

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

Instituto de Física

"FLUJO DE UN CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO EN UN CANAL CONVERGENTE".

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE

MAESTRO EN CIENCIAS FÍSICAS

PRESENTA

FÍSICO MENDOZA GUTIÉRREZ JONATAN

DIRECTORDE TESIS: DR. JUAN ADRIÁN REYES CERVANTES

MÉXICO, D. F.

2010

posgrado en ciencias lísicas u n a m

pcf



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. Antorize a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAN a difendir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional. MOMBRE: <u>(encoza Catterra</u> <u>prestas</u> FECHA: <u>22 /06/ 0/0</u> FIRMA:

1. 4. 40

// XX





OFICIO: PCF/174/2010 ASUNTO: Designación de jurado

DR. ISIDRO AVILA MARTÍNEZ DIRECTOR GENERAL DE LA ADMINISTRACIÓN ESCOLAR UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO P R E S E N T E

At´n: L. A. Balfred Santaella Hinojosa Jefe de la Unidad de Administración del Posgrado

El Comité Académico del Posgrado en Ciencias Físicas en su sesión del 3 de Marzo del presente ha designado como Jurado del alumno **JONATAN MENDOZA GUTIÉRREZ** con número de cuenta **098259425**, para dictaminar si el trabajo desarrollado como tesis titulado: *"Flujo de un cristal líquido nemático en un canal convergente*", dirigido por el Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes, tiene los méritos para obtener el grado de MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA) conforme al plan de estudios **4057**.

- **Propietario:** Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes
- Propietario: Dr. Octavio Manero Brito
- Propietario: Dr. Orlando Guzmán López
- **Suplente:** Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz
- Suplente: Dra. María del Pilar Ortega Bernal

Atentamente. "POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU" Ciudad Universitaria, D. F., a 5 de Marzo del 2010. El Coordinador del Posgrado en Ciencias Físicas

Dr. Manuel Torres Labansat

c.c.p.- Cada miembro del sínodo c.c.p.- Interesado. c.c.p.- Expediente.

Agradecimientos:

Al Posgrado en Ciencias Físicas, de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM); por todas las facilidades otorgadas para formarme bajo los mejores estándares académicos durante mis estudios de Maestría.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), por su valioso apoyo, al otorgarme la Beca para Estudios de Maestría.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA), UNAM; por la Beca otorgada a través del Programa de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) proyecto IN117606-3.

Al Instituto de Física de la UNAM, por el uso de sus instalaciones para la realización de esta tesis.

A los miembros del Comité Tutoral que supervisaron este proyecto: Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes (Tutor Principal), Dr. Orlando Guzmán López, Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz, Dra. María del Pilar Ortega Bernal, Dr. Octavio Manero Brito; por sus valiosos comentarios y correcciones durante cada sesión.

Agradecimientos Personales:

Al Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes, por la excelente dirección de esta Tesis, por sus sugerencias y correcciones; por todas las oportunidades otorgadas que me permitieron introducirme al quehacer científico y son parte fundamental en mi formación académica.

A la M. en C. Maria Julia Ezpinoza Camacho, porque palabras no bastan para hacer justicia o brindar agradecimiento ciencero absoluto. Porque una suceción de palabras jamas suplira la gratitud de una persona de una mirada, que aun por mas extensas no expresaran aquello que es pretendido.

Al Dr. Orlando Guzmán López, por tu disposición para discutir la tesis, por escuchar mis dudas no siempre claras ó sencillas, por esa paciencia, y forma de ayudarme a abrazar el conocimiento del tema.

Al Físico Manrriquez Zepeda Juan Luis que sin el apoyo brindado en momentos claves, este y otros tantos proyectos hubieran sido simplemente imposibles, además; mil gracias por ser mi amigo.

A la M. en C. Sandra Elvia Hernández Valencia, por su disposición para asesorarme en la parte escrita; por su tiempo, apoyo y cariño.

A todos aquellos que injustamente no fueron nombrados no por falta sino por omisión ya que no alcanzaria espacio para nombrarles.

A mi madre;

Por todo el esfuerzo y dedicación que ha puesto en el proyecto que es mi vida, apoyandome incondicionalmente, a pesar de las adversidades.

Por nunca dejarme solo, escuchar cuando es necesario y callar cuando es más adecuado, solo por compartir mis penas y alegrias.

Por las historias y recuerdos que hemos generado juntos, tratando de ser mas de dos almas en el universo.

Por ser la única persona que en el mundo que siempre estará conmigo de manera incondicional, por ese inmenso amor,

A mi alfil Julia:

sin ti, este éxito no sería posible.

Al **Destino**... El primero de toda una historia:

Sucesos del todo extraños, interesantes caminos entrelazados, causales coincidencias casuales, las hay nombre inocencia, las hay se historia sutil paralelas, como aquel amor de adolescencia, como aquel recuerdo que no se espera, bien extrañas vidas cuasi gemelas. Naturalmente dos solitarios, sin precisar amistad, pero sin reconocerse extraños. Fue grata compañía, albores de alegria, inciertas empatías, gemelas de alta estima.

Índice general

Índice general					
1.	Intr	oducción	1		
2.	Gen	eralidades	4		
	2.1.	Hipótesis del continuo	9		
	2.2.	Simetrías	11		
	2.3.	Propiedades elásticas	12		
3.	Líqu	iidos ordinarios	14		
	3.1.	Cinemática de fluidos	14		
		3.1.1. Descripción euleriana y lagrangiana	15		
		3.1.2. Descomposición par e impar	17		
		3.1.3. Tensor de esfuerzos	20		
	3.2.	Principios de conservación	23		
		3.2.1. Conservación de masa: ecuación de continuidad	23		
		3.2.2. Ecuación de momento lineal	24		
		3.2.3. Ecuación de balance de energía	26		



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.

	3.3.	Ecuaciones constitutivas	27
		3.3.1. Tensor viscoso	27
		3.3.2. Fluidos newtonianos y <i>no</i> newtonianos	29
		3.3.3. Ley de fourier	29
		3.3.4. Ecuación de Navier Stokes	31
	3.4.	Flujo en un canal	32
		3.4.1. Solución analítica	34
		3.4.2. Solución numérica	36
			10
4.	Fluj	o de nemáticos	42
	4.1.	Teoría de Ericksen-Leslie	42
		4.1.1. Tensor de esfuerzos disipativo y dinámica del vector director $% {\displaystyle \sum} {\displaystyle \sum}$	43
	4.2.	Relaciones constitutivas	44
		4.2.1. Viscosidad nemática	46
	4.3.	Conservación de energía	51
		4.3.1. Dinámica disipativa	52
	4.4.	Ecuaciones dinámicas	53
5.	Flui	o de un cristal líquido nemático en un canal	64
-			-
	5.1.	Modelo	67
	5.2.	Solución numérica	75
6.	Res	ultados	78
	6.1.	Las ecuaciones	78
Μ.	J. M	G.	III

	6.2.	Los planos de arrastre y elongación	81			
	6.3.	Perfiles y texturas	84			
	6.4.	Particularidades locales	92			
	6.5.	Gasto y energía	93			
7.	Con	clusiones	97			
А.	Con	nponentes físicas en coordenadas cilíndricas	II			
B. Identidades tensoriales						
	B.1.	Teorema del transporte	VIII			
Bi	bliog	rafía	IX			

- CAPITULO 1

Introducción

Un cristal líquido es un material que presenta un tipo intermedio de estado de agregación de la materia, que tiene características de las fases sólida y líquida. Estos estados también se denominan mesofases y poseen cualidades peculiares, que como veremos, han constituido toda una revolución en el mundo tecnológico, que forman parte de un área conocida como Materia Condensada Blanda. La Física del medio continuo está basada principalmente en dos teorías: (a) La de la elasticidad, que es la propiedad que tienen los cuerpos de cambiar de forma cuando se ejerce sobre ellos una fuerza deformadora, y el recuperar su forma original, cuando la fuerza deformadora deja de actuar, esta teoría se aplica principalmente a los cuerpos sólidos. (b) La hidrodinámica, que estudia a los fluidos (líquidos y gases) en movimiento. Ambas no son más que la extensión natural de las leyes de Newton al medio continuo.

Una característica importante de estos materiales (cristales líquidos) es que en ellos es posible cambiar sus propiedades físicas (viscosidad, color, configuración interna, índices de refracción, permeabilidades magnéticas, etc.) en presencia de un estímulo externo como lo es; los esfuerzos mecánicos, campos eléctricos, magnéticos o bien bajo variaciones en su temperatura.

En los últimos treinta años se ha demostrado que estas sustancias ocupan un lugar único en la naturaleza. Así; se sabe que los cristales líquidos desempeñan un papel fundamental en el funcionamiento de los organismos vivos pues el DNA forma diversas fases líquido-cristalinas. Una de sus características que los hace particularmente propicios para la fabricación de dispositivos electrónicos, como los indicadores



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. electro-ópticos, mostrando su factibilidad en la fabricación de pantallas de TV extraordinariamente delgadas, así como la opacidad controlada de ventanas y cortinas al aplicar una diferencia de voltaje.

Estos líquidos tan peculiares, que estamos estudiando, son también de gran utilidad en la fabricación de nuevos materiales con propiedades diversas, como lo son fibras de muy alta resistencia [5] basados particularmente en poliamidas aromáticas liotrópicas; fibra Kevlar [5, 6] de Dupont y X-500 de la Monsanto Company[6], o bien guías de onda con propiedades polarizantes [7]. Por otro lado en el área médica se tienen avances en termometría y termografías, tanto en el área pediatrica como en el área clínica [8], entre muchas otras.

Trabajos previos han analizado el comportamiento de cristales líquidos confinados en celdas o capilares bajo condiciones como lo son; el flujo de Poiseuille, esfuerzos de corte, *flujos de Couette* y/o bajo la acción de campos eléctricos o magnéticos. Con base en estos sistemas se ha propuestos dispositivo para cambiar el valor de la viscosidad efectiva de cristales líquidos poliméricos a través de la aplicación de campos magnéticos [1]. Diodos mecánicos en capilares de cristales controlados eléctricamente también han sido estudiados, donde se calculan las funciones viscométricas para discernir la naturaleza de los tipos de flujo esperados [3]. Otros trabajos en donde se consideran cilindros concéntricos rotantes muestran que a partir de ciertos valores críticos de las velocidades angulares y del campo eléctrico se obsevan soluciones múltiples y biestabilidades [11].

A partir de estos antecedentes en esta tesis se realizó el análisis de los perfiles de velocidad y las texturas para flujos estacionarios de un cristal líquido nemático que fluye por un canal convergente para lo cual utilizamos la formulación de medio continuo de Ericksen Leslie Parodi ELP [13] que considera la simetría uniaxial de los cristales líquidos nemáticos sujetos a condiciones de fronteras fuertes. Así, en este trabajo se desarrollaron algoritmos numéricos, se calculan sus propiedades, y analizán su comportamiento.

Con objeto de poner en marco el presente trabajo, se presenta en el primer capítulo, una breve revisión de las ecuaciones que gobiernan o describen la mecánica de fluidos.

En el capítulo dos se revisan las ecuaciones generales de conservación y se establecen las ecuaciones constitutivas de los líquidos Newtonianos.

En el capítulo tres se discute el método numérico de continuación paramétrica que se utiliza para analizar el problema. Este método se aplica para resolver el sistema de interés de esta tesis, pero para un líquido ordinario.

En el capítulo cuatro se discuten las ecuaciones constitutivas para un cristal líquido nemático y se establece el formalismo de *Ericksen-Leslie*.

En el capítulo cuatro se resuelve el sistemas de ecuaciones acopladas de reorientación y perfil de velocidades sujetas a condiciones de frontera, se obtiene múltiples soluciones y se estudian sus comportamientos.

En el capítulo cinco se discuten las gráficas de los perfiles y las texturas resultantes, finalmente en el último capítulo (capítulo 6) se establecen las conclusiones más relevantes.

CAPITULO 2

Generalidades

El estado Líquido cristalino, es un estado específico y bien definido para los materiales que presentan estas fases. Reconocemos que la materia se presenta en estados de agregación, entre los mayormente conocidos se encuentran el sólido, el líquido y el gaseoso, además de estos estados de agregación existen las llamadas mesofases, éstas son; fases intermedias que se presentan en algunos materiales, éstas se presentan en la transición de un estado a otro. Así un cristal líquido es una mesofase que se presenta en la transición sólido-líquido. Los cristales son caracterizados por el orden posicional de las moléculas o grupos de moléculas que le conforman, despreciando desde luego las vibraciones térmicas propias del estado de equilibrio.

Los cristales líquidos se pueden clasificar (figura 2.1) en dos tipos principales: termotrópicos y liotrópicos. Los cristales líquidos termotrópicos están formados por una sustancia pura o bien por mezclas, que en un intervalo de temperaturas presentan una mesofase. A temperaturas inferiores el cristal líquido es sólido, éste a su vez a temperaturas superiores se considera un líquido isotrópico. Dichos cristales líquidos pueden dividirse en tres fases: esmécticos, nemáticos y colestéricos. Por otro lado, los cristales líquidos liotrópicos se forman cuando un sólido cristalino se disuelve en un líquido apropiado a intervalos determinados de concentración, temperatura y presión.

Para los cristales líquidos termotrópicos, las fases esmécticos, nemáticos y colestéricos (figura 2.2) suceden en intervalos de temperatura relativamente pequeños, éstas a su vez se hallan entre las fases sólido-cristalino y los líquidos isotrópicos como



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.



Figura 2.1. Criterio de clasificación de los cristales líquidos.

una consecuencia y con suma frecuencia suele denominarse mesofases a los cristales líquidos.

Es en sumo común que los cristales líquidos se hallen constituidos por moléculas alargadas y rígidas, que bajo un modelo cuya primer aproximación al estudió físico, considera que éstas se asemejan a un elipsoide de revolución, o bien son a su vez moléculas que se aglomeran en distribuciones planares, una debajo de otra para que de esta manera, formen objetos de mayor tamaño que asemejan cilindros más comúnmente llamadas estructuras columnares (figura 2.3). Esta orientación preferencial se describe por un vector unitario, comúnmente llamado vector director \mathbf{n} , que representa la orientación promedio de alineamiento de los centros de masa de cada constituyente de la muestra; figura 2.4.

Las características excepcionales que presentan los cristales líquidos los convierten



Figura 2.2. Orden orientacional entre las distantas fases de un material característico conforme la tempertura.

en un material ideal para estudiar la dinámica de fluidos estructurados. Por un lado, la fuerte anisotropía que presentan en su fase nemática, no sólo permite una fácil visualización de la dinámica, sino que es responsable de la existencia de convección térmica cuando se calientan. Por otro lado, el hecho de que sus propiedades dependan de los campos magnéticos y eléctricos, introduce nuevos acoplamientos que se pueden admitir sin perturbar el sistema experimental, son fácilmente controlables y de éstos depende la dinámica, generando una rica gama de inestabilidades y estructuras.

En general, en un líquido los centros de masas de sus componentes no se encuentran ordenados de ninguna manera; además, si estos componentes tienen alguna estructura espacial (por ejemplo, moléculas alargadas, estructuras cilíndricas, etc.), éstos se encuentran orientados en todas las direcciones posibles indistintamente. A un líquido en esas condiciones se le llama Isótropo o Isotrópico y si todas las moléculas se orientan en una misma dirección, manteniendo sus centros de masa distribuidos desordenadamente, se obtiene una nueva fase denominada Nemática. De esa manera, todas las propiedades físicas van a depender de la dirección espacial, situación que caracteriza a los materiales anisotrópicos.

En concreto, en un nemático, las diferentes moléculas tienden a orientarse en promedio de forma paralela entre sí de forma natural (figura 2.5), pero no en todo el vo-



Figura 2.3. Algunas fases de la matería.

lumen, sino por regiones separadas entre sí por fronteras de dominio semejantes a hilos. De ahí proviene la denominación de nemático, la cual fue introducida por G. Friedel a partir del término griego $\nu \eta \mu \alpha$, que significa *hilo*. Ahora bien, si lo que se requiere es una alineación uniforme de las moléculas del medio, basta con aplicar un pequeño campo magnético uniforme, con el cual las moléculas tenderán a colocarse paralelas al campo.

Una condición necesaria aunque no suficiente, para que un tipo de moléculas dé lugar a la formación de *cristal líquido*, es que éstas deben ser "anisotrópicas", como se muestra en el esquema de la molécula 5CB en la figura 2.6a. Químicamente dicha molécula esta compuesta por un esqueleto central que engloba unidades aromáticas o cicloalifáticas unidas por enlaces rígidos (figura 2.6b).

Un cristal líquido es una mesofase formada en la transición sólido-líquido. Como es bien sabido, un sólido cristalino posee orden posicional, es decir, despreciando las vibraciones térmicas, los centros de masa de las moléculas o grupos de moléculas en esta fase, estan condicionadas a ocupar solo ciertas posiciones para formar una red periódica. Si adicionalmente las moléculas constituyentes del cristal no presentan simetría esférica y existe cierta interacción que permite que cada una de éstas se



Figura 2.4. Algunas de las geometrías moleculares más comunes presentes en cristales líquidos.

orienten con respecto a sus vecinas, existirá de forma natural un orden o simetría orientacional. Cuando un sólido se funde en un líquido, ambos tipos de orden se pierden completamente. En cambio, cuando un sólido se funde en un cristal líquido, el orden orientacional prevalece, mientras que los centros de masa de los elementos de la red periódica pueden moverse en forma análoga a como lo hace un líquido.

Los grupos de moléculas no tienen orden de largo alcance traslacional y por lo tanto no se observan máximos y mínimos en el patrón de difracción de rayos X. En otras palabras, el nemático se comporta como un líquido convencional. Para un nemático típico tal como el PAA (p-azoxyanisol) cuya viscosidad es del orden de 10^{-2} Poise a temperatura ambiente (10 veces más grande que la viscosidad del agua).



Figura 2.5. Esquema del cristal líquido nemático. El vector director del nemático se halla indicado por $\hat{\mathbf{N}}$. El ángulo entre el eje de simetría de una molécula individual $\hat{\mathbf{n}}$ y el vector diretor del cristal líquido nemático $\hat{\mathbf{N}}$ es denotado por θ

2.1. Hipótesis del continuo

La distinción entre sólidos y fluidos no es nítida, pues muchos materiales que se comportan como sólidos bajo ciertas circunstancias y en otras se comportan como fluidos. Llamaremos sólido simple a un medio en el cual, las posiciones relativas de sus elementos sufren cambios de pequeña magnitud, cuando las fuerzas que actúan sobre él tienen cambios pequeños. Es decir, pequeñas fuerzas producen deformaciones pequeñas. Análogamente, llamaremos fluido simple a un medio en el cual las posiciones relativas de sus elementos sufren cambios no pequeños, aún cuando sean pequeños los cambios de las fuerzas que actúan sobre él. En otras palabras, fuerzas pequeñas dan lugar a deformaciones de gran magnitud. Aquí conviene distinguir entre deformaciones con cambio de volumen pero sin cambio de forma (expansiones o contracciones puras) y deformaciones con cambio de forma pero sin cambio de volumen (distorsiones puras). En general, la deformación es una combinación de ambas. Llamaremos fluido a una porción de materia incapaz de contrarrestar el efecto de fuerzas que producen deformaciones sin cambio de volumen. Esto no quiere decir



Figura 2.6. Esquemas del compuesto 5CB.

que el fluido no opone resistencia a tales deformaciones, pero significa que esta resistencia tiende a cero cuando tiende a cero la rapidez con la cual se produce la deformación, independientemente de la magnitud de la deformación. En consecuencia, dicha resistencia limita la rapidez con la cual ocurre la deformación, pero no su magnitud.

La materia consistente de moléculas en constante movimiento e interacción, no es continua, vemos que en la aproximación al continuo se ignora la existencia de la estructura molecular y se considera una distribución continua de materia. Este punto de vista es válido siempre que la longitud de la trayectoria libre promedio de las moléculas sea mucho más pequeña que la dimensión de longitud menor considerada en el problema físico. Esto es, cuando el número de Knudsen (definido como el cociente entre ambas) deberá ser mucho más pequeño que la unidad, para que la hipótesis del continuo sea válida. El sistema que nos proponemos analizar cumple efectivamente esta hipótesis ya que la distancia media entre moléculas 2nm es mucho menor que la longitud típica de las celdas de cristal líquido $10\mu m$. Ahora bien, un fluido se define como una sustancia que sufre una deformación continua cuando le es aplicado un esfuerzo cortante por pequeño que éste sea. En cambio, un sólido elástico bajo la aplicación de un esfuerzo cortante pequeño, no se deforma indefinidamente, sino que asume una configuración fija.

Como la hipótesis básica de la Mecánica de Fluidos consiste en suponer que en escala

macroscópica, un fluido se comporta como si estuviera dotado de una estructura perfectamente continua, o, si se quiere, como si no tuviera estructura alguna. De acuerdo con ello, magnitudes como la masa, la cantidad de movimiento y la energía, asociadas con la materia contenida en una pequeña parcela del fluido, se consideran uniformemente distribuidas en el volumen de la parcela (en vez de estar concentradas en una pequeña fracción de éste, como realmente ocurre).

No es fácil, en general, justificar la Hipótesis del Continuo y establecer su rango de validez en términos del comportamiento de la materia real. A los fines de este estudio podemos aceptar que su justificación radica en el comportamiento macroscópico de los fluidos tal como resulta de la observación y los experimentos. En tal sentido le daremos el valor de principio fundado en la experiencia. De esta forma aceptaremos como resultados experimentales que la densidad, la velocidad, la aceleración, etc., de un elemento de fluido suficientemente pequeño son independientes del tamaño y la forma de dicho elemento, sin preocuparnos por el límite inferior del dominio de aplicación (esto es, operando como si este límite no existiera). Para nosotros, el sustento de la Hipótesis del Continuo consiste en la observación empírica que la existencia de ese límite, es irrelevante en lo que se refiere a la descripción macroscópica del movimiento del fluido. Debe quedar claro que la Hipótesis del Continuo no implica que todo rastro de la granulosidad de la materia desaparece de las ecuaciones macroscópicas del movimiento. En estas ecuaciones quedan coeficientes¹ que no se pueden calcular o estimar sin recurrir a modelos microscópicos.

2.2. Simetrías

Hay un orden direccional de las moléculas, es decir, tienden a ser paralelas a algún eje común. Esta dirección preferencial se etiqueta por un vector unitario o comúnmente llamado director \mathbf{n} (figura 2.5) y representa la dirección promedio de alineamiento de las moléculas. Ópticamente, un nemático es un medio uniaxial con el eje óptico

¹Coeficientes de viscosidad, de conductividad térmica, de tensién superficial e interfacial, etc

a lo largo de **n**. Se ha observado experimentalmente que la diferencia entre índices de refracción medidos con polarizaciones paralelas o normales a **n** es de alrededor 0;2 para el *PAA* [8].

La dirección de \mathbf{n} es arbitraria en el espacio, impuesta por fuerzas menores tales como las paredes del contenedor.

Los estados $\mathbf{n} \neq -\mathbf{n}$ son indistinguibles debido a que las contribuciones dipolares promedio de las moléculas son nulas para nemáticos no ferro-eléctricos. Esta fase se presenta solamente en materiales que no distinguen entre derecha e izquierda, esto es, cada molécula o grupo de moléculas constituyentes, es idéntica a su imagen espejo. Cuando una molécula o grupo de moléculas no es idéntica a su imagen espejo se dice que es quiral.

