



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
INGENIERÍA QUÍMICA – POLÍMEROS

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA REOLOGÍA DE SUSPENSIONES NO  
COLOIDALES CONCENTRADAS DE ESFERAS RÍGIDAS EN MATRICES NO  
NEWTONIANAS

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
ALAN ROSALES ROMERO

TUTOR PRINCIPAL  
DR. JOSÉ ESTEBAN LÓPEZ AGUILAR, FACULTAD DE QUÍMICA

CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO 2022



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

**JURADO ASIGNADO:**

Presidente: DR. MANERO BRITO OCTAVIO  
Secretario: DR. VIVALDO LIMA EDUARDO  
1 er. Vocal: DR. LÓPEZ AGUILAR JOSÉ ESTEBAN  
2 do. Vocal: DR. CUEVAS GARCÍA ROGELIO  
3 er. Vocal: DR. AGUAYO VALLEJO JUAN PABLO

EDIFICIO D, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM, CDMX.

**TUTOR DE TESIS:**

DR. JOSÉ ESTEBAN LÓPEZ AGUILAR

---

**FIRMA**

# Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca otorgada para realizar mis estudios de maestría [1083040].

A la Universidad Nacional Autónoma de México por la oportunidad que me dio para continuar con mis estudios, especialmente al Programa de Posgrado en Ingeniería.

A todos los docentes que contribuyeron en mi formación, y que son de motivación para seguir adelante con nuevos retos.

A los miembros del jurado por su orientación y comentarios para el desarrollo de este trabajo.

Al Dr. José Esteban López Aguilar por su apoyo incondicional en cada etapa académica, por su guía y motivación para tomar nuevos retos.

A mis colegas y amigos que hicieron más amenas las situaciones difíciles y los estudios.

A mi mamá, papá, hermana y abuelos por hacer posible mis sueños y metas. Todo ha sido posible gracias a su compañía, apoyo y amor durante toda mi vida.



# Índice general

Lista de símbolos . . . . .	IV
Lista de figuras . . . . .	V
<b>Resumen</b>	<b>VIII</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Justificación . . . . .	1
1.2. Hipótesis . . . . .	3
1.3. Objetivos . . . . .	4
1.3.1. Objetivos generales . . . . .	4
1.3.2. Objetivos específicos . . . . .	5
1.4. Marco teórico . . . . .	5
<b>2. Modelo Newtoniano generalizado</b>	<b>18</b>
<b>3. Método numérico de Dinámica de Lubricación</b>	<b>30</b>
<b>4. Resultados y análisis</b>	<b>38</b>
4.1. Viscosidad . . . . .	41
4.2. Esfuerzos normales . . . . .	50

4.3. Morfología . . . . .	57
4.3.1. Densidad de pares y fuerza de lubricación . . . . .	59
4.3.2. Videos del movimiento de la suspensión . . . . .	78
4.4. Mecanismo . . . . .	87
<b>5. Conclusiones y recomendaciones</b>	<b>90</b>
5.1. Trabajo a futuro . . . . .	91
5.2. Productividad . . . . .	93
<b>Referencias</b>	<b>94</b>
<b>A. Código de Matlab</b>	<b>101</b>

## Lista de símbolos

Símbolo	Significado	Unidades
$SR$	Rapidez de corte impuesta adimensional	—
$\dot{\gamma}$	Tensor rapidez de deformación	$s^{-1}$
$\dot{\gamma}_{in}$	Rapidez de corte efectiva (para la suspensión)	$s^{-1}$
$\dot{\gamma}_{loc}$	Rapidez de corte local (en el espacio entre superficies de un par de partículas)	$s^{-1}$
$\dot{\gamma}_{loc}^{max}$	Rapidez de corte local máxima	$s^{-1}$
$\dot{\gamma}_{crit}$	Rapidez de corte crítica (modelo biviscoso)	$s^{-1}$
$h_0$	Distancia entre las superficies de un par de partículas	$m$
$h_0^{lim}$	Distancia límite entre las superficies de un par de partículas para la activación de la respuesta biviscosa de la matriz	$m$
$a$	Radio de una partícula	$m$
$\eta$	Viscosidad de corte de la matriz	$Pa\ s$
$\eta_{conf}$	Viscosidad bajo confinamiento de la matriz	$Pa\ s$
$\eta_{bult}$	Viscosidad de bulto de la matriz	$Pa\ s$
$\eta_R$	Viscosidad de corte adimensional de la suspensión	—
$N_1$	Primera diferencia de esfuerzos normales	$Pa$
$N_2$	Segunda diferencia de esfuerzos normales	$Pa$
$\Delta\eta$	Aumento de viscosidad de la matriz por confinamiento	$Pa\ s$
$L$	Longitud crítica para la activación de la respuesta biviscosa de la matriz	$m$
$A$	Parámetro que modula la rapidez de corte crítica para la activación de la respuesta biviscosa de la matriz	$m\ s^{-1}$
$\phi$	Fracción de volumen	—
$F_1$	Fuerza de lubricación monoviscosa con $\eta_{conf}(h_0)$	$N$
$F_2$	Fuerza de lubricación biviscosa con $\eta_{conf}(h_0)$ y $\eta_{bult}$	$N$
CST	Engrosamiento al corte continuo	—
DST	Engrosamiento al corte discontinuo	—

# Índice de figuras

1.1. Efecto de la fracción de volumen $\phi$ de partículas de PVC $1.25 \mu m$ en ftalato de dioctilo. . . . .	10
1.2. Símbolos en blanco, viscosidad efectiva $\eta$ contra la rapidez de corte $\dot{\gamma}$ para el polibutadieno PBD 7000 a cuatro separaciones de confinamiento entre superficies ( $L =$ longitud activa). Símbolos negros, viscosidad efectiva deducida de experimentos de fricción ( $D =$ espesor de la película). . . . .	15
1.3. Par de partículas interaccionando por fuerza de lubricación normal ( <i>squeezing flow</i> ). La capa de lubricación es el fluido que pasa entre la superficie de un par de partículas lo suficientemente cercanas para que interaccionen. . . . .	17
2.1. Respuesta de la viscosidad de la matriz $\eta$ contra la rapidez de corte $\dot{\gamma}$ con el modelo FBV para la variación del parámetro $\Delta\eta = \{10, 25\}$ con $A = 10^{-4}$ , $L = 1$ , $h_0 = 10^{-3}$ . . . . .	20
2.2. Respuesta de la viscosidad de la matriz $\eta$ contra la separación entre partículas $h_0$ con el modelo FBV para la variación del parámetro $L = \{0.1, 1, 10\}$ con $\Delta\eta = 10$ , $A = 10^{-4}$ . . . . .	21
2.3. Respuesta de la viscosidad de la matriz $\eta$ contra la rapidez de corte $\dot{\gamma}$ con el modelo FBV para la variación del parámetro $A = \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}$ con $\Delta\eta = 10$ , $L = 1$ , $h_0 = 10^{-3}$ . . . . .	23

2.4. Viscosidad efectiva $\eta$ contra la separación entre partículas $h_0$ ; símbolos: Datos experimentales de Luengo et al. (1997); líneas continuas: Modelo biviscoso funcionalizado (FBV) para $\dot{\gamma} = \{23, 426\} s^{-1}$ con $\Delta\eta = \{7000, 500\} Pa s$ , $\eta_{bult} = 2.35 Pa s$ , $A = \{10^6, 5000\} m s^{-1}$ , $L = \{20, 5\} nm$ . . . . .	25
3.1. Esquema de un modelo de Dinámica de Lubricación de un par de partículas suspendidas. . . . .	33
3.2. Sistema compuesto por partículas esféricas rígidas y lisas de radio $a = 1$ . . . . .	37
4.1. Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . .	45
4.2. Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en $L$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $A = 10^{-4}$ . . .	47
4.3. Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en $\Delta\eta$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $A = 10^{-3}$ y $L = 1$ . . .	48
4.4. Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en $\phi = 0.48$ con el modelo FBV con: $\Delta\eta = 10$ , $A = 10^{-3}$ y $L = 1$ . . . . .	50
4.5. Primera diferencia de esfuerzos normales para la variación en $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	53
4.6. Segunda diferencia de esfuerzos normales para la variación en $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	54
4.7. Primera diferencia de esfuerzos normales para la variación en $\Delta\eta$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $A = 10^{-3}$ y $L = 1$ . . . . .	55
4.8. Segunda diferencia de esfuerzos normales para la variación en $\Delta\eta$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $A = 10^{-3}$ y $L = 1$ . . . . .	56
4.9. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $A = 10^{-5}$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	64

4.9. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $A = 10^{-5}$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	65
4.10. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $A = 10^{-4}$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	66
4.10. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $A = 10^{-4}$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	67
4.11. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $A = 10^{-3}$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	68
4.12. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $L = 0.1$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $A = 10^{-4}$ . . . . .	71
4.12. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $L = 0.1$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $A = 10^{-4}$ . . . . .	72
4.13. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $L = 10$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $A = 10^{-4}$ . . . . .	73
4.13. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $L = 10$ , $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $A = 10^{-4}$ . . . . .	74

4.14. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $\phi = 0.40$ , $\Delta\eta = 10$ , $A = 10^{-3}$ , $L = 1$ . . . . .	76
4.15. Rapidez de corte local adimensional, $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional, $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes $SR$ (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con $\phi = 0.45$ , $\Delta\eta = 10$ , $A = 10^{-3}$ , $L = 1$ . . . . .	77
4.16. Instantes de los videos para la variación de $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	80
4.16. Instantes de los videos para la variación de $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	81
4.17. Instantes de los videos para la variación de $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	83
4.17. Instantes de los videos para la variación de $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	84
4.18. Instantes de los videos para la variación de $A$ con el modelo FBV con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ y $L = 1$ . . . . .	86
A.1. Fluctuaciones de los resultados obtenidos con el modelo de Dinámica de Lubricación en estado estacionario para tres diferentes $SR = \{0.5, 10, 100\}$ con el modelo biviscoso funcionalizado con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ , $A = 10^{-4}$ y $L = 1$ . . . . .	102
A.1. Fluctuaciones de los resultados obtenidos con el modelo de Dinámica de Lubricación en estado estacionario para tres diferentes $SR = \{0.5, 10, 100\}$ con el modelo biviscoso funcionalizado con: $\phi = 0.48$ , $\Delta\eta = 10$ , $A = 10^{-4}$ y $L = 1$ . . . . .	103

# Resumen

En este trabajo se presenta un modelo para ofrecer una explicación alternativa al mecanismo que promueve el fenómeno conocido como engrosamiento al corte discontinuo (DST, del término en inglés: *Discontinuous Shear Thickening*) que se presenta en las suspensiones concentradas de partículas sólidas. Esta respuesta reológica se manifiesta como un crecimiento súbito de la viscosidad de una suspensión concentrada con el aumento de la rapidez de corte, para el cual la suspensión aparenta un comportamiento tipo sólido. Las propiedades reológicas de las suspensiones concentradas están fuertemente determinadas por las propiedades reológicas de la matriz y de la forma, tamaño y las múltiples interacciones entre las partículas en suspensión. La reología de las suspensiones concentradas se puede modelar considerando las fuerzas de lubricación de corto alcance entre partícula-partícula al aplicarse un flujo cortante simple. El sistema analizado consta de: i) partículas esféricas, sólidas, rígidas y lisas de tamaño, tal que las fuerzas Brownianas son despreciables (suspensiones no coloidales); y ii) un fluido de suspensión, o también llamado matriz, no Newtoniano descrito a través del modelo biviscoso funcionalizado. Además, con soporte en reportes del área de tribología, se añade el efecto de confinamiento extremo a la matriz, en el cual el fluido al confinarse entre dos superficies aumenta su vis-



cosidad. De esta forma, el comportamiento reológico de la matriz queda en función de la rapidez de corte y de la separación entre las partículas en suspensión (micro-escala). Esta funcionalidad de la viscosidad tiene un impacto directo en la fuerza de lubricación, que finalmente se manifiesta en las propiedades reológicas de la suspensión (escala macroscópica). Con base en los resultados obtenidos y el análisis de éstos, se propone un mecanismo para el DST a través de las fuerzas de lubricación no Newtonianas con la funcionalización de la viscosidad de la matriz con respecto a la distancia entre las superficies de las partículas y la morfología de la suspensión. El mecanismo establece que para que se presente el DST se requiere que la fuerza de lubricación no newtoniana sea entre 5-6 veces más grande en magnitud que la fuerza de lubricación Newtoniana, y que el número de partículas que interaccionan entre si se aumente considerablemente y, de manera simultánea, la distancia entre la superficie de las partículas que interaccionen se reduzca.

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Justificación

La falta de una completa descripción de los fenómenos de engrosamiento al corte continuo y discontinuo (CST-DST); (CST, del término en inglés: *Continuous Shear Thickening*) en suspensiones concentradas, abre la puerta a la propuesta de nuevos mecanismos e ideas que lo expliquen. A través de modelos constitutivos funcionalizados con respecto a la separación entre partículas en suspensión y las herramientas de simulación numérica moderna (algoritmos Lagrangianos de Dinámica de Lubricación de sistemas particulados); (Kumar et al., 2020, 2021; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a,b) se busca reproducir y explicar desde un punto de vista fundamental el CST-DST con una perspectiva diferente a las propuestas en la literatura, dada por el análisis de las fuerzas de lubricación entre partículas en suspensiones concentradas no coloidales (López-Aguilar et al., 2022).

Este tipo de estudios tienen aplicabilidad tecnológica, en donde las herramientas predictivas son cada vez más usadas en el desarrollo de nuevos materiales, productos y tecnologías, y el auge que tiene la creación de materiales inteligentes de reología adaptable, como es el caso de materiales para la construcción como el concreto (Clavaud et al., 2017), productos alimenticios o de belleza (Bourrienne et al., 2020; Morris, 2020), también la aplicación en prendas protectoras (Ding et al., 2011; Gürgen et al., 2017; Lee et al., 2002, 2003).

Se han propuesto diversos mecanismos como el origen del engrosamiento al corte en su forma continua y discontinua, i.e. CST y DST; éstos incluyen la transición *orden-desorden*, el *hydroclustering* o la *fricción por contacto* entre partículas. Este trabajo plantea un nuevo mecanismo usando las fuerzas de lubricación, integrando los avances fundamentales del área de tribología de fluidos bajo confinamiento en la reología de suspensiones concentradas, a través del aumento en la viscosidad por confinamiento extremo (Bureau, 2010; Jabbarzadeh et al., 1997; Luengo et al., 1996, 1997). En el sistema, que en este trabajo se toma en una configuración de flujo cortante simple entre placas paralelas, la capa de lubricación que se encuentra entre las superficies de los pares de partículas cercanas experimenta confinamiento extremo a medida que las partículas se acercan unas a otras debido a la rapidez de corte impuesta por las placas en movimiento. Este aumento de viscosidad por confinamiento tiene un impacto directo en la magnitud de la fuerza de lubricación, factor que puede usarse a través de una funcionalización de la viscosidad con la separación entre partículas para promover y reproducir los fenómenos CST y DST (López-Aguilar et al., 2022).

Se realizan muchas simulaciones considerando al fluido de suspensión como New-

toniano (Morton y Jeddrey, 2014; Tanner, 2014, 2018). En el presente trabajo, las simulaciones del flujo cortante simple impuesto sobre la suspensión se harán con una matriz con un comportamiento no Newtoniano, i.e. usando el modelo biviscoso funcionalizado (Kumar et al., 2020; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a; López-Aguilar et al., 2022), que intrínsecamente promueven una respuesta reológica no Newtoniana más compleja que aquella obtenida con un fluido Newtoniano (Mewis y Wagner, 2009; Morton y Jeddrey, 2014). De este modo, la viscosidad de la capa de lubricación que pasa a través de la separación entre partículas dependerá de la rapidez de corte  $\dot{\gamma}$  y de la separación entre la superficie de las partículas,  $h_0$ , i.e.  $\eta(\dot{\gamma}, h_0)$ .

## 1.2. Hipótesis

- El trabajo pretende mostrar que las fuerzas de lubricación son lo suficientemente grandes como para promover el CST y DST al incluirse el efecto del aumento de viscosidad por confinamiento. La simulación numérica que consiste en modelar la matriz como un fluido no Newtoniano funcionalizado con respecto a la separación entre la superficie de partículas, resuelto numéricamente con el método de Dinámica de Lubricación (Capítulo 3), podrá reproducir los fenómenos CST y DST observados para las suspensiones concentradas.
- Los parámetros para funcionalizar el modelo biviscoso contienen información física importante para la descripción del mecanismo del CST y DST.
- Las fuerzas de lubricación involucran la microestructura de la suspensión, en la cual las interacciones y el número de interacciones entre las partículas sólidas, en conjunto con el comportamiento de la capa de lubricación que pasa entre

de estas, permiten la manifestación del CST o DST.

## 1.3. Objetivos

### 1.3.1. Objetivos generales

1. Proponer un marco teórico que proporcione una explicación cualitativa alterna basada en fuerzas de lubricación, para la reología de suspensiones concentradas no coloidales de partículas esféricas rígidas y lisas en matrices no Newtonianas, a través de simulación numérica con métodos Lagrangianos de Dinámica de Lubricación de sistemas particulados (Bian y Ellero, 2014; Kumar et al., 2020; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a,b; López-Aguilar et al., 2022). Se toma como base las fuerzas de lubricación entre partículas bajo confinamiento extremo, lo cual se fundamenta en estudios de tribología, como el mecanismo que promueve el engrosamiento al corte continuo (CST, del inglés: Continuous Shear-Thickening) y discontinuo (DST, del inglés Discontinuous Shear-Thickening).
2. Proponer una funcionalización que caracterice reológicamente un fluido de suspensión (matriz) no Newtoniano a través de un modelo biviscoso funcionalizado (Kumar et al., 2020; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a; López-Aguilar et al., 2022), con dependencia de la separación entre partículas en suspensiones concentradas para incluir el efecto de aumento de la viscosidad promovido por el confinamiento desde un punto de vista tribológico (Bureau, 2010; Jabbarzadeh et al., 1997; Luengo et al., 1996, 1997).

### 1.3.2. Objetivos específicos

1. Crear un modelo de un sistema que simule una suspensión concentrada de partículas esféricas sólidas no coloidales con fracciones de volumen  $\phi = \{0.40, 0.45, 0.48\}$ .
2. Utilizar un programa de descripción Lagrangiana basado en la Dinámica de Lubricación (Kumar et al., 2020, 2021) para resolver el sistema compuesto por una matriz no Newtoniana y partículas sólidas esféricas suspendidas en dicha matriz. Desarrollar e implementar herramientas que permitan el post-procesado de datos para obtener los elementos que expliquen los resultados.
3. Interpretar físicamente los parámetros que se obtienen a partir de funcionalizar el modelo biviscoso (Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a) con respecto a la separación entre la superficie de las partículas.
4. Describir a través de las fuerzas de lubricación no Newtonianas el mecanismo que permite el CST y DST en las suspensiones concentradas de partículas esféricas sólidas no coloidales.

## 1.4. Marco teórico

### Suspensiones concentradas

Las suspensiones están compuestas por partículas rígidas dispersas en un medio de suspensión, comúnmente llamado matriz en la literatura de reología de suspensiones (Bourrienne et al., 2020; Mewis y Wagner, 2009; Morton y Jeddrey, 2014); un ejemplo común es la suspensión de almidón de maíz en agua (Abdoulaye et al., 2017; Hermes et al., 2018), es decir, una mezcla de partículas sólidas y un líqui-

do viscoso. Las suspensiones concentradas exhiben un comportamiento no lineal en sus propiedades reológicas cuando se someten a flujo, incluso si las partículas están suspendidas en una matriz Newtoniana (el fluido más simple) bajo condiciones en el que los efectos inerciales pueden ser ignorados, i.e. a números de Reynolds bajos (Brown y Jeager, 2014; Morton y Jeddrey, 2014).

Para las suspensiones concentradas, con fracciones de volumen con  $\phi \geq 0.4$  (definida como la relación entre volumen de las partículas sólidas entre el volumen de la suspensión) (Brown et al., 2010; Mewis y Wagner, 2009; Morton y Jeddrey, 2014), se observa que la viscosidad de la suspensión cambia con la rapidez de corte, y las primera y segunda diferencias de esfuerzos normales son diferentes de cero y negativas, lo que evidencia que estos materiales exhiben viscoelasticidad, a pesar de que la matriz sea Newtoniana (Abdoulaye et al., 2017; Brown y Jeager, 2014; Denn et al., 2018; Wagner y Brady, 2009). El valor negativo de  $N_1$  para las suspensiones concentradas se considera como una característica reológica inusual y diferente que contrasta con el valor positivo de  $N_1$  para fluidos viscoelásticos (Seto y Giusteri, 2018). En contraste, un fluido Newtoniano sin partículas en suspensión muestra una viscosidad constante con respecto a la rapidez de corte y diferencias de esfuerzos normales nulas. Las propiedades reológicas que muestran las suspensiones concentradas son variadas y dependen de la fracción de volumen de partículas en suspensión, y de las interacciones entre partículas (Stickel y Powell, 2005; Mewis y Wagner, 2009). También dependen de la forma y tamaño de las partículas (Stickel y Powell, 2005; Mewis y Wagner, 2009). Los estudios fundamentales se realizan con esferas monodispersas; sin embargo, los sistemas reales difieren de estos sistemas ideales al ser polidispersos o al tener partículas con formas irregulares (Stickel y Powell, 2005;

Mewis y Wagner, 2009). Cuando las dimensiones de las partículas son de orden micrométrico ( $10^{-6}$  m) o mayor, las fuerzas Brownianas se pueden despreciar, y las fuerzas de lubricación (o también llamadas hidrodinámicas) dominan en el sistema (Guy et al., 2015; Mewis y Wagner, 2009; Tanner, 2014, 2018); a estas suspensiones con partículas relativamente grandes se les conoce como suspensiones no coloidales. De forma complementaria, las suspensiones coloidales son aquellas que están formadas por partículas suspendidas con dimensiones menores a un micrómetro y cuya respuesta reológica por consecuencia, además de las fuerzas de lubricación, se ve influenciada por el movimiento y fuerzas de naturaleza Browniana (Cwalina y Wagner, 2014; Ness et al., 2022; Wagner y Brady, 2009).

En soluciones semi-diluidas con  $\phi < 0.05$ , las suspensiones muestran un adelgazamiento al corte, es decir, la viscosidad de la suspensión disminuye al aumentar la rapidez de corte. Este comportamiento resulta de fuerzas hidrodinámicas de largo alcance y posiblemente de una formación de estructuras inducidas por la rapidez de corte (Tanner, 2014). Para estas suspensiones diluidas existen modelos matemáticos analíticos que describen estos fenómenos (Stickel y Powell, 2005; Tanner, 2014, 2018). En comparación con las suspensiones diluidas, las suspensiones concentradas con una fracción de volumen relativamente alta,  $\phi \geq 0.4$ , exhiben fenómenos reológicos interesantes reportados en la literatura mediante tres fases de flujo distintas, de acuerdo con la rapidez de corte aplicada a la suspensión: (i) adelgazamiento al corte a bajas rapidezces de corte, seguido por (ii) el engrosamiento al corte a rapidezces de corte intermedias y (iii) una tercera fase en donde, dependiendo de la composición de la suspensión, se puede observar un segundo adelgazamiento al corte o un fenómeno de fractura (Brown et al., 2010; Morton y Jeddrey, 2014; Seto et al., 2013; Wagner y



Brady, 2009). Como consecuencia de estos fenómenos que presentan las suspensiones concentradas, existe un área activa de investigación, tanto en experimentos como en simulaciones (Guy et al., 2015; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a; Lee et al., 2022; Mewis y Wagner, 2009; Wyart y Cates, 2014) para ser capaces de reproducirlos.

La tercera fase que ocurre a altas rapidezces de corte puede presentar dos fenómenos diferentes que han sido registrados experimentalmente. El primero es un adelgazamiento al corte, en el cual la viscosidad de la suspensión decrece al aumentarse la rapidez de corte; es decir, la suspensión vuelve a fluir (Brown y Jeager, 2014; Guy et al., 2015; Wagner y Brady, 2009). El segundo comportamiento consiste en una fractura del material que se manifiesta por una viscosidad muy alta en la cual el DST se sostiene al aumentarse la rapidez de corte hasta observar una fractura de la muestra (comportamiento tipo sólido de la suspensión); (Brown y Jeager, 2014; Hermes et al., 2018; Hoffman, 1972; Seto et al., 2013). El engrosamiento al corte discontinuo es un fenómeno que puede ser interpretado en términos de una inestabilidad; sin embargo, la naturaleza de esta inestabilidad y su origen siguen siendo elusivas (Gibaud et al., 2018). Durante el DST pueden existir regiones de la suspensión que experimenten una misma rapidez de corte, pero con un esfuerzo cortante diferente (Chacko et al., 2018). Este comportamiento es una inestabilidad que ocurre en la dirección neutral del flujo; lo cual ocurre cuando el esfuerzo en la dirección del flujo de un sistema con una rapidez de corte homogénea decrece al aumentar la rapidez de corte (Dhont y Briels, 2008).

El engrosamiento al corte es identificado como un aumento súbito y reversible de la viscosidad con aumentos pequeños de la rapidez de corte (Brown et al., 2010; Stickel y Powell, 2005; Wagner y Brady, 2009). La magnitud del engrosamiento al corte

se promueve por el aumento de la fracción de volumen, con valores intermedios de  $0.05 < \phi < 0.4$  se observa un engrosamiento al corte continuo (CST, del inglés *Continuous Shear Thickening*), que se caracteriza por el aumento leve, continuo y suave de la viscosidad con la rapidez de corte (Guy et al., 2015; Jamali y Brady, 2019; Wagner y Brady, 2009; Tanner, 2018). Para fracciones de volumen altas,  $\phi \geq 0.4$ , el aumento de la viscosidad es un salto discontinuo, cuyo máximo puede localizarse en niveles de órdenes de magnitud mayores a la viscosidad a bajas rapidezces de corte, y se promueve con pequeños aumentos de la rapidez de corte (Abdoulaye et al., 2017; Guy et al., 2015; Brown y Jeager, 2014). En estas instancias incluso la suspensión se puede percibir físicamente como un sólido (Hermes et al., 2018; Seto et al., 2013). Este fenómeno se conoce como engrosamiento al corte discontinuo (DST, del inglés *Discontinuous Shear Thickening*). En la Fig. 1.1, con datos experimentales de Hoffman (1972), se pueden observar estos fenómenos.

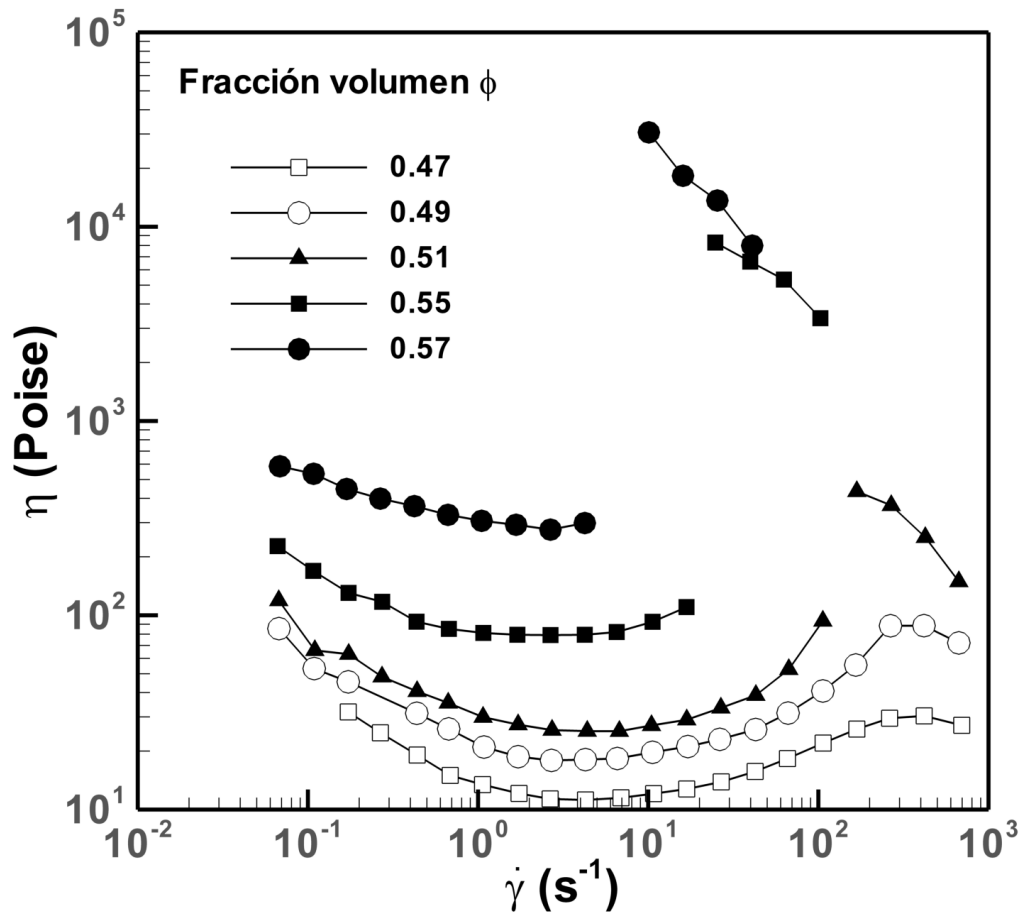


Figura 1.1: Efecto de la fracción de volumen  $\phi$  de partículas de PVC  $1.25 \mu m$  en ftalato de dioctilo.

### Aplicación

Las suspensiones no coloidales se encuentran de manera ubicua en la vida diaria, algunos ejemplos son: sistemas biológicos (sangre) (Stickel y Powell, 2005), productos del hogar (pinturas), procesos industriales (lodos de deshecho) (Morris, 2020; Stickel y Powell, 2005), cosméticos (cremas), productos de consumo (pasta de dientes) o en materiales de ingeniería (cemento) (Bourrienne et al., 2020; Wagner y Brady, 2009).

