

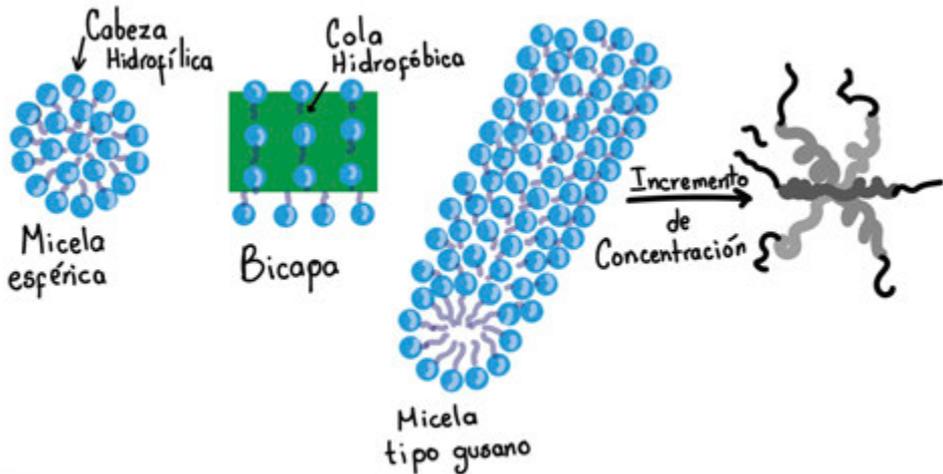
# Fenómenos de transporte y reología de fluidos estructurados

Dr. Edtson Emilio Herrera Valencia  
M. en C. Luis Antonio Ramírez Torres  
Dra. Mayra Luz-Sánchez-Villavicencio  
Dr. Fausto Calderas García  
I.Q. Dominga Ortiz Bautista  
Dra. Catalina Soriano Correa  
Dr. Vicente Jesús Hernández Abad



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

# Fenómenos de transporte y reología de fluidos estructurados



Dr. Edtson Emilio Herrera Valencia  
M. en C. Luis Antonio Ramírez Torres  
Dra. Mayra Luz-Sánchez-Villavicencio  
Dr. Fausto Calderas García  
I.Q. Dominga Ortiz Bautista  
Dra. Catalina Soriano Correa  
Dr. Vicente Jesús Hernández Abad

Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Estudios Superiores Zaragoza



Dr. Vicente Jesús Hernández Abad  
**Director**

Dra. Mirna García Méndez  
**Secretaria General**

Dr. José Luis Alfredo Mora Guevara  
**Secretario de Desarrollo Académico**

CD. Yolanda Lucina Gómez Gutiérrez  
**Secretaria de Desarrollo Estudiantil**

Mtro. Luis Alberto Huerta López  
**Secretario Administrativo**

Dra. María Susana González Velázquez  
**Jefa de la División de Planeación  
Institucional**

Dra. Rosalva Rangel Corona  
**Jefa de la División de Vinculación**

Dr. David Nahum Espinosa Organista  
**Jefe de la División de Estudios de Posgrado  
e Investigación**

Lic. Carlos Raziel Leños Castillo  
**Jefe de la Coordinación de Comunicación  
Social y Gestión de Medios**

### Datos para catalogación bibliográfica

Autores: Edtson Emilio Herrera Valencia, Luis Antonio Ramírez Torres, Mayra Luz-Sánchez-Villavicencio, Fausto Calderas García, Dominga Ortiz Bautista, Catalina Soriano Correa, Vicente Jesús Hernández Abad.

Autor de correspondencia: edtsonhv@comunidad.unam.mx,  
faustocg@unam.mx, luis\_ramirez@comunidad.unam.mx

### Fenómenos de transporte y reología de fluidos estructurados.

UNAM, FES Zaragoza, mayo de 2023.

Peso: 5.3 MB.

ISBN: 978-607-30-7605-0.

Diseño de portada: Carlos Raziel Leños Castillo.  
Formación de interiores: Claudia Ahumada Ballesteros.

Este libro fue dictaminado a través del Comité Editorial de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza y se aprobó en abril de 2023.

---

### DERECHOS RESERVADOS

Queda prohibida la reproducción o transmisión total o parcial del texto o las ilustraciones de la presente obra bajo cualesquiera formas, electrónicas o mecánicas, incluyendo fotocopiado, almacenamiento en algún sistema de recuperación de información, dispositivo de memoria digital o grabado sin el consentimiento previo y por escrito del editor.

### Fenómenos de transporte y reología de fluidos estructurados.

**D.R. © Universidad Nacional Autónoma de México**

Av. Universidad # 3000, Col. Universidad Nacional Autónoma de México, C.U.,  
Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México, México.

**Facultad de Estudios Superiores Zaragoza**

Av. Guelatao # 66, Col. Ejército de Oriente,  
Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09230, Ciudad de México, México.

# Índice



<b>Prólogo a la primera edición</b>	<b>xiii</b>
<b>Dedicatorias</b>	<b>xv</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>xix</b>
<b>Resumen</b>	<b>xxiii</b>
<b>Abstract</b>	<b>xxiv</b>
<b>Sobre los autores</b>	<b>xxv</b>
<b>CAPÍTULO I. Fluidos complejos</b>	<b>I</b>
I.1 Introducción	2
I.2 Antecedentes	2
I.3 Fluidos estructurados	3
I.3.1 Polímeros asociativos	4
I.3.2 Estructura y comportamientos de los tensoactivos	5
I.3.3 Sistema tensoactivo CTAT	6
I.3.3.1 Sistemas micelares	6
I.3.4 Concentración Micelar Crítica (CMC)	7
I.3.5 Geometría de las micelas	9
I.3.6 Mecanismos de formación de micelas	10
I.4 El estudio teórico de fluidos reológicos en geometrías simples	12
I.5 Distribución del material de estudio	15
I.6 Objetivos	17
I.6.1 Objetivo general	17
I.6.2 Objetivos particulares	17

I.7	Hipótesis del sistemas	18
	<b>CAPÍTULO II. Ecuaciones de conservación y de transporte</b>	<b>19</b>
II.1	Ecuación de continuidad sin reacción química (conservación de masa)	20
II.2	Ecuación de conservación de momento	23
II.2.1	Ecuación de conservación de momento para un fluido Newtoniano	27
II.2.1.1	Ecuación de Navier-Stokes (Fluido incompresible e isotérmico)	30
II.3	Ecuaciones constitutivas reológicas	31
	<b>CAPÍTULO III. Modelo de Bautista-Manero-Puig (BMP)</b>	<b>33</b>
III.1	Modelo de Bautista-Manero-Puig	34
III.1.1	Modelo de Fredrickson	34
III.1.2	Modelo viscoelástico BMP	37
III.1.3	Balance estructural del modelo BMP	38
III.2	Modelo BMP vs otras ecuaciones constitutivas	41
III.3	Propiedades materiales del modelo BMP	42
	<b>CAPÍTULO IV. Evolución del modelo BMP</b>	<b>45</b>
IV.1	Evolución cronológica del modelo BMP	46
IV.1.1	Modelo BMP generalizado	46
IV.1.2	Modelo de Boek	47
IV.1.3	Modelo de Manero: diferentes tamaños micelares	48
IV.1.4	Modelo BMP: Flujo bandeado	48
IV.1.5	Modelo BMP acoplado con transferencia de masa	49
IV.1.6	Modelo BMP: difusión y dispersión	50
	<b>CAPÍTULO V. Flujo oscilatorio de baja amplitud de deformación (SAOS)</b>	<b>51</b>
V.1	Flujo Oscilatorio de Baja Amplitud de Deformación (SAOS)	52
V.1.1	Modelo de Maxwell	53
V.2	Funciones materiales en SAOS del modelo BMP	54
V.2.1	Modelo de Maxwell: Polímero	57
V.2.2	Modelo de Jeffreys: Interacción solvente-polímero	58
V.2.3	Modelo de Burgers: Interacción polímero-polímero	59
	<b>CAPÍTULO VI. Flujo cortante simple estacionario</b>	<b>61</b>
VI.1	Flujo cortante simple	62
VI.2	Funciones materiales en flujo cortante simple	62
VI.3	Flujo cortante simple del modelo BMP en placas paralelas	63

VI.3.1	Funciones materiales	65
VI.3.2	Perfil de velocidades	66
VI.3.3	Flujo volumétrico	67
VI.4	Flujo cortante simple del modelo BMP en un cilindro	67
VI.4.1	Cantidades tensoriales	70
VI.4.1.1	Gradiente de velocidad	70
VI.4.1.2	Rapidez de deformación	70
VI.4.1.3	Tensor de esfuerzos	71
VI.4.2	Funciones materiales	73
VI.4.3	Perfil de velocidades	75
VI.4.4	Flujo volumétrico	79
VI.4.5	Fluidez aparente	81
VI.4.6	Factor de fricción del modelo BMP	84
VI.5	Ecuaciones analíticas adimensionales del flujo en un cilindro	87
VI.5.1	Flujo volumétrico adimensional	88
VI.5.2	Esfuerzo a la Cedencia adimensional	89
VI.5.2.1	Perfil de velocidades adimensional	89
VI.5.3	Flujo volumétrico adimensional	90
	<b>CAPÍTULO VII. Flujo extensional</b>	<b>93</b>
VII.1	Modelado matemático	94
VII.2	Funciones materiales en flujo extensional del modelo BMP	96
VII.2.1	Viscosidad extensional	96
VII.2.1.1	Viscosidad extensional	99
	<b>CAPÍTULO VII. Simulaciones numéricas</b>	<b>101</b>
VIII.1	Variables adimensionales	102
VIII.1.1	Mecanismos adelgazantes o engrosantes al corte	103
VIII.1.2	Mecanismos tixotrópicos y reopéticos	103
VIII.1.3	Mecanismos de cedencia	104
VIII.1.4	Mecanismos viscoelásticos	105
VIII.1.5	Números adimensionales a alto corte	106
VIII.2	Diagramas materiales 3D	107
VIII.3	Propiedades reológicas experimentales	108
VIII.4	Mecanismos adelgazantes y engrosantes al corte	110

VIII.4.1	Función fluidez	110
VIII.4.2	Perfil de velocidades	113
VIII.4.3	Flujo volumétrico	115
VIII.5	Mecanismos tixotrópicos	116
VIII.5.1	Función fluidez	116
VIII.5.2	Perfil de velocidades	118
VIII.5.3	Flujo volumétrico	119
VIII.6	Mecanismos reopéticos	120
VIII.6.1	Función fluidez	120
VIII.6.2	Flujo volumétrico	121
VIII.7	Mecanismos por esfuerzo de cedencia	122
VIII.7.1	Función fluidez	122
VIII.7.2	Perfil de velocidades	125
VIII.7.3	Flujo volumétrico	126
VIII.8	Efecto de la concentración	127
VIII.8.1	Función fluidez	127
VIII.8.2	Perfil de velocidades	129
VIII.8.3	Flujo volumétrico	131
VIII.8.4	Factor de fricción	134
<b>CAPÍTULO IX. Conclusiones y trabajo futuro</b>		<b>135</b>
IX.1	Conclusiones	136
IX.2	Perfil de velocidades	137
IX.3	Función fluidez aparente	137
IX.4	Flujo volumétrico	138
IX.5	Factor de fricción	139
IX.6	Trabajo futuro	140
IX.7	Comentarios finales del Libro	141
<b>Apéndice</b>		<b>143</b>
IX.8	Apéndice A	143
IX.9	Apéndice B	148
IX.9.1	Deducción del flujo volumétrico en un cilindro para el modelo BMP	148

<b>Nomenclatura</b>	<b>151</b>
Lista de símbolos	151
Letras griegas	151
Vector, diádica y tensores	152
Variables adimensionales	153
Otros símbolos	153
Números adimensionales	154
<b>Glosario</b>	<b>155</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>158</b>





# Índice de figuras



<b>Figura I-1.</b> El surfactante CTAT (cetiltrimetilamonio sulfonato p-tolueno $C_{19}H_{42}NC_7H_7O_3S$ ), peso molecular 455.74 g/mol, tensoactivo del tipo catiónico. La concentración micelar crítica de surfactante CTAT en agua suele ser relativamente baja, e incluso a concentraciones de 3% ya se empiezan a observar las micelas tipo gusano.	7
<b>Figura I-2.</b> Representación de una estructura micelar	8
<b>Figura I-3.</b> Diagrama esquemático de soluciones de tensoactivo mostrando 4 diferentes morfologías.	9
<b>Figura I-4.</b> Distribución informativa del libro. El orden en que se recomienda leer esta obra se indica con flechas negras, las flechas moradas indican el orden de consulta para lectores familiarizados con el tema.	16
<b>Figura II-1.</b> Esquema general del balance de masa. Adaptado de Welty et al. {Welty, 2018 #584}.	20
<b>Figura V-1.</b> Modelo en serie de Maxwell. Un resorte y un pistón son conectados en serie.	52
<b>Figura V-2.</b> Módulo de pérdida $G''$ y módulo de almacenamiento $G'$ para el modelo de Maxwell.	58
<b>Figura V-3.</b> Módulo de pérdida $G''$ y módulo de almacenamiento $G'$ del modelo de Jeffreys.	59
<b>Figura V-4.</b> Módulo de pérdida $G'$ y módulo de almacenamiento $G''$ del modelo de Burgers.	60
<b>Figura VI-1.</b> Esquema de flujo en placas paralelas de un fluido de BMP.	63
<b>Figura VI-2.</b> Esquema del flujo en un cilindro de un fluido de BMP.	68
<b>Figura VIII-1.</b> Diagrama material conformado por los grupos adimensionales del modelo BMP que engloban los procesos estructurales y cinéticos a través del adelgazamiento, engrosamiento, tixotropía y reopexia.	107
<b>Figura VIII-2.</b> Diagrama material conformado por los grupos adimensionales del modelo BMP donde se muestran los mecanismos de cedencia en función del número adimensional B.	108

<b>Figura VIII-3.</b> Fluidez adimensional vs esfuerzo en la pared para distintas condiciones materiales en función de los números adimensionales A Y B	111
<b>Figura VIII-4.</b> Velocidad axial adimensional vs la coordenada radial adimensional en función de los mecanismos de adelgazamiento y espesamiento por rapidez de deformación a través de los números adimensionales A y B.	114
<b>Figura VIII-5.</b> Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional a diferentes condiciones de adelgazamiento y espesamiento por rapidez de deformación a través de los números adimensionales $A_0$ y B.	116
<b>Figura VIII-6.</b> Función fluidez adimensional vs el esfuerzo en la pared en función de los números adimensionales $A_0$ y B.	117
<b>Figura VIII-7.</b> Velocidad axial sin dimensiones vs coordenadas radiales adimensionales en función de los mecanismos tixotrópicos	118
<b>Figura VIII-8.</b> Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional a diferentes condiciones tixotrópicas respectivamente.	119
<b>Figura VIII-9.</b> Velocidad de superficie sin dimensiones en función del esfuerzo de pared adimensional, en diferentes condiciones de reopexia.	121
<b>Figura VIII-10.</b> Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo de pared adimensional en función del número adimensional $A_0$ , para un valor constante de B.	122
<b>Figura VIII-11.</b> Función viscosidad y fluidez en función del número de Bingham.	124
<b>Figura VIII-12.</b> Fluidez adimensional vs el número de Bingham.	124
<b>Figura VIII-13.</b> Velocidad axial adimensional vs la coordenada radial adimensional en función de $B^{-1}$ .	126
<b>Figura VIII-14.</b> Flujo volumétrico adimensional vs el número de Bingham como función del esfuerzo de cedencia.	127
<b>Figura VIII-15.</b> Fluidez adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional en función de la concentración de CTAT en el sistema.	129
<b>Figura VIII-16.</b> Perfil de velocidades vs la coordenada radial en función de la concentración de CTAT.	131
<b>Figura VIII-17.</b> Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional en función de la concentración de la muestra en el sistema.	132
<b>Figura VIII-18.</b> Dependencia de los números adimensionales en función de la concentración de CTAT.	133

# Índice de tablas



<b>Tabla III-1.</b> Propiedades materiales del modelo BMP y las pruebas reológicas con las que se obtienen.	42
<b>Tabla III-2.</b> Valores de los parámetros materiales del polímero asociativo HASE	43
<b>Tabla VIII-1.</b> Variables adimensionales.	102
<b>Tabla VIII-2.</b> Valores de los parámetros reológicos para el modelo BMP	109
<b>Tabla VIII-3.</b> Propiedades materiales a distintas concentraciones de CTAT	128



# Prólogo a la primera edición



En este libro se pretende introducir al lector a los tipos más comunes de flujo en fenómenos de transporte y en reología de fluidos complejos. En el capítulo I se describe la información básica de los sistemas estructurados de estudio, en donde la hipótesis fundamental es que la viscosidad es proporcional a la estructura del sistema, i.e., al número de puntos de contacto intermoleculares llamados simplemente puntos estructurales o entrecruzamientos físicos a un tiempo  $t$ . Para describir la respuesta reológica del fluido complejo se explica a lo largo del texto una serie de experimentos en estado estacionario y no estacionario.

Los experimentos reométricos que son descritos en este texto son: (i) Flujo cortante simple, (ii) Flujo oscilatorio de baja amplitud (SAOS), (iii) Flujo extensional, (iv) Flujo no homogéneo, y en el último capítulo se presenta desde un punto de vista computacional la conexión entre aplicaciones biológicas y reológicas.

Para describir la transferencia de momento y la reología lineal y no-lineal del sistema, se utiliza un modelo reológico que describe el cambio de la estructura en función de un balance poblacional. Este modelo se puede deducir mediante el balance de masas suponiendo que el cambio de estructura puede ser descrito por medio de una cinética física, en donde la energía de activación se define como la energía mínima que necesita el fluido para cambiar su estructura.

Los mecanismos que describe el modelo son: (i) adelgazamiento, (ii) engrosamiento, (iii) tixotropía, (iv) reopexia, y (v) esfuerzo de cedencia. El efecto de la concentración se mide indirectamente a través de las propiedades materiales del sistema. Los mecanismos antes mencionados son descritos por una serie de números adimensionales que describen la física en el sistema, los cuales relacionan los mecanismos estructurales, cinéticos, viscoelásticos, de flujo lento (esfuerzo de cedencia y de bandeo en el fluido) [1-3].

## **Palabras claves:**

*Fenómenos de transporte, Reología de fluidos complejos, Pruebas reométricas, Micelas tipo gusano, Modelos reológicos.*



# Dedicatoria



A mi amada familia:  
Mayra Luz Sánchez Villavicencio, Camila Isabella Herrera Sánchez

A mi amada hermana  
Gabriela Yolanda Herrera Valencia



Te amamos Camila y estamos orgullosos de ti

우리는 당신을 카밀라를 사랑하고 우리는 당신을 자랑스럽게 생각합니다

A nuestra amada Irma Concepción Villavicencio Cordero



Tus hijos Mayra, Jaime, Mabel, Edna  
Siempre te extrañarán, y donde quiera que estes:  
“Vuela alto MITOS”

A mis amados padres  
Emilio Herrera Caballero y Yolanda Valencia Cortés



Porque siempre han sido mi ejemplo y pilares en mi vida.  
Este libro es un testigo del amor que les tengo.

A mi amado padre  
Emilio Herrera Caballero



Este libro está dedicado a mi padre Emilio Herrera Caballero. Muchas veces, me presionaste hasta el límite, me decías que nunca era suficiente lo que hacía. Me contaste muchas anécdotas de tu vida, como cuando te dejaron de hablar en tu trabajo por mantener tus ideales. No te entendía, pero ahora después de tu partida comprendo que nunca te fuiste por el camino fácil, siempre luchaste por lo que tu considerabas justo y nunca cambiaste. Hoy entiendo que eso, se llama congruencia, hoy celebro que lo único que querías, es que yo fuera diferente. En estos días, puedo decir que tuve al mejor padre del mundo y que celebro el ser hijo del “Ave de las tempestades- Emilio Herrera Caballero”. Algún día nos encontraremos de nuevo padre mío y me seguirás contando tus historias a un después de tu partida. Gracias por todo y por que nos volvamos a encontrar en algún momento.

# Agradecimientos



- Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPITT) de la UNAM <<IN102823>> <<Modelado Matemático y Simulación Computacional de Fluidos Complejos con Aplicación a Bioingeniería >>.
- Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos para Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza (PAPIME) de la UNAM <<PE116519>> << Fenómenos de transporte avanzados: Fluidos No-Newtonianos Viscoelásticos Lineales y No-Lineales>>.
- DGAPA-PAPIIT IT-201619, Diseño de matrices multiparticuladas de liberación controlada preparadas mediante el proceso sol-gel, aplicables en el tratamiento de la diabetes mellitus tipo 2
- Al laboratorio de reología y fenómenos de transporte de fluidos complejos por las facilidades otorgadas para este proyecto de investigación.
- Al seminario de investigación de Reología y Fenómenos de Transporte de Fluidos Complejos.
- A la carrera de ingeniería química de la FES Zaragoza de la Universidad Nacional Autónoma de México por la formación recibida.
- Luis Antonio Ramírez Torres agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología la beca otorgada durante la realización de su doctorado en el programa de posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales a través del CVU 860719.
- Agradecimiento a la Licenciada en administración y Licenciada en Comunicación Gabriela Y. Herrera Valencia por las sugerencias para la edición de esta obra.
- Agradecimiento a Vanessa Mejía López por el diseño de las imágenes.



# Participantes



## Unidad de Investigación en Bio-Ingeniería UI-FESZ-110323

### Líneas de investigación participantes:

- Fenómenos de Transporte y Reología de Fluidos Complejos: LUI-FESZ-420415.
- Reología Teórica y Experimental de Fluidos Estructurados: LUI-FESZ-570619.
- Estructura Electrónica de Sistemas de Interés Biológico: LUI-FESZ-200506.
- Ciencias Farmacéuticas. LI-FESZ-210506.

### Laboratorios participantes:

- Laboratorio de Reología y Fenómenos de Transporte, Unidad de Investigación Multidisciplinaria de Investigación Experimental Zaragoza (UMIEZ), P/L-7, Facultad de Estudios Superiores Zaragoza.
- Laboratorio de Investigación Farmacéutica. ET-PA-16, Planta Piloto, Facultad de Estudios Superiores Zaragoza.



# Resumen



En este trabajo se estudió la respuesta reológica y la transferencia de momento de un sistema complejo bajo la acción de un gradiente de presión constante. Para la caracterización reológica y del flujo en el sistema se utilizó la ecuación constitutiva de Bautista-Manero-Puig (BMP) [1] que permite predecir el comportamiento reológico de fluidos complejos en los cuales la estructura interna es modificada por el cociente entre la fluidez a una determinada rapidez de deformación y la fluidez con respecto un estado de referencia. El modelo BMP acopla el modelo viscoelástico de Maxwell convectivo superior [4] con una ecuación de tipo cinético-estructural propuesta por Fredrickson (1967) [5] la cual describe la evolución temporal de un parámetro de estructura de tipo logístico, además, toma en consideración la reestructuración a la que están sometidos, por ejemplo, los polímeros asociativos cuando están bajo la acción de un flujo. El parámetro de estructura cuantifica el grado de entrecruzamientos físicos en el sistema y puede ser relacionado a través de la fluidez  $\phi$  (inverso de la viscosidad). Este modelo, en un flujo incompresible en estado estacionario y homogéneo, genera expresiones analíticas para el esfuerzo cortante, función viscosidad, rapidez de deformación, y la primera y segunda diferencia de esfuerzos normales [1]. Por otro lado, en un flujo de Hagen-Poiseuille a gradiente de presión constante, se pueden deducir expresiones analíticas para el perfil de velocidades, flujo volumétrico, y fluidez aparente. Los mecanismos que describe el modelo son: (i) adelgazamiento al flujo, (ii) engrosamiento al flujo, (iii) tixotropía, (iv) reopexia, y (v) esfuerzo de cedencia. El efecto de la concentración se mide indirectamente a través de las propiedades materiales del sistema. Los mecanismos antes mencionados son descritos por tres números adimensionales que describen la física en el sistema, los cuales relacionan los mecanismos cinético-estructurales, viscoelásticos y de cedencia en el fluido [1, 3, 6].

**Palabras claves:** Fenómenos de Transporte, Reología de fluidos complejos, Fluido viscoelástico, Modelo BMP, Micelas tipo gusano.

In this work, the rheology and momentum transfer of a complex fluid system under the action of a pressure gradient was studied. Analytical expressions for velocity profiles and volumetric flow in a tube were obtained. For the rheological and flow characterization in the system, a rheological constitutive equation of Bautista-Manero-Puig [1] was used to predict the rheological behavior of a complex fluids in which the internal structure is modified by the rate of fluidity at a determined shear rate and a fluidity in a reference state. The BMP model couples the upper-convected Maxwell model with a kinetic model proposed by Fredrickson (1967) [5] which was deduced in terms of a structure parameter, which takes into account the complex fluid restructuring during flow. The structure parameter is given in terms of the fluidity  $\phi$  which, in simple shear flow, is the inverse of shear viscosity function. BMP model predicts, not only the sigmoidal relation of the constitutive equation of the stress and shear rate, also describes the instabilities that arise from the coupling between the flow and the structure concentration in, for example, shear banding phenomenon. According to the BMP model, it was discovered that thixotropy has a negative effect on the energy associated with the maximum flow improvement and reflects the relationship between the kinetic, viscous and structural mechanisms in the system.

**Key words:** Transport Phenomena, Rheology of complex fluids, Viscoelastic fluid, BMP Model, Wormlike micelles.

# Sobre los autores



## Dr. Edtson Emilio Herrera Valencia

El **Dr. Edtson Emilio Herrera Valencia** es Ingeniero Químico por la Facultad de Química de la UNAM. Tiene una licenciatura en Matemáticas Aplicadas por la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I). Es maestro en Ingeniería por la Facultad de Química, UNAM con el mejor promedio de generación y postulado a la medalla Alfonso Caso. Posee Estudios de Maestría en Física con especialidad en Física Estadística por parte de la Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa. Es doctor en Ingeniería Química por la Facultad de Química, UNAM con mención honorífica. Por sus estudios doctorales fue postulado a la Medalla Alfonso Caso por parte de la Facultad de Química de la UNAM. Realizó una estancia de Investigación de un año en el Centro de Investigación en Polímeros (COMEX) mediante una generosa beca del Instituto de Ciencia y Tecnología del Distrito Federal. Realizó tres estancias postdoctorales de dos años cada una en la universidad de McGill en Montreal Quebec, Canadá, en el departamento de Ingeniería Química. La primera de ellas debido a una generosa beca de Gobierno de México (CONACYT), la segunda de ellas por parte del Gobierno Federal de Canadá y la tercera por parte de la provincia de Quebec, en Canadá. Su experiencia en la docencia incluye Fenómenos de Transporte Momento, Energía y Masa, Mecánica, Electromagnetismo y Matemáticas. Sus áreas de investigación son: Fenómenos de Transporte: (i) Momento, (ii) Energía, (iii) Masa, (iv) Reología de Fluidos Complejos con énfasis en cristales Líquidos Biológicos, (v) Flujo Pulsátil Sanguíneo y (vi) Membranas Biológicas. Es autor de 31 artículos de investigación indexados en el JCR, tres capítulos en libros y una patente sobre el estudio de sangre con diferentes trastornos alimenticios. Sus trabajos de investigación han sido citados más de 260 veces. Ha impartido pláticas en congresos en Italia, Canadá (Ontario, Alberta y Quebec) sobre Fenómenos de Transporte y Reología de Fluidos Complejos. Ha dirigido 30 servicios sociales, 20 tesis de licenciatura, dos de maestría y una de doctorado. Ha participado como jurado en exámenes de Licenciatura, Maestría y Doctorado. Actualmente es responsable de la línea de Investigación en Fenómenos de Transporte y Reología de Fluidos Complejos de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza. Actualmente es responsable del laboratorio de Reología y Fenómenos de Transporte de la Unidad Multidisciplinaria de Investigación

Experimental Zaragoza (UMIEZ) de Investigación en Fenómenos de Transporte y Reología de Fluidos Complejos de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza. Es actualmente PRIDE C del sistema de estímulos de la Universidad Nacional Autónoma de México.

### Doctorante M. en C. e I. M. Luis Antonio Ramírez Torres

El **doctorante M. en C. e I. M. Luis Antonio Ramírez Torres** es ingeniero químico egresado de la Facultad de Química, UNAM. Es Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales por parte del Instituto de Investigación en Materiales (IIM), UNAM donde obtuvo mención honorífica y cuya tesis fue postulada a la medalla Alfonso Caso. Actualmente es candidato a Doctor en Ciencia e Ingeniería de Materiales (2020) por parte del IIM en la UNAM. Es miembro de la Sociedad Mexicana de Reología (SMR) desde el 2020 hasta la actualidad. Ha sido profesor de Asignatura en la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza (FESZ) de las materias de Transferencia de Masa, Separación Mecánica y Mezclado, Química III, Matemáticas II y Bioestadística de la carrera de ingeniería química y ha impartido un curso de Biomatemáticas a nivel posgrado. Posee más de 4 años de experiencia en docencia a distintos niveles (secundaria, preparatoria y universidad) y trabajó como Ingeniero de Procesos en una firma de ingeniería (*Plugrama Ingeniería S.A. de C.V.*). Ha impartido más de 10 cursos para estudiantes y profesores a nivel universitario, y se ha capacitado en más de 30 cursos de diversa índole, de los cuales destacan: Fenómenos de Transporte, Reología y Mecánica de Biomateriales, Química Analítica, Simulación numérica, Matemáticas Avanzadas, Termodinámica estadística, dibujo asistido por computadora (CAD), educación en línea, tutoría universitaria (diplomado), uso de software de simulación de procesos (AspenONE, Wolfram Mathematica, Polymat, Matlab, Phyton, AutoCAD, COMSOL Multphysics) y uso de software para creación de documentos (Microsoft Office y LaTeX).

Ha participado en más de 30 encuentros, talleres y congresos. Actualmente asesora 10 tesis a nivel licenciatura. Es coordinador de los seminarios del Laboratorio de Reología y Fenómenos de Transporte de la UMIEZ-FESZ que se llevan a cabo semanalmente todos los viernes por medio de *Zoom* y cuyo canal de *Youtube* puede encontrarse en la web. Ha publicado 6 artículos de investigación y difusión en revistas arbitradas con factor de impacto y pertenecientes al JCR.

Actualmente es corresponsable del Laboratorio de Reología y Fenómenos de Transporte, primer piso, L-7 de la Unidad multidisciplinaria de la UMIEZ.

Es colaborador de las líneas de investigación Fenómenos de Transporte y Reología de fluidos complejos LI-FESZ-420415 y de la línea de investigación Reología Teórica y Experimental de Fluidos Estructurados LI-FESZ-570619.

### **Dra. Mayra Luz Sánchez Villavicencio**

La **Dra. Mayra Luz Sánchez Villavicencio** es Bióloga Experimental por la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I). Maestra y Doctora en Biología Experimental por la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I). Áreas de especialización: Ecología: tratamiento de aguas de uso secundario. Farmacología: técnicas de biología molecular, plantas medicinales, diabetes, obesidad. Ha publicado 11 artículos como primera autora y en colaboración en revistas nacionales e internacionales con factor de impacto. Realizó una estancia internacional en la Universidad de Montreal, en Montreal, QC Canadá. Colabora con diferentes grupos interdisciplinarios tanto en el área de etnobotánica y productos naturales para la salud del departamento de biología de la Universidad de Ottawa, así como en el área de Ingeniería Química y Materiales de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza del departamento de Ingeniería Química de la UNAM. Es miembro del sistema Nacional de Investigadores por el periodo 2016-2019. Asistente de investigación en el laboratorio de productos naturales y enfermedades metabólicas en el departamento de fisiología y farmacología en la Facultad de Medicina de la Universidad de Montreal de Agosto 2017 a Mayo 2019 fue profesora de tiempo parcial del departamento de Hidrobiología de la Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa de 2005 a 2007. Temas actuales de interés: enfermedades metabólicas, vías de señalización de Resistencia a la insulina, diabetes, obesidad y modelado matemáticos de sistemas biológicos de interés para ciencias exactas e ingeniería.

### **Dr. Fausto Calderas García**

El **Dr. Fausto Calderas García** es ingeniero químico por la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza (FES-Z), UNAM. Es maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales por parte del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM. Es doctor en Ingeniería química por parte de la UNAM. Es experto en el área de reología con veinte años de experiencia en manejo de reómetros capilares, de esfuerzo controlado y de deformación controlada. Es autor de más de 50 artículos en revistas internacionales con factor de impacto en las áreas

de nuevos materiales, reología y fluidos complejos; tiene más de 800 citas en la literatura especializada, 4 artículos en revistas de divulgación y tiene tres capítulos en libros sobre reología y nanocompuestos poliméricos con editoriales internacionales, además tiene tres patentes registradas, una de ellas sobre un aditamento de pulsos ultrasónicos para realizar mediciones simultáneas de reología. Ha sido revisor certificado de más de 50 artículos en revistas internacionales. Ha impartido cursos técnicos de capacitación a empresas para manejo de reómetros de vulcanización y tecnología del hule. Ha dirigido y co-asesorado 10 tesis de licenciatura, 4 de maestría y 1 de doctorado. Imparte cursos de ingeniería química en la Facultad de estudios superiores Zaragoza y en la Facultad de Química de la UNAM. Ha presentado sus trabajos en más de 50 congresos internacionales y nacionales. Ingresó al Sistema Nacional de Investigadores con Nivel 1 en enero de 2014 y continúa con ese nivel hasta la fecha. Es presidente de la sociedad mexicana de reología (SMR), que es la representación de la Sociedad de Reología (SR) en México. Es miembro de la sociedad de procesamiento de polímeros (Polymer Processing Society, PPS) y co-organizó el 34° congreso de esa sociedad (PPS-34) que se celebró por primera vez en México, en la ciudad de Cancún en diciembre del 2017. Actualmente está interesado en los temas de mezclado de fluidos complejos, nanocompuestos poliméricos, geles para alimentos, secado por convección de antioxidantes, modelado y caracterización de fluidos reológicos (sangre, disoluciones poliméricas, polímeros fundidos), flujo elongacional de fluidos modelo, etc. Colabora con grupos de investigación del área de alimentos, de farmacia, de nuevos materiales, reología entre otros. Es responsable de la línea de investigación “Reología teórica y reometría de fluidos estructurados” (LI-FESZ-570619).

### I.Q. Dominga Ortiz Bautista

La **I.Q. Dominga Ortiz Bautista** es egresada de la FES-Zaragoza, UNAM, con estudios de Maestría en Ingeniería en sistemas energéticos por la Facultad de Ingeniería, UNAM, con diplomados en la FES-Zaragoza. Con 27 años de antigüedad, tiene experiencia Académico-Administrativa, desempeñándose en la Facultad de Estudios Zaragoza, UNAM. Impartiendo actualmente, las asignaturas de Laboratorio de Ciencia Básica I, Flujo de Fluidos, Laboratorio y Taller de proyectos. Y en el ámbito administrativo se ha desempeñado como, responsable del Servicio *Social*, Coordinadora de Ciclo Intermedio y Jefa de Carrera de Ingeniería Química. Ha dirigido Tesis y Coordinadora de servicios sociales con más de 30 trabajos en la Carrera de Ingeniería Química. Con participación en proyectos PAPIIME UNAM, con publicación de trabajos en revistas y memorias de Congresos.

## Dra. Catalina Soriano Correa

La **Dra. Catalina Soriano Correa** posee una licenciatura en Química por la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, BUAP. Tiene una Maestría en Química por la Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa (UAM-I), es Doctora en Ciencias por la UAM-Iztapalapa. Actualmente es profesora de Carrera Titular C de tiempo completo. Es responsable de la línea de investigación: “estructura electrónica de sistema de interés biológico”, que tiene como objetivos la formación de recursos humanos, así como generar conocimiento en las áreas químico-biológicas básicas y aplicadas, que aporta información que permite explicar la relación existente entre las propiedades fisicoquímicas, electrónicas, estructurales, moleculares y de reactividad química de moléculas de interés biológico, para el desarrollo y diseño de moléculas con potencial farmacológico en el contexto de los postulados de la mecánica cuántica y de la Teoría de la Información. Los proyectos que conforman la línea de investigación contribuyen en la resolución de problemas de salud pública, tales como: cáncer, enfermedades infecciosas, antibacteriales, crónico-degenerativas y enfermedades olvidadas (Chagas y Leishmania), así como el estudio de la liberación de fármacos. Algunos de los proyectos comprenden también estudios experimentales, que corroboran las predicciones teóricas en el diseño de nuevas moléculas; lo que permite el intercambio académico y la vinculación con otros grupos de trabajo nacionales y extranjeros. Es responsable de una patente (Péptido con actividad anticancerígena). Es miembro de la Comisión Dictaminadora de la Carrera de Química Farmacéutico Biológica de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza desde 2018 a la fecha. Ha sido autor y coautor de artículos y capítulos de libro publicados en revistas arbitradas internacionales y con factor de impacto. Asimismo, ha dirigido tesis a nivel licenciatura, maestría y doctorado. Ha presentado más de cien trabajos en congresos nacionales e internacionales. La Dra. Catalina Soriano Correa es profesora de las materias de Fisicoquímica I y II en la carrera de QFB, es miembro del sistema nacional de investigadores Nivel I y tutora del doctorado en el posgrado en Ciencias Biológicas y en el posgrado en Ciencias Químicas de la Universidad Nacional Autónoma de México, Tutora en los posgrados en Ciencias Biológicas y Biología Experimental de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Tutora en el posgrado en el Centro de Investigación Cerebrales (CICE), Universidad Veracruzana, Profesora invitada de la maestría en Ciencias en Farmacología de la Escuela Superior de Medicina-Instituto Politécnico Nacional.