La fase nemática presenta diferentes tipos de simetría:

- 1. Traslación en cualquier dirección.
- 2. Rotación al
rededor de ${\bf n}.$
- 3. Rotación de 180° al
rededor de cualquier eje perpendicular a ${\bf n}.$

Esta última propiedad asegura que \mathbf{n} y $-\mathbf{n}$ serán equivalentes. Es por este motivo que el director se representa en general con una flecha doble.

2.3. Propiedades elásticas

El estado de equilibrio elástico se define como aquel donde todas las moléculas están alineadas de forma paralela entre sí. Partiendo de las anteriores consideraciones de simetría se pueden describir tres modos principales de deformación a partir del estado de equilibrio (figura 2.7).

Para estudiar matemáticamente estas deformaciones, se define la energía libre de deformación F_d . Esta energía presenta un mínimo en el estado de equilibrio, siendo



(c) pandear

Figura 2.7. Figuras representativas de las accíones biselar (a), torcer (b) y pandear (c).

nula cuando $\nabla \cdot \mathbf{n} = 0$ y $\nabla \times \mathbf{n} = 0$. La contribución a la energía libre de los diferentes modos de deformación, en función de las derivadas espaciales de \mathbf{n} , limitándonos a los términos de órdenes más bajos, es:

$$F_d = \frac{1}{2} [k_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + k_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + k_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2]$$
(2.1)

donde las k_i son las constantes elásticas asociadas a cada modo de deformación:

- 1. $k_1(\nabla \cdot \mathbf{n} \neq 0)$: biselar (splay)
- 2. $k_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} \neq 0)$: torcer (twist)
- 3. $k_3(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n} \neq 0)$: pandear (bend)

- CAPITULO 3

Líquidos ordinarios

En este capítulo se realizará una revisión de las ecuaciones constitutivas, así como de los principios de conservación para fluidos isotrópicos y Newtonianos. Reconoceremos las leyes de conservación que los gobiernan basado en principios generales de conservación pero expresados en términos de variables de campo. Asimismo, se plantea el problema bidimensional del flujo de un líquido por un canal convergente, el cual se resuelve numéricamente utilizando el método de continuación parámetrica.

3.1. Cinemática de fluidos

En el instante t, la velocidad **v** de cada elemento de fluido centrado en (x, y, z), es una función vectorial $\mathbf{v}(x, y, z)$, que se indica en forma compacta como $\mathbf{v}(x_i, t)$ o bien $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ con $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Así, el campo de velocidades es un *campo vectorial*, y $\rho(x_i, t)$ es un campo escalar que determina la densidad del elemento de forma límite del elemento de volumen infinitesimal en el punto (x, y, z), etc.

Las líneas y las superficies formadas por puntos, cada uno de los cuales se desplaza con la velocidad del fluido (como si éste fuese arrastrado por el flujo), se denominan *líneas y superficies materiales*. También se denomina *volumen material* al volumen limitado por una superficie que denominaremos material. Esta denominación se aplica tanto a elementos finitos como a elementos infinitesimales. Cualquiera que sea el campo de velocidades, un volumen de material dado contiene una masa de fluido,



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. que será constante para fluidos incompresibles, no así para fluidos compresibles, pues al moverse todos los puntos de las superficie que lo limita, éste sigue la superficie material que lo contiene.

Así pues, dado un campo de velocidades $\mathbf{v}(x_i, t) = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, se denominan *líneas de corriente* o *líneas de campo* a las líneas que en todos sus puntos tienen por tangente a \mathbf{v} , en un instante determinado t. Si el campo no es estacionario, la configuración de líneas de corriente varía de instante a instante, pero si el campo es estacionario dicha configuración se mantiene al paso del tiempo t.

Se denominan trayectorias a las curvas $\mathbf{r}(t)$ conformadas por las distintas posiciones que toma un punto material o volumen material infinitesimal con el transcurrir del tiempo. Por tanto cada trayectoria se halla asociada a un determinado punto material cuya tangente a cada uno de sus puntos \mathbf{r} es la velocidad $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t_p(\mathbf{r}))$, que dicho punto tiene en el instante $t_p(\mathbf{r})$ para la línea material cuando pasa por \mathbf{r} . En general, una trayectoria no coincide con una línea de corriente, salvo en casos en el que el campo de velocidades es estacionario, esto es cuando $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t_p(\mathbf{r})) = \mathbf{v}(\mathbf{r})$.

3.1.1. Descripción euleriana y lagrangiana

La forma más natural de describir el flujo de un material consiste en significar las magnitudes que le carecterizan en función de la posición \mathbf{r} y del tiempo t, por ejemplo cantidades como lo son; la densidad de masa $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$, el campo de velocidades $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, etc. Esta descripción que se denomina *Euleriana*, explícitamente consiste en la asignación de cada una de estas propiedades en cada punto del espacio. Si logramos la designación de cada una de estas propiedades en cada *punto material* se dice que tenemos una descripción *Lagrangiana*.

Para ilustrar este punto, considere la velocidad **v**. Su variación con el tiempo en la vecindad de un *punto fijo* del espacio, esto es $\partial \mathbf{v}/\partial t$, la cual no tiene una interpretación de partículas simple o directa¹, como la tiene el término $\frac{d\mathbf{v}}{dt}$. La variación

 $^{^{1}}$ Si bien esta cantidad tiene las dimensiones de aceleración, no lo es, pues mide la diferencia

con el tiempo de la velocidad de un *punto material* o bien $\frac{d\mathbf{v}}{dt}$ representa la aceleración del fluido, para esta variación utilizamos de la nomenclatura el término $d\mathbf{v}/dt$, que veremos con más detalle más adelante. Es claro que la aceleración $d\mathbf{v}/dt$ se encuentra vinculada dinámicamente con la resultante de las fuerzas que actúan sobre el elemento de volumen material, la cual es una magnitud cuya interpretación física es más clara y directa que el elemento $\partial \mathbf{v}/\partial t$.

En resumen, podemos decir que: (a) En la descripción *Euleriana* cada magnitud está asociada a puntos fijos del espacio, y (b) En la descripción *Lagrangiana* cada magnitud está asociada con *puntos materiales* del fluido.

Suponga ahora que a es un parámetro escalar de un fluido en movimiento (por ejemplo, la densidad o bien una componente de la velocidad, etc.) que cambia en el espacio y el tiempo. Los cambios en el observable $a(\mathbf{r}, t)$ son diferentes para un observador estacionario en un punto \mathbf{r} y para un observador que se mueve con el elemento de volumen seleccionado. Para un observador estacionario, la razón de cambio $\partial a/\partial t$ es causada exclusivamente por las "modificaciones locales del observable". Para observar el movimiento, se adicionan los siguientes cambios: Durante un intervalo de tiempo dt, el elemento de fluido es llevado a la nueva posición, que no es más que la posición anterior del elemento de fluido más un incremento, $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$, así pues, tenemos:

$$a(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) - a(r, t) = dt \left(\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial x_i}\frac{\partial x_i}{\partial t}\right) = dt \left(\frac{\partial a}{\partial t} + \mathbf{v}_i\frac{\partial a}{\partial x_i}\right); \quad (3.1)$$

con $v_i = dx_i/dt$ las componentes de la velocidad de la partícula presente en **r** al tiempo t. Donde, y de ahora en adelante, se usará la regla de Einstein, referente a la suma sobre índices repetidos, en los términos donde se hallen tales índices. De la cual se obtiene; la cual es una importante definición de la derivada material

$$\frac{da}{dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \mathbf{v}_i \frac{\partial a}{\partial x_i} = \frac{\partial a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla a.$$
(3.2)

⁽por unidad de tiempo) de las velocidades de puntos materiales distintos.

Los términos $\mathbf{v} \cdot \nabla a$ brinda en esencia elementos no lineales en las ecuaciones de la hidrodinámica. La propiedad del fluido es transportada por la velocidad, que a su vez es una propiedad del fluido.

3.1.2. Descomposición par e impar

El movimiento local de un fluido puede ser descompuesto en cuatro componentes distintivas: (1) puramente traslacional, (2) rotaciones del fluido como un sólido que no involucra deformaciones en el elemento de volumen analizado, (3) deformaciones de corte, y por último (4) deformaciones extensivas o dilataciones.

Considere dos partículas de fluidos m_1 y m_2 , a un tiempo t, estas partículas se encuentran separadas por una distancia $d\mathbf{r}$, y se mueven con velocidades \mathbf{v} y $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$. La velocidad de m_1 relativa a m_2 es el incremento $dv_i = \partial v_i / \partial x_j$, i, j = 1, 2, 3, la combinación de los elementos de $v_{i,j}$ se asocian a; $\nabla \cdot \mathbf{n} \neq 0$ a deformaciones tipo *apertura*, se asocia a los elementos $\nabla \times \mathbf{n} \neq 0$ a las deformaciones tipo *torsión* y a los elementos de la forma $\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} \neq 0$, así como los elementos de \mathbf{v} a traslaciones puras. Al separar las rotaciones sólidas (2) de las deformaciones (3) y (4), el tensor gradiente de velocidad $\partial v_i / \partial x_j$ puede ser expresado como la suma $A_{ij} + W_{ij}$, esto es; una parte simétrica A_{ij} y otra antisimétrica W_{ij} , definidas como sigue:

$$A_{ij} = A_{ji} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \qquad (3.3)$$

$$W_{ij} = -W_{ji} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right).$$
(3.4)

 A_{ij} es llamado el tensor de razón de deformación. Los elementos diagonales de A_{ij} describen la dilatación (4): sí; por ejemplo, las partículas m_1 y m_2 son separadas a lo largo del eje x_1 , entonces $A_{11} = \partial v_1 / \partial x_1$ es la razón de extensión por unidad de distancia de separación. Los elementos de A_{ij} fuera de la diagonal son proporcionales a la velocidad de cizallamiento en la dirección *i* de las dos partículas m_1 y m_2

separadas en la dirección j y esto representa el movimiento de corte (3). Finalmente W_{ij} , describe las rotaciones sólidas (2) de m_2 alrededor de m_1 , éstos regularmente son expresados a través de la velocidad angular $\varpi = \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{v}) \operatorname{con} W_{ij} = -\varepsilon_{ijk} \varpi_k$, donde ε_{ijk} son las componentes del tensor de Levi-Civita, las cuales cumplen;

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & si : ijk = 123, 231, 312 \\ -1 & si : ijk = 321, 213, 132 \\ 0 & cualquier & otro & caso \end{cases}$$
(3.5)

por último hagamos notar que $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i = \varepsilon_{ijk} a_j b_k$; con ello, $[\nabla \times \mathbf{a}]_i = \varepsilon_{ijk} a_{k,j}$, con $a_{k,j} = \partial a_k / \partial x_j$, note también que con ello tenemos una fórmula muy útil;

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}.$$
(3.6)

Como se trata de un tensor simétrico, A_{ij} puede ser diagonalizado en cualquier punto. Esto es, en cualquier punto del material, se puede elegir un sistema de ejes coordenados, llamados ejes principales del tensor de deformación, de tal forma que únicamente las componentes diagonales A_{11} A_{22} y A_{33} sean distintas de cero, es necesario precisar que una vez que el tensor **A** se halla diagonalizado en un punto del cuerpo, en general no lo estará diagonalizado en otros puntos del mismo.

Si el tensor de deformaciones está diagonalizado en un punto, en sus proximidades el elemento de longitud tras la deformación será:

$$dl'^{2} = (\delta_{ij} + 2A_{ij})dx_{i}dx_{j}$$

= $(1 + 2A_{11})dx_{1}dx_{1} + (1 + 2A_{22})dx_{2}dx_{2} + (1 + 2A_{33})dx_{3}dx_{3}.$ (3.7)

Note que esta expresión es suma de términos independientes, consecuentemente, la deformación de un elemento de volumen puede considerarse compuesta por deformaciones a lo largo de tres ejes mutuamente perpendiculares, éstos son los *ejes* principales del tensor **A**, para cierto tipo de flujos estas deformaciones son pequeñas, *i.e.* la variación de una longitud, comparada con la longitud misma, es pequeña.

Las dilataciones relativas de los elementos de longitud a lo largo de los *ejes princi*pales del tensor en las vecindades de un punto dado salvo términos de orden superior como

$$(1+2A_{ii})^{\frac{1}{2}} - 1 \approx A_{ii},\tag{3.8}$$

esto es; son directamente la suma de los valores principales del tensor **A**. Si se considera un elemento de volumen infinitesimal dV vemos que dV' el elemento de volumen luego de la deformación, está relacionado con los elementos de los valores principales del tensor **A**_{ij}, para hacerlo evidente habrá que hacer coincidir los ejes coordenados con los *ejes principales* en el punto que hemos considerado y ahí calcular dV', como los elementos dx_i luego de la transformación se miran como $dx'_i = (1 + A_{ii})dx_i$, el elemento de volumen dV' será escrito como

$$dV' = dV(1 + A_{11})(1 + A_{22})(1 + A_{33}), (3.9)$$

si despreciamos los términos de orden superior, tenemos;

$$dV' = dV(1 + A_{11} + A_{22} + A_{33}). (3.10)$$

La suma $A_{11} + A_{22} + A_{33}$, de los valores principales de un tensor o traza, se reconoce como uno de los invariantes bajo transformaciones lineales sobre tensores de segundo orden.

3.1.3. Tensor de esfuerzos

En un cuerpo en que no se hallan deformaciones, su distribución molecular corresponde a un estado de equilibrio, tanto térmico como mecánico, *i.e.* al considerar una porción cualquiera de un elemento de materia en estudio, la resultante de las fuerzas que actúan debidas a todas las otras es nula. Bajo una deformación la distribución molecular del sólido cambia de encontrarse en un estado de equilibrio, a uno donde las fuerzas generadas por la deformación tienden a anularse, y con ello se tiene un nuevo estado de equilibrio. Estas fuerzas internas que aparecen luego de deformarse el material se llaman *esfuerzos internos*, de no suceder una deformación, no suceden los *esfuerzos internos*.

Si se considera la fuerza total que se ejerce sobre un elemento de volumen del cuerpo, esta fuerza total es la suma de todas aquellas que actúan sobre el elemento considerado, de tal forma que se puede escribir como $\int \mathbf{F} dV$, donde \mathbf{F} es la fuerza por unidad de volumen, con ello; $\mathbf{F} dV$ es la fuerza que se ejerce sobre el elemento de volumen dV, ésta es equivalente a la suma de las fuerzas que ejercen sobre el elemento de volumen en cuestión las porciones que le rodean. Esto es la suma de las fuerzas que ejercen sobre todos los elementos de superficie, es decir, mediante la integral de superficie.

Así, para cualquier porción del material, cada componente de $\int \mathbf{F} dV$ es transformada en una integral de superficie, de tal forma que al hacer uso del teorema de la divergencia de Gauss obtenemos:

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j},\tag{3.11}$$

con ello, la fuerza ejercida sobre cualquier elemento de volumen se puede expresar a través de la siguiente inegral de superficie;

$$\int F_i dV = \int \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dV = \oint \sigma_{ij} dS_j, \qquad (3.12)$$

donde dS_i es la componente del vector de superficie que integra al elemento de volumen. El tensor σ_{ij} recibe el nombre de *Tensor de Esfuerzos*.



Figura 3.1. Componentes del tensor de esfuerzos en coordenadas cartesianas

Si se trazaran seis planos alrededor de un *punto material* de manera que se defina un elemento infinitesimal de volumen dv, con aristas dx, dy, dz; se tiene que sobre cada cara del elemento infinitesimal se puede definir un esfuerzo normal y una pareja de esfuerzos cortantes, obtenidos a partir de la descomposición de la fuerza que se transmite por esa cara. En total son 9 las componentes del esfuerzo que actúan en dicho volumen (figura 3.1). El primer subíndice de cada componente del tensor de esfuerzos denota la cara sobre la que actúa, el segundo índica la dirección en la que lo hace. Así, las componentes σ_{xx} , σ_{yy} , y σ_{zz} son los esfuerzos normales; mientras que las componentes σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz} , σ_{yx} , σ_{zx} , y σ_{zy} son los llamados esfuerzos de corte.

Ahora bien las fuerzas que actúan sobre una porción del cuerpo, generan el momento debido a la fuerza \mathbf{F} , que puede escribirse como un tensor antisimétrico de
segundo rango, cuyas componentes se escriben como $F_i x_j - F_j x_i$, donde x_i son las componentes de las coordenadas donde se aplica la fuerza **F**. Así, el momento debido a esta fuerza que actúan sobre el elemento de volumen dV es $(F_i x_j - F_j x_i)dV$ la integral sobre todo el volumen es el momento P_{ij} , que bien puede escribirse usando la expresión de la fuerza en términos del tensor de esfuerzos, esto es

$$P_{ij} = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \sigma_{il}}{\partial x_l} x_j - \frac{\partial \sigma_{jl}}{\partial x_l} x_i \right) dV$$
$$= \int_{\Omega} \frac{\partial \left(\sigma_{jl} x_i - \sigma_{il} x_l \right)}{\partial x_l} dV - \int_{\Omega} \left(\sigma_{il} \frac{\partial x_j}{\partial x_l} - \sigma_{jl} \frac{\partial x_i}{\partial x_l} \right) dV, \tag{3.13}$$

como estamos en un sistema ortonormal $\frac{x_i}{x_j} = \delta_{ij}$, con ello y reconociendo los nuevos indices, podemos usar el teorema de Green, *i.e.* la integral de volumen sobre Ω puede transformarse en integral de superficie sobre la frontera que encierra al volumen V, esta es $\partial \Omega$ así nos resulta

$$P_{ij} = \oint_{\partial\Omega} (\sigma_{il} x_j - \sigma_{jl} x_i) ds_l + \int_{\Omega} (\sigma_{ij} - \sigma_{ji}) dV, \qquad (3.14)$$

para que el momento P_{ij} sea expresado a través de una integral de superficie, el segundo término debe ser idénticamente nulo, es decir, debe cumplirse $\sigma_{ij} - \sigma_{ji} = 0$, *i.e.*

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji},\tag{3.15}$$

explícitamente para coordenadas cartesianas

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} \qquad \sigma_{zy} = \sigma_{yz} \qquad \sigma_{xz} = \sigma_{zx}. \tag{3.16}$$

3.2. Principios de conservación

En esta sección deduciremos las leyes generales de conservación de la física en este tipo de procesos como son la conservación de masa, momento y energía. Daremos aquí su forma explícita en el contexto de medios continuos, es decir en términos de variables de campo continuas expresadas como funciones de las coordenadas espaciales y del tiempo.

3.2.1. Conservación de masa: ecuación de continuidad

Considere un elemento de volumen del fluido V_0 acotado por la superficie A_0 . El subíndice "₀" nos índica que es un elemento de volumen fijo en el espacio. La masa del fluido en el volumen en cualquier momento es la integral de volumen sobre la densidad, esto es; $\int \int \int_{V_0} \rho(\mathbf{r}, t) dV$. La razón de flujo saliente de masa a través de la superficie cerrada A_0 es $\oint_{A_0} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\eta} dA$, donde hemos denotado por $\hat{\eta}$ al vector unitario que caracteriza al elemento de superficie de la superficie de integración. La razón a la cual la masa decrece en el interior de tal elemento de volumen es $-\frac{\partial}{\partial t} \int \int_{V_0} \rho(\mathbf{r}, t) dV$, pero la masa no puede ser creada o destruida (en este tipo de procesos), por lo que tenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_{V_0} \rho dV + \oint_{A_0} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\eta} dA = \int \int \int_{V_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + div \ \rho \mathbf{v} \right) dV = 0 \qquad (3.17)$$

la ecuación puede o bien debe mantenerse para cualquier elemento de volumen, con lo cual

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -div \ \left(\rho \mathbf{v}\right) = -\nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v}\right). \tag{3.18}$$

Ésta es la ecuación de conservación de masa, también conocida como la ecuación de continuidad. La cual tienen una forma lagrangiana, es decir, al aplicar la derivada

material al flujo de partículas, esto es; sobre la densidad que se tiene en el elemento de volumen, tenemos:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \tag{3.19}$$

lo que nos dice que la razón de cambio bajo un incremento infinitesimal temporal de la densidad $d\rho/dt$, cambia como el producto de la densidad ρ y la razón de expansión del volumen $\nabla \cdot \mathbf{v}$, al ser contrario el flujo, se adopta un signo opuesto. Para un fluido incompresible, $\rho(\mathbf{r}, t) = cte$, la ecuación de continuidad se simplifica a

$$\nabla \cdot \mathbf{v} \equiv \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial x_k} = 0. \tag{3.20}$$

3.2.2. Ecuación de momento lineal

Como en la sección anterior; seleccionamos un elemento de volumen V acotado por una superficie A que se mueve con el fluido (en este caso V y A dependen del tiempo), observando las componentes de las fuerzas que podemos escribir de las leyes básicas de la mecánica sobre un el elemento de volumen, obtenemos; la ecuación de momento lineal se sigue de un principio análogo a la segunda ley de Newton de la mecánica: La razón de cambio del momento $\frac{d}{dt} \int \int \int_V \rho \mathbf{v} dV$ de una partícula es igual a la fuerza neta que actúa sobre la partícula:

$$\frac{d}{dt} \int \int \int_{V} \rho \mathbf{v}_{i} dV = \int \int \int_{V} \left(\rho \mathbf{f}_{i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_{j}} \right) dV, \qquad (3.21)$$

en donde \mathbf{f}_i denota a un campo de fuerza volumétrico el cual puede ser en particular el campo de gravitación. σ_{ij} son las entradas del tensor de esfuerzos mecánicos los cuales pueden ser generados por fuerzas superficiales aplicadas sobre las superficies que confinan al fluido.

Al obtener el balance de momento en forma local, se requiere llevar la ecuación

anterior a la forma diferencial, sin embargo se tiene un pequeño detalle sobre el lado izquierdo, ya que no es permisible la operación, debido a que el elemento de volumen de integración es dependiente del tiempo. Observe, sin embargo, que se puede remplazar la integración sobre un elemento de volumen por la integración sobre un elemento de masa, $\rho dV = dm$, bajo el supuesto de que las variaciones sobre la densidad ρ son ínfimas, la región de integración (la masa de la partícula en movimiento) es constante, con ello se tiene la conmutación en el orden de integración y derivación sobre los elementos de volumen, esto es:

$$\frac{d}{dt} \int \int \int_{V} \rho \mathbf{v} dV = \frac{d}{dt} \int \mathbf{v} \ dm = \int \frac{d\mathbf{v}}{dt} \ dm = \int \int \int_{V} \left(\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt}\right) dV, \qquad (3.22)$$

cuando hacemos el elemento de volumen arbitrario, la forma Lagrangiana de la ecuación de movimiento la podemos escribir como

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \rho f_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j},\tag{3.23}$$

que vectorialmente se escribe

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \sigma, \qquad (3.24)$$

que en forma Euleriana se escribe como

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} = \rho f_i - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\sigma_{ij} + \rho v_i v_j \right), \qquad (3.25)$$

que en notación vectorial escribiendo en forma explícita la derivada material, escribimos

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}\right) = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \sigma, \qquad (3.26)$$

donde ρv_i es la densidad de momento y $(-\sigma_{ij} + \rho v_i v_j)$ es el tensor de flujo de momento, también llamado el tensor de corriente de momento. Finalicemos observando la estructura de esta última ecuación (3.26), se podría asímismo haber obtenido directamente a partir de la forma Lagrangiana (ecuación 3.24), donde la relación entre operadores claramente es

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla, \qquad (3.27)$$

que tiene en cuenta el movimiento del fluido a través de la superficie S por medio del término $\mathbf{v} \cdot \nabla$, la ecuación (3.26) puede considerarse como un ejemplo particular de lo que se conoce como *ecuación de balance*, cuya forma general se escribe como:

$$\frac{\partial (densidad)}{\partial t} = (fuentes) - \nabla \cdot (flujo), \qquad (3.28)$$

en donde las fuentes del momento son las fuerzas volumétricas y los flujos son *las* componentes del tensor de esfuerzos.

