en estado transitorio es posible obtener ese tipo de curvas multivaluadas en donde las diferentes viscosidades de una determinada rapidez de extensión pertenecen a distintos tiempos del experimento. Mientras que para las curvas obtenidas en este trabajo los tres puntos de viscosidad extensional a una rapidez de extensión pertenecen a tres distintas fuerzas aplicadas a los flujos, o bien a tres distintos experimentos.

Por otra parte, todas las gráficas en las cuales se están comparando los 5 diferentes flujos extensionales, muestran que el tipo de flujo afecta la viscosidad extensional tanto en la zona de baja rapidez de extensión como la de alta rapidez de extensión. Además comparando los valores de la viscosidad extensional en estas dos zonas encontramos las siguientes observaciones:

- La viscosidad extensional del flujo biaxial en la primera zona es en general el doble del valor de la viscosidad uniaxial.
- El valor de la viscosidad extensional planar puede calcularse como el promedio aritmético de las viscosidades de los flujos m=0.3 y m=-0.3.
- En la segunda zona la viscosidad extensional del flujo biaxial está por debajo de la viscosidad uniaxial, mientras que para los otros flujos generalmente tienden a tener el mismo valor de la viscosidad extensional uniaxial

El hecho de que la viscosidad biaxial en la primera zona sea el doble de la viscosidad extensional uniaxial se puede atribuir a la doble orientación de las mancuernas. Mientras que el hecho de que la viscosidad planar sea el promedio aritmético de las otras dos viscosidades podría atribuirse a que el valor del paramétro "m" de estos dos flujos es simétrico al valor m = 0 del flujo planar.

Con lo que respecta a los resultados obtenidos de los diferentes flujos en donde se variaron las condiciones iniciales se observa que el paramétro  $\nu$  es el que influye de forma

más contundente en la viscosidad extensional de la primera zona; además al parecer el modelo es muy sensible a ciertos valores de este parámetro ya que se presentaron ciertos problemas numéricos.

Los resultados obtenidos al variar el número de Débora,  $\alpha$ , a tres distintos valores de  $\beta$ , muestran que al incrementarse el valor de  $\alpha$  la zona de inestabilidad también aumenta. Esto, como ya se mencionó, puede estar relacionado con el experimento realizado por Douglas [24], en el cual se observó que para altos números de Débora predominan las conformaciones metaestables de las macromoléculas. Por otra parte, para estos mismos cálculos se muestra que a baja rapidez de extensión, los flujos con m = -0.3, m = 0 y m = 0.3 y  $\alpha > 1$ , la viscosidad extensional en esa zona es muy grande.

Este comportamiento de las curvas puede explicarse mediante el análisis asintótico realizado al modelo a fuerza pequeña, en el cual se muestra que cuando el número de Débora es grande la viscosidad extensional depende de los valores de  $\nu_1$  y  $\nu_2$ . La ecuación 5.108 muestra que para estos tres casos la suma de estos dos paramétros no debe ser la unidad, pues esto indetermina la ecuación; sin embargo, en nuestro caso los valores escogidos de  $\nu_1$  y  $\nu_2$  para realizar el cálculo, eran precisamente los que indeterminan la ecuación de la viscosidad extensional, y entonces la forma de las curvas de estos flujos pueden ser el resultado de un ajuste automático que realiza el programa para calcular la viscosidad. Por lo tanto, se sugiere calcular valores que sean más representativos de la configuración inicial de las mancuernas, la cual deberá estar basada en el valor de la fuerza a la cual están sometidas las mancuernas al inicio del experimento.

Por otro lado, en estos mismos cálculos podemos apreciar que en todos los casos, cuando  $\alpha = 0.1$ , obtenemos el valor de la relación de Trouton; es decir, la viscosidad extensional de los flujos uniaxial, biaxial y planar toman aproximadamente el valor de 3, 6 y 4 respectivamente.

En las gráficas en las cuales se varió  $\beta$  se encontró que, para el valor de  $\beta = 0.005$ , todos los flujos, excepto el uniaxial, presentan un mínimo; mientras que para el caso biaxial este mínimo se presenta también cuando  $\beta = 0.990$  (aunque este valor sale del intervalo de validez del modelo). Además hay que observar que a pesar de que el modelo es para soluciones diluidas, la curva de  $\beta = 0.990$  en los casos de los flujos uniaxial biaxial y planar cumple con la regla de Truton; esto se explica mediante el análisis asintótico para el caso del modelo de Maxwell en donde  $\beta = 1$ , en el que se hizo notar que la regla se cumple si los valores de "b" son muy grandes aún para soluciones concentradas.