## Dr. Vicente Jesús Hernández Abad

Nacido en la Ciudad de México el 28 de enero de 1974. El **Dr. Vicente Jesús Hernández Abad** es Químico Farmacéutico Biólogo con mención honorífica por la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza (FES-Z). Posee una maestría en ciencias especializada en farmacia y biofarmacia por la Facultad de Química de la UNAM postulado y ganador de la medalla Alfonso Caso. Posee un doctorado en farmacia. Actualmente es profesor de Carrera Titular C de tiempo completo, es nivel C del PRIDE. Es Miembro del Sistema Nacional de Investigadores, nivel 1 (1997-Actualidad). Desde 1997 hasta la fecha ha impartido de manera ininterrumpida los módulos de Biofarmacia y Desarrollo Analítico (teoría) en la carrera de Químico Farmacéutico y Biólogo de la Facultad la FESZ. Ha impartido diferentes actividades académicas y formado parte de comités tutores de Posgrado. Fue coordinador de 2001 a 2014 del Programa de Especializaciones en Farmacia Industrial. Autor y coordinador de los diplomados: Administración Farmacéutica y Cromatografía de Líquidos de Alta Resolución. Ha impartido cátedra, por convenios institucionales, en la Red Panamericana para la Armonización de la Reglamentación Farmacéutica (Organización Panamericana de la Salud), en la Dirección General de Medicamentos y Tecnologías para la Salud (Secretaría de Salud) en el Instituto Nacional de Pediatría y en la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Ha participado en el Consejo Interno asesor de Estudios de Posgrado, en el Comité de Investigación, así como en el Comité Editorial de la FES Zaragoza. Fungió como secretario del H. Consejo Técnico de la FES Zaragoza durante casi ocho años, siendo actualmente su presidente. Es presidente de la Comisión del Mérito Universitario del H. Consejo Universitario de la UNAM. Fue integrante de los Comités Académicos de Posgrado de: las Especializaciones en Farmacia Industrial, las Maestrías en Enfermería y Trabajo Social, de Ciencias de la Administración, Maestría y Doctorado en Psicología, así como de la Maestría y doctorado en Ciencias Médicas, Odontológicas y de la Salud. Ha ocupado diversos cargos en la FES Zaragoza de forma ininterrumpida. En el periodo 1998-2001 fue Coordinador del área Química de la Carrera de QFB. Coordinador de Desarrollo Tecnológico de 2001 a 2003. Jefe de la División de Estudios de Posgrado e Investigación de 2003 a 2010. Fungió como secretario general de 2010 a 2018. Director de la FES Zaragoza desde noviembre de 2018. Es jefe de la Línea de Investigación en Ciencias Farmacéuticas, con énfasis en Desarrollo Farmacéutico. Dirigió la certificación en ISO del laboratorio a su cargo. Ha sido responsable o participado en 15 proyectos de investigación con financiamiento. Ha publicado 25 artículos en revistas arbitradas e indizadas. Es árbitro del Journal of Ethnopharmacology y de Drug Development and Industrial Pharmacy, así como evaluador de proyectos de CONACYT y PAPIIT. Ha generado productos que se encuentran en proceso de patentamiento y cuenta con una patente concedida. Autor de diversos materiales educativos: cinco libros de texto,

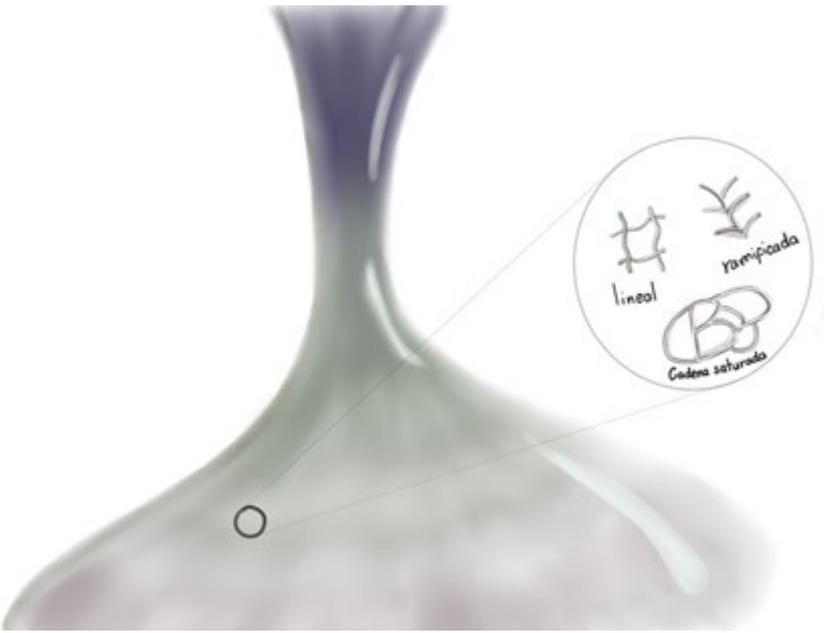
dos capítulos de libros, tres manuales, siete videos, tres aulas virtuales y dos aplicaciones para dispositivos inteligentes. Ha presentado 100 trabajos libres en eventos académicos y 54 conferencias en diversos foros. Dirigió el servicio social de 47 alumnos, asesoró o dirigió la tesis de más de 120 egresados de licenciatura y posgrado. Sus actividades fuera de la UNAM se han orientado hacia la conducción de grupos multidisciplinarios e interinstitucionales encaminados al fortalecimiento y la mejora continua de la educación. Participó en el grupo técnico que elaboró la propuesta de política farmacéutica para México en 2005. En la Asociación Farmacéutica Mexicana A.C. ha ocupado diversos cargos de elección: fue su presidente en 2010-2011 y fue Coordinador de su Consejo de Expresidentes. Es evaluador líder fundador del Consejo Mexicano para la Acreditación de la Educación Farmacéutica desde 2006. Es editor, desde 2015, de la Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas. Fue electo en 2017 primer vicepresidente de la Fundación para la Educación Farmacéutica en México A.C. Recibió el Premio Nacional de Ciencias Farmacéuticas “Dr. Leopoldo Río de la Loza” 2017 que otorga la Asociación Farmacéutica Mexicana A.C., en el área de Educación.





# CAPÍTULO I

## Flujos complejos



### 1.1 Introducción

**Definición:** Un fluido complejo es aquel que presenta propiedades físicas ligadas con el flujo dependientes o independientes con respecto al tiempo, y su naturaleza es no-Newtoniana. Los principales mecanismos que presentan los fluidos complejos en diferentes pruebas reométricas son: (i) Adelgazamiento, (ii) Engrosamiento, (iii) Esfuerzo de cedencia, (iv) viscoelasticidad lineal, (iv) Tixotropía, (v) Reopexía, (vi) Bando y (vii) defectos topológicos, por mencionar algunos.

Estos fluidos están determinados por un acoplamiento entre el flujo-orientación-alineación de los volúmenes de control, en donde se llevan a cabo los balances de materia, momento, energía y masa.

Ejemplo de fluidos complejos son: (i) suspensiones, (ii) soluciones poliméricas, (iii) dispersiones de cristales líquidos, (iv) alimentos y (v) fluidos electro-reológicos, entre otros.

### 1.2 Antecedentes

El estudio reológico de sistemas complejos ha sido punto de partida de varios grupos de investigación a nivel nacional e internacional, y su descripción reológica en el régimen lineal y no lineal, es el tema central de la física de la materia suave y del modelado computacional y reológico de nuevos materiales [7-9].

El estudio de la reología de los materiales es de gran importancia a nivel industrial para la fabricación de pinturas, aceites lubricantes, cremas, tratamiento de aguas, pegamentos, mejoras en la recuperación de petróleo etc.; que requieren de una alta viscosidad para evitar la sedimentación de sus componentes durante su almacenamiento [10].

Entre estos sistemas, podemos mencionar: (i) polímeros, (ii) sistemas micelares, (iii) sistemas coloidales, (iv) cristales líquidos nemáticos, (v) cristales líquidos colestericos, (vi) sistemas biológicos, etc. [11-13]. Un ejemplo de aplicaciones de fluidos complejos se da en la formación del colágeno, que es el principal componente en la bio-ingeniería del tejido.

La formación del colágeno se divide principalmente en tres secciones: (i) La primera de ellas, consiste en una solución diluida de colágeno con un pH alrededor de 3.2. Este, es depositado en un sustrato mediante la aplicación de una combinación de esfuerzos

cortantes y extensionales [14]. Una posible explicación del flujo y la reología de este sistema es el estudio del sistema de flujo Jeffery-Hamel, el cual describe la deformación continua e irreversible de un sistema en una trayectoria convergente o divergente. Este líquido viscoso pasa por una contracción y es depositado en el sustrato, de tal manera que pasamos de una estructura anisotrópica o para-nemática a una nemática. La segunda etapa, consiste en una deshidratación del cristal líquido y existe una transición termodinámica de fase nemática a la colestérica por efecto de la transferencia de masa. El último proceso, es describir la superficie que queda del colágeno, debido a que el colágeno es un regenerador natural del hueso, la superficie debe ser la adecuada para el crecimiento de las células en la parte superior.

Para describir este tipo de sistemas se han empleado diferentes tipos de ecuaciones constitutivas fenomenológicas que describen la naturaleza, inelástica, viscoelástica lineal y no lineal y estructurales.

Por otro lado, el estudio reológico de sistemas complejos ha sido punto de partida de varios grupos de investigación a nivel nacional e internacional, y su descripción en el régimen lineal y no lineal es usado para comprender el flujo de fluidos complejos, materia suave y nuevos materiales [1, 2, 6, 15-21].

Asimismo, el estudio reológico de los materiales es de gran importancia a nivel industrial para la fabricación de pinturas, aceites lubricantes, cremas, tratamiento de aguas, pegamentos, tribología, mejoras en la recuperación de petróleo, donde se requiere de una alta viscosidad para evitar la sedimentación de sus componentes durante su almacenamiento.

Los sistemas más comúnmente estudiados son: (i) polímeros, (ii) sistemas micelares, (iii) sistemas coloidales, (iv) cristales líquidos nemáticos, (v) cristales líquidos colestéricos, (vi) sistemas biológicos, etc. [11-13, 22]. Para cada tipo de material se han empleado diferentes tipos de ecuaciones constitutivas [1, 6, 11, 17, 19, 22-28].

### 1.3 Fluidos estructurados

La principal hipótesis de los fluidos estructurados es que la viscosidad del fluido es igual al número de puntos estructurales o entrecruzamientos físicos al tiempo  $t$ . Un ejemplo de este tipo, son los tensoactivos catiónicos conocidos como sistemas micelares tipo gusano.

Cuando la concentración de tensoactivos catiónicos es suficiente grande, varias cadenas de polímero se entrelazan entre sí formando una red que confiere una mayor viscosidad y propiedades elásticas a la disolución [18]. La resistencia a deformaciones que opone la red tridimensional depende de la cantidad de entrelazamientos físicos entre cadenas, del peso molecular del polímero y de la concentración [24, 29-33]. El efecto de la estructura se cuantifica a través de los cambios macroscópicos, que indirectamente implica un cambio de la viscosidad, i.e. un fluido con mayor cantidad de puntos estructurales presenta menor fluidez (mayor viscosidad) que aquel con un menor número de puntos estructurales [1, 6, 15-19, 21, 25, 26].

Adicionalmente, los tensoactivos catiónicos están formados por un componente hidrofílico siendo este la cadena principal y por uno o más grupos hidrofóbicos que se encuentran unidos a la cadena principal [34-39]. Los factores que influyen en el comportamiento reológico de los sistemas micelares son: (i) la configuración, la composición de química de sus componentes, (ii) la presencia de tensoactivos o partículas cargadas (sales), (iii) la temperatura, (iv) disolvente, (v) tamaño de la partícula, etc. [18, 33, 40].

### 1.3.1 Polímeros asociativos

Los polímeros asociativos o polímeros hidro-fóbicamente modificados solubles en agua forman sistemas con muchos puntos estructurales, es decir enredados, y que tienen un comportamiento reológico complejo, i.e. que dependen de la rapidez de deformación a través de los mecanismos de formación y destrucción de la estructura y pueden presentar competencia entre los mecanismos de ruptura y de flujo del material [15, 16, 41, 42]. Por ejemplo, el adelgazamiento o engrosamiento al flujo se puede interpretar en términos de los puntos estructurales después de un periodo de deformación dado. La tixotropía y la reopexia es una competencia entre el tiempo de ruptura (estructural) del material y el tiempo de flujo, o bien, del tiempo característico del material (de esfuerzos). Los polímeros asociativos están formados por un componente hidrofílico siendo este la cadena principal y por uno o más grupos hidrofóbicos que se encuentran unidos a la cadena principal [34-36, 39, 43]. Los factores que influyen en el comportamiento reológico de los polímeros asociativos son: la configuración molecular, la composición química de sus componentes, la presencia de tensoactivos o partículas cargadas (sales), la temperatura, el disolvente, el tamaño de la partícula, etc. [18, 29, 32, 33]. Los modificadores reológicos son polímeros capaces de absorber agua en grandes cantidades, permitiendo que a grandes concentraciones se traslapen unas cadenas sobre

otras formando una red tridimensional o madeja siendo estas liberadas en un disolvente [18, 44-46].

La resistencia a deformaciones que opone la red tridimensional depende de la cantidad de entrelazamientos físicos entre cadenas, del peso molecular del polímero y de la concentración [24, 29-33].

El efecto de la estructura se cuantifica a través de los cambios macroscópicos, de la viscosidad, i.e. un fluido con mayor cantidad de puntos estructurales, presenta menor fluidez (mayor viscosidad) que aquel con un menor número de puntos estructurales [16].

### 1.3.2 Estructura y comportamientos de los tensoactivos

Los tensoactivos tienen una estructura molecular que consiste de un grupo estructural que tiene muy poca atracción por el disolvente, conocido como grupo liófilo o liofóbico y un grupo que tiene una fuerte atracción por el disolvente llamado grupo liofílico. Esto es conocido como estructura anfipática (o anfifílica). Cuando una molécula con una estructura anfipática es disuelta en un disolvente, el grupo liofóbico puede distorsionar la estructura del disolvente, incrementando la energía libre del sistema. Cuando esto ocurre, el sistema responde de alguna manera con el fin de minimizar el contacto entre el grupo liofóbico y el disolvente. En el caso de que el surfactante se encuentre en medio acuoso, el grupo liofóbico o grupo hidrofóbico distorsiona la estructura del agua (por rompimiento de los puentes de hidrógeno entre las moléculas de agua). Como resultado de la distorsión algunas moléculas de surfactante son expulsadas a las interfaces del sistema, con sus grupos hidrofóbicos orientados con el fin de minimizar el contacto con el agua. La superficie del agua llega a ser cubierta con una capa de moléculas de surfactante con sus grupos hidrofóbicos orientados predominantemente hacia el aire, ya que las moléculas de aire son no polares por naturaleza, como los grupos hidrofóbicos. Esto es lo que provoca una disminución en la tensión superficial. Por otra parte, la presencia del grupo liofílico o grupo hidrofílico impide que el surfactante sea expulsado completamente del disolvente como una fase separada, ya que eso requeriría la deshidratación del grupo hidrofílico. De esta manera, una estructura anfifílica no solo disminuye la tensión superficial, sino que orienta las moléculas de la superficie hacia el grupo hidrofílico en la fase acuosa, y aleja a las moléculas del grupo hidrofóbico lejos del solvente [6].

Las estructuras de las moléculas surfactantes pueden ser muy diversas. Para una actividad superficial en un sistema particular, las moléculas de surfactante deben tener una estructura química que es anfipática en el disolvente a usar.

El grupo hidrofóbico es usualmente una cadena larga de hidrocarburos, mientras que el grupo hidrofílico es un grupo iónico altamente polar. Dependiendo de la naturaleza del grupo hidrofílico, los surfactantes son clasificados como:

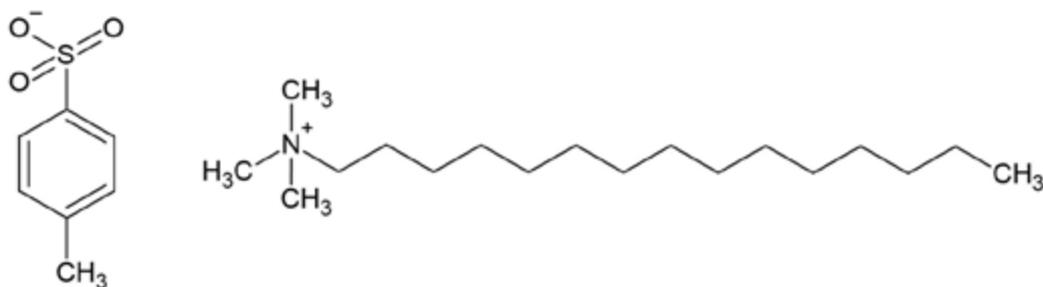
1. Aniónicos. La porción de superficie activa de la molécula tiene carga negativa, por ejemplo,  $RCOO^- Na^+$  (jabón),  $RC_6H_4SO_3^- Na^+$  (sulfonato de alquibenceno).
2. Catiónicos. La porción de superficie activa tiene una carga positiva, por ejemplo,  $RNH_3^+ Cl^-$  (sal de una cadena larga de amina).
3. Zwitteriónicos. Las cargas y negativas pueden estar presentes en la porción de superficie activa, por ejemplo,  $RN^+H_2CH_2COO^-$  (aminoácido de cadena larga).
4. No iónicos. La porción de superficie activa no lleva carga iónica, por ejemplo,  $RCOOCH_2CHOHCH_2OH$  (monoglicérido de ácido graso de cadena larga.)

### I.3.3 Sistema tensoactivo CTAT

#### I.3.3.1 Sistemas micelares

Los surfactantes (véase **Figura I1**) están entre los productos más versátiles de la industria química, estos aparecen en productos tan diversos como los aceites de motores, farmacéuticos, detergentes, lodos de perforación utilizados en la prospección de petróleo, agentes de flotación, entre otros. Las últimas décadas han sido testigo de la extensión de las aplicaciones de los surfactantes a ciertas áreas de tecnología como la impresión electrónica, la grabación magnética, la biotecnología, la microelectrónica y la investigación viral [47].

Un surfactante (agente de superficie activa) o tensoactivo es una sustancia que, cuando presentan una baja concentración en un sistema, tiene la propiedad de adsorción sobre las superficies o interfaces del sistema y es capaz de alterar en un grado notable la superficie o la energía libre interfacial de esas superficies (o interfaces). El término interfase indica una frontera entre dos fases inmiscibles; el término superficie denota una interfase donde una de las fases es un gas, que usualmente es aire.



**Figura 11.** El surfactante CTAT (cetiltrimetilamonio sulfonato p-tolueno  $C_{19}H_{42}NC_7H_7O_3S$ ), peso molecular 455.74 g/mol, tensoactivo del tipo catiónico. La concentración micelar crítica de surfactante CTAT en agua suele ser relativamente baja, e incluso a concentraciones de 3% ya se empiezan a observar las micelas tipo gusano.

En el interior de un líquido, una molécula es atraída por todas las que le rodean por medio de fuerzas intermoleculares o de cohesión, de manera que el efecto total es nulo. Pero en la superficie no es lo mismo. Las fuerzas que ejercen las moléculas en el seno del líquido, que atraen a las moléculas de la superficie, no pueden ser neutralizadas por las moléculas que se encuentran en la parte superior, puesto que se considera que tiene la fase gaseosa (fuerzas de cohesión despreciables) por encima de la fase líquida. A causa de este hecho los líquidos tienden siempre a presentar la menor superficie libre posible. La energía libre de Gibbs interfacial es la cantidad mínima de trabajo requerido para crear la interface.

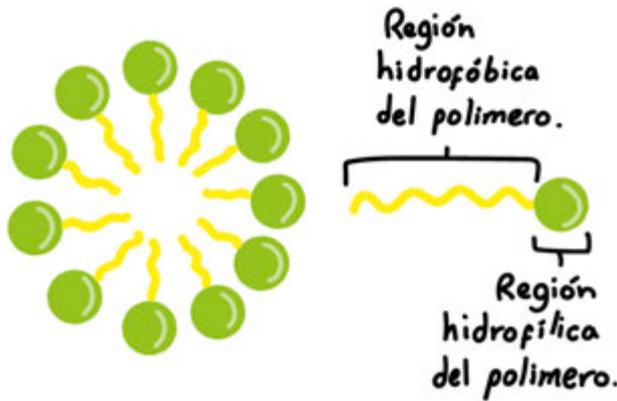
### 1.3.4 Concentración Micelar Crítica (CMC)

Las micelas son agregados moleculares de los surfactantes que se forman en mezclas de surfactante y disolvente. Cuando una molécula anfifílica es colocada en algún solvente (por ejemplo, el agua), se presenta una situación *inusual*: las regiones polares de la molécula se asocian con el agua (regiones hidrofílicas), pero la parte no polar o la región hidrofóbica tiene una tendencia a separarse del agua para evitar el contacto. Como resultado de esas tendencias opuestas, las moléculas anfifílicas se autoensamblan en estructuras las cuales alcanzan el mínimo contacto del grupo no polar con agua, y al mismo tiempo se tiene el máximo contacto del grupo polar con el disolvente. Esas estructuras (o agregados) son conocidos como micelas. Al proceso de formación de micelas se le conoce como micelización.

La micelización es un mecanismo alternativo a la adsorción en las interfaces para remover grupos hidrofóbicos del contacto con el agua, reduciendo la energía libre del sistema.

En la **Figura 12** se aprecia la representación esquemática de varias moléculas de surfactantes. El grupo polar o grupo hidrofílico es representado por una circunferencia, mientras que el grupo no polar o el grupo hidrofóbico se identifica por la línea de zig-zag. Por otra parte, se tiene la representación de una micela. Las colas son las cadenas de hidrocarburos, y todas están orientadas hacia el centro o núcleo, con el fin de evitar el contacto con el agua. Las micelas pueden ser vistas como polímeros, que son agregados de monómeros (moléculas de surfactante).

Dependiendo de la estructura química del surfactante, sus micelas pueden ser catiónicas, catiónicos, zwitteriónicos y no iónicos. Esta propiedad única de los surfactantes hace que las soluciones acuosas de tensoactivos sean medios microheterogéneos.

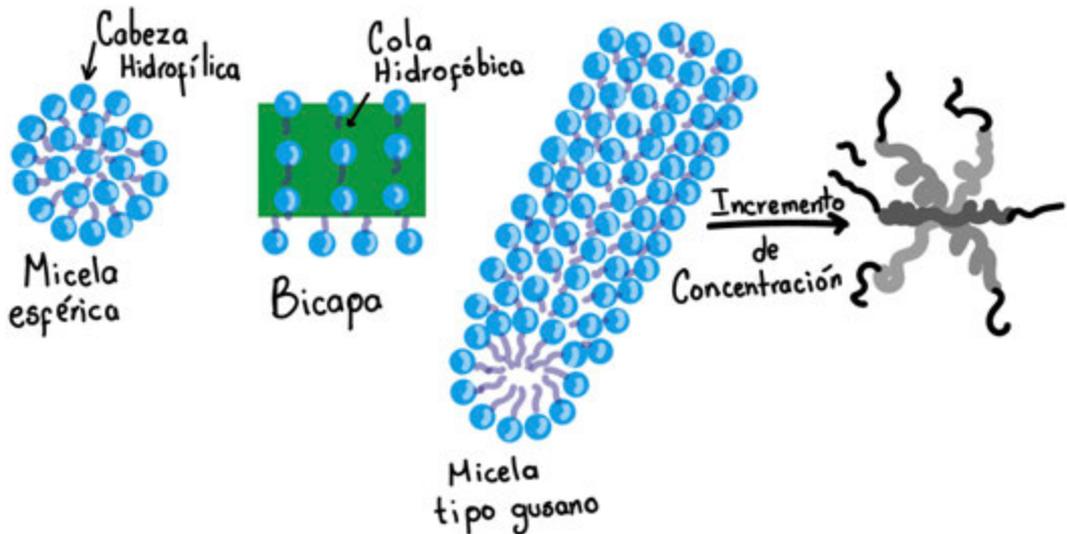


**Figura 12.** Representación de una estructura micelar.

La concentración por encima de la cual se forman las micelas se conoce como concentración micelar crítica (CMC). Arriba de la CMC, los monómeros y las micelas existen en el equilibrio dinámico. Las micelas son pequeñas partículas coloidales. El valor de la CMC puede ser determinada por el cambio en las propiedades fisicoquímicas de la solución de surfactante conforme la concentración de tensoactivo aumenta, tales como la conductividad eléctrica molar, la tensión superficial, la turbidez, entre otras [31, 48].

### 1.3.5 Geometría de las micelas

Los agregados micelares mostrados en la **Figura 13** pueden formar un gran número de estructuras complejas incluyendo micelas esféricas y gusanos, vesículas y bicapas lipídicas. La morfología de los agregados complejos depende del tamaño de la cabeza del grupo de tensoactivo, la longitud y el número de colas, la larga, la sanidad de la solución, temperatura, y las condiciones de flujo. Los tensoactivos con una cabeza grande y una cola corta tiende a formar micelas esféricas mientras los tensoactivos con cabezas pequeñas y colas largas tienden a formar micelas tipo gusano. Los que presentan dos o más colas tienden a formar bicapas [48].



**Figura 13.** Diagrama esquemático de soluciones de tensoactivo mostrando 4 diferentes morfologías.

La mayoría de los modelos reológicos mencionados no describen los procesos de formación y destrucción de la estructura, i.e. no interpretan el cambio de viscosidad en términos de la estructura en la mayoría de los fluidos de interés en la industria y en otras ramas de la ciencia. Además, los pocos existentes contienen parámetros de ajuste que no pueden ser obtenidos en términos de experimentos reológicos independientes, por lo

tanto, fluidos como los sistemas micelares, dispersiones de cristales líquidos, polímeros asociativos, fluidos biológicos como la sangre con hipercolesterolemia y coloides deben ser interpretados en términos de su estructura [48].

En este punto, valdría la pena utilizar un modelo que describa su evolución en términos de variables medibles y que puedan ser calculadas mediante experimentos reológicos independientes en estado estacionario y no estacionario[48].

Precisamente esta es la razón de este libro, utilizar un modelo adecuado que prediga la dinámica reológica lineal y no lineal de un sistema estructurado (polímero asociativo) que son materiales estructurados que dependen de la posición  $r$ , al tiempo  $t$ .

Se proponen las siguientes hipótesis para en el flujo cortante y extensional, tanto oscilatorio como simple, inducido por un gradiente de presión constante de fluidos complejos:

- a) Existirá un modelo dinámico lineal y no lineal que pueda describir un fluido con estructura transitoria
- b) A través de las propiedades materiales del modelo propuesto se podrán describir los mecanismos más importantes como son: (i) Adelgazamiento, (ii) Engrosamiento, (iii) Tixotropía, (iv) Reopexía, (v) Esfuerzo de cedencia y (vi) Dependencia de la concentración en el sistema.
- c) ¿Qué tipo de números adimensionales describen estos mecanismos?
- d) Se podrán obtener expresiones analíticas para: (i) el perfil de velocidades, (ii) flujo volumétrico, (iii) fluidez aparente en función de los números adimensionales, (iv) factor de fricción no-newtoniano

### 1.3.6 Mecanismos de formación de micelas

En la literatura de la formación de micelas, dos modelos primarios han ganado aceptación general como modelos útiles para el entendimiento del proceso. Se basa en un balance entre las micelas formadas y las destruidas por efecto del flujo. El enfoque anterior se basa en los siguiente: (i) La ley de acción de masas y (ii) Un efecto termodinámico [48]. Para la primera, en el cual las micelas y las especies monoméricas (moléculas de surfactante) se consideran como si estuvieran en equilibrio químico y el modelo de separación de fase,

en el cual las micelas se consideran que constituyen una nueva fase formada en el sistema por arriba de la CMC.

En este caso, el enfoque de la termodinámica clásica es usado para describir el proceso completo de formación de micelas [48]:



Con una correspondiente constante de equilibrio  $K_m$ , dada por la Ec. (I.2):

$$K_m = \frac{[S_n]}{[S]^n} \quad (\text{I.2})$$

Donde  $n$  es el número de moléculas o monómeros de surfactante en la micela,  $S$  representa a la molécula de tensoactivo, y  $S_n$  representa a la micela, los corchetes indican concentraciones molares. Teóricamente uno debe usar actividades en lugar de concentraciones en la Ec. (I.2); de esta manera la sustitución de concentraciones por actividades es justificada por el hecho de que la concentración micelar crítica ocurre a bajas concentraciones, en las que los coeficientes de actividad pueden suponerse como la unidad. Se ha observado que la CMC es característica y única para cada tensoactivo a una temperatura dada. Si  $C_t$  denota la concentración total de surfactante en solución,  $C_s$  es la fracción de tensoactivo presente como moléculas libres, y  $C_m$  el estado de agregación, la Ec. (I.2) puede ser escrita como [48]:

$$K_m = \frac{C_m}{(C_s)^n} \quad (\text{I.3})$$

En el proceso de formación de micelas, habrá algún valor de  $C$  y un valor de  $C_{eq}$  en el cual el número de moléculas de tensoactivos en la forma micelar será igual a las moléculas de tensoactivo que se encuentran libres. Usando la Ec. (I.3), uno puede escribir:

$$K_m = \left( \frac{1}{2} C_{eq} \right)^{-(n-1)} \quad (\text{I.4})$$

A cualquier valor de  $C$ , la relación entre  $C_s$  y  $C_m$  puede ser encontrada por la sustitución de la Ec. (I.4) en la Ec. (I.3):

$$\frac{C_m}{(C_s)^n} = \left( \frac{1}{2} C_{eq} \right)^{(n-1)} \quad (I.5)$$

Dónde:

$$C_t = C_s + C_m \quad (I.7)$$

Reordenando la Ec. (I.5) se obtiene la Ec. (I.7):

$$\frac{C_m}{C_{eq}} = \frac{1}{2} \left( \frac{2C_s}{C_{eq}} \right)^n \quad (I.8)$$

Usando la Ec. (I.7) como punto inicial, uno puede estimar cómo varía la concentración en las proximidades de  $C_t = C_{eq}$  para un determinado número de agregación  $n$  [48].

El enfoque alternativo para el modelo de la formación de micelas es pensar en términos de un modelo de separación de fase en el cual, a la CMC, la concentración de las moléculas de surfactante libres llega a ser constante (como un límite de solubilidad), y todas las moléculas adicionales formarán las micelas. El análisis de los enfoques produce el mismo resultado en términos energéticos para el proceso de formación de micelas, de esta manera, la elección del modelo es realmente asunto de preferencia o circunstancias.

## I.4 El estudio teórico de fluidos reológicos en geometrías simples

La reología y transferencia de momento han sido estudiadas en fluidos complejos en geometrías simples como son: (i) capilares, (ii) rendijas, (iii) cilindros concéntricos, (iv) esferas y (v) geometrías que involucran expansiones y contracciones de flujo [49, 50]. Los tipos de flujo más investigados son: (a) Flujo cortante simple en estado estacionario y homogéneo, inducido por un gradiente de presión en la dirección de flujo, (b) por mecanismos gravitacionales, (c) por un gradiente de presión pulsátil y (d) por flujo por compresión que combina flujo cortante y extensional. El sistema (d) se estudia en problemas de lubricación y la geometría consiste en dos platos separados por una distancia  $H$  y una longitud característica radial  $r = a$ . El fluido se coloca en el plato inferior y el plato superior se aproxima al inferior a una velocidad constante (el lector interesado vea Bird *et al.* 2002, Cap. 3, problema 2.B.8 [51]).

En este mismo rubro, Oliveira y Pinho (1999) y Oliveira (2002) deducen soluciones analíticas para el flujo transitorio en rendijas y geometrías cilíndricas con diferentes ecuaciones constitutivas viscoelásticas no lineales las cuales son descritas a través de los parámetros materiales asociados a los modelos matemáticos [52, 53]. Suponiendo flujo incompresible (densidad constante), y asumiendo que el sistema de flujo se encuentra totalmente desarrollado, se obtienen expresiones cerradas (analíticas), para los perfiles de velocidad, flujo volumétrico, velocidad promedio, viscosidad cortante y la primera diferencia de esfuerzos normales. La mayoría de estos trabajos utilizan el modelo exponencial, linealizado y cuadrático de Phan-Thien Tanner (PTT) con solvente y sin solvente [53-58].

El modelo de Phan-Thien-Tanner ha sido empleado en la caracterización reológica de polímeros fundidos y se ha encontrado una relación aceptable entre los resultados experimentales y teóricos. En este mismo contexto, el modelo PPT-exponencial y PTT linealizado se ha utilizado en la descripción del flujo electro-osmótico con gradiente de presión constante tomando en cuenta los mecanismos del solvente [56]. Distribución de partículas en medios viscoelásticos con diferentes cargas bajo la acción combinada de gradientes de presión, efectos gravitacionales y campos eléctricos, son de vital importancia en los estudios básicos de liberado de fármacos [56, 59].

Afonso *et al.* (2010) analizaron el fenómeno electro-osmótico mediante ecuaciones viscoelásticas no lineales tipo Phan-Thien, tomando en cuenta los efectos del solvente y del polímero. Su trabajo demostró que la reología y el flujo dependen de las propiedades materiales de la ecuación constitutiva (viscosidades a corte bajo, alto, tiempos de relajación, tiempos de flujo, etc.). La influencia de estos materiales fue analizada a través de grupos adimensionales asociados a los diferentes mecanismos aplicados [24] y de nueva cuenta, sus resultados reflejan los efectos de las propiedades electro-reológicas newtonianas sobre el flujo.

En este contexto, muchas ecuaciones constitutivas han sido empleadas con el fin de caracterizar la reología y transferencia de momento en sistemas complejos. En este punto, podemos mencionar las siguientes: (i) Modelo de Phan-Thien-Tanner, (ii) Modelo de Tanner, (iii) Modelo de Giesekus, (iv) Modelo de De Kee, (v) Modelo de White-Metzner, (vi) Modelo de Oldroyd B, etc. Todas estas ecuaciones constitutivas tratan de describir el comportamiento lineal y no lineal de estos sistemas. La mayoría de estos modelos describen los siguientes mecanismos: (i) Adelgazamiento y Engrosamiento al corte, (ii) Tixotropía, (iii) Reopexía, (iv) Esfuerzo de cedencia, etc. La mayoría tiene expresiones analíticas para flujos sencillos de Couette, Poiseuille y flujos combinados. Sin embargo,

la mayoría de estos modelos contienen varios parámetros de ajuste, es decir, parámetros que no pueden obtenerse de experimentos reológicos en estado estacionario y no estacionario [53-58]. Una revisión de este tipo de modelos se puede consultar en el libro de Bird (2002) [51].

La mayoría de los modelos mencionados no describen los procesos de formación y destrucción de la estructura, i.e. no interpretan el cambio de viscosidad en términos de la estructura intermolecular del fluido. Lo anterior es especialmente relevante en el flujo de los fluidos de interés en la industria y en otras ramas de la ciencia (véase [60]). Además, contienen parámetros de ajuste que no pueden ser obtenidos en términos de otros experimentos reológicos, por lo tanto, es conveniente que, fluidos como los sistemas micelares, dispersiones de cristales líquidos, polímeros asociativos, fluidos biológicos como la sangre con hipercolesterolemia y coloides, sean interpretados en términos de su estructura intermolecular. Por consiguiente, valdría la pena utilizar un modelo que describa la evolución del flujo de estos materiales en términos de variables medibles y que puedan ser calculadas mediante experimentos reológicos independientes tanto en estado estacionario como en estado no estacionario.

Para cumplir con lo anterior, se requiere de un modelo que prediga la dinámica no lineal y lineal de un sistema estructurado (v.g. polímero) asociativo, es decir, la visco-elasto-plasticidad y cuya estructura dependa de la posición  $r$  y del tiempo  $t$  durante un flujo.

Podemos enlistar los aspectos de interés en el modelo para un flujo cortante simple de fluidos complejos inducidos por un gradiente de presión constante:

- e) El modelo propuesto deberá ser capaz de describir la dinámica lineal y la dinámica no lineal de un fluido con estructura transitoria.
- f) A través de las propiedades materiales del modelo propuesto se podrá describir los mecanismos más importantes de la reología como son: (i) Adelgazamiento, (ii) Engrosamiento, (iii) Tixotropía, (iv) Reopexía, (v) Esfuerzo de cedencia y (vi) Bando.
- g) Números adimensionales que describan los mecanismos de b).
- h) De preferencia, deberá generar expresiones analíticas para: (i) el perfil de velocidades, (ii) flujo volumétrico, (iii) fluidez aparente en función de los números adimensionales, (iv) factor de fricción (de Darcy) no-newtoniano.

A pesar de todos los esfuerzos que se han realizado en la descripción del flujo cortante inducido por un gradiente de presión en un cilindro (flujo de Poiseuille), pocos modelos pueden capturar todos los mecanismos anteriores.

Para contestar estas preguntas, los objetivos del presente libro de texto se anuncian en la siguiente sección.

## 1.5 Distribución del material de estudio

El contenido de este libro se ha dividido de la siguiente manera:

**En el capítulo I** se introduce al lector a los fluidos complejos y estructurados y se presentan las características más importantes de este tipo de sistemas, en particular, se estudian las micelas tipo gusano.

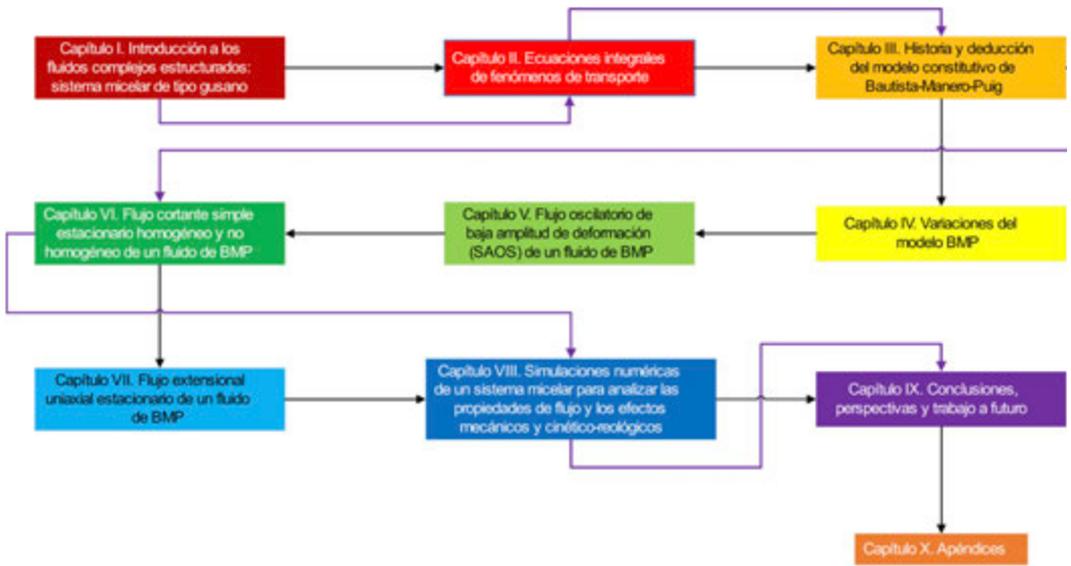
**En el capítulo II** se deducen las ecuaciones de continuidad y de momento básicas a partir de balances integrales y se discuten casos particulares de las mismas.