3.2.3. Ecuación de balance de energía

Considere la energía total de un fluido, la cual sabemos está compuesta de la energía cinética del movimiento y la energía interna, la cual no necesariamente es cero incluso para fluidos en reposo. Denotemos por ε la energía total de sistema y por u a la energía interna, ambas calculadas por unidad de masa, se tiene entonces que $\varepsilon = \frac{\mathbf{v}^2}{2} + u$. Así el cambio de la energía total se calcula como:

$$\frac{d}{dt} \int \int \int_{V_0} \rho \varepsilon \, dV = \int \int \int_{V_0} \rho \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + u \right) dV, \tag{3.29}$$

esto es causado por el trabajo hecho en el sistema y por el flujo de calor hacia éste. El trabajo por unidad de tiempo (potencia) se realiza sobre el volumen y la superficie, como; $\int \int \int_V \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{v}) \, dV + \oint_A (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}) dA$. Como el calor recibido por unidad de tiempo es; $\oint_A (-\mathbf{J}^q \cdot \mathbf{v}) dA$, donde \mathbf{J}^q es el flujo de calor. Entonces

$$\int \int \int_{V_0} \rho \frac{d\varepsilon}{dt} \, dV = \int \int \int_{V} \rho \left(\mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \right) dV + \oint_A (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}) dA + \oint_A (-\mathbf{J}^q \cdot \mathbf{v}) dA, \quad (3.30)$$

lo que en forma local y lagrangiana, escribimos como

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = \rho g_i v_j - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-v_i \sigma_{ij} + J_j^q \right), \qquad (3.31)$$

nuevamente, los flujos de energía y las fuentes pueden ser escritos en el esquema de Euler (en forma análoga a una ecuación de balance) como;

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\varepsilon = \rho g_i v_i - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v_i \left(-\sigma_{ij} + \rho\varepsilon\delta_{ij} \right) + J_j^q \right], \qquad (3.32)$$

ésto es adecuado, ya que separamos los cambios de enegía cinética de los cambios de energía interna, así escribimos la razón de energía cinética como; $\rho \frac{d}{dt} (\frac{\mathbf{v}^2}{2}) =$ $v_i(\rho \frac{d}{dt}(v_i))$, donde $\rho \frac{dv_i}{dt}$ se expresa a través de la ecuación de conservación de momento, de esa forma obtenemos la siguiente ecuación para la energía interna:

$$\rho \frac{du}{dt} = \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial J_j^q}{\partial x_j}, \qquad (3.33)$$

de esta manera, la energía interna específica es entonces controlada por el trabajo de las fuerzas debidas a las fuentes y al flujo del calor, con lo que se concluve que el trabajo de las fuerzas sobre el cuerpo, cambia sólo la energía cinética.

Ecuaciones constitutivas 3.3.

3.3.1.Tensor viscoso

Si en la dinámica del fluido no hay procesos disipativos (fluidos con viscosidad nula), $\frac{dS}{dt} = 0$, se tiene que el tensor es precisamente, $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$ (diagonal). En un caso más M. J. M. G.

general, por ejemplo en el caso de un proceso disipativo, se representa el tensor de esfuerzos como la suma de la parte reversible $\sigma_{ij}^{(r)} = -p\delta_{ij}$ y de la parte irreversible $\sigma_{ij}^{(d)}$, es decir, escribimos $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(r)} + \sigma_{ij}^{(d)}$. la parte ireversible $\sigma_{ij}^{(d)}$ es llamado el tensor de esfuerzo viscoso, cuando el tensor de esfuerzos viscoso se asume como una función lineal de un gradiente de velocidades (esto es; considerando pequeñas perturbaciones del sistema cercanas al equilibrio), de esta forma, tenemos que la función de disipación correspondiente se escribe como:

$$2R = \sigma_{ij}^{(d)} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \eta_{ijkl} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_l}, \qquad (3.34)$$

donde R es la función de disipación, se tienen *a priori* 54 coeficientes η_{ijkl} , las siguientes consideraciones reducen el número a dos en el caso de un fluido isotrópico. Primero, note que los elementos $\sigma_{ij}^{(d)}$ debería desaparecer cuando no hay ningún movimiento relativo (y así, ninguna fricción) entre los elementos del fluidos, es decir, cuando $\mathbf{v} = const$, o cuando el fluido gira como un cuerpo rígido con velocidad angular constante ϖ a lo largo de z, $(v_x, v_y) = (-\varpi_y, \varpi_x)$, obviamente, para este flujo $\partial v_y / \partial x = -\partial v_x / \partial y$, entonces, entre las cuatro componentes del movimiento considerados para un fluido, se tienen solamente dilataciones (3) y flujos de corte (4), caracterizado por el tensor simétrico A_{ij} , éste puede causar fricción *per se* (fricción intrinseca entre los elementos del flujo), en consecuencia y al ser estos elementos las únicas combinaciones lineales de los gradientes de la velocidad que deben aparecer en las ecuaciones, podemos escribir pues $\sigma_{ij}^{(d)} = \eta_{ijkl}A_{kl}$, debido a las simetrías con respecto al intercambio de los indices $i \leftrightarrow j$, $k \leftrightarrow l$, y $ij \leftrightarrow kl$ (relaciones de Onsager), para un fluido isotrópico, éste es caracterizado por solamente dos coeficientes de viscosidad independientes, los cuales escribimos como:

$$\sigma_{ij}^{(d)} = \varsigma \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \eta \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right)$$

$$\equiv \varsigma \delta_{ij} A_{kk} + 2\eta \left(A_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_{kk} \right), \qquad (3.35)$$

M. J. M. G.

los escalares ς y η , son respectivamente; la viscosidad dinámica de bulto y la viscosidad dinámica de corte, a través de la segunda ley de la temodinamica, debe cumplirse que los coeficientes deberán satisfacer; $\eta > 0$ y $\varsigma > 0$.

3.3.2. Fluidos newtonianos y no newtonianos

Los Fluidos Newtonianos son aquellos en donde al aplicar un esfuerzo cortante, éste se comporta de manera directamente proporcional al gradiente de velocidad y en consecuecia la viscosidad se torna constante e independiente del valor del esfuerzo aplicado y del tiempo de aplicación del mismo, que escribimos como

$$\tau = \eta \frac{d\mathbf{v}}{dx},\tag{3.36}$$

la constante de proporcionalidad η , es denominado coeficiente de viscosidad también conocido como viscosidad absoluta o dinámica, en general ésta aumenta muy débilmente con la presión, pero es afectada fuertemente por variaciones en su temperatura; cuando ésta se toma por unidad de densidad se le conoce simplemente como viscosidad dinámica.

En el caso de fluidos *No Newtonianos*, el esfuerzo cortante aplicado no es directamente proporcional a la rapidez de deformación y por ende varia según el gradiente de tensión aplicado; como resultado de ello, tenemos; un fluido *No Newtoniano* no tiene un valor de viscosidad definido y constante, como en la ecuación (3.36). Como ejemplo de ésto tenemos; la mayonesa y la sangre.

3.3.3. Ley de fourier

Sea \mathbf{J}^q la densidad de flujo de calor (energía por unidad de área y por unidad de tiempo), entre dos puntos de un flujo, debido a una diferencia de temperatura entre éstos. Así la *ley de Fourier* afirma que hay una proporcionalidad entre el flujo de

energía \mathbf{J}^q y el gradiente de la temperatura, es decir

$$J_j^q = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j},\tag{3.37}$$

donde hemos escrito la ecuación en notación indicial por comodidad, y κ se denomina conductividad térmica, la cual es caracteristica de cada medio. Consideremos un volumen de control definido y constante V_c en el espacio confinado por una superficie S. La energía que sale de tal volumen de control está contabilizada por la proyección normal de J_i^q a través de la superficie confinante

$$\frac{dE}{dt} = -\oint_S J^q \cdot dS. \tag{3.38}$$

Esta energía, se emplea en cambiar la temperatura de la materia encerrada por la superficie S, la cantidad de energía absorbida o cedida (en la unidad de tiempo, en caso de no haber cambios de fase de primer orden) dentro de un volumen de control también es igual

$$\frac{dE}{dt} = \int_{V_c} \left(\frac{dq}{dT}\right)_p \frac{dT}{dt} dV = \int_{V_c} \rho c_p \frac{dT}{dt} dV, \qquad (3.39)$$

en donde q es el flujo de calor por unidad de masa, c_p es el calor específico a presión constante del fluido. Eliminando dE/dt de ambas ecuaciones se obtiene

$$\int_{V_c} \rho c_p \frac{dT}{dt} dV = -\oint_S J^q \cdot dS = -\int_{V_c} \nabla \cdot J^q dV, \qquad (3.40)$$

en la última igualdad se ha hecho uso del teorema de Gauss, con ello la ecuación anterior se puede transformar en

$$\int_{V_c} \left[\rho c_p \frac{dT}{dt} + \nabla \cdot J^q \right] dV = 0.$$
(3.41)

Debido a que esta ecuación es válida para cualquier volumen de control es válida

también localmente. Así insertando la ecuación 3.37 en la ecuación resultante, se llega a

$$\frac{dT}{dt} + \frac{\kappa}{\rho c_p} \nabla^2 T = 0, \qquad (3.42)$$

que es conocida como la ecuación de conducción de calor.

3.3.4. Ecuación de Navier Stokes

Los coeficientes de viscosidad dinámica de bulto η viscosidad dinámica de corte ς depende la viscosidad, también conocidos como coeficiente de viscosidad y coeficiente de segunda viscosidad, respectivamente. Las ecuaciones de movimiento de un fluido viscoso pueden ahora ser obtenidas con la simple sustitución de la ecuación constitutiva mecánica discutida en la sección 3.3.1, es decir; $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^d$ en el lado derecho de la ecuación de momento 3.26

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_i}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i},\tag{3.43}$$

con lo que obtenemos:

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_i}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right)\right) + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varsigma\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right).$$
(3.44)

Ésta es la forma más general de la ecuación de movimiento de un fluido viscoso isotrópico, recordemos que los coeficientes viscosas η y ς en general se encuentran en función de la presión y temperatura. En general p, y T, así como η y ς ; no son constantes a través del fluido, sin embargo, los coeficientes de viscosidad no cambian notablemente a través del fluido, con ello, éstos se pueden considerar constantes en una primer aproximación, así la ecuación 3.44 la podemos escribir de la siguiente manera:

$$\rho[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}] = \rho \mathbf{F} - \nabla \ p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + (\varsigma + \frac{1}{3}\eta)\nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{v}\right), \qquad (3.45)$$

o bien

$$\rho[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}] = \rho \mathbf{F} - \nabla p + \varsigma \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \eta \nabla^2 \mathbf{v}.$$
(3.46)

Ésta es llamada la ecuación de Navier-Stokes. Si se considera que el fluido es incompresible, la ecuación de continuidad de masa, nos dice; $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, y los términos del lado derecho de esta última (ecuación 3.45) es cero, para fluidos viscosos, incompresibles y *Newtonianos*, podemos escribir;

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\eta}{\rho}\nabla^2 \mathbf{v}.$$
(3.47)

donde el tensor de esfuerzo (3.35) en un fluido incompresible toma la forma simple:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ik} + \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right), \qquad (3.48)$$

las expresiones para el tensor de esfuerzos en coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) , éstas se pueden revisar en el apéndice A.

3.4. Flujo en un canal

Considere un fluido confinado entre dos planos que forman un ángulo α entre ellos, como se muestran en la siguiente figura 3.2. Primero; supondremos que fluye en dirección de la línea de intersección de los planos.



Figura 3.2. Forma gráfica del canal convergente

Las coordenadas más convenientes para tal empresa son las coordenadas cilíndricas (figura 3.2), este sistema tiene como variables r, ϕ , z. Con el eje z a lo largo de la línea de intersección de los planos que conforman al canal, y el ángulo ϕ , medido a partir de uno se sus planos frontera, como se muestra en la figura 3.2. Si el flujo fuese laminar éste sería uniforme en la dirección del eje z, por no haber fuerzas externas o inducidas en esta dirección, así en caso de haberlo, se puede asumir que el flujo es enteramente radial, es decir, con ello se asume

$$v_{\phi} = v_z = 0, \qquad (3.49a)$$

$$v_r = v(r,\phi). \tag{3.49b}$$

y las ecuaciones de Navier-Stokes 3.47 y continuidad 3.19 se escriben como:

$$v\frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial \phi} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 v}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2}\right),\tag{3.50}$$

$$-\frac{1}{\rho r}\frac{\partial p}{\partial \phi} + \frac{2\nu}{r^2}\frac{\partial v}{\partial \phi} = 0, \qquad (3.51)$$

$$\frac{\partial (rv)}{\partial r} = 0. \tag{3.52}$$

3.4.1. Solución analítica

En este caso, la ecuación de continuidad (ecuación 3.52) tiene por solución

$$v = u(\phi)/r,\tag{3.53}$$

con la cual podemos reescribir las ecuaciones (3.50 y 3.51) de la siguiente forma:

$$\frac{p}{\rho} = \frac{2\nu u}{r^2} + g(r), \tag{3.54}$$

 con ello

$$g'(r)r^{3} = \frac{\partial^{2}u}{\partial\phi^{2}} + 4\nu u + u^{2}, \qquad (3.55)$$

como el lado derecho solo depende de ϕ y el izquierdo de r, se puede concluir que:

$$g'(r) = \frac{c}{r^3} \operatorname{con} \quad \text{ello} \tag{3.56}$$

$$g(r) = -\frac{c}{2r^2} + conts.$$
 (3.57)

$$y \quad u'' + 4\nu u + u^2 = conts.$$
 (3.58)

la cual admite solución a través de la multiplicación por la derivada de la función u'^{1} , es decir

$$u'u'' + 4\nu uu' + u^2u' - cu' = 0, \qquad (3.59)$$

$$\left(\frac{u'}{2}\right)^2 + \frac{4\nu}{2}u^2 + \frac{u^3}{3} - cu + d = 0, \qquad (3.60)$$

con c y d, constantes, esta última la podemos llevar a cuadraturas, esto es:

$$\phi - \phi_0 = \int d\phi = \int \frac{du}{2^{\frac{1}{2}} \left(d + cu - 4\nu u^2 - \frac{u^3}{3} \right)^{\frac{1}{2}}},$$
(3.61)

la cual puede ser integrada en el espacio de configuración. Es posible escribir esta expresión en términos de funciones elípticas, estudiar su comportamiento analíticamente [11] y deducir las soluciones múltiples que este problema puede presentar. En la siguiente sección utilizamos un método numérico alternativo para estudiar sus soluciones conocido como continuación paramétrica. Dicho método numérico nos servirá de base para resolver y analizar el sistema propuesto en este trabajo de tesis.

¹usaremos x' para la derivada sobre la variable de la función, en este caso x y usaremos \dot{x} para la derivada temporal total de la función x

3.4.2. Solución numérica

Con el objeto de expresar la ecuación diferencial a resolver de la forma más similar posible a la ecuación que será resuelta en la sección 3.4.1 para cristal líquido nemáticos, se sigue la ecuación 3.58, para obtener una ecuación diferencial de tercer orden:

$$4\nu u' + u^{(3)} + 2u'u = 0. ag{3.62}$$

Se necesitan tres condiciones de frontera para resolver esta ecuación, las cuales pueden escogerse como la función u, su derivada $u' = \alpha$ y segunda derivada $u'' = \beta$ evaluadas en la frontera. Ahora bien, debido a que se considera que el fluido no resbala sobre la superficie de las placas confinantes, se tiene que la componente de la velocidad debe de ser nula en ambas fronteras, es decir en $\phi = 0$ y $\phi = \pi/4$

$$u(0) = u(\pi/4) = 0. \tag{3.63}$$

La tercera condición se obtiene de escoger un valor arbitario para $u''(0) = \beta$ que posteriormente es expresada en términos del gasto del fluido a través del canal Q. Nótese, que desde el punto de vista matemático, éste es un problemas con condiciones a la frontera en que se debe imponer el valor de la función u en más de un punto. Se utilizará el método numérico de disparo (shooting) para emplear un algoritmo para resolver problemas de condiciones iniciales como Runge Kutta [29], en la solución de este problema con condiciones de frontera. El método de disparo consiste en partir de un conjunto de valores iniciales para u en este caso: u(0) = 0, $u'(0) = \alpha$ y $u''(0) = \beta$, para determinar el valor de $u(\pi/4)$. Si $u(\pi/4)$ no satisface la segunda condición de la ecuación 3.63, se cambia el valor α hasta que se cumpla. Todos los valores de α que cumplen esta condición serán soluciones al problema de condiciones de frontera definido por las ecuaciones (3.62) y (3.63).

M. J. M. G.

Debido a que el principal interés es analizar el comportamiento del campo de velocidades para varias intensidades de flujo, será necesario repetir el procedimiento para varios valores de β . Una forma sistemática de obtener todas estas soluciones parametrizadas por β , se logra utilizando el método de continuación paramétrica, en el cual se considera un pequeño cambio en el primer valor de β_0 para el cual se resolvió el problema de condiciones iniciales, es decir $\beta_0 + \Delta\beta$ [29]. Consecuentemente, si el valor de α_0 no satisface el problema de condiciones de frontera para el nuevo valor de β . Sin embargo, el nuevo valor de α debe de estar cerca de α_0 en la medida que $\Delta\beta$ sea pequeño. De esta manera, basta con buscarlo en la vecindad de α_0 para obtener $\alpha_0 + \Delta\alpha$. Repitiendo este procedimiento conseguimos graficar paramétricamente el o los valores de α en función de β .



Figura 3.3. Parámetros solución de **u** como función del parámetro β .

Ahora, cada rama tiene un perfil de flujo solución distinto como función del parámetro β , veamos pues cada una de éstos mas adelante. Como los perfiles de velocidad de-

penden también del parámetro α , podemos graficar este último como función del parámetro β , *i.e.* el espacio $\beta - \alpha$, (fig. 3.3). Definiremos por punto rama a aquella escinsión de la gráfica 3.3, y por ramas las distintas direcciones alternativas o líneas trayectorias.

Se reconocen a los puntos de la gráfica $\beta - \alpha$ como los perfiles solución en el espacio $u(\phi) - \phi$, la primer característica de esta primer gráfica (figura 3.3) es, que las ramas $A, B \neq C$ son continuación parámetrica una a la otra, asociadas a perfiles de velocidad $u(\phi) - \phi$ a r = const. simétricos respecto al plano medio que les separa, en tanto, la ramas $D \neq E$ divergentes al punto ramal $\beta = 1428$, expresan perfiles asimétricos $u(\phi) - \phi$ para sus valores asociados $\beta - \alpha$. Esto se hace explícito en las gráficas de los perfiles de velocidad (figura 3.5b y 3.5a respectivamente), se observa que ambas son reflejo especular una de la otra, tras una reflección especular bajo el eje $\phi = \pi/8$, que es el eje de simétria del canal, a esto se denominará de ahora en adelante como simetría sobre los perfiles o texturas. Además, nótese que se rompe la simétria de los perfiles a partir del punto rama $\beta = 1428$, luego próximo a la frontera se abre paso una zona para la cual, localmente el flujo es opuesto al flujo del resto del perfil, a esto se le denomina contraflujo.

Un hecho a enfatizar, es la ruptura de la simetría como se observa en las figuras 3.6a y 3.6b, donde se muestran los perfiles asimétricos de las ramas D y E, además de tener en medio de estos el perfil simétrico correspondiente a la rama C, se han tomado valores de β mayores al punto ramal $\beta = 1428$, éstos muestran cómo los perfiles comienzan a alejarse del perfil simétrico, dichas gráficas corresponden a un solo valor de β , pero no así para α como lo hace específico la gráfica 3.3. Como resultado de la **no** linealidad de la ecuación diferencial de tercer orden (ecuación 3.62).

Nótese, que este tipo de solución es simétrica respecto a la línea media, *i.e.* respecto a la línea que define el plano con $\phi = \pi/8$, para nuestro problema de canal con $\phi \in (0, \pi/4)$. Recordemos que la masa que pasa por unidad de tiempo a través de un



Figura 3.4. Perfiles solución de la ecuación 3.62, simétricas; ramas A y B.



Figura 3.5. Gráficas asimétrica derecha e izquierda, debidas a las soluciones de 3.62, ramas $C \ge D$ respectivamente (figura 3.3).



Figura 3.6. Perfiles de velocidades para números próximos y progresivos del parámetro β al punto rama de la gráfica 3.3.

área o sección tranversal es denominado gasto, el cual denotamos por Q, que puede ser calculado fácilmente de la ecuación de continuidad de masa, es decir:

$$Q = \int_{V} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV = \oint_{S} \rho \mathbf{v} \cdot ds, \qquad (3.64)$$

para el fluido que cruza por unidad de tiempo una sección transversal con r = const se obtiene

$$Q = \rho \int_{\pi/4}^{0} v r d\phi = 6\nu\rho \oint_{0}^{\pi/4} u d\phi, \qquad (3.65)$$

Q puede ser positivo o negativo. Si Q > 0, la línea de intersección de las superficies fronteras es una fuente, *i.e.*. El fluido emerge del vértice del ángulo, a esto se le denomina *flujo en un canal divergente*. La razón $\frac{\|Q\|}{\nu\rho}$ es adimensional y juega el papel del número de Reynolds en este problema.

Al ser las ramas $E \neq D$ reflexión especular una de la otra, es de esperarse pues que sus gastos sean idénticos. Para flujos de perfiles con u > 0 en todo momento se tienen flujos tal que Q > 0, para la rama B como la hemos tomado, luego de pasar por $\beta = 0$ el gasto se vuelve contrario a la dirección de \vec{r} , con ello el flujo se invierte y tenemos flujos que se dirigen al vértice, así para flujos con Q < 0, éstos se denominan por *flujos convergentes*. Como se observa, los gastos son monótonos con el parámetro β . De igual forma, las ramas $D \neq B$ parecen convergir una a la otra (figura 3.3), sin embargo para β mayores eso no sucede, ya que tienen un comportamiento asintótico.



Figura 3.7. Flujo de los perfiles de las ramas solución, de la ecuación 6.11.

- CAPITULO 4

Flujo de nemáticos

A continuación, se describen las principales propiedades dinámicas de los nemáticos. Se considera que no existe ningún campo eléctrico, magnético u óptico de suficiente intensidad para deformar la configuración del nemático. Asimismo, se desarrolla una de las teorías más utilizadas para describir situaciones experimentales de la nematodinámica.