También, se ha visto interés en el desarrollo de prendas de protección balística de bajo costo, ligeras y portables, usando fluidos que engrosan al corte (Ding et al., 2011; Gürgen et al., 2017; Lee et al., 2002, 2003), y en el desarrollo de patentes con telas sensibles a la deformación (Chiou et al., 2008). Su uso se extiende a la prevención de bloqueos de tuberías y equipos industriales, aplicaciones deportivas y automotrices (Ding et al., 2011, 2013), o en las operaciones de mezclado y revestimiento de superficies en la industria (Barnes, 1989). El interés en la reología suspensiones ha aumentado recientemente por las interrogantes científicas que aún requieren explicación y por las aplicaciones tecnológicas de suspensiones concentradas (Abdoulaye et al., 2017; Bian y Ellero, 2014; Bourrienne et al., 2020; Guy et al., 2015; Kumar et al., 2020; Mewis y Wagner, 2009).

## **Mecanismos**

La falta de Ecuaciones constitutivas que relacionen el esfuerzo con la rapidez de corte durante el DST deja inexploradas aplicaciones para las suspensiones concentradas (Clavaud et al., 2017). Uno de los sistemas estudiados más representativos es la suspensión concentrada de almidón de maíz en agua (Abdoulaye et al., 2017; Hermes et al., 2018), el cual muestra un comportamiento líquido o sólido de acuerdo con la rapidez de corte impuesta. Este sistema es recurrente para evidenciar que incluso partículas suspendidas en matrices Newtonianas exhiben manifestaciones no Newtonianas. Debido a esto, se han propuesto diferentes mecanismos que intentan explicar la causa del CST-DST. Un primer mecanismo es la *transición orden-desorden* (Hoffman, 1972, 1973), que describe que, a bajas rapidezces de corte, existe un flujo ordenado con pocas interacciones entre partículas que se vuelve inestable a altas rapidezces de corte, tal que el sistema evoluciona a un flujo desordenado con muchas

interacciones. Este mecanismo fue propuesto a través de mediciones ópticas, en las cuales se observa un cambio en los patrones de difracción, revelando la rapidez de corte de inicio del DST (Hoffman, 1972). La *aglomeración* o *hydroclustering*, es el mecanismo que atribuye el DST a las aglomeraciones de las partículas “pegadas” o agrupadas por la fuerza de lubricación ejercida por el fluido entre las partículas. La competencia entre fuerzas interparticulares que tienden a mantener separadas a las partículas, y el esfuerzo cortante impuesto que fuerza a las partículas a acercarse en la dirección de compresión disminuyendo la distancia entre ellas, establece una dinámica de fuerzas compleja en el seno de la suspensión. Las aglomeraciones de partículas resultantes se mueven con mayor dificultad debido a su tamaño, ofreciendo mayor resistencia a fluir, lo que se ve reflejado en el aumento de la viscosidad (Brady y Bossis, 1985, 1988; Lee et al., 2022; Wagner y Brady, 2009). Otro mecanismo propuesto es el de *fricción por contacto*, que propone que el DST resulta del contacto entre las superficies de las partículas promovido por las altas rapidezces de corte impuestas (Mari et al., 2015; More y Ardekani, 2021; Morris, 2018; Seto et al., 2013). Se sabe que este contacto entre superficies es capaz de proveer la fuerza necesaria para producir DST (Denn et al., 2018; Morton y Jeddrey, 2014; Lin et al., 2016), sin embargo, la naturaleza física del contacto sigue poco clara e inaccesible experimentalmente (Clavaud et al., 2017). Las técnicas empleadas, hechas a una fracción de volumen dada, proveen información de la rapidez de corte, esfuerzo cortante y viscosidad, pero no permiten determinar el coeficiente de fricción, el cual es el parámetro de importancia para estos modelos (Clavaud et al., 2017). El valor del coeficiente de fricción tiene un efecto considerable en la viscosidad relativa de la suspensión a fracciones de volumen altos  $\phi \geq 0.4$ . Diversos modelos usan un valor constante para el coeficiente de fricción en un rango de 0 – 1, sin embargo,

no se espera que un factor de fricción constante describa con precisión la fricción en las suspensiones (Tanner, 2018). Además, las fuerzas que no son de lubricación producen fuerzas normales inconsistentes con la física, lo que muchas veces provoca indeterminaciones en modelos teóricos (Gurnon y Wagner, 2015). Por otro lado, la fuerza de lubricación Newtoniana es insuficiente para reproducir el DST observado experimentalmente, ya que sólo se percibe un leve aumento de la viscosidad de la suspensión al aumentar la rapidez de corte (Brown y Jeager, 2014; Wagner y Brady, 2009). Sin embargo, la fuerza de lubricación Newtoniana es capaz de predecir el signo negativo reportado para la primera y segunda diferencias de esfuerzos normales  $N_1$  y  $N_2$  (Cwalina y Wagner, 2014; Lee et al., 2022; Seto y Giusteri, 2018; Zarraga et al., 2000).

## **Tribología**

Se han reportado estudios de fluidos en confinamiento extremo en el área de la Física que estudia la fricción, conocida como Tribología, en los que se observa un aumento significativo de la viscosidad al colocar un fluido entre dos superficies situadas a una distancia muy corta, con una separación en el orden de nanómetros (Bureau, 2010; Jabbarzadeh et al., 1997; Luengo et al., 1996, 1997). En la Fig. 1.2 se muestran datos experimentales de Luengo et al. (1997), se puede notar que a separaciones relativamente grandes (en geometrías con separaciones de 250 nm y mayores), la respuesta reológica del fluido corresponde a un fluido Newtoniano con viscosidad constante  $\eta_{bult}$ . Sin embargo, bajo cierto nivel de confinamiento (con separaciones menores de 250 nm), la viscosidad aumenta dramáticamente (entre uno y cuatro órdenes de magnitud) y presenta un comportamiento no Newtoniano (adelgazante al corte). Cabe señalar que este aumento extremo de viscosidad promovido por el

confinamiento ocurre en fluidos que nominalmente se califican como Newtonianos en condiciones de flujo no confinado. Este aumento de viscosidad se relaciona con el arreglo molecular de las finas capas confinadas que exhiben un comportamiento tipo sólido (Luengo et al., 1996). Los líquidos sobreenfriados que se aproximan a su temperatura de transición vítrea, en condiciones de confinamiento comparten cualidades como: el aumento dramático de la viscosidad y un comportamiento no Newtoniano (adelgazamiento al corte); (Bureau, 2010). Por tanto, la propuesta para aumentar la fuerza de lubricación en la simulación de suspensiones concentradas de partículas no coloidales es, considerar un aumento de la viscosidad de la matriz a causa del confinamiento que experimenta al pasar por la estrecha separación entre las partículas en suspensión.

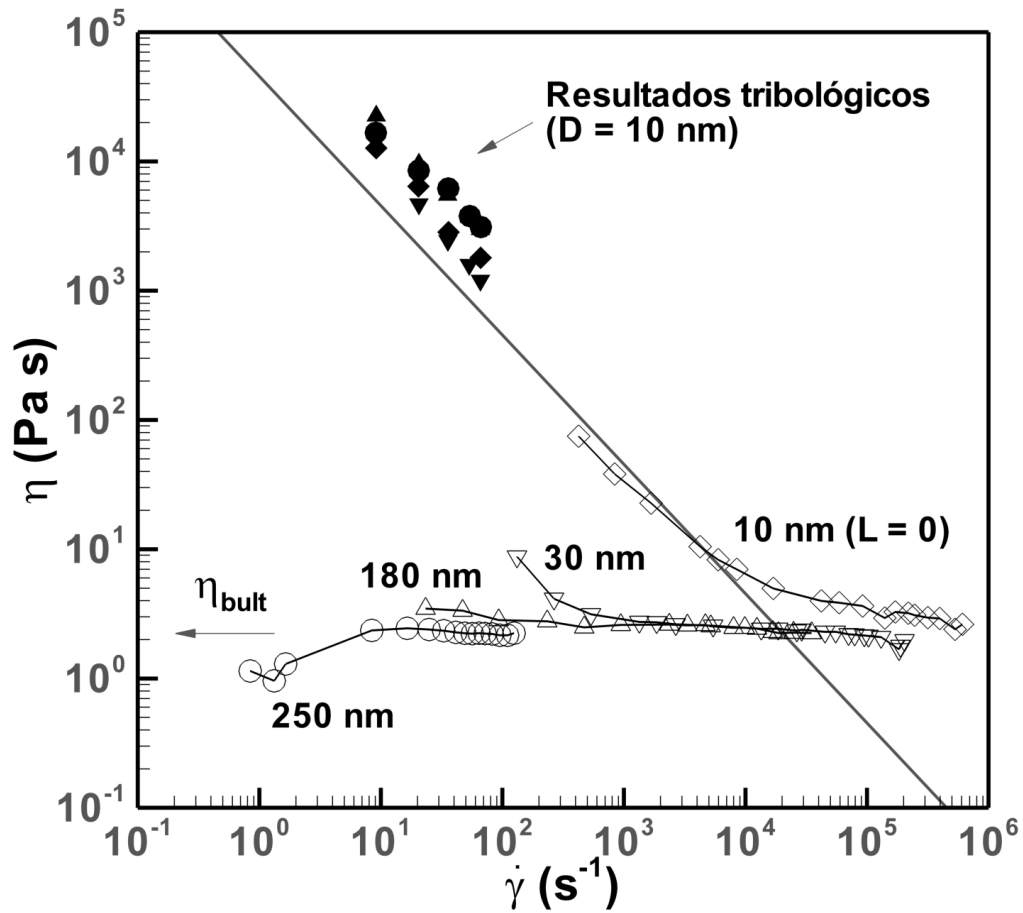


Figura 1.2: Símbolos en blanco, viscosidad efectiva  $\eta$  contra la rapidez de corte  $\dot{\gamma}$  para el polibutadieno PBD 7000 a cuatro separaciones de confinamiento entre superficies ( $L$  = longitud activa). Símbolos negros, viscosidad efectiva deducida de experimentos de fricción ( $D$  = espesor de la película).

### Fuerza de lubricación

La fuerza que se opone al movimiento de una partícula que se mueve a través de un fluido viscoso es usualmente denominada como fuerza hidrodinámica (el término *hidrodinámica* se debe a que el agua es el ejemplo más común) o fuerza de lubricación y depende de la forma de la partícula (Brown y Jeager, 2014; Sangtae y Karrila,



1991). La ley de Stokes (Bird et al., 2002) describe la fuerza de lubricación  $F^H$  para una sola partícula esférica en una matriz Newtoniana en régimen laminar, y expresa como:

$$F^H = -6\pi\mu aU, \quad (1.1)$$

$\mu$  en la Ecuación (1.1) es la viscosidad del fluido de suspensión,  $a$  es el radio de la partícula esférica y  $U$  es la velocidad con la que se mueve la partícula. Se observa en la Ecuación (1.1) que la fuerza de lubricación es proporcional a la viscosidad para este sistema de una sola partícula en un fluido viscoso.

Para las suspensiones con múltiples partículas sólidas, el movimiento de las partículas rige la evolución de la microestructura de la suspensión; al mismo tiempo, la microestructura determina las fuerzas que actúan sobre ellas. Cuando dos partículas suspendidas en una matriz se aproximan, el movimiento de cada partícula es influenciado por la otra, incluso en la ausencia de interacciones interparticulares como las fuerzas de Van der Waals o fuerzas electrostáticas (Sangtae y Karrila, 1991). El campo de velocidad generado por el movimiento de una partícula y las fuerzas asociadas son transmitidos a través de la matriz hacia las partículas vecinas con la que interactúa (ver Fig. 1.3); (Bian y Ellero, 2014; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016b; Sangtae y Karrila, 1991).

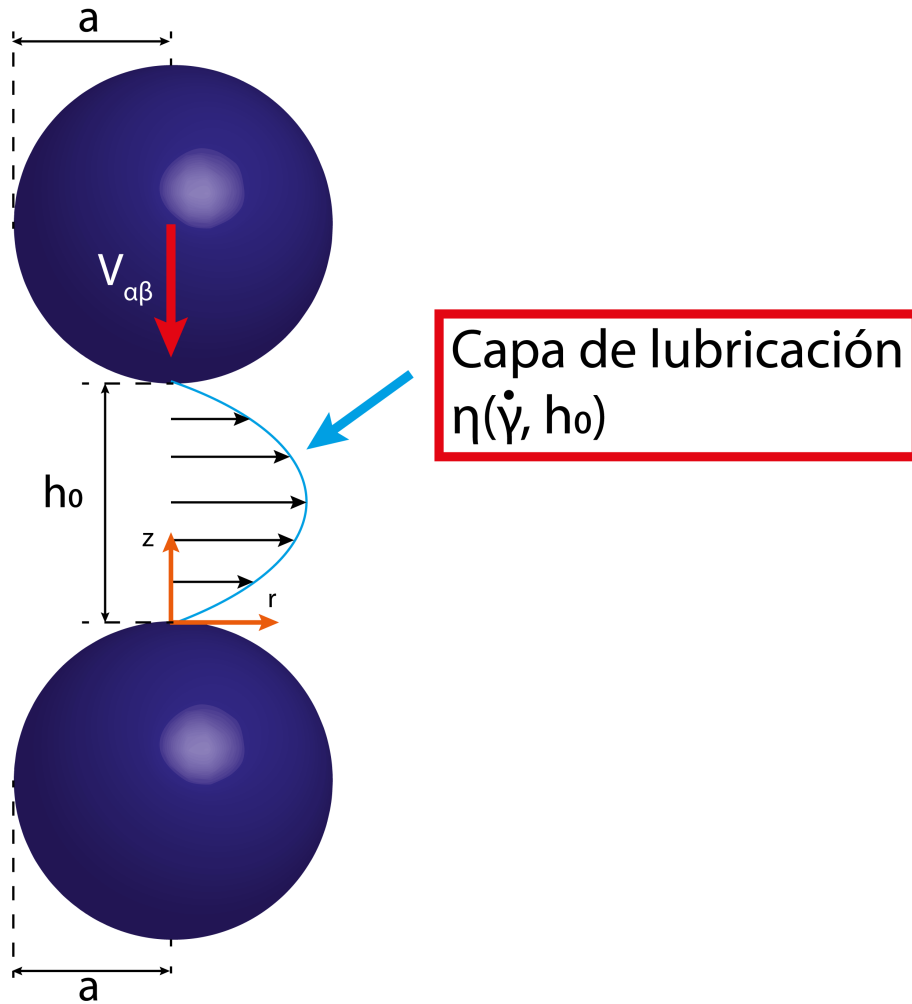


Figura 1.3: Par de partículas interactuando por fuerza de lubricación normal (*squeezing flow*). La capa de lubricación es el fluido que pasa entre la superficie de un par de partículas lo suficientemente cercanas para que interactúen.

## Capítulo 2

# Modelo Newtoniano generalizado

Para describir la reología no Newtoniana de la matriz se usa el modelo biviscoso, el cual pertenece a los modelos Newtonianos generalizados (GNF, del término en inglés *Generalized Newtonian Fluids*); (Bird et al., 2002), para los cuales la viscosidad de corte  $\eta$  es función de la magnitud de la rapidez de deformación  $|\dot{\gamma}| = \left[\frac{1}{2}(\dot{\gamma} : \dot{\gamma})\right]^{\frac{1}{2}}$ . De acuerdo con los reportes de tribología (Luengo et al., 1996), el fluido bajo confinamiento presenta un comportamiento no Newtoniano en el que la viscosidad adelgaza al corte. El modelo biviscoso describe este adelgazamiento al corte a partir de una función escalón. En las siguientes secciones se describen las particularidades de este modelo.

### **Modelo biviscoso funcionalizado (FBV)**

El modelo biviscoso fue originalmente formulado para describir la reología de materiales que presentaban un esfuerzo de cedencia a través de una respuesta escalonada con dos niveles constantes de viscosidad que cambian a una rapidez de corte crítica

(Tanner y Milthorpe, 1983). El modelo biviscoso funcionalizado (FBV) propuesto en este trabajo y descrito en la Ecuación (2.1), refleja una viscosidad bajo confinamiento,  $\eta_{conf}$ , a rapidezces de corte locales,  $\dot{\gamma}_{loc}$ , por debajo de una rapidez de corte crítica,  $\dot{\gamma}_{crit}(h_0)$ . Por otro lado, el modelo exhibe una viscosidad de bulto,  $\eta_{bult}$ , (correspondiente a la viscosidad de la matriz sin confinamiento) relativamente menor a rapidezces de corte locales más altas que  $\dot{\gamma}_{crit}(h_0)$ . La magnitud de la rapidez de corte local se define como  $|\dot{\gamma}_{loc}| = [\frac{1}{2}(\dot{\gamma}_{loc} : \dot{\gamma}_{loc})]^{\frac{1}{2}}$ , la cual representa la magnitud del tensor rapidez de deformación local  $\dot{\gamma}_{loc}$ , es decir, la rapidez de corte en la capa de lubricación que se encuentra entre las superficies de dos partículas cercanas.

$$\eta(\dot{\gamma}_{loc}, h_0) = \begin{cases} \eta_{conf}(h_0), & \text{si } |\dot{\gamma}_{loc}| < \dot{\gamma}_{crit}(h_0), \\ \eta_{bult}, & \text{si } |\dot{\gamma}_{loc}| \geq \dot{\gamma}_{crit}(h_0). \end{cases} \quad (2.1)$$

La transición entre  $\eta_{conf}(h_0)$  y  $\eta_{bult}$  está funcionalizada a través de una expresión exponencial en función de la separación entre partículas,  $h_0$ , tal que para  $h_0 > 0$  no hay contacto entre la superficie de las partículas, y se define como se indica en la Ecuación (2.2),

$$\eta_{conf}(h_0) = \Delta\eta * \exp\left(-\frac{h_0}{L}\right) + \eta_{bult}, \quad (2.2)$$

$\Delta\eta$  en la Ecuación (2.2) es el aumento de la viscosidad por confinamiento y  $L$  es una longitud crítica que modula el aporte de  $\Delta\eta$  a la viscosidad bajo confinamiento de acuerdo con la separación entre la superficie de las partículas. En las Figs. 2.1 y 2.2 se muestra el efecto de los parámetros  $A$  y  $L$  para el modelo FBV.

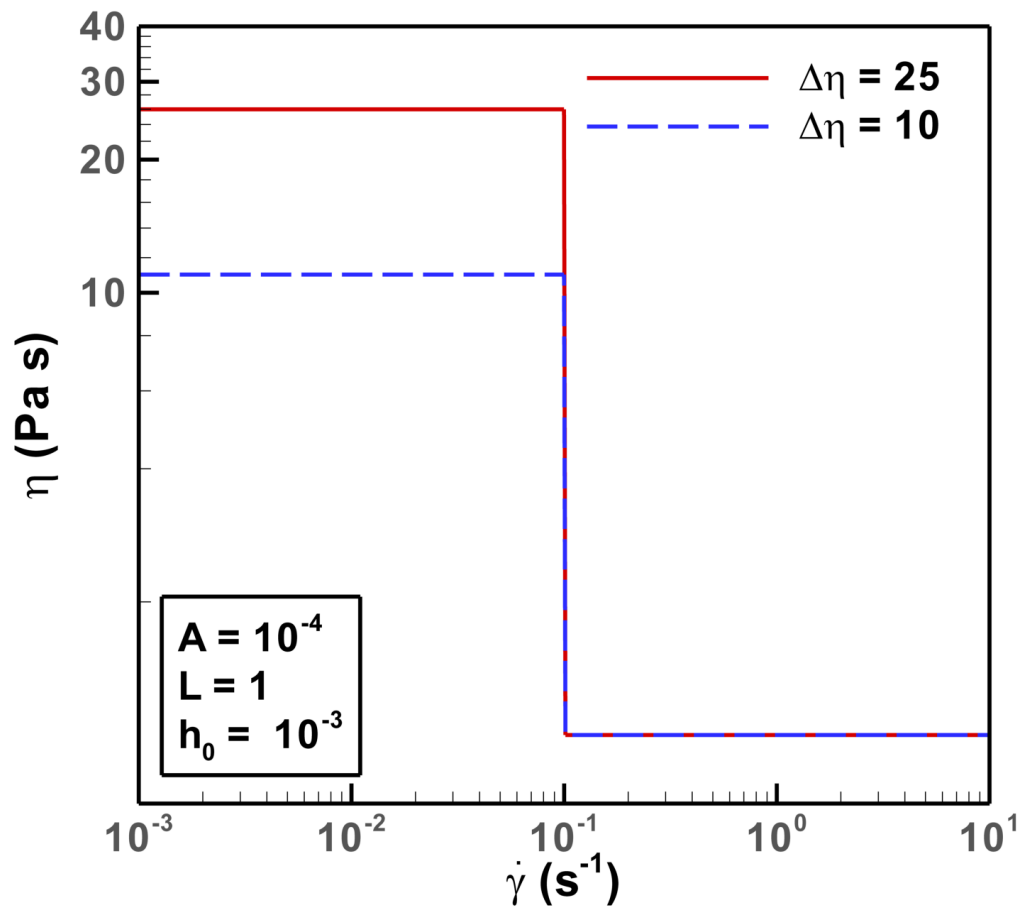


Figura 2.1: Respuesta de la viscosidad de la matriz  $\eta$  contra la rapidez de corte  $\dot{\gamma}$  con el modelo FBV para la variación del parámetro  $\Delta\eta = \{10, 25\}$  con  $A = 10^{-4}$ ,  $L = 1$ ,  $h_0 = 10^{-3}$ .

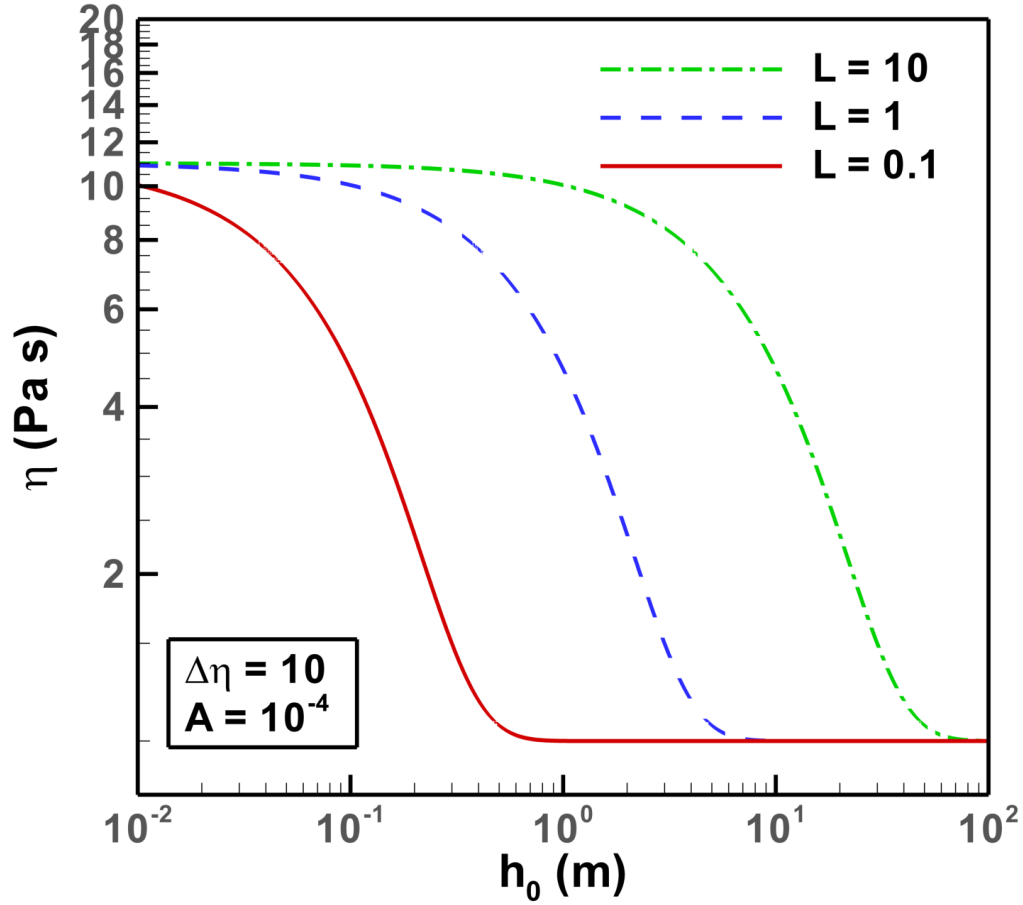


Figura 2.2: Respuesta de la viscosidad de la matriz  $\eta$  contra la separación entre partículas  $h_0$  con el modelo FBV para la variación del parámetro  $L = \{0.1, 1, 10\}$  con  $\Delta\eta = 10$ ,  $A = 10^{-4}$ .

Se puede notar que  $\eta_{conf}(h_0)$  será mayor a  $\eta_{bult}$ , excepto cuando  $\eta_{conf}(h \rightarrow \infty) \rightarrow \eta_{bult}$ . En el trabajo de Vázquez-Quesada y Ellero (2016a) se desarrolló la solución analítica para la fuerza de lubricación entre dos esferas para un fluido biviscoso. La solución analítica se puede usar en la simulación de suspensiones concentradas, como en Kumar et al. (2020) que proveen un mecanismo alternativo para la explicación del adelgazamiento al corte observado en experimentos de suspensiones concentradas no

coloidales con matrices Newtonianas. Un agregado al trabajo de Vázquez-Quesada y Ellero (2016a) que se propone en esta tesis, es la introducción de una rapidez de corte crítica variable con respecto a la separación entre partículas  $h_0$ ,  $\dot{\gamma}_{crit}(h_0)$ , en contraste con la rapidez de corte crítica constante usada en Kumar et al. (2020) y Vázquez-Quesada y Ellero (2016a). Esta función está definida en la Ecuación (2.3),

$$\dot{\gamma}_{crit}(h_0) = \frac{A}{h_0}, \quad (2.3)$$

$\dot{\gamma}_{crit}(h_0)$  en la Ecuación (2.3) es inversamente proporcional a la separación entre partículas  $h_0$  y proporcional al parámetro  $A$  (con unidades de longitud sobre tiempo) que modula el umbral de la rapidez de corte crítica para la activación de la respuesta biviscosa de la matriz. La funcionalización propuesta en la Ecuación (2.3) tiene el propósito de ampliar la rapidez de corte en la cual se presenta  $\eta_{conf}$ , y así mismo aumentar la magnitud de la fuerza de lubricación cuando la matriz se encuentre bajo confinamiento. En la Fig. 2.3 se muestra el efecto de  $A$  en el modelo biviscoso funcionalizado.

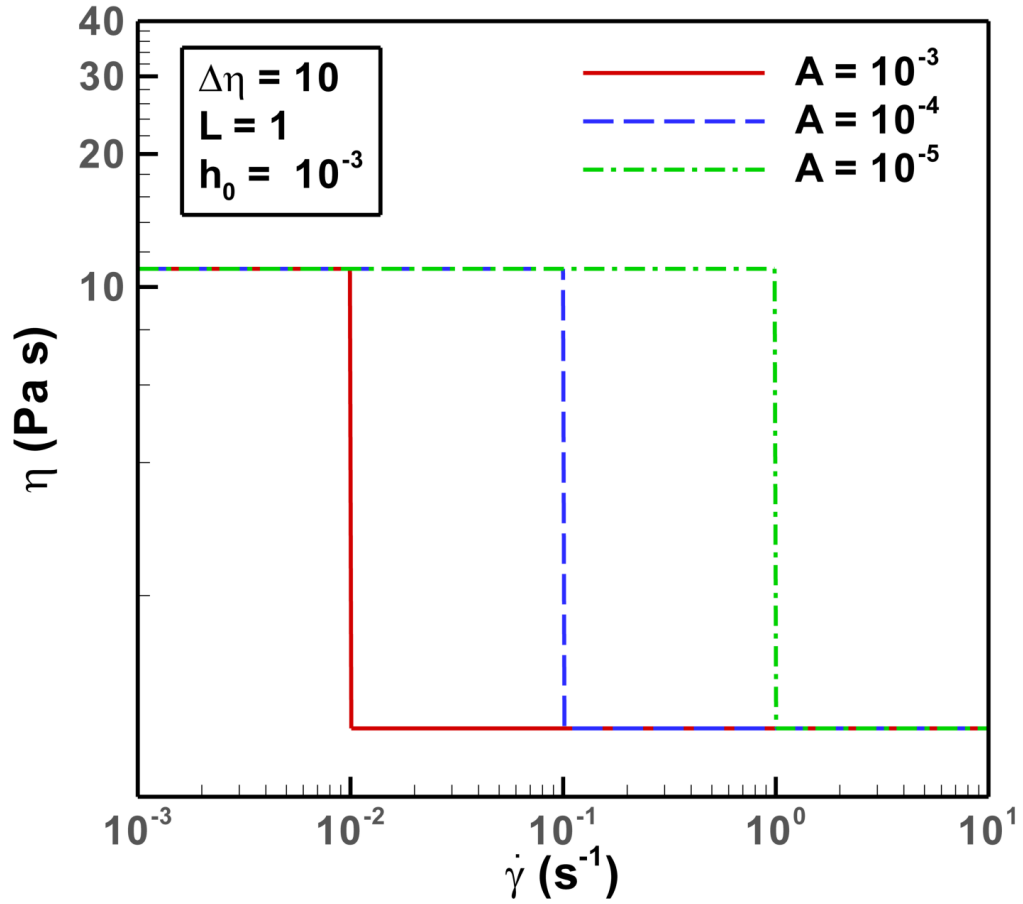


Figura 2.3: Respuesta de la viscosidad de la matriz  $\eta$  contra la rapidez de corte  $\dot{\gamma}$  con el modelo FBV para la variación del parámetro  $A = \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}$  con  $\Delta\eta = 10$ ,  $L = 1$ ,  $h_0 = 10^{-3}$ .