**En el capítulo III** se deduce y se discute la ecuación constitutiva reológica de estado de Bautista-Manero-Puig (BMP). Esta ecuación se presenta mediante un sistema mecánico y un balance poblacional de estructura.

**En el capítulo IV** se presentan formas alternativas del modelo BMP que toman en consideración un solvente newtoniano, describen el fenómeno de bandeo o explican la transferencia de masa simultánea durante el flujo.

**En el capítulo V** se estudia el flujo oscilatorio de baja amplitud para describir la respuesta viscoelástica lineal del sistema. En el régimen de bajas deformaciones, la ecuación constitutiva de BMP se reduce al modelo lineal de Burgers. Este modelo se puede interpretar como un sistema de dos modelos de Maxwell en paralelo, en el cual la rapidez de deformación es constante.

**En el capítulo VI** se estudia el flujo cortante homogéneo (flujo de Couette) y el flujo cortante no homogéneo (flujo en un cilindro) con la ecuación constitutiva Bautista-Manero-Puig (BMP). En este sistema se supone que la rapidez de deformación es constante para el flujo homogéneo y no constante en el flujo no-homogéneo y, experimentalmente, se conoce como una prueba destructiva.



**Figura 14.** Distribución informativa del libro. El orden en que se recomienda leer esta obra se indica con flechas negras, las flechas moradas indican el orden de consulta para lectores familiarizados con el tema.

**En el capítulo VII** se estudia el flujo extensional del modelo BMP. En este régimen de flujo, el sistema se reduce a una ecuación no lineal para la rapidez de extensión. A baja y alta rapidez de extensión, el sistema se reduce al modelo de Trouton que relaciona la viscosidad cortante con la viscosidad extensional.

**En el capítulo VIII** se realizan las simulaciones numéricas con datos experimentales de micelas tipo gusano para analizar el perfil de velocidades y el flujo volumétrico de los mecanismos adelgazantes y engrosantes, tixotrópicos y reopécticos, esfuerzo a la cedencia y factor de fricción.

**En el capítulo IX** se presentan las conclusiones, perspectivas y trabajo futuro del sistema.

**En el capítulo X** se presentan los apéndices. El apéndice A contiene la deducción del perfil de velocidades y el apéndice B presenta la deducción del flujo volumétrico. Finalmente, este libro es el reflejo de mucho tiempo invertido en la búsqueda constante para el entendimiento de sistemas complejos sometidos a flujo de Poiseuille, con el fin de

comprender su comportamiento reológico. La extensión natural de este trabajo, es estudiar otro tipo de geometrías simples (rendijas, esferas), diferentes tipos de flujo: (i) pulsátil, (ii) extensional, oscilatorio a baja y alta amplitud, etc. Otra de las vertientes futuras podría ser la aplicación de este tipo de flujo a sistemas biológicos como en el liberado de fármacos, en el flujo pulsátil sanguíneo, y en la descripción de películas que sirven en la regeneración de tejido como es el colágeno. Estos sistemas involucran transferencia de masa inducida por la transferencia de momento.

## 1.6 Objetivos

El objetivo general y los objetivos particulares del presente libro son mencionados a continuación.

### 1.6.1 Objetivo general

Analizar el comportamiento reológico de un polímero asociativo que se deforma continua e irreversiblemente por un gradiente de presión constante y por arrastre en la dirección del flujo.

### 1.6.2 Objetivos particulares

**Particular 1:** Determinar todas las propiedades de flujo de un líquido complejo (polímero asociativo) sometido a un gradiente de presión constante y por arrastre.

**Particular 2:** Caracterizar la cinemática y la dinámica del sistema de flujo mediante una ecuación constitutiva que describa el rompimiento y la formación de la estructura por efecto del flujo.

**Particular 3:** Proponer un conjunto de variables adimensionales con el fin de obtener un conjunto de grupos adimensionales que describa la física completa del sistema.

**Particular 4:** Obtener los perfiles de velocidad y flujo volumétrico en función de los grupos adimensionales correspondientes a los distintos mecanismos reológicos propuestos.

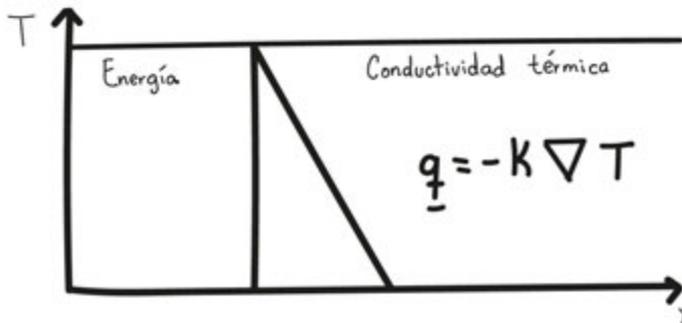
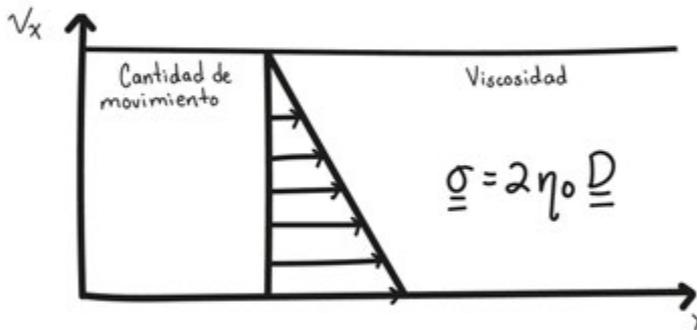
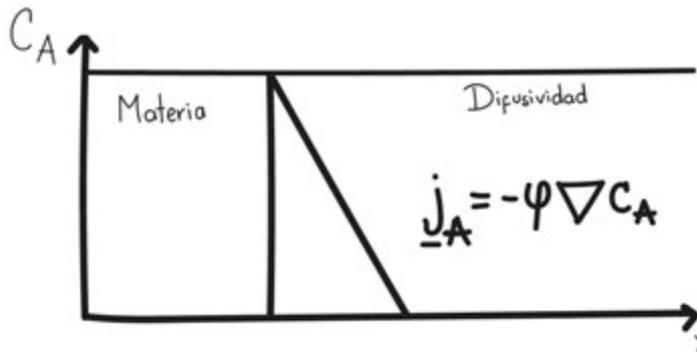
## 1.7 Hipótesis del sistema

Si el flujo y la reología de un sistema estructurado depende del número de entrecruzamientos en el tiempo  $t$ , entonces las propiedades del flujo y los parámetros reológicos podrán ser cuantificados a través de los procesos cinéticos de construcción y destrucción estructural del fluido.



## CAPÍTULO II

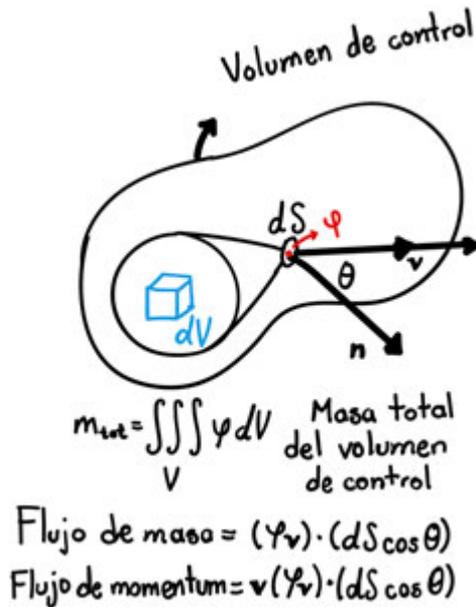
# Ecuaciones de conservación y de transporte



Adaptado de Bird *et al.* [51]

## II.1 Ecuación de continuidad sin reacción química (conservación de masa)

En esta sección se presentan las ecuaciones más importantes que son base de los resultados que se presentarán en las secciones siguientes, todos los balances presentados en este libro se le conocen como balances integrales [51, 61]. La premisa es muy simple: se tiene un elemento de control (o volumen de control) en el cual se hacen los balances de materia, momento y energía. Este volumen de control se asume continuo, es decir, todas las funciones de interés del sistema no presentan discontinuidades matemáticas, además, la densidad del volumen de control es puntual (véase **Figura II1**). Lo anterior implica que el volumen de control se observa a una escala mayor en comparación de la escala atómico-molecular [62].



**Figura III.** Esquema general del balance de masa. Adaptado de Welty *et al.* [61].

Como en todo balance de materia [63], se parte de la premisa de que:

$$\text{Entradas} + \text{Generación} = \text{Salidas} + \text{Acumulación}$$

(II.1)

Para el término de acumulación en el volumen de control se tiene que:

$$\text{Acumulación} = \frac{d}{dt} m_{\text{total}} = \frac{d}{dt} \int_V \rho dV \quad (\text{II.2})$$

La cantidad de materia total que entra y sale en el elemento de control, está dada por la integral de superficie:

$$\text{Entrada-Salida} = - \int_S \rho V \cdot dS \quad (\text{II.3})$$

Dado que no hay reacciones nucleares ni reacciones químicas, el término de generación es nulo, por lo tanto, se igualan las Ecs. (II.2) y (II.3):

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_S \rho V \cdot dS \quad (\text{II.4})$$

Al introducir la derivada temporal en la densidad del sistema, se obtiene lo siguiente:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_S \rho V \cdot dS \quad (\text{II.5})$$

Aplicando el teorema de la divergencia en la Ec. (II.5)

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_S \rho V \cdot dS = - \int_V \nabla \cdot (\rho V) dV \quad (\text{II.6})$$

Finalmente, se tiene lo siguiente:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (\rho V) dV = 0 \quad (\text{II.7})$$

Factorizando, la diferencial del volumen si tiene lo siguiente:

$$\int_V \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) \right) dV = 0 \quad (\text{II.8})$$

Como el volumen de control  $dV$ , es diferente de cero, se tiene lo siguiente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (\text{II.9})$$

La Ec. (II.9) puede ser expresada como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot \mathbf{V} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{V}) = 0 \quad (\text{II.10})$$

Por simetría, se tiene que:

$$\nabla \rho \cdot \mathbf{V} = \mathbf{V} \cdot \nabla \rho \quad (\text{II.11})$$

Entonces:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \rho \quad (\text{II.12})$$

Finalmente, se tiene la ecuación de continuidad (balance de materia) en el sistema:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{V}) = 0 \quad (\text{II.13})$$

Si el fluido es incompresible, es decir, si la densidad no depende de la posición y del tiempo, se tiene:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (\text{II.14})$$

Si la densidad es diferente de cero, i.e.,  $\rho \neq 0$ , se concluye lo siguiente:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (\text{II.15})$$

Es decir, para un fluido incompresible, los cambios espaciales de la velocidad son iguales a cero a través del operador divergencia. Es claro que esta ecuación es análoga a la teoría electromagnética, en donde la divergencia del campo magnético es cero, i.e., por lo que:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{II.16})$$

La Ec. (II.16) implica que no existen monopolos magnéticos y las líneas de corriente que salen de un polo de un imán son las mismas que entran en el otro polo. En términos de un fluido, las líneas de corriente que atraviesan un área de control son las mismas que salen.

## II.2 Ecuación de conservación de momento

Se podría decir que la ecuación de conservación de momento es la segunda ley de Newton aplicada a un medio continuo que, obtenida por primera vez por Austin-Louis de Cauchy en el siglo XIX, también se le conoce como segunda ley del movimiento de Cauchy. El balance de *momentum* se puede resumir de la siguiente manera:

$$\sum F = \text{Salidas} - \text{Entradas} + \text{Acumulación} \quad (\text{II.17})$$

La suma de fuerzas  $\sum F$  que actúan sobre el volumen de control consiste en 2 fuerzas distintas: las fuerzas volumétricas (o de bulto); resultado de campos de fuerzas que actúan en donde se encuentra el volumen de control y las fuerzas de superficie; generadas a través de interacciones entre el fluido en el volumen de control y sus alrededores [61]. El campo gravitacional y su fuerza resultante es el ejemplo típico de una fuerza volumétrica. En la **Figura II1** se muestra el esquema general del balance integral de masa y de *momentum*; el producto  $dS \cdot \cos\theta$  es la diferencial de área proyectada en una dirección normal al vector velocidad  $v$  donde  $\theta$  es el ángulo entre  $u$  y  $n$ ,  $n$  es un vector normal a la superficie que, por convención, sale de la misma y es positivo. Nótese que el producto  $(\rho u)(dA \cos\theta)$  es el flujo de entrada de masa del volumen de control a través de  $dS$ . Si se multiplica por el flujo de entrada de masa se obtiene el flujo de entrada de *momentum*

$$\mathbf{u}(\rho u)(dS \cos \theta) = \mathbf{u}(\rho dS)[|\mathbf{u} \parallel \mathbf{n}| \cos \theta] = \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})dS \quad (\text{II.18})$$

Por lo anterior, el término de acumulación se puede escribir como lo muestra la Ec. (II.19):

$$\text{Acumulación} = \frac{d}{dt} m_{\text{total}} \mathbf{u} = \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV \quad (\text{II.19})$$

La rapidez con la que entra o sale el momento en el elemento diferencial se puede expresar mediante una integral de superficie, por lo que se tiene lo siguiente:

$$\text{Entrada-Salidas} = -\int_S \mathbf{T} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{II.20})$$

En donde  $\mathbf{T}$  es el tensor de esfuerzos total, el cual se puede expresar como la suma de tres contribuciones, i.e.,

$$\mathbf{T} = p\mathbf{I} + \rho(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{II.21})$$

Las fuerzas de bulto actúan sobre todo el volumen de control, por lo que se tiene lo siguiente:

$$\text{Fuerzas de volumen} = \int_V f_B dV \quad (\text{II.22})$$

Al sumar todas las contribuciones

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV = -\int_S \mathbf{T} \cdot d\mathbf{S} + \int_V f_B dV \quad (\text{II.23})$$

Suponiendo que todas las funciones son de clase  $C^1$ , es decir, continuas y diferenciables por lo menos una vez, se tiene que, la derivada temporal ordinaria puede entrar en la integral como derivada parcial con respecto a la coordenada temporal  $t$ , por lo que:

$$\int_V \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} dV = -\int_S \mathbf{T} \cdot d\mathbf{S} + \int_V f_B dV \quad (\text{II.24})$$

La Ec. (II.24) se puede expresar como:

$$\int_V \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} dV + \int_S \mathbf{T} \cdot d\mathbf{S} - \int_V f_B dV = 0 \quad (\text{II.25})$$

Aplicando el teorema de la divergencia, para pasar de una integral de superficie a una de volumen:

$$\int_V \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot \mathbf{T} dV - \int_V f_B dV = 0 \quad (\text{II.26})$$

El operador intergral de volumen puede ser expresado como:

$$\int_V \left( \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{T} - \mathbf{f}_B \right) dV = 0 \quad (\text{II.27})$$

Como el volumen es diferente de cero, i.e.,  $V \neq 0$ , se tiene lo siguiente:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{T} - \mathbf{f}_B = 0 \quad (\text{II.28})$$

Finalmente, se obtiene lo siguiente:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.29})$$

El tensor de esfuerzos total (II.21), se sustituye en la Ec. (II.29) por lo que obtenemos, lo siguiente:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho \mathbf{I} + \rho(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \boldsymbol{\sigma}] + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.30})$$

En la Ec. (II.30), se realizan las operaciones tensoriales

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho \mathbf{I}] - \nabla \cdot [\rho(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})] + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.31})$$

En todas las operaciones involucradas en la Ec. (II.31) se utilizara, la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{II.32})$$

El segundo término se desarrolla aplicando las propiedades del operador divergencia, en particular, la diferencia de un escalar por un vector:

$$\nabla \cdot (f \mathbf{F}) = \nabla f \cdot \mathbf{F} + f(\nabla \cdot \mathbf{F}) \quad (\text{II.33})$$

Por lo que, el segundo término se puede desarrollar como:

$$\nabla \cdot [\rho \mathbf{I}] = \nabla \rho \cdot \mathbf{I} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{I}) \quad (\text{II.34})$$

Es importante, resaltar que en la Ec. (II.34):

$$\nabla \cdot \mathbf{I} = \mathbf{0} \quad (\text{II.35})$$

De la misma manera, el tercer término se debe de desarrollar como:

$$\nabla \cdot [\rho(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})] = \nabla \rho \cdot \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} = \nabla \rho \cdot \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \rho(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{II.36})$$

En la Ec. (II.36) se aplico dos veces la Ec. (II.33). Sumando todas las contribuciones se tiene lo siguiente:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla p \cdot \mathbf{I} - \rho(\nabla \cdot \mathbf{I}) - \nabla \rho \cdot \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \rho(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.37})$$

La Ec. (II.37) se puede simplificar si observamos que la divergencia del tensor unidad es cero (ver Ec. (II.35)). Además, si se arregla la Ec. (II.37), se obtiene lo siguiente:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) = -\nabla p \cdot \mathbf{I} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.38})$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{u} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) = -\nabla p \cdot \mathbf{I} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.39})$$

Factorizando a la velocidad  $\mathbf{u}$  de la Ec.(II.39), se tiene lo siguiente:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{u} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) = -\nabla p \cdot \mathbf{I} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.40})$$

Aplicando las propiedades del operador divergencia vistos en la Ec. (II.33), la Ec. (II.40) se puede expresar como:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{u} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \right) = -\nabla p \cdot \mathbf{I} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.41})$$

De la conservación de la masa sin reacción química, se tiene lo siguiente:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{u}(0) = -\nabla p \cdot \mathbf{I} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.42})$$

Y recordando, que el producto interior del gradiente de la presión y el tensor unidad  $\mathbf{I}$ , es el mismo, i.e.,

$$\nabla p = \nabla p \cdot \mathbf{I} \quad (\text{II.43})$$

Al susituir la Ec. (II.43) en la Ec. (II.42), se tiene lo siguiente:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.44})$$

Si se define la Ec. (II.44) en términos de la derivada material de la velocidad, tenemos lo siguiente:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (\text{II.45})$$

Combinando las Ecs. (II.44) y (II.45), se obtiene la siguiente expresión matemática:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_B \quad (\text{II.46})$$

Finalmente, si las fuerzas de bulto, se expresan en términos de los mecanismos gravitacionales, se tiene la ecuación de movimiento valida para fluidos newtonianos y no newtonianos.

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (\text{II.47})$$

A la Ec. (II.47) también se le conoce como segunda ley de movimiento de Cauchy [62].

## II.2.1 Ecuación de conservación de momento para un fluido Newtoniano

La ecuación más simple, que describe la reología de un fluido esta dado por la ecuación constitutiva de Newton, la cual se puede expresar en forma tensorial de la siguiente manera:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \mathbf{D} + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (\text{II.48})$$

En donde,  $\mathbf{D}$  es el tensor rapidez de deformación, el cual es la parte simétrica del tensor gradiente de velocidad  $\nabla\mathbf{u}$ , y que se puede expresar como:

$$2\mathbf{D} = \nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T \quad (\text{II.49})$$

En la Ec. (II.49),  $\mu$  y  $\lambda$  son las viscosidades cortante y volumétrica respectivamente.

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot [2\mu\mathbf{D} + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}] + \rho\mathbf{g} \quad (\text{II.50})$$

Al combinar las Ecs. (II.49) y (II.50) se tiene lo siguiente:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}] + \rho\mathbf{g} \quad (\text{II.51})$$

Desarrollando las operaciones vectoriales de la Ec. (II.51), se tiene lo siguiente:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla\mu \cdot (\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) + \mu\nabla \cdot [\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T] + \nabla \cdot [\lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}] + \rho\mathbf{g} \quad (\text{II.52})$$

Así que:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla\mu \cdot \nabla\mathbf{u} + \nabla\mu \cdot (\nabla\mathbf{u})^T + \mu\nabla \cdot \nabla\mathbf{u} + \mu\nabla \cdot (\nabla\mathbf{u})^T + \nabla \cdot [\lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}] + \rho\mathbf{g} \quad (\text{II.53})$$

Tenemos la siguiente expresión:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla\mu \cdot \nabla\mathbf{u} + \nabla\mu \cdot (\nabla\mathbf{u})^T + \mu\nabla^2\mathbf{u} + \mu\nabla[\nabla \cdot \mathbf{u}] + \nabla \cdot [\lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}] + \rho\mathbf{g} \quad (\text{II.54})$$

En donde se utilizaron las siguientes identidades vectoriales:

$$(\nabla \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla^2\mathbf{u} \quad (\text{II.55})$$

Y

$$\nabla \cdot (\nabla\mathbf{u})^T = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{II.56})$$

La Ec. (II.56) se puede demostrar simplemente utilizando la notación de Einstein y asumiendo la continuidad e invertibilidad de las derivadas parciales mixtas [24], así que:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\nabla \mathbf{u})^T &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right)^T = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u})\end{aligned}\quad (\text{II.57})$$

Y de la misma manera:

$$\nabla \cdot [\lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}] = \nabla \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \cdot \mathbf{I} + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) (\nabla \cdot \mathbf{I}) = \nabla \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \cdot \mathbf{I} \quad (\text{II.58})$$

Por lo que, se tiene la siguiente expresión analítica:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot [\lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}] &= \nabla \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \cdot \mathbf{I} = (\lambda \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \lambda) \cdot \mathbf{I} \\ &= \lambda \nabla [\nabla \cdot \mathbf{u}] + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \lambda\end{aligned}\quad (\text{II.59})$$

Si sustituimos las anteriores expresiones, en la ecuación de movimiento, se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} &= -\nabla p + \nabla \mu \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mu \cdot (\nabla \mathbf{u})^T + \dots \\ &+ \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mu \nabla [\nabla \cdot \mathbf{u}] + \lambda \nabla [\nabla \cdot \mathbf{u}] + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \lambda + \rho \mathbf{g}\end{aligned}\quad (\text{II.60})$$

Simplificando

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \mu \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mu \cdot (\nabla \mathbf{u})^T + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + (\mu + \lambda) \nabla [\nabla \cdot \mathbf{u}] + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \lambda + \rho \mathbf{g} \quad (\text{II.61})$$

La Ec. (III.44) es la expresión final para la descripción de un fluido newtoniano compresible y no-isotérmico. Esta expresión es general y puede ser utilizada para describir el flujo de sistemas con las características antes mencionadas.

### II.2.1.1 Ecuación de Navier-Stokes (Fluido incompresible e isotérmico)

Finalmente, si consideramos un sistema isotérmico, y que el líquido que estamos analizando es incompresible, se tiene que la viscosidad no depende de la posición y la divergencia del campo de velocidades es cero, por lo que se tiene:

$$\nabla \mu = \mathbf{0}; \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{II.62})$$

Al sustituir la Ec. (2.43) en el balance de cantidad de movimiento, se tiene lo siguiente:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mathbf{0} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{0} \cdot (\nabla \mathbf{u})^T + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + (\mu + \lambda) \nabla[\mathbf{0}] + (\mathbf{0}) \nabla \lambda + \rho \mathbf{g} \quad (\text{II.63})$$

Simplificando se observa que:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (\text{II.64})$$

La ecuación de Navier-Stokes es una ecuación no-lineal que se utiliza para fluidos Newtonianos y que es punto de partida en las aproximaciones para sistemas y geometrías simples.

Una primera aproximación es suponer que el flujo es laminar y el sistema se encuentra en el límite de Stokes, es decir, la divergencia del producto punto entre vectores de velocidad se puede expresar como:

$$\nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = 2\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (\text{II.65})$$

Por lo que, la Ec. (II.64), se puede expresar como:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \left( \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right) \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (\text{II.66})$$

Si suponemos, que la velocidad del sistema es baja, la energía cinética es pequeña y que se puede despreciar la Ec. (II.65), por lo que tenemos lo siguiente:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (\text{II.67})$$

### II.3 Ecuaciones constitutivas reológicas

También conocidas como ecuaciones de estado reológicas, las ecuaciones constitutivas reológicas son modelos matemáticos lineales y no lineales (del esfuerzo con la deformación) que describen la naturaleza reológica del material a través de sus propiedades materiales [4, 10, 24, 51, 64]. Los esfuerzos en este rubro se centran en describir dos tipos de fluidos: (i) Newtonianos, y (ii) No-Newtonianos. Los últimos son de mucho interés desde el punto de vista de la investigación básica, aplicada y tecnológica. Los fluidos no-newtonianos se pueden calificar como: (a) no-Newtonianos inelásticos, (b) no-Newtonianos viscoelásticos lineales y (c) no-Newtonianos viscoelásticos no lineales.

La ecuación básica que describe al fluido newtoniano tiene la siguiente forma (véase Ec. (II.68)):

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{D} \quad (\text{II.68})$$

En la Ec. (II.68),  $\mu$  es la constante material del fluido newtoniano llamada viscosidad, en los libros clásicos de reología se denota como  $\eta_0$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  y  $\mathbf{D}$  son el tensor de esfuerzos y el tensor rapidez de deformación, respectivamente, el tensor de rapidez de deformación es la parte simétrica del tensor gradiente de velocidad  $\nabla\mathbf{v}$ . La siguiente ecuación de estudio, es la llamada ecuación del fluido newtoniano generalizado-inelástico [24, 51, 65]:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta(\mathbb{I}_p)\mathbf{D} \quad (\text{II.69})$$

La Ec. (II.69) es básicamente la misma que la Ec. (II.68), sin embargo, la constante material se conoce como función viscosidad, la cual depende del segundo invariante del tensor de rapidez de deformación [24]

$$\eta(\mathbb{I}_p) = \eta\left(\sqrt{2(\mathbf{D}:\mathbf{D})}\right) \quad (\text{II.70})$$

El segundo invariante del tensor rapidez de deformación está asociado con el tipo de flujo reológico, i.e. flujo cortante, flujo extensional o combinaciones de ambos.

La ecuación constitutiva para un fluido viscoelástico lineal, combina dos elementos mecánicos en serie, un pistón con un fluido newtoniano: el viscoso y un resorte Hookeano: el elástico. El resultado de combinar ambos elementos mecánicos genera el modelo viscoelástico lineal más simple derivado originalmente por James Clerk Maxwell para la descripción de la termodinámica microscópica de gases [4]:

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{\eta_0}{G_0} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 2\eta_0 \mathbf{D} \quad (\text{II.71})$$

La única diferencia entre el modelo de Newton y el modelo de Maxwell, es la incorporación de un tiempo de relajación  $\eta_0/G_0$ , asociado a la competencia de los mecanismos intermoleculares asociados a la viscosidad newtoniana (numerador) y mecanismos intermoleculares asociados a la elasticidad lineal (denominador) del material. El modelo de Maxwell también puede incorporar los cambios espaciales de velocidad asociados a la no homogeneidad del tensor de esfuerzos (flujo no homogéneo) que incluye la derivada material [4, 24].

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{\eta_0}{G_0} \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \right) \boldsymbol{\sigma} = 2\eta_0 \mathbf{D} \quad (\text{II.72})$$

La Ec. (II.72), por ejemplo, ha sido propuesta para estudiar el flujo pulsátil, postulando que la velocidad, el esfuerzo, y el gradiente de presión son funciones periódicas en el tiempo [46, 66]. La Ec. (II.72) es válida solo en el régimen de bajas deformaciones, esto es, en el régimen donde el módulo viscoso y el módulo elástico no dependen de la deformación [67]. La Ec. (II.72) puede ser extendida al régimen de viscoelasticidad no lineal (véase Ec. (II.73)):

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{\eta_0}{G_0} \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \right) \boldsymbol{\sigma} - (\nabla \mathbf{V}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{V}) \right\} = 2\eta_0 \mathbf{D} \quad (\text{II.73})$$

Finalmente, cuando se incorpora un fluido no newtoniano generalizado-inelástico en el pistón, obtenemos un modelo visco-elasto-plástico:

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{\eta(\Pi_D)}{G_0} \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \right) \boldsymbol{\sigma} - (\nabla \mathbf{V}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{V}) \right\} = 2\eta(\Pi_D) \mathbf{D} \quad (\text{II.74})$$

La Ec. (II.74) es la forma más general del modelo de Maxwell y se conoce en la literatura como el modelo viscoelástico no lineal de White-Metzner [68]. Las propiedades reológicas del modelo de White-Metzner dependen de la naturaleza de la función viscosidad expresada en la Ec. (II.74), adicionalmente, dicha función viscosidad puede ser obtenida por medio de una prueba reológica conocida como flujo cortante simple estacionario [64]. Este modelo predice las funciones materiales a flujo cortante simple como son: (i) función viscosidad, (ii) Primer coeficiente de esfuerzos normales y (iii) Segundo coeficiente de esfuerzos normales. Si el lector desea conocer más modelos constitutivos reológicos, consultar el trabajo de Herrera-Valencia *et al.*, (2022) [66].

## CAPÍTULO III

# Modelo de Bautista-Manero-Puig (BMP)



*Definición: El modelo de BMP es una ecuación constitutiva reológica que es capaz de describir varios fenómenos reométricos. Es una ecuación tixotrópica, visco-elasto-plástica que se deduce a partir de un balance poblacional de tipo logístico en donde la población es la estructura al tiempo  $t$  y posición  $r$ .*

Balance de  
masa

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Balance de  
momentum

$$\varphi \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla P + 2\eta_s \nabla \cdot \mathbf{D} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

Tensor de  
esfuerzos  
viscoelásticos

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\eta, \mathbf{D})$$

Modelo BMP

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = \frac{1}{\lambda} (\varphi_0 - \varphi) + K_0 (\varphi_\infty - \varphi) \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}$$

Ecuación de Fredrickson

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{G_0 \varphi} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D}$$

Modelo de Maxwell Convectivo Superior (UCM)

## III.1 Modelo de Bautista-Manero-Puig

### III.1.1 Modelo de Fredrickson

El modelo de Fredrickson es un modelo de fluido inelástico que fue desarrollado para suspensiones y que acopla dos ecuaciones en términos de la fluidez [5]. La primera de ellas, es el newtoniano generalizado la cual, toma como punto de partida la siguiente expresión:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \quad (\text{III.1})$$

En la Ec. (III.1)  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de esfuerzos viscosos inelástico. La ecuación cinética que propuso Fredrickson, se basó en ecuaciones logísticas y balances poblaciones de estructura. La evolución de la estructura, puede ser descrita como una ecuación de crecimiento exponencial, i.e.

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\eta} \right) = -\frac{1}{\eta^2} \frac{d\eta}{dt} \quad (\text{III.2})$$

En donde la constante  $k_0$  es una constante de integración, la cual tiene unidades de inverso de tiempo y estará asociado a la reestructuración del material. Por otra parte, la Ec. (III.2) es poco realista, es decir predice que la estructura (viscosidad) crece hasta un valor infinito, por lo que es necesario modificarla. Si suponemos que la viscosidad decrece debido a que la interacción entre los puntos estructurales, i.e.  $\eta \cdot \eta$  por lo que, se tiene una ecuación logística:

$$\frac{d\eta}{dt} \propto \eta \Rightarrow \frac{d\eta}{dt} = k_0 \eta \quad (\text{III.3})$$

En la Ec. (III.3) el signo negativo significa que a la estructura se le resta la estructura que se rompe debido a su propia interacción intermolecular. El valor  $\eta_0$  es la viscosidad a baja rapidez de deformación que representa el máximo número de puntos estructurales del sistema a tiempo largos, es decir en el estado estacionario.

$$\frac{d\eta}{dt} \propto \eta \cdot \eta \cdot \eta \Rightarrow \frac{d\eta}{dt} = k_0 \left( \eta \cdot \frac{\eta \cdot \eta}{\eta_0} \right) \quad (\text{III.4})$$

De la misma manera, a rapidez de deformación alta, se tiene lo siguiente:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \eta(t) = \eta_0 \quad (\text{III.5})$$

La Ec. (III.5) satisface el siguiente límite.

$$\frac{d\eta}{dt} \propto \eta - \eta_0 \Rightarrow \frac{d\eta}{dt} = k_\infty \left( \eta - \frac{\eta \cdot \eta}{\eta_\infty} \right) \quad (\text{III.6})$$

Por lo tanto, el balance de puntos estructurales queda de la siguiente manera:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \eta(t) = \eta_\infty \quad (\text{III.7})$$

Entonces, al sustituir los balances poblaciones, se tiene lo siguiente:

$$\frac{d\eta}{dt} = \left( \frac{d\eta}{dt} \right)_0 + \left( \frac{d\eta}{dt} \right)_\infty \quad (\text{III.8})$$

Si multiplicamos la Ec. (III.14) por el negativo del cuadrado del inverso de la viscosidad, se tiene lo siguiente:

$$\frac{d\eta}{dt} = k_0 \left( \eta - \frac{\eta \cdot \eta}{\eta_0} \right) + k_\infty \left( \eta - \frac{\eta \cdot \eta}{\eta_\infty} \right) \quad (\text{III.9})$$

El miembro izquierdo de la Ec. (III.9) se puede simplificar como:

$$-\frac{1}{\eta^2} \frac{d\eta}{dt} = k_0 \left( \frac{1}{\eta_0} - \frac{1}{\eta} \right) + k_\infty \left( \frac{1}{\eta_\infty} - \frac{1}{\eta} \right) \quad (\text{III.10})$$

Combinando las Ecs. (II.27) y (II.28) se forma:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\eta} \right) = k_0 \left( \frac{1}{\eta_0} - \frac{1}{\eta} \right) + k_\infty \left( \frac{1}{\eta_\infty} - \frac{1}{\eta} \right) \quad (\text{III.11})$$

Entonces, si se define el inverso de la viscosidad (Ec. (III.12)) como un parámetro estructural conocido como fluidez se puede analizar casos límite, i.e. el caso de fluidez cero, i.e., el esfuerzo de cedencia, etc.

$$\frac{1}{\eta} = \varphi \quad \text{(III.12)}$$

Finalmente, combinando las Ecs. (II.30) en (II.31), se tiene:

$$\frac{d\varphi}{dt} = k_0 (\varphi_0 - \varphi) + k_\infty (\varphi_\infty - \varphi) \quad \text{(III.13)}$$

Si se define la constante  $k_0$  de la siguiente manera:

$$k_0 = \frac{1}{\lambda} \quad \text{(III.14)}$$

Y la constante  $k_\infty$  como:

$$k_\infty = k\sigma : \mathbf{D} \quad \text{(III.15)}$$

La constante  $k_\infty$  es proporcional al trabajo irreversible para romper la estructura. Nótese, que la Ec. (III.15) involucra el flujo a través del tensor rapidez de deformación  $\mathbf{D}$ . Por lo que, se tiene lo siguiente:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + k(\varphi_\infty - \varphi)\sigma : \mathbf{D} \quad \text{(III.16)}$$

La Ec. (III.16) fue deducida por Fredrickson (1970)[5]. Esta ecuación describe un balance de estructura. Los parámetros  $\{\lambda, k\}$  se pueden interpretar como un tiempo de reestructuración y  $k$  es una constante de tipo cinético que describe la destrucción de la estructura. Finalmente el par de ecuaciones acopladas, tiene la forma:

$$\text{Fredrickson} \Rightarrow \begin{cases} \sigma = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \\ \frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + k(\varphi_\infty - \varphi)\sigma : \mathbf{D} \end{cases} \quad \text{(III.17)}$$

### III.1.2 Modelo viscoelástico de BMP

En este modelo se describe el estado reológico de un fluido con estructura transitoria (por estructura transitoria se entiende que la viscosidad del fluido es proporcional al número de puntos o entrecruzamientos físicos al tiempo  $t$ ). El modelo BMP se describe a continuación [1]. La deformación total de un material viscoelástico, donde la parte viscosa está conectada en serie con la parte elástica, se expresa como:

$$\gamma = \gamma_V + \gamma_E \quad (\text{III.18})$$

Aplicando la derivada temporal a la Ec. (III.18), se tiene lo siguiente:

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_V + \dot{\gamma}_E \quad (\text{III.19})$$

La rapidez de deformación viscosa, tiene la siguiente forma:

$$\dot{\gamma}_V = \varphi_0 \sigma \quad (\text{III.20})$$

Y la componente elástica, puede ser expresada como una generalización del modelo de Hooke, por lo que:

$$\dot{\gamma}_E = \frac{1}{G_0} \overset{v}{\sigma} \quad (\text{III.21})$$

Finalmente, el modelo BMP puede ser expresado como un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas, que predicen la primera diferencia de esfuerzos normales, definidas como:

$$\text{Bautista-Manero-Puig} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\varphi}{\varphi_0} \sigma + \frac{1}{\varphi_0 G_0} \overset{v}{\sigma} = \frac{2}{\varphi_0} \mathbf{D} \\ \frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + k(\varphi_\infty - \varphi) \sigma : \mathbf{D} \end{cases} \quad (\text{III.22})$$

El modelo BMP puede ser reescrito en términos de la fluidez, de la siguiente manera:

$$\sigma + \frac{1}{\varphi G_0} \overset{v}{\sigma} = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \quad (\text{III.23})$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{1}{\lambda}(\phi_0 - \phi) + K(\phi_\infty - \phi)\sigma : \mathbf{D} \quad (\text{III.24})$$

Las Ecs. (III.23) y (III.24) son las más utilizadas cuando se describe el modelo BMP en la literatura especializada en reología.

Las Ecs. (III.23) y (III.24) se pueden expresar en términos de la viscosidad de la siguiente manera:

$$\sigma + \frac{\eta(\Pi_D)^\vee}{G_0} \sigma = \eta(\Pi_D) \mathbf{D} \quad (\text{III.25})$$

$$\frac{1}{\eta(\Pi_D)} \frac{d\eta(\Pi_D)}{dt} = \frac{1}{\lambda} \left( 1 - \frac{\eta(\Pi_D)}{\eta_0} \right) + K \left( 1 - \frac{\eta(\Pi_D)}{\eta_\infty} \right) \sigma : \mathbf{D} \quad (\text{III.26})$$

Las Ecs. (III.25) y (III.26) es el modelo BMP en términos de la viscosidad.

### III.1.3 Balance estructural del modelo BMP

La suposición básica de este modelo radica en una ecuación modificada de Maxwell, la cual describe la viscoelasticidad de un material en términos de un balance de puntos estructurales.