4.1. Teoría de Ericksen-Leslie

Se considera tanto para casos prácticos como teóricos, al cristal líquido como consistente en partículas moviéndose lentamente. De ahí que el abordaje para el estudio de estos sistemas se centre en el comportamiento del director **n** en ausencia de los campos de la velocidad. Lamentablemente, la velocidad lenta realmente distorsiona la alineación de las moléculas. Más importante, el opuesto es también cierto [13], es decir, un cambio de la alineación induce cambios en la velocidad, la cual, a su vez a afectar la evolución temporal del campo director. En este proceso, no podemos asumir que el campo de velocidad permanece pequeño incluso cuando comenzamos con un campo de velocidad cero. Por ello Ericksen y Leslie en los 60´s formularon la teoría hidrodinámica para cristales líquidos, donde consideran las ecuaciones de conservación de masa, de momento lineal, de momento angular, así como la condición de flujos incompresibles.



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. De acuerdo al esquema general presentado en las partes anteriores, se identifican siete variables hidrodinámicas independientes: densidad de masa ρ , densidad de momento $\rho \mathbf{v}$, densidad de energía $\rho \varepsilon$, y las dos componentes de \mathbf{n} , mismas que son restringidas a dos, debido a la unitariedad del vector mismo. Las leyes de conservación para las primeras cinco variables mantienen la formas antes descritas. La conservación del momento angular es garantizada siempre que el tensor de esfuerzos σ_{ij} sea simétrico. En efecto, éste es un requerimiento para σ_{ij} . En la ley de conservación para la densidad de momento (ecuación 3.45), la cantidad observable no es el tensor de esfuerzos (ecuación 3.48), pero si lo es la divergencia tensorial $\partial \sigma_{ij}/\partial x_j$. El requerimiento de simetría puede ser restaurado con la adición del tensor antisimétrico σ_{ij} en términos de $\partial \chi_{ijk}/\partial x_k$, donde χ_{ijk} es algún tensor asimétrico con respecto al cambio de los índices j y k; es decir, $\chi_{ijk} = -\chi_{ikj}$. El nuevo tensor de esfuerzos simétrico $\tilde{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} + \partial \chi_{ijk}/\partial x_k$ con $\partial \tilde{\sigma}_{ik}/\partial x_k = \partial \sigma_{ik}/\partial x_k$, es tal que el momento lineal y el momento angular se conservan.

4.1.1. Tensor de esfuerzos disipativo y dinámica del vector director

En la derivación de la ecuación dinámica para el vector director \mathbf{n} , es necesario observar el hecho de que el vector \mathbf{n} se halle normalizado, esto es $\mathbf{n}^2 = 1$, que resulta en $\mathbf{n} \cdot \dot{\mathbf{n}} = 0$. Primero, recuérdese que el campo de vectores directores se alinean paralelos, es decir, en la configuración de equilibrio. Entonces, la cantidad de interés en el campo molecular es el vector $\mathbf{m} = \mathbf{h} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{h})$ el cual es perpendicular a \mathbf{n} , esto es $\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$.

Donde h_i , se denomina campo molecular que se especifica en ausencia de campos electromagnéticos como:

$$h_i \equiv -\frac{\partial f_{FO}}{\partial n_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial f_{FO}}{\partial (\partial n_i / \partial x_j)} \right).$$
(4.1)

M. J. M. G.

Las componentes de **m** pueden ser escritas con la ayuda de la delta de Kronecker transversal como $m_i = \delta_{ij}^{\perp} h_j$. La dependencia de $\dot{\mathbf{n}}$ en h_j , que a su vez en la ecuación dinámica, se puede describir por el término $(\frac{1}{\gamma_1}\delta_{ij}^{\perp}h_j)$, donde el escalar γ_1 tiene las dimensiones de la viscosidad.

Segundo, la relación entre $\dot{\mathbf{n}}$ y el gradiente de velocidades $\partial v_j / \partial x_k$ puede obtenerse a través del tensor de tercer rango λ_{ijk} . Llamando a $\dot{n}_i = \lambda_{ijk} \partial v_j / \partial x_k$. Esto debido a que $\mathbf{n} \cdot \dot{\mathbf{n}} = 0$, con lo que se tienen solamente dos componentes independientes de λ_{ijk} . Usualmente se separa λ_{ijk} en términos de la parte simétrica y la parte antisimétrica, esto es $\dot{n}_i = \lambda_{ijk}^{(s)} A_{jk} + \lambda_{ijk}^{(a)} W_{jk}$, pero las rotaciones de un nemático como una barra con velocidad angular $\boldsymbol{\varpi} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{v}$ reorienta el campo de vectores directores (sin considerar energía disipada), la contribución antisimétrica $\lambda_{ijk}^{(a)} W_{jk}$ puede simplificarse como $\varepsilon_{ijk} \boldsymbol{\varpi}_j n_k \equiv W_{ij} n_k$, la parte simétrica puede también ser escrita en términos del coeficiente como $\lambda_{ijk}^{(s)} = \lambda \delta_{ij}^{\perp} n_k$, donde λ es un parámetro adimensional. Resumiendo, la ecuación dinámica del vector director es:

$$\frac{dn_i}{dt} = W_{ij}n_k + \lambda \delta_{ij}^{\perp} A_{jk}n_k + \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ij}^{\perp} n_j, \qquad (4.2)$$

comparando con la ecuación anterior, para la dinámica del vector director, se justifica la notación introducida. Los efectos dinámicos son incluidos en el campo h, donde no tenemos términos de ∇T en el lado derecho de la ecuación de la derivada temporal de \mathbf{n} , esto debido a la simetría de $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$.

4.2. Relaciones constitutivas

El tensor de esfuerzos disipativos $\sigma_{ij}^{(d)}$ y el director dinámico pueden ser escritos en términos del vector **N**, el cual describe la razón de rotación relativa al vector director, que escribimos como:

$$\mathbf{N} = \dot{\mathbf{n}} - \boldsymbol{\varpi} \times \mathbf{n}, \qquad \acute{\mathbf{o}} \qquad N_j = -n_k \overline{\overline{\Omega}}_{jk} = n_k \overline{\overline{\Omega}}_{kj}, \tag{4.3}$$

que en términos del tensor asimétrico de vorticidad, escribimos las componentes como:

$$N_j = \dot{n}_j - W_{ij} n_j. \tag{4.4}$$

El tensor de esfuerzos viscos
o $\overline{\sigma}_{ij},$ puede de esta forma ser expresado a través de N
 y A_{ij} de la siguiente forma

$$\sigma_{ij} = \alpha_1 n_i n_j n_k n_l A_{kl} + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_j n_p A_{pi} + \alpha_6 n_i n_p A_{pj}, \qquad (4.5)$$

los coeficientes α_i , son conocidos como los coeficientes de viscosidad de Leslie, o simplemente coeficientes de Leslie, con ello podemos escribir la parte antisimétrica del tensor de esfuerzos viscoso como:

$$\varepsilon_{ijk}\sigma_{jk} = \varepsilon_{ijk} \left(\alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_5 n_j n_p A_{pi} + \alpha_6 n_i n_p A_{pj}\right)$$

$$= \varepsilon_{ijk} n_j \widetilde{g}_k,$$
(4.6)

 ${\rm donde}$

$$\widetilde{g}_k = -\gamma_1 N_i - \gamma_2 A_{ip} n_p, \qquad (4.7)$$

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2, \tag{4.8}$$

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5. \tag{4.9}$$

Parodi propuso vía las relaciones de Onsager, que los coeficientes de viscosidad son restringidos a través de la relación entre los coeficientes, ésto es:

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5 = \alpha_3 + \alpha_2, \tag{4.10}$$

Nótese que esta relación fue obtenida subsecuentemente por Currie [40], a través de un argumento de estabilidad, este resultado reduce el número de coeficientes de viscosidad independientes a cinco en lugar de los seis usuales, lo que resulta en una simplificación de la teoría. No se persiguen los argumentos que causan la relación de Parodi, sin embargo, ésta es generalmente acorde a la solución que nos da la teoría. Las relaciones de Parodi sostienen que la desigualdad de la disipación viscosa se reduce a

$$\mathcal{D} = \alpha_1 (n_i A_{ij} n_j)^2 + 2\gamma_2 N_i A_{ij} n_j + \alpha_4 A_{ij} A_{ij} + (\alpha_5 + \alpha_6) n_i A_{ij} A_{jk} n_k + \gamma_1 N_i N_i \ge 0, \qquad (4.11)$$

(4.12)

donde $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$, $\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5$, y los coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_6$, son los llamados coeficientes de viscosidad de Leslie, o simplemente viscosidades de Leslie.

4.2.1. Viscosidad nemática

La anisotropía en las propiedades viscosas de un fluido nemático puede ser ilustrada al medir las viscosodades efectivas para diferentes orientaciones del vector director \mathbf{n} con respecto a la dirección de un campo externo \mathbf{H} .



Figura 4.1. Flujo de Couette de un nemático entre dos planos, con el vector director fijo por un campo externo H intenso.

Considérese un flujo de *Couette* en un plano ¹ confinado entre los planos z = 0y z = d figura 4.1. El plano movil superior que se mueve a velocidad constante U a lo largo del eje y, con el plano del fondo fijo; el flujo de corte se especifica como $(0, v_y(z), 0)$. El fluido se adhiere al sustrato sólido de tal forma que se tiene $v_y |_{z=d} = U$ y $v_y |_{z=0} = 0$. Suponga además que el director del material H, como en la figura 4.1, se halla fijo en el espacio y tiempo, por ejemplo a través de un campo externo intenso, así; $\mathbf{n}(r,t) = Constante$ figura 4.1, y que el nemático satisface la ley de Newton para la viscosidad, esto es:

$$\sigma_{yz}^{(d)} = \eta \frac{dv_y}{dz},\tag{4.13}$$

$$\eta^{a} = \frac{\alpha_{4}}{2} \qquad \eta^{b} = \frac{\alpha_{3} + \alpha_{4} + \alpha_{6}}{2} \qquad \eta^{c} = \frac{-\alpha_{2} + \alpha_{4} + \alpha_{5}}{2}, \tag{4.14}$$

donde σ_{yz}^d es el tensor de esfuerzos cortantes transmitido a través del fluido nemático, y η es la constante comunmente nombrada como coeficiente de viscosidad efectiva.

¹El flujo entre dos cilindros concéntricos que rotan, es referido en la literatura como *Flujo de Couette* (M. Couetee 1890). En el límite $R_1 \rightarrow R_2$ se vierte en el movimiento entre planos paralelos referido a un flujo de *Couette* en dos dimensiones.



Figura 4.2. Flujo de *Couette* de un nemático entre planos, con el vector director fijo por un campo externo intenso. Geometrías de Miesowicz: (a) \mathbf{n} paralelo a la dirección de vorticidad, (b) \mathbf{n} paralelo al flujo, (c) \mathbf{n} paralelo al gradiente de velocidad.

Integrando la última ecuación y empleando condiciones de frontera, primero encontramos que la velocidad es una función lineal de la coordenada z; $v_z = \dot{\gamma} z$, donde $\dot{\gamma} = \frac{U}{d}$ que es la razón de corte constante con dimensión 1/s. Expresando η como función de los coeficientes de Leslie α_i y las viscosidades η^i , con las siguientes tres más practicas geometrias posibles para la orientación del director versus flujo de corte, comúnmente conocidas como geometría de Miesowicz (figura 4.2).

- 1. **n** perpendicular a la dirección del flujo y al gradiente de velocidad, $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$. Entonces, $n_i A_{ij} = 0$, $N_i = n_k W_{ki} = 0$, y el tensor de esfuerzos se reduce a $\sigma_{xy} = \alpha_4 A_{yz} = \alpha_4 \frac{\dot{\gamma}}{2}$; *i.e.*, $\eta^a = \frac{\alpha_4}{2} = \eta_2$. La torca de viscosidad es por tanto nula, que se escribe como $\Gamma = (\alpha_2 - \alpha_3) [\mathbf{n} \times \mathbf{N}] + (\alpha_5 - \alpha_6) [\mathbf{n} \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{n}] = 0$, es decir, el nemático se comporta como un fluido isotrópico con una viscosidad efectiva $\frac{\alpha_4}{2} = \eta_2$.
- 2. **n** paralelo al flujo, **n** = (0, 1, 0). las componentes de $n_i A_{ij}$ y $N_i = n_j W_{ji}$ son (0, 0, $\frac{\dot{\gamma}}{2}$); $\bar{\sigma}_{yz} = \alpha_3 N_z + (\alpha_4 + \alpha_6) A_{yz}$. Por tanto, $\eta^b = (\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)/2 = \eta_3 + \gamma_1 (1 - \lambda)^2/4$.
- 3. **n** paralelo al gradiente de velocidad **n** = (0,0,1). Las componentes de $n_i A_{ij}$ y $N_i = n_j W_{ji}$ son $(0, \frac{\dot{\gamma}}{2}, 0)$ y $(0, -\frac{\dot{\gamma}}{2}, 0)$, respectivamente. De este modo, $\bar{\sigma}_{yz} = \alpha_2 N_y + (\alpha_4 + \alpha_5) A_{yz}$ y $\eta^c = (-\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_5)/2 = \eta_3 + \gamma_1 (1 + \lambda)^2/4$.

Viscosidad de Miesowicz	$\eta^{1} = \frac{1}{\eta^{1}}(\alpha_{3} + \alpha_{4} + \alpha_{6}) = \frac{1}{2}(\alpha_{2} + 2\alpha_{3} + \alpha_{4} + \alpha_{5})$
	$\eta^2 = \frac{1}{2}(-\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_5)$
	$\eta^3 = \frac{1}{2}\alpha_4$
	$\eta^{12} = \alpha_1$
viscosidad Rotacional	$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$
coeficiente de Torción	$\gamma_2 = \alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5 = \eta^1 - \eta^2$
viscosidad de apertura (splay)	$\eta^{splay} = \gamma_1 - \frac{1}{4\eta^1} (\eta^1 - \eta^2 + \gamma_1)^2 = \gamma_1 - \frac{\alpha_3^2}{\eta^1}$
viscosidad de torcedura (twist)	$\eta^{twist} = \gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$
viscosidad de curvatura (bend)	$\eta^{bend} = \gamma_1 - \frac{1}{4\eta^2} (\eta^1 - \eta^2 - \gamma_1)^2 = \gamma_1 - \frac{\alpha_2^2}{\eta^2}$

Experimentalmente con el flujo de corte inmerso en un campo de intensidad magnética **H** intenso, podemos medir experimentalmente conbinaciones de las viscosidades de Leslie, por medio de las viscosidades de Miesowics, según sea; (a) **n** paralelo a la dirección de vorticidad, (b) **n** paralelo al flujo, (c) **n** paralelo al gradiente de velocidad. En conjunto con otras técnicas como lo es la dispersión de luz, la dinámica de la transición de Frederiks, rotación y oscilación de campos, y otros, se pueden encontrar todos los coeficientes viscosos α_i . Por definición las tres viscosidades de Miesowicz en experimentos de corte se calculan a través de:

$$\eta^{b} = \frac{\alpha_{3} + \alpha_{4} + \alpha_{6}}{2} < \eta^{a} = \frac{\alpha_{4}}{2} < \eta^{c} = \frac{-\alpha_{2} + \alpha_{4} + \alpha_{5}}{2}.$$
(4.15)

Las viscosidades como función de los coeficientes de Leslie para los tres casos, se muestran en la figura 4.3. Éstas son conocidas como viscosidades de Miesowicz luego de ser propuestas y medidas por ejemplo en [22], [23]. Si se escoge una orientación no simétrica para el director, la viscosidad α_i es accesible en experimentos de corte, por ejemplo [24].

Los coeficientes de Viscosidad para *pentylcyanobiphenyl* (5*CB*) se revisan por ejemplo en [25] y [26], muestran que la razón $\frac{\eta^b}{\eta^c}$ es pequeña ≈ 0.18 , el cual es un resultado razonable si la fricción tiene correlación con la sección transversal de las moléculas



Figura 4.3. Flujo de *Couette* de un nemático entre planos, con el vector director fijo por un campo externo intenso. Geometrías de Miesowicz: Definición de las tres viscosidades de Miesowicz en experimentos de corte.

vistas por el flujo.

Por otro lado al considerar flujos estacionarios e incompresibles de los parámetros que caracterizan al fluido, aparecen particularmente en las ecuaciones de la hidrodinámica (ecuación de Navier-Stokes 3.46) la viscosidad cinemática $\nu = \frac{\eta}{\rho}$, las funciones incognitas \mathbf{v} y el cociente p/ρ , donde p es la presión, y ρ su densidad. Por supuesto, el flujo depende a través de las condiciones límites, de la forma y dimenciones, si el flujo esta especificado por los parámetros ν , \mathbf{v} y l, esta última longitud caracteristicas del problema, es fácil notar que la única combinación de éstas que resulta adimencional es el número de Reynolds

$$\mathcal{R} = \frac{\rho v l}{\eta} = \frac{v l}{\nu},\tag{4.16}$$

de tal forma que cualquier otro parámetro adimencional puede ser escrito en términos de este número (*ley de semejanza* [12]). La ecuación 3.46 se simplifica en el caso de flujos con números de Reynolds pequeños, por ejemplo; para el caso de flujos estacionarios e incompresibles (ecuación 3.47) el término de $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}$ es del orden de magnitud de $\frac{\mathbf{v}^2}{l}$, analogamente el término $\frac{\eta}{\rho}\nabla^2\mathbf{v}$ tiene por orden de magnitud a $\frac{\eta v}{\rho l^2}$. El cociente de estas dos cantidades es precisamente el número de Reynolds.

4.3. Conservación de energía

La ecuación de balance de energía para fluidos nemáticos, se obtiene a partir de la ecuación para fluidos "isotrópicos", cuando agregamos los términos relacionados al orden de orientación del fluido, esto es:

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + u \right) + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(I\Omega^2 \right) = \rho g_i v_i + G_i n_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v_i \sigma_{ij} + n_i \tau_{ij} - J_j^q \right), \quad (4.17)$$

donde $\frac{1}{2}I\Omega^2$ es la densidad de energía rotacional. La densidad de energía interna u puede ahora contener contribuciones a la densidad de energía propia de la interacción del nemático con campos externos o propios, como lo es el campo de inducción magnética B, y se define $w_f = f_{FO} - \frac{1}{2}\mu_0^{-1}\chi_a(B\cdot\mathbf{n})^2$, donde $f_{FO} = F_{elast}$ es el término elástico debido a Frank-Onsager. El cual debido a su importancia se reescribe, aún cuando se discutirá en la sección [3.25]:

$$W_f = \frac{1}{2} \int_V \left[K_1 \left(\nabla \cdot \mathbf{n} \right)^2 + K_2 \left(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} \right)^2 + K_3 \left(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n} \right)^2 \right] dV, \qquad (4.18)$$

Como se observa, el lado derecho de la ecuación $w_f = f_{FO} - \mu_0^{-1} \frac{1}{2} \chi_a (B \cdot \mathbf{n})^2$, donde $\int_V w_f dV = W_f$, complementan las fuerzas de orientación (segundo término de la ecuación 4.18), así como uno de los términos del tensor director superficial. Finalmente, para un medio anisotrópico, el gradiente de temperatura puede causar flujo de calor en alguna dirección, diferente para la dirección del gradiente, $J_j^q = -\kappa_{js} \partial T / \partial x_s$, donde el coeficiente de conductividad térmica κ_{js} es un tensor de segundo orden. Para un nemático uniaxial, κ_{js} se tienen tan sólo dos componentes independientes κ_{\shortparallel} y κ_{\perp} , donde $\kappa_{js} = \kappa_{\shortparallel} \mathbf{n}_i \mathbf{n}_j + \kappa_{\perp} \delta_{js}^{\perp}$, donde $\delta_{js}^{\perp} = \delta_{js} - \mathbf{n}_j \mathbf{n}_s$, son los elementos transversales, éstos son los elementos de la delta de Kronecker transversal.

4.3.1. Dinámica disipativa

Al analizar los procesos disipativos de la ecuación de producción de entropía, tenemos que la función de disipación la escribimos como

$$2R = \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \left(\sigma_{jk} + p \delta_{jk} + \pi_{pk} \frac{\partial n_p}{\partial x_j} \right) + \Omega_{jk} \left(\sigma_{jk} + \phi_j n_k + \pi_{jp} \frac{\partial n_k}{\partial x_p} \right) + \frac{\partial \Omega_{jk}}{\partial x_p} \left(n_j \tau_{kp} - n_j \pi_{kp} \right), \quad (4.19)$$

que en presencia de un gradiente de temperatura, se añade el término $\left(\frac{-J_j^q}{T}\right)\frac{\partial T}{\partial x_j}$, cuya contribución se requiere en el lado derecho de la ecuación precedente, donde $J_j^q = -\kappa_{js}\frac{\partial T}{\partial x_s}$. Si analizamos procesos no disipativos, todos los términos entre corchetes son nulos, con ello garantizamos que R = 0 para cualquier $\frac{\partial v_j}{\partial x_k}$ y $\frac{\partial \Omega_{jk}}{\partial x_p}$, así:

$$\sigma_{jk}^{(r)} = -p\delta_{jk} - \pi_{pk}\frac{\partial n_p}{\partial x_j},\tag{4.20}$$

$$\varepsilon_{ijk}\sigma_{jk}^{(r)} = -\varepsilon_{ijk}\phi_j n_k - \varepsilon_{ijk}\pi_{jp}\frac{\partial n_k}{\partial x_p},\tag{4.21}$$

$$\varepsilon_{ijk} n_j \tau_{kp} = \varepsilon_{ijk} n_j \pi_{kp}, \qquad (4.22)$$

donde hemos hecho uso del tensor de Levi-Civita para acentuar que la información relevante son el segundo y tercer términos del tensor de esfuerzos en la ecuación de producción de entropía (ecuación 4.19), éstos se obtienen solamente a través de la parte antisimétrica de la expresión en los paréntesis; cuando Ω_{jk} es un tensor antisimétrico, cualquier parte simétrica que contenga el corchete se anula cuando se multiplica por Ω_{jk} . Así de la primer ecuación (4.20) que resulta al hacer nulos los términos en la ecuación de producción de entropía, con ello se define el tensor de esfuerzos de Ericksen (ecuación 4.20) como:

$$\sigma_{jk}^{(r)} = -p\delta_{jk} - \pi_{pk}\frac{\partial n_p}{\partial x_j},\tag{4.23}$$

constituido por las contribuciones del esfuerzo de un líquido en resposo y el esfuerzo debido a la distorsión del vector director (sin considerar las contribuciones diamagnéticas). El tensor de esfuerzo de Ericksen (4.20) es independiente de los efectos disipativos y usualmente más pequeño que el tensor de esfuerzos viscosos (ecuación 4.5), con ello podemos escribir la función de disipación (4.19) en la forma siguiente:

$$2R = A_{ij}\overline{\sigma}_{ij}^{(s)} + (\Omega_{ij} + W_{ij})\overline{\sigma}_{ij}^{(s)} = A_{ij}\overline{\sigma}_{ij}^{(s)} + \overline{\overline{\Omega}}_{ij}\overline{\sigma}_{ij}^{(a)}, \qquad (4.24)$$

donde se representa el gradiente de velocidades como $\partial v_i / \partial x_j \equiv A_{ij} + W_{ij}$ e introducimos el tensor de esfuerzos $\overline{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} - \overline{\sigma}_{ij}^{(r)} = \overline{\sigma}_{ij}^{(s)} + \overline{\sigma}_{ij}^{(a)}$, con una parte simétrica $\overline{\sigma}_{ji}^{(s)} = \overline{\sigma}_{ij}^{(s)}$, y una parte antisimétrica $\overline{\sigma}_{ij}^{(a)} = -\overline{\sigma}_{ji}^{(a)}$. Finalmente, se escribe $\Omega_{ij} + W_{ij} = \overline{\overline{\Omega}}_{ij}$.