El caso en el cual se varía el paramétro "b", se observó que la viscosidad extensional alcanza un valor límite diferente que depende de este valor; de hecho, entre más alto sea el valor de éste, el límite que alcanza la viscosidad es mayor.

En cuanto al análisis asintótico a fuerza pequeña, o bien baja rapidez de extensión, se muestra que a número Débora pequeño y para el modelo de Maxwell, la viscosidad extensional de los flujos uniaxial, biaxial y planar cumple con la relación de Trouton; Además, como tenemos la expresión general de la viscosidad de estos casos podríamos calcular cuál sería la viscosidad extensional de otros flujos con m deferente de -0.5, 0 y 1.

Por otra parte, el caso del modelo de Hooke, se muestra que la viscosidad extensional

TESIS COM FALLA DE UNIGEN es función de la concentración, el número de Débora y las condiciones  $\nu_1$  y  $\nu_2$ . En este caso podemos notar que si el número de Débora es pequeño se puede nuevamente obtener la relación de Trouton.

Po otro lado, a altos números de Débora, la viscosidad del modelo depende fuertemente de los valores de  $\nu_1$  y  $\nu_2$ . En estas ecuaciones existen ciertos valores de estos parámetros para los cuales la viscosidad extensional está indeterminada, y esto podría explicar el porqué la viscosidad extensional del flujo planar y de los flujos con m=-0.3 y m=0.3 tiene un valor tan alto en las gráficas en las cuales el número de Débora es grande.

TESIS	CUM
FALLIN OF	AUGEN

#### Nomenclatura

- Tensor rapidez de extensión Ė
- έ11 Componente 11 del tensor rapidez de extensión
- Componente 22 del tensor rapidez de extensión Ė22
- Componente 33 del tensor rapidez de extensión  $\dot{\varepsilon}_{33}$
- Rapidez de extensión Ė
- $\zeta_d$  Coeficiente de fricción hidrodinámico
- V Velocidad relativa
- $\psi$  Función de distribución de configuración
- <u>*F*</u> Fuerza total
- <u>k</u> Gradiente de velocidades
- RVector de configuración
- $r_1$  y  $r_2$  Vectores de posición
- Derivada del vector de configuración  $\dot{r}$
- ζ Inverso de la fuerza aplicada al flujo
- Traza del tensor de configuración z
- ż Derivada de la traza del tensor de configuración
- $z^0$ Traza a orden cero del tensor de configuración
- $\dot{z}^0$ Derivada de la traza a orden cero del tensor de configuración
- $z^1$ Traza a orden uno del tensor de configuración
- ż1 Derivada de la traza a orden uno del tensor de configuración

 $d_{ii}$ Componentes del tensor rapidez de deformación

- Tensor de esfuerzos ₫
- Componente 11 del tensor de esfuerzos  $\sigma_{11}$
- $\sigma_{22}$ Componente 22 del tensor de esfuerzos
- Componente 33 del tensor de esfuerzos  $\sigma_{33}$
- Tensor unitario
- <u>I</u>S <u>A</u> Tensor de esfuerzos del polímero
- Tensor de conformación
- Ăij Componente ij del tensor conformación
- Ăn Componente 11 del tensor conformación
- Å22 Componente 22 del tensor conformación
- Aaa Componente 33 del tensor conformación
- Condición inicial de la longitud de la mancuerna π
- $N_1$ Condición inicial de la deformación uno
- $N_2$ Condición inicial de la deformación dos
- $a^2$ Tamaño de equilibrio de la mancuerna
- $L^2$ Longitud de la mancuerna completamente extendida
- Ù Velocidad característica
- Velocidad adimensional u
- $u^0$ Velocidad adimensional a orden cero
- $u^1$ Velocidad adimensional a orden uno
- Derivada de la velocidad adimensional ü
- $\dot{u}^0$ Derivada de la velocidad adimensional a orden cero