Con la funcionalización hecha a través de las Ecuaciones (2.2) y (2.3) se busca magnificar la viscosidad que manifiesta la matriz cuando la distancia entre partículas sea pequeña, la cual tiene un efecto directo en la fuerza de lubricación (Ball y Melrose, 1995), es decir, la fuerza de lubricación aumenta a medida que la distancia se acorta por efecto del confinamiento. Este efecto se puede notar en la Ecuación (2.6), en la cual la fuerza de lubricación Newtoniana con (comportamiento monoviscoso de



la matriz) es directamente proporcional a la viscosidad. La Ecuación (2.3) aumenta el umbral en el que la viscosidad bajo confinamiento se manifiesta a medida que se reduce la distancia entre partículas. Esto es similar a lo que se observa en estudios de tribología (Bureau, 2010; Jabbarzadeh et al., 1997; Luengo et al., 1996, 1997), en el que un líquido aparentemente Newtoniano muestra un aumento de viscosidad bajo confinamiento extremo. En la Fig. 2.4 se muestra el ajuste para datos experimentales de Luengo et al. (1997) con el modelo biviscoso funcionalizado.

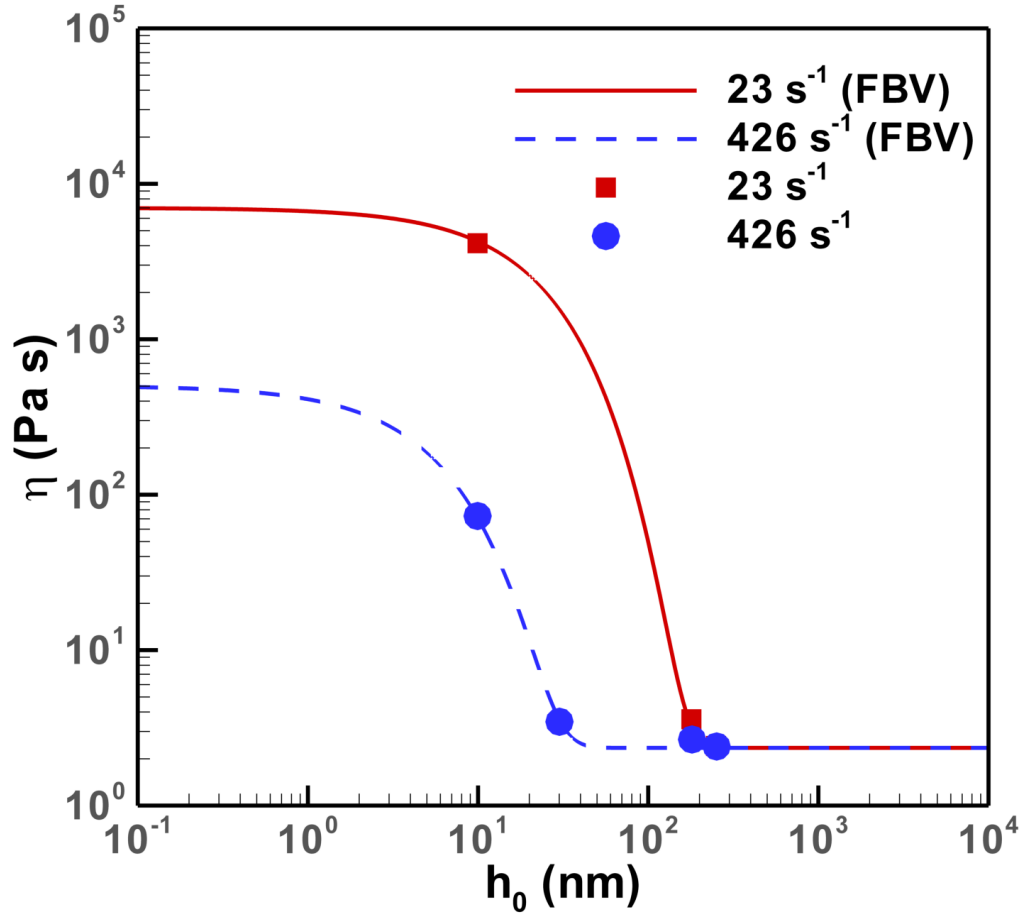


Figura 2.4: Viscosidad efectiva  $\eta$  contra la separación entre partículas  $h_0$ ; símbolos: Datos experimentales de Luengo et al. (1997); líneas continuas: Modelo bivisco funcionalizado (FBV) para  $\dot{\gamma} = \{23, 426\} s^{-1}$  con  $\Delta\eta = \{7000, 500\} Pa s$ ,  $\eta_{bult} = 2.35 Pa s$ ,  $A = \{10^6, 5000\} m s^{-1}$ ,  $L = \{20, 5\} nm$ .

Por otro lado, la Ecuación (2.2), que describe la magnitud de  $\eta_{conf}$ , la cual está modulada por un término exponencial negativo que depende de  $h_0$ , dicta que, a distancias cortas, la viscosidad bajo confinamiento  $\eta_{conf}$  es la viscosidad del bulto  $\eta_{bult}$  más el aporte de la viscosidad por confinamiento  $\Delta\eta$ . Con esta descripción del comportamiento de la viscosidad de la matriz, la capa de lubricación tendrá

una alta resistencia a fluir, es decir, la matriz experimentará una alta viscosidad ( $\eta_{conf} = \Delta\eta(h_0) + \eta_{bult}$ ) cuando la rapidez de corte local sea menor que la rapidez de corte crítica,  $\dot{\gamma}_{loc} < \dot{\gamma}_{crit}(h_0)$ .

De acuerdo con el trabajo de Vázquez-Quesada y Ellero (2016a), se puede derivar la expresión analítica que permite discernir entre una respuesta monoviscosa o una biviscosa, en función de la distancia límite,  $h_0^{lim}$ , entre dos partículas. Para ello, se calcula la posición radial  $r$  en la cual se presenta el valor máximo de la rapidez de corte local sobre la superficie de la partícula, la cual es  $r_{max} = \sqrt{\frac{2}{3}ah_0}$ . En  $r_{max}$ , el valor de la rapidez de corte local máxima es  $\dot{\gamma}_{loc}^{max} = \frac{9}{8} \frac{V}{h_0} \sqrt{\frac{3}{2} \frac{a}{h_0}}$ , en la cual se observa una dependencia con la separación entre partículas de  $h_0^{-3/2}$ . La condición para que se presente una respuesta biviscosa en alguna posición radial es que  $\dot{\gamma}_{crit} < \dot{\gamma}_{loc}^{max}$ . En el trabajo de Vázquez-Quesada y Ellero (2016a) se utiliza  $\dot{\gamma}_{crit}$  constante, por lo que al igualar  $\dot{\gamma}_{crit} = \dot{\gamma}_{loc}^{max}$ , se obtiene que  $h_0^{lim} = \frac{3}{4} \sqrt[3]{\frac{9V^2a}{\dot{\gamma}_{crit}^2}}$ . En este trabajo, usando la Ecuación (2.3), al igualar  $\dot{\gamma}_{crit} = \dot{\gamma}_{loc}^{max}$  se obtiene la Ecuación (2.4),

$$h_0^{lim} = \frac{243}{128} \frac{V^2 a}{A^2}. \quad (2.4)$$

Una respuesta monoviscosa hace referencia a que la capa de lubricación solo tendrá una viscosidad, en este caso  $\eta_{conf}(h_0)$ ; dicho de otro modo, la rapidez de corte local  $\dot{\gamma}_{loc}$  que experimenta toda la capa de lubricación a lo largo de la distancia entre la superficie de las partículas siempre es menor que la rapidez de corte crítica  $\dot{\gamma}_{crit}$ . Una respuesta biviscosa, por otro lado, se refiere a que la capa de lubricación presenta dos viscosidades, una sección donde  $\dot{\gamma}_{loc} \geq \dot{\gamma}_{crit}$  estableciendo una viscosidad de bulto  $\eta_{bult}$ ; esta sección con viscosidad de bulto  $\eta_{bult}$  se empieza a generar en las superficies

de las partículas. La otra sección se presenta cuando  $\dot{\gamma}_{loc} < \dot{\gamma}_{crit}$  con una viscosidad bajo confinamiento  $\eta_{conf}(h_0)$ . Esta sección con viscosidad de confinamiento  $\eta_{conf}$  se encuentra en la parte media de la separación de las superficies de las partículas.

De lo anterior se deriva la fuerza de lubricación normal (en adelante llamada fuerza de lubricación, representada por  $F_{lub}$ ) para el comportamiento monoviscoso  $F_1$  y biviscoso  $F_2$ , respectivamente, en función de  $h_0^{lim}$  dada en la Ecuación (2.5),

$$F_{lub} = \begin{cases} F_1, & \text{si } h_0 \geq h_0^{lim}, \\ F_2, & \text{si } h_0 < h_0^{lim}. \end{cases} \quad (2.5)$$

En las Ecuaciones (2.6) y (2.7) se establecen las expresiones para  $F_1$  y  $F_2$  respectivamente, en el cual,  $a$  representa el radio reducido  $\frac{1}{a} = \frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2}$  (en este trabajo se utilizan partículas monodispersas, i.e.  $a_1 = a_2$ ),  $V$  la velocidad relativa entre par de partículas,  $r_1$  y  $r_2$  son las posiciones en el cual  $\dot{\gamma}_{loc} = \dot{\gamma}_{crit}$ . La fuerza de lubricación  $F_1$  es exactamente igual a la fuerza de lubricación para un fluido Newtoniano al considerar  $\eta_{conf} = \text{constante}$ ,  $F_2$  regresa a la expresión Newtoniana al establecer  $\eta_{conf} = \eta_{bult} = \text{constante}$ .

$$F_1 = \frac{6\pi[\eta_{conf}]Va^2}{h_0}, \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned}
F_2 = & \\
& 2\pi \left\{ \frac{3[\eta_{conf}]Va^2}{h_0} + \right. \\
& 3\left[ [\eta_{conf}] - \eta_{bult} \right] Va^2 \left[ \frac{1}{h(r_2)} - \frac{1}{h(r_1)} \right] * \\
& \left( 2 - h_0 \left[ \frac{1}{h(r_1)} + \frac{1}{h(r_2)} \right] \right) + \\
& 2a\dot{\gamma}_{crit}(h_0) \left[ [\eta_{conf}] - \eta_{bult} \right] \left[ (r_2 - r_1) + (h(r_1) - 2h_0) \sqrt{\frac{2a}{h_0}} \right. \\
& \left. \left. \left( \tan^{-1} \left( \frac{r_2}{\sqrt{2ah_0}} \right) - \tan^{-1} \left( \frac{r_1}{\sqrt{2ah_0}} \right) \right) \right] \right\}. \tag{2.7}
\end{aligned}$$

Un valor alto de la viscosidad,  $\eta_{conf}$ , puede presentarse a bajas rapidezces de corte impuestas (identificada en forma adimensional como  $SR$  en adelante), como con  $SR < 1$ . Sin embargo, a estos bajos valores de  $SR$  se espera que las partículas se mantengan separadas. Por lo tanto, la aportación de la viscosidad por confinamiento  $\Delta\eta$  se reduce. A medida que se aumenten los valores de  $SR$  las partículas se acercarán ( $h_0 \rightarrow 0$ ), lo que permitirá que el argumento de la exponencial de la Ecuación (2.2) sea pequeño y aumente la aportación de  $\Delta\eta$ . Este aumento de la aportación de  $\Delta\eta$  al aumentar los valores de  $SR$  tiene un impacto directo en la fuerza de lubricación que podría permitir que las fuerzas entre las partículas sean lo suficientemente grandes como para observar un aumento de la viscosidad relativa,  $\eta_R$ , de la suspensión (observando ya sea CST o DST). En el otro extremo, cuando  $\dot{\gamma}_{loc} \geq \dot{\gamma}_{crit}(h_0)$ , la viscosidad que mostrará la capa de lubricación será la viscosidad de bulto,  $\eta_{bult}$ , y será independiente de la separación entre las partículas,  $h_0$ . Se espera ver este bajo valor de la viscosidad cuando  $SR$  sea relativamente alta. Cuando

esta baja viscosidad esté presente en la capa de lubricación, la fuerza de lubricación será pequeña (cercana o igual a una fuerza de lubricación Newtoniana) y las fuerzas entre las partículas serán menores, permitiendo que el sistema se deforme fácilmente, es decir,  $\eta_R$  disminuirá.

## Capítulo 3

# Método numérico de Dinámica de Lubricación

El método de Dinámica de Lubricación (LD, del término en inglés *Lubrication Dynamics*) se utiliza para realizar simulaciones de la mecánica de sistemas particulados. Este método Lagrangiano es ideal para la descripción de la reología de suspensiones concentradas no coloidales, en el cual se calculan la dinámica de las fuerzas y el flujo en el espacio entre las partículas vecinas, y sus consecuencias en el comportamiento mecánico de la suspensión. Bian y Ellero (2014) propusieron un esquema semi-implícito de integración para resolver las velocidades de traslación y rotación de las partículas acoplado al método SPH (del término en inglés *Smoothed Particle Hydrodynamics*), el cual está construido para hacer cumplir los principios de conservación de momentum lineal y angular. El método considera las fuerzas normales (*squeezing flow*) y fuerzas tangenciales (*shearing flow*) para la solución del sistema. Usando estas fuerzas se puede calcular la fuerza total sobre una partícula a través

de la contribución de cada una de las interacciones con las partículas vecinas delimitadas por  $r^c$ , que simboliza el radio de corte, para registrar una interacción entre dos partículas, el esquema se muestra en la Fig. 3.1. El método desarrollado por Kumar et al. (2021) utiliza un novedoso método de Dinámica de Lubricación semi-implícito que resuelve de forma efectiva la singularidad de la fuerza de lubricación cuando las partículas se acercan a tal distancia de casi hacer contacto entre ellas, lo que conlleva a restricciones en el método numérico como el tamaño de paso (Ball y Melrose, 1995).

También, se considera una fuerza de repulsión de corto alcance entre las partículas en adición a la fuerza de lubricación (Bian y Ellero, 2014; Kumar et al., 2021). A pequeñas rapideces de corte, la fuerza de repulsión evita que las partículas entren en contacto produciendo fuerza por fricción (Chacko et al., 2018; Clavaud et al., 2017; Kumar et al., 2021); de este modo se previene que toda la capa de lubricación que existe entre las partículas se drene y la viscosidad diverja debido al contacto entre ellas (Clavaud et al., 2017). Durante las simulaciones, el cálculo se detiene (la simulación diverge) al detectar este contacto o traslape entre partículas, el cual se alcanza cuando la fuerza de lubricación sobrepasa la fuerza de repulsión (Kumar et al., 2021).

La solución usa el modelo propuesto por Ball y Melrose (1997) para calcular las propiedades de la suspensión a través de tomar en cuenta únicamente las fuerzas de lubricación a corta distancia, siendo efectivo para simular sistemas de suspensiones concentradas ( $\phi \geq 0.40$ ). Simular pocas partículas o suspensiones diluidas queda excluido de este modelo debido a las fuerzas de lubricación de largo alcance. En comparación con otras aproximaciones numéricas como Stokesian Dynamics (SD)



o Direct Numerical Simulation (DNS), que son excelentes candidatos para la simulación de suspensiones pero que tienen requerimientos computacionales y tiempos prohibitivos a causa de las múltiples partículas presentes en una suspensión concentrada. Por otro lado, el método SPH en conjunto con la Dinámica de Lubricación, asegura una buena convergencia en tiempos aceptables (Kumar et al., 2021).

En el trabajo de Kumar et al. (2020) se usa el modelo de Dinámica de Lubricación para simular una suspensión de partículas esféricas rígidas y lisas con una matriz no Newtoniana descrita a través del modelo biviscoso para reproducir el adelgazamiento al corte a través de las fuerzas de lubricación. Primero se describe que el decremento de la viscosidad se debe a un aparente deslizamiento de la matriz en las superficies de las partículas al definir una rapidez de corte crítica alta. En segundo lugar, definiendo una rapidez de corte crítica baja, la suspensión presenta un esfuerzo de cedencia aparente.

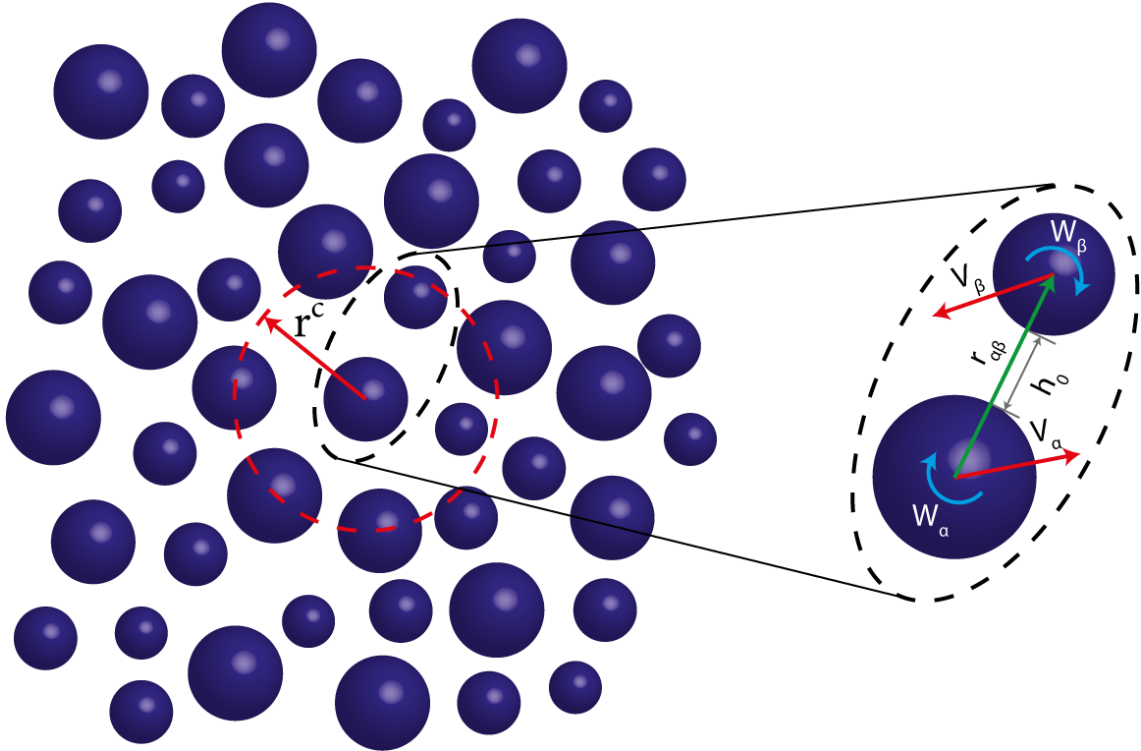


Figura 3.1: Esquema de un modelo de Dinámica de Lubricación de un par de partículas suspendidas.

El método de Dinámica de Lubricación considera para la solución las fuerzas normales  $\mathbf{F}^n$  (*squeezing flow*) y fuerzas tangenciales  $\mathbf{F}^t$  (*shearing flow*), representadas en las Ecuaciones (3.1) y (3.2), respectivamente para un par de partículas. Sin embargo, para este trabajo sólo se toman en cuenta las fuerzas normales como en Vázquez-Quesada y Ellero (2016a). Las fuerzas normales escalan con el inverso de la distancia entre partículas ( $\frac{1}{h_0}$ ), mientras las fuerzas tangenciales lo hacen con el logaritmo natural del inverso de la distancia entre partículas ( $\ln(\frac{1}{h_0})$ ); (Vázquez-Quesada y Ellero, 2016b; Sangtae y Karrila, 1991), tal que la fuerza de lubricación está dominada por las fuerzas normales cuando las partículas se encuentran cercanas, como sucede en las suspensiones concentradas. Usando esta fuerza normal se

puede calcular la fuerza total sobre una partícula a través de la contribución de cada una de las interacciones con partículas vecinas delimitadas por  $r^c$ . De igual manera, se puede calcular el torque al sumar la contribución individual de las partículas cercanas.

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^n = f_{\alpha\beta}(\eta, h_0) \mathbf{V}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{e}_{\alpha\beta} \mathbf{e}_{\alpha\beta}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^t = g_{\alpha\beta}(\eta, h_0) \mathbf{V}_{\alpha\beta} \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{e}_{\alpha\beta} \mathbf{e}_{\alpha\beta}), \quad (3.2)$$

en las cuales,

$$f_{\alpha\beta}(h_0) = -6\pi\eta(\dot{\gamma}_{loc}, h_0) \left[ \left( \frac{a_\alpha a_\beta}{a_\alpha + a_\beta} \right)^2 \frac{1}{h_0} + a_\alpha \left( \frac{1 + 7\frac{a_\beta}{a_\alpha} + \left(\frac{a_\beta}{a_\alpha}\right)^2}{5\left(1 + \frac{a_\beta}{a_\alpha}\right)^3} \right) \text{Ln}\left(\frac{a_\alpha}{h_0}\right) \right], \quad (3.3)$$

$$g_{\alpha\beta}(h_0) = -6\pi\eta(\dot{\gamma}_{loc}, h_0) a_\alpha \left[ \frac{4\frac{a_\beta}{a_\alpha} \left( 2 + \frac{a_\beta}{a_\alpha} + 2\left(\frac{a_\beta}{a_\alpha}\right)^2 \right)}{15\left(1 + \frac{a_\beta}{a_\alpha}\right)^3} \text{Ln}\left(\frac{a_\alpha}{h_0}\right) \right]. \quad (3.4)$$

$\mathbf{V}_{\alpha\beta}$  es la velocidad relativa entre el par de partículas,  $f_{\alpha\beta}(h_0)$  y  $g_{\alpha\beta}(h_0)$  son funciones escalares que dependen de los radios de las partículas  $a_\alpha$ ,  $a_\beta$  y de la separación entre los pares de partículas  $h_0$ ,  $\mathbf{e}_{\alpha\beta}$  es el vector radial unitario que conecta los centros de los pares de partículas y  $\mathbf{1}$  es el tensor identidad de segundo orden.

Los componentes del tensor de esfuerzos  $\boldsymbol{\sigma}$  para la suspensión se pueden calcular a partir de la contribución de las interacciones entre partículas (microescala) usando el método de Irving-Kirkwood (Jabbarzadeh et al., 1997; Kumar et al., 2021). Este método se aplica sólo en la región de bulto que está lo suficiente lejos de las paredes de la geometría que contiene a las partículas en suspensión para evitar efectos de deslizamiento así, los efectos estéricos de las paredes son despreciables para la predicción de la reología de la suspensión. Este efecto es producto de la posibilidad de acomodo de las partículas en capas cerca de la pared causadas por la fuerza de lubricación entre la pared y las partículas (Vázquez-Quesada y Ellero, 2016b). De acuerdo con este método, la contribución al esfuerzo está dada por dos partes: una parte por cinética y una parte por configuración. Ésta es definida en la Ecuación (3.5).

$$\boldsymbol{\sigma} = -\frac{1}{V} \left( \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \mathbf{r}_{\alpha\beta} \mathbf{F}_{\alpha\beta} \right). \quad (3.5)$$

La primera suma del lado derecho de la Ecuación (3.5), denota la contribución cinética por cada partícula, mientras la segunda suma representa la configuración o contribución potencial de las partículas, es decir, la contribución por las interacciones entre las partículas vecinas. Aquí,  $V$  es el volumen de la región de bulto,  $\mathbf{v}$  es la velocidad de perturbación definida como  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{u}_{\alpha}$ ,  $\mathbf{u}_{\alpha}$  es la velocidad de corriente del flujo de corte en la posición de la partícula,  $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}$  es la posición relativa de la partícula  $\alpha$  con respecto a la partícula vecina  $\beta$  y  $\mathbf{F}_{\alpha\beta}$  es el vector de fuerza entre las partículas. La rapidez de corte efectiva,  $\dot{\gamma}_{in}$ , se calcula interpolando la velocidad de las partículas en el bulto; esta rapidez de corte efectiva es la que experimentan

el bulto de la suspensión y no la rapidez de corte aplicada  $\dot{\gamma} = \frac{2V}{32a}$ .

El sistema de estudio básico, corresponde a un flujo cortante simple que se compone de un flujo de Stokes (flujo laminar) de una suspensión concentrada en una geometría de placas planas paralelas, ver Fig. 3.2; (Kumar et al., 2020; Vázquez-Quesada y Ellero, 2016a). Las dimensiones del sistema son  $32a$  de alto (dirección  $z$ ),  $32a$  de largo (dirección  $x$ ) y  $32a$  de ancho (dirección  $y$ ), donde  $a$  es el radio de una partícula; estas medidas son lo suficientemente grandes para evitar los efectos de las paredes y de las condiciones periódicas en el movimiento final de las partículas de acuerdo con Vázquez-Quesada y Ellero (2016b). Las direcciones  $x$  y  $y$  son periódicas, mientras que  $z$  está delimitada por dos placas sólidas que imponen el movimiento a la suspensión; la placa superior y la placa inferior se mueven a velocidad  $V$  y  $-V$  respectivamente. Estas placas producen un campo de velocidad  $\mathbf{v}$ , en el cual, la dirección del movimiento se encuentra en dirección  $x$ , el gradiente de velocidades en dirección  $z$  y la dirección neutral es  $y$ .

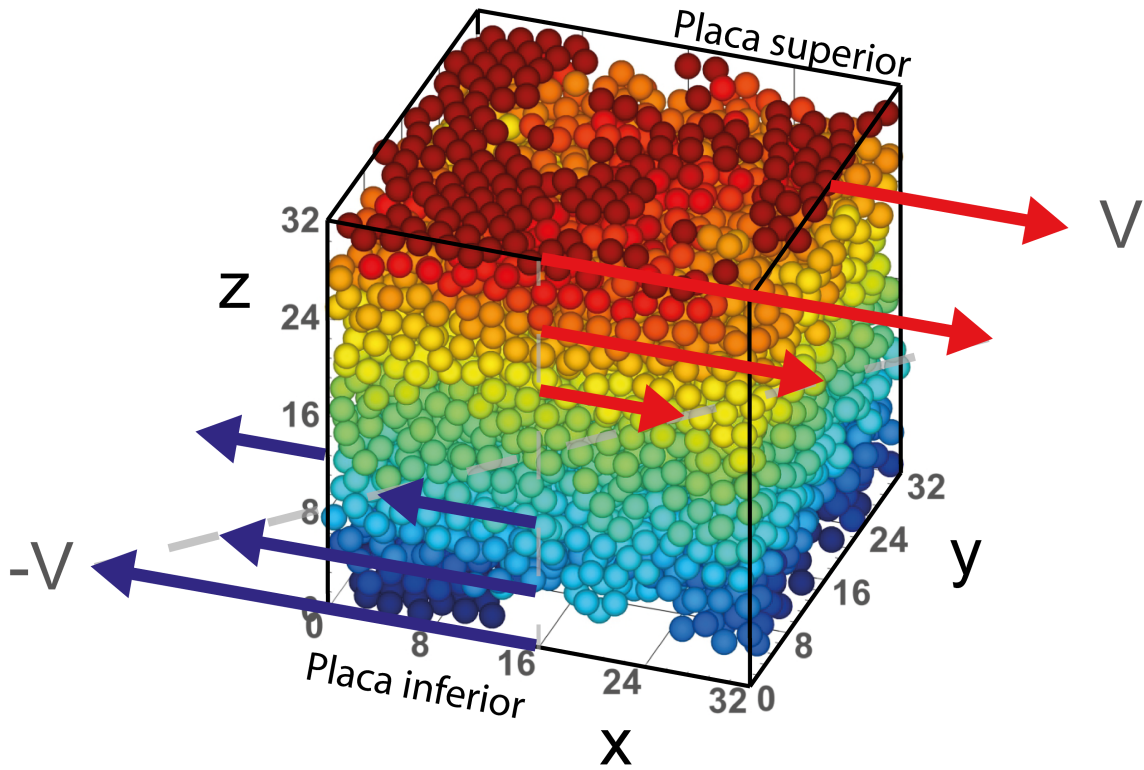


Figura 3.2: Sistema compuesto por partículas esféricas rígidas y lisas de radio  $a = 1$ .

La fracción de volumen se define como el volumen de las partículas entre el volumen de la suspensión (Morton y Jeddrey, 2014; Wagner y Brady, 2009). Para el sistema de partículas esféricas de radio  $a$ , se denota como:

$$\phi = \frac{N\left(\frac{4}{3}\pi a^3\right)}{(32a)^3}, \quad (3.6)$$

en la cual  $N$  es el número de partículas,  $\left(\frac{4}{3}\pi a^3\right)$  es el volumen de una partícula esférica y  $(32a)^3$  es el volumen del sistema. Para las fracciones de volumen analizadas en este trabajo  $\phi = \{0.40, 0.45, 0.48\}$  el número de partículas requeridas es  $N = \{3129, 3520, 3755\}$ , respectivamente.

# Capítulo 4

## Resultados y análisis

Las soluciones que se obtienen a partir del modelo de Dinámica de Lubricación (ver Capítulo 3) programado en FORTRAN (desarrollado en el Centro Vasco de Matemática Aplicada, Bilbao), se post procesaron con una herramienta en Matlab (desarrollada para este trabajo con un CPU: Intel Core i5-6200U@2.30GHz, ver Anexo A). Los datos recolectados son los archivos de rapidez de corte efectiva,  $\dot{\gamma}_{in}$ , en función del tiempo  $t$  (tomados cada 100 pasos de tiempo), los nueve componentes del tensor de esfuerzo de la suspensión,  $\sigma$ , contra el tiempo  $t$  (tomados cada 100 pasos de tiempo), conviene enfatizar que seis términos son diferentes debido a la simetría de  $\sigma$ , y archivos de datos de las partículas que contienen la posición  $(x, y, z)$  y la velocidad  $(V_x, V_y, V_z)$  cada 100,000 pasos de tiempo. Las simulaciones se detuvieron a los 30 millones de pasos en el tiempo para obtener un régimen estacionario del sistema para cada rapidez de corte impuesta  $SR$  analizada. El tiempo requerido para cada  $SR$  en las gráficas siguientes, es de 5 – 7 días para obtener los 30 millones de pasos en el tiempo usando el servidor *HIPATIA* del Centro Vasco de Matemática

Aplicada. Las propiedades materiales se obtienen a partir de datos promediados en estado estacionario como consecuencia de las fluctuaciones de los valores de  $\sigma$  y  $\dot{\gamma}_{in}$ , dado por la descripción Lagrangiana implementada en el modelo de Dinámica de Lubricación (sistemas particulados). Una vez con los datos en estado estacionario, se calculan las desviaciones estándar de las propiedades materiales para colocar las barras de error en las gráficas presentadas en este Capítulo. Estas fluctuaciones se pueden observar en trabajos de simulación de sistemas particulados como en Bian y Ellero (2014), Hermes et al. (2018) y Kumar et al. (2020).