4.4. Ecuaciones dinámicas

Se asume de ahora en adelante condiciones isotérmicas, de tal forma que se ignorará todo efecto térmico, en estas circunstancias, como en cualquier teoría basada en el continuo, se requiere conservación de masa, momento lineal y angular. La ley de balance del momento lineal, es básicamente similar a la de un fluido isotrópico, excepto que el tensor de esfuerzos resultante no necesariamente es simétrico. La ley de balance para el momento angular es adecuadamente aumentado al incluir explícitamente las fuerzas y momentos externos sobre el cuerpo, así como momentos sobre su superficie. De tal forma que se denota por \mathbf{K} al momento externo del cuerpo, y por l al momento superficial por unidad de área. Asimismo, se denota por $\frac{D}{Dt}$ a la derivada material, así puede escribirse las leyes de balance de masa, de momento lineal, y angular como:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V} \rho dV = 0, \qquad (4.25)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{V} \rho \mathbf{v} dV = \int_{V} \rho \mathbf{F} dV + \int_{\partial V} \mathbf{t} dS, \qquad (4.26)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{V} \rho(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) dV = \int_{V} \rho(\mathbf{r} \times \mathbf{F} + \mathbf{K}) dV + \int_{\partial V} (\mathbf{x} \times \mathbf{t} + \mathbf{l}) dS, \qquad (4.27)$$

aquí \mathbf{t} es la fuerza superficial por unidad de área. Y su realción con el tensor de esfuerzos y el momento de superficie están dados por:

$$t_i = \sigma_{ij}\nu_j, \qquad l_i = l_{ij}\nu_j \tag{4.28}$$

donde se considera a ν como la normal a la superficie de la frontera que encierra al volumen V, la primer ecuación de 4.28, puede reescribirse de una forma más convencional como

$$\int_{\partial V} t_i dS = \int_{\partial V} \sigma_{ij} \nu_j dS = \int_V \sigma_{ij,j} dV.$$
(4.29)

De tal forma que la ley de balance de momento angular se escribe como:

$$\int_{V} \epsilon_{ijk} x_j \left(\rho \dot{v}_k - \rho F_k - \sigma_{kp,p}\right) dV = \int_{V} \left(\rho K_i + \epsilon_{ijk} \sigma_{kj} + l_{ij,j}\right) dV, \tag{4.30}$$

la cual se reduce a:

$$\rho K_i + \epsilon_{ijk} \sigma_{kj} + l_{ij,j} = 0. \tag{4.31}$$

Se observa que en el caso de fluidos isotrópicos K y l son nulos, con ello; $\epsilon_{ijk}\sigma_{kj} = 0$, que nos dice que en fluidos isotrópicos el tensor de esfuerzos es simétrico. Siguiendo a Leslie [36], éste asume que la razón o cambio entre fuerzas y momentos en una porción de volumen del nemático será absorbida en cambios en de energía del nemático w_f , en la energía cinética, o será perdida por medio de disipación viscosa. La razón de trabajo postulada es tomada por:

$$\int_{V} \rho \left(\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{K} \cdot \omega \right) dV + \int_{\partial V} \left(\mathbf{t} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{l} \cdot \omega \right) dS =$$
$$= \frac{D}{Dt} \int_{V} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{w}_{\mathbf{f}} \right) dV + \int_{V} \mathcal{D}dV, \qquad (4.32)$$

donde ω es la velocidad angular del director **n** y \mathcal{D} es la razón de disipación viscosa por unidad de volumen, también llamada función de disipación. Se asume que \mathcal{D} es siempre positiva, que se demuestra en la ecuación 4.11, y puede ser reescrita como:

$$\int_{\partial V} (t_i v_i + l_i w_i) \, dS = \int_V (\sigma_{ij} v_{i,j} + l_{ij} w_{i,j} + v_i \sigma_{ij,j} + w_i l_{ij,j}) \, dV. \tag{4.33}$$

Aqui se puede hacer uso de la ecuación 4.28, con ello

$$\int_{\partial V} \left(t_i v_i + l_i w_i \right) dS = \int_V \left(\sigma_{ij} v_{i,j} + l_{ij} w_{i,j} + \rho \dot{v}_i v_i - \rho F_i v_i - \rho w_i K_i - w_i \epsilon_{ijk} \sigma_{kj} \right) dV,$$

$$\tag{4.34}$$

también en el caso especial de un material incompresible (donde necesariamente, $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$), y suponiendo que el elemento de volúmen que observamos sea invariante respecto a t, se reduce a la forma diferencial

$$\sigma_{ij}v_{i,j} + l_{ij}w_{i,j} - w_i\epsilon_{ijk}\sigma_{kj} = \dot{w}_f + \mathcal{D}, \qquad (4.35)$$

ahora, de la definición de derivada material

$$\dot{\overline{n}_{i,j}} = (\dot{n}_i)_{,j} - n_{i,k} v_{k,j}, \tag{4.36}$$

siempre que conmuten las derivadas parciales. Entonces, dado que $w_f = w_f(\mathbf{n}, \nabla \mathbf{n})$, la derivada material de w_f , se escribe

$$\dot{w}_{f} = \frac{\partial w_{f}}{\partial n_{p}} \dot{n}_{p} + \frac{\partial w_{f}}{\partial n_{p,k}} \frac{\dot{n}_{p,k}}{\partial n_{p,k}}$$
$$= \epsilon_{iqp} \left[\left(n_{q} \frac{\partial w_{f}}{\partial n_{p}} + n_{q,k} \frac{\partial w_{f}}{\partial n_{p,k}} \right) w_{i} + n_{q} \frac{\partial w_{f}}{\partial n_{p,k}} w_{i,k} \right] - \frac{\partial w_{f}}{\partial n_{p,k}} n_{p,q} v_{q,k}, \qquad (4.37)$$

reetiquetando los índices como es debido. Empleando la identidad de Ericksen 4.44, se puede concluir

$$\dot{w}_f = \epsilon_{ipq} \left(n_q \frac{\partial w_f}{\partial n_{p,j}} w_{i,j} - n_{k,q} \frac{\partial w_f}{\partial n_{k,p}} w_i \right) - \frac{\partial w_f}{\partial n_{p,j}} n_{p,i} v_{i,j}, \tag{4.38}$$

insertando este resultado en la ecuación 4.35 tenemos:

$$\left(\sigma_{ij} + \frac{\partial w_f}{\partial n_{p,j} n_{p,i}}\right) v_{i,j} + \left(l_{ij} - \epsilon_{iqp} n_q \frac{\partial w_f}{\partial n_{p,j} n_{p,i}}\right) w_{i,j} - w_i \epsilon_{iqp} \left(\sigma_{pq} - \frac{\partial w_f}{\partial n_{k,p} n_{k,q}}\right) = \mathcal{D}$$

$$(4.39)$$

como se ha mencionado \mathcal{D} debe ser necesariamente positiva. Dados los signos de $w_i, w_{i,j}$ y $v_{i,j}$ pueden ser arbitrariamente escogidos, si seguimos los coeficientes de cada término lineal para $w_i, w_{i,j}$ y $v_{i,j}$ con la ecuación 4.39, debe poder igualarse a cero para que \mathcal{D} se quede positivo. Esto nos lleva a la conclusión que el tensor de esfuerzos y su tensor asociado l_{ij} deben tomar las formas [36]

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} - \frac{\partial w_f}{\partial n_{p,j}} n_{p,i} + \widetilde{\sigma}_{ij}, \qquad (4.40)$$

$$l_{ij} = \epsilon_{ipq} n_p \frac{\partial w_f}{\partial n_{q,j}} + \tilde{l}_{i,j}, \qquad (4.41)$$

donde p es una presión arbitraria que surge de asumir la incompresibilidad del
nemático, y $\tilde{\sigma}_{i,j}$ y $\tilde{l}_{i,j}$ denotan contribuciones dinámicas posibles, en la terminología de Leslie, $\tilde{\sigma}_{ij}$ es llamada el *tensor de esfuerzos viscoso* [[37], p. 38], [[38], p. 36] si, por un momento, las contribuciones dinámicas supuestas son ignoradas en estas expresiones, entonces es fácil identificar que su introducción en el lado izquierdo de 4.39 nos refiere los términos a cero, observando que el primer término entre paréntesis se reduce a $-pv_{i,i}$, que es cero debido a la ecuación de continuidad, mientras el siguiente término entre paréntesis debe ser cero porque $\epsilon_{ijk}X_{kj} = 0$ para cualquier tensor de segundo orden simétrico X_{kj} . Con estas últimas ecuaciones la ecuación 4.39 se reduce a:

$$\widetilde{\sigma}_{ij}v_{i,j} + \widetilde{l}_{ij}w_{i,j} - w_i\epsilon_{ijk}\widetilde{\sigma}_{kj} = \mathcal{D} \ge 0$$
(4.42)

dado que \mathcal{D} es positiva. Esta desigualdad es de crucial importancia al discutir la teoría constitutiva e imponer restricciones sobre las formas de los términos dinámicos.

Desde una posición cualquiera, se tienen las relaciones constitutivas del momento angular y lineal, además de la ley de balance de momento angular (ecuación 3.45) puede escribirse la ecuación dinámica a partir de las ecuaciones 4.31, 4.41, 4.40 y la desigualdad de la ecuación 4.42, obteniendo:

$$\rho K_i + \varepsilon_{ijk} \left[\sigma_{jk} + \left(n_j \frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}} \right)_{,l} - n_{m,k} \frac{\partial w_F}{\partial n_{m,j}} \right] = 0, \qquad (4.43)$$

donde se debe reconocer que las variables naturales de $\tilde{\sigma}_{ij}$, así como de \tilde{l}_{ij} son n_i, w_i y $v_{i,j}$, al ser evaluadas en un punto y un instante. Como se ha asumido que \tilde{l}_{ij} no depende del gradiente de $w_{i,j}$ de la velocidad angular w del vector director, se sigue que $\tilde{l}_{ij} = 0$, porque $w_{i,j}$ puede ser de signo arbitrario y solamente entra en la desigualdad 4.42 linealmente con \tilde{l}_{ij} . usando la ecuación de balance del momento angular y la identidad de Ericksen 4.44, la cual se escribe como:

$$\epsilon_{ijk} \left(n_j \frac{\partial w}{\partial n_k} + n_{j,p} \frac{\partial w}{\partial n_{k,p}} + n_{p,j} \frac{\partial w}{\partial n_{p,k}} \right) = 0, \qquad (4.44)$$

Nótese que entre el tensor de esfuerzos y el de deformación se tiene la siguiente igualdad (ver apéndice A),

$$\epsilon_{ijk}\sigma_{jk} = \epsilon_{ijk}n_j\widetilde{g}_k \tag{4.45}$$

de esta forma la ecuación (4.43) puede ser arreglada y escrita como:

$$\rho K_i + \varepsilon_{ijk} n_j \left[\widetilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}} \right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} \right] = 0, \qquad (4.46)$$

donde \tilde{g} está definida en la ecuación 4.7. Además, si se supone que el momento externo del cuerpo por unidad de masa **K**, esta relacionada a la fuerza del cuerpo generalizada **G** por medio de la ecuación $\rho \mathbf{K} = \mathbf{n} \times \mathbf{G}$, esto es:

$$\rho K_i = \varepsilon_{ijk} n_j G_k, \tag{4.47}$$

así, la ecuación de balance de momento (ecuación 4.46) se escribe como:

$$\varepsilon_{ijk}n_j \left[G_k + \widetilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} \right] = 0.$$
(4.48)

De las ecuaciones de equilibrio, se puede reconocer que, de observar una posición se pueden comparar los coeficientes para el incremento arbitrario infinitesimal virtual Δn_i , por medio de $\Delta n_i = \delta n_i + n_{i,j} \delta x_j$, con δx_i un desplazamiento virtual en la coordenada *i*. Las variaciones en el director **n** no son del todo arbitrarias, sino que se hallan sujetas a las constricciones

$$(\delta x_i)_i = 0, \qquad n_i \delta n_i = 0, \qquad n_i \Delta n_i = 0. \tag{4.49}$$

La primer constricción es debida a que se asume la incompresibilidad del fluido. Las siguientes formas requieren la exigencia general de que las variaciones satisfagan

$$\delta \rho + \left(\rho \delta x_i\right)_i = 0. \tag{4.50}$$

Ésta refleja la propiedad de la conservación de masa, al aplicar variaciones sobre las variables (ver Apéndice A), por ejemplo usando el principio de D'alambert (el principio de trabajos virtuales). Con ello (más la identidad de Ericksen ecuación 4.44), el caso general de un fluido incompresible se obtiene las ecuaciones (4.46, 4.47)

$$\left(\frac{\partial w}{\partial n_{i,j}}\right)_{,j} - \frac{\partial w}{\partial n_i} + G_i + \widetilde{g}_k - \lambda n_i = 0, \qquad (4.51)$$

con ello se puede concluir que la forma final que adopta la ley de balance de momento angular, (ecuación 4.48) es:

$$G_k + \tilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} = \lambda n_k, \qquad (4.52)$$

con λ una función escalar arbitraria. Como se observa, ésta es efectivamente del tipo de las ecuaciones de Euler-Lagrange de la teoría estática con la adición del término dinámico \tilde{g}_k definido por; $g_k = -\gamma_1 N_i - \gamma_2 A_{ip} n_p$. Aunque, como se menciona anteriormente, puede no considerarse el término de director inercial en la derivación de la ecuación de Euler-Lagrange, pero vale la pena notar que esta ecuación 4.52, puede ser reescrita como:

$$G_k + \tilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} = \lambda n_k + \xi \ddot{n}_k \tag{4.53}$$

donde ξ es una constante inercial, medida en términos de $kg m^{-1}$, que es necesario debido a la consideración de una energía cinética rotacional de un elemento de material. Este término $\xi \ddot{n}_k$ es generalmente despreciado en la mayoría de las circunstancias, pero, es expresado por Leslie, éste puede ser concebido debido a que juega un papel relevante cuando la anisotropía del eje es sujeta a grandes aceleraciones, y por esta razón se establece en la ecuación (4.53), con ello se tiene la completez de la misma (ecuación 4.53). Realizando el producto escalar de la ecuación con $n_{k,i}$ resulta

$$G_k n_{k,i} + \widetilde{g}_k n_{k,i} + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} n_{k,i} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} n_{k,i} = 0, \qquad (4.54)$$

en donde se usó $n_{k,i}n_i = 0$. Introduciendo la relación constitutiva entre σ_{ij} y $\bar{\sigma}_{ij}$, en términos de $\bar{\sigma}_{ij}$ en la ecuación de balance de momento lineal (ecuación 3.45) y haciendo uso del resultado anterior (ecuación 4.54) obtenemos, con los índices adecuadamente reasignados, la siguiente expresión:

$$\rho \dot{v}_i = \rho F_i - p_{,i} - \frac{\partial w_F}{\partial n_i} n_{k,ji} - \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,j}}\right)_{,j} n_{k,i} + \bar{\sigma}_{ij,j}, \qquad (4.55)$$

$$\rho \dot{v}_i = \rho F_i - p_{,i} - \frac{\partial w_F}{\partial n_i} n_{k,ji} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} n_{k,i} + G_k n_{k,i} + \tilde{g}_k n_{k,i} + \bar{\sigma}_{ij,j}.$$
(4.56)

Como $w_F = w_F(n, \nabla n)$, la ecuación anterior se reduce a la forma general para la ecuación de balance del momento lineal (ecuación 3.45), que en términos de la notación para las derivadas parciales, resulta:

$$\rho \dot{v}_i = \rho F_i - (p + w_F)_{,i} + G_k n_{k,i} + \tilde{g}_k n_{k,i} + \bar{\sigma}_{ij,j}.$$
(4.57)

ahora bien, las ecuaciones dinámicas principales para nemáticos son las ecuaciones de la conservación de masa, la ley de balance de momento angular y la ley de balance de momento lineal. Las cuales, se hallan en el resumen hecho por Leslie [35], cuando los términos inerciales que involucran a **n** son ignorados, nótese que Leslie absorbe el término de ρ al introducirlo en la definición de **F**, como observa Ericksen [34], en circunstancias ordinarias los aspectos del campo gravitacional o de los campos electromagnéticos tienden a producir las fuerzas \mathbf{F} y \mathbf{G} . Por ejemplo, en el caso de un campo gravitacional externo en ausencia de campos electromagnéticos, se obtiene:

$$F_{i} = -\frac{\partial \Psi_{g}}{\partial x_{i}}, \qquad G_{i} = 0, \qquad \Psi_{g} = \Psi_{g}(x), \qquad (4.58)$$

donde Ψ_g es el potencial gravitacional.

Si se siguen las ecuaciones que incorporan a los potenciales asociados a las fuerzas \mathbf{F} y \mathbf{G} , se observa que en general se incorporan los efectos de los campos gravitacional y electromagnético al considerar

$$\rho F_i = \frac{\partial \Psi}{\partial x_i}, \qquad G_i = \frac{\partial \Psi}{\partial n_i}, \qquad \Psi = -\rho \Psi_g + \Psi_m,$$
(4.59)

donde ρ es constante, sin embargo, cuando $\Psi = \Psi(n, x)$, se puede ver que se emplea la definición sobre los campos y los potenciales

$$\rho F_i + G_j n_{j,i} = \frac{\partial \Psi}{\partial n_j} n_{j,i} + \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} = \Psi_{,i}, \qquad (4.60)$$

con ello la ecuación de balance de momento lineal se escribe como:

$$\rho \dot{v}_i = -\tilde{p}_{,i} + \bar{\sigma}_{ik,k} + \tilde{g}_k n_{k,i} \tag{4.61}$$

donde:

$$\widetilde{p} = p + w_F - \Psi, \tag{4.62}$$

con p la presión. Por completez del estado, como en el caso de ímpetu angular, esto es, cuando la contribución al vector director inercial es incorporado, entonces las dos formas de las ecuaciones que balancean al momento lineal (ecuación 3.45) son remplazadas por:

$$\rho \dot{v}_i + \xi \ddot{n}_j n_{j,i} = \rho F_i - (p + w_F)_{,i} + \widetilde{g}_j n_{j,i} + G_j n_{j,i} + \bar{\sigma}_{ij,j}, \qquad (4.63)$$

$$\rho \dot{v}_i + \xi \ddot{n}_j n_{j,i} = \widetilde{g}_j n_{j,i} - \widetilde{p}_{,i} + \bar{\sigma}_{ij,j} \tag{4.64}$$

donde se consideran los comentarios mencionados en la ecuación $G_k + \tilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} = \lambda n_k + \xi \ddot{n}_k$, que incluye términos de la segunda derivada del vector director.

Si ahora seguimos en el problema dinámico en nemáticos, la clave se requiere y que gobierna las ecuaciones en muchos problemas prácticos, son las constricciones, como aquella dada por la ecuación de conservación de la masa, las leyes de balance de momento lineal y angular, junto con las ecuaciones constitutivas que definen los parámetros γ_i a través de las relaciones de Parodi, el vector $\tilde{g}_i = -\gamma_1 N_i - \gamma_2 A_{ip} n_p$, y la forma explícita del vector de esfuerzos viscoso $\bar{\sigma}_{ij}$.

Es importante señalar que el número de incógnitas en la teoría dinámica debe ser y lo es, igual al número de ecuaciones disponibles. Las variables desconocidas son: la velocidad $\mathbf{v}(x,t)$, el vector director $\mathbf{n}(x,t)$, la presión p(x,t) y el multiplicador de Lagrange λ . Entonces el número total de cantidades desconocidas son claramente ocho: las tres necesarias de \mathbf{v} , tres de \mathbf{n} , una de p y una más de λ . Las constricciones como $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$ y la condición de incompresibilidad $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, proporciona dos ecuaciones, mientras la ecuación de balance de momento y la ecuación de balance de momento angular, proveen de tres ecuaciones. Entonces las ocho ecuaciones pueden ser satisfechas, y éstas igualan el número de variables desconocidas. Es bastante común, como un ejemplo simple, para el balance de ecuación de momento angular la reducción a dos ecuaciones, una vez que los multiplicadores de Lagrange han sido eliminados por \mathbf{n} , que es un vector unitario, el cual puede ser descrito por dos parámetros independientes.

Es necesario concluir esta sección con algunos comentarios sobre las condiciones de frontera. En un sólido con fronteras o interfase es común asumir que el cristal líquido nemático se adhiere a la superficie del sólido, y con ello la velocidad es sujeta a la usual condición sin deslizamiento; por ejemplo, en una interfase sólida en reposo se asume que $\mathbf{v} = 0$ en las fronteras. La condición frecuente de frontera para el director es a menudo la condición de anclaje fuerte, esto es el alineamiento del vector director a la superficie es intrínseca al fluido. Por supuesto, cualquier otra condición de frontera para el vector director es posible, pero en los problemas de la literatura se emplean condiciones fuertes de anclaje sobre el vector director en la frontera con el sólido como hipótesis, sin embargo, pueden estas condiciones de frontera relajarse a una viscosidad sobre la frontera del medio [39].

Resumen de las ecuaciones dinámicas de Ericksen-Leslie.

$$\overline{\sigma}_{ij} = \alpha_1 n_i n_j n_k n_l A_{kl} + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j +$$

$$+\alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_j n_p A_{pi} + \alpha_6 n_i n_p A_{pj}, \quad (4.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (W_f)_i = w_f = \frac{1}{2} \left[K_1 \left(\nabla \cdot \mathbf{n} \right)^2 + K_2 \left(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} \right)^2 + K_3 \left(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n} \right)^2 \right], \quad (4.66)$$

$$\rho \dot{\mathbf{v}}_i = \widetilde{g}_j n_{j,i} - \widetilde{p}_{,i} + \widetilde{\sigma}_{ij,j}, \quad (4.67)$$

$$\rho \mathbf{v}_i = g_j n_{j,i} - p_{,i} + \sigma_{ij,j}, \quad (4.67)$$
$$\widetilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} = \lambda n_k + \xi \ddot{n}_k. \quad (4.68)$$

$$\widetilde{g}_k = -\gamma_1 N_i - \gamma_2 A_{ip} n_p, \qquad (4.69)$$

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2, \qquad \gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5, \tag{4.70}$$

$$A_{ij} = A_{ji} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \qquad (4.71)$$

$$W_{ij} = -W_{ji} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \qquad (4.72)$$

$$N_j = n_j - W_{ij} n_j. (4.73)$$

CAPITULO 5 -

Flujo de un cristal líquido nemático en un canal

Ahora bien, para abordar el problema del presente trabajo, se cosiderar un *cristal líquido* nemático confinado entre dos semiplanos, éstos forman un ángulo que denominaremos α , que se medirá según la figura 5.1. Tómese de igual forma al eje z coincidente con la línea de intersección de las dos placas.



Figura 5.1. Forma gráfica del canal convergente y/o divergente.

que puede observarse en otra perspectiva de la siguiente gráfica.



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.