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \sigma + \frac{1}{G_0} \sigma = 2\mathbf{D} \quad (\text{III.27})$$

En la Ec. (III.27), el parámetro estructural  $S(\mathbf{r}, t)$  depende de la posición, el tiempo y puede ser descrito en términos de un balance de puntos estructurales, i.e.:

$$\frac{dS(\mathbf{r}, t)}{dt} = \left( \frac{dS(\mathbf{r}, t)}{dt} \right)_0 - \left( \frac{dS(\mathbf{r}, t)}{dt} \right)_\infty \quad (\text{III.28})$$

A rapidez de deformación baja, el sistema se puede representar como:

$$\left( \frac{dS(\mathbf{r}, t)}{dt} \right)_0 = K_1 e^{-\beta_1 f(\text{Invariante})} \quad (\text{III.29})$$

A rapidez de deformación alta, se tiene una expresión similar:

$$\left( \frac{dS(r, t)}{dt} \right)_{\infty} = K_2 e^{-\beta_2 f(\text{Invariante})} \quad (\text{III.30})$$

El balance total toma la forma:

$$\frac{dS(r, t)}{dt} = K_1 e^{-\beta_1 f(\text{Invariante})} + K_2 e^{-\beta_2 f(\text{Invariante})} \quad (\text{III.31})$$

Las exponenciales pueden ser desarrolladas por medio de una serie de Taylor, y reteniendo contribuciones de primer orden, se tiene la siguiente expresión:

$$\frac{dS(r, t)}{dt} = K_1 (1 - \beta_1 f(\text{Invariante})) - K_2 (1 - \beta_2 f(\text{Invariante})) \quad (\text{III.32})$$

Así que, agrupando todos los términos de la Ec. (III.32), se tiene lo siguiente:

$$\frac{dS(r, t)}{dt} = K_1 - K_2 - K_1 \beta_1 f(\text{Invariante}) + K_2 \beta_2 f(\text{Invariante}) \quad (\text{III.33})$$

Y

$$\frac{dS(r, t)}{dt} = K_1 - K_2 + (K_1 \beta_1 - K_2 \beta_2) (-f(\text{Invariante})) \quad (\text{III.34})$$

Identificando las siguientes variables

$$K_1 = \frac{\varphi_0}{\lambda}; K_2 = \frac{\varphi}{\lambda}; \beta_1 = \varphi_1 \beta_2; \beta_2 = k\lambda \quad (\text{III.35})$$

Definiendo las siguientes variables, obtenemos:

$$\varphi r = \varphi_0 / \varphi_{\infty} \quad (\text{III.36})$$

El balance estructural está dado por:

$$\frac{dS(r,t)}{dt} = \frac{\varphi_0 - S(r,t)}{\lambda} + (\varphi_0 \varphi_r - S(r,t)) \left( -\frac{\beta_2}{\lambda} f(\text{Invariante}) \right) \quad (\text{III.37})$$

Y definiendo lo siguiente,

$$\varphi_0 \varphi_r = \varphi_\infty; k = \frac{\beta_2}{\lambda}; -f(\text{Invariant}) = \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}) \quad (\text{III.38})$$

Entonces,

$$\frac{dS(r,t)}{dt} = \frac{\varphi_0 - S(r,t)}{\lambda} + k(\varphi_\infty - S(r,t)) \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}) \quad (\text{III.39})$$

La Ec. (III.39), toma la siguiente forma analítica

$$\left( 1 + f_\lambda (\beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D})) \frac{d}{dt} \right) S(r,t) / \varphi_\infty = \frac{\varphi_r + \beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D})}{1 + \beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D})} \quad (\text{III.40})$$

Y la función de relajación se puede expresar en términos de una exponencial

$$f_\lambda (\beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D})) = \frac{\lambda}{1 + \beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D})} \cong \frac{\lambda}{\text{Exp}(\beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}))} = \lambda \text{Exp}(-\beta \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D})) \quad (\text{III.41})$$

Combinando las dos últimas ecuaciones, se tiene lo siguiente:

$$S(r,t) / \varphi_\infty = \frac{\text{Exp}[(\varphi_r - 1) f_\lambda]}{1 + f_\lambda \frac{d}{dt}} \quad (\text{III.42})$$

El modelo final, se puede expresar de la siguiente manera:

$$\text{Exp}[(\varphi_r - 1) f_\lambda] \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{\varphi_\infty G_0} \left( 1 + f_\lambda \frac{d}{dt} \right)^v \boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{\varphi_\infty} \left( 1 + f_\lambda \frac{d}{dt} \right) \mathbf{D} \quad (\text{III.43})$$

Y generalizando la última expresión, tenemos:

$$\text{Exp}[(\varphi_r - 1) f_\lambda] \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{\varphi_\infty G_0} \boldsymbol{\sigma} + \frac{f_\lambda}{\varphi_\infty G_0} \boldsymbol{\sigma}^{vv} = \frac{2}{\varphi_\infty} \left( \mathbf{D} + f_\lambda \mathbf{D} \right) \quad (\text{III.44})$$

La Ec. (III.44) es el modelo reológico general de este libro y contiene varios casos particulares de la literatura en reología. Nótese, que este ha sido deducido mediante argumentos de teoría cinética y ecuaciones de tipo Arrhenius. Aquí, la energía de activación es el trabajo irreversible viscoso o viscoelástico que necesita un agente externo para cambiar de estructura por efecto del flujo (corte). Esto es similar al modelo de Eyring usado para describir el cambio de una reacción:  $K = K_0 \text{Exp}[-\Delta G/RT] = K_0 \text{Exp}[-\beta\sigma : D]$ , i.e.,  $\Delta G/RT = \beta\sigma : D$ .

Nótese que la asunción de la cinética de tipo exponencial corresponde a una dinámica poblacional de crecimiento independiente de la densidad (población continua), es decir, corresponde a sistemas diluidos. El modelo BMP (véase Ecs. (III.25) y (III.26)) proviene de una cinética poblacional continua dependiente de la concentración que es comúnmente conocido como modelo logístico [69].

## III.2 Modelo BMP vs otras ecuaciones constitutivas

Uno de los modelos cinéticos más exitosos en la última década es el modelo de BMP (Bautista-Manero-Puig) [1, 6, 17-19, 21, 25, 26], el cual ha sido utilizado en la descripción de fluidos complejos que se encuentran bajo flujo como son los sistemas micelares tipo gusano [45, 46, 70, 71], dispersiones de cristales líquidos [1, 25], sistemas micelares catiónicos [26, 72], polímeros asociativos [18, 73], polímeros tipo micelas [21], nanocompuestos poliméricos [74] y fluidos bio-reológicos [3].

La ventaja del modelo BMP con respecto a los otros modelos reológicos no lineales: (i) Phan-Thien-Tanner [53, 55-57, 75, 76], (ii) Giesekus [51, 77-80], (iii) Tanner [81], (iv) Oldroyd B [24, 51], (v) Acierno [82], (vi) Boek [16, 38, 39, 43], (vii) Cook-Vasquez-Mckinley [29], (viii) Marrucci [83], (ix) Mewis [84], (x) Rincon [85], es su sencillez para predecir flujos en geometrías simples en flujo cortante, flujo extensional uniaxial, flujo oscilatorio a baja amplitud, y flujo bandeado [1, 6, 17-19, 21, 25, 26]. En flujo cortante simple estacionario el modelo BMP predice los siguientes mecanismos [1, 2]:

- a) Adelgazamiento y engrosamiento al corte [1].
- b) Tixotropía y Reopexía [1, 3, 45, 46].
- c) Esfuerzo de cedencia [3, 86].
- d) Primera diferencia de esfuerzos normales [1, 2].

- e) Segunda diferencia de esfuerzos normales [87].
- f) Flujo bandeado [6, 25].

Otra de las ventajas de este modelo, es que todas las propiedades materiales  $[\eta_0, \eta_\infty, K, \lambda, G_0]$  pueden ser calculadas mediante experimentos reológicos en estado estacionario y no estacionario, y poseen interpretación física.  $[\eta_0, \eta_\infty]$  son las viscosidades a bajo y alto corte, respectivamente,  $G_0$  es el módulo elástico (elasticidad del material),  $K$  es una constante cinética y  $\lambda$  es un tiempo de reestructuración del sistema después de un periodo de deformación.

### III.3 Propiedades materiales del modelo BMP

El modelo BMP en su forma más simple contiene 5 propiedades materiales las cuales pueden ser obtenidas mediante experimentos reológicos independientes en estado estacionario y no estacionario. El resumen de las pruebas y su caracterización, se presentan a continuación en la **Tabla III.1**:

**Tabla III.1.** Propiedades materiales del modelo BMP y las pruebas reológicas con las que se obtienen.

Propiedad Material	Prueba de Flujo	Prueba de Flujo	Sistema geométrico utilizado
Constante cinética [Pa <sup>-1</sup> ]	K	Relajación de esfuerzos	Cilindros concéntricos
Tiempo de reestructuración [s]	$\lambda$	Relajación de esfuerzos	Cilindros concéntricos
Fluidez a corte bajo [Pa <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	$\phi_0$	Flujo en estado estacionario y homogéneo	Cono y Plato
Fluidez a corte alto [Pa <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	$\phi_\infty$	Flujo en estado estacionario y homogéneo	Cono y Plato
Módulo elástico [Pa]	$G_0$	Flujo oscilatorio de baja amplitud	Platos paralelos

En la prueba de flujo en estado estacionario y homogéneo, la muestra es colocada en el reómetro y es destruida por efecto de la rapidez de deformación. En la prueba de flujo oscilatorio de baja amplitud, se obtiene la respuesta viscoelástica lineal del material en el sistema, i.e. que tan viscosa y elástica es esta, cabe resaltar que en esta prueba la respuesta elástica y viscosa son independientes de la deformación. En el experimento de relajación instantánea, se observa la recuperación del material (esfuerzo vs tiempo) cuando es sometido a un esfuerzo constante y este se interrumpe.

En la **Tabla III.2** se presentan los valores numéricos de los parámetros reológicos del modelo BMP de un polímero asociativo HASE el cual es utilizado como precursor reológico en las pinturas comerciales [88] calculados con las pruebas reométricas explicadas anteriormente, para las distintas condiciones de flujo estudiados por el BMP.

**Tabla III.2.** Valores de los parámetros materiales del polímero asociativo HASE.

BMP Ecuación reológica	Constante cinética	Tiempo de reestructuración	Módulo elástico	Fluidez a baja corte	Fluidez a alto corte
Propiedades del Material	$k \times 10^6$ [Pa <sup>-1</sup> ]	$\lambda$ [s]	$G_0$ [Pa]	$\phi_0 = 1/\eta_0$ [Pa <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	$\phi_\infty = 1/\eta_\infty$ [Pa <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
Engrosamiento al corte	39	0.14	185	0.0053	0.0002, 0.002
Adelgazamiento al corte	39	0.14	185	0.0053	0.20, 1
Newtoniano	39	0.14	185	0.0053	0.0053
Esfuerzo de cedencia	39	0.14	185	0, 0.001, 0.001, 0.0053, 1, 10.5	10.5
Tixotropía	39	0.14, 0.10, 0.01, 0.001	185	0.0053	1
Concentración de Hase (*) (wt. %)					
5%	250	0.12	41.5	0.0275	19.8
10%	30.3	0.33	176.0	0.0061	15.0
15%	10.5	0.38	138.0	0.0050	12.6
20%	4.2	0.42	620.0	0.0042	12.0

(\*) Los datos reométricos fueron obtenidos del polímero asociativo HASE y se ajustaron con el modelo BMP. Los protocolos experimentales para este fluido se basaron en el estudio de Caram *et al.* (2006)[88].



## CAPÍTULO IV

# Evolución del modelo BMP



*Definición: El modelo BMP es una ecuación tixotrópica, visco-elasto-plástica que se basa en el concepto de la ecuación logística (modelo poblacional) en donde la población con los puntos estructurales al tiempo  $t$  y posición  $r$ .*

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + K_0(1 + \theta \Pi_D)(\varphi_\infty - \varphi) \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + \varphi_0 \beta_0^* \nabla \cdot \mathbf{J}$$

$$\mathbf{J} + \tau_1 \frac{\varphi_0}{\varphi} \overset{\nabla}{\mathbf{J}} = -\mathcal{D} \frac{\varphi_0}{\varphi} \nabla c - \frac{\beta_0}{\varphi} \nabla \varphi + \beta_2 \frac{\varphi_0}{\varphi} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{G_0 \varphi} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} + \beta_2^* \frac{\varphi_0}{\varphi} \nabla \mathbf{J}$$

## IV.1 Evolución cronológica del modelo BMP

### IV.1.1 Modelo BMP generalizado

El modelo BMP generalizado se plantea a continuación [2]:

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{\varphi G_0} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\varphi} \left( \mathbf{D} + \lambda_j \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (\text{IV.1})$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\lambda} (\varphi_0 - \varphi) + K (\varphi_\infty - \varphi) \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \quad (\text{IV.2})$$

En la Ec. (IV.1),  $\lambda_j = [\eta_s / (\eta_s + \eta_p)]$ ,  $\lambda_0$  es el tiempo de retardo de Jeffreys el cual depende del tiempo de relajación de Maxwell (bajas deformaciones) y de la contribución del solvente y del polímero [2]. Este modelo fue probado bajo diferentes tipos de flujo llamados: (i) Flujo cortante simple estacionario, (ii) Flujo extensional uniaxial, (iii) Flujo oscilatorio de baja amplitud y (iv) Regla heurística de Cox-Merz, la cual es una comparación entre la viscosidad compleja y la cortante [2]. Si no se considera la cinética de construcción/destrucción del fluido, el modelo de BMP se reduce al bien conocido modelo de Oldroyd-B [4]

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{\varphi_0 G_0} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\varphi_0} \left( \mathbf{D} + \lambda_j \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (\text{IV.3})$$

En el régimen de viscoelasticidad lineal, el modelo de Oldroyd-B se transforma en el modelo de Jeffreys

$$\left( 1 + \frac{1}{\varphi_0 G_0} \frac{\partial}{\partial t} \right) \boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{\varphi_0} \left( 1 + \lambda_j \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{D} \quad (\text{IV.4})$$

En estado estacionario, el modelo de Oldroyd-B se reduce a la siguiente expresión no lineal para el esfuerzo:

$$\left( \frac{\varphi}{\varphi_0} \right) \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{\varphi_0 G_0} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\varphi_0} \left( \mathbf{D} + \lambda_j \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (\text{IV.5})$$

La derivada de la fluidez con respecto al tiempo de la Ec. (IV.5) es cero, por lo que la ecuación cinética (Ec. (IV.2)), toma la forma:

$$\frac{\varphi}{\varphi_0} = \frac{1 + (\varphi_\infty / \varphi_0) K \lambda \sigma : \mathbf{D}}{1 + K \lambda \sigma : \mathbf{D}} = \frac{1 + (\varphi_\infty / \varphi_0) \beta \sigma : \mathbf{D}}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \quad (\text{IV.6})$$

Al combinar las Ecs. (IV.5) y (IV.6), se tiene la siguiente ecuación diferencial no lineal

$$\left( \frac{1 + (\varphi_\infty / \varphi_0) \beta \sigma : \mathbf{D}}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \right) \dot{\sigma} + \frac{1}{\varphi_0 G_0} \overset{\vee}{\sigma} = \frac{2}{\varphi_0} \left( \mathbf{D} + \lambda_j \overset{\vee}{\mathbf{D}} \right) \quad (\text{IV.7})$$

Nótese, que en la Ec. (IV.7) no se ha invocado en concepto de estado estacionario, es decir, que la derivada de la estructura es cero debido a que los procesos de relajación son muy pequeños. El concepto de estado estacionario, se aplica a las variables dinámicas del sistema como son: (i) Esfuerzo y (ii) Rapidez de deformación.

## IV.1.2 Modelo de Boek

Las Ecs. (IV.8) y (IV.9) son el punto de partida para realizar una modificación al modelo BMP, separando las contribuciones del solvente y la del polímero [37]. El esfuerzo total puede ser separado en dos contribuciones asociadas al solvente y al polímero:

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_p = \frac{2}{\varphi_s} \mathbf{D} + \sigma_p \quad (\text{IV.8})$$

$$\sigma_p + \frac{1}{\varphi_p G_0} \overset{\vee}{\sigma}_p = \frac{2}{\varphi_p} \left( \mathbf{D} + \lambda_\infty \overset{\vee}{\mathbf{D}} \right) \quad (\text{IV.9})$$

$$\frac{d\varphi_p}{dt} = \frac{1}{\lambda} (\varphi_0 - \varphi_p) + K \varphi_\infty \sigma_p : \mathbf{D} \quad (\text{IV.10})$$

Las Ecs. (IV.8)-(IV.10) son la base del estudio en sistemas poliméricos del modelo BMP. Estas ecuaciones fueron probadas en diferentes tipos de flujo: (i) Flujo cortante simple estacionario, (ii) Flujo oscilatorio a baja amplitud de deformación, (iii) Flujo extensional uniaxial, (iv) ha sido aplicado en medios porosos. Es importante resaltar que el tiempo de Jeffreys  $\lambda_j$  fue reemplazado por un tiempo a alto corte llamado  $\lambda_\infty$  mediante un análisis de estabilidad del flujo extensional.

### IV.1.3 Modelo de Manero: diferentes tamaños micelares

El modelo BMP también fue modificado para tomar en cuenta el tamaño de los sistemas micelares tipo gusano [19]. Las ecuaciones básicas son las siguientes:

$$\sigma + C \left( \frac{1}{\varphi G_0} \right)^\alpha \sigma = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \quad (\text{IV.11})$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\lambda} (\varphi_0 - \varphi) + K (\varphi_\infty - \varphi) \sigma : \mathbf{D} \quad (\text{IV.12})$$

En la Ec. (IV.11)  $\alpha$  es un exponente del modelo tipo ley de potencia que describe las interacciones entre los diferentes tamaños.  $C$  es una constante de proporcionalidad, que es consistente con las unidades del modelo.

### IV.1.4 Modelo BMP: Flujo bandeado

El modelo ha presentado varias extensiones para considerar más efectos reológicos interesantes e inestabilidades al flujo. Una de las virtudes de este, es el de describir los efectos del flujo bandeado a través de incorporar en la ecuación cinética, el efecto del flujo a través de la constante cinética [1, 6, 17-19, 21, 25, 26, 89]. La constante cinética  $K$ , se expresa ahora como una función cinética, que depende del flujo a través del segundo invariante del tensor rapidez de deformación:

$$K = K_0 (1 + \theta \Pi_D) \quad (\text{IV.13})$$

La Ec. (IV.13) se sustituye en la cinética del BMP y el modelo que se obtiene es:

$$\sigma + \frac{1}{\varphi G_0} \sigma = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \quad (\text{IV.14})$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\lambda} (\varphi_0 - \varphi) + K_0 (1 + \theta \Pi_D) (\varphi_\infty - \varphi) \sigma : \mathbf{D} \quad (\text{IV.15})$$

El modelo conformado por las Ecs. (IV.14) y (IV.15), forman un conjunto no lineal de ecuaciones, que describe las inestabilidades de flujo asociado a una función esfuerzo multi-valuada (v.g. fenómeno de bandeo). Este modelo ha sido estudiado mediante análisis teóricos y experimentales.

### IV.1.5 Modelo BMP acoplado con transferencia de masa

El modelo BMP ha sido extendido, mediante termodinámica irreversible, para acoplar la transferencia de masa inducida por corte [89-91]:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\phi_0 - \phi}{\lambda} + K_0 (1 + \theta \Pi_D) (\phi_\infty - \phi) \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + \phi_0 \beta_0^* \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (\text{IV.16})$$

$$\mathbf{J} + \tau_1 \frac{\phi_0}{\phi} \overset{\vee}{\mathbf{J}} = -D \frac{\phi_0}{\phi} \nabla c - \frac{\beta_0}{\phi} \nabla \phi + \beta_2 \frac{\phi_0}{\phi} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{IV.17})$$

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{G_0 \phi} \overset{\vee}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\phi} \mathbf{D} + \beta_2' \frac{\phi_0}{\phi} \nabla \mathbf{J} \quad (\text{IV.18})$$

En donde las derivadas convectivas del tensor de esfuerzos y del flux de masa son definidas de la siguiente manera:

$$\overset{\vee}{\mathbf{J}} = \frac{D\mathbf{J}}{Dt} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \quad (\text{IV.19})$$

$$\overset{\vee}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} - (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}^T) \quad (\text{IV.20})$$

En las Ecs. (IV.19) y (IV.20)  $\mathbf{L}$  es el tensor gradiente de velocidad,  $\mathbf{D}$  es el tensor rapidez de deformación, que es la parte simétrica del tensor espacial gradiente de velocidad,  $\Pi_D$  es el Segundo invariante del tensor rapidez de deformación,  $\phi$  es la fluidez que es el inverso de la función viscosidad,  $\phi_0$  ( $\equiv \eta_0^{-1}$ ) es la fluidez a bajas rapidez de deformación,  $G_0$  es el módulo elástico,  $\lambda$  es el tiempo de reestructuración del sistema,  $K_0$  puede ser interpretado como una constante cinética que describe el rompimiento y destrucción de la estructura a bajas rapidez de deformación,  $\tau_1$  es un tiempo de relajación para el flux de masa,  $D$  es la difusividad inducida por el corte,  $c$  es la concentración del sistema y  $\vartheta$ ,  $\beta_0$ ,  $\beta_0'$ ,  $\beta_2$  y  $\beta_2'$  son parámetros fenomenológicos. Las Ecs. (IV.16)-(IV.20) junto con la ecuación

de continuidad para un solo componente sin reacción química, forman un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales no lineales y junto con las condiciones iniciales y de contorno, forman un conjunto cerrado. Este conjunto de ecuaciones diferenciales está doblemente acoplado y se utilizan para describir el comportamiento reológico lineal y no lineal de sistemas complejos [89-91].

### IV.1.6 Modelo BMP: difusión y dispersión

Otras de las ventajas del modelo de BMP versan en la descripción de fluidos complejos y migración de interfases, en sistemas que presentan estructura transitoria, y en el fenómeno de flujo bandeado.

$$\boldsymbol{\sigma} + \tau_{\sigma}(\varphi) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \quad (\text{IV.21})$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + K_0 \left(1 + \theta \sqrt{\Pi_D}\right) (\varphi_{\infty} - \varphi) \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + \kappa_{\varphi} \nabla^2 \varphi + \beta \nabla^2 |\nabla \varphi| \quad (\text{IV.22})$$

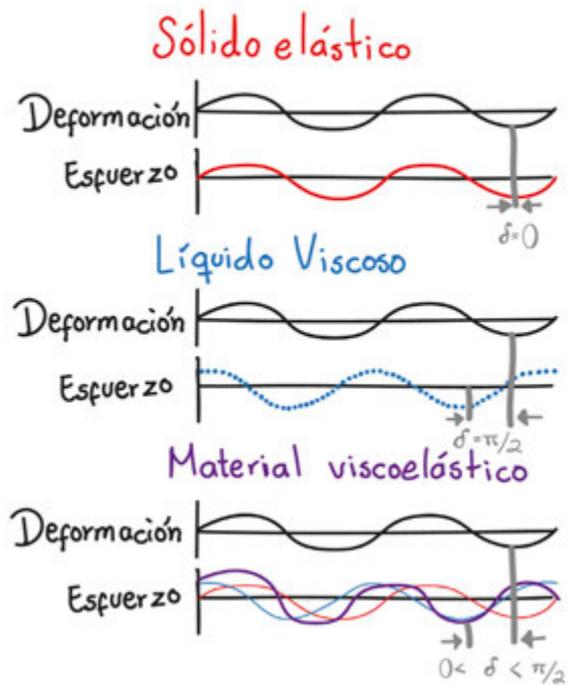
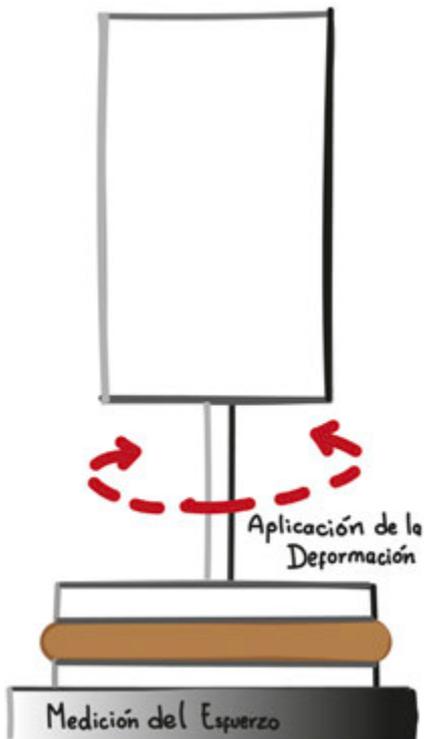
La ecuación cinética descrita por la Ecs. (IV.21) y (IV.22) describen los mecanismos asociados a los procesos de relajación, disipación, difusión y dispersión de un sistema de flujo. Esta ecuación ha sido utilizada en la descripción del flujo bandeado y de la migración de las interfases [91].

## CAPÍTULO V

# Flujo oscilatorio de baja amplitud de deformación (SAOS)



*Definición: La prueba de flujo oscilatorio es una prueba en reología no destructiva en la que se analiza la respuesta mecánica del sistema.*

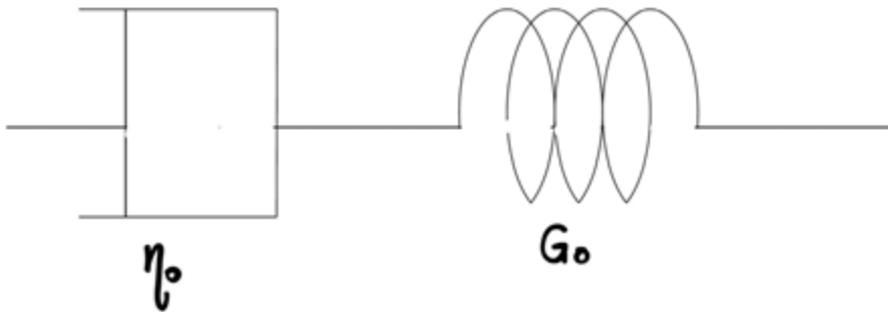


Adaptado de Tanner [81].

## V.1 Flujo Oscilatorio de Baja Amplitud de Deformación (SAOS)

El flujo oscilatorio de baja amplitud, quizá es uno de los sistemas de estudio más simples y a la vez más difíciles de describir por la física involucrada en él. Básicamente, este consiste en estudiar la respuesta mecánica del sistema. Que tan viscoso y que elástico puede ser un fluido. La premisa es fácil, una muestra es colocada en una geometría particular dependiendo de las características del fluido, es decir la geometría depende de la experiencia del investigador para ser colocada en la muestra. A partir de esta, se programa el reómetro y se empieza a deformar de manera controlada la muestra en cuestión. La deformación es oscilatoria, es decir, se deforma en una dirección y después se deforma en la otra dirección. Este sistema puede ser representado mecánicamente por un resorte (parte elástica y de almacenamiento de la energía del sistema) y por un embolo que describe la parte disipativa del resorte, es decir la parte que no se recupera en una deformación.

En la **Figura V1** se observa un dispositivo clásico que representa el modelo viscoelástico más sencillo conocido como fluido viscoelástico de Maxwell. Cada uno de estos modelos difiere en la disposición de los pistones y amortiguadores. Además, solo son aplicados a fluidos con gradientes de desplazamiento extremadamente pequeños.



**Figura VI.** Modelo en serie de Maxwell. Un resorte y un pistón son conectados en serie.

### V.1.1 Modelo de Maxwell

El modelo de Maxwell (véase **Figura V1**) se puede describir como la suma de una contribución viscosa y otra elástica que está asociada con la recuperación:

$$\gamma = \gamma_{\text{Newton}} + \gamma_{\text{Hooke}} \quad (\text{V.1})$$

Derivando la deformación total con respecto al tiempo, se tiene lo siguiente:

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{\text{Newton}} + \dot{\gamma}_{\text{Hooke}} \quad (\text{V.2})$$

La contribución de Newton y de Hooke se sustituye en la expresión anterior:

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{\text{Newton}} + \dot{\gamma}_{\text{Hooke}} = \frac{\sigma}{\eta_0} + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\sigma}{G_0} \right) = \frac{\sigma}{\eta_0} + \frac{1}{G_0} \frac{\partial}{\partial t} \sigma \quad (\text{V.3})$$

Multiplicando la Ec. (V.3) por la viscosidad a bajas rapidez de deformación, se obtiene la siguiente expresión:

$$\eta_0 \dot{\gamma} = \sigma + \frac{\eta_0}{G_0} \frac{\partial}{\partial t} \sigma = \left( 1 + \frac{\eta_0}{G_0} \frac{\partial}{\partial t} \right) \sigma \quad (\text{V.4})$$

Si se define el tiempo de relajación de Maxwell, como  $\lambda_0 = \eta_0/G_0$ , la expresión anterior toma la forma:

$$\left( 1 + \frac{\eta_0}{G_0} \frac{\partial}{\partial t} \right) \sigma = \eta_0 \dot{\gamma} \quad (\text{V.5})$$

Finalmente, si el tensor que describe la evolución de la deformación se expresa en términos del tensor rapidez de deformación, i.e.  $(d/dt) \dot{\gamma} = 2\mathbf{D}$ , se tiene el modelo tensorial reológico de Maxwell:

$$\sigma + \lambda_0 \frac{\partial}{\partial t} \sigma = 2\eta_0 \mathbf{D} \quad (\text{V.6})$$

El modelo de Maxwell predice que el esfuerzo decaerá exponencialmente con el tiempo en, por ejemplo, un polímero sometido a deformación constante, lo cual se ajusta bastante bien a lo observado experimentalmente para muchos polímeros líquidos. Sin embargo,

una limitación importante es que no predice el comportamiento de flujo lento (*creep*) de muchos polímeros ya que en este caso predice un aumento lineal de la deformación con el tiempo si el esfuerzo es constante, sin embargo, la mayor parte de los polímeros muestran una tasa de deformación decreciente con el tiempo. Por otra parte, esta ecuación está limitada solamente a deformaciones bajas, mientras que los procesos industriales trabajan a deformaciones moderadas y altas, respectivamente, por lo que se necesitan ecuaciones diferentes al modelo explicado por la Ec. (V.6).

## V.2 Funciones materiales en SAOS del modelo BMP

Las funciones materiales que se calculan en una prueba oscilatoria de baja amplitud son  $G'$  y  $G''$  las cuales están asociadas a los mecanismos viscosos-disipativos y a los elásticos-almacenamiento. Las funciones materiales se pueden obtener mediante la transformada de Fourier-Laplace y utilizando el concepto de función de transferencia compleja, i.e., el modelo estructural de esta propuesta se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{\varphi}{\varphi_\infty} \sigma + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \frac{d}{dt} \sigma = \frac{2}{\varphi_\infty} \mathbf{D} \quad (\text{V.7})$$

$$\left( 1 + \frac{\lambda}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \frac{d}{dt} \right) \frac{\varphi}{\varphi_\infty} = \frac{1 + \beta \sigma : \mathbf{D} + \varphi_r - 1}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} = 1 + \frac{\varphi_r - 1}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} = \text{Exp} \frac{\varphi_r - 1}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \quad (\text{V.8})$$

Al combinarse estas dos expresiones, se tiene lo siguiente:

$$\text{Exp} \left[ \frac{\varphi_r - 1}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \right] \sigma + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \left( 1 + \frac{\lambda}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \frac{d}{dt} \right) \sigma = \frac{2}{\varphi_\infty} \left( 1 + \frac{\lambda}{1 + \beta \sigma : \mathbf{D}} \frac{d}{dt} \right) \mathbf{D} \quad (\text{V.9})$$

Si consideramos el caso general de la expresión anterior, tenemos el siguiente modelo:

$$\text{Exp} \left[ (\varphi_r - 1) \frac{\lambda(\sigma : \mathbf{D})}{\lambda} \right] \sigma + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \left( 1 + \lambda(\sigma : \mathbf{D}) \frac{d}{dt} \right) \sigma = \frac{2}{\varphi_\infty} \left( 1 + \lambda(\sigma : \mathbf{D}) \frac{d}{dt} \right) \mathbf{D} \quad (\text{V.10})$$

$$\frac{\lambda(\sigma : \mathbf{D})}{\lambda} = \text{Exp}[-\beta \sigma : \mathbf{D}] \quad (\text{V.11})$$

En el régimen de viscoelasticidad lineal, el modelo anterior se reduce al modelo de Burgers, es decir:

$$\sigma + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \frac{\partial}{\partial t} \sigma + \lambda \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \sigma = \frac{2}{\varphi_\infty} \left( 1 + \lambda \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{D} \quad (\text{V.12})$$

La Ec. (V.12) puede ser factorizable de la siguiente manera:

$$\sigma = 2O_\eta \left( \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{D} \quad (\text{V.13})$$

Donde, operador viscosidad puede ser descrito de la siguiente manera [66]:

$$O_\eta \left( \frac{\partial}{\partial t} \right) = \frac{1}{\varphi_\infty} \frac{1 + \lambda \frac{\partial}{\partial t}}{1 + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \frac{\partial}{\partial t} + \lambda \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \frac{\partial^2}{\partial t^2}} \quad (\text{V.14})$$

Este operador viscosidad contiene como casos particulares a los modelos de Jeffreys y Maxwell. Si suponemos un flujo cortante, es decir solamente tenemos componentes xy, la ecuación anterior toma la forma:

$$\sigma_{xy} = O_\eta \left( \frac{\partial}{\partial t} \right) \dot{\gamma}_{xy} \quad (\text{V.15})$$

Definiendo la transformada de Fourier de la siguiente manera:

$$F\{f(t)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (\text{V.16})$$

Y recordando que la transformada de una derivada se puede expresar de la siguiente manera:

$$F\left\{ \frac{\partial^k f(t)}{\partial t^k} \right\} = (i\omega)^k f(\omega) \quad (\text{V.17})$$

Aplicando la transformada de Fourier, al operador viscosidad, se tiene lo siguiente:

$$O_{\eta}(i\omega) = \frac{1}{\varphi_{\infty}} \frac{1 + \lambda(i\omega)}{1 + \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}(i\omega) + \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}(i\omega)^2} \quad (\text{V.18})$$

Simplificando, se tiene lo siguiente:

$$O_{\eta}(i\omega) = \frac{1}{\varphi_{\infty}} \frac{1 + \lambda(i\omega)}{1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 + \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}(i\omega)} \quad (\text{V.19})$$

Multiplicando por el conjugado, se tiene:

$$O_{\eta}(i\omega) = \frac{1}{\varphi_{\infty}} \frac{1 + \lambda(i\omega)}{1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 + \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}(i\omega)} \cdot \frac{1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 - \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}(i\omega)}{1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 - \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}(i\omega)} \quad (\text{V.20})$$

$$O_{\eta}(i\omega) = \frac{1}{\varphi_{\infty}} \frac{1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 + \frac{\lambda}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 + \left( \frac{\omega}{G_0\varphi_{\infty}} + \lambda\omega - \frac{\lambda^2}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^3 \right) i}{\left( 1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 \right)^2 + \left( \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega \right)^2} \quad (\text{V.21})$$

Separando las contribuciones real e imaginaria, la función de transferencia toma la forma.

$$O_{\eta}(i\omega) = \text{Re}[O_{\eta}(i\omega)] + i\text{Im}[O_{\eta}(i\omega)] \quad (\text{V.22})$$

Definiendo la parte real e imaginaria como:

$$\text{Re}[O_{\eta}(i\omega)] = \frac{1}{\varphi_{\infty}} \frac{1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 + \frac{\lambda}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2}{\left( 1 - \lambda \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2 \right)^2 + \left( \frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega \right)^2} \quad (\text{V.23})$$

Y la parte imaginaria:

$$\text{Im}[O_{\eta}(i\omega)] = \frac{1}{\varphi_{\infty}} \frac{\frac{\omega}{G_0\varphi_{\infty}} + \lambda\omega - \frac{\lambda^2}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^3}{\left(1 - \lambda\frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega^2\right)^2 + \left(\frac{1}{G_0\varphi_{\infty}}\omega\right)^2} \quad (\text{V.24})$$

Entonces los módulos elásticos y viscosos toman la siguiente forma:

$$G(\omega) = i\omega O_{\eta}(i\omega) = i\omega \left( \text{Re}[O_{\eta}(i\omega)] - i \text{Im}[O_{\eta}(i\omega)] \right) \quad (\text{V.25})$$

La parte real del modulo elástico esta definido como:

$$G'(\omega) = \text{Re}[G(\omega)] = \omega \text{Im}[O_{\eta}(i\omega)] \quad (\text{V.26})$$

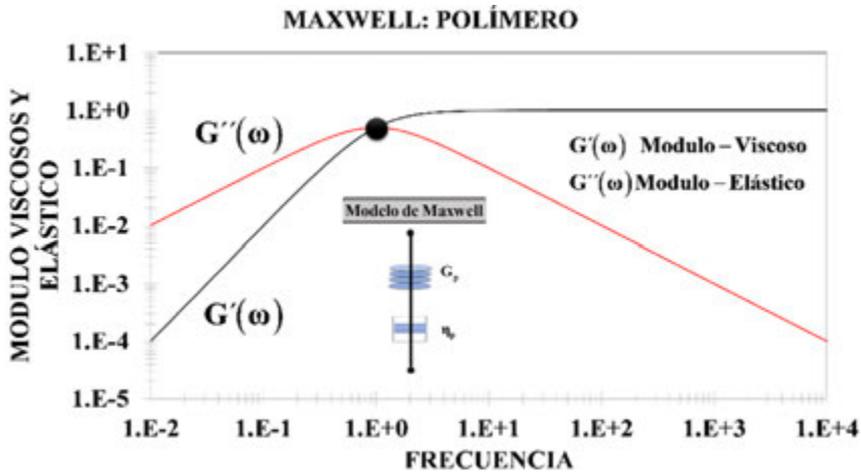
Y la parte imaginaria es:

$$G''(\omega) = \text{Im}[G(\omega)] = \omega \text{Re}[O_{\eta}(i\omega)] \quad (\text{V.27})$$

Los dos últimos resultados son la parte fundamental de esta prueba oscilatoria no destructiva en donde se analiza la respuesta mecánica del material, es decir la parte elástica y viscosa del sistema. A continuación, se analizan los casos particulares del sistema.