El post procesamiento de datos tiene las siguientes funciones:

1. Determinar el estado estacionario para  $\sigma$  y  $\dot{\gamma}_{in}$  de la suspensión. Esto se hace a través de las gráficas de rapidez de corte y esfuerzos en función del tiempo calculando la desviación estándar. Posteriormente, en el estado estacionario, se calcula la viscosidad relativa que presenta la suspensión  $\eta_R = \frac{\sigma_{zx}}{\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}}$ , es decir, la relación entre la viscosidad que exhibe la suspensión  $\frac{\sigma_{zx}}{\dot{\gamma}_{in}}$  y la viscosidad de bulto de la matriz  $\eta_{bult}$  (matriz sin confinamiento), primera diferencia de esfuerzos normales,  $N_1^* = \frac{\sigma_{xx}-\sigma_{zz}}{\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}}$ , y la segunda diferencia de esfuerzos normales,  $N_2^* = \frac{\sigma_{zz}-\sigma_{yy}}{\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}}$ . Los esfuerzos normales están adimensionalizados con respecto al esfuerzo cortante de bulto  $\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}$ .
2. Los valores de la viscosidad relativa  $\eta_R$  se grafican en función de la rapidez de corte adimensional,  $\dot{\gamma}_{in}^* = \frac{6\pi\eta_{bult}a^2}{F_0}\dot{\gamma}_{in}$ , en la cual  $F_0$  es la magnitud de la fuerza de repulsión entre partículas. Esta gráfica permite determinar si el comportamiento de interés CST-DST está presente o no, con ciertos parámetros propuestos para el modelo biviscoso funcionalizado.



3. Se grafican los esfuerzos normales  $N_1^*$  y  $N_2^*$  en función de la rapidez de corte adimensional,  $\dot{\gamma}_{in}^*$ . Esto muestra el comportamiento viscoelástico de la suspensión, en donde se observa que ambas diferencias de esfuerzos normales son diferentes de cero.
4. Para explicar el por qué se presenta el fenómeno de CST-DST se tomaron diferentes configuraciones de la suspensión (distribución de partículas) a diferentes pasos de tiempo, una vez que se alcanza el estado estacionario. Lo anterior permite tener diferentes muestras del estado morfológico de la suspensión en el tiempo y obtener un promedio de lo que les ocurre a las partículas a medida que se aumenta  $SR$ . Estas gráficas muestran la morfología de la suspensión (a escala microscópica). Obteniendo lo siguiente:
  - a) La gráfica de densidad de partículas que muestra el conteo del número de interacciones partícula-partícula con respecto a su separación adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , y con respecto a la rapidez de corte local (que es la rapidez de corte del fluido que pasa a través de las superficie de partículas que están interaccionando) adimensionalizada con respecto a la rapidez de corte efectiva (la que experimenta la suspensión),  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ .
  - b) La gráfica de fuerza de lubricación relativa a una fuerza de lubricación Newtoniana de las interacciones partícula-partícula con respecto a su separación y la rapidez de corte local. Se calcula la fuerza de lubricación sobre la superficie de los pares de partículas que interaccionan, y se compara contra la fuerza de lubricación sobre las partículas considerando que la matriz sea Newtoniana.

- c) Videos del sistema con las  $N$  partículas en su posición y con su velocidad en la dirección de flujo ( $V_x$ ), a diferentes pasos de tiempo. En estos videos se observa la evolución del sistema en el estado estacionario y muestran qué pasa con las partículas cuando se presenta el engrosamiento o el adelgazamiento al corte a través de la magnitud de la velocidad en la dirección del movimiento,  $V_x$ .

## 4.1. Viscosidad

La viscosidad de corte relativa  $\eta_R$  que despliega la suspensión se calcula a partir del cociente del esfuerzo cortante  $\sigma_{xz}$  entre la rapidez de corte efectiva  $\dot{\gamma}_{in}$  adimensionalizada con respecto a la viscosidad de bulto (viscosidad de la matriz sin confinamiento)  $\eta_{bult}$ , como:  $\eta_R = \frac{\sigma_{xz}}{\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}}$ . Para cada juego de parámetros se calcula  $\eta_R$  una vez que se alcanza el estado estacionario. Posteriormente se grafica en función de la rapidez de corte adimensional,  $\dot{\gamma}_{in}^* = \frac{6\pi\eta_{bult}a^2}{F_0}\dot{\gamma}_{in}$ . Esta rapidez de corte,  $\dot{\gamma}_{in}$ , es la que experimenta el seno de la suspensión (una rapidez de corte efectiva) y no la rapidez de corte aplicada por las paredes en movimiento, es decir  $\dot{\gamma} = \frac{2V}{32a}$ , identificada en forma adimensional como  $SR$  en las gráficas posteriores. En la simulación de suspensiones concentradas en flujo cortante simple, es común que se presente deslizamiento en las paredes (Vázquez-Quesada y Ellero, 2016b) y además, debido a la fuerza que se opone al movimiento de las partículas (fuerza de lubricación), se tiene como consecuencia que  $\dot{\gamma}_{in} < \frac{2V}{32a}$ . La rapidez de corte efectiva  $\dot{\gamma}_{in}$  se obtiene interpolando la velocidad de las partículas ( $V_x$ ) en la dirección del gradiente ( $z$ ) en estado estacionario lejos de las paredes a partir de los datos obtenidos por el modelo de Dinámica de Lubricación (ver Capítulo 3). Por otra parte,  $\dot{\gamma} = \frac{2V}{32a}$  sería la rapidez de corte

que experimentaría un fluido sin partículas suspendidas en estado estacionario.

Para el modelo biviscoso funcionalizado se estudiaron cuatro variaciones de los parámetros: i)  $A$ , para la modulación de la rapidez de corte crítica para la activación de la respuesta biviscosa, ii)  $L$ , para la longitud crítica para la activación de la respuesta biviscosa, iii)  $\Delta\eta$ , que es el aumento de viscosidad de la matriz por confinamiento y iv)  $\phi$  fracción de volumen. Las variaciones en  $L$ ,  $\Delta\eta$  y  $A$  funcionaron para encontrar un juego de parámetros que mostraran DST. La variación en  $\phi$  se realizó para observar cómo afecta la fracción de volumen cuando se presenta el DST.

### Variación de $A$

La variación en  $A$ , Fig. 4.1, muestra cuatro curvas para los parámetros  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ . Se provee como referencia una curva de una suspensión con una matriz Newtoniana con viscosidad  $\eta_{bult} = 1$ . La curva de la suspensión con matriz Newtoniana muestra un ligero adelgazamiento a bajas rapidezces de corte, seguido de una viscosidad constante; cabe destacar que, pese a que la matriz sea Newtoniana, la viscosidad relativa de la suspensión  $\eta_R \neq \frac{\eta_{bult}}{\eta_{bult}} = 1$  debido a las interacciones de las partículas en suspensión.

El parámetro  $A$  modula el umbral de la respuesta biviscosa de la capa de lubricación (el fluido contenido entre las esferas). La capa de lubricación experimenta diferentes rapidezces de corte a lo largo de la separación entre las superficies de las partículas y, en consecuencia, la capa de lubricación puede presentar hasta dos viscosidades; esta es la esencia del modelo biviscoso (Vázquez-Quesada y Ellero, 2016b). El comportamiento monoviscoso o biviscoso también se puede determinar a partir de la Ecuación (2.5) en función de la distancia límite,  $h_0^{lim}$ , que representa la separación entre los

pares de partículas límite para que se presente un comportamiento biviscoso (ver Capítulo 2). Existen dos casos: i) la capa sólo presenta una sola viscosidad,  $\eta_{conf}(h_0)$ , cuando la rapidez de corte de toda a la capa es menor a la rapidez de corte crítica,  $\dot{\gamma}_{crit}$  (la capa es monoviscosa) o  $h_0 > h_0^{lim}$ , o ii) la capa de lubricación presenta dos viscosidades, tanto  $\eta_{conf}$  como  $\eta_{bult}$ , cuando existen rapidezces de corte menores y mayores a la rapidez de corte crítica,  $\dot{\gamma}_{crit}$ , respectivamente (la capa es biviscosa), o cuando  $h_0 < h_0^{lim}$ . La viscosidad está regulada por,  $\dot{\gamma}_{crit}$  como en Vázquez-Quesada y Ellero (2016a), sin embargo en este trabajo esta rapidez de corte crítica tiene una funcionalización con respecto a la separación entre las superficies de las partículas,  $h_0$ :  $\dot{\gamma}_{crit}(h_0) = \frac{A}{h_0}$ . Cuando el parámetro  $A$  toma valores pequeños ( $A = 10^{-5}$ , el valor más pequeño usado en este trabajo), la rapidez de corte local necesaria para que se presente  $\eta_{conf}$  debe ser pequeña; i.e.  $\dot{\gamma}_{loc} < \frac{A}{h_0}$ . Por otro lado, cuando  $A$  toma valores más grandes ( $A = 10^{-3}$ , el valor más grande usado en este trabajo), la rapidez de corte local en la que se presenta  $\eta_{conf}$  será mayor. Este cambio del umbral tiene un efecto importante en la viscosidad de la capa de lubricación. Al aumentar  $SR$ , también lo hará  $\dot{\gamma}_{loc}$ , de forma que para  $SR > 2$  la capa de lubricación aún puede tener regiones con viscosidad bajo confinamiento altas, es decir  $\eta_{conf} \rightarrow \Delta\eta + \eta_{bult}$ , donde  $\Delta\eta$  aumenta la viscosidad por confinamiento y, en consecuencia, se obtienen fuerzas de lubricación más altas que la Newtoniana.

El valor del parámetro  $A$  modula el umbral en el cual ocurre el cambio de viscosidad entre una  $\eta_{bult}$  y  $\eta_{conf}$ , de acuerdo con  $\dot{\gamma}_{loc}$ , cuando se tiene una respuesta biviscosa. A valores grandes de  $A$ , el intervalo de  $SR$  en el cual actúa la viscosidad bajo confinamiento es mayor. En otras palabras, el valor de  $\dot{\gamma}_{crit} = \frac{A}{h_0}$  aumenta proporcionalmente con respecto a  $A$ . Para  $A = 10^{-5}$  (el valor más pequeño para  $A$  usado en

el trabajo) se observa inicialmente un adelgazamiento al corte para  $SR < 2$ , seguido por un ligero aumento de la viscosidad en el intervalo  $2 \leq SR \leq 5$  y después un segundo adelgazamiento al corte para  $SR > 5$ ; aquí no se reproduce DST sino que se observa un comportamiento de CST. Por otro lado, para  $A = 10^{-3}$  (el valor más grande para  $A$  usado en el trabajo), hay una meseta con viscosidad constante para  $SR < 0.5$ , seguida de un adelgazamiento al corte en el intervalo  $0.5 \leq SR \leq 3$ . Después de este adelgazamiento, al aumentar a  $SR > 3$  se presenta un aumento súbito de la viscosidad, en el cual,  $\dot{\gamma}_{in}$  no aumenta por el contrario disminuye su valor levemente. Este comportamiento particular de la curva de flujo (forma de  $S$ ), es caracterizada por  $\frac{\delta\sigma_{zz}}{\delta\dot{\gamma}} < 0$  y se ha relacionado con inestabilidades como: migración de las partículas o la transición entre fuerzas de lubricación y fuerzas de fricción (Chacko et al., 2018; Hermes et al., 2018). Durante el aumento súbito de la viscosidad, que se identifica con el fenómeno de DST, el material en la macroescala incluso puede aparentar un comportamiento tipo sólido que se fractura o se cuaja a elevadas rapidezces de deformación (Seto et al., 2013). La curva para  $A = 10^{-3}$  en la Fig. 4.1 muestra el fenómeno DST sostenido, es decir, ya no hay un segundo adelgazamiento a más altas rapidezces de corte impuestas. Las soluciones obtenidas reportan divergencia por contacto o penetración de una o más pares de partículas para este caso, lo que ocasiona que el cálculo diverja y se detenga la simulación. Un caso intermedio es con  $A = 10^{-4}$ , para el cual se observa un adelgazamiento al corte para  $SR < 2$ ; posteriormente en el intervalo  $2 \leq SR \leq 10$  se presenta el DST. Sin embargo, este aumento de  $\eta_R$  no se mantiene al aumentar  $SR$ , ya que se presenta un segundo adelgazamiento para  $SR > 10$ .

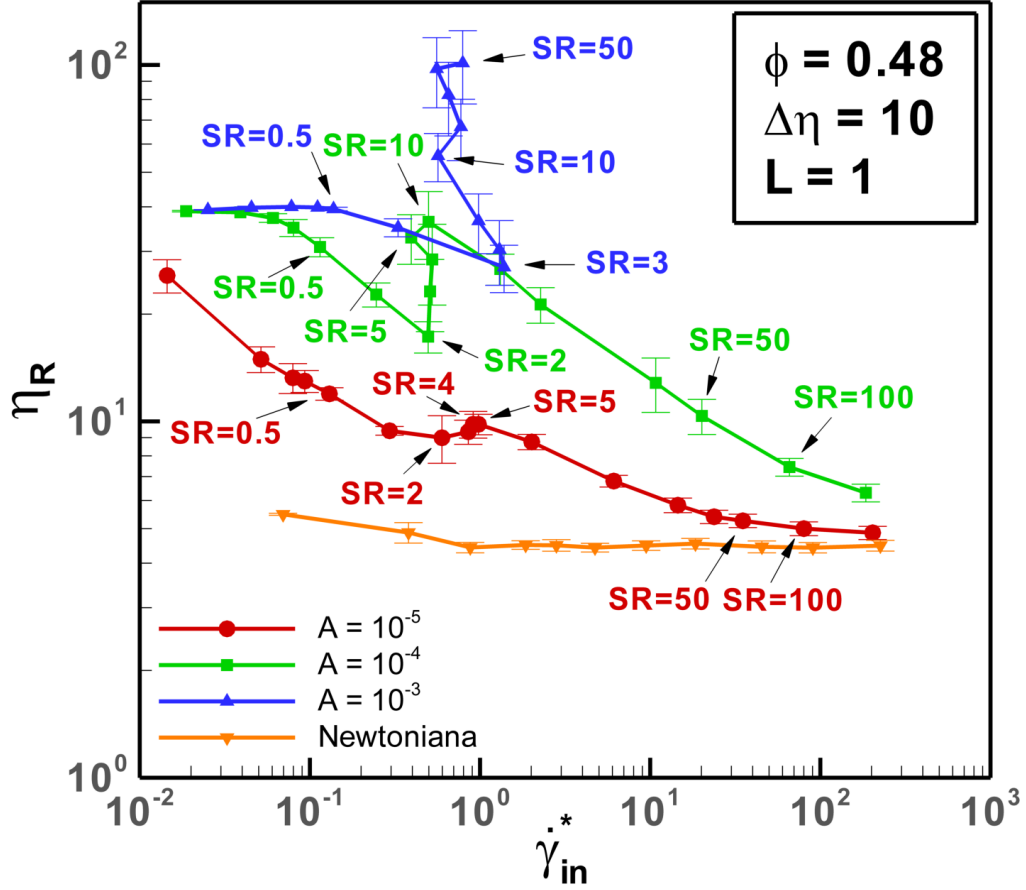


Figura 4.1: Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

### Variación de $L$

La longitud crítica  $L$  modula la distancia entre las superficies de las partículas en la cual se exhibe el aporte de la viscosidad por confinamiento,  $\Delta\eta$ , a la viscosidad bajo confinamiento,  $\eta_{conf}$ , de acuerdo con la ecuación (2.2). Cuando  $L$  es pequeña ( $L = 0.1$ , el valor más pequeño usado en el trabajo), se requiere de distancias más cortas entre las superficies de las partículas ( $h_0$ ) para que el término dentro de la

exponencial tienda a cero y se obtenga el mayor aporte de  $\Delta\eta$ . Por el otro lado, cuando  $L$  es grande ( $L = 10$ , el valor más grande usado en el trabajo), las distancias no necesitan ser tan pequeñas para que el término dentro de la exponencial tienda a cero y se manifieste el aporte de  $\Delta\eta$ . Cuando  $L = 0.1$ , se observa una pequeña meseta con viscosidad constante para  $SR < 0.5$ , seguida de un adelgazamiento al corte en el intervalo  $0.5 \leq SR \leq 2$ . Posteriormente, se observa un aumento de la viscosidad con una tendencia continua al aumentar a  $2 \leq SR \leq 10$ . Este comportamiento se puede describir como un engrosamiento al corte continuo (CST), ya que se observa que la viscosidad de la suspensión  $\eta_R$  continúa aumentando al aumentar  $SR$ . Finalmente, a altas rapidezces de corte ( $SR > 10$ ) hay un segundo adelgazamiento al corte. Para  $L = \{1, 10\}$ , las curvas presentan una zona con viscosidad constante para  $SR < 0.5$ . La viscosidad de la meseta Newtoniana para  $L = \{1, 10\}$  es entre 3 y 4 veces la viscosidad mostrada para  $L = 0.1$ . Continuando en el intervalo  $0.5 \leq SR \leq 2$ , hay un adelgazamiento al corte seguido de un aumento súbito de la viscosidad cuando se aumenta aún más la rapidez de corte impuesta a  $2 \leq SR \leq 10$ . Este comportamiento caracteriza al DST: la viscosidad sigue en aumento a pesar de que  $\dot{\gamma}_{in}^*$  se mantiene constante al aumentar  $SR$ . El DST continua hasta un máximo en el que posteriormente se observa un segundo adelgazamiento al corte para  $SR > 10$ . Con  $L = \{1, 10\}$ , se observa el DST; sin embargo, este comportamiento no se sostiene ya que se observa un segundo adelgazamiento al seguir aumentando  $SR$ . En esta segunda zona de adelgazamiento la viscosidad se abate hasta casi llegar al valor de la viscosidad con una matriz Newtoniana. Presumiblemente, a rapidezces de corte mucho más altas, la viscosidad empataría con la curva de la matriz Newtoniana.

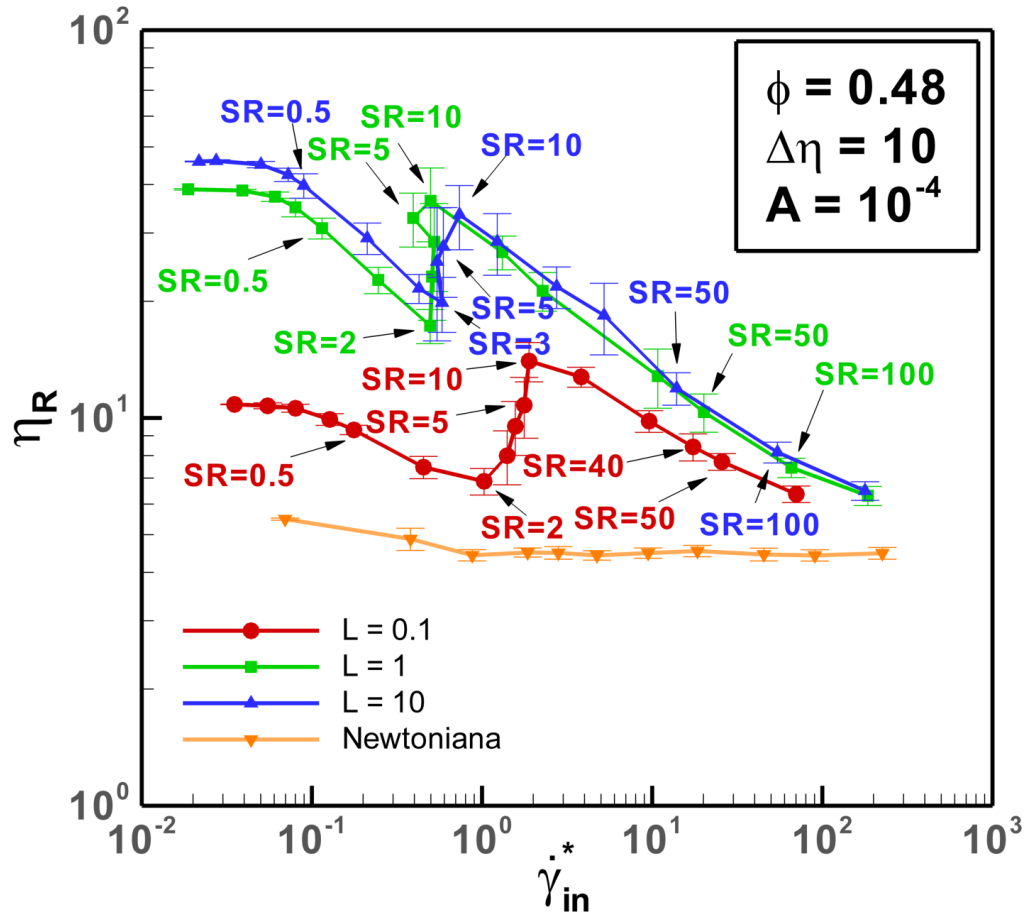


Figura 4.2: Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en  $L$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $A = 10^{-4}$ .

### Variación de $\Delta\eta$

Con lo anterior, el juego de parámetros  $\phi = 0.48$ ,  $L = 1$  y  $A = 10^{-3}$  muestra el engrosamiento al corte discontinuo (DST) sostenido. Con estos parámetros se realizó la variación en el aumento de la viscosidad por confinamiento  $\Delta\eta = \{10, 25\}$ , cuyos resultados se ilustran en la Fig. 4.3. Esta variable es la aportación extra a la viscosidad de la matriz debido al confinamiento del fluido. Cuando  $\Delta\eta = 25$ , se



observa que la meseta con viscosidad constante para  $SR < 0.5$  aumenta su valor con respecto a  $\Delta\eta = 10$  en la misma proporción, aproximadamente 2.5 veces más. Sigue un adelgazamiento en el intervalo  $0.5 \leq SR \leq 3$ , el cual se percibe más pronunciado en  $\Delta\eta = 25$  que en  $\Delta\eta = 10$  y, posteriormente, se presenta el DST sostenido dentro del intervalo  $3 \leq SR \leq 50$ , seguido de la divergencia de la simulación para  $SR > 50$ .

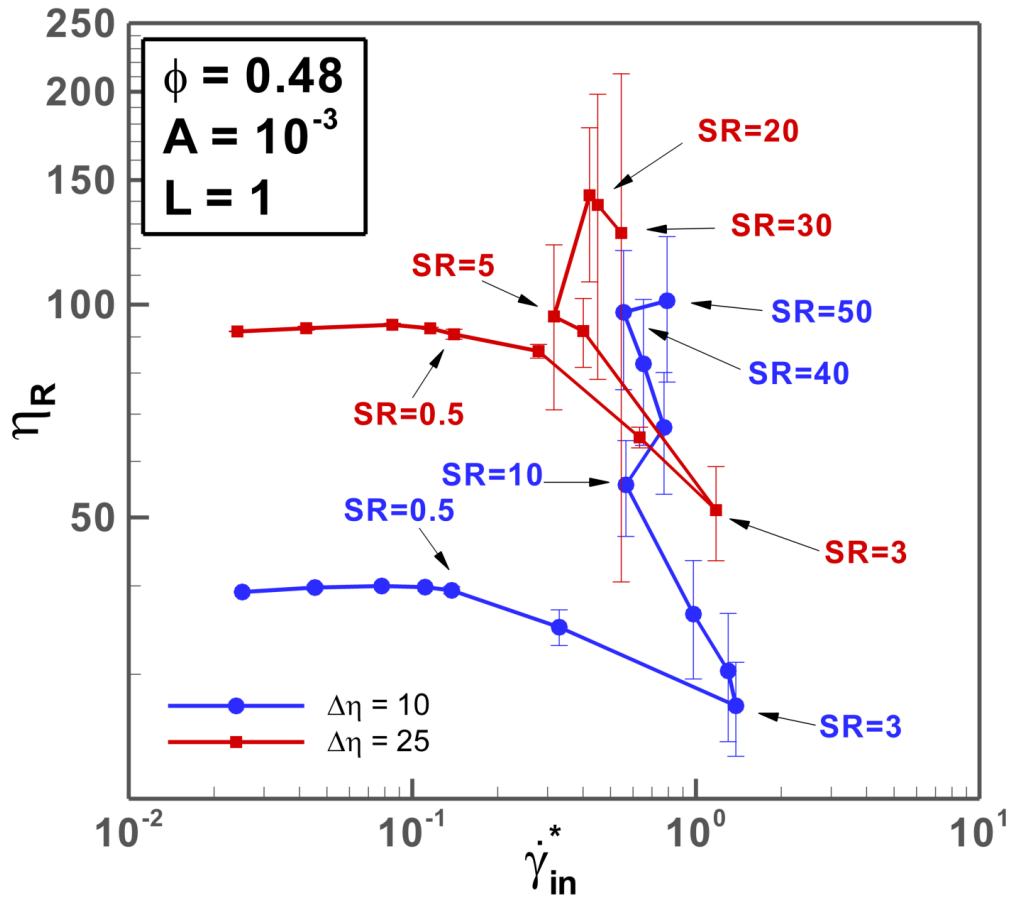


Figura 4.3: Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en  $\Delta\eta$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $A = 10^{-3}$  y  $L = 1$ .

### Variación de $\phi$

Por último, se presentan los efectos en el cambio de la fracción de volumen  $\phi$ . Se tomaron los parámetros que permiten reproducir el DST sostenido, i.e.  $\Delta\eta = 10$ ,  $L = 1$  y  $A = 10^{-3}$ . Las fracciones de volumen utilizadas son:  $\phi = \{0.40, 0.45, 0.48\}$ . La Fig. 4.4 muestra que se presenta el DST sostenido para las tres fracciones de volumen. A bajas rapidezces de corte  $SR < 0.5$  se observa una meseta con viscosidad constante para  $\phi = \{0.45, 0.48\}$ . Esta viscosidad constante crece a medida que aumenta el valor de  $\phi$ . Nótese que para  $\phi = 0.40$ , esta meseta Newtoniana no parece existir y  $\eta_R$  aumenta levemente al pasar de bajas rapidezces de corte a rapidezces de corte intermedias ( $SR = 0.5 \rightarrow 3$ ). Esto podría deberse al método numérico usado, el cual requiere de altas fracciones de volumen con el fin de que las fuerzas de lubricación de corto alcance sean las predominantes (ver Capítulo 3). Posteriormente, las tres curvas presentan adelgazamiento al corte con  $0.5 \leq SR \leq 3$  para continuar con un salto en la magnitud de la viscosidad al aumentarse a  $SR > 3$ . Aunque las tres variaciones del parámetro  $\phi$  presentan DST sostenido, el aumento de  $\eta_R$  es diferente. El mayor aumento de  $\eta_R$  tomando como referencia la viscosidad a bajos  $SR$ , se presenta para la fracción de volumen más baja ( $\phi = 0.40$ ) y disminuye al aumentar  $\phi$ .

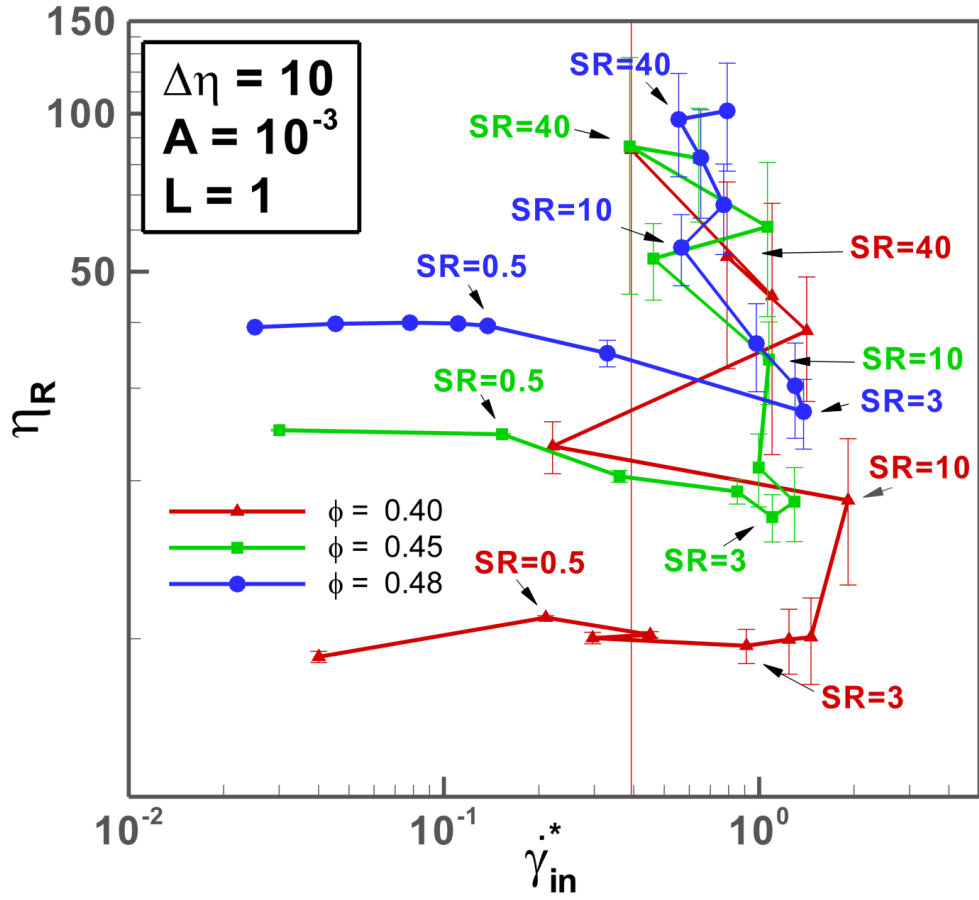


Figura 4.4: Viscosidad contra la rapidez de corte adimensionalizadas para la variación en  $\phi = 0.48$  con el modelo FBV con:  $\Delta\eta = 10$ ,  $A = 10^{-3}$  y  $L = 1$ .