Figura 5.2. Perspectiva del canal convergente y/o divergente

Si se asume que se puede orientar el nemático como lo describe la ecuación 5.1, como en el caso isotrópico, tenemos un flujo que ocurre en el plano $\hat{e}_r - \hat{e}_{\phi}$, con \hat{e}_i el vector unitario de la *i*-esima coordenada, como habitualmente es el plano perpendicular a \hat{e}_z , con lo que las variables del fluido serán solamente funciones de r, es decir, podemos escribir al vector director de las particulas del nemático **n** por

$$\mathbf{n} = (\operatorname{sen}\theta(r), \cos\theta(r), 0), \qquad (5.1)$$

donde θ se halla definida por el ángulo subtendido por el vector r y el vector director de la molécula nemática **n**, figuras 5.1 y 5.2. De esta forma la energía libre elástica de Frank, (F_{elast}) , está dada por la ecuación (5.7). Ahora bien, para el caso del fluido ordinario, como se discutió en el capítulo anterior, las condiciones de frontera además de simétricas eran únicamente sobre el perfil de velocidades del fluido. para el caso de un cristal líquido nemático (figura 5.3) se deben cumplir además las siguientes



Figura 5.3. Cristal líquido nemático. El vector director del Nemático se halla indicado por $\hat{\mathbf{N}}$. Es definido por θ al ángulo suscrito por el eje de simetría de cada molécula individual $\hat{\mathbf{n}}$ y el vector diretor del cristal líquido nemático $\hat{\mathbf{N}}$, aun cuando éste puede ser local o no.

condiciones de frontera sobre el ángulo de orientación θ , dadas por

$$u(0) = 0, \qquad u(\pi/4) = 0, \qquad u''(0) = \beta,$$
 (5.2)

$$\theta(0) = 0, \qquad \theta(\pi/4) = 0.$$
 (5.3)

Cada una de las cuales tiene un significado físico. Las condiciones nulas para u en ambas fronteras significan que el fluido se amolda sobre la frontera, sin resbalar. El valor de β nos permitirá escoger posteriormente un valor para el gasto de fluido que cruza el canal. Por otro lado las condiciones nulas para θ establecen condiciones de fronteras de anclaje fuerte planar para las dos fronteras. Es decir **n** será paralelo a ambas fronteras para cualquier intensidad de flujo.

5.1. Modelo

Haciendo uso del sistema de coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) , con el eje z a lo largo de la línea de intersección entre los planos, el ángulo α es como lo muestra la figura 5.1. Debido a que el flujo es uniforme en la dirección z, y si se asume que naturalmente el flujo es enteramente radial, es decir:

$$v_{\phi} = v_z = 0, \tag{5.4}$$

$$v_r = v(r,\phi). \tag{5.5}$$

Consistentemente se considera que **n** se halla en el plano $\hat{e}_r - \hat{e}_{\phi}$, plano normal a \hat{e}_z , donde θ se mide a partir del vector unitario \hat{e}_r , como lo ilustra la figura 5.1, con lo cual se escribe:

$$\mathbf{n} = (\cos\theta(\phi), \sin\theta(\phi), 0). \tag{5.6}$$

Sustituyendo esta \mathbf{n} en la ecuación 4.18 se obtiene la forma explícita de la densidad de energía elástica:

$$F_{elast} = \frac{1}{4r^2} (K_1 + K_3 + (K_1 - K_3)\cos 2\theta(\phi))(1 + \theta'(\phi))^2.$$
 (5.7)

En este punto, es conveniente un resumen de las ecuaciones dinámicas de Ericksen-Leslie para nemáticos en el marco de la teoría isotérmica incompresible, donde los términos inerciales del vector director son despreciados debido a que se considerarán flujos lentos. Recuérdese que en nuestro problema no se considerán campos eléctricos por lo que los términos $\rho F_i = D_k E_{k,i}$, $G_i = \epsilon_0 \epsilon_a n_k E_k E_i$, son claramente nulos. Definiendo $\tilde{p} = p + w_f$ las ecuaciones 4.53 y 4.63 toman la forma:

$$\widetilde{g}_k + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} = \lambda n_k + \xi \ddot{n}_k.$$
(5.8)

$$\rho \dot{v}_i + \xi \ddot{n}_j n_{j,i} = -\widetilde{p}_{,i} + \widetilde{g}_j n_{j,i} + \bar{\sigma}_{ij,j}, \qquad (5.9)$$

En la ecuación 4.65 se definió el tensor de esfuerzos viscoso como

$$\overline{\sigma}_{ij} = \alpha_1 n_i n_j n_k n_l A_{kl} + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_j n_p A_{pi} + \alpha_6 n_i n_p A_{pj}.$$
(5.10)

Sustituyendo las ecuaciones 5.4 y 5.5, en la ecuación 4.71 se obtiene la expresión explícita para \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v(r,\phi)}{\partial r} & \frac{1}{2r} \frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi} & 0\\ \frac{1}{2r} \frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi} & \frac{v(r,\phi)}{r} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (5.11)

A partir de **n** definido en la ecuación 5.6, se calcula el vector **N** dado por la ecuación 4.73), esto es:

$$\mathbf{N} = \mathbf{n}_{\perp} - \frac{1}{2r} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi} & 0\\ -\frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n},$$
(5.12)

en donde:

$$\frac{d\mathbf{n}}{d\phi} = (-\mathrm{sen}\theta(\phi), \cos\theta(\phi), 0)\theta', \qquad (5.13)$$

$$\mathbf{n}_{\perp} = (-\mathrm{sen}\theta(\phi), \cos\theta(\phi), 0). \tag{5.14}$$

Calculando la divergencia del tensor de esfuerzos, dado por la ecuación 5.10 σ con componentes cilíndricas (véase apéndice) σ_{ij} se encuentran las siguentes expresiones para sus componentes

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot \sigma]_1 &= -\frac{v(r,\phi)}{2r^2} \left(2(\alpha_4 + (\alpha_5 + \alpha_6) \mathrm{sen}^2\theta + \alpha_1 \mathrm{sen}^4\theta) + \\ \theta'(\phi)((2\alpha_6 - \alpha_1) \mathrm{cos} 2\theta + \alpha_1 \mathrm{cos} 4\theta) \right) \\ &- \frac{\mathrm{sen} 2\theta}{4r^2} \frac{dv(r,\phi)}{d\phi} \left[(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_5 - \alpha_6) + \\ 2 \theta'(\phi)(\alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_5 + \alpha_6 - 2\alpha_1 \mathrm{cos} 2\theta) \right] \\ &+ \frac{1}{2r^2} \frac{d^2v(r,\phi)}{d\phi^2} \left[\alpha_4 + (\alpha_3 + \alpha_6) \mathrm{cos}^2\theta + \\ (\alpha_5 - \alpha_2) \mathrm{sen}^2\theta + \frac{\alpha_1}{2} \mathrm{sen}^2 2\theta \right] \\ &+ \frac{1}{r} \frac{dv(r,\phi)}{dr} \left[\alpha_4 + (\alpha_5 + \alpha_6) \mathrm{cos}^2\theta + \alpha_1 \mathrm{cos}^4\theta \right. \\ &+ \theta'(\phi) \left(\frac{\alpha_1 + 2\alpha_5}{2} \mathrm{cos} 2\theta + \frac{\alpha_1}{2} \mathrm{cos} 4\theta \right) \right] \\ &= \frac{1}{4r} \frac{d^2v(r,\phi)}{d\phi dr} \mathrm{sen} 2\theta \left[2\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + 3\alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_1 \mathrm{cos} 2\theta \right] \\ &+ \frac{d^2v(r,\phi)}{dr^2} \left[\alpha_4 + (\alpha_5 + \alpha_6) \mathrm{cos}^2\theta + \alpha_1 \mathrm{cos}^4\theta \right], \end{aligned}$$
(5.15)

$$\begin{split} [\nabla \cdot \sigma]_2 &= -\frac{\mathrm{sen}2\theta}{4r^2} v(r,\phi) \left[-\alpha_1 - 2\alpha_6 + \alpha_1 \mathrm{cos}2\theta + \\ &\quad 4(-\alpha_1 - \alpha_5 - \alpha_6 + \alpha_1 \mathrm{cos}2\theta)\theta'(\phi) \right] \\ &\quad + \frac{1}{4r^2} \frac{dv(r,\phi)}{d\phi} \left[2\alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 + 6\alpha_4 + 3\alpha_5 + 3\alpha_6 + \\ &\quad (\alpha_2 + \alpha_3 - 2\alpha_1 - 3\alpha_5 - \alpha_6)\mathrm{cos}2\theta \\ &\quad + 2\theta'(\phi) \left\{ (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6)\mathrm{cos}2\theta - \alpha_1\mathrm{cos}4\theta \right\} \right] \\ &\quad + \frac{\mathrm{sen}2\theta}{4r^2} \frac{d^2v(r,\phi)}{d\phi^2} \left[\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - \alpha_1\mathrm{cos}2\theta \right] \\ &\quad + \frac{\mathrm{sen}2\theta}{4r} \frac{dv(r,\phi)}{dr} \left[3\alpha_1 + 4\alpha_5 + 2\alpha_6 + \alpha_1\mathrm{cos}2\theta + 4\alpha_1\theta'(\phi)\mathrm{cos}2\theta \right] \end{split}$$

$$+\frac{1}{4r}\frac{d^2v(r,\phi)}{d\phi dr}\left[\alpha_1+\alpha_2-\alpha_3+2\alpha_4+\alpha_5+\alpha_6+\frac{1}{4r^2}(\alpha_2+\alpha_3+\alpha_5-\alpha_6)\cos 2\theta-\alpha_1\cos 4\theta\right]\\+\frac{d^2v(r,\phi)}{dr^2}\frac{\sin 2\theta}{4}\left[\alpha_1+2\alpha_6+\alpha_1\cos 2\theta\right],$$

$$\left[\nabla \cdot \sigma\right]_3 = 0. \tag{5.16}$$

Al mantener presente que se tiene dependencia del argumento de las componentes del vector director, como función de ϕ , esto es $\theta(\phi)$, salvo la coordenada z, sobre la cual tenemos un flujo estacionario, de haber sus variaciones son nulas y con ello puede despreciarse tal variable, así:

$$\nabla \mathbf{n} = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{-\operatorname{sen}(\theta(\phi)) - \operatorname{sen}(\theta(\phi))\theta'(\phi)}{r} & 0\\ 0 & \frac{\operatorname{COS}(\theta(\phi)) + \operatorname{COS}\theta(\phi))\theta'(\phi)}{r} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(5.17)

usando la expresión del gradiente en coordenadas cilíndricas, nótese la ausencia del término $\frac{n_i}{r}$.

Al ser esto una forma constructiva sobre el abordaje del problema, lo siguiente es la definición del tensor de esfuerzos en términos de los coeficientes α_i , conocidos como los coeficientes de viscosidad de Leslie o simplemente coeficientes de Leslie, escribiendo la parte antisimétrica del tensor de esfuerzos viscoso en términos de los vectores antes definidos, es decir, es necesario reescribir la ecuación (5.7). Asimismo, se definen los coeficientes γ_1 y γ_2 , en términos de los coeficientes de Leslie según la relación de Parodi

$$\widetilde{\mathbf{g}} = -\gamma_1 \mathbf{N} - \gamma_2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{n}_\perp, \tag{5.18}$$

$$\widetilde{\mathbf{g}}(r,\phi) = \left\{ -\gamma_1 \left(-\theta'(\phi) \operatorname{sen}\theta(\phi) - \frac{\operatorname{sen}\theta(\phi)}{2r} \frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi} \right) \right\}$$

M. J. M. G.

$$-\gamma_{2}\left(\frac{\operatorname{sen}\theta(\phi)}{2r}\frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi} + \cos\theta(\phi)\frac{\partial v(r,\phi)}{\partial r}\right),\-\gamma_{1}\left(-\theta'(\phi)\cos\theta(\phi) - \frac{\cos\theta(\phi)}{2r}\frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi}\right)\-\gamma_{2}\left(\frac{\operatorname{sen}\theta(\phi)}{r}v(r,\phi) + \frac{\cos\theta(\phi)}{2r}\frac{\partial v(r,\phi)}{\partial \phi}\right),0\right\}.$$
 (5.19)

Es de notarse que en la ecuación 5.8 se tiene la derivada variacional de la función de la energía libre de Frank con lo que es menester calcularla. Por otra parte recordemos que la energía libre de Franck es función de $\theta(\phi)$ y de ϕ , esto es una funcional, con lo que su derivación se vuelca a una derivada variacional, la cual será definida más adelante¹, de tal forma que:

$$\delta W_f = -\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta \theta} (r \quad w_f(\theta, \phi)), \qquad (5.20)$$

se sobre entiende

$$\frac{\delta w_f}{\delta \theta} = \frac{d}{d\phi} \left(\frac{\partial w_f}{\partial \theta'(\phi)} \right) - \frac{\partial w_f}{\partial \theta},\tag{5.21}$$

donde δW_f es la variación de la función por unidad de volúmen, de la energía libre de Frank con ello:

$$\delta W_f = -\frac{1}{2r^2} \left[(-K_1 + K_3) \mathrm{sen} 2\theta(\phi) + (K_1 - K_3)\theta'(\phi)^2 \mathrm{sen} 2\theta(\phi) + (K_1 + K_3 + (K_1 - K_3))\theta''(\phi) \mathrm{cos} 2\theta(\phi) \right],$$
(5.22)

donde $\delta w_f/\delta \theta$ es la derivada variacional y se han utilizado la definición anterior de la función energía libre de Franck ecuaciones (4.18 y 5.18), es decir:

¹Mientras tanto, se sigue la notación del libro [21], donde: sí J es un funcional diferenciable entonces $DJ = D_h J$ se entiende como la derivada variacional, comúnmente conocida con el nombre de derivada de Gâteaux.

$$\frac{\delta w_f}{\delta \theta} = \frac{1}{2r^2} \left[(-K_1 + K_3) \mathrm{sen} 2\theta(\phi) + (K_1 - K_3) \mathrm{sen} 2\theta(\phi) \theta'(\phi)^2 - (K_1 + K_3 + (K_1 - K_3) \mathrm{cos} 2\theta(\phi) \theta''(\phi)) \right].$$
(5.23)

Asimismo, usando los términos ya definidos en las ecuaciones (A.19 y 5.18), podemos escribir:

$$\rho \dot{\mathbf{v}}_i = \widetilde{g}_j n_{j,i} - \widetilde{p}_{,i} + \widetilde{\sigma}_{ij,j}, \qquad (5.24)$$

en esta última, sustituimos las ecuaciones (5.23, 5.19 y 5.17), así como la definición de \tilde{p} , ahora de la ecuación del vector director eliminamos el término con el multiplicador de Lagrange, para ello, se proyecta sobre la parte perpendicular de **n**, esto es:

$$\widetilde{g}_k n_{\perp k} + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} n_{\perp k} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} n_{\perp k} = \lambda n_k n_{\perp k} + \xi \ddot{n}_k n_{\perp k}, \qquad (5.25)$$

el término $\sigma \ddot{n}_k$ es generalmente despreciado, el cual puede ser relevante cuando la anisotropía del eje se halla sujeta a grandes aceleraciones, por esta razón se establece en la ecuación (4.53), resultando simplemente:

$$\widetilde{g}_k n_{k,i} + \left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{k,l}}\right)_{,l} n_{k,i} - \frac{\partial w_F}{\partial n_k} n_{k,i} = 0, \qquad (5.26)$$

que no es más que:

$$\widetilde{g}_k n_{k,i} + \frac{\delta w_F}{\delta \phi} = 0. \tag{5.27}$$

De esta última podemos resolver para $\theta''(\phi)$ de ello obtenemos:

$$\theta''(\phi) = \frac{-2K_1\rho \operatorname{sen} 2\theta(\phi) + 2K_3\rho \operatorname{sen} 2\theta(\phi) + 2\alpha_4\gamma_2 \operatorname{sen} 2\theta(\phi)u(\phi)}{2\rho(K_1 + K_3 + K_1 \cos 2\theta(\phi) - K_3 \cos 2\theta(\phi))}$$

$$+\frac{\alpha_{4}\gamma_{1}u'(\phi) + \alpha_{4}\gamma_{2}\cos 2\theta(\phi)u'(\phi) + 2K_{1}\rho\sin 2\theta(\phi)\theta'(\phi)^{2}}{2\rho(K_{1} + K_{3} + K_{1}\cos 2\theta(\phi) - K_{3}\cos 2\theta(\phi))} - \frac{K_{3}\sin 2\theta(\phi)\theta'(\phi)^{2}}{2\rho(K_{1} + K_{3} + K_{1}\cos 2\theta(\phi) - K_{3}\cos 2\theta(\phi))}.$$
(5.28)

donde se ha asumido la dependencia de θ , *i.e.* $\theta(\phi) = \theta$, de aquí en adelante se asumirá la dependencia de ϕ para u, y θ , así como para sus derivadas. Por otro lado de la ecuación (5.24) podemos despejar $\frac{\partial p}{\partial \phi}$ que integrando podemos encontrar:

$$\frac{\partial p(r,\phi)}{\partial r} = C(\phi) + \int_{-1}^{\phi} \frac{1}{16r^{2}\rho} \alpha_{4}(-8u(\zeta)\operatorname{sen}2\theta(d)(-\alpha_{5}+\alpha_{6}-\gamma_{2} + (-\alpha_{1}+\alpha_{5}+\alpha_{6}-\gamma_{2}-2\alpha_{1}\operatorname{cos}2\theta(\zeta))\theta'(\zeta) + 2u'(\zeta)(\alpha_{1}+2\alpha_{6}+2\alpha_{3}+4\alpha_{4}+2\alpha_{5}+2\alpha_{6}-2\gamma_{1} - 2(\alpha_{1}+2\alpha_{5}+\gamma_{2})\operatorname{cos}2\theta(\zeta) + + \alpha_{1}\operatorname{cos}4\theta(\zeta) - 2(\gamma_{1}-(\alpha_{1}+\alpha_{2}+\alpha_{3}+\alpha_{5}+\alpha_{6}-\gamma_{2}) * \operatorname{*cos}2\theta(\zeta) + \alpha_{1}\operatorname{cos}4\theta(\zeta)\theta'(\zeta))) - 2(-\alpha_{1}-\alpha_{2}-\alpha_{3}-\alpha_{5}-\alpha_{6}+\alpha_{1}\operatorname{cos}2\theta(\zeta))) * \operatorname{*sen}2\theta(\zeta))u''(\zeta)d\zeta,$$

donde $C(\phi)$ es función de ϕ debido a la ecuación 5.24, nótese además que, esta última es una ecuación donde aún no se ha hecho uso de la relación de Parodi, de tal forma que introduciendola en la ecuación angular y simplificando obtenemos una ecuación que podemos finalmente resolver para w, que definimos enseguida de lo cual resulta:

$$\mathbf{0} = 4\alpha_2 w'' \operatorname{sen} 2\theta + 4\alpha_3 w'' \operatorname{sen} 2\theta - 4\alpha_5 w'' \operatorname{sen} 2\theta + 4\alpha_6 w'' \operatorname{sen} 2\theta - 4\alpha_1 w'' \operatorname{sen} 4\theta - 8\alpha_2 \theta' w'' \operatorname{sen} 2\theta - 8\alpha_3 \theta' w'' \operatorname{sen} 2\theta + 8\alpha_5 \theta' w'' \operatorname{sen} 2\theta$$

$$-8\alpha_{6}\theta'w'' \operatorname{sen} 2\theta + 8\alpha_{1}\theta'w' \operatorname{sen} 4\theta \\ +8w \left\{-2\alpha_{5} \operatorname{sen} 2\theta + 2\alpha_{6} \operatorname{sen} 2\theta - 2\gamma_{2} \operatorname{sen} 2\theta \right. \\ -\frac{K_{1}\alpha_{4}\rho}{2(\alpha_{1} + \alpha_{5} - \alpha_{6})(\gamma_{1} + \gamma_{2})}w' - 2(\gamma_{2} + 2\alpha_{1} \cos 2\theta)\theta' \operatorname{sen} 2\theta \\ +2(\alpha_{5} - \alpha_{6} + 4\alpha_{1} \cos 2\theta)\theta'^{2} \operatorname{sen} 2\theta \\ -\alpha_{5}\theta'' \cos 2\theta + \alpha_{6}\theta'' \cos 2\theta - \alpha_{1}\theta'' \cos 4\theta \right\} \\ +4w' \left\{\alpha_{1} - 2\alpha_{2} + 2\alpha_{3} + 4\alpha_{4} + 2\alpha_{5} + 2\alpha_{6} - 2\gamma_{1} \\ -2\alpha_{5} \cos 2\theta + 2\alpha_{6} \cos 2\theta - 2\gamma_{2} \cos 2\theta + \alpha_{1} \cos 4\theta \\ -2(\gamma_{1} - (\alpha_{2} + \alpha_{3} - 2\alpha_{5} + 2\alpha_{6} - \gamma_{2}) \cos 2\theta + 3\alpha_{1} \cos 4\theta)\theta'^{2} \\ -((\alpha_{2} + \alpha_{3} - \alpha_{5} + \alpha_{6}) \cos 2\theta - 2\alpha_{1} \cos 4\theta)\theta'^{2} \\ -(\alpha_{2} + \alpha_{3} - \alpha_{5} + \alpha_{6} - 2\alpha_{1}\theta'' \cos 2\theta)\operatorname{sen} 2\theta \right\} \\ +(\alpha_{1} - 2\alpha_{2} + 2\alpha_{3} + 4\alpha_{4} + 2\alpha_{5} + 2\alpha_{6} \\ +2(\alpha_{2} + \alpha_{3} - \alpha_{5} + \alpha_{6}) \cos 2\theta - \alpha_{1} \cos 4\theta)w^{(3)}, \qquad (5.29)$$

donde se introdujo la siguiente variable adimensional, que en términos de u, se escribe $u(\phi) = w(\phi) \frac{K_1 \rho}{2(-\alpha_1 - \alpha_5 + \alpha_6)(\gamma_1 + \gamma_2)}$, recuérdese este cociente², recuérdese también que $v(r, \phi) = \frac{u(\phi)}{r}$. Asimismo:

$$0 = -\frac{\alpha_4}{4(\alpha_1 + \alpha_5 - \alpha_6)(\gamma_1 + \gamma_2)} \{2\gamma_2 (\operatorname{sen} 2\theta) w + (\gamma_1 + \gamma_2 \cos 2\theta) w'\} + (1 - \eta) \operatorname{sen} 2\theta + (-1 + \eta) (\operatorname{sen} 2\theta) \theta'^2 + \{1 + \eta - (-1 + \eta) \cos 2\theta\} \theta''.$$
(5.30)

Estas ecuaciones acopladas describen el perfil de velocidades u, que denominaremos perfil y el ángulo de oirentación θ al cual se denominará textura a partir de ahora, de un cristal líquido nemático, a través de un canal convergente limitado por dos

 $^{^2 \}mathrm{Este}$ factor tiene suma importancia al ser el parámetro que juega el papel del número de Reynolds para el problema, que caracteriza los regímenes del flujo para fluidos viscosos, que se encuentra en la ecuación 3.60, el cual nos permite entender el régimen en que ambos fluidos se desarrollan cuando presentan los perfiles y texturas calculados.

paredes sólidas formando un ángulo 2α . Cabe mencionar que en el punto en el cual ambas fronteras concurrentes, puede hallarse una fuente o sumidero de fluido, es decir tendremos flujos convergentes o divergentes según sea el caso.