## V.2.1 Modelo de Maxwell: Polímero

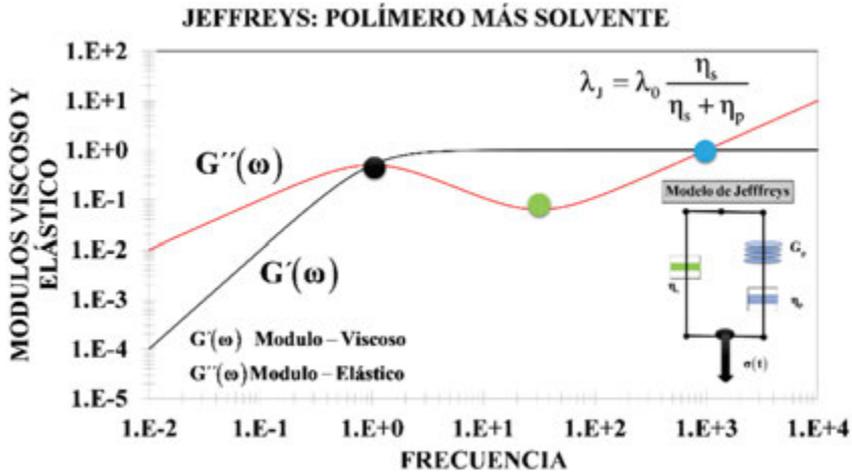
En la **Figura V2** se muestra la respuesta mecánica en escala log-log del modelo de Maxwell. A bajas frecuencias el módulo viscoso domina sobre el módulo elástico, de hecho,  $G'$  tiene una pendiente de 1 a bajas frecuencias y  $G''$  tiene una pendiente de 2 a bajas frecuencias (en escala logarítmica). Adicionalmente, el modelo de Maxwell contiene dos constantes materiales: el tiempo de relajación (inverso de la frecuencia en el equimódulo, es decir, en  $G' = G''$ ) y el módulo elástico  $G_0$ . El modelo de Maxwell repre snta bien los datos experimentales de algunos polímeros fundidos.



**Figura V2.** Módulo de pérdida  $G''$  y módulo de almacenamiento  $G'$  para el modelo de Maxwell.

## V.2.2 Modelo de Jeffreys: Interacción solvente-polímero

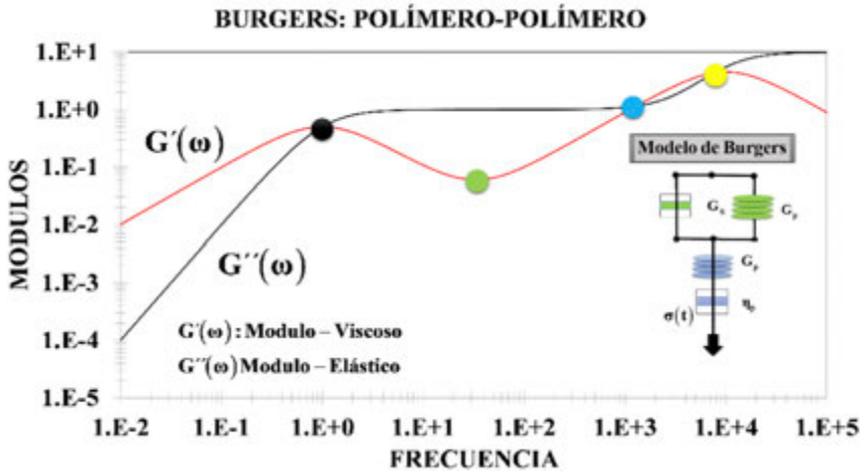
En la **Figura V3** se muestra el espectro dinámico mecánico lineal en escala log-log del modelo de Jeffreys. La analogía mecánica de este modelo consiste en un resorte conectado en paralelo con un modelo de Maxwell. A bajas frecuencias se puede apreciar un comportamiento de tipo Maxwelliano, a frecuencias medias el módulo de pérdida disminuye hasta un valor mínimo para posteriormente aumentar, asimismo, el módulo de almacenamiento permanece constante después del primer equimódulo. El aumento de  $G''$  a partir del valor mínimo se asocia a la respuesta del solvente, de hecho, en el segundo equimódulo, el inverso de la frecuencia corresponde al tiempo de relajación del solvente, y a la frecuencia del primer equimódulo corresponde al tiempo de relajación del polímero. El modelo de Jeffreys contiene tres constantes materiales asociadas a la viscosidad del polímero, viscosidad del solvente y el tiempo de relajación del solvente y del polímero. El modelo de Jeffreys representa los datos experimentales razonablemente bien para sistemas de surfactantes catiónicos diluidos.



**Figura V3.** Módulo de pérdida  $G''$  y módulo de almacenamiento  $G'$  del modelo de Jeffreys.

### V.2.3 Modelo de Burgers: Interacción polímero-polímero

En la **Figura V4** se muestra la respuesta mecánica del modelo de Burgers en escala log-log, al modelo de Burgers también se le conoce como el modelo de 4 elementos [64]. El modelo de Burgers conecta en serie un modelo de Maxwell y un modelo de Kelvin-voigt que representan la viscoelasticidad lineal de dos polímeros distintos que son solubles entre sí. La respuesta mecánica del modelo de Burgers exhibe 3 tiempos de relajación (equimódulo  $G' = G''$ ) el primero, el tiempo característico del modelo de Maxwell, el segundo, el tiempo característico del modelo de Jeffreys y el último correspondiente a la memoria de la interacción polímero-polímero.



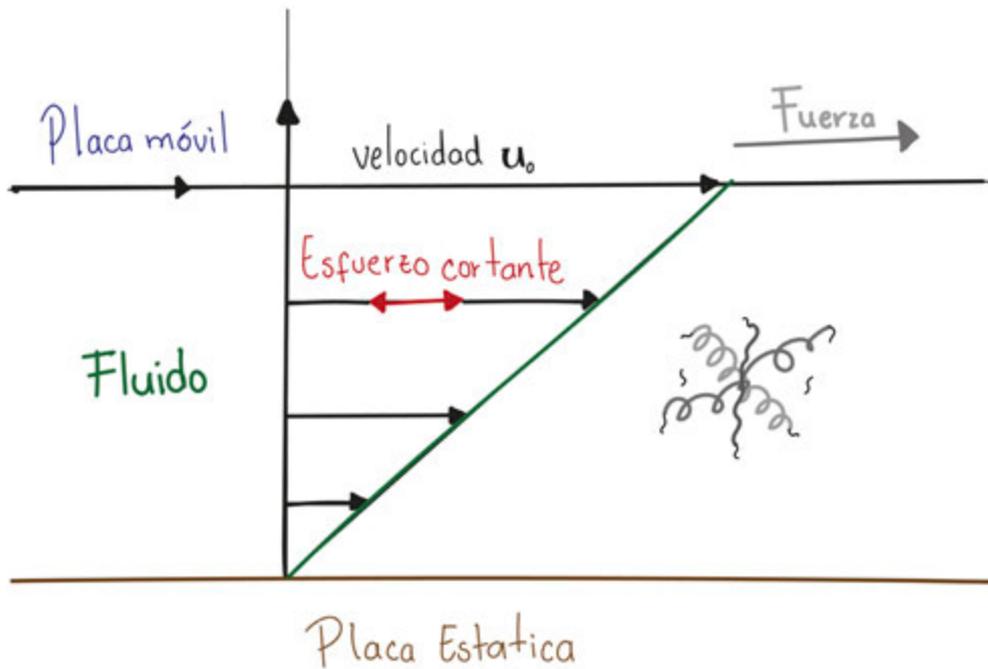
**Figura V4.** Módulo de pérdida  $G'$  y módulo de almacenamiento  $G''$  del modelo de Burgers.

## CAPÍTULO VI

# Flujo cortante simple estacionario



*Definición: La prueba de flujo cortante simple estacionario es una prueba en reología en la cual el material se destruye por efecto del flujo continuo.*



## VI.1 Flujo cortante simple

El flujo cortante simple es un flujo homogéneo, es decir, que la rapidez de deformación  $\dot{\gamma}$  y el esfuerzo cortante (tangencial) no dependen de la posición y es generado cuando a un elemento de control se le aplica una fuerza tangente y el material se deforma continua e irreversiblemente. Suponga dos placas separadas a una distancia  $H$ , en la cual se encuentra un fluido con densidad constante. En la placa superior se aplica una fuerza de tal manera que adquiere una velocidad  $v$  en la dirección paralela a la fuerza, esto implica que transfiere el momento en la dirección ortogonal a la velocidad, lo que implica a su vez que las placas de fluido que se encuentran debajo de la mayor velocidad adquieran una velocidad mucho menor hasta su valor mínimo de cero (condición de no deslizamiento).

## VI.2 Funciones materiales en flujo cortante simple

Las funciones materiales describen el estado de la respuesta que sufre el material a las deformaciones impuestas en función de las constantes materiales (éstas dependen de la ecuación constitutiva que se emplea y pueden ser viscosidades a bajo y alto corte, tiempos de retardo, fludeces, módulos elásticos, entre otras.) Las funciones materiales en corte son: la función viscosidad, el primero y el segundo coeficiente de esfuerzos normales, los cuales describen la respuesta del material cuando se somete a un flujo cortante simple. Desde el punto de vista reométrico, esta prueba es destructiva debido que se somete a un flujo continuo con grandes deformaciones y se cuantifican los cambios de la función viscosidad. Matemáticamente las funciones materiales en corte se pueden describir de la siguiente manera [24, 51].

$$\eta \left( \dot{\gamma}_{yx} \right) = \frac{\sigma_{yx}}{\dot{\gamma}_{yx}} \quad (\text{VI.1})$$

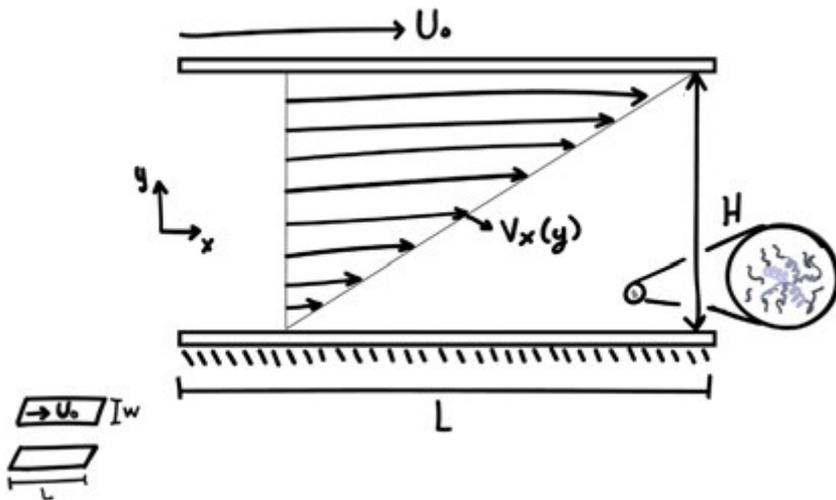
$$\Psi_1 = \frac{N_1}{\left( \dot{\gamma}_{yx} \right)^2} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{\left( \dot{\gamma}_{yx} \right)^2} \quad (\text{VI.2})$$

$$\Psi_2 = \frac{N_2}{\left(\dot{\gamma}_{yx}\right)^2} = \frac{\sigma_{yy} - \sigma_{zz}}{\left(\dot{\gamma}_{yx}\right)^2} \quad (\text{VI.3})$$

En las Ecs. (VI.1)-(VI.3)  $\eta$  es la función viscosidad,  $N_1$  y  $N_2$  son la primera y segunda diferencia de esfuerzos normales y finalmente  $\Psi_1$  y  $\Psi_2$  son el primer y segundo coeficiente de esfuerzos normales [24].

### VI.3 Flujo cortante simple del modelo BMP en placas paralelas (flujo homogéneo)

También conocido como flujo de Couette, el flujo cortante simple se lleva a cabo entre dos placas paralelas, separadas a una distancia  $y = H$  y de longitud característica  $x = L$ . Se supone que entre las placas se encuentra un fluido BMP el cual, es cortado debido a que la placa superior en  $y = H$ , tiene una velocidad  $U_0$ . Esta velocidad le transmite su *momentum* a las placas adyacentes en la dirección  $y$ , la que se encuentra en  $y = 0$ , su velocidad es cero (ver **Figura VI1**).



**Figura VII.** Esquema de flujo en placas paralelas de un fluido de BMP.

Suponga que el proceso es isotérmico, incompresible, los mecanismos gravitacionales se

desprecian y no existen una gradiente de presión en la dirección  $x$ . Para la descripción reológica planteamos las siguientes simplificaciones:

- a) Estado estacionario: ninguna variable dinámica o intrínseca del sistema dependen del tiempo.
- b) El fluido se deforma continua e irreversiblemente debido al arrastre que genera una placa en  $y = H$ .
- c) Los efectos gravitacionales son despreciables (placas horizontales).
- d) Flujo cortante simple. El vector velocidad solo depende de una coordenada  $\underline{v} = \{v_x(y), 0, 0\}$ .
- e) Fluido incompresible (densidad permanece constante en el tiempo y en el espacio, se tiene un flujo solenoidal).
- f) Proceso isotérmico (Temperatura constante,  $T = \text{cte}$ ).

Partiendo del balance de masa sin reacción química (ecuación de continuidad), se tiene que no existen elementos extensionales, es decir que se cumple lo siguiente:

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} = 0 \quad \text{(VI.4)}$$

De la ecuación de movimiento, suponiendo que los mecanismos inerciales, gravitacionales y de presión son despreciables, y que el transporte es molecular, se tiene lo siguiente:

$$\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} = 0 \quad \text{(VI.5)}$$

### VI.3.1 Funciones materiales

Las ecuaciones reológicas básicas que describen este flujo, son las mismas que en un flujo cortante simple por lo que, se tiene a siguiente expresión analítica:

$$\sigma_{xy} = \eta \left( \dot{\gamma}_{xy} \right) \dot{\gamma}_{xy} \quad (\text{VI.6})$$

La componente xx del tensor de esfuerzos:

$$\sigma_{xx} = 2 \frac{\eta \left( \dot{\gamma}_{xy} \right) \dot{\gamma}_{xy}}{G_0} \sigma_{xy} = 2 \frac{\sigma_{xy}^2}{G_0} \quad (\text{VI.7})$$

La ecuación cinética del modelo BMP, se reduce a la siguiente forma algebraica:

$$\varphi_0 - \varphi + K\lambda (\varphi_\infty - \varphi) \sigma_{xy} \dot{\gamma}_{xy} = 0 \quad (\text{VI.8})$$

Combinando la Ec. (VI.6) en términos de la fluidez, y sustituyéndola en la Ec. (VI.8), se tiene lo siguiente:

$$\varphi_0 - \varphi + K\lambda (\varphi_\infty - \varphi) \sigma_{xy}^2 \varphi = 0 \quad (\text{VI.9})$$

Desarrollando algebraicamente, se tiene lo siguiente:

$$K\lambda \sigma_{xy}^2 \varphi^2 + (1 - K\lambda \varphi_\infty \sigma_{xy}^2) \varphi - \varphi_0 = 0 \quad (\text{VI.10})$$

La Ec. (VI.10) puede ser resuelta utilizando la ecuación algebraica de segundo orden, por lo que se tiene lo siguiente:

$$\varphi(\sigma_{xy}) = \frac{K\lambda \varphi_\infty \sigma_{xy}^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda \varphi_\infty \sigma_{xy}^2 - 1)^2 + 4K\lambda \sigma_{xy}^2 \varphi_0}}{2K\lambda \sigma_{xy}^2} \quad (\text{VI.11})$$

La rapidez de deformación en términos del esfuerzo cortante, se puede expresar como:

$$\frac{dV_x}{dy} = \varphi(\sigma_{xy}) \sigma_{xy} = \frac{K\lambda\varphi_\infty\sigma_{xy}^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\varphi_\infty\sigma_{xy}^2 - 1)^2 + 4K\lambda\sigma_{xy}^2\varphi_0}}{2K\lambda\sigma_{xy}^2} \quad (\text{VI.12})$$

La rapidez de deformación tiene dos límites asintóticos a baja y alta rapidez de deformación respectivamente:

$$\lim_{\sigma_{xy} \rightarrow 0} \frac{dV_x}{dy} = \varphi_0 \sigma_{xy} \quad (\text{VI.13})$$

Y

$$\lim_{\sigma_{xy} \rightarrow \infty} \frac{dV_x}{dy} = \varphi_\infty \sigma_{xy} \quad (\text{VI.14})$$

### VI.3.2 Perfil de velocidades

Al combinar la ecuación de continuidad, movimiento y reologica se obtiene lo siguiente:

$$\frac{dV_x}{dy} = A \quad (\text{VI.15})$$

En la Ec. (VI.15) la constante A se ha definido como:

$$A = \frac{K\lambda\varphi_\infty\sigma_0^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\varphi_\infty\sigma_0^2 - 1)^2 + 4K\lambda\sigma_0^2\varphi_0}}{2K\lambda\sigma_0^2} \quad (\text{VI.16})$$

Integrando la Ec. (VI.15) con respecto a la coordenada espacial y, se tiene el perfil general de velocidades, i.e.,

$$V_x(y) = Ay + C \quad (\text{VI.17})$$

Aplicando las condiciones de frontera: (i)  $y = H$ ,  $V_x = U_0$  y (ii)  $y = 0$ ,  $V_x = 0$ , se tiene lo siguiente:

$$V_x(y) = \frac{U_0}{H} y \quad (\text{VI.18})$$

En donde se cumple que:

$$\frac{U_0}{H} = \frac{K\lambda\phi_\infty\sigma_0^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\phi_\infty\sigma_0^2 - 1)^2 + 4K\lambda\sigma_0^2\phi_0}}{2K\lambda\sigma_0^2} \quad (\text{VI.19})$$

### VI.3.3 Flujo volumétrico

Finalmente, se puede obtener el valor del esfuerzo  $\sigma_0$ , en términos de cantidades medibles. Integrando la Ec. (6.52) en una sección de área transversal, se tiene la siguiente expresión analítica para el flujo volumétrico  $Q$ , i.e.

$$Q = \int_0^w \int_0^H V_x(y) dy dz = \int_0^w \int_0^H \frac{U_0}{H} y dy dz = \frac{1}{2} HWU_0 \quad (\text{VI.20})$$

Las Ecs. (VI.19) y (VI.20) son las más importantes de este tema y son independientes del fluido que se este analizando, por lo que se utilizan como principio en lo cursos de reometría y para explicar el uso de las diferentes geometrías en los experimentos de flujo en estado estacionario y no estacionario.

### VI.4 Flujo cortante simple del modelo BMP en un cilindro (flujo no homogéneo)

Como se puede apreciar en la **Figura VI2**, el flujo cortante simple estacionario en un cilindro se dispone de una tubería de radio  $a$ . El flujo en el cilindro es unidireccional, i.e. el vector velocidad solo posee una componente, es decir  $u = (v_z(r), 0, 0)$ , el momento se transmite a lo largo de la coordenada radial, el eje neutro le corresponde el eje coordenado angular  $\theta$ , el gradiente de presión se considera constante en dirección axial, a través de dicho cilindro fluyen polímeros micelares [1, 6, 17-19, 21, 25, 26].

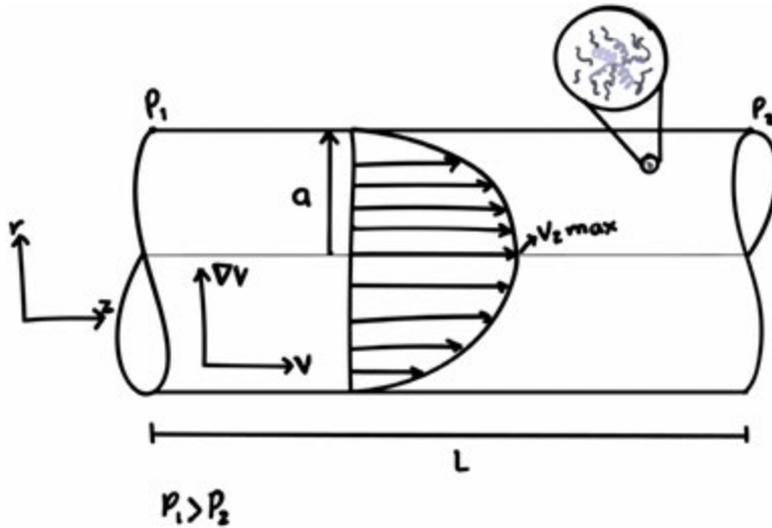


Figura VI.2. Esquema del flujo en un cilindro de un fluido de BMP.

Aplicando las condiciones anteriores, el modelo BMP se reduce a las siguientes ecuaciones:

$$\sigma_{12} + \frac{1}{\varphi G_0} \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial t} - \frac{1}{\varphi G_0} \dot{\gamma}_{12} \sigma_{22} = \frac{1}{\varphi} \dot{\gamma}_{12} \quad (\text{VI.21})$$

$$\sigma_{11} + \frac{1}{\varphi G_0} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial t} = 2 \frac{\dot{\gamma}_{12}}{G_0 \varphi} \sigma_{11} \quad (\text{VI.22})$$

$$\sigma_{22} + \frac{1}{\varphi G_0} \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial t} = 0 \quad (\text{VI.23})$$

$$\sigma_{33} + \frac{1}{\varphi G_0} \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial t} = 0 \quad (\text{VI.24})$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\lambda} (\varphi_0 - \varphi) + K (\varphi_\infty - \varphi) \sigma_{12} \dot{\gamma}_{12} \quad (\text{VI.25})$$

A continuación, se obtendrán expresiones cerradas para: (i) funciones materiales, (ii) perfil de velocidades, (iii) flujo volumétrico y (iv) factor de fricción. Adicionalmente, se utilizará el modelo BMP más simple, con el fin de caracterizar el líquido estructurado sometido a un gradiente de presión. El modelo BMP, en cantidades tensoriales, puede ser reescrito en términos de la fluidez de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \sigma + \frac{1}{\varphi G_0} \overset{v}{\sigma} &= \frac{2}{\varphi} \mathbf{D} \\ \overset{v}{\sigma} &= \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \sigma - \{ \nabla \mathbf{V}^T \cdot \sigma + \sigma \cdot \nabla \mathbf{V} \} \\ \frac{d\varphi}{dt} &= \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + K (\varphi_\infty - \varphi) \sigma : \mathbf{D} \end{aligned} \quad \text{(VI.26)}$$

Se modelará matemáticamente un flujo cortante simple inducido por un gradiente de presión constante de polímeros micelares. El procedimiento comenzará con la ecuación de BMP y, a partir de esta, se calcularán las funciones materiales del sistema como lo son el esfuerzo cortante, la función viscosidad, la primera diferencia de esfuerzos normales, el flujo volumétrico y el factor de fricción. Para la descripción del flujo planteamos las siguientes simplificaciones:

- a) Estado estacionario: ninguna variable dinámica o intrínseca del sistema dependen del tiempo.
- b) El fluido se deforma continua e irreversiblemente debido a un gradiente de presión constante en la dirección axial z.
- c) Los efectos gravitacionales son despreciables (Tubo horizontal).
- d) Flujo cortante simple. El vector velocidad solo depende de una coordenada.
- e) Fluido incompresible (densidad permanece constante en el tiempo y en el espacio, se tiene un flujo solenoidal).
- f) Proceso isotérmico (Temperatura constante,  $T = \text{cte}$ ).

## VI.4.1 Cantidades tensoriales

A continuación, se analizarán las cantidades tensoriales involucradas en el flujo de polímeros micelares en una tubería cilíndrica por medio del modelo constitutivo de BMP con las condiciones establecidas anteriormente.

### VI.4.1.1 Gradiente de velocidad

El tensor gradiente espacial de la velocidad en coordenadas cilíndricas está dado por:

$$\nabla V = \begin{pmatrix} \frac{\partial V_r}{\partial r} & \frac{\partial V_\theta}{\partial r} & \frac{\partial V_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial V_r}{\partial \theta} & \frac{1}{r} \frac{\partial V_\theta}{\partial \theta} + \frac{V_r}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial V_z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial V_r}{\partial z} & \frac{\partial V_\theta}{\partial z} & \frac{\partial V_z}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial V_z}{\partial r} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI.27})$$

A partir del tensor gradiente espacial de velocidades (Ec. (VI.27)) se calcula la transpuesta, i.e.

$$(\nabla V)^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial V_r}{\partial r} & \frac{\partial V_\theta}{\partial r} & \frac{\partial V_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial V_r}{\partial \theta} & \frac{1}{r} \frac{\partial V_\theta}{\partial \theta} + \frac{V_r}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial V_z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial V_r}{\partial z} & \frac{\partial V_\theta}{\partial z} & \frac{\partial V_z}{\partial z} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial V_z}{\partial r} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI.28})$$

### VI.4.1.2 Rapidez de deformación

De las Ecs. (VI.27) y (VI.28) se puede calcular el tensor rapidez de deformación. Nótese que este está asociado a los cambios de forma de un elemento de control.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D} &= \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{V} + \nabla\mathbf{V}^T) = \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial V_z}{\partial r} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial V_z}{\partial r} & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial V_z}{\partial r} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial V_z}{\partial r} & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{VI.29}$$

### VI.4.1.3 Tensor de esfuerzos

Para un flujo cortante simple, el tensor de esfuerzos toma la forma:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{rr} & 0 & \sigma_{rz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{rz} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \tag{VI.30}$$

En los tensores gradiente de velocidad y transpuesta del tensor gradiente de velocidad se ha definido el escalar rapidez de deformación  $\dot{\gamma}$  de la siguiente forma:

$$\dot{\gamma}_{rz} = \frac{\partial V_z}{\partial r} \tag{VI.31}$$

La ecuación que describe la viscoelasticidad del modelo BMP es la siguiente:

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{\eta}{G_0} \left( \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma} - \nabla \mathbf{V}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{V} \right) = 2\eta \mathbf{D} = \eta (\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T) \tag{VI.32}$$

Dado que el flujo es no homogéneo (la rapidez de deformación y el tensor de esfuerzos dependen de una coordenada espacial) y se encuentra en estado estacionario, se tiene la siguiente expresión para la ecuación convectiva superior de Maxwell.

$$\boldsymbol{\sigma} - \frac{\eta}{G_0} (\nabla \mathbf{V}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{V}) = \eta (\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T) \tag{VI.33}$$

Sustituyendo las matrices con la información anterior en la ecuación tensorial, se tiene lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{xz})}{G_0} \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{xz} & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dot{\gamma}_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right) = \eta(\dot{\gamma}_{xz}) \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{xz} & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dot{\gamma}_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right) \quad (\text{VI.34})$$

Simplificando las matrices de la Ec. (VI.34), se obtiene lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{xz})}{G_0} \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{xz} \sigma_{xx} & 0 & \dot{\gamma}_{xz} \sigma_{xz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xx} \dot{\gamma}_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zx} \dot{\gamma}_{xz} \end{pmatrix} \right) = \eta(\dot{\gamma}_{xz}) \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{xz} & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dot{\gamma}_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right) \quad (\text{VI.35})$$

Simplificando la Ec. (VI.35), se tiene lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{xz})}{G_0} \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xx} \dot{\gamma}_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{xz} \sigma_{xx} & 0 & \dot{\gamma}_{xz} \sigma_{xz} + \sigma_{zx} \dot{\gamma}_{xz} \end{pmatrix} \right) = \eta(\dot{\gamma}_{xz}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dot{\gamma}_{xz} \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{xz} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI.36})$$

Así que,

$$\begin{pmatrix} \sigma_{rr} & 0 & \sigma_{rz} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{rz})}{G_0}(\sigma_{rr}\dot{\gamma}_{rz}) \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{rz} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{rz})}{G_0}\dot{\gamma}_{rz}\sigma_{rr} & 0 & \sigma_{zz} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{rz})}{G_0}(\dot{\gamma}_{rz}\sigma_{rz} + \sigma_{zz}\dot{\gamma}_{rz}) \end{pmatrix} = \eta(\dot{\gamma}_{rz}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dot{\gamma}_{rz} \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{rz} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI.37})$$

Desacoplando las ecuaciones, obtenemos las siguientes ecuaciones algebraicas

$$\sigma_{rz} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{rz})}{G_0}(\sigma_{rr}\dot{\gamma}_{rz}) = \eta\dot{\gamma}_{rz} \quad (\text{VI.38})$$

$$\sigma_{rz} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{rz})}{G_0}\dot{\gamma}_{rz}\sigma_{rr} = \eta\dot{\gamma}_{rz} \quad (\text{VI.39})$$

$$\sigma_{zz} - \frac{\eta(\dot{\gamma}_{rz})}{G_0}(\dot{\gamma}_{rz}\sigma_{rz} + \sigma_{zz}\dot{\gamma}_{rz}) = 0 \quad (\text{VI.40})$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = 0 \quad (\text{VI.41})$$

## VI.4.2 Funciones materiales

Es claro que las Ecs. (VI.40) y (VI.41) tienen la misma estructura algebraica debido a la simetría del tensor de esfuerzos  $\sigma_{rz} = \sigma_{rz}$ , por lo que solamente debe de tomarse solo una de estas ecuaciones:

$$\sigma_{rz} = \eta(\dot{\gamma}_{rz})\dot{\gamma}_{rz} \quad (\text{VI.42})$$

A partir de la Ec. (VI.40) obtenemos la componente zz del tensor de esfuerzos:

$$\sigma_{zz} = 2 \frac{\eta \left( \dot{\gamma}_{zz} \right)}{G_0} \dot{\gamma}_{zz} \sigma_{zz} = 2 \frac{\sigma_{zz}^2}{G_0} \quad (\text{VI.43})$$

La ecuación cinética, se reduce a la siguiente forma algebraica:

$$\varphi_0 - \varphi + K\lambda(\varphi_\infty - \varphi)\sigma \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (\text{VI.44})$$

El doble producto tensorial para la ecuación cinética del modelo de BMP toma la forma:

$$\sigma \cdot \mathbf{D} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{zz} & 0 & \sigma_{zx} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dot{\gamma}_{zz} \\ 0 & 0 & 0 \\ \dot{\gamma}_{zz} & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left( \sigma_{zz} \dot{\gamma}_{zz} + \sigma_{zx} \dot{\gamma}_{zx} \right) = \sigma_{zz} \dot{\gamma}_{zz} \quad (\text{VI.45})$$

Al combinar las Ecs. (VI.44) y (VI.45), se tiene lo siguiente:

$$\varphi_0 - \varphi + K\lambda(\varphi_\infty - \varphi)\sigma_{zz} \dot{\gamma}_{zz} = 0 \quad (\text{VI.46})$$

Desarrollando algebraicamente la Ec. (VI.46), se tiene lo siguiente:

$$K\lambda\sigma_{zz}^2\varphi^2 + (1 - K\lambda\varphi_\infty\sigma_{zz}^2)\varphi - \varphi_0 = 0 \quad (\text{VI.47})$$

La Ec. (VI.47) puede ser resuelta utilizando la ecuación algebraica de segundo orden, por lo que se tiene lo siguiente:

$$\varphi(\sigma_{zz}) = \frac{K\lambda\varphi_\infty\sigma_{zz}^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\varphi_\infty\sigma_{zz}^2 - 1)^2 + 4K\lambda\sigma_{zz}^2\varphi_0}}{2K\lambda\sigma_{zz}^2} \quad (\text{VI.48})$$

La Ec. (VI.48) es la fluidez de un flujo homogéneo en estado estacionario del modelo BMP. Esta ecuación tiene dos límites asintóticos a bajos y altos cortes. Es decir, se satisfacen los siguientes límites:

$$\lim_{\sigma_{zz} \rightarrow 0} \varphi(\sigma_{zz}) = \varphi_0 \quad (\text{VI.49})$$

$$\lim_{\sigma_{zx} \rightarrow \infty} \varphi(\sigma_{zx}) = \varphi_{\infty} \quad (\text{VI.50})$$

La rapidez de deformación en términos del esfuerzo cortante, se puede expresar como:

$$\frac{dV_z}{dr} = \varphi(\sigma_{zx}) \sigma_{zx} = \frac{K\lambda\varphi_{\infty}\sigma_{zx}^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\varphi_{\infty}\sigma_{zx}^2 - 1)^2 + 4K\lambda\sigma_{zx}^2\varphi_0}}{2K\lambda\sigma_{zx}} \quad (\text{VI.51})$$

La rapidez de deformación tiene dos límites asintóticos a baja y alta rapidez de deformación respectivamente:

$$\lim_{\sigma_{zx} \rightarrow 0} \frac{dV_z}{dr} = \varphi_0 \sigma_{zx} \quad (\text{VI.52})$$

$$\lim_{\sigma_{zx} \rightarrow \infty} \frac{dV_z}{dr} = \varphi_{\infty} \sigma_{zx} \quad (\text{VI.53})$$

### VI.4.3 Perfil de velocidades

El flujo rectilíneo isotérmico e incompresible se consigue bajo un gradiente de presión constante (flujo de Poiseuille) en un tubo/capilar de radio adimensional  $r^* = 1$ , y longitud axial adimensional  $L^* = L/a \gg 1$  (véase **Figura VI2**). Se asume una simetría angular, es decir, todas las variables dinámicas son independientes de la coordenada angular adimensional  $\theta^*$ . En este sistema, todas las magnitudes físicas se definen en coordenadas cilíndricas  $(r^*, \theta^*, z^*)$  con respecto a un origen en el centro del cilindro. El gradiente de presión se da en la dirección axial, es decir,  $dp_0^*/dz^* = (\nabla^* p_0 \cdot \mathbf{e}_z)$ .