## 4.2. Esfuerzos normales

En el caso de suspensiones concentradas se han reportado valores negativos para ambas diferencias de esfuerzos normales, además, se reporta que la magnitud de  $N_2 > N_1$  (Cwalina y Wagner, 2014; Seto y Giusteri, 2018). Los valores de estas dos diferencias se calculan a partir de los componentes normales del tensor de esfuerzos

$\sigma$  de la suspensión en estado estacionario, como se indica en la Ecuación (4.2) y la Ecuación (4.2).

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{zz}, \quad (4.1)$$

$$N_2 = \sigma_{zz} - \sigma_{yy}. \quad (4.2)$$

El esfuerzo normal en la dirección del flujo corresponde a  $\sigma_{xx}$ , el esfuerzo normal en la dirección del gradiente es  $\sigma_{zz}$ , y por último, el esfuerzo normal en la dirección neutral es  $\sigma_{yy}$ . Las diferencias de esfuerzos normales se adimensionalizan con respecto al esfuerzo cortante de bulto como:  $N_1^* = \frac{N_1}{\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}}$  y  $N_2^* = \frac{N_2}{\eta_{bult}\dot{\gamma}_{in}}$ .

### Variación de A

En las Figs. 4.5 y 4.6 se muestra el valor negativo de las diferencias de esfuerzos normales para la variación de  $A$  del modelo biviscoso funcionalizado. En el caso de  $A = 10^{-5}$ , el cual presenta un leve comportamiento de CST, se observa a que ambos esfuerzos normales de forma general son negativos (es decir,  $-N_1^* > 0$  y  $-N_2^* > 0$ ). A bajas rapidezces de corte,  $N_1^*$  toma valores positivos que se vuelven negativos al aumentar un poco la rapidez de corte  $\dot{\gamma}_{in}^*$ . Ambas diferencias de esfuerzos normales se mantienen prácticamente constantes con respecto a  $\dot{\gamma}_{in}^*$ . Para los casos:  $A = \{10^{-4}, 10^{-3}\}$  que presentan DST, los valores de ambas diferencias de esfuerzos normales se mantienen en valores negativos con respecto a  $\dot{\gamma}_{in}^*$ , excepto cuando se presenta el DST sostenido. Cuando  $A = 10^{-4}$ , el caso que presenta DST

y un segundo adelgazamiento al corte, ambas diferencias de esfuerzos normales van aumentando su magnitud con respecto a  $\dot{\gamma}_{in}^*$ . Posteriormente, las magnitudes disminuyen cuando se ocurre el segundo adelgazamiento de la viscosidad al aumentar más  $\dot{\gamma}_{in}^*$ . Cuando  $A = 10^{-3}$ , se obtiene DST sostenido y la magnitud de ambas diferencias de esfuerzos normales crecen con respecto a  $\dot{\gamma}_{in}^*$  y los valores se disparan al seguir aumentando  $\dot{\gamma}_{in}^*$ ;  $N_1^*$  aumenta hacia valores negativos mientras  $N_2^*$  aumenta hacia valores positivos. Este valor positivo para  $N_2$  durante el DST sostenido, no coincide con las observaciones reportadas (Cwalina y Wagner, 2014; Seto y Giusteri, 2018; Zarraga et al., 2000). Otro cambio que ocurre durante el DST, es que  $|N_1^*| > |N_2^*|$ , contrario a lo que se observa a bajas  $SR$ .

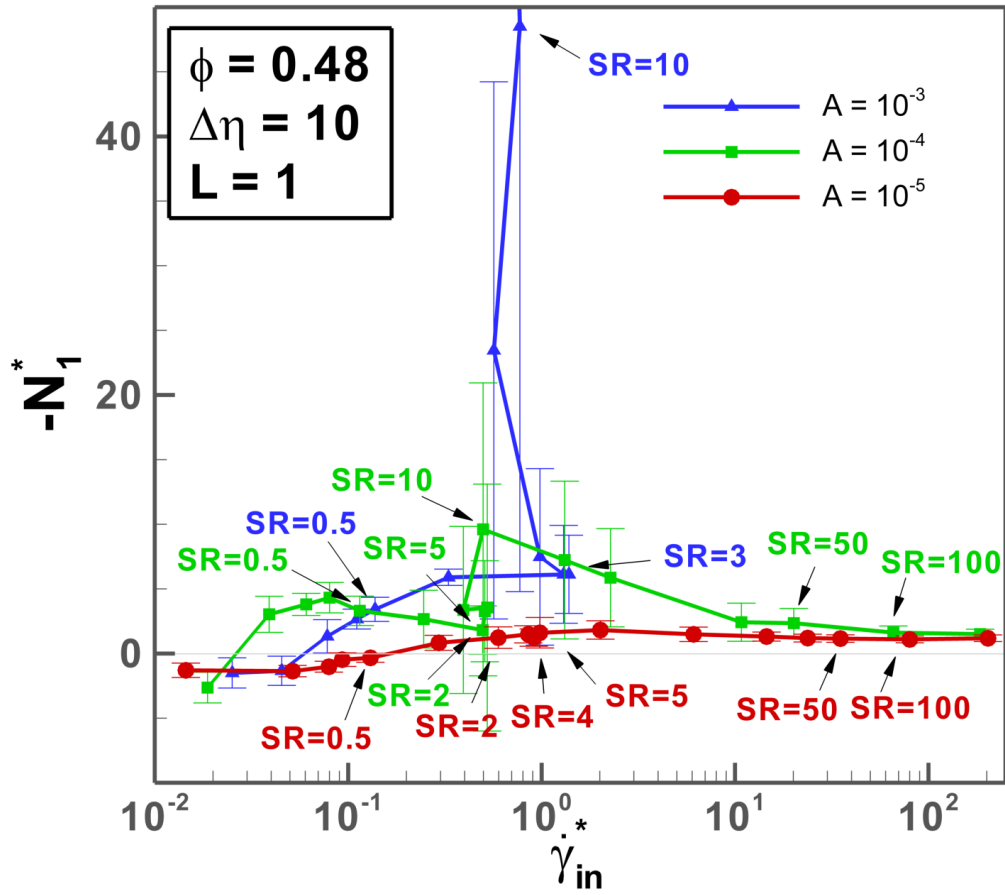


Figura 4.5: Primera diferencia de esfuerzos normales para la variación en  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

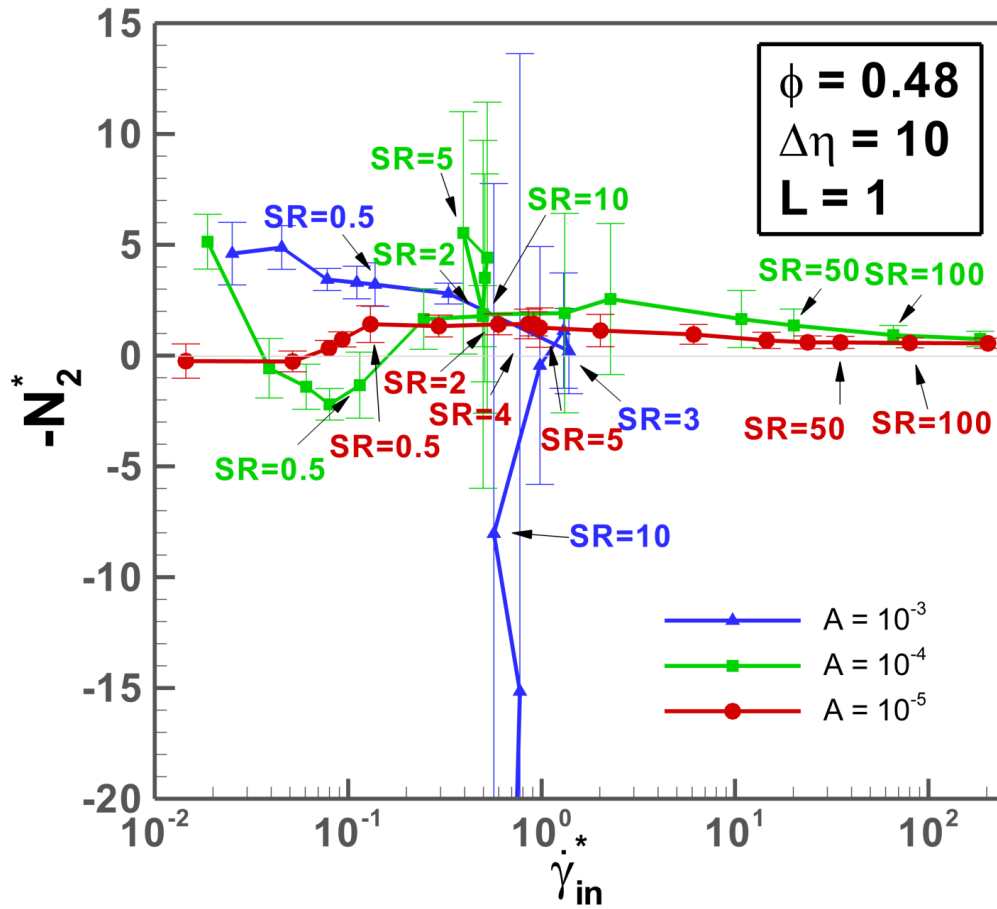


Figura 4.6: Segunda diferencia de esfuerzos normales para la variación en  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

### Variación de $\Delta\eta$

Cuando se varía el parámetro  $\Delta\eta$  con  $\phi = 0.48$ ,  $A = 10^{-3}$  y  $L = 1$ , en los cuales se presenta DST sostenido, en las Figs.4.7 y 4.8 se muestran que ambas diferencias de esfuerzos normales en general se mantienen en valores negativos, excepto cuando se presenta DST sostenido a  $SR \geq 3$ ;  $N_1^*$  aumenta su magnitud hacia valores negativos mientras que  $N_2^*$  cambia de signo y aumenta su magnitud hacia valores positivos.

Durante el DST también se observa que  $|N_1^*| < |N_2^*|$ , contrario a lo observado a bajas  $SR$ .

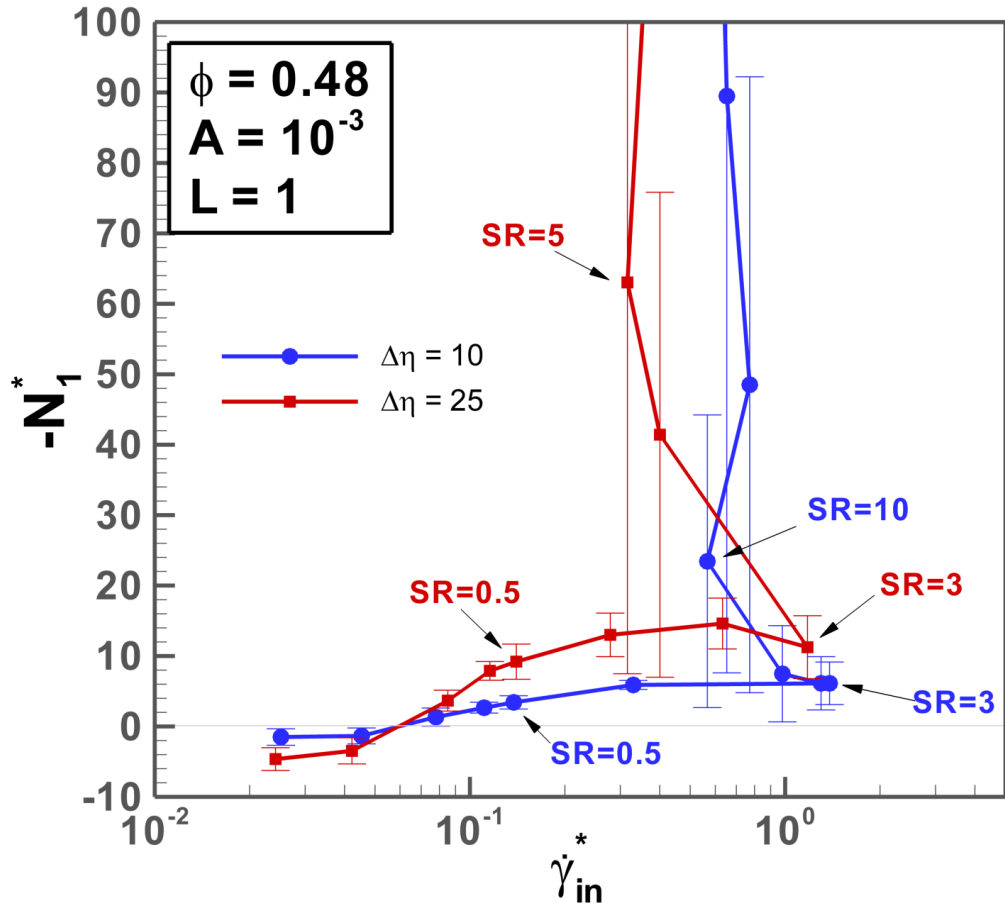


Figura 4.7: Primera diferencia de esfuerzos normales para la variación en  $\Delta\eta$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $A = 10^{-3}$  y  $L = 1$ .



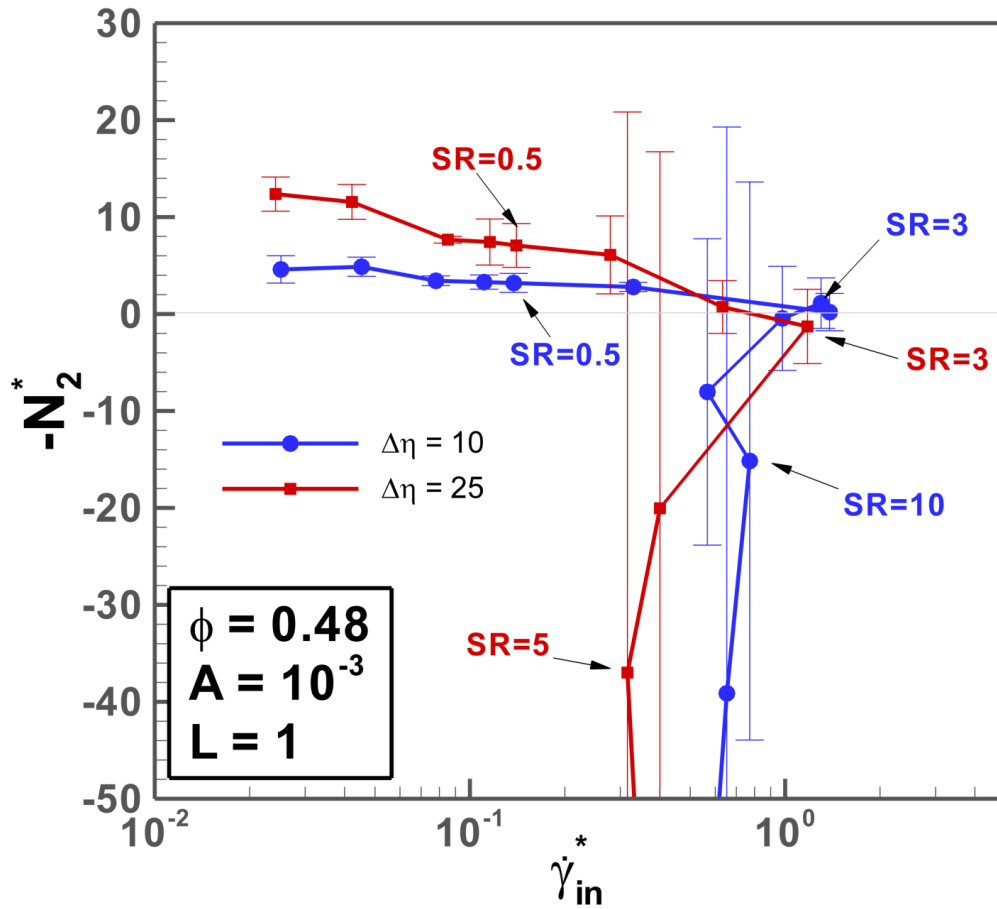


Figura 4.8: Segunda diferencia de esfuerzos normales para la variación en  $\Delta\eta$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $A = 10^{-3}$  y  $L = 1$ .

Se observa la inestabilidad de la microestructura de la suspensión durante el DST, a través de la desviación estándar de las gráficas (barras de error) para  $N_1^*$  y  $N_2^*$  en estado estacionario. Se puede observar en las Figs. 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8 que la magnitud de los valores de ambas diferencias de esfuerzos normales aumentan súbitamente y la barra de error tiene un tamaño considerablemente grande al presentarse DST sostenido. En contraste, la diferencia de esfuerzos normales se mantiene en valores

negativos bajos y la barra de error se mantiene pequeña cuando se presenta el primer adelgazamiento y el segundo adelgazamiento.

Con la variación de los parámetros restantes ( $\phi$ ,  $L$ ), se observó que, en general, ambas diferencias de esfuerzos normales son negativas. A bajas rapidezces de corte se aprecian valores positivos para  $N_1^*$  y  $N_2^*$ , los cuales rápidamente se vuelven negativos al aumentar  $\dot{\gamma}_{in}^*$ . Cuando se presentan el CST o el DST, tanto  $N_1^*$  como  $N_2^*$  se mantienen en valores negativos y sus magnitudes crecen de forma moderada, como en las Figs. 4.5 y 4.6 para  $A = \{10^{-5}, 10^{-4}\}$ . Así mismo, ambas diferencias de esfuerzos normales disminuyen durante el segundo adelgazamiento.

### 4.3. Morfología

Se puede observar en las figuras presentadas en la sección de viscosidad, que existen juegos de parámetros que pueden reproducir DST. Para explicar este fenómeno se analiza la microestructura de la suspensión, es decir, se busca explicar el fenómeno a partir de lo que ocurre entre las múltiples interacciones entre las partículas suspendidas. El mecanismo propuesto tiene como base las fuerzas de lubricación de corto alcance integrando el aumento de viscosidad de la matriz en función de la separación de las superficies. Este análisis se hace a través del muestreo de la microestructura de la suspensión, a partir de la posición  $(x, y, z)$  y la velocidad  $(V_x, V_y, V_z)$  de las partículas cada cierto paso de tiempo, una vez alcanzado el estado estacionario. A partir de estos datos se crean dos gráficos usando la rapidez de corte local  $\dot{\gamma}_{loc}$ , es decir, la rapidez de corte que experimenta la capa de lubricación entre dos pares de partículas que interaccionan adimensionalizada con respecto a la rapidez de corte efectiva que presenta la suspensión,  $\dot{\gamma}_{in}$ . La otra variable es la distancia entre la su-

perficie de las dos partículas que interaccionan,  $h_0$ , adimensionalizada con respecto al radio de las partículas,  $a$ . Para hacer un análisis representativo se tomaron 11 diferentes configuraciones en el estado estacionario para cada gráfica creada. Las dos gráficas son:

1. Densidad de interacciones. Esta gráfica muestra la cantidad de pares de partículas que están interaccionando, en la cual la capa de lubricación experimenta cierta rapidez de corte,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , a cierta distancia entre el par de partículas,  $\frac{h_0}{a}$ . De este modo se tiene un mapa de la morfología de la suspensión.
2. Fuerza de lubricación normalizada con respecto a una fuerza de lubricación Newtoniana ( $6\pi\eta_{bult}a^2\frac{V}{h_0}$ ) con viscosidad  $\eta_{bult}$  entre los pares de partículas en el que la matriz experimenta cierta rapidez de corte  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  y la distancia entre el par de partículas es  $\frac{h_0}{a}$ .

También se realizaron videos a partir de estos datos, los cuales muestran la evolución del sistema (el desplazamiento de las partículas en el sistema) al imponer flujo cortante simple. Para colocar los resultados de los videos se tomó un instante para poder agregarlo al trabajo escrito.

De acuerdo con el modelo biviscoso y el valor de  $\eta_{conf}$  en función de  $h_0$ , descritos en las Ecuaciones (2.1) y (2.2) respectivamente; entre más cerca estén las partículas, la viscosidad bajo confinamiento aumenta su magnitud hasta un máximo de  $\eta_{conf} = \Delta\eta + \eta_{bult}$ , cuando  $h_0 \rightarrow 0$ . Por otra parte, el cambio entre  $\eta_{conf}$  y  $\eta_{bult}$  está modulada por la rapidez de corte crítica,  $\dot{\gamma}_{crit} = \frac{A}{h_0}$ . La rapidez de corte adimensional impuesta se representa con  $SR$  en las gráficas posteriores.

### 4.3.1. Densidad de pares y fuerza de lubricación

Las Figs. 4.5 y 4.6 muestran tres casos: i) una suspensión que presenta un ligero comportamiento de CST ( $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $L = 1$  y  $A = 10^{-5}$ ), ii) una suspensión que presenta DST pero no sostiene este aumento en la viscosidad, el cual adelgaza a mayores  $SR$  ( $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $L = 1$  y  $A = 10^{-4}$ ) y iii) una suspensión que presenta DST y sostiene el aumento de la viscosidad ( $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $L = 1$  y  $A = 10^{-3}$ ). Las gráficas se dividen en tres zonas diferentes:

- Zona 1 (1<sup>er</sup> Adelgazamiento al corte). La viscosidad muestra una meseta Newtoniana seguido de un adelgazamiento al corte.
- Zona 2 (Engrosamiento al corte). La viscosidad presenta el aumento súbito de su magnitud al aumentar poco la rapidez de corte.
- Zona 3 (2<sup>o</sup> Adelgazamiento al corte). La viscosidad presenta un segundo adelgazamiento al corte.

Las gráficas de densidad de partículas muestran el conteo del número de interacciones partícula-partícula para 11 configuraciones diferentes en estado estacionario. En la abscisa se coloca la separación adimensional  $\frac{h_0}{a}$  y en las ordenadas la rapidez de corte local adimensional  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  de las partículas que interaccionan. Estas gráficas muestran la región, o las regiones,  $(\frac{h_0}{a}, \frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}})$  en la cual se encuentra la mayoría de las interacciones partícula-partícula y es marcada por una flecha que indica el conteo de las interacciones; los tonos rojos corresponden a una concentración de interacciones relativamente alta mientras los tonos azules a una concentración de interacciones relativamente baja.

Las gráficas de fuerza de lubricación relativa muestran la fuerza de lubricación normalizada con respecto a una fuerza de lubricación Newtoniana ( $6\pi\eta_{bult}a^2\frac{V}{h_0}$ ) de las interacciones partícula-partícula para las mismas 11 configuraciones usadas para elaborar las gráficas de densidad de partículas. En la abscisa se coloca la separación adimensional  $\frac{h_0}{a}$  y en las ordenadas la rapidez de corte local adimensional  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  de las partículas que interaccionan. En esta gráfica se proyecta la región que contiene la mayor densidad de partículas, en consecuencia, se muestra la fuerza de lubricación relativa predominante en el sistema. Los tonos rojos representan una fuerza de lubricación relativamente más alta que la Newtoniana mientras los tonos azules una fuerza de lubricación prácticamente Newtoniana.

### Variación de A

En la Fig. 4.1 para la variación de  $A = \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}$  con  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$  se muestran los tres casos del comportamiento de la viscosidad, i.e. 1<sup>er</sup> adelgazamiento, engrosamiento (CST o DST) y 2<sup>o</sup> adelgazamiento al corte. En las Figs. 4.9a, 4.10a y 4.11a se muestran las morfologías de esta primera zona a bajas rapidezces de corte aplicada ( $SR < 3$ ) para las tres curvas de viscosidad se muestran. Se observa que en esta primera zona la mayor densidad de partículas tiene una distancia,  $\frac{h_0}{a} = 10^{-1}$ , y una rapidez de corte local,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , baja. Además, el número de interacciones de pares de partículas es relativamente bajo ( $\approx 1700$  interacciones). De acuerdo con estos valores para  $\frac{h_0}{a}$  y  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , para  $A = 10^{-5}$ , la viscosidad de la capa de lubricación que se encuentra entre los pares de partículas toma la viscosidad bajo confinamiento  $\eta_{conf}$  pero con poca atribución de  $\Delta\eta$  debido a que la mayor densidad de pares de partículas tiene una separación relativamente grande. Esto se refleja en una fuerza de lubricación relativamente baja para todas las interacciones, como se

observa en las gráficas de fuerza de lubricación relativa. Por otro lado, para los casos  $A = \{10^{-4}, 10^{-3}\}$  si está presente la contribución de la viscosidad por confinamiento debido a los parámetros  $L$  y  $A$ , y por lo tanto, las fuerzas de lubricación son altas para gran parte de las capas de lubricación; esto se observa con valores de color rojo en las gráficas de fuerza de lubricación relativa.

En las Figs. 4.9b, 4.10b y 4.11b se muestran las morfologías de la zona 2 con  $3 \leq SR \leq 10$  para  $A = \{10^{-5}, 10^{-4}\}$  y de  $3 \leq SR \leq 50$  para  $A = 10^{-3}$ . Lo primero que se observa es el cambio de región de la mayor densidad de interacciones entre pares de partículas. La distancia se reduce en un orden menor de magnitud, i.e.  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$ , y  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  toma valores intermedios. Además y notablemente, el número de interacciones aumenta considerablemente: un poco más del triple que para la zona 1 para los casos que presentan DST ( $\approx 5200$ , 3.2 veces más); sin embargo, para el caso que no presenta engrosamiento,  $A = 10^{-5}$ , este aumento se queda en un poco más del doble ( $\approx 4500$ , 2.2 veces más). La capa de lubricación muestra una respuesta biviscosa con  $\eta_{conf}$  y  $\eta_{bult}$  debido al aumento de la rapidez de corte local en la capa de lubricación. Además,  $\eta_{conf}$  tiene un mayor aporte de  $\Delta\eta$  a consecuencia de que los de pares de partículas se encuentran más cercanos. Para  $A = 10^{-5}$  la fuerza de lubricación relativa no supera más de 2 veces la fuerza de lubricación Newtoniana, mientras para  $A = \{10^{-4}, 10^{-3}\}$ , pese a no ser los valores más altos, i.e. 10 veces la Newtoniana, sigue en valores intermedios de 3 a 4 veces la fuerza de lubricación Newtoniana. Aunado a este comportamiento de la matriz y de la fuerza de lubricación relativa, es de relevancia el número de interacciones, ya que además de existir capas de lubricación con respuesta biviscosa, hay un aumento notorio de pares de partículas interaccionando a menor distancia.

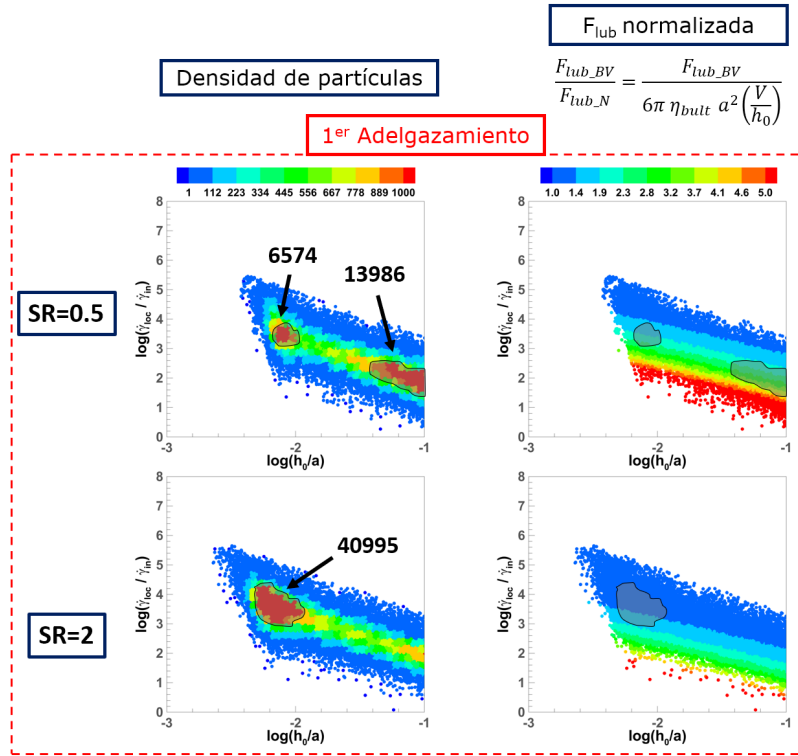
Por último, para los casos que presentan CST y DST no sostenido,  $A = \{10^{-5}, 10^{-4}\}$  respectivamente, se presenta la morfología de la zona 3 en las Figs. 4.9c y 4.10c. La densidad de interacciones entre pares de partículas se mantiene en  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$  y  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 3$ . La diferencia con respecto a la zona 2 es el número de interacciones, que disminuye dramáticamente ( $\approx 13000$  interacciones menos) conforme se aumenta  $SR$ . Durante este segundo adelgazamiento,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  ocasiona que la capa de lubricación tenga una respuesta biviscosa dominada por  $\eta_{bult}$  y, con la disminuida cantidad de interacciones, provoca que no se exhiba el efecto de  $\eta_{conf}$ . Esto se ve representando como una fuerza de lubricación entre 1-1.2 veces la fuerza de lubricación Newtoniana para ambos valores de  $A = \{10^{-5}, 10^{-4}\}$ .