5.2. Solución numérica

Se resuelve utilizando el método de continuación paramétrica discutido en el capítulo 5.1, para encontrar la solución numérica a la ecuación diferencial ordinaria de tercer orden [28], ecuación 5.31, en términos de los nuevos parámetros que definiremos por α y γ , los cuales se hallan en función del parámetro β , más adelante daremos una breve recensión sobre estos. Lo anterior, lo podemos hallar en la sección 3.4.2 de manera más detallada. Una vez resuelto el caso isotrópico, se aborda el caso del fluido nemático, el cual se halla regido por las ecuaciones 5.29, que se reescribe en términos de la variable adimensional w, como:

$$0 = 8w \{2(\alpha_{5} - \alpha_{6})\theta'\cos 2\theta(1 + \theta') + 2\alpha_{1}\theta'\sin 4\theta(2\theta' - 1) \\ (\alpha_{6} - \alpha_{5})\theta''\cos 2\theta - \alpha_{1}\theta''\cos 4\theta\} + \\ 8ww' \frac{K1\alpha_{4}\rho}{2(\alpha_{1} + \alpha_{5} - \alpha_{6})(\gamma_{1} + \gamma_{2})} \\ + 4w' \{\alpha_{1} + 2(2\alpha_{4} + \alpha_{5} + \alpha_{6}) + \alpha_{1}\cos 4\theta \\ -2\eta_{0}\cos 2\theta(-1 + \theta')\theta' \\ + 2(\alpha_{2} - \alpha_{3})\theta' + 2\alpha_{1}\cos 4\theta\theta'(-3 + 2\theta') \\ -\eta_{0}\sin 2\theta\theta'' + \alpha_{1}\sin 4\theta\theta''\} \\ -4w'' \{\sin 2\theta (-1 + 2\theta')(\eta_{0} - 2\alpha_{1}\cos 2\theta)\} \\ + w^{(3)} \{\alpha_{1} + 4\alpha_{4} - 4\alpha_{2} + 4\alpha_{5} \\ + 2\eta_{0}(1 + \cos 2\theta) - \alpha_{1}\cos 4\theta\},$$
(5.31)

M. J. M. G.

donde hemos definido el coeficiente η por

$$\eta_0 = \alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_5 + \alpha_6 \tag{5.32}$$

se ha escalado la velocidad por el factor $\frac{K_1\rho}{2(-\alpha_1-\alpha_5+\alpha_6)(\gamma_1+\gamma_2)}$, mas la ecuación para $\theta(\phi)$ o textura

$$-\frac{\alpha_4 \left(2w\gamma_2 \operatorname{sen} 2\theta + (\gamma_1 + \gamma_2 \cos 2\theta)w'\right)}{8(\alpha_1 + \alpha_5 - \alpha_6)(\gamma_1 + \gamma_2)}$$
$$+\frac{1}{2} \left((1 - \eta)\operatorname{sen} 2\theta + (-1 + \eta)\theta'^2 \operatorname{sen} 2\theta + (1 + \eta - (-1 + \eta)\cos 2\theta)\theta''\right) = 0, \tag{5.33}$$

se resuelvió el sistema de ecuaciones 5.31 y 5.33 para una fase nemática específica llamada 5CB, debido a que dicho sistema depende de los valores de las viscosidades específicas. Así, si se toma el material Nemático 5CB a 25 grados centigrados [24], como se muestran en el sigiente cuadro:

Coeficientes de Viscodidad y Elasticidad		
$\alpha_1 = -0,0060 \text{ Pa} s^{-1}$	$\alpha_2 = -0,0812$ Pa s^{-1}	$\alpha_3=-0,0036$ Pa s^{-1}
$\alpha_4 = 0,0652 \text{ Pa } s^{-1}$	$\alpha_5=0,0640$ Pa s^{-1}	$\alpha_6=-0,0208$ Pa s^{-1}
$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$	$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5$	$\eta = \frac{K_1}{K_3}$
$K_1 = 6.2 * 10^{-12} N$	$K_3 = 8,2 * 10^{-12} N$	$ ho = 1020 \ Kg \ m^{-3}$

Bajo las condiciones:

$$w'(0) = \alpha \quad w''(0) = \beta \quad \theta'(0) = \gamma,$$
 (5.34)

tales que las condiciones de frontera:

$$w(0) = \theta(0) = 0, \tag{5.35}$$

$$w(\pi/4) = \theta(\pi/4) = 0, \tag{5.36}$$

son satisfechas. Estas ecuaciones 5.31 y 5.33, son simétricas bajo la reflexión o transformación $\phi \to (\pi/4 - \phi), \ \theta \to \theta$ y $w'(\pi/4 - \phi)_{\phi \to 0} = w'(\pi/4), \ \theta'(\pi/4 - \phi)_{\phi \to 0} = \theta'(\pi/4)$ etc. bajo las condiciones $\theta(\pi/4) = w(\pi/4) = 0, \ \theta(0) = w(0) = 0.$

Así, las ecuaciones acopladas 5.31 y 5.33, de acuerdo con los coeficientes de viscosidad de Leslie y densidad del compuesto 5*CB*, mostrados en el cuadro anterior, conjuntan el sistema a resolver numéricamente, bajo las condiciones de frontera 5.34. Debido a que es interés del presente trabajo analizar el comportamiento del campo de velocidades *u* para varias intensidades de flujo será necesario repetir el procedimiento para varios valores de β y γ . Una forma sistemática de obtener todas estas soluciones parametrizadas por β y γ se logra utilizando el método de *continuación paramétrica* en el cual se considera un pequeño cambio en el primer valor de β_0, γ_0 para el cual se resolvió el problema de condiciones iniciales, es decir $\beta_0 + \Delta\beta$ [29]. Consecuentemente el valor de α_0 no satisface el problema de condiciones de frontera para el nuevo valor de β . Sin embargo, el nuevo valor de α debe de estar cerca de α_0 en la medida que $\Delta\beta$ sea pequeño. De esta manera, basta con buscarlo en la vecindad de α_0 para obtener $\alpha_0 + \Delta\alpha$. Repitiendo este procedimiento se conseguirá graficar paramétricamente el o los valores de α en función de β . - CAPITULO 6

Resultados

6.1. Las ecuaciones

Es de notar que la ecuación diferencial 5.31 se reduce a la expresión 3.62, que se encuentra en la sección 3.4.2, no es más que la ecuación para el fluido isotrópico, *i.e.*. La ecuación 3.58, se reduce a la ecuación para el fluido isotrópico, si se considera el caso límite de los parámetros con los valores de un fluido isotrópico. Esto es, considerando que los coeficientes de viscosidad de Leslie (ecuación 4.5, sección 4.2), sean nulos, salvo el término α_4 , ya que el término A_{ij} del tensor de esfuerzos del cual depende, debe ser no nulo. Bajo estas circuntancias la ecuación 5.33 es nula, debido a que tenemos $\theta = \theta' = \theta'' = 0$, en tanto la ecuación 5.31 se reduce a:

$$\left(4 - 2\frac{K_1}{(\alpha_1 + \alpha_5 - \alpha_6)(\gamma_1 + \gamma_2)}w\right)w' + w^3 = 0,$$
(6.1)

con $\alpha_4 \neq 0$, donde el cociente: $\frac{K_1}{(\alpha_1 + \alpha_5 - \alpha_6)(\gamma_1 + \gamma_2)}$ tiene limite real $< \infty$, adimencional por construcción. Con ello se muestra la consistencia de las ecuaciones planteadas con el sistema soluble isotrópico, ya que dichas ecuaciones (6.1 y 3.58), son de la misma familia y con ello sus soluciones. Nótese el cociente de parámetros que acompaña a w, y recuérdese la ecuación 3.60, se observa que este parámetro, juega el papel del parámetro ν , de la ecuación 3.62 para el fluido isotrópico, con lo que puede asegurarse, que este parámetro hace el rol del número de Reynolds, que nos describe los regímenes de como se presentan dichos flujos. Así las ecuaciones acopladas que

M. J. M. G.



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. describen finalmente al sistema son:

$$0 = 8wH_0(\theta) + 8ww'H_{0,1}(\theta) + 4w'H_1(\theta) - 4w''H_2(\theta) + w^{(3)}H_3(\theta)$$
 (6.2)

definiendo los coeficientes

$$H_0(\theta) = 2(\alpha_5 - \alpha_6)\theta' \cos 2\theta (1 + \theta') + 2\alpha_1 \theta' \sin 4\theta (2\theta' - 1)$$

(\alpha_6 - \alpha_5)\theta'' \cos 2\theta - \alpha_1 \theta'' \cos 4\theta (6.3)

$$H_{0,1}(\theta) = \frac{K_1 \alpha_4 \rho}{2 (\alpha_1 + \alpha_5 - \alpha_6) (\gamma_1 + \gamma_2)}$$
(6.4)

$$H_1(\theta) = \alpha_1 + 2(2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6) + \alpha_1 \cos\theta$$

$$-2\eta_0 \cos 2\theta (-1+\theta')\theta' +2(\alpha_2 - \alpha_3)\theta' + 2\alpha_1 \cos(4\theta)\theta'(-3+2\theta') -\eta_0 \sin(2\theta)\theta'' + \alpha_1 \sin(4\theta)\theta''$$
(6.5)

$$H_2(\theta) = \operatorname{sen} 2\theta \left(-1 + 2\theta'\right) \left(\eta_0 - 2\alpha_1 \cos 2\theta\right)$$
(6.6)

$$H_3(\theta) = \alpha_1 - 4\alpha_2 + 4\alpha_4 + 4\alpha_5 + 2\eta_0 + 2\eta_0 \cos 2\theta - \alpha_1 \cos 4\theta$$
(6.7)

donde se han reunido los factores de $w(\phi)$ así como los que cuentan con su derivada, mostrando un sistema de tercer orden en $w(\phi)$, que coligado al segundo orden en $\theta(\phi)$ nos proporciona un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de quinto orden a resolver, más la ecuación para θ

$$-\alpha_4 \frac{2\gamma_2 \operatorname{sen} 2\theta + (\gamma_1 + \gamma_2 \cos 2\theta)w'}{4(\alpha_1 + \alpha_5 - \alpha_6)(\gamma_1 + \gamma_2)} + (1 - \eta)\operatorname{sen} 2\theta + (-1 + \eta)\operatorname{sen} (2\theta)\theta'^2 + (1 + \eta - (-1 + \eta)\cos 2\theta)\theta'' = 0$$
(6.8)

este sistema de ecuaciones simultáneas a resolver, en términos de los parámetros α y γ , respectivamente, como función del parámetro β , al cual debemos añadir las condiciones de frontera discutidas anteriormente, tenemos:

$$w(0) = 0 \quad w'(0) = \alpha \quad w''(0) = \beta \tag{6.9}$$

$$\theta(0) = 0 \quad \theta'(0) = \gamma.$$
 (6.10)

Asimismo, el sistema depende de los parámetros α_i y K_i , que son los coeficientes de viscosidad de Leslie y las constantes elásticas, respectivamente, así como los coeficientes γ_i que se precisan de las relaciones de Onsager 4.8 y 4.9.

Variando simultaneamente las ecuaciones 6.2 y 6.8, hasta hallar los parámetros adecuados para α y γ , que nos representa el arrastre y la elongación del medio, respectivamente, en términos de β ambas bajo las condiciones de frontera ya discutidos, resultan las gráficas 6.1.

6.2. Los planos de arrastre y elongación

Resolviendo numéricamente las ecuaciones 6.2 y 6.8 bajo el esquema de diferencias finitas, arrojan las siguientes gráficas para los parámetros α (arrastre) y γ (elongación) ambos como función de β , los cuales provienen de las condiciones de frontera y cuyo significado físico son la aceleración $w'(\phi) = \alpha$ en las fronteras, esto es el arrastre del fluido y la elongación del mismo, *i.e.*, la función ángulo $\theta'(\phi) = \gamma$ sobre la frontera, que parametrizados por β , pueden ser graficados en cada uno de los planos correspondientes.

Bajo las condiciones de frontera antes descritas, las ecuaciones 6.2 y 6.8 proveen del comportamiento del flujo del *cristal líquido*, con base en el parámetro β , las cuales tienen por parámetros las condiciones de frontera que se han descrito por $\alpha = w'(\phi)$, $\beta = w''(\phi)$ y $\gamma = \theta'(\phi)$ sobre ambas fronteras. Por tener condiciones fijas y nulas para $w(0) = w(\pi/4) = \theta(0) = \theta(\pi/4) = 0$, numéricamente se fija sobre una frontera y sobre la otra los parámetros son variados en una partición finita hasta que se cumplan las condiciones, es decir se empieza con $w(0) = \theta(0) = 0$ y $\alpha = w'(0)$ así como $\gamma =$ $\theta'(0)$ para un β fijo y se varian los parámetros α y γ , hasta que $w(\pi/4) = \theta(\pi/4) = 0$ y $\alpha = w'(\pi/4)$ así como $\gamma = \theta'(\pi/4)$. Así podemos parametrizar α y γ como función de β , claro que al tomar una tríada ($\alpha(\beta_0), \beta_0, \gamma(\beta_0)$) para algun β_0 en las ecuaciones 6.2 y 6.8, las cuales pueden ser graficadas, son respectivamente la velocidad y lo cual se denomina textura, es decir; el perfil de θ ambos en función de ϕ , cuando se han colocado los valores de la tríada ($\alpha_{\beta_0}, \beta_0, \gamma_{\beta_0}$).

De la tríada (α, β, γ) tomamos un par a la vez, esto es; $(\alpha(\beta), \beta)$ y $(\gamma(\beta), \beta)$, estas fueron escritas de la manera que reconocemos las variables como función explícita de β , y con ello los planos que estas variables definen. De esta forma las gráficas 6.1a y 6.1b, nos muestran los planos $\alpha(\beta) - \beta$ y $\gamma(\beta) - \beta$ respectivamente, mismas que se encuentran asociadas con el perfil de $w(\phi)$ y $\theta(\phi)$ para cada valor de la tríada $(\alpha_{\beta_0}, \beta_0, \gamma_{\beta_0})$. En un esbozo de las ramas de una forma general, vemos que la gráfica 6.1 es la única que puede ser comparada con aquella generada para el fluido isotrópico, figura 3.3, ambas representan los perfiles de velocidad con sus zonas de solución única y sus zonas con multiplicidad de soluciones, solo que al tener un sistema más complejo tenemos la gráfica $\gamma - \beta$ 6.1b, con lo que la multiplicidad de $\alpha(\beta)$ tiene sentido al ser acompañada por su perfil $\theta(\phi)$. Note que tenemos una zona de solución única $\beta \in (-24, 253)$, donde además, muestran perfiles de $w(\phi)$ y $\theta(\phi)$ simétricos, como fue definido en la sección 3.4.2, esto es; bajo la reflexión especular sobre el plano medio definido por $\phi = \pi/8$ como lo muestran por ejemplo los perfiles 6.2c y 6.2d, luego se presentan los puntos rama $\beta = -23,5, 253$.

Se muestran cuatro vertientes o grupos principales: el grupo 1 conformado por las ramas principales que emergen de condiciones nulas, es decir, de la tríada nula $(\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 0)$, el grupo 2, de ramas que parten del inicio de la rama C, el número 3, asimétrico de las ramas G y H, finalmente la muy particular rama D o grupo 4. Los grupos 1 y 2, similares al reflejo especular de los flujos positivos para el fluido isotrópico (figura 3.3). Ahí se observa una rama *Principal* que según los datos recabados tiene perfiles de velocidad y textura simétricos, luego del punto rama, las ramas que se derivan de este punto son asimétricas, pero reflejo especular de la otra respecto al plano medio que tiene el problema ($\phi = \pi/8$). Los grupos 3 y 4 son novedosos en comportamiento respecto al caso isotrópico, el primero es asimétrico del todo, sin tener perfiles reflejo especular una de la otra rama H y G, en tanto la rama D tiene perfiles simétricos respecto a si misma para triadas a uno u otro lado del valor $\beta = -281,8$.



Figura 6.1. Éstas son nuestras gráficas primarias más importantes, nos muestran la dependencia de los parámetros α y γ respecto a β .

6.3. Perfiles y texturas

Se ha definido por perfil, a las funciones $w(\phi)$ dependientes de los valores de las tríadas $(\alpha(\beta_i), \beta_i, \gamma(\beta_i))$ y por textura a las funciones acopladas a w, esto es $\theta(\phi)$. En este apartado se pone especial atención a estas gráficas.

Se reconoce, salvo errores de convergencia en el método numérico, que se tienen regiones de solución única en la región $\beta \in (-24, 253)$, una región conexa de bisoluciónes, $\beta \in (-149, 7, -47, 5)$, y múltiples soluciones para $\beta \in (-244, -149, 7) \cup (-47, 5, -24) \cup (\beta > 253)$ (figura 6.1a).

Particularmente se observa que los perfiles de las ramas $G ext{ y } H$ son del todo asimétricas, esto es, sus perfiles se "cargan" a una misma frontera, respecto al eje de simétria del problema. Por otra parte no se hallaron las ramas cuyos perfiles fuesen reflejos especular de éstas, (perfiles 6.3a y 6.3b, así como sus texturas 6.3c y 6.3d), esto probablemente debido a la anisotropía del material, lo cual se muestra en sus coeficientes viscosos. Sin embargo la simetría del problema, indica que los perfiles simetrícos son posibles ambos sobre la razon experimental, así como por la reflexión especular de las ecuaciones; sobre la base de un reflejo especular del sistema de coordenadas, es decir, sobre el cambio $\phi \to (\pi/4 - \phi), \theta(\phi) \to \theta(\pi/4 - \phi), w(\phi) \to w(\pi/4 - \phi)$, con las excusas de $w'(\phi) = w'(\pi/4 - \phi), w''(\phi) = w''(\pi/4 - \phi)$, así como el cambio de las condiciones iniciales a $\pi/4$, y condiciones de frontera a 0, $\phi \in (0, \pi/4)$.

Se advierte que las ramas $B ext{ y } E$ (figura 6.1a y 6.1b) ambas con perfiles en $w(\phi) ext{ y } \theta(\phi)$ reflejo especular uno del otro, se encuentran a la derecha e izquierda respectivamente de la rama simétrica C figura 6.1b, parten de un perfil "común" en su intersección con el valor $\beta = -234$ figuras 6.7a y 6.7b, como se ve en el acercamiento de la intersección de las ramas B - C - E (figura 6.7b). Los perfiles de las ramas B(figura 6.4a y E figura 6.4b) son como se ha mencionado, reflejo especular uno del otro, corroborado esto cuando se calculan sus flujos y gastos (figura 6.8b).

Una rama singular encontrada en este caso, es la rama D figura 6.1a, nótese la total ruptura de semejanza con cualquier otra rama, expresamente cada una de ellas mantienen el signo de su pendiente o derivada sobre su curva (figura 6.1a), es deci: cualquiera otra tiene exclusivamente pendiente negativa o positiva, solo la rama D nos muestra que bajo ciertos rangos del parámetro β , ésta tiene pendiente o derivada positiva, negativa y solo en un punto nula, bajo el esquema de la figura 6.1a. En $\alpha(\beta) - \beta$ con $\beta = -281,8$ nos refiere perfiles simétricos tanto de $w(\phi)$ como de $\theta(\phi)$ figuras 6.6, luego se cargan a uno u otro lado a partir de esta triada $(\alpha_{-281,8}, \beta = -281,8, \gamma_{-281,8}).$



Figura 6.2. Mostramos aquí únicamente las texturas y perfiles simétricos del sistema.

Un caso interesante resulta ser la rama B, note que en ambas gráficas $(\alpha(\beta) - \beta)$ figura 6.1a y $(\gamma(\beta) - \beta)$ figura 6.1b, parecen tender los valores de sus triadas $(\alpha_{\beta_i}, \beta_i, \gamma_{\beta_i})$ hacia los valores de las triadas de la rama A, para la primer gráfica $(\alpha(\beta) - \beta)$ su aparente convergencia es por la derecha $((\alpha_{\beta_B}, \beta(B)) \rightarrow (\alpha_{\beta_A}, \beta_A)^+)$, en tanto para el segundo la convergencia es izquierda $((\gamma_{\beta_B}, \beta_B) \rightarrow (\gamma_{\beta_A}, \beta_A)^-)$, esta reiterada "supuesta" convergencia es interesante, ya que si bien se esperaría la convergencia en el espacio de parámetros, ésta **no** sucede. Una clara diferencia de ésto es el número de ceros o nodos que presenta cada textura $\theta(\phi)$, donde se tiene un solo cero o nodos¹ figura 6.2b, y dos ceros o nodos para B que se muestran en la textura figura 6.4c, po lo que los perfiles asociados a sus triadas $(\alpha_{\beta}, \beta, \gamma_{\beta})$ no convergen.

Si bien las limitaciones numéricas de precisión impiden rastrear más allá a la rama D bajo el parámetro β , su comportamiento es muy interesante debido a la simetría y asimetría de los perfiles y texturas que presentan sus triadas ($\alpha(\beta), \beta, \gamma(\beta)$). La intersección de esta rama (D) con las ramas $E \ge C$ ($\beta = -533 \ge \alpha \approx 340$), de lo cual se muestra un acercamiento en la figura 6.7e. Muestran texturas distintas, claro esta con perfiles distintos, esto ya que subtienden parámetros γ distintos, se tiene $\beta = -533 \ge \alpha \approx 340$ con $\gamma = -14, 14, -3, 81, 4, 01$, respetivamente para las ramas $D, E \ge C$ (vése los perfiles de las figuras 6.6a, 6.4b y 6.2e).

Una característica de este sistemas, es el número de ceros o nodos que presentan sus texturas. Así, en este caso parece haber una relación entre la energía libre de Franck figura 6.8a, y el número de nodos que presentan los perfiles por rama, se observa que las ramas G, H, M y T, no tienen nodos en sus texturas; figuras 6.3c, 6.3d, 6.5d, y 6.5c respectivamente, sin embargo la textura de la rama D tiene un nodo en su perfil $\theta(\phi)$ figura 6.6, al igual que los perfiles $\theta(\phi)$ de las ramas A y F ("simétricas", figuras 6.2b y 6.2d), sin embargo, las demás ramas no presentan un número bien definido de nodos.

Observese que para números positivos de β la orientación de las ramas asimétricas 1^{1} se excluyen los puntos fijos frontera. según sus perfiles y texturas, respecto a las ramas simétricas es semejante con su orientación en los planos $\alpha - \beta$ vs $\gamma - \beta$, no así para números negativos donde es inversa la relación de orientación respecto a sus ramas simétricas (figuras 6.1b y 6.1a), tomemos por ejemplo las ramas G y H, cuyos perfiles se muestran en la figuras 6.3a y 6.3b respectivamente.



Figura 6.3. Perfiles y texturas para las únicas ramas asimétricas que no tienen reflejo especular respecto a la bisectriz del canal, sobre β mayor a cero.



Figura 6.4. Perfiles y texturas para las ramas asimétricas respecto a la rama C y su perfil 6.2e y textura 6.2f, obsérvese que tanto las texturas $\theta(\phi)$ como los perfiles $w(\phi)$ de E son el reflejo especular de B, éstos a su vez fueron derivados de la rama C cuando $\beta = -234$. Se espera que las formas extendidas para ambas ramas sean el reflejo especular de 6.4e y 6.4f, respectivamente.



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.


Figura 6.5. Perfiles y texturas de las ramas T y M.



Figura 6.6. Perfiles y texturas para las ramas T y D, se ha partido la rama D, respecto del mínimo de la su gráfica $\beta = -281,8$.





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).

6.4. Particularidades locales



Figura 6.7. Detalles de las confluencias entre las ramas.