- $\dot{u}^1$  Derivada de la velocidad adimensional a orden uno
- $\lambda$  Tiempo caractéristico
- *θ* Segundo tiempo caractéristico
- $\alpha$  Número de Débora
- $\beta$  Concentración
- $\eta_p$  Viscosidad del polímero
- $\eta_s$  Viscosidad del solvente
- $\eta^m$  Viscosidad extensional
- $y_1$  Primera deformación
- $\dot{y}_1$  Derivada de la primera deformación
- $y_1^0$  Primera deformación a orden cero
- $\dot{y}_1^0$  Derivada de la primera deformación a orden cero
- $y_1^1$  Primera deformación a orden uno
- $\dot{y}_1^1$  Derivada de la primera deformación a orden uno
- $y_2$  Segunda deformación
- $\dot{y}_2$  Derivada de la segunda deformción
- $y_2^0$  Segunda deformación a orden cero
- $\dot{y}_2^0$  Derivada de la segunda deformación a orden cero
- $y_2^{\overline{1}}$  Segunda deformación a orden uno
- $\dot{y}_2^{1}$  Derivada de la segunda deformación a orden uno
- $\underline{v}$  Vector velocidad  $v_1$  componente 1 del vector velocidad
- $v_2$  componente 2 del vector velocidad
- $v_3$  componente 3 del vector velocidad
- $x_1$  Dirección uno
- $x_2$  Dirección dos
- $x_3$  Dirección tres

	TESSE		COV	
l	FALLS	ĎĿ,	UNIGEN	
## Bibliografía

- H. A. Barnes, An Introduction to Rheology, Elsevier Science, The Netherlands, 1997.
- [2] P. R. Williams, R. W. Williams J. Non-Newtonian Fluid Mech., 19 (1985) 53-80.
- [3] Chistopher W. Macosko, Rheology Principles, Measurements and Aplications, Wiley-VCH, USA, 1994.
- [4] C. A. Cathey, G. G. Fuller, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 30 (1988) 303-316.
- [5] Song L. Ng, Robert P. Mun, David V. Boger, David F. James, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 65 (1996) 291-298.
- [6] J. Meissner, S. E. Stephenson, A. Demarmels, P. Portmann, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 11 (1982) 221-237.
- [7] C. J. S. Petrie, Rheol. Acta, 34,1 (1995) 12-26.
- [8] P. G. De Gennes, J. Chem. Phys. ,12 (1974) 5030-5042.
- [9] J. S. Petrie, J. Non-Newtonian Fluid Mech, 34, (1990) 37-62.
- [10] W. N. Song, Z. M. Xia, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 53 (1994) 151-163.
- [11] M. E. Mackay, Ch. J. S. Petrie Rheol. Acta, 28 (1989) 281-293.
- [12] John M. Dealy, Rheometers for molten plastics, Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1982.
- [13] J. M. Dealy, J. Rheol., 37 (1993) 136-148.
- [14] J. F. Stevenson, S. C.-K. Chung, J. T. Jenkins, Trans. Soc. Rheol. 19, (1975) 397-405.
- [15] N. Phan-Thien, O. Manero, L. G. Leal Rheol. Acta, 23 (1984) 151-162.
- [16] J. M. Rallison, E. J. Hinch, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 30 (1988) 37-55.
- [17] A. E. Chávez, Estudio del flujo de soluciones concentradas de polielectrolitos, Tesis de Maestría, Facultad de Química, UNAM, México, 1987.



144

- [18] Bird R. B., Curtiss C. F., Armstrong R. C., Hassager O., Dynamics of Polymeric Liquids, Vol. 2, Kinetic Theory, John Wiley and Sons 2nd. Edition (1987), USA.
- [19] G. G. Fuller, L. G. Leal, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 8 (1981) 271-310.
- [20] Harold R. Warner, Jr., Ind. Eng. Chem. Fundam., 11, (1972) 379-387.
- [21] C. J. S. Petrie, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 54, (1994) 251-267.
- [22] S. P. Carrington, J. A. Odell, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 67 (1996) 269-283
- [23] H. A. Barnes, J. F. Hutton and K. Walters, An Introduction to Rheology, Elsevier Science, Amsterdam, 1997.
- [24] Douglas E. Smith, Steven Chu, Science, 281 (1998) 1335-1340.
- [25] N. E. Hudson, J. Ferguson, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 35 (1990) 263-276.
- [26] J. Ferguson, K. Walters, C. Wolff, Rheol. Acta, 29 (1990) 571-579.