Recordando que la respuesta monoviscosa o biviscosa está en función del parámetro  $A$  a través de las Ecuaciones (2.3) y (2.4), y que durante un comportamiento biviscoso la viscosidad de la matriz está descrita a través de las Ecuaciones (2.1) y (2.2); el parámetro  $A$  establece una respuesta monoviscosa o biviscosa, y además, cuando se presenta la respuesta biviscosa establece una viscosidad dominante entre  $\eta_{conf}$  y  $\eta_{bult}$  en las capas de lubricación. Cuando  $A = 10^{-5}$ , la rapidez de corte crítica es  $\dot{\gamma}_{crit} = 10^{-4}$  para  $SR < 0.5$  y  $h_0 = 10^{-1}$ , por lo que gran parte de las capas de lubricación tienen  $\dot{\gamma}_{loc} > \dot{\gamma}_{crit}$ , lo cual representa una respuesta biviscosa dominada por  $\eta_{bult}$ . En contraste, con  $A = 10^{-3}$ , las capas de lubricación pueden mostrar una respuesta biviscosa dominadas por  $\eta_{conf}$  a causa del aumento del valor a  $\dot{\gamma}_{crit} = 10^{-2}$  para  $SR < 3$  y  $h_0 = 10^{-1}$ , es decir, se amplía el umbral en dos órdenes de magnitud para el cual la matriz presenta una viscosidad  $\eta_{conf}$ . Para valores intermedios  $3 \leq SR \leq 10$  con distancias del orden de  $h_0 = 10^{-2}$ , la rapidez de corte crítica queda como  $\dot{\gamma}_{crit} = 10^{-3}$  para  $A = 10^{-5}$ , y  $\dot{\gamma}_{crit} = 10^{-1}$  para  $A = 10^{-3}$ . De igual

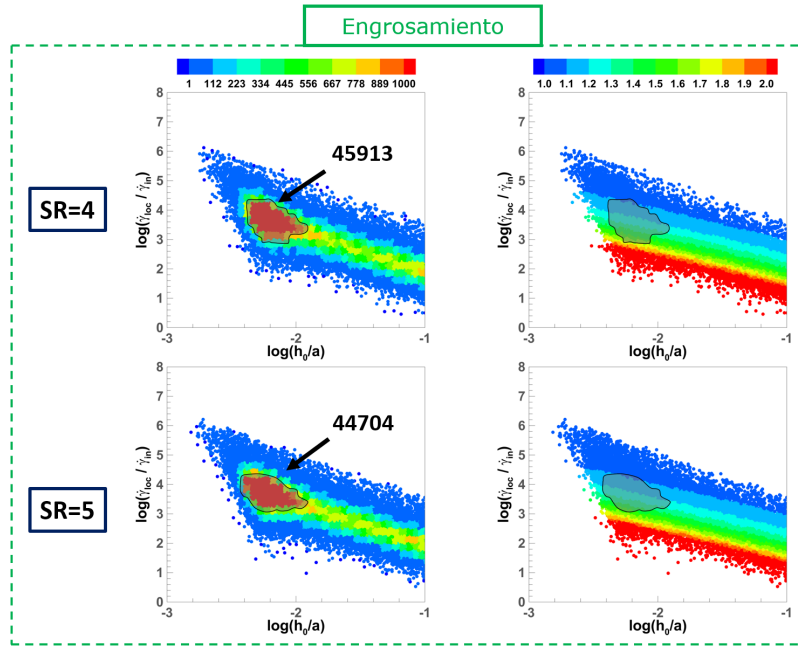
manera, para valores mayores de  $A$ , la rapidez de corte en la que se presenta una respuesta biviscosa que sea dominada por  $\eta_{conf}$  aumenta, promoviendo que la fuerza de lubricación sea mayor con respecto a una fuerza de lubricación Newtoniana. Para  $A = 10^{-3}$ , las capas de lubricación dominadas por  $\eta_{conf}$  se mantienen, mientras que para  $A = 10^{-5}$  no; esto explica el DST observado para  $A = 10^{-3}$  y el continuo adelgazamiento para  $A = 10^{-5}$ . Además de estas fuerzas de lubricación relativamente altas para  $A = 10^{-3}$ , en las gráficas de densidad de partículas de la Fig.4.11 se observa un aumento importante del número de interacciones; para observar CST o DST, se requiere de fuerzas de lubricación relativamente grandes y de un mayor número de interacciones que tengan dicha fuerza de lubricación.

Siguiendo con altas  $SR$ , para  $A = 10^{-3}$  ya no se observa un segundo adelgazamiento al corte. Para  $A = 10^{-5}$  con  $SR > 5$ , la capa de lubricación experimenta una  $\dot{\gamma}_{loc} \geq \dot{\gamma}_{crit}$  en la mayor parte de las capas de lubricación, provocando que, durante la respuesta biviscosa, la viscosidad predominante sea  $\eta_{bult}$ , disminuyendo así la fuerza de lubricación y aproximándose a una fuerza de lubricación Newtoniana. Este comportamiento con respecto a  $A$  explica el segundo adelgazamiento a altos valores de  $SR$ .





(a)



(b)

Figura 4.9: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $A = 10^{-5}$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

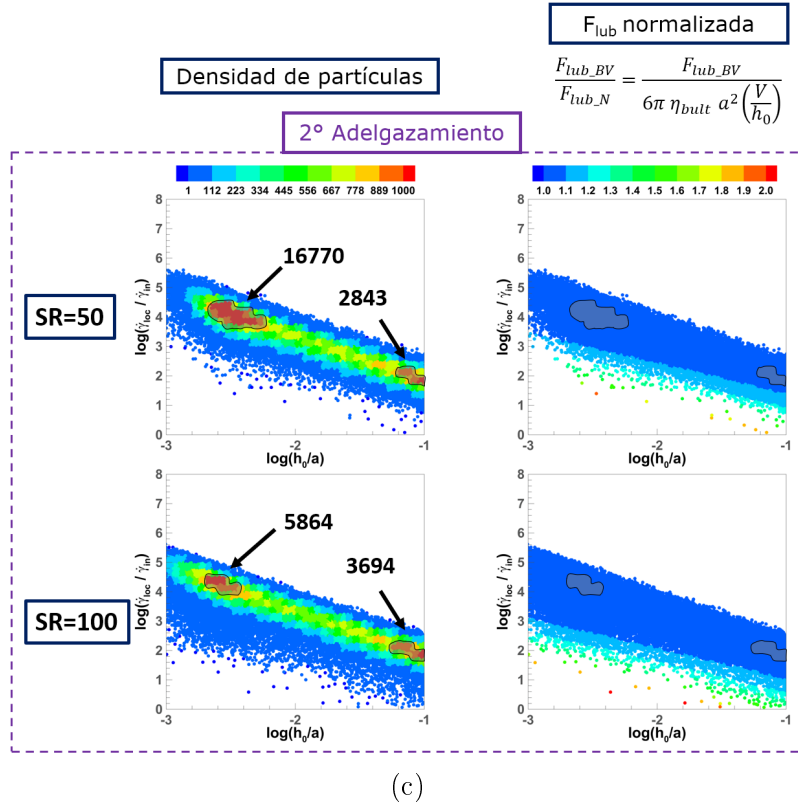
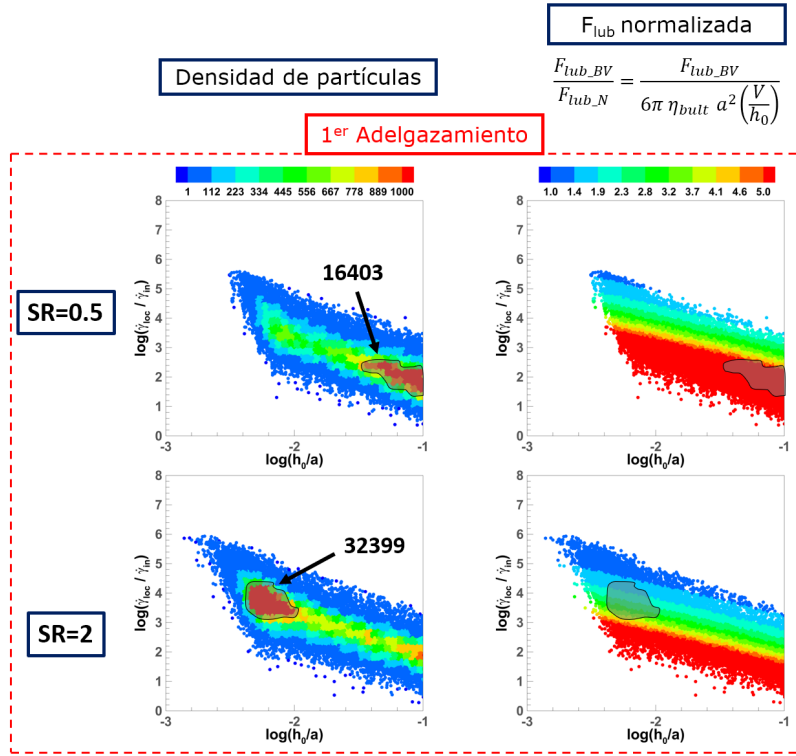
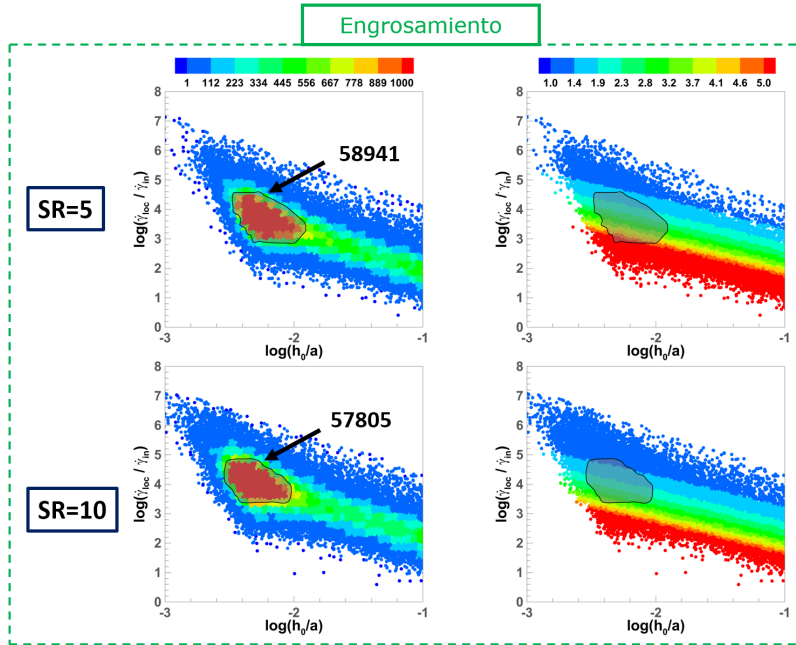


Figura 4.9: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{lm}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $A = 10^{-5}$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .



(a)



(b)

Figura 4.10: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $A = 10^{-4}$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

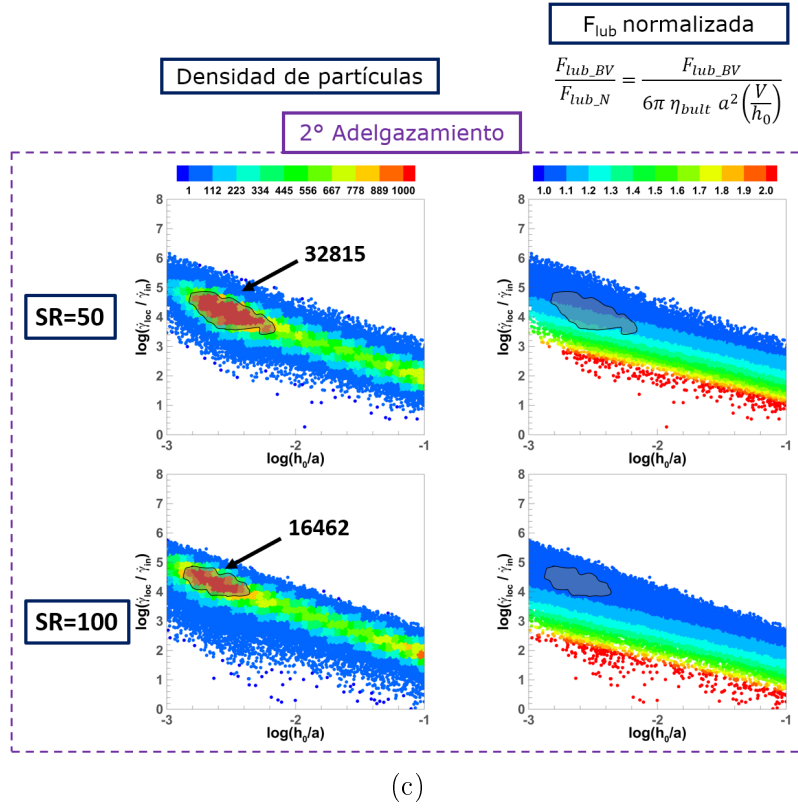


Figura 4.10: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $A = 10^{-4}$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

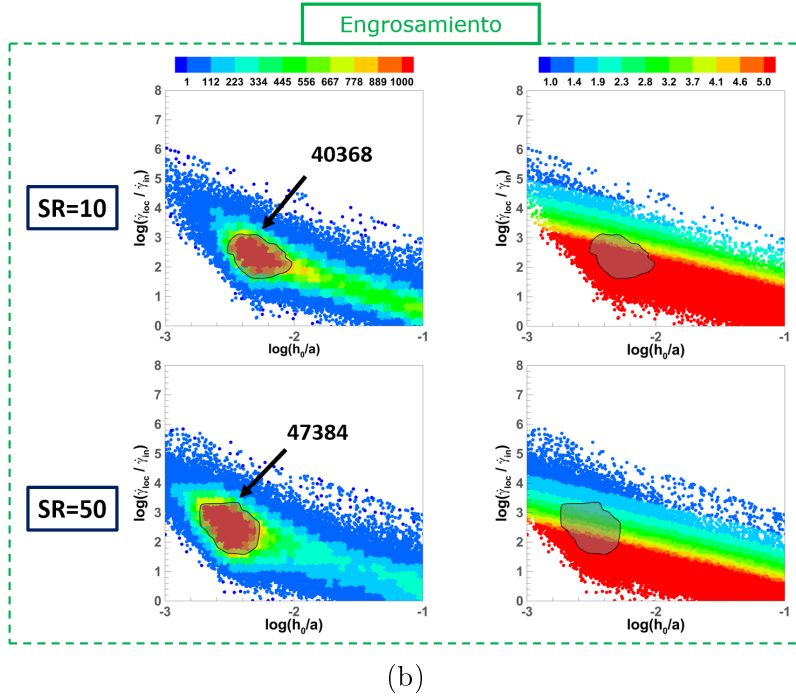
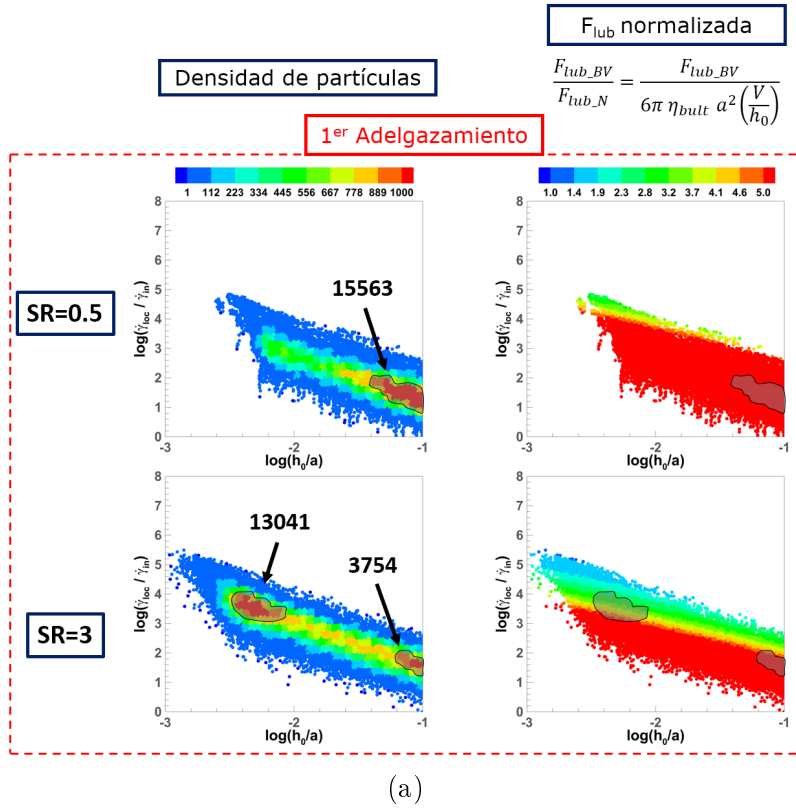


Figura 4.11: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $A = 10^{-3}$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

## Variación de $L$

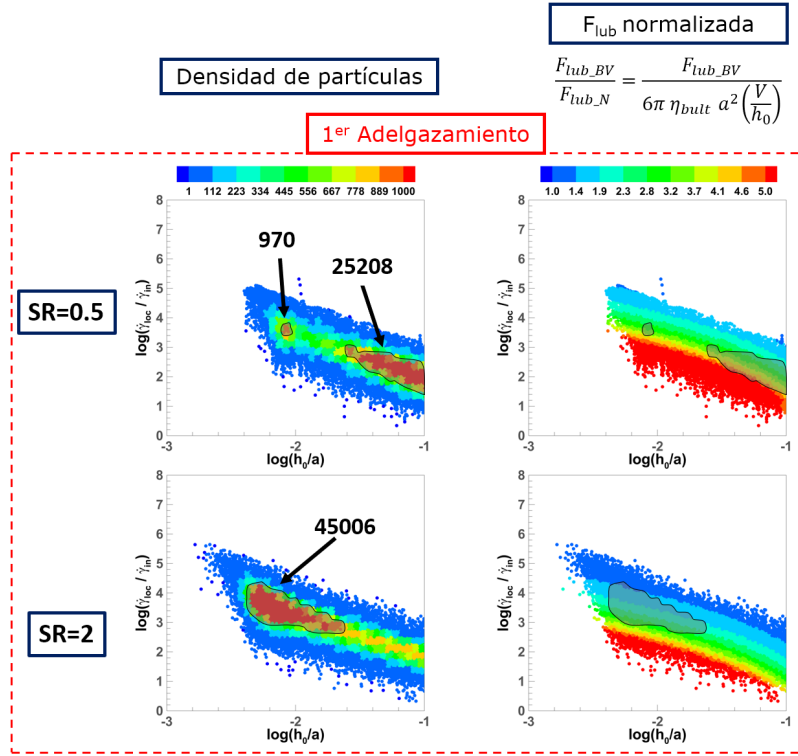
En las Figs. 4.12 y 4.13 se muestran las morfologías de los tres casos del comportamiento de la viscosidad para la variación de  $L$ . La morfología a  $SR < 3$  se muestra en las Figs. 4.12a y 4.13a. Se observa una evolución de la morfología al disminuir las distancias de las interacciones entre partículas, pasando de  $\frac{h_0}{a} = 10^{-1}$  a  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$  y  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^2$  a  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^3$ . También, se observa el aumento del número de interacciones de pares de partículas y la disminución de la fuerza de lubricación.

El número de interacciones de pares de partículas aumenta significativamente durante el engrosamiento con  $5 \leq SR \leq 10$ . Este aumento es más evidente para  $L = 10$  que para  $L = 0.1$ , lo cual puede ser atribuido a la baja fuerza de lubricación (entre 1 - 3 la Newtoniana) presente para  $L = 0.1$ , lo que facilita la aproximación de las partículas, incluso a bajas  $SR$ . En cambio, para  $L = 10$ , la fuerza de lubricación se mantiene en valores intermedios (entre 3 - 5 la Newtoniana) e impide la fácil aproximación de las partículas a bajas  $SR$  y sólo al aumentar más la  $SR$  las partículas, éstas pueden acercarse e aumentar el número de interacciones, como se observa en las Figs. 4.12b y 4.13b. Por otro lado, se mantienen las distancias cortas de  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$  y altos valores de rapidez de corte local,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^3$ .

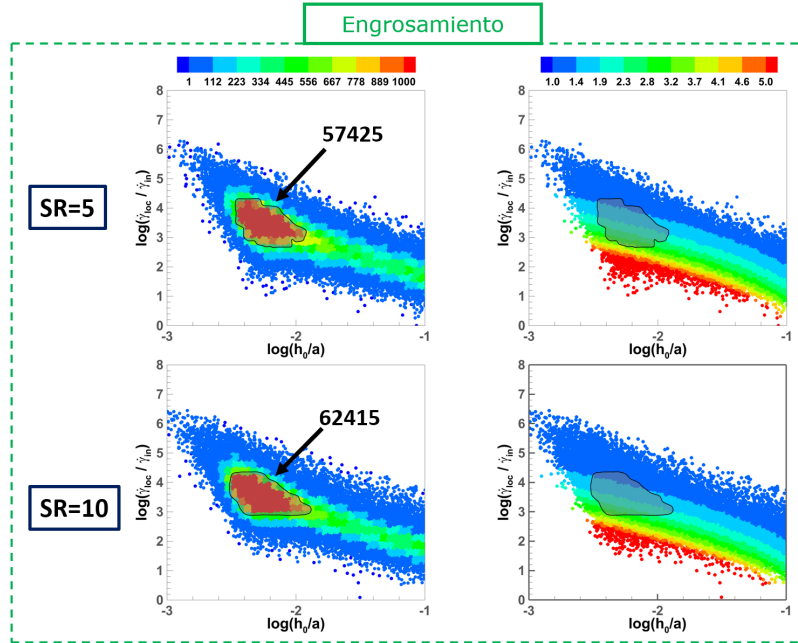
En las Figs. 4.12c y 4.13c se muestra la morfología durante el segundo adelgazamiento. Al aumentar  $SR$ , el número de interacciones disminuye al igual que la fuerza de lubricación, lo cual prácticamente se reduce a una fuerza de lubricación Newtoniana. Las distancias cortas de  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$  y  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^3$  se mantienen.

Como se observa en la Fig. 4.2, las curvas de viscosidad tienen diferentes comportamientos dependiendo del valor de  $L$ . Cuando  $L = 0.1$  se presenta CST, en contraste,

cuando  $L = \{1, 10\}$  se presenta DST. De acuerdo con la Ecuación (2.2) el valor de  $\eta_{conf}$  está modulado por  $L$ , en consecuencia, la distancia entre los pares de partículas debe ser más pequeña con  $L = 0.1$ , para que la viscosidad por confinamiento  $\Delta\eta$  se manifieste por completo en  $\eta_{conf}$ . Cuando  $L = 0.1$ , la viscosidad bajo confinamiento  $\eta_{conf}$  a distancias del orden de  $h_0 = 10^{-1}$  es de  $\eta_{conf} = 4.68$ ; por otro lado, para  $L = \{1, 10\}$  son de  $\eta_{conf} = \{10.05, 10.90\}$ . Cuando el orden de separación disminuye a  $h_0 = 10^{-2}$ , el valor para  $L = 0.1$  es de  $\eta_{conf} = 10.05$  y para  $L = \{1, 10\}$  son de  $\eta_{conf} = \{10.90, 10.99\}$ . Es decir, las regiones de la capa de lubricación en las cuales  $\dot{\gamma}_{loc} < \dot{\gamma}_{crit}$  exhiben una viscosidad bajo confinamiento  $\eta_{conf}$  menor con  $L = 0.1$  en comparación con  $L = \{1, 10\}$ . La diferencia es más evidente a  $SR < 0.5$ , en el cual  $h_0 = 10^{-1}$  y se presenta la meseta Newtoniana; la curva de  $L = 0.1$  empieza por debajo de las curvas correspondientes a  $L = \{1, 10\}$  debido a este efecto de la longitud crítica,  $L$ .



(a)



(b)

Figura 4.12: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $L = 0.1$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $A = 10^{-4}$ .



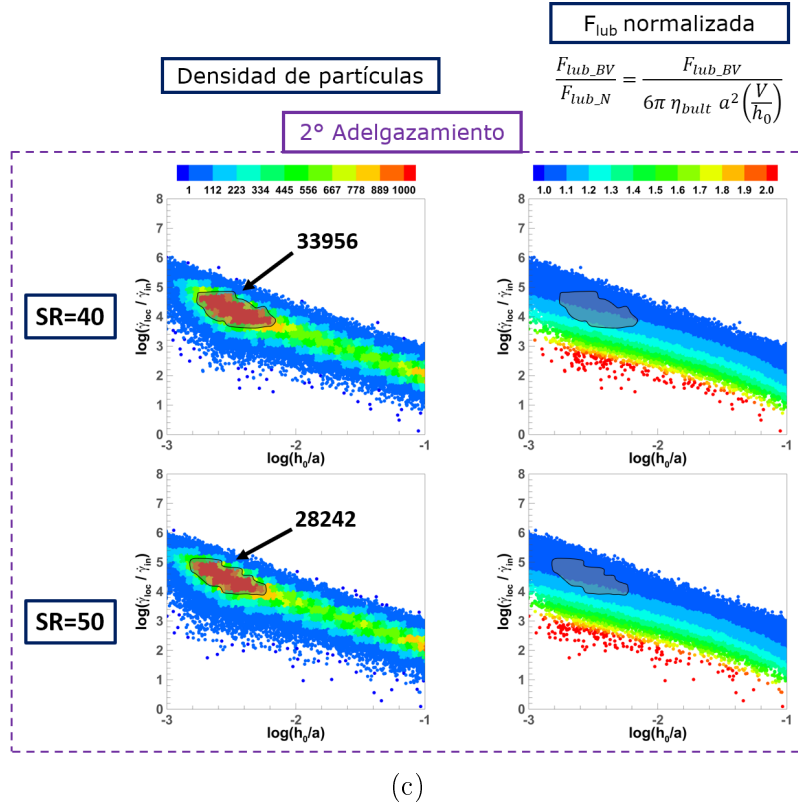


Figura 4.12: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo bivisco funcionalizado con  $L = 0.1$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $A = 10^{-4}$ .

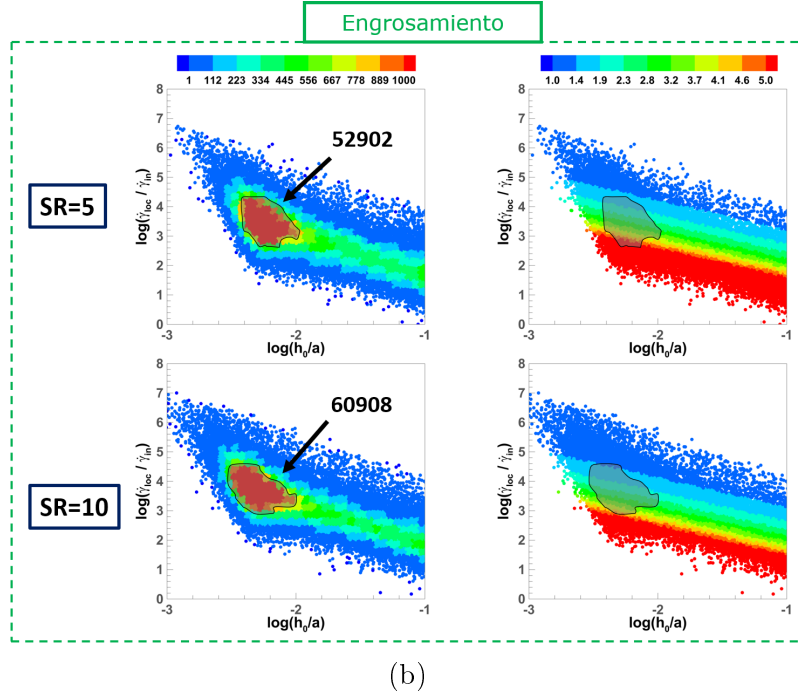
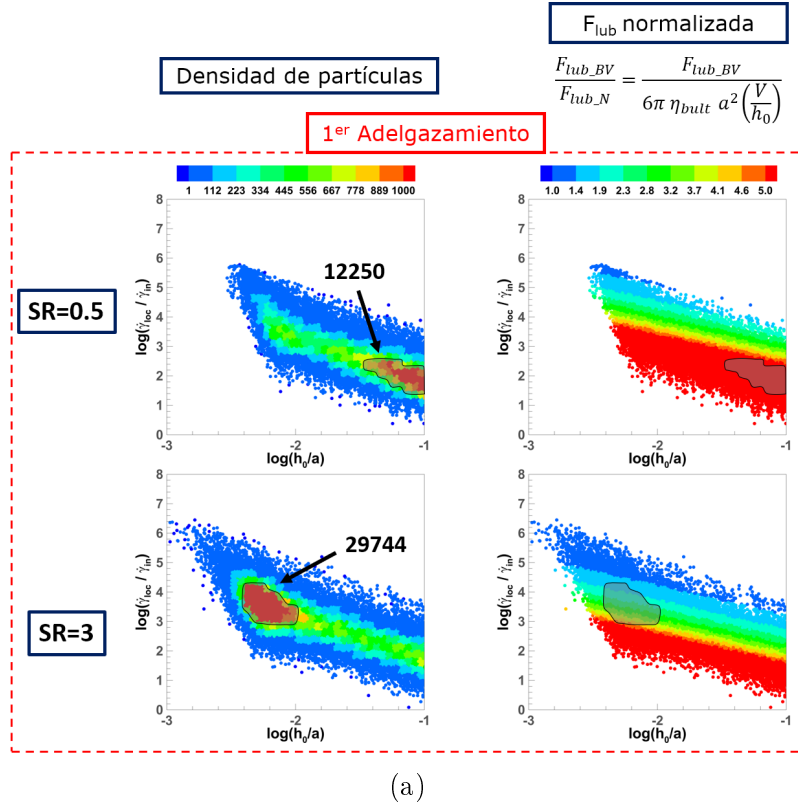


Figura 4.13: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $L = 10$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $A = 10^{-4}$ .