Se procede a calcular el perfil de velocidades axial en el sistema de flujo:

$$V_z(r) = \int \frac{dV_z}{dr} dr + C \quad (\text{VI.54})$$

Substituyendo la rapidez de deformación:

$$V_z(r) = \int \left( \frac{K\lambda\varphi_{\infty}\sigma_{zx}^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\varphi_{\infty}\sigma_{zx}^2 - 1)^2 + 4K\lambda\sigma_{zx}^2\varphi_0}}{2K\lambda\sigma_{zx}} \right) dr + C \quad (\text{VI.55})$$

Al substituir el esfuerzo cortante  $\sigma_{rz}$  de la ecuación de movimiento tomando en cuenta estado estacionario y mecanismos inerciales despreciables, se tiene lo siguiente:

$$\sigma_{rz} = \frac{1}{2} \nabla_z p r \quad (\text{VI.56})$$

En la Ec. (VI.56) se utilizó la condición de que el esfuerzo debe de permanecer acotado en el centro del tubo. Combinando las Ecs. (VI.55) y (VI.56) se tiene la siguiente expresión simplificada:

$$V_z(r) = \int \left( \frac{K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1)^2 + 4K\lambda\phi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2}}{2K\lambda(\nabla_z p/2)r} \right) dr + C \quad (\text{VI.57})$$

El perfil de velocidades de la Ec. (VI.57) puede ser reescrito de la siguiente forma:

$$V_z(r) = \phi_\infty (\nabla_z p/2) \cdot \int \left( \frac{K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1)^2 + \left(\frac{\phi_0}{\phi_\infty}\right) 4K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2}}{2K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r} \right) dr + C \quad (\text{VI.58})$$

La Ec. (VI.58) puede escribirse en la siguiente forma compacta:

$$V_z(r) = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4X^2} \int \left( \frac{u-1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_r u}}{u} \right) du + C \quad (\text{VI.59})$$

En donde se han definido las siguientes variables:

$$X^2 = K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 \quad (\text{VI.60})$$

$$\phi_r = \phi_0 / \phi_\infty \quad (\text{VI.61})$$

$$u = X^2 r^2 \quad (\text{VI.62})$$

La Integral de la Ec. (VI.59) puede ser resuelta mediante los bien conocidos métodos de integración del cálculo de una variable. Nótese que la Ec. (VI.62) se reduce al modelo newtoniano, cuando la fluidez reducida es igual a la unidad, i.e.  $\phi_r = 1$ , por lo que se tiene lo siguiente:

$$V_z(r) = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4X^2} \int \left( \frac{u-1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4u}}{u} \right) du + C \quad (\text{VI.63})$$

Simplificando, se tiene lo siguiente:

$$V_z(r) = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4X^2} \int \left( \frac{u-1 + \sqrt{(u+1)^2}}{u} \right) du + C \quad (\text{VI.64})$$

Por lo que:

$$V_z(r) = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4X^2} \int \left( \frac{u-1 + u+1}{u} \right) du + C \quad (\text{VI.65})$$

Reduciendo

$$V_z(r) = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{2X^2} X^2 r^2 + C = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{2} r^2 + C \quad (\text{VI.66})$$

Aplicando la condición de frontera de no deslizamiento, i.e.  $V_z(r = a) = 0$ , se tiene:

$$C = -\frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{2} a^2 \quad (\text{VI.67})$$

Por lo que:

$$V_z(r) = \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{2} r^2 - \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{2} a^2 \quad (\text{VI.68})$$

Implicando

$$V_z(r) = \frac{a^2 \phi_\infty (-\nabla_z p)}{4} \left( 1 - \left( \frac{r}{a} \right)^2 \right) \quad (\text{VI.69})$$

Como  $\phi_r = 1$ ,  $\phi_\infty = \phi_0$ , por lo que finalmente se tiene:

$$V_z(r) = \frac{a^2 \phi_0 (-\nabla_z p)}{4} \left( 1 - \left( \frac{r}{a} \right)^2 \right) \quad (\text{VI.70})$$

Por otro lado, al considerar un fluido no newtoniano inelástico, la integral de la Ec. (VI.59) se resuelve utilizando varios cambios de variables, dando lo siguiente:

$$\begin{aligned} V_z(r) = & \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4 X^2} \left\{ u + \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_r u} \right. \\ & + (2\phi_r - 1) \text{Ln} \left| 1 - (2\phi_r + u) - \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_r u} \right| \\ & \left. - \text{Ln} \left| 1 + (2\phi_r - 1)u + \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_r u} \right| \right\} \\ & + C \end{aligned} \quad (\text{VI.71})$$

Suponiendo que no existe deslizamiento en la pared, se cumple la siguiente condición de frontera  $r = a$ ;  $V_z(r = a) = 0$ , por lo que la constante C de la Ec. (VI.71) toma la forma:

$$\begin{aligned} C = & \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4 X^2} \left\{ - \left( u_w + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w} \right) \right. \\ & - (2\phi_r - 1) \text{Ln} \left| 1 - (2\phi_r + u_w) - \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w} \right| \\ & \left. + \text{Ln} \left| 1 + (2\phi_r - 1)u_w + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w} \right| \right\} \end{aligned} \quad (\text{VI.72})$$

En la Ec. (VI.72)  $u_w$  se ha definido de la siguiente manera:

$$u_w = X^2 a^2 \quad (\text{VI.73})$$

Sustituyendo las Ecs. (VI.72) y (VI.73), se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} V_z(r) = & \frac{\phi_\infty (\nabla_z p/2)}{4 X^2} \\ & \left\{ u - u_w + \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_r u} - \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w} \right. \\ & \left. + (2\phi_r - 1) \text{Ln} \left| \frac{1 - (2\phi_r + u) - \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_r u}}{1 - (2\phi_r + u_w) - \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w}} \right| \right\} \end{aligned} \quad (\text{VI.74})$$

$$+ \text{Ln} \left| \frac{1 + (2\phi_r - 1)u_w + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w}}{1 + (2\phi_r - 1)u + \sqrt{(u - 1)^2 + 4\phi_r u}} \right| \quad (\text{VI.74})$$

La Ec. (VI.74) es el perfil de velocidades particular del modelo BMP el cual es consistente con el perfil newtoniano cuando la fluidez reducida es igual a la unidad, i.e.  $\phi_r = 1$ , por lo que la condición sería:

$$\boxed{\text{Lim}_{\phi_r \rightarrow 1} V_z(r) \rightarrow V_{z_N}(r) = \frac{a^2 \phi_0 (-\nabla_z p)}{4} \left( 1 - \left( \frac{r}{a} \right)^2 \right)} \quad (\text{VI.75})$$

La Ec. (VI.75) es la solución analítica para el perfil de velocidades del modelo BMP. Nótese que depende del gradiente de presión, y de las propiedades materiales del modelo BMP. La velocidad máxima toma la forma:

$$\begin{aligned} V_{\max} = V_z(r=0) &= \frac{\phi_\infty (\nabla_z p / 2)}{4X^2} \\ &\quad \left\{ -u_w - \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w} \right. \\ &+ (2\phi_r - 1) \text{Ln} \left| \frac{2B}{2B + u_w + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w} - 1} \right| \\ &\quad \left. + \text{Ln} \left| \frac{1 + (2B - 1)u_w + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\phi_r u_w}}{2} \right| \right\} \end{aligned} \quad (\text{VI.76})$$

#### VI.4.4 Flujo volumétrico

La Ec. (VI.76) es extremadamente compleja, por lo que el flujo volumétrico requiere de muchos procedimientos algebraicos, se procede inicialmente con la expresión general del flujo volumétrico para una tubería cilíndrica [51]:

$$Q = \int_0^{2\pi} \int_0^a V_z(r) r dr d\theta \quad (\text{VI.77})$$

Al integrar una vez por partes, y suponiendo que no hay deslizamiento en la pared, se tiene lo siguiente:

$$Q = \int_0^{2\pi} \int_0^a V_z(r) r dr d\theta = 2\pi \int_0^a V_z(r) r dr = \pi V_z(r=a) a^2 - \pi \int_0^a \frac{\partial V_z(r)}{\partial r} r^2 dr \quad (\text{VI.78})$$

Como la velocidad en la pared es cero, se tiene lo siguiente:

$$Q = -\pi \int_0^a \frac{\partial V_z(r)}{\partial r} r^2 dr \quad (\text{VI.79})$$

La Ec. (VI.79) nos permite calcular el flujo volumétrico en función de la rapidez de deformación

$$Q = -\pi \int_0^a \left( \frac{K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1 + \sqrt{(K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1)^2 + 4K\lambda\phi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2}}{2K\lambda (\nabla_z p/2) r} \right) r^2 dr \quad (\text{VI.80})$$

Simplificando la expresión, se tiene lo siguiente:

$$Q = -\frac{\pi}{4} \phi_\infty \frac{(\nabla_z p/2)}{(K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2)} \int_0^{u_w} (u - 1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\phi_0 u}) du \quad (\text{VI.81})$$

En donde el cambio de variable utilizado fue:

$$u = K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 \quad (\text{VI.82})$$

Y la variable evaluada en la pared toma la forma:

$$u_w = K\lambda\phi_\infty (\nabla_z p/2)^2 a^2 \quad (\text{VI.83})$$

Y la fluidez reducida

$$\phi_r = \phi_0 / \phi_\infty \quad (\text{VI.84})$$

A partir de la Ec. (VI.84), se tiene lo siguiente:

$$Q = -\frac{\pi}{4} \varphi_{\infty} \frac{(\nabla_z p/2)}{\left(K\lambda\varphi_{\infty} (\nabla_z p/2)^2\right)^2} \int_0^{u_w} \left(u - 1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u}\right) du \quad (\text{VI.85})$$

La Ec. (VI.85) puede ser descrita en términos de la fluidez aparente del sistema:

$$Q_{\text{BMP}} = \varphi_{\text{app}} Q_{\text{N}} \quad (\text{VI.86})$$

En donde el flujo newtoniano es

$$Q_{\text{N}} = \varphi_0 \frac{\pi}{4} a^4 (-\nabla_z p/2) \quad (\text{VI.87})$$

### VI.4.5 Fluidez aparente

La fluidez aparente del modelo BMP, se puede expresar en términos de la siguiente integral, por lo que:

$$\frac{\varphi_{\text{app}}}{\varphi_0} = \frac{1/\varphi_r}{a^4 \left(K\lambda\varphi_{\infty} (\nabla_z p/2)^2\right)^2} \int_0^{u_w} \left(u - 1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u}\right) du \quad (\text{VI.88})$$

Los límites asintóticos de la fluidez, toman la forma:

$$\text{Lim}_{\sigma_w \rightarrow 0} \frac{\varphi_{\text{app}}}{\varphi_0} = \frac{1/\varphi_r}{a^4 \left(K\lambda\varphi_{\infty} (\nabla_z p/2)^2\right)^2} \int_0^{u_w} \left(u - 1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u}\right) du = 1 \quad (\text{VI.89})$$

$$\text{Lim}_{\sigma_w \rightarrow \infty} \frac{\varphi_{\text{app}}}{\varphi_0} = \frac{1/\varphi_r}{a^4 \left(K\lambda\varphi_{\infty} (\nabla_z p/2)^2\right)^2} \int_0^{u_w} \left(u - 1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u}\right) du = \varphi_{\infty} \quad (\text{VI.90})$$

Integrando la fluidez aparente, se tiene lo siguiente:

$$\frac{\varphi_{app}}{\varphi_0} = \frac{1/\varphi_r}{a^4 \left( K\lambda\varphi_\infty (\nabla_z p/2)^2 \right)^2} I(K\lambda, \varphi_0, \varphi_\infty, \nabla_z p) \quad (VI.91)$$

En donde la integral, tiene la siguiente forma analítica:

$$I = \int_0^{u_w} \left( u - 1 + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u} \right) du \quad (VI.92)$$

Resolviendo la integral, se tiene los siguientes:

$$I = \frac{u_w^2}{2} - u_w + \left( \frac{1}{2}(u_w - 1) + \varphi_r \right) \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w} + \left( \varphi_r - \frac{1}{2} \right) 2(1 - \varphi_r) \varphi_r \text{Ln} \left[ \frac{-1 + u_w + 2\varphi_r + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w}}{-1 + 2\varphi_r} \right] \quad (VI.93)$$

Entonces, el flujo volumétrico toma la forma, para el modelo BMP:

$$Q_{BMP} = \left( \frac{\varphi_{app}}{\varphi_0} \right) Q_N = \frac{1/\varphi_r}{a^4 \left( K\lambda\varphi_\infty (\nabla_z p/2)^2 \right)^2} I(K\lambda, \varphi_0, \varphi_\infty, \nabla_z p) Q_N \quad (VI.94)$$

Por lo tanto, el flujo volumétrico del modelo BMP se puede comprender como el producto del flujo de un fluido newtoniano con la función fluidez aparente del modelo BMP normalizada con la fluidez a bajo corte. Por otra parte, si el tiempo de reestructuración tiende a cero, significa que el fluido es newtoniano, debido que la fluidez se reduce al modelo newtoniano. Esto es claro de la Ec. (3.21) la cual algebraicamente es cuadrática en la fluidez:

$$\varphi_0 - \varphi + K\lambda(\varphi_\infty - \varphi)\sigma_{xz}^2\varphi = 0 \quad (VI.95)$$

Si la lambda es cero, el producto  $K\lambda$  es cero por lo que la fluidez se simplifica de la siguiente manera:

$$\varphi \rightarrow \varphi_0 \quad (\text{VI.96})$$

Entonces el flujo de un fluido de BMP se reduce al modelo newtoniano, i.e.

$$\boxed{\text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} Q_{\text{BMP}} = \text{Lim}_{K\lambda \rightarrow 0} Q_{\text{BMP}} \rightarrow Q_{\text{N}} = \varphi_0 \frac{\pi a^4}{8} (-\nabla_z p)} \quad (\text{VI.97})$$

Otra alternativa es a partir de la definición de flujo volumétrico

$$\text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} Q = \text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} \pi \int_0^a \left( \frac{\text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} Q}{2K\lambda (\nabla_z p/2) r} \left( K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1 + \sqrt{\left( K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2 - 1 \right)^2 + 4K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2} \right) \right) r^2 dr \quad (\text{VI.98})$$

Por lo tanto,

$$\text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} Q = \text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} \pi \int_0^a \left( \frac{-1 + \sqrt{1 + 4K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2}}{2K\lambda (\nabla_z p/2) r} \right) r^2 dr \quad (\text{VI.99})$$

Desarrollando el numerador de la integral en serie de Taylor, se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + 4K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2} &\cong 1 + \frac{1}{2} \left( 4K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2 \right) \\ &= 1 + 2K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2 + O\left( 4K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{VI.100})$$

Sustituyendo en la integral

$$\text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} Q = \text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} \pi \int_0^a \left( \frac{-1 + 1 + 2K\lambda \varphi_0 (\nabla_z p/2)^2 r^2}{2K\lambda (\nabla_z p/2) r} \right) r^2 dr \quad (\text{VI.101})$$

Simplificando:

$$\boxed{\text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} Q = \text{Lim}_{\lambda \rightarrow 0} \pi \varphi_0 (\nabla_z p/2) \int_0^a r^3 dr = \pi \varphi_0 (\nabla_z p/2) \frac{r^4}{4} \Big|_0^a = \frac{\pi \varphi_0 a^4}{8} (-\nabla_z p)} \quad (\text{VI.102})$$

Por lo tanto, si el parámetro K tiende a cero, el flujo volumétrico es newtoniano.

### VI.4.6 Factor de fricción del modelo BMP

El factor de fricción se define como el cociente de mecanismos viscosos y cinéticos respectivamente. La ecuación básica, de este, se puede escribir de la siguiente manera:

$$f_{fricción} = \frac{\sigma_w}{\frac{1}{2}\rho\langle Vz \rangle^2}; \sigma_w = -\sigma_{zz}|_{r=a} = -\frac{1}{2}\nabla_z p_a \quad (\text{VI.103})$$

En la ecuación anterior  $\sigma_w$  es el esfuerzo en la pared,  $\langle Vz \rangle$  es la velocidad promedio del sistema y  $\rho$  es la densidad del fluido. A partir de la Ec. (VI.103), se tiene lo siguiente:

$$f_{fricción} = \frac{16}{\rho\langle Vz \rangle D} \frac{\sigma_w}{\frac{8\langle Vz \rangle}{D}} \quad (\text{VI.104})$$

En la Ec. (VI.104)  $D$  es el diámetro del sistema cilíndrico. Multiplicando el denominador por la fluidez a corte bajo, se tiene lo siguiente:

$$f_{fricción} = \frac{16}{\varphi_0 \rho \langle Vz \rangle D} \left( \varphi_0 \frac{\sigma_w}{\frac{8\langle Vz \rangle}{D}} \right) \quad (\text{VI.105})$$

Definiendo el factor de fricción para un fluido newtoniano, se tiene lo siguiente:

$$f_N = \frac{16}{\varphi_0 \rho \langle Vz \rangle D} \quad (\text{VI.106})$$

Combinando las dos últimas expresiones (Ecs. (VI.105) y (VI.106)) se tiene lo siguiente:

$$f_{fricción} = f_N \left( \varphi_0 \frac{\sigma_w}{\frac{8\langle Vz \rangle}{D}} \right) \quad (\text{VI.107})$$

Definiendo la rapidez de deformación aparente:

$$\dot{\gamma}_{app} = \frac{8\langle Vz \rangle}{D} \quad (VI.108)$$

Combinando las Ecs. (VI.107) y (VI.108), se tiene lo siguiente:

$$f_{fricción} = f_N \left( \Phi_0 \frac{\sigma_w}{\dot{\gamma}_{app}} \right) \quad (VI.109)$$

Definiendo la fluidez aparente como:

$$\frac{\sigma_w}{\dot{\gamma}_{app}} = \eta_{app} = \Phi_{app}^{-1} \quad (VI.110)$$

Combinando, las Ecs. (VI.109) y (VI.110) se tiene lo siguiente:

$$f_{fricción} = f_N \Phi_0 \eta_{app} = f_N \Phi_0 \Phi_{app}^{-1} \quad (VI.111)$$

La Ec. (VI.111) puede ser expresada de la siguiente forma:

$$\boxed{\frac{f_{fricción}}{f_N} = \frac{\eta_{app}}{\eta_0} = \frac{\Phi_0}{\Phi_{app}}} \quad (VI.112)$$

Finalmente, el factor de fricción no newtoniano normalizado es igual a la viscosidad aparente no newtoniana normalizada con la viscosidad a corte bajo. En este mismo contexto, se puede interpretar como un cociente entre la fluidez a corte bajo y la fluidez aparente no newtoniana. La Ec. (VI.112) puede ser expresada como:

$$f_r = \frac{f_{fricción}}{f_N} = \frac{a^4 \Phi_r \left( K \lambda \Phi_\infty (\nabla_z p / 2)^2 \right)^2}{I(K \lambda, \Phi_0, \Phi_\infty, \nabla_z p)} \quad (VI.113)$$

En la siguiente sección se presenta un resumen de los resultados más importantes del presente capítulo.

a) Perfil de velocidades:

$$\begin{aligned}
 v_z(r) &= \frac{\varphi_\infty (\nabla_z p/2)}{4X^2} \\
 &\left\{ u - u_w + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u} - \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w} + \right. \\
 &(2\varphi_r - 1) \operatorname{Ln} \left[ \frac{1 - (2B+u) - \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u}}{1 - (2B+u_w) - \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w}} \right] \\
 &\left. + \operatorname{Ln} \left[ \frac{1 + (2B-1)u_w + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w}}{1 + (2B-1)u + \sqrt{(u-1)^2 + 4\varphi_r u}} \right] \right\} \quad \text{(VI.114)}
 \end{aligned}$$

En donde  $u$ ,  $u_w$  y  $\varphi_r$  toman están definidas como:

$$\varphi_r = \varphi_0 / \varphi_\infty \quad \text{(VI.115)}$$

$$u = K\lambda\varphi_\infty (\nabla_z p/2)^2 r^2 \quad \text{(VI.116)}$$

$$u_w = K\lambda\varphi_\infty (\nabla_z p/2)^2 a^2 \quad \text{(VI.117)}$$

b) Flujo volumétrico

$$Q_{BMP} = \left( \frac{\varphi_{app}}{\varphi_0} \right) Q_N = \frac{1/\varphi_r}{a^4 (K\lambda\varphi_\infty (\nabla_z p/2)^2)^2} I(K\lambda, \varphi_0, \varphi_\infty, \nabla_z p) Q_N \quad \text{(VI.118)}$$

En donde la integral I es:

$$\begin{aligned}
 I(K\lambda, \varphi_0, \varphi_\infty, \nabla_z p) &= \frac{u_w^2}{2} - u_w + \left( \frac{1}{2}(u_w - 1) + \varphi_r \right) \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w} \\
 &+ \left( \varphi_r - \frac{1}{2} \right) 2(1 - \varphi_r) \varphi_r \operatorname{Ln} \left[ \frac{-1 + u_w + 2\varphi_r + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u_w}}{-1 + 2\varphi_r} \right] \quad \text{(VI.119)}
 \end{aligned}$$

c) Fluidez aparente

Es el inverso de la viscosidad y es la que se mide en el sistema. Es claro que esta, no es la real que solo puede ser calculada en un reómetro.

$$\frac{\varphi_{app}}{\varphi_0} = \frac{1/\varphi_r}{a^4 \left( K\lambda\varphi_{\infty} (\nabla_z p/2)^2 \right)^2} \left\{ \begin{aligned} & \left[ \frac{u_w^2}{2} - u_w + \left( \frac{1}{2}(u_w - 1) + \varphi_r \right) \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u} \right. \\ & \left. + \left( \varphi_r - \frac{1}{2} \right) 2(1 - \varphi_r) \varphi_r \text{Ln} \left[ \frac{-1 + u_w + 2\varphi_r + \sqrt{(u_w - 1)^2 + 4\varphi_r u}}{-1 + 2\varphi_r} \right] \right] \end{aligned} \right\} \quad (VI.120)$$

d) Factor de fricción normalizado

$$\frac{f_{fricción}}{f_N} = \frac{\varphi_0}{\varphi_{app}} \quad (VI.121)$$

Estos resultados (a-d) dependen de las propiedades materiales del modelo BMP ( $\eta_0, \eta_{\infty}, K, \lambda, G_0$ ), es decir, de las propiedades reológicas. Las propiedades de flujo dependen de los mecanismos involucrados en el sistema.

## VI.5 Ecuaciones analíticas adimensionales del flujo en un cilindro

En esta sección se presenta un resumen de las ecuaciones principales adimensionales para la velocidad axial, flujo volumétrico y fluidez. Utilizando las variables adimensionales definidas al inicio de esta sección, se tiene la siguiente expresión analítica para la velocidad axial:

$$Vz^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*, r^*] = \frac{1}{4A_0\sigma_{w0}^*} \left\{ \begin{aligned} & A_0 B \sigma_{w0}^{*2} (1 - r^{*2}) + \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \\ & - \sqrt{(A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2} \\ & + \text{Log} \left[ G_2 [A_0, B, \sigma_{w0}^*, r^*] (G_3 [A_0, B, \sigma_{w0}^*, r^*]) \right] \end{aligned} \right\} \quad (VI.122)$$

Donde  $G_1$  y  $G_2$  tienen la siguiente forma analítica:

$$G_2 = \frac{1 + A_0(2-B)(\sigma_{w0}^* r^*)^2 + \sqrt{(A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2}}{1 + A_0(2-B)\sigma_{w0}^{*2} + \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}}} \quad (\text{VI.123})$$

$$G_3 = \left[ \frac{2 + A_0 B^2 (\sigma_{w0}^* r^*)^2 + B \left( \sqrt{(A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2} - 1 \right)}{2 + A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + B \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} - 1 \right)} \right]^{(B-2)/B} \quad (\text{VI.124})$$

Esto significa que la velocidad axial es una función de los números adimensionales  $A_0$ ,  $B$ , del esfuerzo en la pared asociado al gradiente de presión y de la coordenada radial adimensional  $r^*$ .

### VI.5.1 Flujo volumétrico adimensional

Mediante la sustitución de la velocidad en la integral volumétrica del caudal, se obtiene la siguiente expresión analítica para el flujo volumétrico y la fluidez (inversa de la viscosidad):

$$Q_{BMP}^* = Q_{N0}^* \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] \quad (\text{VI.125})$$

En donde la fluidez asociada al BMP toma a forma:

$$\begin{aligned} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] &= \frac{1}{2} B - \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \\ &+ \frac{1}{2A_0^2 B^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( (A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + 2B) \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \right) - (2B) \right) \\ &+ \frac{2}{A_0^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( \frac{B-1}{B^3} \right) \text{Log} \left| \frac{2 + A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + B \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} - 1 \right)}{2} \right| \end{aligned} \quad (\text{VI.126})$$

Y el flujo volumétrico newtoniano esta dado por:

$$Q_{N0}^* = \sigma_{w0}^* / 4 \quad (\text{VI.127})$$

El flujo volumétrico del modelo BMP, es el producto de la fluidez no newtoniana con el flujo volumétrico newtoniano. Es claro que esta expresión implica que la desviación del comportamiento newtoniano está asociada a la fluidez (inverso de la viscosidad) la cual, depende de los números adimensionales  $A_0$ ,  $B$  y del esfuerzo en la pared. Los límites más importantes de la fluidez, están dados por las siguientes expresiones analíticas

a) Número adimensional  $B = 1$

$$\text{Lim}_{B \rightarrow 1} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = 1 \quad (\text{VI.128})$$

b) Esfuerzo en la pared bajo y alto

$$\text{Lim}_{\sigma_{w0}^* \rightarrow 0} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = 1 \quad (\text{VI.129})$$

$$\text{Lim}_{\sigma_{w0}^* \rightarrow \infty} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = B \quad (\text{VI.130})$$

c) Mecanismos cinéticos-estructurales

$$\text{Lim}_{A_0 \rightarrow 0} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] \cong 1 \quad (\text{VI.131})$$

$$\text{Lim}_{A_0 \rightarrow \infty} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = B \quad (\text{VI.132})$$

## VI.5.2 Esfuerzo a la Cedencia adimensional

Para analizar los fenómenos de esfuerzo cortante, es necesario escalar la tensión con la viscosidad  $\eta_{\infty}$ . Asociado al número adimensional  $B$ .

### VI.5.2.1 Perfil de velocidades adimensional

Al ajustar la deformación en términos del número de Bingham con respecto a la coordenada radial adimensional  $r^*$ , la velocidad axial para la zona de esfuerzo cortante del modelo BMP viene dada por

$$Vz^* [r^*, B, Bi] = \frac{\sigma_y^*}{4B_1^{-1}} \left\{ \begin{aligned} & B_1^{-2} (1-r^{*2}) + \sqrt{(B_1^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_1^{-2}} - \sqrt{(B_1^{-2}r^{*2}-1)^2 + 4B^{-1}B_1^{-2}r^{*2}} \\ & + \text{Log} [G_1(r^*, Bi, B) \cdot G_2(r^*, Bi, B)] \end{aligned} \right\} \quad \text{(VI.133)}$$

Donde las funciones:  $\{G_1(B_1, B, r^*), G_2(B_1, B, r^*)\}$  son dados por:

$$G_1 = \left( \frac{1-2B^{-1}-B_1^{-2} + \sqrt{(B_1^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_1^{-2}}}{1-2B^{-1}-B_1^{-2}r^{*2} + \sqrt{(B_1^{-2}r^{*2}-1)^2 + 4B^{-1}B_1^{-2}r^{*2}}} \right)^{(2B-1)} \quad \text{(VI.134)}$$

Finalmente, se tiene lo siguiente:

$$G_2 = \frac{1+(2B^{-1}-1)B_1^{-2}r^{*2} + \sqrt{(B_1^{-2}r^{*2}-1)^2 + 4B^{-1}B_1^{-2}r^{*2}}}{1+(2B^{-1}-1)B_1^{-2} + \sqrt{(B_1^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_1^{-2}}} \quad \text{(VI.135)}$$

### VI.5.3 Flujo volumétrico adimensional

En esta subsección el flujo volumétrico cerca del esfuerzo de cedencia es descrito. Es claro que, para el flujo volumétrico, las ecuaciones fueron escaladas con la velocidad a alto corte. El sistema de flujo se puede describir en tres zonas. A número de Bingham cercano a cero, el sistema se comporta como un fluido, mientras que, al aumentar el número Bi, el fluido se estructura, es decir aumenta el número de puntos estructurales y por lo tanto su fluidez decrece y su viscosidad aumenta. Cerca de un número de Bi =1 el fluido se comporta como un sólido de Hook. Mientras que para Bi >> 1, el sistema no fluye y se está en la zona de esfuerzo de cedencia (sólido con memoria perfecta). La ecuación del flujo volumétrico del modelo BMP se expresa como el producto de la fluidez aparente y la fluidez del flujo newtoniano.

$$Q_{BMP}^* (B_1, B, \sigma_{w\infty}^*) = \phi_{(app)\infty}^* (B_1, B) Q_{N\infty}^* \quad \text{(VI.136)}$$

Y el flujo newtoniano escalado con la viscosidad a corte alto es.

$$Q_{N\infty}^* = \sigma_{w\infty}^* / 4 \quad \text{(VI.137)}$$

La fluidez queda expresada de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \Phi_{(app)\infty}^* [B^{-1}, B_i] &= \frac{1}{2} B_i^2 + \left( \frac{1}{2} - 2B^{-1} \sqrt{B^{-1}} \right) B_i^4 + \\ &\left( \frac{1}{2} (1 - B_i^2) + B^{-1} B_i^2 \right) \sqrt{(1 - B_i^2)^2 + 4B^{-1} B_i^2} \\ &+ 2(B^{-1} - 1) B^{-1} \text{Log} \left| \frac{2(B^{-1} + \sqrt{B^{-1}}) B_i^2}{1 + (2B^{-1} - 1) B_i^2 + \sqrt{(1 - B_i^2)^2 + 4B^{-1} B_i^2}} \right| B_i^4 \end{aligned} \quad \text{(VI.138)}$$

Es importante resaltar que la fluidez calculada depende solamente de dos números adimensionales, los cuales pueden ser descritos por medio de  $B_i$  y el inverso de  $B$ , i.e.  $B^{-1}$ . La fluidez adimensional tiene el siguiente límite asintótico de Bingham:

$$\begin{aligned} \lim_{B_i \rightarrow 0} \Phi_{(app)\infty}^* [B^{-1}, B_i] &= 1 \\ \lim_{B_i \rightarrow 1} \Phi_{(app)\infty}^* [B^{-1}, B_i] &= 0 \end{aligned} \quad \text{(VI.139)}$$

Junto con los siguientes límites:

$$\Phi_{\infty}^* [B^{-1}, B_i] = \begin{cases} \lim_{B^{-1} \rightarrow 0} \Phi_{\infty}^* [B^{-1}, B_i] = 1 - B_i^4 \rightarrow 0, & B_i \rightarrow 1 \\ \lim_{B^{-1} \rightarrow 1} \Phi_{\infty}^* [B^{-1}, B_i] = 1 \end{cases} \quad \text{(VI.140)}$$

Cuando el Bingham va a cero, la fluidez es igual a uno y el fluido presenta los mismos puntos estructurales para cualquier velocidad de deformación (fluido newtoniano). En el caso cuando el Bingham tiende a la unidad, la fluidez es cero correspondiente a un sólido elástico. Por otro lado, cuando el inverso de  $B$  va al infinito, la fluidez muestra una función polinomial en función del Bingham, y finalmente cuando  $B$  tiende a la unidad, la fluidez es consistente con el fluido newtoniano.

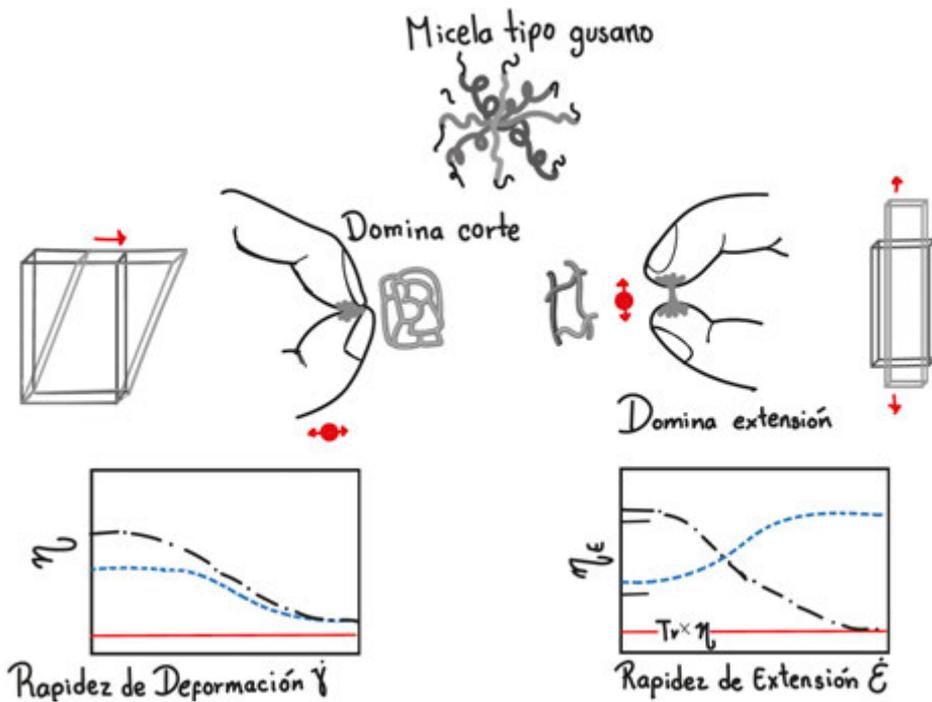


# CAPÍTULO VII

## Flujo extensional



Definición: La prueba de flujo extensional es una prueba en reología en la cual el material es sometido a esfuerzos normales, de tal manera que no existen esfuerzos cortantes en el elemento de control.



Adaptado de Calabrese et al. [92].

## VII.1 Modelado matemático

Para un flujo extensional, el tensor de esfuerzos y los tensores gradiente de velocidad y gradiente de velocidad transpuesto toman la forma [4]:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{VII.1})$$

En los tensores gradiente de velocidad y transpuesta del tensor gradiente de velocidad se ha definido la escalar rapidez de extensión de la siguiente forma:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\partial V_x}{\partial x} \quad (\text{VII.2})$$

El modelo de Maxwell convectivo superior en forma tensorial toma la siguiente forma:

$$\boldsymbol{\sigma} + \frac{\eta}{G_0} \left( \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma} - \nabla \mathbf{V}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{V} \right) = 2\eta \mathbf{D} = \eta (\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T) \quad (\text{VII.3})$$

Suponiendo flujo homogéneo y régimen permanente, se tiene la siguiente expresión para la Ec. (VII.3).

$$\boldsymbol{\sigma} - \frac{\eta}{G_0} (\nabla \mathbf{V}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{V}) = \eta (\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T) \quad (\text{VII.4})$$

Sustituyendo las matrices en la ecuación tensorial, se tiene lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} - \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0} \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} \end{pmatrix} = \\
 \frac{1}{2}\eta(\dot{\epsilon}) \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} \end{pmatrix} \quad (\text{VII.5})$$

Simplificando las matrices de la Ec. (VII.4), se obtiene lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} - \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0} \begin{pmatrix} 2\dot{\epsilon}\sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon}\sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\epsilon}\sigma_{zz} \end{pmatrix} = \eta(\dot{\epsilon}) \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} \end{pmatrix} \quad (\text{VII.6})$$

Así que,

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} - 2\frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0}\dot{\epsilon}\sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} + \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0}\dot{\epsilon}\sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} + \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0}\dot{\epsilon}\sigma_{zz} \end{pmatrix} = \eta(\dot{\epsilon}) \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} \end{pmatrix} \quad (\text{VII.7})$$

Desacoplando las ecuaciones, obtenemos las siguientes ecuaciones algebraicas

$$\sigma_{xx} - 2 \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0} \dot{\epsilon} \sigma_{xx} = \eta(\dot{\epsilon}) \dot{\epsilon} \quad (\text{VII.8})$$

$$\sigma_{yy} + \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0} \dot{\epsilon} \sigma_{yy} = -\frac{1}{2} \eta(\dot{\epsilon}) \dot{\epsilon} \quad (\text{VII.9})$$

$$\sigma_{zz} + \frac{\eta(\dot{\epsilon})}{G_0} \dot{\epsilon} \sigma_{zz} = -\frac{1}{2} \eta(\dot{\epsilon}) \dot{\epsilon} \quad (\text{VII.10})$$

Las ecuaciones anteriores pueden ser expresadas en términos de las variables adimensionales:

$$\varphi(\dot{\epsilon}) \sigma_{xx} - 2 \frac{1}{G_0} \dot{\epsilon} \sigma_{xx} = \dot{\epsilon} \quad (\text{VII.11})$$

$$\varphi(\dot{\epsilon}) \sigma_{yy} + \frac{1}{G_0} \dot{\epsilon} \sigma_{yy} = -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} \quad (\text{VII.12})$$

$$\varphi(\dot{\epsilon}) \sigma_{zz} + \frac{1}{G_0} \dot{\epsilon} \sigma_{zz} = -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} \quad (\text{VII.13})$$

## VII.2 Funciones materiales en flujo extensional del modelo BMP

En estado estacionario, la ecuación cinética del modelo BMP, tiene la forma:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{\lambda} + K(\varphi_\infty - \varphi) \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} = 0 \quad (\text{VII.14})$$

Entonces, al simplificar la Ec. (VII.14) se llega al siguiente resultado analítico

$$\frac{\varphi}{\varphi_\infty} = \frac{\varphi_0 / \varphi_\infty + \beta \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}}{1 + \beta \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}} = \frac{\varphi_1 + \beta \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}}{1 + \beta \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}} \quad (\text{VII.15})$$

El doble producto tensorial del modelo BMP toma la forma:

$$\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{D} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} 2\dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\varepsilon} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (2\sigma_{xx} - \sigma_{yy} - \sigma_{zz}) \dot{\varepsilon} \quad (\text{VII.16})$$

La primera y segunda diferencia de esfuerzos normales, tienen la siguiente forma:

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{yy} \quad (\text{VII.17})$$

Y

$$N_2 = \sigma_{yy} - \sigma_{zz} \quad (\text{VII.18})$$

Aplicando estas definiciones al trabajo irreversible, se tiene lo siguiente:

$$\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{D} = \frac{1}{2} (2\sigma_{xx} - 2\sigma_{yy} + \sigma_{yy} - \sigma_{zz}) \dot{\varepsilon} = \left( N_1 + \frac{1}{2} N_2 \right) \dot{\varepsilon} \quad (\text{VII.19})$$

La función de estructura tiene la siguiente forma matemática:

$$\frac{\varphi}{\varphi_\infty} = \frac{\varphi_r + \beta \left( N_1 + \frac{1}{2} N_2 \right) \dot{\varepsilon}}{1 + \beta \left( N_1 + \frac{1}{2} N_2 \right) \dot{\varepsilon}} \quad (\text{VII.20})$$

Las componentes del tensor de esfuerzos se pueden expresar como:

$$\sigma_{xx} = \frac{\frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} - 2 \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} \quad (\text{VII.21})$$

$$\sigma_{yy} = - \frac{\frac{1}{2} \frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} \quad (\text{VII.22})$$

$$\sigma_{zz} = \frac{-\frac{1}{2} \frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} \quad (\text{VII.23})$$

Restando las Ecs. (VII.21) y (VII.22), se tiene lo siguiente:

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{yy} = \frac{\frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} - 2 \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} + \frac{\frac{1}{2} \frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} \quad (\text{VII.24})$$

$$N_2 = \sigma_{yy} - \sigma_{zz} = \frac{\frac{1}{2} \frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} - \frac{\frac{1}{2} \frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon}}{\frac{\varphi(\dot{\varepsilon})}{\varphi_\infty} + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} = 0 \quad (\text{VII.25})$$

La Ec. (VII.25) implica que la segunda diferencia de esfuerzos normales es cero, i.e., solamente este modelo admite una primera diferencia de esfuerzos normales diferente de cero. Entonces la ecuación para la primera diferencia de esfuerzos normales está dada por:

$$N_1 = \left[ \frac{1}{\frac{\varphi_r + \beta N_1 \dot{\varepsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\varepsilon}} - 2 \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} + \frac{1/2}{\frac{\varphi_r + \beta N_1 \dot{\varepsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\varepsilon}} + \frac{1}{G_0 \varphi_\infty} \dot{\varepsilon}} \right] \frac{1}{\varphi_\infty} \dot{\varepsilon} \quad (\text{VII.26})$$

La Ec. (VII.26) es una ecuación no lineal para la primera diferencia de esfuerzos normales.

## VII.2.1 Viscosidad extensional

La viscosidad extensional está definida como la razón entre la primera diferencia de esfuerzos normales y rapidez de extensión, por lo que se tiene lo siguiente.

$$\eta(\dot{\varepsilon}) = \frac{N_1(\dot{\varepsilon})}{\dot{\varepsilon}} \quad (\text{VII.27})$$

Procedimiento iterativo para la viscosidad extensional, es el siguiente:

- a) Se definen los valores de la viscosidad reducida, parámetro de destrucción, modulo elástico de corte, e inverso de la fluidez a alto corte  $\{\phi_r, \phi_\infty, \beta, G_0\}$ .
- b) El método iterativo, empieza con un valor de la rapidez de extensión:

$$\dot{\varepsilon}_i = \dot{\varepsilon}_0 \quad (\text{VII.28})$$

A partir de este valor, se resuelve la ecuación no-lineal numérica y se obtiene los valores correspondientes, de la primera diferencia de esfuerzos normales.

- c) Para obtener los demás puntos de la primera diferencia de esfuerzos normales, se repite el procedimiento en un intervalo de prueba de:

$$10^{-3} = \dot{\varepsilon}_0 \leq \dot{\varepsilon} \leq \dot{\varepsilon}_f = 10^3 \quad (\text{VII.29})$$

El tamaño del paso para el método iterativo es de  $10^{-2}$ .