Nótese la diferencia entre las aperturas de las ramas sobre los puntos $\beta = -234$ (figuras 6.7a y 6.7b), del cual surgen las tres ramas $C, B ext{ y } E$, con el punto $\beta = -23,5$ (figuras 6.7c y 6.7d) del cual surgen las ramas $T, A ext{ y } M$.

6.5. Gasto y energía

Recordemos que de la condición en que la misma masa m de un fluido pasa por unidad de tiempo a través de una sección transversal a r = const. tenemos:

$$Q = \rho \int_{\alpha_{max}}^{\alpha_{min}} vr \quad d\phi = 6\nu\rho \int_{\alpha_{max}}^{\alpha_{min}} u \quad d\phi \tag{6.11}$$

Q el gasto puede ser tanto positivo como negativo. Si Q > 0, la línea de intersección de los planos se dice que es una fuente, es decir, el fluido emerge del vértice del ángulo; esto es llamado *flujo en un canal divergente*. Si Q < 0, la línea de intersección es nombrado sumidero, entonces tenemos: *flujo en un canal convergente*. La razón $|Q|/v\rho$ es adimensional y juega el papel del Número de Reynolds $\left(\frac{\rho l \mathbf{v}}{\eta}\right)$ para este problema.

Como en el caso isotrópico vemos soluciones que parten de la tríada nula ($\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 0$) de parámetros simétricos sobre sus perfiles $w(\phi)$ y $\theta(\phi)$ obteniendo flujos Q < 0 y Q > 0 para $\beta < 0$ y $\beta > 0$ respectivamente, éstos son similares en forma a aquellos obtenidos para el flujo isotrópico, una característica de estos es el número de *Nodos o ceros* sobre sus perfiles o texturas, sin considerar claro las fronteras nulas.

Luego de éstos hay flujos que se distorcionan como se ve en los perfiles de las ramas de los flujos H y G (perfiles y texturas (figuras 6.3)), éstos son asimétricos y sin contraflujos, en contraparte del sistema isotrópico que sí los presenta (figuras 3.6). Recuerde que cada tríada ($\alpha(\beta), \beta, \gamma(\beta)$) de cada rama tiene adjunto un perfil específico para el flujo del cristal líquido en la geometría presente, de esta forma podemos ver que tenemos ramas de una asimetría que debemos estudiar más a fondo ramas H y G figuras 6.1b y 6.1a.

Ahora bien, cada uno de estos perfiles tienen una energía que podemos aproximar a un primer orden por la suma de la energía libre de Franck, que es la energía de deformación, la energía debida al momento angular, así como la energía cinética.





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).

Debido a la magnitud del momento de inercia de los elementos que conforman el cristal líquido, es 9 ordenes de magnitud menor, su energía rotacional es asímismo menor en esta proporción que al ser comparada con su energía cinética, podemos despreciar la energía debida a la rotación de las moléculas del cristal líquido, es decir, la energía se reparte mayormente en la energía de traslación a aquélla debida a la rotación de sus moléculas. Con lo que las gráficas de energía son puramente descriptivas del sistema, bien una descripción circunspecta de los flujos de cada perfil de cada rama.



(b) Gasto definido por la ecuación 6.11 en función de β .

ß

0

 3.5×10^2

 -3.5×10^{2}

-30

-7x10²



Figura 6.9. Energía cinética y energía libre de Franck

CAPITULO 7

Conclusiones

Se plantearon y resolvieron las ecuaciones para un sistema de placas infinitas que forman un canal convegente-divergente, sobre el cual fluye un cristal líquido nemático. Resolviendo numéricamente hallamos los perfiles y texturas que conforman las soluciones al problema, de tal forma; que se enumeran los puntos más sobresalientes.

- 1. La existencia de soluciones múltiples para números β que juegan el papel del número de Reynolds muy cortos comparados con los correspondientes a un fluido isotrópico.
- 2. Es de señalar que este problema simétrico desde el punto de vista geométrico; no lo es numéricamente, debido a la anisotropía del material que conforma al fluido, ésto se manifiesta através de sus constantes elásticas, así como de sus viscosidades. Esto tiene como consecuencia la existencia de varias soluciones asimétricas, en contraste con el tipo de soluciones halladas para un fluido isotrópico bajo la misma geometría.
- 3. La existencia de múltiples soluciones para parámetros β asi como regiones con solución única para estos mismos, donde β puede ser interpretado como la cantidad conocida como Número de Reynolds para cada rama, con ello las dimensiones asi como las velocidades presentes en el flujo son consistentes con los experimentos realizados con cristales liquidos para celdas extensamente usadas, cuyas dimensiones no superan las micras.





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).

- 4. Riqueza en la expresión de soluciones respecto al caso del fluido isotrópico. Particularmente notamos que se mantiene una preferencia en la multiplicidad de las soluciones para flujos *divergentes*, no así con la relativa simplicidad de los flujos que se muestran como flujos convergentes, figuras 6.1b y 3.3.
- 5. Si bien **no** se tienen perfiles con contra flujos, como en el caso isotrópico esto es retribuido, con una mayor cantidad de perfiles existentes, todos ellos sin contra flujos. Ésto se debe principalmente a que el exceso de energía mecánica que para el caso del fluido isotrópico se invierte en la presencia de vorticidades locales o contraflujos, para un nemático esta energía se utiliza en la distorción elástica del vector director \mathbf{n} .
- 6. No se tiene cota sobre el parámetro que hace las veces del numéro de Reynolds, para el caso del *nemático*, en contraparte que para el fluido isotrópico se tiene una cota sobre este parámetro para que la integral que resulve al sistema pueda ser soluble [ecuación 3.61].

CAPITULO A -

Componentes físicas en coordenadas cilíndricas

Ahora bien, como el problema a resolver nos refiere usar coordenadas cilíndricas, debido a la simetría del problema, la ecuación de movimiento para un fluido incompresible viscoso en coordenadas cilíndricas r, ϕ y z, así el tensor de esfuerzo se escriben como:

$$\sigma_{rr} = -p + 2\eta \frac{\partial v_r}{\partial r}, \qquad (A.1)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = -p + 2\eta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_{\phi}}{\partial \phi} + \frac{v_r}{r}\right), \qquad (A.2)$$

$$\sigma_{zz} = -p + 2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z}.$$

y los términos no diagonales:

$$\begin{split} \sigma_{r\phi} &= \eta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + \frac{\partial v_\phi}{\partial r} - \frac{v_\phi}{r} \right), \end{split} \tag{A.2} \\ \sigma_{\phi z} &= \eta \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \phi} \right), \\ \sigma_{zr} &= \eta \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right). \end{split}$$

Y las tres componentes de las ecuaciones de Navier-Stokes en coordenadas cilíndricas las escribimos como:





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).

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_r - \frac{\mathbf{v}_{\phi}^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left(\nabla^2 v_r - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_{\phi}}{\partial \phi} - \frac{v_r}{r^2} \right), \quad (A.3)$$

$$\frac{\partial v_{\phi}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_{\phi} - \frac{v_{\phi} v_r}{r} = -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \nu \left(\nabla^2 v_{\phi} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{v_{\phi}}{r^2} \right), \quad (A.3)$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_z = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \nabla^2 v_z.$$

 ${\rm donde}$

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla) f = v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial f}{\partial \phi} + v_z \frac{\partial f}{\partial z},$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}.$$
(A.4)

y la ecuación de Continuidad se escribe como:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\left(rv_{r}\right)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial v_{\phi}}{\partial \phi} + \frac{\partial v_{z}}{\partial z} = 0.$$
(A.5)

Ahora bien la representación de vectores así como sus operaciones básicas en términos de las componentes físicas en coordenadas cilíndricas, las escribimos a partir de la razón del tensor \mathbf{A} antes definido como

$$A_{11} = \frac{\partial v_1}{\partial r}, \qquad A_{22} = \frac{v_1}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_2}{\partial \theta}, \qquad A_{33} = \frac{\partial v_3}{\partial z}, \tag{A.6}$$

$$A_{12} = A_{21} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_1}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_2}{r} \right) \right), \tag{A.7}$$

$$A_{13} = A_{31} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_1}{\partial z} + \frac{\partial v_3}{\partial r} \right), \tag{A.8}$$

$$A_{23} = A_{32} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_2}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_3}{\partial \theta} \right).$$
(A.9)

las componentes físicas no nulas del tensor antisimétrico o de vorticidad \mathbf{W} se es-

criben en coordenadas cilíndricas como

$$W_{12} = -W_{21} = \frac{1}{2r} \left(\frac{\partial v_1}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial r} (rv_2) \right), \qquad (A.10)$$

$$W_{13} = -W_{31} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_1}{\partial z} - \frac{\partial v_3}{\partial r} \right), \qquad (A.11)$$

$$W_{23} = -W_{32} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_2}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial v_3}{\partial \theta} \right).$$
(A.12)

Posteriormente hay que obtener el gradiente del vector director, que en coordenadas cilíndricas, para un vector \mathbf{v} cualquiera se escriben las componentes de este último como lo muestra [27] que provienen de la definición 4.5 y el gradiente en coordenadas cilíndricas, esto es

$$[\nabla \mathbf{v}]_{11} = \frac{\partial v_1}{\partial r}, \qquad [\nabla \mathbf{v}]_{12} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial v_1}{\partial \theta} - v_2 \right), \qquad [\nabla \mathbf{v}]_{13} = \frac{\partial v_1}{\partial z}, \quad (A.13)$$

$$[\nabla \mathbf{v}]_{21} = \frac{\partial v_2}{\partial r}, \qquad [\nabla \mathbf{v}]_{22} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial v_1}{\partial \theta} - v_2 \right), \qquad [\nabla \mathbf{v}]_{23} = \frac{\partial v_2}{\partial z}, \quad (A.14)$$

$$[\nabla \mathbf{v}]_{31} = \frac{\partial v_3}{\partial r}, \qquad [\nabla \mathbf{v}]_{32} = \frac{1}{r} \frac{\partial v_3}{\partial \theta}, \qquad [\nabla \mathbf{v}]_{33} = \frac{\partial v_3}{\partial z}. \tag{A.15}$$

Por último la divergencia del tensor de esfuerzos σ_{ij} que es definida en la sección 3.4.2, es decir $[\nabla \cdot \sigma] = \sigma_{ij,i}$. Las componentes de esta divergencia en coordenadas cilíndricas son [según 115, p. 144]

$$[\nabla \cdot \sigma]_1 = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} + \frac{\sigma_{11}}{r} - \frac{\sigma_{22}}{r}, \qquad (A.16)$$

$$[\nabla \cdot \sigma]_2 = \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial z} + \frac{\sigma_{21}}{r} + \frac{\sigma_{12}}{r}, \qquad (A.17)$$

$$\left[\nabla \cdot \sigma\right]_{3} = \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z} + \frac{\sigma_{31}}{r}, \qquad (A.18)$$

La divergencia en estas coordenadas del tensor de esfuerzos disipativos es definida

M. J. M. G.

y nombrada para su posterior uso, esto es

$$\nabla \cdot \sigma = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r \sigma_{11})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial \phi} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} - \frac{\sigma_{22}}{r} \right), \quad (A.19)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r \sigma_{21})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial \phi} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial z} + \frac{\sigma_{12}}{r},$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r \sigma_{31})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial \phi} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z} \right)$$

- CAPITULO B

Identidades tensoriales

Los experimentos de Miesowicz y Zwetkoff sugieren que $\tilde{\sigma}$ tiene una dependencia lineal sobre N y A, de aceptar esta depencia lineal podemos escribir

$$\widetilde{\sigma}_{ij} = \mathcal{A}_{ij} + \mathcal{B}_{ijk}N_k + \mathcal{C}_{ijkp}A_{kp} \tag{B.1}$$

donde Q es una rotación arbitraria representada por un tensor ortogonal propio de segundo orden como función del tiempo, si el sistema es dependiente del tiempo, el tensor \mathcal{B} es llamado invariante entre sistemas, o bien el tensor *objetivo* que se mantienen bajo las siguientes reglas de transformación

$$\vec{a}^* = \mathcal{Q}\vec{a}, \qquad \mathcal{B}^* = \mathcal{Q}\mathcal{B}\mathcal{Q}^T$$
 (B.2)

donde el superindice * representa la correspondiente cantidad derivada sobre el movimiento, es decir $x^*(t) = c(t) + \mathcal{Q}(t)x(t)$, por supuesto se siguen sobre las componentes de \mathcal{Q} las siguientes propiedades

$$\mathcal{Q}_{ik}\mathcal{Q}_{jk} = \mathcal{Q}_{kj}\mathcal{Q}_{ki} = \delta_{ij}, \qquad det\mathcal{Q} = +1.$$
(B.3)

En componentes cartesianas las ecuaciones B.2, se escriben

$$\vec{a}_i^* = \mathcal{Q}_{ij}\vec{a}_j, \qquad \mathcal{B}_{ij}^* = \mathcal{Q}_{ip}\mathcal{B}_{pq}\mathcal{Q}_{jq}.$$
 (B.4)

Con ello la componentes de la ecuación B.1, se transforman como

$$\mathcal{A}_{ij}^* = \mathcal{Q}_{ip} \mathcal{Q}_{jq} \mathcal{A}_{pq}, \tag{B.5}$$

$$\mathcal{B}_{ijk}^* = \mathcal{Q}_{iq} \mathcal{Q}_{jm} \mathcal{Q}_{kp} \mathcal{B}_{qmp}, \tag{B.6}$$

y
$$C_{ijkp}^* = Q_{iq}Q_{jm}Q_{kr}Q_{ps}C_{qmrs},$$
 (B.7)

donde los coeficientes \mathcal{A}_{pq} , \mathcal{B}_{ijk} y \mathcal{C}_{ijkp} se encuentran en función de n_i . La simetría Nemática también hace la siguiente imposición de que los coeficientes deben ser transversales con respecto a n_i . Ésto se halla indicado por Ericksen, tensores de este tipo han sido estudiados por Smit y Rivlin, quienes mostrarón que cualquier tensor es expresable como una combinación lineal de los productos de dichas componentes. Esto indica que los coeficientes pueden ser puestos en la forma más general

$$\mathcal{A}_{ij} = \mu_1 \delta_{ij} + \mu_2 n_i n_j, \tag{B.8}$$
$$\mathcal{B}_{ijk} = \mu_3 \delta_{ij} n_k + \mu_4 \delta_{jk} n_i + \mu_5 \delta_{ki} n_j,$$
$$\mathcal{C}_{ijkp} = \mu_6 \delta_{ij} \delta_{kp} + \mu_7 \delta_{ik} \delta_{jp} + \mu_8 \delta_{ip} \delta_{jk} + \mu_9 \delta_{ij} n_k n_p + \mu_{10} \delta_{jk} n_i n_p + \mu_{11} \delta_{ik} n_j n_p + \mu_{12} \delta_{ip} n_j n_k + \mu_{13} \delta_{jp} n_i n_k + \mu_{14} \delta_{kp} n_i n_j + +\mu_{15} n_i n_j n_k n_p. \tag{B.9}$$

insertando estas ecuaciones en la ecuación $\sigma_{ij}^{(d)} = \eta_{ijkl}A_{kl}$ y recordando las propiedades de A, *i.e.* que $A_{ij} = A_{ji}$, $n_i N_i = 0$ y $A_{ii} = 0$, con ello encontramos

$$\widetilde{\sigma}_{ij} = (\mu_1 + \mu_9 n_k A_{kp} n_p) \,\delta_{ij} + (\mu_2 + \alpha_1 n_k A_{kp} n_p) \,n_i n_j + \alpha_2 N_i n_j + + \alpha_3 N_j n_i + \alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_j A_{ik} n_k + \alpha_6 n_i A_{jk} n_k.$$
(B.10)

donde; $\alpha_1 = \mu_{15}, \alpha_2 = \mu_5, \alpha_3 = \mu_4$, así como

$$\alpha_4 = \mu_7 + \mu_8, \quad \alpha_5 = \mu_{11} + \mu_{12}, \quad \alpha_6 = \mu_{10} + \mu_{13}.$$
 (B.11)

M. J. M. G.

ahora se puede desarrollar $\widetilde{\sigma}_{ij}$ como

$$\epsilon_{ijk}\widetilde{\sigma}_{kj} = \epsilon_{ijk}\left(\alpha_2 N_k n_j + \alpha_3 N_j n_k + \alpha_5 n_j A_{kp} n_k + \alpha_6 n_k A_{jp} n_p\right) = \epsilon_{ijk} n_j \widetilde{g}_k, \quad (B.12)$$

donde \widetilde{g}_{ij} fue definido en la ecuación 4.7.

B.1. Teorema del transporte

Sea V cualquier volumen cerrado que se mueva con el fluido en consideración y sea $\mathcal{F}(\mathbf{r}, t)$ sea una función que depende de \mathbf{r} y el tiempo t. El teorema de transporte de Reynolds

$$\frac{D}{Dt} \int_{V} \mathcal{F}(\mathbf{r}, t) dV = \int_{V} \left[\dot{\mathcal{F}} + \mathcal{F}(\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] dV, \tag{B.13}$$

donde $\frac{D}{Dt}$ y el punto sobre la función representan las derivadas temporales total y parcial respectivamente, y **v** la velocidad.

Si tomamos $\mathcal{F} = \rho F$, se sigue

$$\frac{D}{Dt} \int_{V} \rho F(\mathbf{r}, t) dV = \int_{V} \left[\frac{\dot{\rho} F}{\rho F} + \rho F(\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] dV$$

$$= \int_{V} \left[\rho \dot{F} + f(\dot{\rho} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{V})) \right] dV = \int_{V} \rho \dot{F} dV, \quad (B.14)$$

donde hemos echo uso de la ecuación de continuidad 3.19. Si se tarata de un material incompresible $(\nabla \cdot \mathbf{v} = 0)$ tenemos

$$\frac{D}{Dt} \int_{V} \mathcal{F}(\mathbf{r}, t) dV = \int_{V} \dot{\mathcal{F}} dV.$$
(B.15)

Bibliografía

[1]	J. A. Reyes, O. Manero and R. F. Rodríguez, Rheol. Acta, 40 426-443 (2001).
[2]	J. A. Reyes and R. F. Rodríguez, Phys. Rev. E 65 051701 (2002).
[3]	J. Adrian Reyes, A Corella Madueño and Carlos I. Mendoza, J. Chem. Phys. 129 084710 (2008).
[4]	Carlos I. Mendoza, A. Corella-Madueño, and J.Adrián Reyes, Phys rev. E. 77 011706 (2008).
[5]	O. Robles V., V.M. Monroy. J.F., Pulg, J.F. Soltero y V.M. Gonzalez- Romero, Estudio reológico y calorimétrico de Cristales líquidos Li- otrópicos Laminares Formados por el Sistema Aerosol OT/H2O, Avences en Ingeniería Química pp. 1151 (1990).
[6]	J. Preston, W.L. Hofferbert, JR, Textile Research Journal, 49 , 283 (1979).
[7]	Laura O. Palomares, a P. Castro-Garay, and J. Adrian Reyes, Applied Physics Letters, 94 181903 (2009).
[8]	Dres. María Luisa Pereyra, Mónica Pujadas, Pablo Steinfeld, A.E. Hilda. Revello, Arch Pediatr Urug, 74(2), 87 (2003).





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).

[9]	I. E. Dzyaloshinskiĭ, Zh. Éksp. Teor. Fiz. 58, 1443 (1970). [Sov. Phys. JETP 31, 773 (1970).
[10]	P. E. Cladis and M. Kleman, J. Phys. 33 , 591 (1972).
[11]	L. D. Landau and E. M. Lifshitz, <i>Theory of Elasticity</i> Oxford, Pergamon Press, (1986).
[12]	L. D. Landau and E. M. Lifshitz, <i>Fluid Mechanics</i> (Oxford, Pergamon Press, (1986).
[13]	O. D. Lavrentovich, Phys. Scr. T39 , 394 (1991).
[14]	Fang-Hua Lin and Chun Liu, Existence of Solutions for the Ericksen- Leslie, Archive for Rational Mechanics and Analysis Springer Berlin / Heidelberg 135 (154), 2 (2000).
[15]	A. Saupe, J. Chem. Phys. 75 , 5118 (1981).
[16]	P. Halevi, J. A. Reyes-Avendaño, and J. A. Reyes-Cervantes, Phys. Rev. E 73, 040701 (R) (2006).
[17]	T. T. Larsen, A. Bjarklev, D. S. Hermann, and J. Broeng, Optics Express 11 (20), 2589 (2003).
[18]	M. Petrov, B. Katranchev, H. Naradikian, T. Angelov, K. Panajotov, and A. Zheltikov, J. Optoelectron Adv. Mat. 9 446 (2007).
[19]	A. Rapini and M. Papoular, J. Phys. (Paris) Colloq. 30 , C4 (1969).
[20]	W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, Cambridge (1986).
[21]	Jorge Ize, Cálculo de variaciones. FENOMEC, (2002).
[22]	M. Miesowicz, Bull. Acad. Pol. A (Poland), 228 (1936).

[23]	М.	Miesowicz,	Nature	158	27	(1946).
------	----	------------	--------	-----	----	---------

- [24] C. Gähwiller, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 20, **301** (1973).
- [25] L.M. Blinov y V.G. Chigrinov, Electrooptics Effects in Liquid Crystal Materials, Springer, New York, 464 (1996).
- [26] PBG, R.G. Larson, The Structure and Rheology of Complex Fluids, Oxford University Press, (1999).
- [27] Iain W. Stewart, The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals A Mathematical Introduction, Taylor & Francis, The Liquid Crystal Book Series. 20, 1356 (2004).
- [28] Arfken G & B, Weber H J. Mathematical Methods for Physicists, 6ed., Elsevier AP, 1198s (2005).
- [29] Quarteroni A., Sacco R., Saleri F. Numerical mathematics, Springer, 669ps (2000).
- [30] J. Schr[']oder, P. Neff, V. Ebbing, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 56, **3486** (2008).
- [31] Ronald Rivlin and invariant theory, A.J.M. Spencer, International Journal of Engineering Science, (47) 1066, (2009).
- [32] A. Véron, A.F. Martins, Thin Solid Films 517, **1384** (2008).
- [33] M. Carme Calderer and Bagisa Mukherjee. On Poiseuille flow of liquid crystals, Liquid Crystals, (22), No. 2 (1997).
- [34] J.L. Ericksen, Hydrostatic Theory of Liquid Crystal, Arc. Rat. Mech.Anal., 9, 355 (1962).
- [35] F.M. Leslie, Distorted twisted orientation patterns in nematics liquid cristal, Pramana, Suppl. No. 1, 44-55ps 1368 (1975).

[36]	F. M. Leslie, Continuum theory for nematic liquid crystals, Continuum				
	Mech. Thermodyn., 4, 167-175 (1992).				
[37]	F. M. Leslie, Liquid Crystal Devices, Institute Wiskundige Dienstver-				
	lening, Technische Iniversiteit Eindhoven (1992).				
[38]	F. M. Leslie, Continuum Theory for Liquid Crystals, in HandBook of				
	Liquid Crystals, Volume 1, D. Demus, J. Goodby G. W. Gray, H. W.				
	Spiess and V. (Eds.), 25-39, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, (1998).				
[39]	Rosalío F. Rodríguez, Juan A. Reyes, Ciencia Ergo Sum, número tres,				
	Especial: Fenómenos no lineales, Toluca, México, (8) 275-284 .				
[40]	P. K. Currie, Mol. Crysr. Liq. Cryst., 28, 335-338 (1974).				