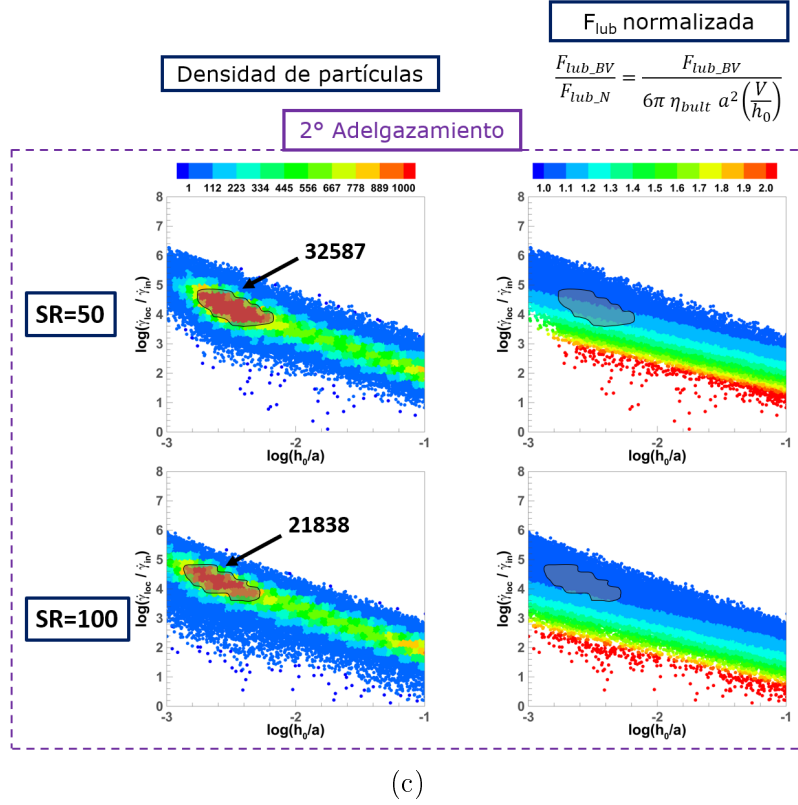


Figura 4.13: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $L = 10$ ,  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $A = 10^{-4}$ .

### Variación de $\phi$

En las Figs. 4.14 y 4.15 se muestran las morfologías para la variación de  $\phi$  de sólo dos zonas del comportamiento de la viscosidad, i.e. 1<sup>er</sup> adelgazamiento y engrosamiento al corte. En las Figs. 4.14a y 4.15a se muestra la morfología para  $SR < 3$ . Durante el 1<sup>er</sup> adelgazamiento se muestra el cambio de las distancias de las interacciones entre partículas se acortan, pasando de  $\frac{h_0}{a} = 10^{-1}$  a  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$  y de rapidezces de corte locales de  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^2$  a  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^3$ . Como se esperaba, a menor concentración de sólidos  $\phi$ , el número de interacciones entre pares de partículas es menor, debido

a la menor cantidad de partículas suspendidas.

Como se observa en las Figs. 4.14b y 4.15b, durante el DST en el intervalo  $10 \leq SR \leq 40$ , el número de interacciones de pares de partículas aumenta notablemente. Este aumento del número de pares de partículas es diferente para cada fracción de volumen; la relación entre el número de interacciones durante el DST contra el número de interacciones antes del DST, aumenta al disminuir  $\phi$ . Para  $\phi = 0.40$  esta relación es de 31.7, para  $\phi = 0.45$  la relación es de 6.4 y para  $\phi = 0.48$  la relación es de 2.7. Esta diferencia para  $\phi$  se puede deber a la mayor facilidad de movimiento de las partículas a bajos valores de  $\phi$ , dado que hay más espacio entre partículas. Cuando las partículas interactúan, éstas mantienen separaciones cortas de  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$  y rapidezces locales de  $\frac{\dot{u}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^3$  para las tres fracciones de volumen.

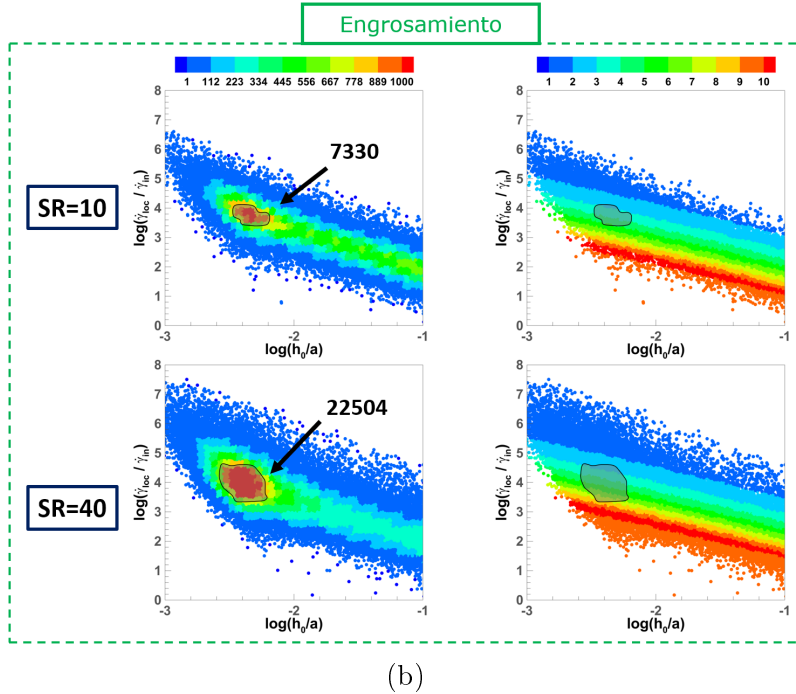
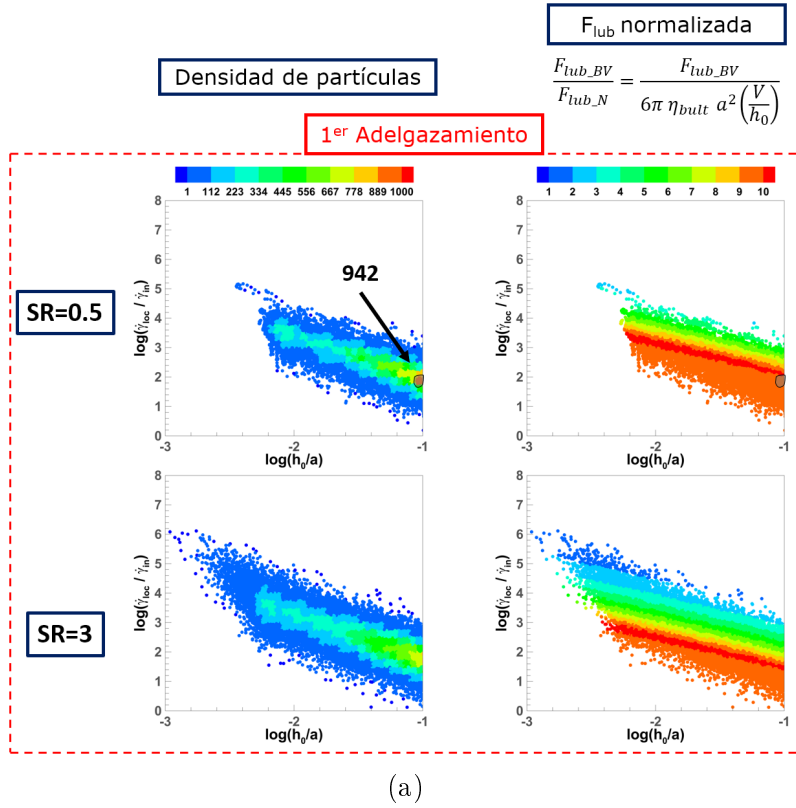


Figura 4.14: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $\phi = 0.40$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $A = 10^{-3}$ ,  $L = 1$ .

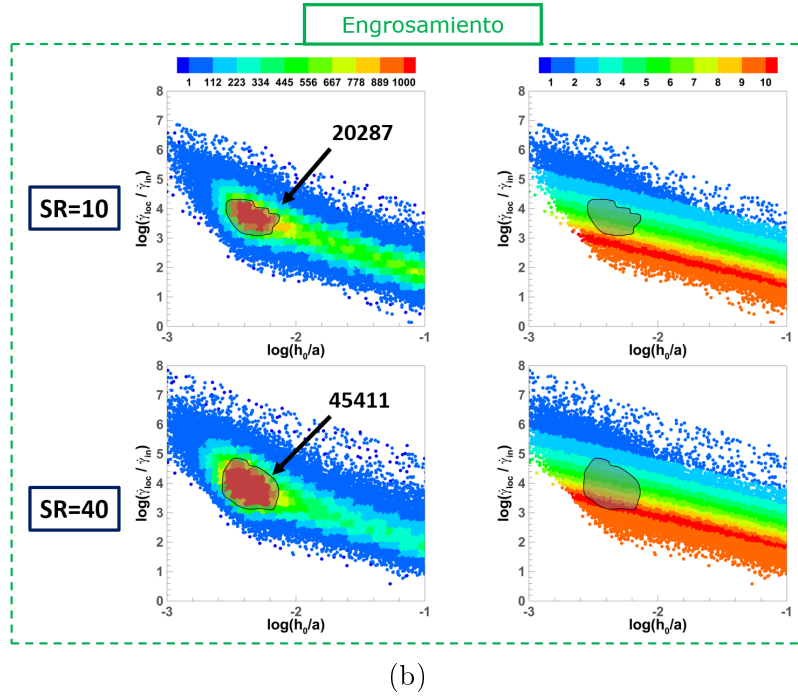
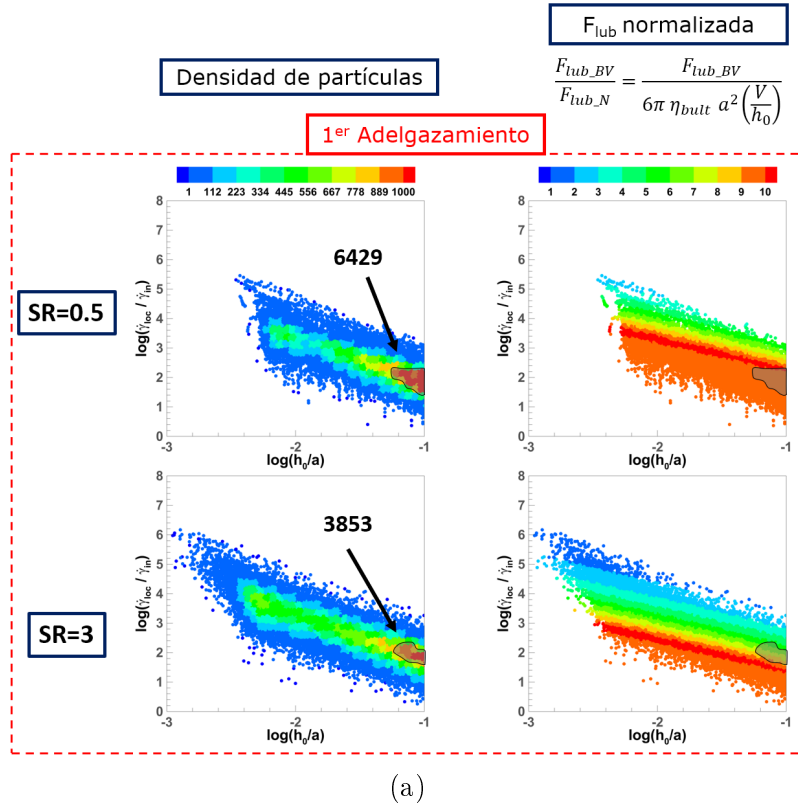


Figura 4.15: Rapidez de corte local adimensional,  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$ , contra la separación entre partículas adimensional,  $\frac{h_0}{a}$ , para diferentes  $SR$  (filas); usando el modelo biviscoso funcionalizado con  $\phi = 0.45$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $A = 10^{-3}$ ,  $L = 1$ .

### 4.3.2. Videos del movimiento de la suspensión

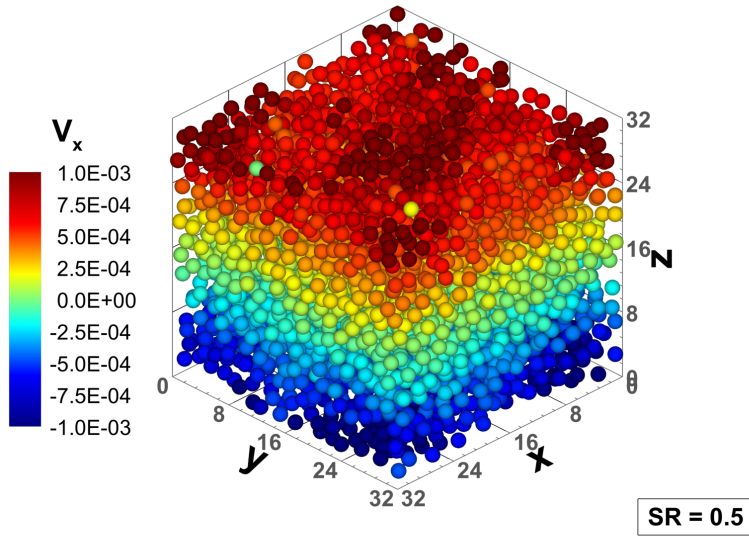
Estos videos se realizan a partir de la posición de cada partícula  $(x, y, z)$  y su velocidad  $(V_x, V_y, V_z)$  a diferentes pasos de tiempo donde se ilustra el avance de las partículas debido al movimiento de las placas. Los videos se realizaron graficando el campo de flujo tridimensional en cada paso de tiempo; además se agregó una escala de color que representara la velocidad en la dirección del flujo  $V_x$ . En las Figs. 4.16, 4.17 y 4.18 se muestran instantes de dichos videos en los cuales se ilustran las tres zonas (1<sup>er</sup> adelgazamiento, engrosamiento y 2<sup>o</sup> adelgazamiento al corte) para los parámetros que muestran los distintos comportamientos de CST-DST; i.e. variación de  $A$  con  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta = 10$  y  $L = 1$ .

a) *Meseta Newtoniana*. Cuando el fluido se somete a muy bajas rapidezces de corte ( $SR < 0.5$ ) y se tiene una condición de flujo reptante, esto produce la meseta con viscosidad constante a bajas  $SR$  en las figuras presentadas en el Capítulo 4.1. En las Figs. 4.16a, 4.16b y 4.16c se observa que el gradiente de  $V_x$  está bien definido, representado por una escala de colores a la largo de la dirección del gradiente  $z$ . Como se observa en las gráficas de densidad de partículas, la región con mayor densidad de partículas se encuentra a  $\frac{h_0}{a} = 10^{-1}$ . Por otro lado, la fuerza de lubricación con respecto a una fuerza de lubricación Newtoniana es alta, lo que provoca que se manifieste una viscosidad de la suspensión más alta con respecto a una matriz Newtoniana.

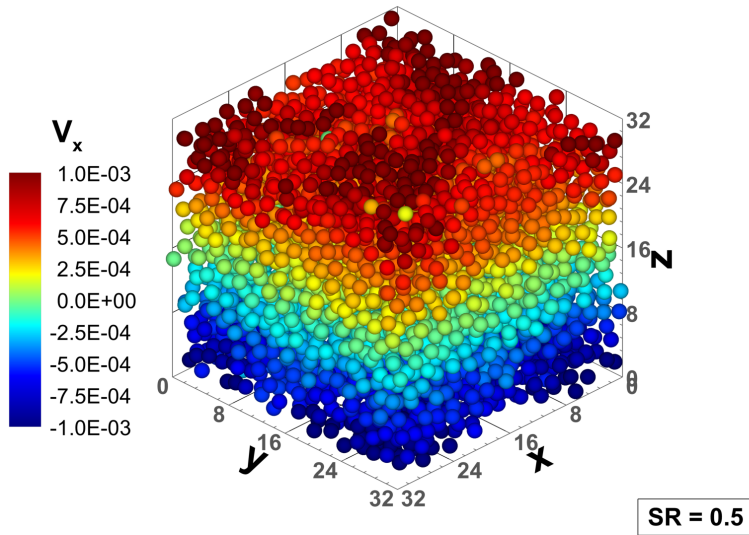
b) *1<sup>er</sup> adelgazamiento al corte*. Al aumentar  $SR$ , la separación entre partículas disminuye a la vez que la rapidez de corte local se aumenta. Una mayor rapidez de corte local implica que haya regiones de las capas de lubricación que tengan una respuesta biviscosa y que sobrepasen el umbral en el cual se presenta  $\eta_{conf}$  y tomen el valor

de  $\eta_{bult}$ , permitiendo que la matriz fluya con mayor facilidad entre las superficies de las partículas. Una menor viscosidad de la capa de lubricación también permite el movimiento de las partículas, ocasionando una disminución de la viscosidad de la suspensión. Este comportamiento produce el 1<sup>er</sup> adelgazamiento de la suspensión e implica un cambio en la morfología de la suspensión. Para el caso particular de  $A = 10^{-5}$ , el umbral en el cual se presenta  $\eta_{conf}$  es muy pequeño (de acuerdo con la Ecuación (2.3)), tal que incluso con una pequeña rapidez de corte adimensional impuesta, como con  $SR < 0.5$ , la mayoría de capas de lubricación tendrán una respuesta biviscosa dominada por  $\eta_{bult}$  debido a que  $\dot{\gamma}_{loc} \geq \dot{\gamma}_{crit}$ .



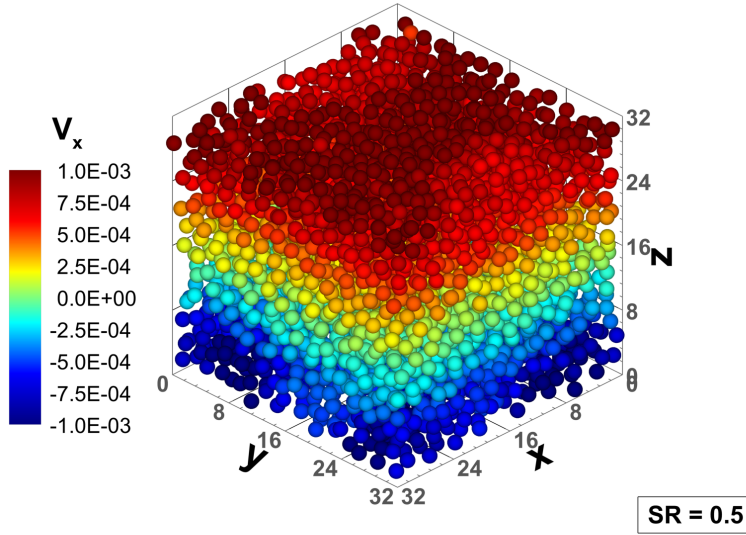


(a) 1<sup>er</sup> adelgazamiento para  $A = 10^{-5}$ .



(b) 1<sup>er</sup> adelgazamiento para  $A = 10^{-4}$ .

Figura 4.16: Instantes de los videos para la variación de  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

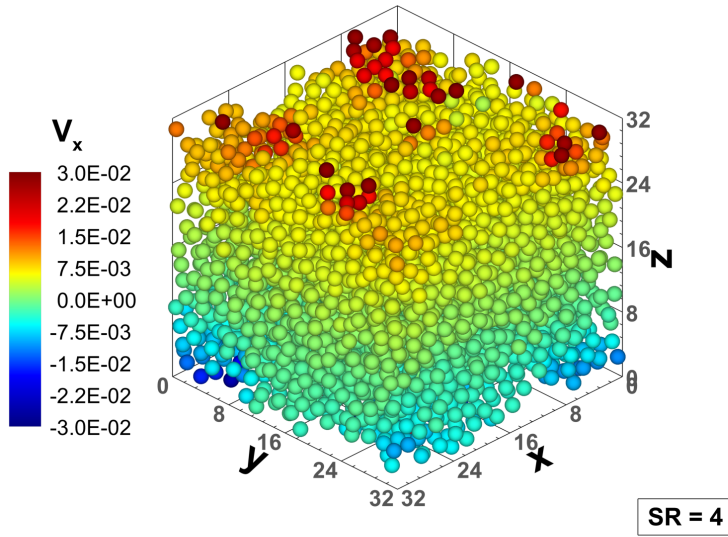


(c) 1<sup>er</sup> adelgazamiento para  $A = 10^{-3}$ .

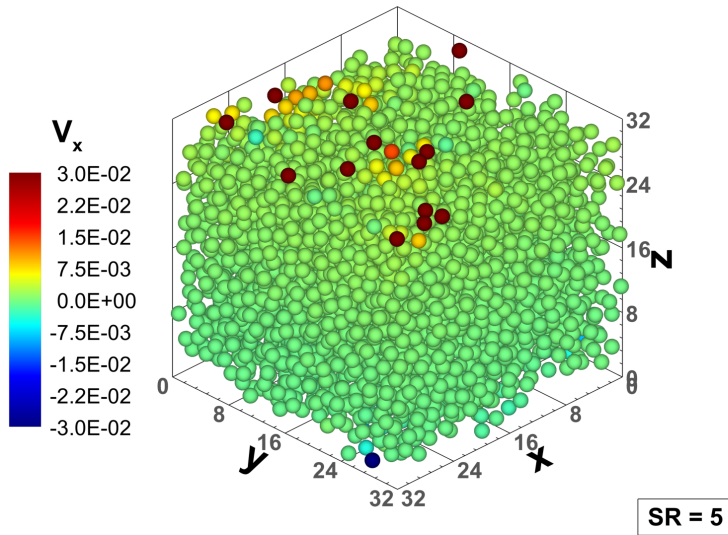
Figura 4.16: Instantes de los videos para la variación de  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

c) *Engrosamiento al corte*. Para  $A = \{10^{-4}, 10^{-3}\}$ , casos en que se presenta DST, se observa que las partículas disminuyen su velocidad en la dirección del flujo  $V_x$  y se mueven como un bulto al aumentar  $SR$ ; es decir, no presentan una gradiente de velocidades en la dirección  $z$ . Esto se representa con una suspensión con color homogéneo en el dominio de flujo. Por otra parte, la matriz sigue en movimiento a través de las separaciones entre partículas, las cuales se encuentran más cercanas unas de otras. Lo anterior se puede observar en las gráficas de densidad de partículas, en las cuales se aprecia que, durante el engrosamiento  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  aumenta a valores  $\approx 10^3 - 10^5$ , lo que marca que la rapidez de corte de la capa de lubricación aumenta con respecto a la rapidez de corte de las partículas. Asimismo, el elevado valor

de  $\dot{\gamma}_{loc}$  hace que algunas capas de lubricación presenten una respuesta biviscosa dominada por  $\eta_{bult}$ , mientras otras capas de lubricación están dominadas por  $\eta_{conf}$  con el aporte de  $\Delta\eta$  dado por el acercamiento de las partículas; esto se observa en las Figs. 4.9b, 4.10b y 4.11b, en las cuales se observa que la mayor cantidad de interacciones está en el orden de  $\frac{h_0}{a} = 10^{-2}$ . Estas fuerzas de lubricación con respuesta biviscosa se ven reflejadas en una fuerza de lubricación intermedia con respecto a una Newtoniana, manteniendo a las partículas “pegadas” y aumentando el número de interacciones entre pares de partículas, formando un bulto de partículas. Este bulto, que se mueve con un sólido, no se deforma, permitiendo reproducir el engrosamiento de la suspensión.

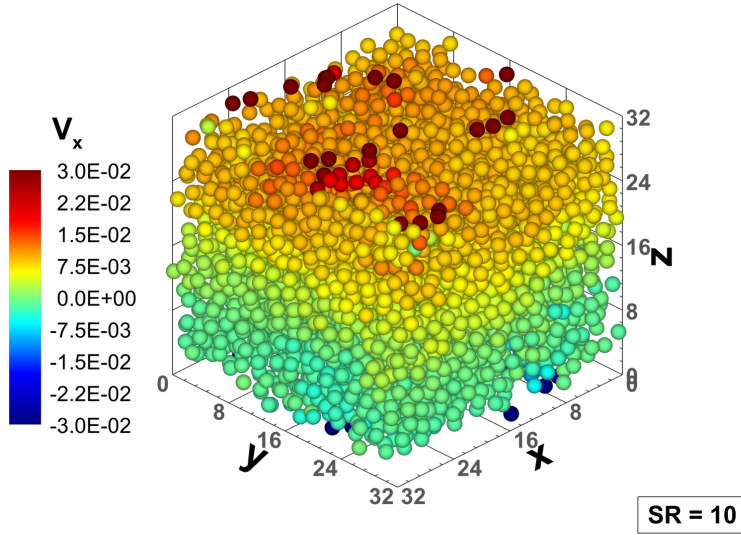


(a) Engrosamiento para  $A = 10^{-5}$ .



(b) Engrosamiento para  $A = 10^{-4}$ .

Figura 4.17: Instantes de los videos para la variación de  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

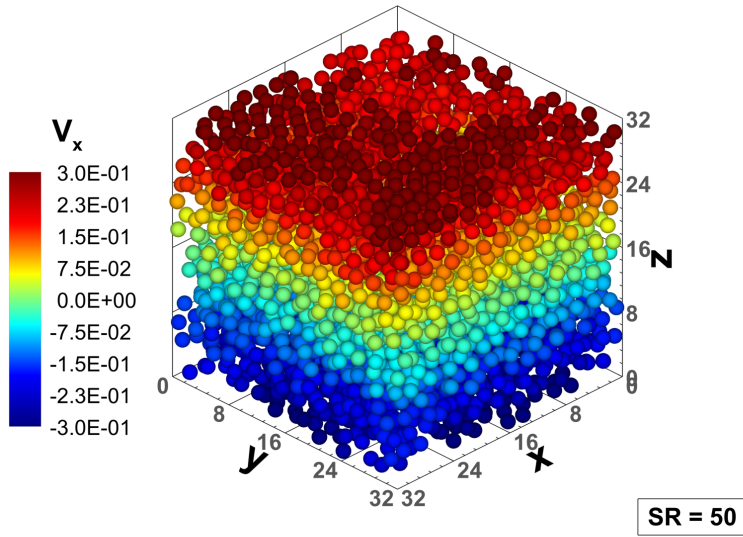


(c) Engrosamiento para  $A = 10^{-3}$ .

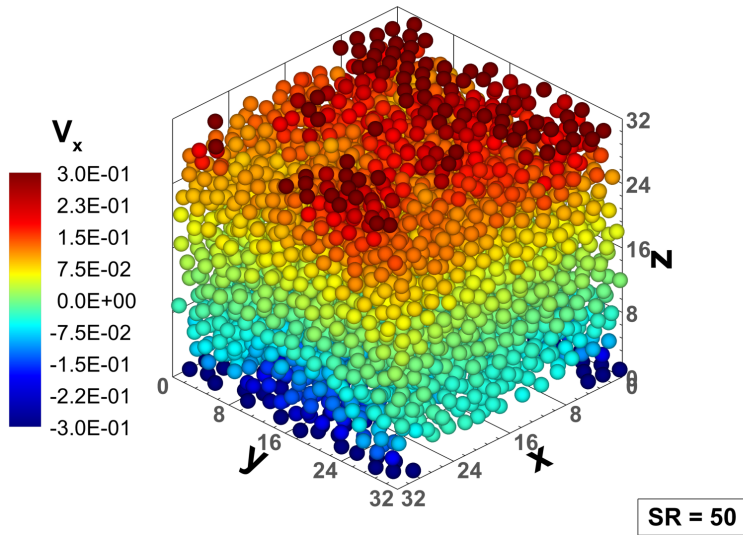
Figura 4.17: Instantes de los videos para la variación de  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

d) 2° adelgazamiento al corte. A medida que  $SR$  aumenta, la rapidez de corte local crece, pero se mantiene la relación  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}} = 10^3$ . El aumento de  $\dot{\gamma}_{loc}$  provoca que las capas de lubricación experimenten una respuesta biviscosa dominada por  $\eta_{bult}$ , provocando que la fuerza de lubricación sea prácticamente la fuerza de lubricación Newtoniana y, como consecuencia, permite que las partículas se muevan nuevamente. En las Figs. 4.9c y 4.10c se aprecia la formación del gradiente de  $V_x$  en la dirección  $z$ . Esta disminución de la fuerza de lubricación a altos  $SR$  se ve reflejada en el aumento de la velocidad en la dirección del flujo  $V_x$ , permitiendo que las partículas comiencen a separarse, disminuyendo el número de interacciones, y que el sistema fluya. Esta fenomenología explica el segundo adelgazamiento al corte visto en la

Fig. 4.1. En contraste, cuando se presenta el DST sostenido, como en el caso de  $A = 10^{-3}$ , el valor de  $\frac{\dot{\gamma}_{loc}}{\dot{\gamma}_{in}}$  decrece a valores  $\approx 10^2 - 10^3$ ; para este caso domina  $\eta_{conf}$ , incluso a altos valores de  $\dot{\gamma}_{loc}$ . De este modo, las capas de lubricación mantienen una viscosidad alta que permite que se exhiba una fuerza de lubricación grande con respecto a una fuerza de lubricación Newtoniana a altas  $\dot{\gamma}_{loc}$ , impidiendo que las partículas comiencen a separarse a medida que se aumenta  $SR$ . Como resultado, la suspensión experimenta DST sostenido a causa de la cercanía entre los pares de partículas, la alta viscosidad a valores altos de  $SR$  y fuerzas de lubricación altas. Con esto se produce una disminución del movimiento, tanto de las partículas como de la matriz, impidiendo que el sistema vuelva a fluir, de modo que la suspensión exhibe un comportamiento tipo sólido, que se ve reflejado en un aumento significativo de la viscosidad.



(a) 2° adelgazamiento para  $A = 10^{-5}$ .



(b) 2° adelgazamiento para  $A = 10^{-4}$ .

Figura 4.18: Instantes de los videos para la variación de  $A$  con el modelo FBV con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$  y  $L = 1$ .

## 4.4. Mecanismo

De acuerdo con lo presentado en este Capítulo 4, es posible reproducir un engrosamiento al corte continuo (CST) y discontinuo (DST) a través de las fuerzas de lubricación no Newtonianas con la funcionalización de la viscosidad con respecto a la distancia entre la superficie de las partículas. Se puede proponer un mecanismo que permite describir las tres zonas de la fenomenología típica de suspensiones concentradas no coloidales de esferas rígidas (Abdoulaye et al., 2017; Brown y Jeager, 2014; Denn et al., 2018; Mewis y Wagner, 2009; Wagner y Brady, 2009). Con el apoyo de las gráficas de densidad de partículas, la fuerza de lubricación relativa a una fuerza de lubricación Newtoniana y las capturas de los videos que muestran el movimiento de las partículas y los diferentes juegos de parámetros del modelo biviscoso funcionalizado (Capítulo 2).