### VII.2.1.1 Límites clásicos: Regla de Throuton

La ecuación no lineal para la primera diferencia de esfuerzos normales debe satisfacer los límites clásicos a rapidez de deformación baja y alta respectivamente, por lo que se tiene lo siguiente:

$$\lim_{\phi_r \rightarrow 1} \frac{N_1}{\dot{\varepsilon}} = \left( \frac{1}{\frac{\phi_r + \beta N_1 \dot{\varepsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\varepsilon}} - 2 \frac{1}{G_0 \phi_\infty} \dot{\varepsilon}} + \frac{1/2}{\frac{\phi_r + \beta N_1 \dot{\varepsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\varepsilon}} + \frac{1}{G_0 \phi_\infty} \dot{\varepsilon}} \right) \frac{1}{\phi_\infty} = \frac{3}{\phi_\infty} \quad (\text{VII.30})$$

A rapidez de deformación baja, se tiene lo siguiente:

$$\lim_{\dot{\epsilon} \rightarrow 0} \frac{N_1}{\dot{\epsilon}} = \lim_{\dot{\epsilon} \rightarrow 0} \left( \frac{1}{\frac{\phi_r + \beta N_1 \dot{\epsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\epsilon}} - 2 \frac{1}{G_0 \phi_\infty} \dot{\epsilon}} + \frac{1/2}{\frac{\phi_r + \beta N_1 \dot{\epsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\epsilon}} + \frac{1}{G_0 \phi_\infty} \dot{\epsilon}} \right) \frac{1}{\phi_\infty} = \frac{3}{\phi_r \phi_\infty} \quad (\text{VII.24})$$

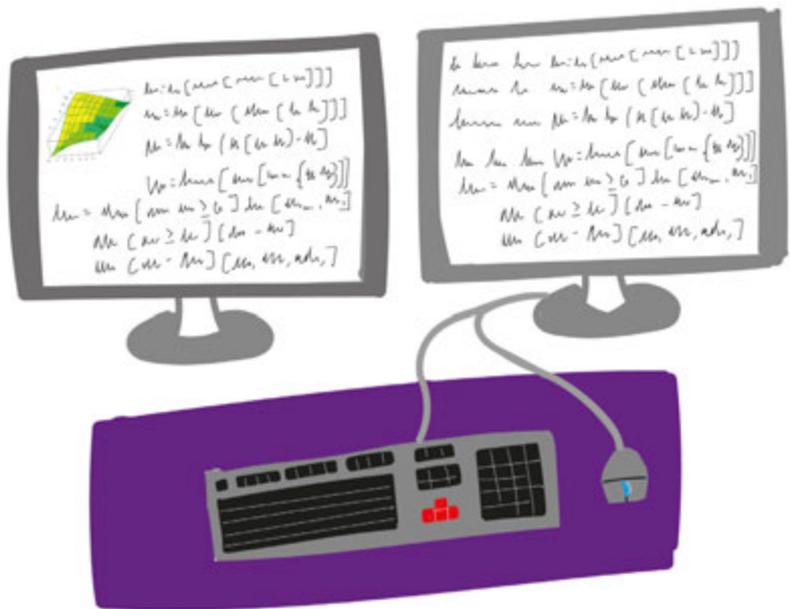
A rapidez de deformación alta, se tiene lo siguiente por lo que:

$$\lim_{\dot{\epsilon} \rightarrow \infty} \frac{N_1}{\dot{\epsilon}} = \lim_{\dot{\epsilon} \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{\frac{\phi_r + \beta N_1 \dot{\epsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\epsilon}} - 2 \frac{1}{G_0 \phi_\infty} \dot{\epsilon}} + \frac{1/2}{\frac{\phi_r + \beta N_1 \dot{\epsilon}}{1 + \beta N_1 \dot{\epsilon}} + \frac{1}{G_0 \phi_\infty} \dot{\epsilon}} \right) \frac{1}{\phi_\infty} = \frac{3}{\phi_\infty} \quad (\text{VII.25})$$

Es importante resaltar que cualquier ecuación constitutiva debe satisfacer los límites clásicos y es una manera analítica de comprobar si los desarrollos expuestos, son pertinentes, i.e. cumplen con la física intrínseca del problema de estudio.

# CAPÍTULO VIII

## Simulaciones numéricas



### VIII.1 Variables adimensionales

En esta sección, se presentan las variables adimensionales que facilitaran las simulaciones y la descripción de los mecanismos que dominan el sistema a través de los grupos adimensionales. En la **Tabla VIII.1** se muestran cuatro columnas, la primera está referida al nombre de la variable, la segunda al símbolo correspondiente, la tercera está relacionada con la variable característica con la que se hace adimensional y por último la variable adimensional. Las variables escaladas son: (i) Coordenada radial, (ii) Esfuerzo cortante, (iii) Esfuerzos normales, (iv) Velocidad axial, (v) Flujo volumétrico, el gradiente de presión.

**Tabla VIII.1.** Variables adimensionales.

	Variable dimensional	Variable característica	Variable adimensional
Viscosidad	$\eta$	$\eta_0$	$\eta^* = \eta/\eta_0$
Componente del esfuerzo cortante rz [Pa]	$\sigma_{rz}$	$\eta_0 \langle Vz \rangle / a$	$\sigma_{rz}^* = \sigma_{rz} / \eta_0 \langle Vz \rangle a^{-1}$
Componentes normales del esfuerzo [Pa] ii = [rr, $\theta\theta$ , zz]	$\sigma_{ii}$	$\eta_0 \langle Vz \rangle / a$	$\sigma_{ii}^* = \sigma_{ii} / \eta_0 \langle Vz \rangle a^{-1}$ ; ii = [ rr, zz, $\theta\theta$ ]
Presión termodinámica [Pa]	p	$\eta_0 \langle Vz \rangle / a$	$p = p / \eta_0 \langle Vz \rangle a^{-1}$
Velocidad axial [m/s]	$V_z$	$\langle Vz \rangle$	$V_z^* = V_z / \langle Vz \rangle$
Flujo volumétrico [m]	Q	$\pi a^2 \langle Vz \rangle$	$Q^* = Q / \pi a^2 \langle Vz \rangle$
Coordenadas radial r y axial z	r, z	a	$r^* = r/a$ ; $z^* = z/a$

Es importante destacar que el conjunto de variables adimensionales, nos permiten:

- a) Acotar el espacio de estudio
- b) Los grupos adimensionales engloban los mecanismos más importantes en el sistema.
- c) Simplifican las simulaciones computacionales mediante el análisis límite de estos grupos adimensionales.

Utilizando las variables adimensionales definidas en la **Tabla VIII.1**, se obtienen los respectivos grupos adimensionales que definen los mecanismos de transferencia de momento y de reología en el sistema de flujo.

### VIII.1.1 Mecanismos adelgazantes o engrosantes al corte

El primero de estos grupos, se define como un cociente de fluideces:

$$B = \frac{\Phi_{\infty}}{\Phi_0} = \begin{cases} B \gg 1: \text{Adelgazamiento} \\ B = 1: \text{Estructura constante} \\ B \ll 1: \text{Engrosamiento} \end{cases} \quad (\text{VIII.1})$$

Este número nos permite analizar la disminución o aumento de puntos estructurales por efecto del corte. Cuando  $B \gg 1$ , el sistema experimenta estados de mayor a menor estructura por efecto del flujo. El caso  $B = 1$ , el sistema experimenta una estructura constante, es decir, no importa con cuán alta sea la rapidez de deformación en, su la estructura permanece intacta. Por último, si  $B \ll 1$ , el sistema experimenta estados de menor a mayor estructura por efecto del corte.

### VIII.1.2 Mecanismos tixotrópicos y reopécticos

El segundo de estos grupos está relacionado con las propiedades tixotrópicas y reopécticas en el sistema.

$$A_0 = \frac{\Phi_0^{-1} \left( (Vz)/a \right)^2}{1/K\lambda} = \frac{\text{Energía-viscosa}}{\text{Energía-cinético/estructural}} \quad (\text{VIII.2})$$

Este número tiene tres valores posibles, los cuales se pueden interpretar de la siguiente manera:

$$A_0 = \frac{\phi_0^{-1} \left( (Vz) / a \right)^2}{1 / K\lambda} = \begin{cases} A_0 \ll 1: \text{Energía-viscosa} \ll \text{Energía-cinéticos/estructurales} \\ A_0 = 1: \text{Energía-viscosa} = \text{Energía-cinéticos/estructurales} \\ A_0 \gg 1: \text{Energía-viscosa} \ll \text{Energía-cinéticos/estructurales} \end{cases} \quad (\text{VIII.3})$$

El número adimensional  $A_0$  es asociado a los procesos de destrucción y construcción de la estructura por efecto del flujo. Es importante destacar lo siguiente:

Si  $A_0$  es muy pequeño, y el sistema se encuentra en estado estacionario, se necesita una mayor energía para que el sistema experimente una transición de estructura de estados de mayor cantidad de puntos estructurales a estados de menor cantidad de puntos estructurales o de menor a mayor número de puntos estructurales por efecto del flujo.

Si  $A_0$  es mayor a uno, el sistema necesita de menor energía para experimentar una transición en el número de puntos estructurales, i.e. se necesita un menor esfuerzo en la pared para que el sistema experimenta un cambio estructural.

### VIII.1.3 Mecanismos de cedencia

El tercer grupo es el número de Bingham, el cual representa los mecanismos de cedencia del material y los asociados al flujo mediante el esfuerzo en la pared que se aplica al sistema. Nótese que el esfuerzo cortante esta escalado con la viscosidad a altos cortes debido a que la viscosidad a bajo corte es infinita en el caso del esfuerzo de cedencia [3].

El número de Bingham se puede escribir como:

$$B_i = \frac{1 / \sqrt{K\lambda\phi_c}}{\sigma_{(z)x}} = \frac{\text{Esfuerzo del material}}{\text{Esfuerzo de corte}} \quad (\text{VIII.4})$$

El número adimensional  $B_i$  se conoce como número de Bingham. Este número describe la transición de un fluido newtoniano al sólido de Hooke (sólido elástico de memoria perfecta).

$$B_i = \frac{1/\sqrt{K\lambda\phi_\infty}}{\sigma_{(x)\infty}} = \begin{cases} B_i = 0 : \text{Fluido} \\ B_i = 1 : \text{Sólido de Hooke} \\ B_i \gg 1 : \text{Esfuerzo de cedencia} \end{cases} \quad \text{(VIII.5)}$$

El número adimensional  $B_i$  esté ligado con  $B^{-1}$  a través de la siguiente relación lineal, la cual fue deducida por Herrera-Valencia *et al.* (2017)[3](véase Ec. (VIII.6)). Esta relación significa que la zona del esfuerzo de cedencia está relacionada con el aumento de puntos estructurales asociados a los mecanismos engrosantes al corte. La relación más simple entre el esfuerzo de cedencia y el inverso del número  $B$  es lineal y fue propuesta en el estudio del flujo pulsátil sanguíneo con hipercolesterolemia [3].

$$B_i(B^{-1}) = 1 - B^{-1} \quad \text{(VIII.6)}$$

Esta relación implica que el número adimensional tiene dos límites clásicos. El primer punto de estudio es:  $(B^{-1}, B_i) = (0, 1)$  que corresponde al caso en el que el sistema se comporta como un sólido debido a su alta viscosidad, mientras que el caso  $(B^{-1}, B_i) = (1, 0)$  está asociado con el comportamiento de un fluido.

### VIII.1.4 Mecanismos viscoelásticos

El cuarto grupo es el número es el Weissenberg. Este es un número que relaciona las propiedades viscoelásticas del material, el cual se puede expresar como el producto de un tiempo característico con una rapidez de deformación en el sistema. Este número puede ser expresado como:

$$We_0 = (1/\phi_0 G_0) \frac{\langle Vz \rangle}{a} = \text{(Tiempo característico del material)} \times \text{(rapidez de deformación)} \quad \text{(VIII.7)}$$

Este número tiene tres límites clásicos, los cuales son enumerados a continuación:

$$We_0 = (1/\phi_0 G_0) \frac{\langle Vz \rangle}{a} = \begin{cases} We_0 = 0 : \text{Inelástico} \\ We_0 \rightarrow 0 : \text{Debilmente elástico} \\ We_0 = 1 : \text{Viscoelástico} \\ We_0 \rightarrow : \text{Elástico} \end{cases} \quad \text{(VIII.8)}$$

### VIII.1.5 Números adimensionales a alto corte

Los números adimensionales escalados con la fluidez a corte bajo, pueden ser escalados con la fluidez a corte alto de la siguiente manera:

$$\{A_0 = BA_x, We_0 = BWe_x\} \quad \text{(VIII.9)}$$

Es decir, la relación entre los números adimensionales  $A_0$  y  $We_0$  con  $A_x$  y  $We_x$  es lineal y su pendiente está determinado por las propiedades adelgazantes y engrosantes a través del número adimensional  $B$ . Esta relación es una consecuencia del conjunto de variables adimensionales que se propuso. Un ejemplo de este se da a continuación. Los números adimensionales  $A_0$  y  $A_x$  fueron definidos como:

$$A_0 = \frac{\varphi_0^{-1} \left( \langle Vz \rangle / a \right)^2}{1/K\lambda}; A_x = \frac{\varphi_x^{-1} \left( \langle Vz \rangle / a \right)^2}{1/K\lambda} \quad \text{(VIII.10)}$$

Al realizar el cociente entre ellos, se tiene lo siguiente:

$$\frac{A_0}{A_x} = \frac{\frac{\varphi_0^{-1} \left( \langle Vz \rangle / a \right)^2}{1/K\lambda}}{\frac{\varphi_x^{-1} \left( \langle Vz \rangle / a \right)^2}{1/K\lambda}} = \frac{\varphi_0^{-1}}{\varphi_x^{-1}} = \frac{\varphi_x}{\varphi_0} = B \quad \text{(VIII.11)}$$

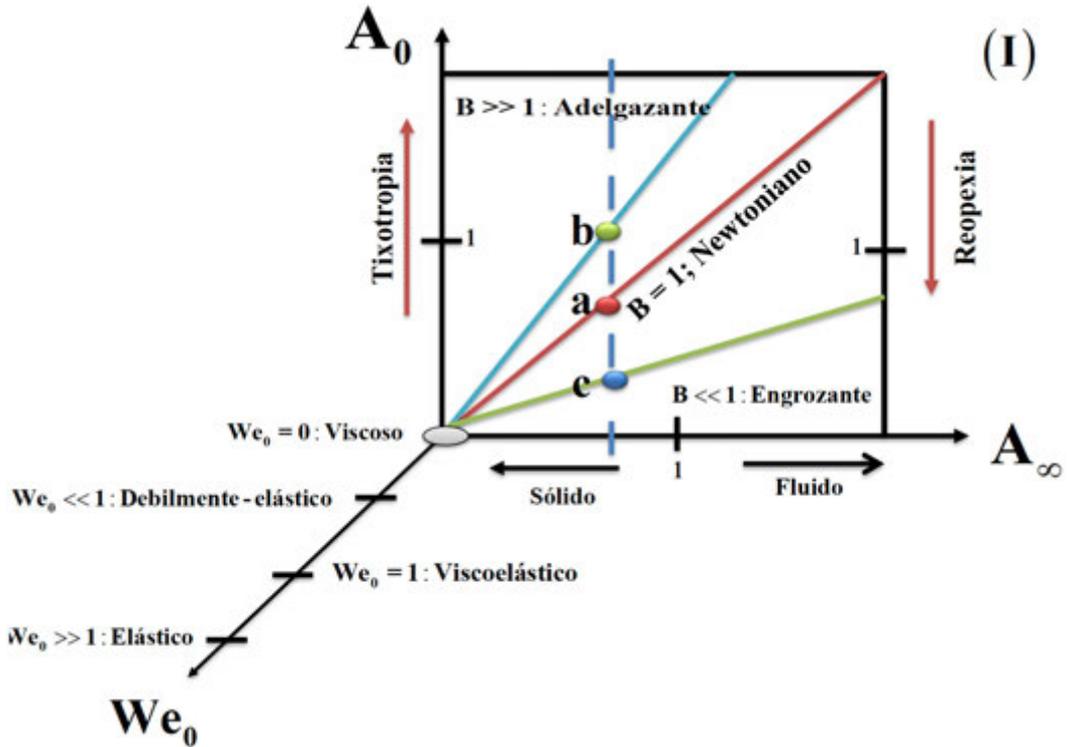
Entonces, la relación entre el número  $A$  a bajas y a altas rapidez de deformación está dada por:

$$\frac{A_0}{A_x} = B \Rightarrow A_0 = BA_x \quad \text{(VIII.12)}$$

Es decir, que los números pueden  $\{A_0, A_x\}$  ser representados en un espacio material 2D (ver **Figura VIII1**) y que la relación más simple es una función lineal con pendiente  $B$ , la cual está relacionada con los procesos de desestructuración y construcción estructural del material a través de los mecanismos adelgazantes o engrosantes al corte. En el caso de un fluido viscoelástico, el espacio material en 3D y el tercer eje están relacionados con las propiedades elásticas del material, como se observa en la **Figura VIII1**.

## VIII.2 Diagramas materiales 3D

Los números adimensionales  $[A_0, A_\infty, We_0]$  y  $[B^{-1}, Bi, We_\infty]$  pueden ser representados en diagramas 3D como los que se muestran en las **Figura VIII2**, respectivamente. Es importante resaltar que las representaciones de las **Figura VIII2** caracterizan el fluido debido a que engloba las propiedades materiales.



**Figura VIII.3.** Diagrama material conformado por los grupos adimensionales del modelo BMP que engloban los procesos estructurales y cinéticos a través del adelgazamiento, engrosamiento, tixotropía y reopexia.

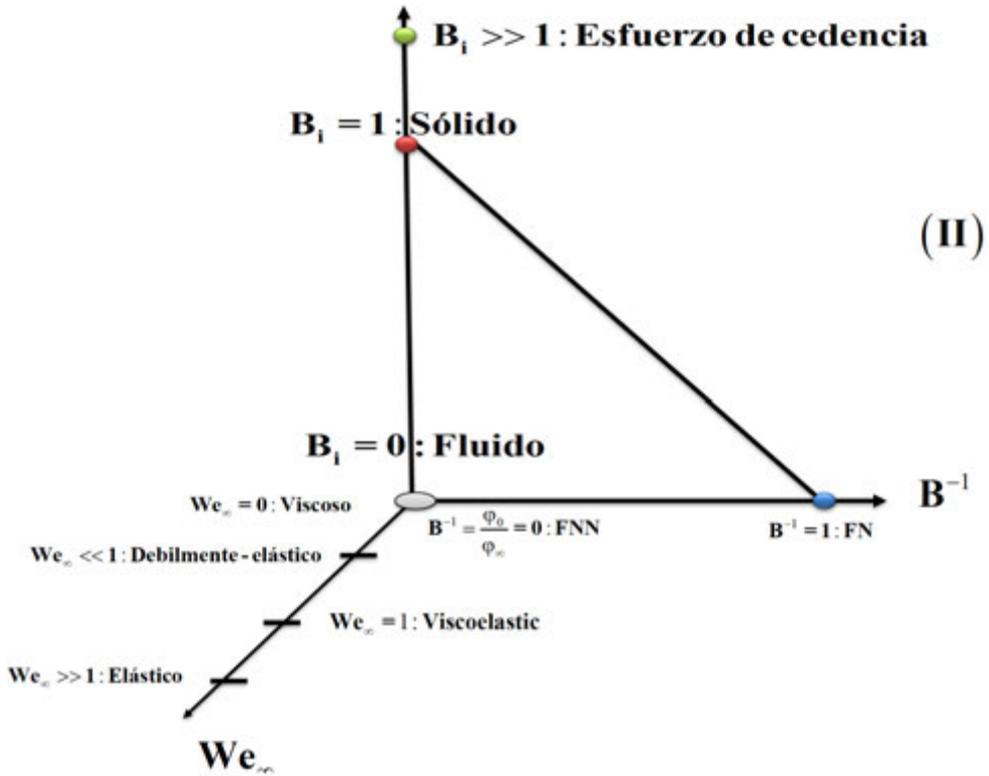


Figura VIII2. Diagrama material conformado por los grupos adimensionales del modelo BMP donde se muestran los mecanismos de cedencia en función del número adimensional B.

### VIII.3 Propiedades reológicas experimentales

Los datos experimentales usados en las simulaciones del presente capítulo provienen de pruebas reométricas aplicadas a polímeros asociativos en estado estacionario y no estacionario. En las pruebas de flujo en estado estacionario y homogéneo, la muestra es colocada en el reómetro y es destruida por efecto del corte. En la prueba de flujo oscilatorio de baja amplitud de deformación se obtiene el espectro dinámico mecánico lineal del material en el reómetro, i.e., la preponderancia viscosa y elástica del material. En las pruebas de relajación instantánea se observa la evolución del esfuerzo cortante con el tiempo cuando el esfuerzo inicial aplicado (constante) es interrumpido de manera

súbita (en  $t = 0$ ). La respuesta del material después de un periodo de información y el tiempo que tarda en llegar a un estado de equilibrio, permite obtener la constante cinética y el tiempo de reestructuración en el sistema [74]. En las Tablas 4 y 5, se presentan los valores numéricos de estas, los principales mecanismos y los números adimensionales respectivamente. Los mecanismos que se simularan en esta tesis son los siguientes:

- a) Adelgazamiento y engrosamiento
- b) Tixotropía y reopexia
- c) Esfuerzo de cedencia
- d) Efecto de la concentración

**Tabla VIII.2.** Valores de los parámetros reológicos para el modelo BMP.

Números adimensionales	$A_0$	$A_{\infty}$	B	$\frac{A_0}{k = 1/G_0}$	$\frac{A_{\infty}}{k = 1/G_0}$
Engrosamiento al corte	0.13727	0.00518 0.0518	26.5 2.65		
Adelgazamiento al corte	5.18	25.9	0.2		
Newtoniano	0.13727	0.13727	1		
Esfuerzo de cedencia	0.00259 0.0259 0.13727 25.9 271.95	271.95	$9.52 \cdot 10^{-6}$ $9.52 \cdot 10^{-6}$ $5.04 \cdot 10^{-6}$ 0.0952381 1		
Tixotropía			185 18.5 1.85 0.185	0.985 0.0985 0.00985 0.000985	1 10 50 100
Concentración (wt. %)					
5%	0.076	720	0.000105		
10%	0.015	2459	$6.1 \cdot 10^{-6}$		
15%	0.0055	2520	$2.18 \cdot 10^{-6}$		
20%	0.0024	2857	$8.04 \cdot 10^{-7}$		

## VIII.4 Mecanismos adelgazantes y engrosantes al corte

### VIII.4.1 Función fluidez

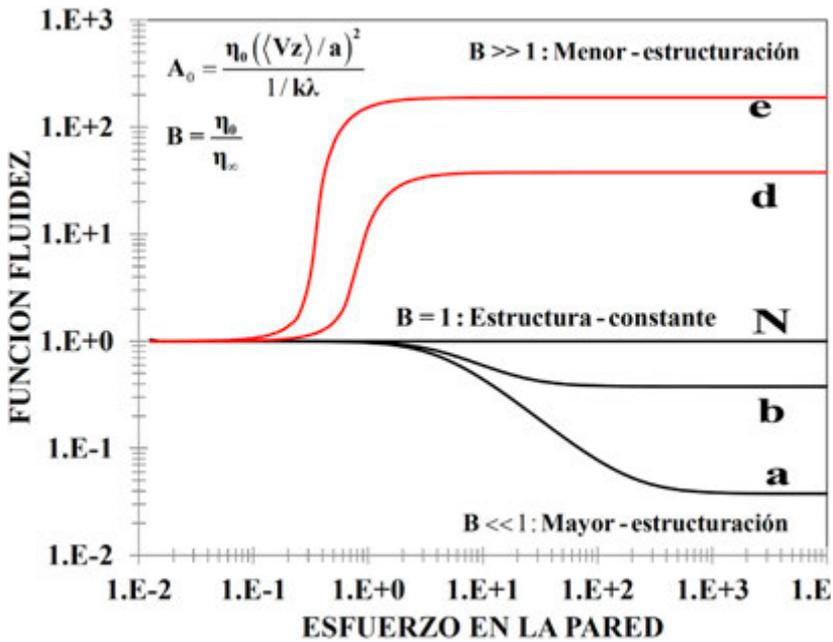
En la **Figura VIII3** se describe la fluidez adimensional (véase Ec. (VIII.13)) aparente del sistema (eje de las ordenadas) de un polímero asociativo vs esfuerzo en la pared (eje abscisas), en función de los grupos adimensionales  $A_0$  y  $B_0$ . Los valores de las propiedades materiales son las reportadas en la **Tabla VIII2**, y los números adimensionales correspondientes a estos también se resumen en la **Tabla VIII2**. La función fluidez aparente muestra tres comportamientos.

- a) Si  $B \gg 1$ , existe una pérdida de puntos estructurales en el sistema debido al flujo (Simulación e y d),
- b) Si  $B = 1$ , el sistema presenta una estructura constante e independiente del esfuerzo en la pared (simulación N). En este caso la fluidez es la misma en todo intervalo de rapidez de deformación.
- c) Si  $B \ll 1$ , se asocia a una estructura más compacta que induce un mayor número de puntos estructurales al aumentar la rapidez de deformación (simulaciones a y b).

Por ejemplo, en los casos de las simulaciones d y e, el sistema a bajos esfuerzos en la pared muestra un comportamiento constante, sin embargo, a un esfuerzo en la pared crítico, se observa un comportamiento monótono creciente hasta un valor máximo, seguido de un comportamiento constante a un segundo valor de esfuerzo en la pared crítico. En esta zona, la estructura está completamente destruida y es equiparable a la del solvente. La simulación d es básicamente la misma explicación y las conclusiones matemáticas y físicas son las mismas. Por otra parte, cuando el número adimensional  $B = 1$ , la simulación N muestra un comportamiento constante e igual a la unidad. Aquí la estructura es constante en toda la ventana del esfuerzo en la pared.

$$\begin{aligned} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] &= \frac{1}{2} B \cdot \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \\ &+ \frac{1}{2A_0^2 B^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( (A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + 2B) \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \right) - (2B) \right) \\ &+ \frac{2}{A_0^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( \frac{B-1}{B^3} \right) \text{Log} \left| \frac{2 + A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + B \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} - 1 \right)}{2} \right| \end{aligned} \quad \text{(VIII.13)}$$

Por otra parte, las simulaciones a y b muestran un comportamiento opuesto a las simulaciones e y d, i.e. a bajos esfuerzos en la pared el sistema complejo muestra una estructura constante, mientras que, a un esfuerzo en la pared cercano a 1, la fluidez aparente decrece inducido por el esfuerzo en la pared y a un segundo esfuerzo en la pared crítico, el sistema presenta una segunda meseta. Físicamente, las simulaciones a, b implican que, al aplicar el esfuerzo en la pared, la estructura compleja aumenta el número de entrecruzamientos físicos por efecto de la rapidez de deformación.



**Figura VIII.3.** Fluidez adimensional vs esfuerzo en la pared para distintas condiciones materiales en función de los números adimensionales A Y B.

Tomando el límite cuando  $B \rightarrow 1$  (Fluido newtoniano) de la Ec. (VIII.13), se tiene lo siguiente:

$$\lim_{B \rightarrow 1} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = \frac{1}{2} - \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} + \frac{1}{2A_0^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left[ (A_0 \sigma_{w0}^{*2} + 1) \left( \sqrt{(A_0 \sigma_{w0}^{*2} + 1)^2} - 1 \right) \right] \quad \text{(VIII.14)}$$



Simplificando la Ec. (VIII.14):

$$\begin{aligned} \text{Lim}_{B \rightarrow 1} \Phi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} + \frac{1}{2A_0^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( (A_0 \sigma_{w0}^{*2} + 1)(A_0 \sigma_{w0}^{*2} + 1) - 1 \right) \end{aligned} \quad \text{(VIII.15)}$$

Realizando los productos entre los polinomios y simplificando

$$\begin{aligned} \text{Lim}_{B \rightarrow 1} \Phi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} + \frac{1}{2A_0^2 \sigma_{w0}^{*4}} (A_0^2 \sigma_{w0}^{*4} + 2A_0 \sigma_{w0}^{*2}) \end{aligned} \quad \text{(VIII.16)}$$

Multiplicando y distribuyendo

$$\begin{aligned} \text{Lim}_{B \rightarrow 1} \Phi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} + \frac{1}{2} + \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \end{aligned} \quad \text{(VIII.17)}$$

Simplificando la Ec.(VIII.17), se tiene lo siguiente:

$$\text{Lim}_{B \rightarrow 1} \Phi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad \text{(VIII.18)}$$

Finalmente, la fluidez aparente normalizada con la fluidez a bajo corte, toma la forma:

$$\therefore \boxed{\text{Lim}_{B \rightarrow 1} \Phi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] = 1} \quad \text{(VIII.19)}$$

La Ec. (VIII.19) expresa una función fluidez independiente del esfuerzo en la pared correspondiente al fluido newtoniano. Para visualizar los efectos de los entrecruzamientos, se puede imaginar una madeja de hilo, que debido a las fuerzas intermoleculares que se aplican en el elemento de control, esta madeja se desenreda y por efecto del flujo se orienta. Este mecanismo es equivalente a lo que se conoce como adelgazamiento al corte. Por otra parte, si al aplicar las fuerzas internas, la madeja con hilo se enreda más, se presenta una estructura compacta y con mayores entrecruzamientos físicos. Este efecto es lo opuesto al adelgazamiento al corte y se conoce como engrosamiento o espesamiento al corte.

### VIII.4.2 Perfil de velocidades

En la **Figura VIII4** se ilustra el perfil de velocidades axial en función de la coordenada radial adimensional a distintos números adimensionales  $A_0$  y  $B$ . Las condiciones de flujo son las mismas que en la **Figura VIII3** y están resumidas en la **Tabla VIII1**. En todos los casos, se aprecia un comportamiento parabólico. La simulación N (en color rojo) se obtiene cuando el valor de  $B = 1$ , esto quiere decir que las fluideces a corte bajo y alto, son las mismas, es decir el fluido experimenta una fluidez constante. Dos casos son admisibles en el sistema: (i)  $B \gg 1$  y  $B \ll 1$ . El primero, (i) se obtiene para las simulaciones (a, b) respectivamente. Es claro que la velocidad del fluido en la pared es cero, debido a la condición de adherencia del sólido al fluido, es decir, la velocidad del fluido es cero. Alejado de la pared, la velocidad del elemento de control es diferente de cero, por lo que se observa un aumento en la velocidad en las simulaciones d y e. La expresión del perfil de velocidades que se utilizó para las simulaciones fue la siguiente:

$$Vz^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*, r^*] = \frac{1}{4A_0\sigma_{w0}^*} \left\{ \begin{array}{l} A_0 B \sigma_{w0}^{*2} (1-r^{*2}) + \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \\ - \sqrt{(A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2} \\ + \text{Log} \left\{ G_2 [A_0, B, \sigma_{w0}^*, r^*] (G_3 [A_0, B, \sigma_{w0}^*, r^*]) \right\} \end{array} \right\} \quad (\text{VIII.20})$$

Donde  $G_1$  y  $G_2$  se expresan de la siguiente manera:

$$G_1 = \frac{1 + A_0(2-B)(\sigma_{w0}^* r^*)^2 + \sqrt{(A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2}}{1 + A_0(2-B)\sigma_{w0}^{*2} + \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}}} \quad (\text{VIII.21})$$

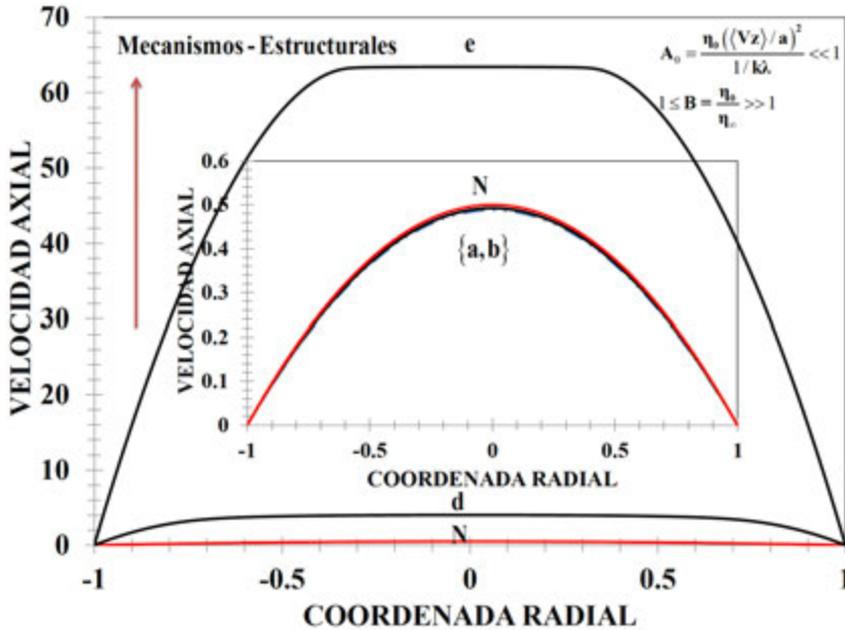
$$G_2 = \left( \frac{2 + A_0 B^2 (\sigma_{w0}^* r^*)^2 + B \left( \sqrt{(A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2} - 1 \right)}{2 + A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + B \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2} - 1} \right)} \right)^{(B-2)B} \quad (\text{VIII.22})$$

En el centro del tubo, se obtiene la velocidad máxima que puede ser calculada directamente de la expresión para la velocidad axial, sustituyendo el valor de  $r^* = 0$ .

$$Vz^*_{max} = Vz^* [A_0, B, \sigma^*_{w0}, r^* = 0] = \frac{1}{4A_0\sigma^*_{w0}} \left\{ A_0 B \sigma^{*2}_{w0} + \sqrt{(A_0 B \sigma^{*2}_{w0} - 1)^2 + 4A_0 \sigma^{*2}_{w0}} \right. \quad \text{(VIII.23)}$$

$$\left. + \text{Log} \left[ G_2 [A_0, B, \sigma^*_{w0}, r^* = 0] (G_3 [A_0, B, \sigma^*_{w0}, r^* = 0]) \right] \right\}$$

Esta expresión nos indica que la velocidad máxima en el sistema es un acoplamiento entre diferentes mecanismos y depende del esfuerzo en la pared, y de los mecanismos viscoelástico, cinético y estructurales a través de los grupos adimensionales  $A_0$  y  $B$  respectivamente. Es importante resaltar que en la **Figura VIII4**, en la simulación e, se observa un perfil de velocidades homogéneo en el intervalo (0, 0.5) inducido por los mecanismos de desestructuración asociados al valor numérico del número adimensional B.



**Figura VIII4.** Velocidad axial adimensional vs la coordenada radial adimensional en función de los mecanismos de adelgazamiento y espesamiento por rapidez de deformación a través de los números adimensionales A y B.

### VIII.4.3 Flujo volumétrico

En la **Figura VIII5** se ilustra el flujo volumétrico del polímero asociativo en función del esfuerzo en la pared para diferentes valores de los números adimensionales  $A_0$  y  $B$ . A bajos esfuerzos en la pared, el flujo volumétrico muestra una dependencia lineal con el esfuerzo en la pared. Dicha zona lineal representa un fluido con una estructura constante, es decir, un fluido que mantiene un número constante de puntos estructurales. A un esfuerzo en la pared crítico, el flujo volumétrico aumenta por efecto del esfuerzo en la pared, y se observa un comportamiento monótono creciente para las simulaciones a y b o decreciente para las simulaciones d y e. A un segundo valor crítico del esfuerzo en la pared, el sistema presenta un comportamiento constante. Es claro que a valores de  $B \gg 1$ , el número de puntos estructurales en el sistema decrece por efecto del corte y el flujo volumétrico aumenta, mientras que cuando  $B \ll 1$ , el flujo volumétrico decrece porque se tiene una estructura más compacta y enredada por efecto de los esfuerzos internos. El carácter no-newtoniano en el sistema está determinado por la función fluidez aparente (véase Ec. (VIII.24)).

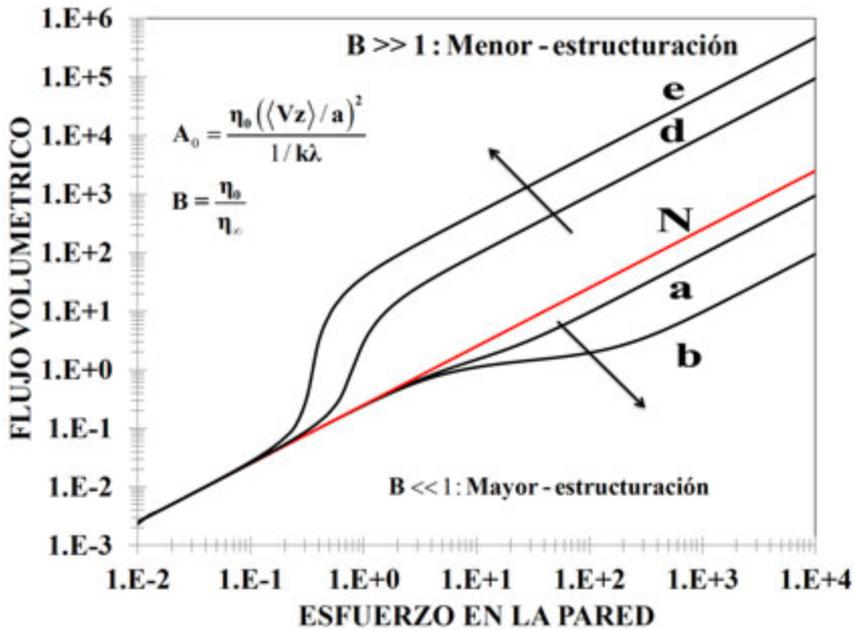
$$Q_{BMP}^* = \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] Q_{N0}^* \tag{VIII.24}$$

$$Q_{N0}^* = \sigma_{w0}^* / 4$$

Y la función fluidez está dada por:

$$\begin{aligned} \varphi_{(app)0}^* [A_0, B, \sigma_{w0}^*] &= \frac{1}{2} B \cdot \frac{1}{A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \\ &+ \frac{1}{2A_0^2 B^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( (A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + 2-B) \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} \right) - (2-B) \right) \\ &+ \frac{2}{A_0^2 \sigma_{w0}^{*4}} \left( \frac{B-1}{B^3} \right) \text{Log} \left| \frac{2 + A_0 B^2 \sigma_{w0}^{*2} + B \left( \sqrt{(A_0 B \sigma_{w0}^{*2} - 1)^2 + 4A_0 \sigma_{w0}^{*2}} - 1 \right)}{2} \right| \end{aligned}$$

Es decir, el flujo volumétrico del BMP se puede visualizar como un múltiplo del fluido newtoniano y ese múltiplo está determinado por la función fluidez

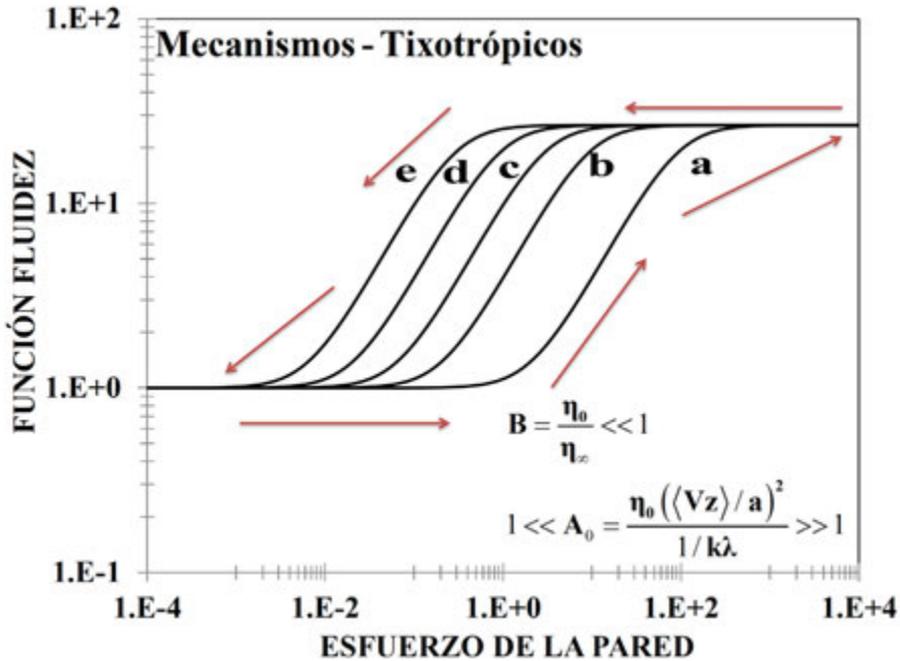


**Figura VIII.5.** Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional a diferentes condiciones de adelgazamiento y espesamiento por rapidez de deformación a través de los números adimensionales  $A_0$  y  $B$ .