Este mecanismo tiene en cuenta la magnitud de la fuerza de lubricación, que está en función de la respuesta biviscosa de la matriz y de la magnitud de las viscosidades  $\eta_{bult}$  y  $\eta_{conf}$ , en donde se integra el aumento de la viscosidad por confinamiento  $\Delta\eta$ , la separación entre la superficie de las partículas  $h_0$ , los parámetros  $A$  y  $L$  que modulan la respuesta biviscosa. También, se toma en cuenta el número de pares de partículas que interaccionan como consecuencia del movimiento impuesto por las placas en movimiento, lo cual se representa a través de la morfología de la suspensión.

Primero se describe el impacto que tienen los parámetros del modelo biviscoso funcionalizado en la respuesta reológica de la simulación de suspensiones concentradas. Posteriormente, se describen las características de la fenomenología con el fin de proponer el mecanismo que promueve cada una de las tres zonas.



## Parámetros del modelo biviscoso funcionalizado

Tienen relevancia para el 1<sup>er</sup> adelgazamiento, engrosamiento y 2° adelgazamiento, ya que modulan la viscosidad de la matriz de acuerdo con rapidez de corte adimensional impuesta y a la distancia entre partículas durante la respuesta biviscosa de la matriz.

- El parámetro  $\Delta\eta$  aporta el aumento por confinamiento de la viscosidad de la matriz en la capa de lubricación cuando  $\dot{\gamma}_{loc} < \dot{\gamma}_{crit}$  y cuando la distancia entre la superficie de las partículas  $h_0$  es lo suficientemente pequeña.
- El parámetro  $L$  indica la distancia entre partículas en la cual se empieza a presentar el aporte de la viscosidad por confinamiento  $\Delta\eta$ .
- El parámetro  $A$  marca el umbral de la rapidez de corte en el que se presenta una viscosidad bajo confinamiento,  $\eta_{conf}$ , o una viscosidad de bulto,  $\eta_{bult}$ , cuando la matriz presenta una respuesta biviscosa en la capa de lubricación.

## Características de la fenomenología y mecanismo

1<sup>er</sup> **Adelgazamiento al corte.** El cambio de la viscosidad de la suspensión que pasa de una viscosidad constante a bajas rapidezces de corte seguida por el adelgazamiento se describe por:

- aumento leve del número de interacciones de partículas.
- La distancia de separación entre la superficie de las partículas comienza a acortarse.
- La capa de lubricación durante la respuesta biviscosa está dominada por  $\eta_{conf}$  (con separaciones del orden  $h_0 = 10^{-1}$ ).

- La fuerza de lubricación comienza a disminuir su magnitud.

***Engrosamiento al corte.*** La suspensión exhibe un salto en la magnitud de la viscosidad, ya sea en modo continuo (CST) o discontinuo (DST), al aumentar la rapidez de corte, que se caracteriza por:

- Un aumento notable del número de interacciones de partículas.
- La distancia de separación entre la superficie de las partículas se acorta en una magnitud, es decir, se confina la matriz.
- La capa de lubricación durante la respuesta biviscosa está dominada por  $\eta_{conf}$  (con separaciones del orden  $h_0 = 10^{-2}$ ).
- La fuerza de lubricación mantiene su magnitud relativa entre 3-4 veces la fuerza de lubricación Newtoniana.

***2° Adelgazamiento al corte.*** Cuando el engrosamiento al corte no se sostiene se presenta un segundo adelgazamiento al corte a altas rapidezces de corte dado por:

- Notable disminución del número de de interacciones de partículas.
- La distancia de separación entre la superficie de las partículas se mantiene corta, la matriz sigue bajo confinamiento.
- La capa de lubricación durante la respuesta biviscosa está dominada por  $\eta_{bult}$ .
- La fuerza de lubricación tiende a una fuerza de lubricación que se acerca a la Newtoniana.

# Capítulo 5

## Conclusiones y recomendaciones

En este trabajo se propuso un mecanismo alternativo para el modelado del engrosamiento al corte continuo y discontinuo de suspensiones concentradas no coloidales de esferas rígidas, basado en las fuerzas de lubricación no Newtonianas. Se propuso una funcionalización del modelo biviscoso con respecto a la separación de las partículas en suspensión. El método utilizado para resolver el sistema es el propuesto por Kumar et al. (2021) basado en la Dinámica de Lubricación de corto alcance entre pares de partículas. Con los hallazgos obtenidos en este trabajo podemos concluir que:

1. Las fuerzas de lubricación no Newtonianas calculadas a través del modelo biviscoso funcionalizado con respecto a la separación entre partículas, permiten que la suspensión reproduzca el fenómeno de engrosamiento al corte continuo CST y discontinuo DST, sin recurrir a las fuerzas de contacto o a las interacciones entre las superficies de las partículas.

2. Los resultados obtenidos indican que el aumento de la viscosidad de la suspensión no sólo se debe a una fuerza de lubricación mayor a una fuerza de lubricación Newtoniana entre los pares de partículas promovidas por la viscosidad bajo confinamiento,  $\eta_{conf}$ , sino también se debe al aumento del número de interacciones y morfología (separación entre pares de partículas  $h_0$ ) de éstas.
3. Las diferencias de esfuerzos normales que se presenta en la suspensión en general son negativas para las distintas variaciones de los parámetros del modelo biviscoso funcionalizado. Se muestra que la fuerza de lubricación es capaz de predecir el signo negativo reportado para  $N_1$  y  $N_2$  (Cwalina y Wagner, 2014; Lee et al., 2022; Seto y Giusteri, 2018; Zarraga et al., 2000).
4. La funcionalización del modelo biviscoso con dependencia de la separación entre partículas contiene distintos juegos de parámetros que permiten reproducir CST y DST para distintas fracciones de volumen. Estos son: i)  $A$ , que modula el cambio del umbral de la rapidez de corte crítica para la activación de la respuesta biviscosa, ii)  $L$ , que representa la longitud crítica que modula la distancia en la cual se percibe el aumento de viscosidad de la matriz, iii)  $\Delta\eta$ , aumento de la viscosidad de la matriz por confinamiento y iv)  $\eta_{bult}$ , la viscosidad de bulto. De estos parámetros,  $A$  tiene el mayor impacto en la producción de CST o DST.

## 5.1. Trabajo a futuro

1. En este trabajo de investigación para la explicación de la respuesta reológica de suspensiones concentradas no coloidales de partículas esféricas sólo se consideraron las fuerzas de lubricación normales, por lo que añadir la contri-

bución de las fuerzas tangenciales puede promover un aumento adicional en la viscosidad, debido a los cambios que pueda sufrir la rapidez de corte local en la capa de lubricación.

2. Las simulaciones del flujo cortante impuesto sobre la suspensión se harán con una matriz con un comportamiento no Newtoniano continuo, i.e. el modelo de Carreau-Yasuda funcionalizado (Carreau, 1972; Yasuda et al., 1981), que intrínsecamente es más complejo que la simulación con un fluido Newtoniano (Mewis y Wagner, 2009; Morton y Jeddrey, 2014) y que el modelo biviscoso.
3. Una seria complicación en el modelado de estos sistemas de flujo es la naturaleza de las expresiones para la lubricación de corto alcance, para las cuales los términos escalan con el inverso de la separación entre partículas. Esta separación decrece con el aumento de la fracción de volumen y la rapidez de adimensional impuesta. Esto puede resultar en la divergencia de la fuerza de lubricación, por lo que es necesario escoger el método de integración correcto para evitar restricciones en el paso de tiempo (Kumar et al., 2021). Para calcular correctamente la fuerza de lubricación y reducir el número de simulaciones, como en el trabajo hecho por Wang et al. (2021) para suspensiones coloidales, en el cual emplea el aprendizaje automático basado en una regresión del proceso gaussiano (GPR, del inglés *Gaussian Process Regression*) se propone el uso del aprendizaje automático para reducir el tiempo de cálculo al relajar las restricciones para el paso de tiempo.

## 5.2. Productividad

El desarrollo de este trabajo ha permitido generar un trabajo de divulgación científica, el cual fue aceptado y presentado en la Conferencia Anual de Reología Europea (*The Annual European Rheology Conference*). López-Aguilar, J. E., Rosales-Romero, A., Vázquez-Quesada, A., Kumar, P., Sagaya, S., y Ellero, M. (2022). Effects of confinement-induced non-newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension. Presentación oral, Annual European Rheology Conference, España, Sevilla.

También se trabaja en un artículo, que se cuenta en desarrollo a la fecha de la publicación de esta tesis, que será sometido al *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* para su publicación.

# Referencias

- Abdoulaye, F., Lemaitre, A., y Ovarlez, G. (2017). Discontinuous shear thickening in cornstarch suspensions. *Powders and Grains*, 140:1–4.
- Ball, R. C. y Melrose, J. R. (1995). Lubrication breakdown in hydrodynamic simulations of concentrated colloids. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 49:19–30.
- Ball, R. C. y Melrose, J. R. (1997). A simulation technique for many spheres in quasi-static motion under frame-invariant pair drag and brownian forces. *Physica A*, 247:444–472.
- Barnes, H. A. (1989). Shear-thickening “dilantacy” in suspensions of nonaggregating solid particles dispersed in newtonian liquids. *J. Rheol.*, 33:329–366.
- Bian, X. y Ellero, M. (2014). A splitting integration scheme for the sph simulation of concentrated particle suspensions. *Comput. Phys. Commun.*, 185:53–62.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., y Lightfoot, E. N. (2002). *Transport phenomena*. John Wiley and Sons, Inc.
- Bourrianne, P., Niggel, V., Polly, G., Divoux, T., y McKinley, G. (2020). Unifying disparate experimental views on shear-thickening suspensions. *Soft Matter*, pages 1–8.

- Brady, J. F. y Bossis, G. (1985). The rheology of concentrated suspensions of spheres in shear flow by numerical simulations. *J. Fluid Mech.*, 155:105–129.
- Brady, J. F. y Bossis, G. (1988). Stokesian dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 22:111–157.
- Brown, E., Forman, N. A., Orellana, C. S., Zhang, H., Maynor, B. W., Betts, D. E., y Jeager, H. M. (2010). Generality of shear thickening in dense suspensions. *Nat. Mats.*, 9:220–224.
- Brown, E. y Jeager, H. (2014). Shear thickening in concentrated suspensions: Phenomenology, mechanisms and relations to jamming. *Rep. Prog. Phys.*, 77:1–23.
- Bureau, L. (2010). Nonlinear rheology of a nanoconfined simple fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 104:1–4.
- Carreau, P. J. (1972). Rheological equations from molecular network theories. *Trans. Soc. Rheol.*, 16:99–127.
- Chacko, R. N., Mari, R., Cates, M. E., y Fielding, S. M. (2018). Dynamic vorticity banding in discontinuously shear thickening suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 121:108003.
- Chiou, M. J., Sauer, B. B., y Samant, K. R. (MX/a/2007/015869 Jun. 2008). Fabrics with strain-responsive viscous liquid polymers.
- Clavaud, C., Berut, A., Metzger, B., y Forterre, Y. (2017). Revealing the frictional transition in shear-thickening suspensions. *PNAS*, 20:5147–5152.
- Cwalina, C. D. y Wagner, N. J. (2014). Material properties of the shear-thickening state in concentrated near hard-sphere colloidal dispersions. *J. Rheol.*, 58:949–967.



- Denn, M. M., Morris, F. J., y Bonn, D. (2018). Shear thickening in concentrated suspensions of smooth spheres in newtonian suspending fluids. *Soft Matter*, 14:170–184.
- Dhont, J. K. G. y Briels, W. J. (2008). Gradient and vorticity banding. *Rheol. Acta*, 47:257–281.
- Ding, J., Li, W., y Shen, S. Z. (2011). Research and applications of shear thickening fluids. *Recent Patents on Mats. Scien.*, 4:43–49.
- Ding, J., Tracey, P., Li, W., Peng, G., Whitten, P. G., y Wallace, G. G. (2013). Review on shear thickning fluids and applications. *Text LigthInd. Sci. Tech.*, 3:161–173.
- Gibaud, T., Saint-Michel, B., y Manneville, S. (2018). Uncovering instabilities in the spatiotemporal dynamics of a shear thickening cornstarch suspension. *Soft Matter*, page 1803.03558.
- Gurnon, A. K. y Wagner, N. J. (2015). Microstructure and rheology relationships for shear thickening colloidal dispersions. *J. Fluid Mech.*, 769:242–276.
- Guy, B. M., Hermes, M., y Poon, W. C. (2015). Towards a unified description of the rheology of hard-particle suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 115:1–5.
- Gürgen, S., Kushan, M. C., y Li, W. (2017). Shear thickening fluids in protective applications: A review. *Elsevier*, 75:48–72.
- Hermes, M., Guy, B., Poon, W., Poy, G., Cates, M. E., y Wyart, M. (2018). Unsteady flow and particle migration in dense, non-Brownian suspensions. *Soft Matter*, 60:905–916.

- Hoffman, R. L. (1972). Discontinuous and dilatant viscosity behavior in concentrated suspensions i. observation of a flow instability. *Journal of Rheology*, 16:155–173.
- Hoffman, R. L. (1973). Discontinuous and dilatant viscosity behavior in concentrated suspensions ii. theory and experimental test. *Journal of Colloid and Interface Science*, 46:491–506.
- Jabbarzadeh, A., Atkinson, J. D., y Tanner, R. (1997). Rheological properties of thin liquid films by molecular dynamics simulations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 69:169–193.
- Jamali, S. y Brady, J. (2019). Alternative frictional model for discontinuous shear thickening of dense suspensions: Hydrodynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 123:1–6.
- Kumar, S., Vázquez-Quesada, A., y Ellero, M. (2020). Numerical investigation of the rheological behavior of a dense particle suspension in a biviscous matrix using a lubrication dynamics method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 281:1–12.
- Kumar, S., Vázquez-Quesada, A., y Ellero, M. (2021). A conservative lubrication dynamics method for the simulations of dense non-colloidal suspensions with particle spin. *J. Comp. Phys.*, 427:110001.
- Lee, Y. F., Luo, Y., Bai, T., Brown, S., y Wagner, N. (2022). Microstructure of continuous shear thickening colloidal suspensions determined by rheo-vsans and rheo-usans. *Soft Matter*.
- Lee, Y. S., Wetzels, E. D., y Egres, R. G. (2002). Advanced armor utilizing shear thickening fluids. pages 1–6, New York, NY.

- Lee, Y. S., Wetzel, E. D., y Wagner, N. J. (2003). The ballistic impact characteristics of Kevlar woven fabrics impregnated with a colloidal shear thickening fluid. *J. Mat. Scien.*, 38:2825–2833.
- Lin, N. Y. C., Ness, C., Cates, M. E., Sun, J., y Cohen, I. (2016). Tunable shear thickening in suspension. *Proc. Matl. Acad. Sci.*, 113:10774–10778.
- Luengo, G., Israelachvili, J., y Granick, S. (1996). Generalized effects in confined fluids: new friction map for boundary lubrication. *Wear*, pages 328–335.
- Luengo, G., Schmitt, F. J., Hill, R., y Israelachvili, J. (1997). Thin film rheology and tribology of confined polymer melts: Contrasts with bulk properties. *American Chem. Society*, 30:2482–2494.
- López-Aguilar, J. E., Rosales-Romero, A., Vázquez-Quesada, A., Kumar, P., Sagaya, S., y Ellero, M. (2022). Effects of confinement-induced non-newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension. Presentación oral, *Annual European Rheology Conference*, España, Sevilla.
- Mari, R., Seto, R., Morris, J. F., y Denn, M. M. (2015). Discontinuous shear thickening in brownian suspension by dynamic simulation. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 112:15326–15330.
- Mewis, J. y Wagner, N. J. (2009). Current trend in suspension rheology. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 157:147–150.
- More, R. V. y Ardekani, A. M. (2021). Unifying disparate rate-dependent rheological regimes in non-brownian suspension. *Phys. Rev. E*, 103:062610.

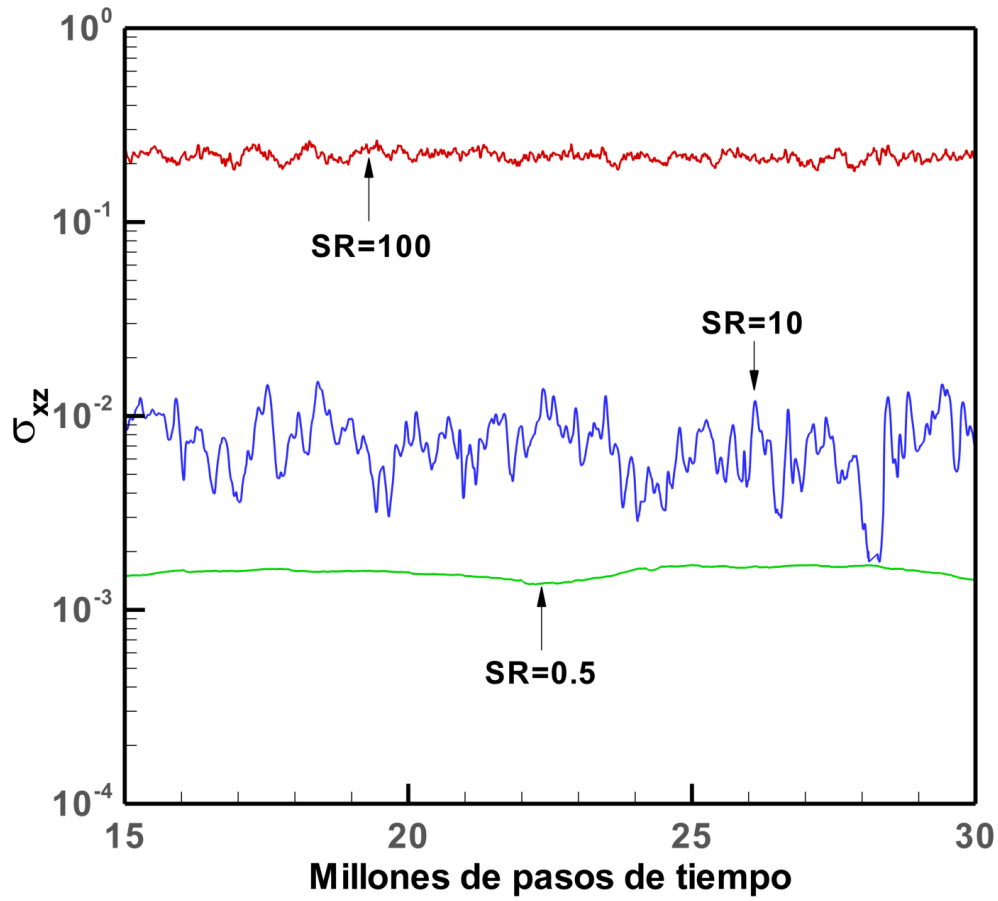
- Morris, J. F. (2018). Lubricated-to-frictional shear thickening scenario in dense suspensions. *Phys. Rev. Fluids*, 3:110508.
- Morris, J. F. (2020). Shear thickening of concentrated suspensions: Recent developments and relation to other phenomena. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 52:121–144.
- Morton, D. M. y Jeddrey, M. F. (2014). Rheology of non-Brownian suspensions. *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.*, 5:203–228.
- Ness, C., Seto, R., y Mari, R. (2022). The physics of dense suspensions. *Soft Matter*, 13:97–117.
- Sangtae, K. y Karrila, S. J. (1991). *Microhydrodynamics: Principles and select applications*. Butterworth.
- Seto, R. y Giusteri, G. G. (2018). Normal stress differences in dense suspensions. *J. Fluid Mech.*, 857:200–215.
- Seto, R., Mari, R., Morris, J. F., y Denn, M. M. (2013). Discontinuous shear thickening of frictional hard-sphere suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 111:218301.
- Stickel, J. J. y Powell, R. L. (2005). Fluid mechanics and rheology of dense suspensions. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 37:129–149.
- Tanner, R. I. (2014). Non-colloidal suspensions: Relations between theory and experiment in shearing flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 14:1–19.
- Tanner, R. I. (2018). Review articles: Aspects of non-colloidal suspension rheology. *Phys. Fluids*, 30:1–13.

- Tanner, R. I. y Milthorpe, J. F. (1983). Numerical simulation of the flow of fluids with yield stresses. Presentación oral, *In Proceedings of the International Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, pages 680–690, Pineridge Press, Swansea.
- Vázquez-Quesada, A. y Ellero, M. (2016a). Analytical solution for the lubrication force between two spheres in a bi-viscous fluid. *Phys. Fluids*, 28:1–19.
- Vázquez-Quesada, A. y Ellero, M. (2016b). Rheology and microstructure of noncolloidal suspension under shear studied with smooth particle hydrodynamics. *J. non-Newtonian Fluid Mech.*, 233:37–47.
- Wagner, N. J. y Brady, J. F. (2009). Shear thickening in colloidal dispersions. *Physics Today*, 62:27–32.
- Wang, Y., Ouyang, J., y Wang, X. (2021). Machine learning of lubrication correction based on gpr for the coupled dpd-dem simulations of colloidal suspensions. *Soft Matter*, 17:5682.
- Wyart, M. y Cates, M. E. (2014). Discontinuous shear thickening without inertia in dense non-brownian suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 112:098302.
- Yasuda, K., Armstrong, R. C., y Cohen, R. E. (1981). Shear flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes. *Rheol. Acta*, 20:163–178.
- Zarraga, I. E., Hill, D. A., y Leighton, D. T. (2000). The characterization of the total stress of concentrated suspensions of noncolloidal spheres in newtonian fluids. *J. Rheol.*, 44:185–220.

# Apéndice A

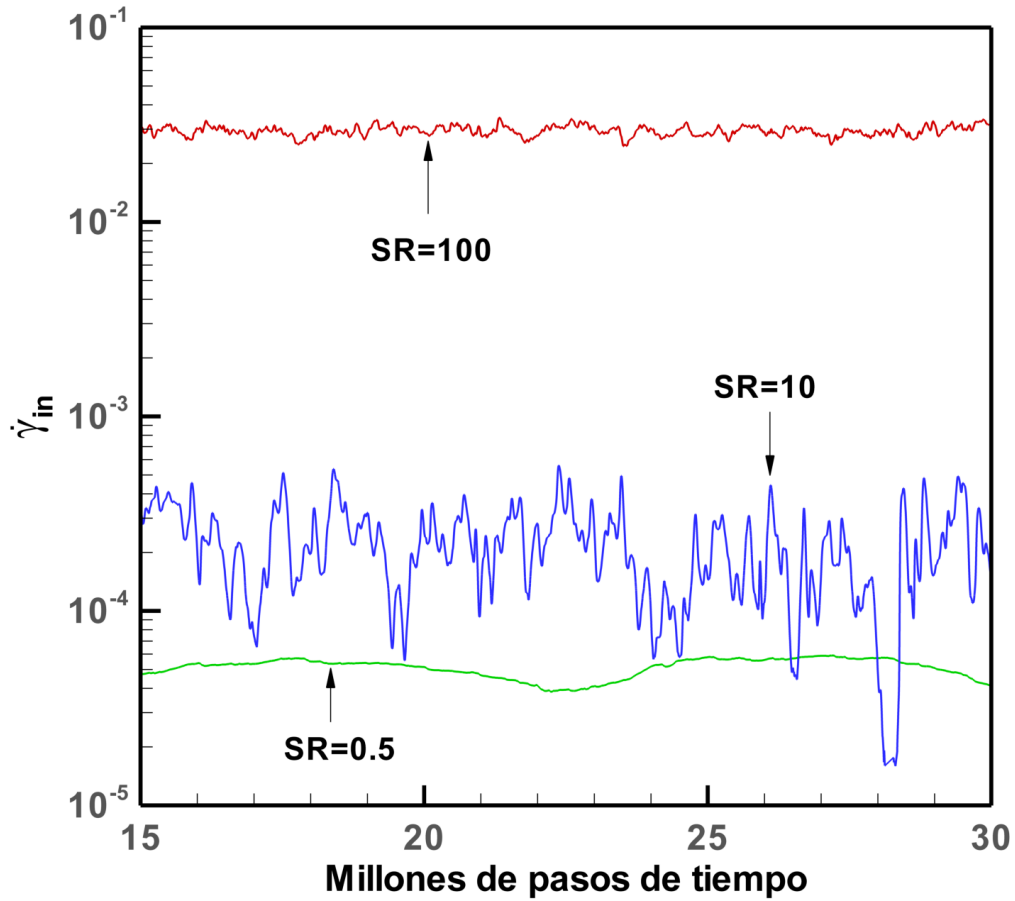
## Código de Matlab

En este trabajo de Tesis se desarrolló un código en Matlab para el post procesamiento de datos para obtener las propiedades materiales de la suspensión. A partir del modelo de Dinámica de Lubricación se obtiene el tensor de esfuerzos de la suspensión  $\sigma$  y la rapidez de corte efectiva  $\dot{\gamma}_{in}$ . Los resultados para una rapidez de corte adimensional impuesta,  $SR$ , fluctúan debido a la descripción Lagrangiana de las partículas, estas fluctuaciones en estado estacionario se pueden observar en las Figs. A.1a y A.1b. En consecuencia, las propiedades materiales se obtienen a partir de un promedio de un rango de pasos de tiempo en estado estacionario, a saber, para este trabajo se tomó el rango de 15 a 30 millones de pasos de tiempo para obtener el promedio.



(a) Fluctuaciones del esfuerzo cortante  $\sigma_{xz}$  con respecto a los pasos de tiempo en estado estacionario.

Figura A.1: Fluctuaciones de los resultados obtenidos con el modelo de Dinámica de Lubricación en estado estacionario para tres diferentes  $SR = \{0.5, 10, 100\}$  con el modelo biviscoso funcionalizado con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $A = 10^{-4}$  y  $L = 1$ .



(b) Fluctuaciones de la rapidez de corte efectiva  $\dot{\gamma}_{in}$  con respecto a los pasos de tiempo en estado estacionario.

Figura A.1: Fluctuaciones de los resultados obtenidos con el modelo de Dinámica de Lubricación en estado estacionario para tres diferentes  $SR = \{0.5, 10, 100\}$  con el modelo biviscoso funcionalizado con:  $\phi = 0.48$ ,  $\Delta\eta = 10$ ,  $A = 10^{-4}$  y  $L = 1$ .

Las gráficas de densidad de partículas y fuerza de lubricación se realizaron a partir de 11 configuraciones diferentes de datos de las partículas, es decir, a diferentes pasos de tiempo en estado estacionario se tomaron los datos de posición  $(x, y, z)$  y velocidad  $(V_x, V_y, V_z)$  de cada una de las partículas que conforman al sistema.



Con estos datos de 11 configuraciones diferentes, se calcula la distancia, la velocidad relativa y la fuerza de lubricación entre los pares de partículas delimitados por  $r^c$ . En las siguientes líneas se muestra el cálculo de la fuerza de lubricación, de acuerdo con el trabajo de Vázquez-Quesada y Ellero (2016a), una vez que se determinaron todos los pares de partículas que interaccionan.

```

function [Flub_BV, Flub_BV_Adim, F_mo, F_mo_Adim, F_m1, F_m1_Adim, ho_Adim, gmgc]
= Operacion_Flub(a, V, n_bult, n_conf, gamm_crit_ho, ho)

% Operaciones de cálculo de la fuerza de lubricación.

% eta_conf - eta_bulk.
n_dif = ( n_conf - n_bult );

% Cálculo de gamma_dot_loc^max.
gamm_smax = (9/8) .* ( V ./ ho ) .* ( (3/2) .* ( a ./ ho ) ) .^ (1/2);

% gamma_dot_loc^max / gamma_dot_crit.
gmgc = ( gamm_smax ./ gamm_crit_ho );

% Cálculo de P
P = (-1 + 2 .* (gmgc.^2) + 2 .* (gmgc) .* (gmgc.^2 - 1).^(1/2) ).^(1/3);
% Cálculo de Q
Q = ( -1 + 1 ./ P + P ) .^ (1/2);
% Cálculo de r_max
r_max = ( (2/3) * a .* ho ) .^ (1/2);
% Cálculo de root_Q
Q_root = ( -3 - Q.^2 + 4 * ( gmgc ./ Q ) ) .^ (1/2);

% r1_max
r1_max = r_max .* ( Q - Q_root );
% r2_max
r2_max = r_max .* ( Q + Q_root );
% r2_max - r1_max
r2r1_dif = ( r2_max - r1_max );

% Cálculo de h evaluada en r1_max; h(r1_max)
h_r1 = ho .* ( 1 + ( r1_max.^2 ./ ( 2 * a .* ho ) ) );
% Cálculo de h evaluada en r2_max; h(r2_max)
h_r2 = ho .* ( 1 + ( r2_max.^2 ./ ( 2 * a .* ho ) ) );

% 1/h(r2_max) - 1/h(r1_max)
inv_h_dif = ( 1 ./ h_r2 ) - ( 1 ./ h_r1 );
% 1/h(r2_max) + 1/h(r1_max)
inv_h_sum = ( 1 ./ h_r2 ) + ( 1 ./ h_r1 );
% Constantes para reducir las operaciones; C1_h, C2_h, C3_h y C4_h
C1_h = ( h_r1 - 2 .* ho );
C2_h = ( 2 .* ( a ./ ho ) ) .^ (1/2);
C3_h = r2_max ./ ( ( 2 * a .* ho ) ) .^ (1/2);
C4_h = r1_max ./ ( ( 2 * a .* ho ) ) .^ (1/2);

% Constantes para el cálculo de la fuerza de lubricación
Flub_T1 = ( 3 * a^2 .* n_conf * V ) ./ ho;
Flub_T2 = ( 3 * a^2 .* n_dif * V .* inv_h_dif .* ( 2 - ho .* inv_h_sum ) );
Flub_T3 = ( 2 * a .* gamm_crit_ho .* n_dif .* ( r2r1_dif + C1_h .* C2_h .* (atan
(C3_h) - atan(C4_h) ) ) );

% Fuerza de lubricación BV
Flub_BV = 2 * pi .* ( Flub_T1 + Flub_T2 + Flub_T3 );

end

```