## VIII.5 Mecanismos tixotrópicos

### VIII.5.1 Función fluidez

La **Figura VIII.6** ilustra la función fluidez adimensional vs el esfuerzo en la pared en función del número adimensional  $A_0$  para un número adimensional  $B$  constante. Las propiedades materiales y los correspondientes números adimensionales son tomados de la **Tabla VIII.1** y **IV.2**, respectivamente. Cuando el valor del número adimensional  $A_0$  es menor a la unidad, i.e.,  $A_0 \ll 1$ , la meseta que presenta la fluidez a bajos esfuerzos se extiende, y para un valor crítico del esfuerzo en la pared, se observa un comportamiento monótono creciente con una pendiente cercana a la unidad y para un segundo esfuerzo crítico, la fluidez presenta una segunda meseta en donde es independiente del esfuerzo en la pared aplicado. Este efecto, se puede ver claramente en la simulación a de la **Figura VIII.6**.



**Figura VIII.6.** Función fluidez adimensional vs el esfuerzo en la pared en función de los números adimensionales  $A_0$  y  $B$ .

Es claro que para un valor fijo del número adimensional  $B$ , los ciclos que se forman son debido a los procesos asociados a la competencia entre los mecanismos cinéticos relacionados con la disipación viscosa y la energía relacionada con los procesos cinético-estructurales (véase Ec. (VIII.25)).

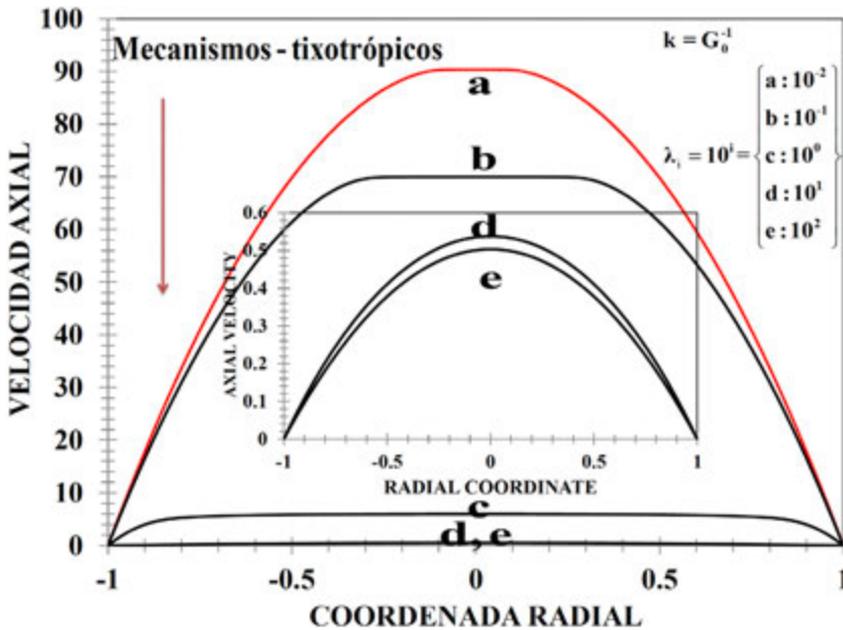
$$A_0 = \frac{\varphi_0^{-1} \left( \langle Vz \rangle / a \right)^2}{l/K\lambda} \tag{VIII.25}$$

El número adimensional  $A_0$  controla los procesos cinético-estructurales del medio, y a partir de este, se pueden obtener los ciclos estructurales que son presentados en la **Figura VIII.6**. Por otra parte, si  $A_0$  es menor a uno, i.e.  $A_0 \gg 1$ , se observa el efecto opuesto, es decir, el plato a bajos esfuerzos en la pared decrece, y para un esfuerzo crítico menor ( $A_0 \ll 1$ ), el sistema experimenta constantes cambios en su estructura y el fluido pasa de estados de menor a mayor fluidez inducido por efecto del flujo. Las curvas de la **Figura VIII.6**

son las correspondientes a los ciclos de tixotropía (curvas de histéresis), que pueden obtenerse en reometría de fluidos complejos. Bautista *et al.* (1999) demostró, mediante rampas de esfuerzo que estas curvas, que las curvas de histéresis están controladas por la reestructuración en el sistema, i.e. por el tiempo de reestructuración  $\lambda$  [1].

### VIII.5.2 Perfil de velocidades

La **Figura VIII7** ilustra el perfil de velocidad para un fluido estructurado vs la coordenada radial adimensional  $r^*$ . se presentan cinco simulaciones con diferentes valores en el tiempo de reestructuración del material.



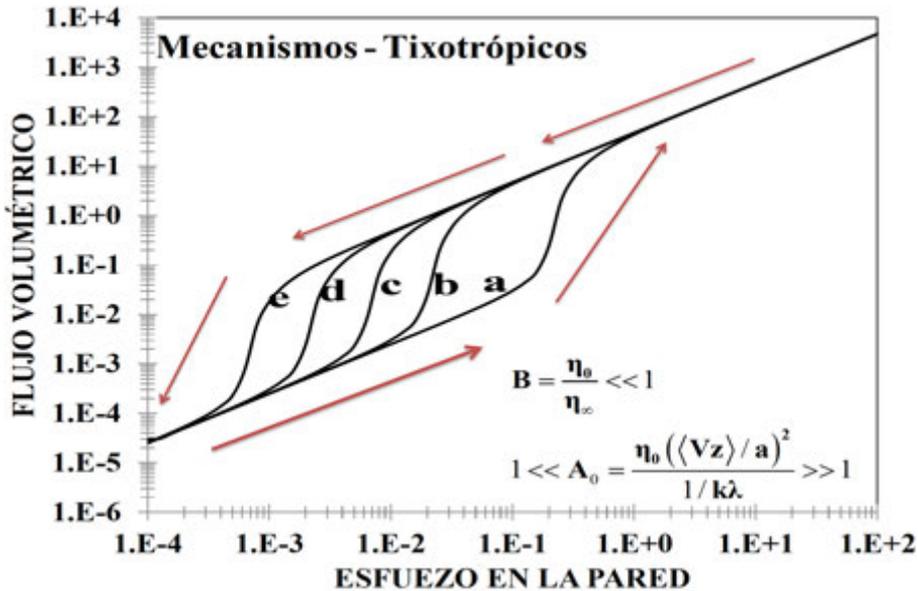
**Figura VIII7.** Velocidad axial sin dimensiones vs coordenadas radiales adimensionales en función de los mecanismos tixotrópicos

Se observa que, en todos los casos de las simulaciones de la **Figura VIII7**, el perfil de velocidades es parabólico, sin embargo, al aumentar el tiempo de reestructuración del

material el sistema exhibe una velocidad menor debido a que se favorecen los mecanismos cinéticos estructurales por lo que velocidad decrece considerablemente como se observa en la **Figura VIII7**. Es claro que el tiempo de reestructuración favorecen los ciclos de tixotropía en el sistema. Por otra parte, en todas las simulaciones, se observan los perfiles parabólicos que consisten en curvas axi-simétricas con la máxima velocidad en el centro del tubo. En la simulación “b” de la **Figura VIII7**, se observa una zona en donde existe un frente homogéneo de velocidades. Es claro que la dinámica lineal y no lineal del sistema se debe al valor numérico de los números adimensionales  $A_0$  y  $B$  asociados a la cinética, la estructura y el mecanismo viscoso a rapidedeces de deformación bajas y altas respectivamente.

### VIII.5.3 Flujo volumétrico

En la **Figura VIII8** se observa el flujo volumétrico tixotrópico para el modelo BMP. El valor de las propiedades materiales son las mismas que las **Figura VIII5 y 8.4**, respectivamente.



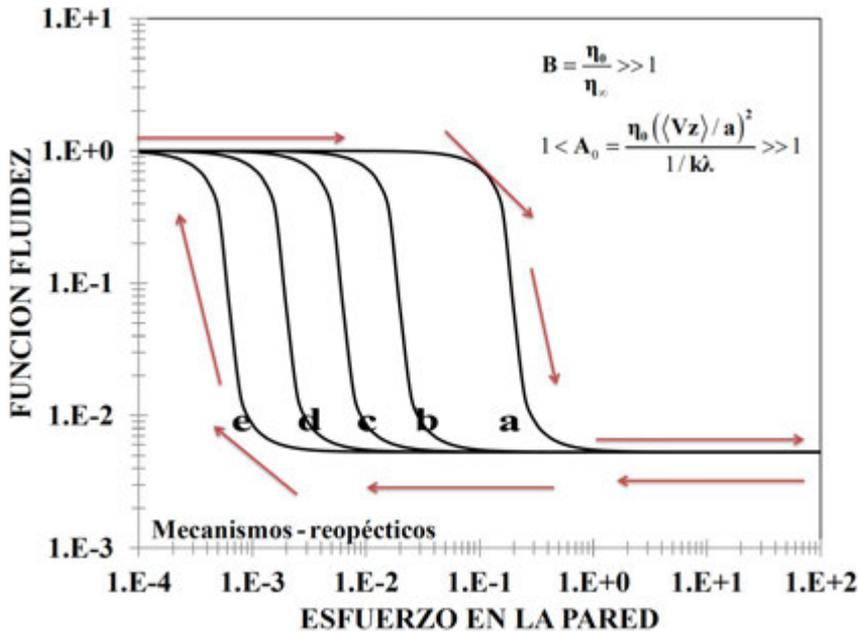
**Figura VIII8.** Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional a diferentes condiciones tixotrópicas respectivamente.

Es claro que, en todas las simulaciones de la **Figura VIII8**, el sistema presenta un comportamiento similar. A bajos esfuerzos en la pared, se observa una dependencia lineal entre el flujo volumétrico y el esfuerzo en la pared. A un esfuerzo crítico el sistema en los cinco casos experimenta un comportamiento monótono creciente con pendiente cercana a la unidad y para un segundo esfuerzo en la pared crítica, se observa de nueva cuenta, un comportamiento lineal con una pendiente que depende de las propiedades adelgazantes al corte. Es claro que cuando el número adimensional  $A_0$  es muy pequeño, la zona lineal entre el esfuerzo volumétrico y el esfuerzo aumenta, lo anterior se puede ver en la simulación a de la **Figura VIII8**. Por otra parte, si el número adimensional  $A$  es mayor a uno, los procesos cinéticos-estructurales dominan y la relación lineal entre el flujo volumétrico y el esfuerzo en la pared decrece, como se observa en las simulaciones [b, c, d, e].

## VIII.6 Mecanismos reopécticos

### VIII.6.1 Función fluidez

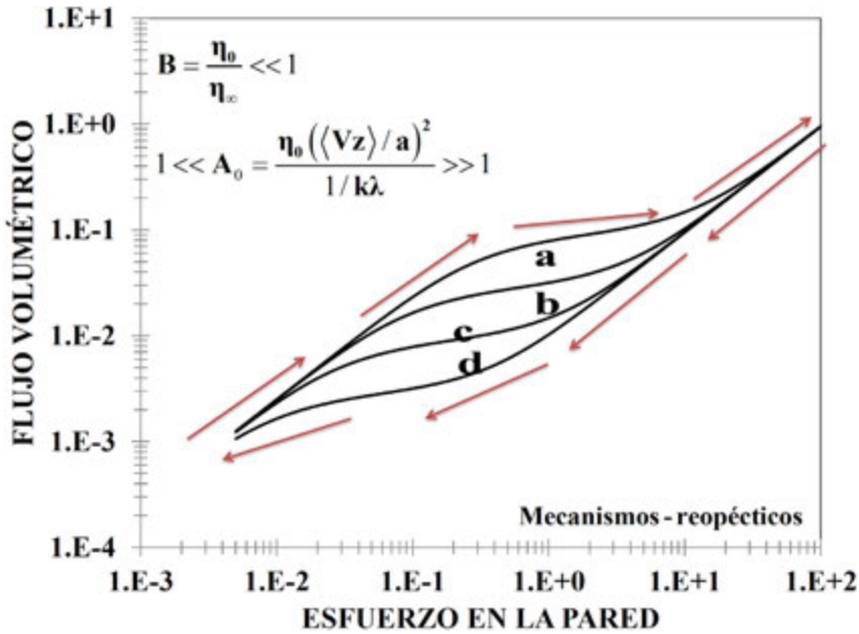
En esta sección se muestran las simulaciones correspondientes a los mecanismos reopécticos asociados a los procesos cinéticos y reestructuración del sistema. En estas condiciones de proceso, se tiene una muestra que presenta mayor número de puntos estructurales y por consiguiente se encuentra más enredada. En esta simulación el valor del número adimensional  $B$  es menor a la unidad, i.e.  $B \ll 1$ . Los valores de  $A_0$  son los mismos que la **Figura VIII8**, en todos los casos se observan dos mesetas a bajo y alto corte por el efecto del flujo y una zona de transición tipo ley de potencia. A bajos esfuerzos en la pared, la muestra presenta una estructura compacta y para un esfuerzo crítico, el sistema experimenta un comportamiento monótono decreciente hasta una segunda meseta, en donde la fluidez es menor. De la misma manera que en la **Figura VIII6**, en la **Figura VIII9** se observan ciclos debido a los efectos combinados estructurales, cinéticos y disipativos a través de los números adimensionales  $A_0$  y  $B$ , respectivamente.



**Figura VIII9.** Velocidad de superficie sin dimensiones en función del esfuerzo de pared adimensional, en diferentes condiciones de reopexia.

## VIII.6.2 Flujo volumétrico

La **Figura VIII10** muestra el flujo volumétrico vs el esfuerzo de pared a diferentes condiciones de reopexia para varios valores de los números adimensionales  $A_0$  y  $B$ . Se observa que los mecanismos estructurales y de flujo juegan un papel muy importante en las curvas de reopexia asociadas con la irreversibilidad del sistema. En todos los casos se observa una zona lineal seguida de un comportamiento monótono creciente hasta un segundo punto crítico en la pared en donde el flujo volumétrico es lineal. Para las curvas b, c y d la descripción matemática es la misma excepto que la zona lineal decrece conforme a esfuerzos de la pared bajos. Físicamente si el sistema fuera estructuralmente reversible solamente habría un camino para la estructura y no se observarían el ciclo que se muestra en la **Figura VIII10**.



**Figura VIII.10.** Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo de pared adimensional en función del número adimensional  $A_0$ , para un valor constante de B.

## VIII.7 Mecanismos por esfuerzo de cedencia

### VIII.7.1 Función fluidez

En la **Figura VIII.11** se ilustra la viscosidad adimensional en función del número de Bingham. Nótese que el inverso del número B depende linealmente del número de Bingham, de la siguiente manera:

$$B^{-1}(B_i) = \frac{\phi_0}{\phi_\infty} (B_i) = 1 - B_i \tag{VIII.26}$$

Es claro que el inverso del número B, i.e.  $B^{-1}$  tiene una dependencia lineal, con el número de Bingham. Dos casos límites son importantes a analizar. El primero de ellos, es cuando la viscosidad tiende a infinito, es decir cuando la fluidez es cero,  $\phi_0 = 0$ . Esto significa que el sistema tiene una viscosidad tan grande que el sistema se comporta como un sólido.

En este caso, el número de Bingham es 1. Esto quiere decir, que la magnitud del esfuerzo aplicado al sistema es del mismo orden que el esfuerzo cortante aplicado.

Adicionalmente, en la **Figura VIII11** se presenta la función fluidez en función del número de Bingham. A Bingham cero, el sistema se comporta como un fluido viscoso y su fluidez es igual a la unidad. Mientras que, cuando el número de Bingham aumenta en el intervalo (0,8), la fluidez decrece monótonamente, sin embargo, a un número de Bingham crítico, la fluidez decrece más rápidamente en el intervalo (0.8, 1) de tal manera que la fluidez se aproxima a cero. Cuando  $B = 1$  la fluidez es cero y se tiene una viscosidad infinita, es decir, un comportamiento de sólido elástico con memoria perfecta. Para  $B > 1$ , el sistema se encuentra en la zona del esfuerzo de cedencia.

En la **Figura VIII12** se compara el comportamiento de la función viscosidad vs el número de Bingham, además, se gráfica la función fluidez en función del número de Bingham. La expresión analítica utilizada en la descripción de la fluidez, es la siguiente:

$$\begin{aligned} \Phi_{(app)\infty}^* [B^{-1}, B_i] &= \frac{1}{2} - B_i^2 + \left( \frac{1}{2} - 2B^{-1}\sqrt{B^{-1}} \right) B_i^4 \\ &+ \left( \frac{1}{2}(1 - B_i^2) + B^{-1}B_i^2 \right) \sqrt{(1 - B_i^2)^2 + 4B^{-1}B_i^2} \\ &+ 2(B^{-1} - 1)B^{-1} \text{Log} \left| \frac{2(B^{-1} + \sqrt{B^{-1}})B_i^2}{1 + (2B^{-1} - 1)B_i^2 + \sqrt{(1 - B_i^2)^2 + 4B^{-1}B_i^2}} \right| B_i^4 \end{aligned} \tag{VIII.27}$$

A Bingham cero la función viscosidad y la fluidez tienen el valor de la unidad. Conforme el número de Bingham aumenta, la viscosidad muestra un comportamiento monótono creciente, mientras que la fluidez, el caso opuesto, es monótono decreciente. Al aumentar la viscosidad decrece la fluidez del material, y conforme el número de Bingham aumenta la viscosidad tiende a un valor no acotado y la fluidez a cero.

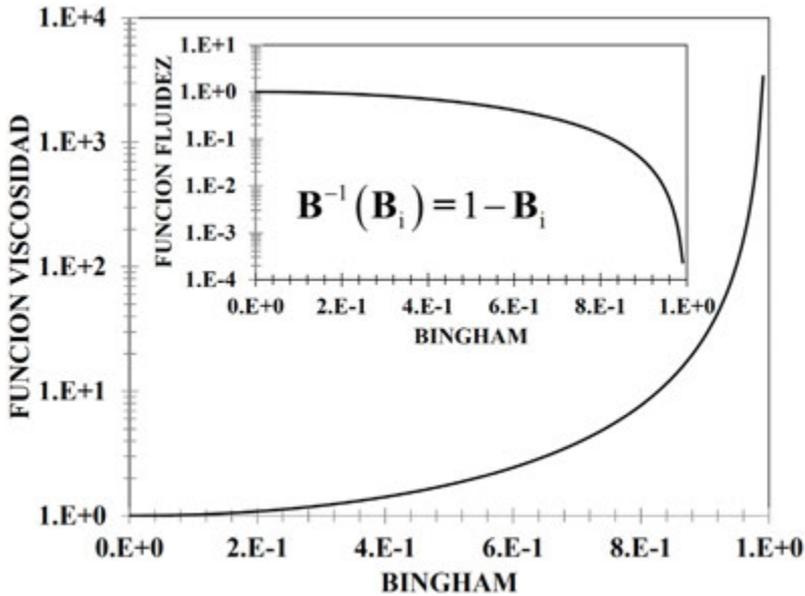


Figura VIII1. Función viscosidad y fluidez en función del número de Bingham.

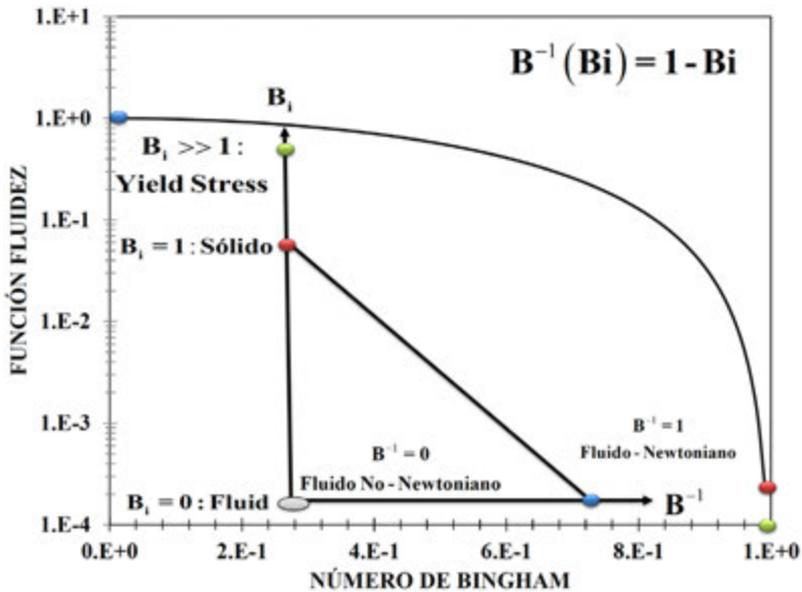


Figura VIII2. Fluidez adimensional vs el número de Bingham.

### VIII.7.2 Perfil de velocidades

En la **Figura VIII13** se ilustra la velocidad axial adimensional vs coordenada radial adimensional en función del inverso del número adimensional  $B^{-1}$ .

En todas las simulaciones presentadas en la **Figura VIII13**, se observa el clásico perfil parabólico. La ecuación que se utilizó en la simulación del perfil de velocidades en forma adimensional fue la siguiente:

$$Vz^* [r^*, B, Bi] = \frac{\sigma_y^*}{4B_i^{-1}} \left\{ \begin{aligned} & B_i^{-2} (1-r^{*2}) + \sqrt{(B_i^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}} - \sqrt{(B_i^{-2}r^{*2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}r^{*2}} \\ & + \text{Log} \left| G_1(r^*, Bi, B) \cdot G_2(r^*, Bi, B) \right| \end{aligned} \right\} \quad \text{(VIII.28)}$$

Donde las funciones: son las dadas por las Ecs. (VIII.29) y (VIII.30):

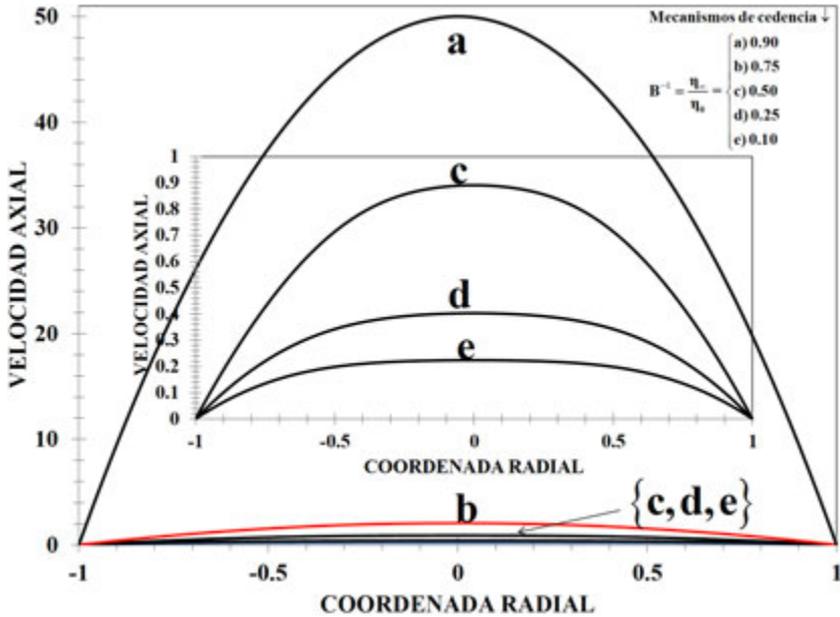
$$G_1 = \left( \frac{1-2B^{-1}-B_i^{-2} + \sqrt{(B_i^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}}}{1-2B^{-1}-B_i^{-2}r^{*2} + \sqrt{(B_i^{-2}r^{*2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}r^{*2}}} \right)^{(2B^{-1})} \quad \text{(VIII.29)}$$

$$G_2 = \frac{1+(2B^{-1}-1)B_i^{-2}r^{*2} + \sqrt{(B_i^{-2}r^{*2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}r^{*2}}}{1+(2B^{-1}-1)B_i^{-2} + \sqrt{(B_i^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}}} \quad \text{(VIII.30)}$$

En las paredes del sistema, la velocidad es cero, mientras que en el centro del sistema es máxima la velocidad (véase Ec. (VIII.31)).

$$\begin{aligned} Vz_{\max}^* [B, Bi] &= Vz^* [r^* = 0, B^{-1}, Bi] \\ &= \frac{\sigma_y^*}{4B_i^{-1}} \left\{ \begin{aligned} & B_i^{-2} + \sqrt{(B_i^{-2}-1)^2 + 4B^{-1}B_i^{-2}} - 1 \\ & + \text{Log} \left| G_1(r^* = 0, Bi, B^{-1}) G_2(r^* = 0, Bi, B^{-1}) \right| \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad \text{(VIII.31)}$$

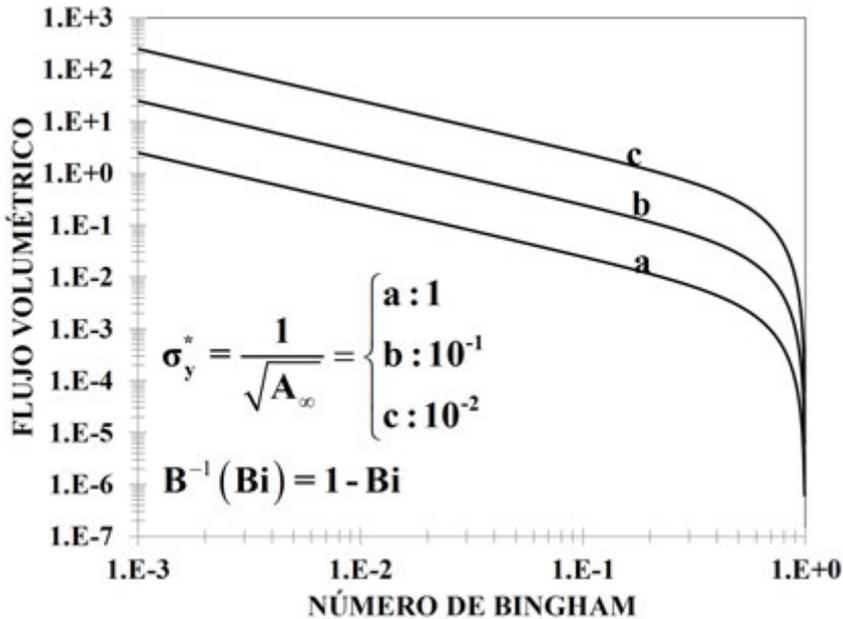
Nótese que, la velocidad máxima depende del esfuerzo, del inverso del número adimensional  $B$ , asociado a la estructuración del material, del número de Bingham y del esfuerzo de cedencia aplicado  $\sigma_y^*$ . Observe que cuando  $B^{-1}$  se aproxima a la unidad, los perfiles de velocidad aumentan drásticamente debido a que el sistema experimenta la transición del fluido viscoso al sólido elástico por efecto del número de puntos estructurales en el sistema. Es importante notar que, cuando  $B^{-1}$  tiende a cero, la velocidad del fluido tiende a cero.



**Figura VIII13.** Velocidad axial adimensional vs la coordenada radial adimensional en función de  $B^{-1}$ .

### VIII.7.3 Flujo volumétrico

En la **Figura VIII14** se ilustra el flujo volumétrico en función del número de Bingham para diferentes valores del esfuerzo de cedencia. En todas las simulaciones de la **Figura VIII14**, se observa un comportamiento similar. Para  $Bi$  cercano a cero, el sistema se comporta como un fluido. En este punto, el flujo volumétrico es el máximo en el sistema y conforme el número de Bingham aumenta, el flujo volumétrico decrece debido a que el sistema aumenta su viscosidad drásticamente, su fluidez baja y el sistema se aproxima al comportamiento de un sólido. Es importante notar, que el valor del flujo volumétrico a  $Bi$  cercano a cero, lo establece el esfuerzo de cedencia.



**Figura VIII14.** Flujo volumétrico adimensional vs el número de Bingham como función del esfuerzo de cedencia.

## VIII.8 Efecto de la concentración

### VIII.8.1 Función fluidez

En la **Figura VIII15** se observa la función fluidez vs esfuerzo en la pared como función de la concentración de CTAT de la muestra. En todas las concentraciones se observa el mismo comportamiento, i.e. a esfuerzos en la pared bajos, se obtiene un comportamiento constante, y para un esfuerzo en la pared crítico, el sistema experimenta un aumento en la fluidez debido al esfuerzo en la pared aplicado. Para un segundo esfuerzo crítico, la fluidez muestra un comportamiento constante independiente del esfuerzo en la pared. El efecto de la concentración en la muestra, se puede cuantificar indirectamente a través de los números adimensionales que describen la física del sistema.

$$A_0 = \frac{\varphi_0^{-1} (\langle Vz \rangle / a)^2}{1/K\lambda}; A_\infty = \frac{\varphi_\infty^{-1} (\langle Vz \rangle / a)^2}{1/K\lambda}; B = \frac{A_0}{A_\infty} \quad (\text{VIII.32})$$

Si consideramos que la rapidez de deformación característica en el sistema es del orden de la unidad, los números adimensionales se reducen a lo mostrado por la Ec. (VIII.33)

$$A_0 = \frac{K\lambda}{\varphi_0}; A_\infty = \frac{K\lambda}{\varphi_\infty} \quad (\text{VIII.33})$$

Los valores de las propiedades materiales fueron extraídos de datos reométricos provenientes de la literatura [72]. Los resultados son los siguientes (véase la **Tabla VIII3**):

**Tabla VIII3.** Propiedades materiales a distintas concentraciones de CTAT.

Números adimensionales	$A_0 = k\lambda/\phi_0$	$A_\infty = k\lambda/\phi_\infty$	B
Conc. CTAT (wt. %)			
5%	0.0010	$1.51 \times 10^{-6}$	662.252
10%	0.0016	$6.6 \times 10^{-7}$	2459.02
15%	0.0008	$3.16 \times 10^{-7}$	2520.0
20%	0.00042	$1.47 \times 10^{-7}$	2857.14

Por ejemplo, en la simulación b de la **Figura VIII15** se observa que el número adimensional  $A_0$  es el mayor para una concentración de 10% wt. de CTAT, por lo que se infiere que presentará menos tixotropía, es decir, el plato a bajos esfuerzos en la pared, será el menor de los cuatro. El valor de la meseta a valores grandes del esfuerzo en la pared, está determinado por el número adimensional  $B = 662.252$ . Esto se puede verificar gráficamente en la **Figura VIII15**. Al disminuir el valor de  $A_0$ , el sistema presenta más tixotropía debido a que el plato a bajos esfuerzos en la pared aumenta.

El aumento del valor de B con la concentración implica que el sistema tiene una mayor capacidad de pérdida de puntos estructurales por lo que su fluidez aumenta. Los casos de las simulaciones c y d de la **Figura VIII15** son similares y su diferencia se debe al valor numérico de los grupos adimensionales antes mencionados.

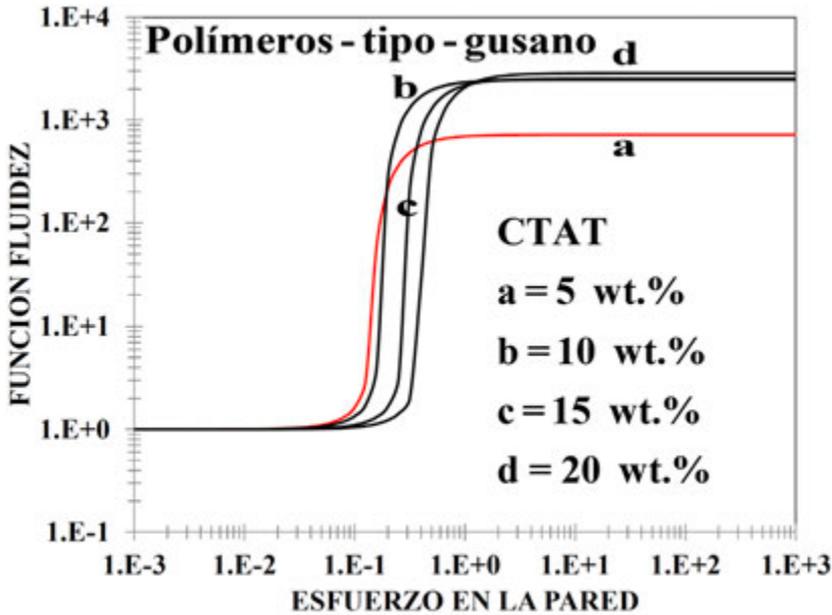


Figura VIII15. Fluidez adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional en función de la concentración de CTAT en el sistema.

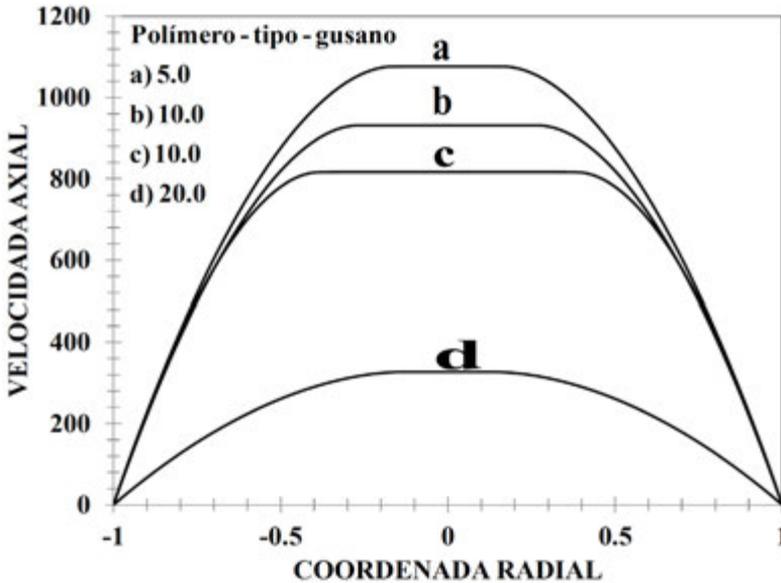
## VIII.8.2 Perfil de velocidades

La Figura VIII16 muestra los perfiles de velocidad axial vs la coordenada radial adimensional en función de la concentración de la muestra. Los valores utilizados en la simulación son los mismos que las **Tabla VIII3**. En la pared todas las simulaciones son cero, en el centro del tubo, la velocidad es máxima. En todos los casos, se observa un frente homogéneo en todas las muestras. En el caso de la mínima concentración, los números adimensionales  $A_0$  y  $B$  están determinadas en la **Tabla VIII3**. En la mínima concentración (5 %) el sistema presenta la mínima tixotropía de las cuatro muestras, y el mínimo valor del número adimensional  $B$ . Físicamente, la máxima velocidad en el sistema está determinada por un acoplamiento entre las propiedades estructurales, cinéticas y viscosas. Por otra parte, en la simulación del 10 % del polímero asociativo de la **Figura VIII16**, se observa un frente homogéneo de velocidades más pronunciado por efecto del incremento en la concentración. El efecto de aumentar la tixotropía y aumentar el valor del número  $B$  genera un aumento en el número de puntos estructurales a bajo y alto esfuerzo en la pared adimensional. Adicionalmente, al aumentar la tixotropía en el sistema, decreciendo el

valor del número  $A_0$ , se observa que los perfiles de velocidad axial son menores por efecto de los mecanismos estructurales en el sistema. Finalmente, en la simulación d de la **Figura VIII16** se observa que el frente homogéneo que se forma en el centro disminuye, debido a que el número adimensional B aumenta drásticamente a pesar de que  $A_0$  disminuye. Por lo anterior, vale la pena resaltar los siguientes puntos:

- a) Al aumentar la estructura por efecto de la concentración se favorecen los mecanismos de la tixotropía por efecto del aumento en los procesos estructurales y cinéticos.
- b) El aumento de la concentración, induce un frente homogéneo en el tubo asociado a los procesos acoplados tixotrópicos y de estructura.
- c) Al aumentar el valor del número adimensional B, el frente homogéneo que se forma por tixotropía decrece. En este punto, es interesante observar la simulación d de la **Figura VIII16**, en donde el número  $A_0$  es el menor de las cuatro muestras y el valor numérico de B de las cuatro concentraciones es el mayor, presenta el menor perfil de velocidad y el menor frente homogéneo de velocidades.

En este punto, se observa que la tixotropía tiene un efecto negativo sobre el perfil de velocidades, por lo que la concentración máxima del polímero asociativo y el perfil de velocidad disminuyen debido a la alta tixotropía. En contraste, el máximo perfil de velocidades, se obtiene al contenido mínimo del polímero asociativo. En la simulación d de la **Figura VIII16** se tiene la máxima estructura debido a que se tiene la máxima tixotropía ( $A_0 = 0.0024$ ), esta estructura se destruye por el flujo exhibido por la disminución de puntos estructurales debido a la fuerza motriz que deforma el fluido. Además, el valor máximo de la velocidad se desplaza a estados menos tixotrópicos, lo que implica una gran demanda de energía para los perfiles de velocidad. Finalmente, el valor del máximo está completamente determinado por un acoplamiento entre las propiedades cinética, viscosa y estructurales del modelo BMP.

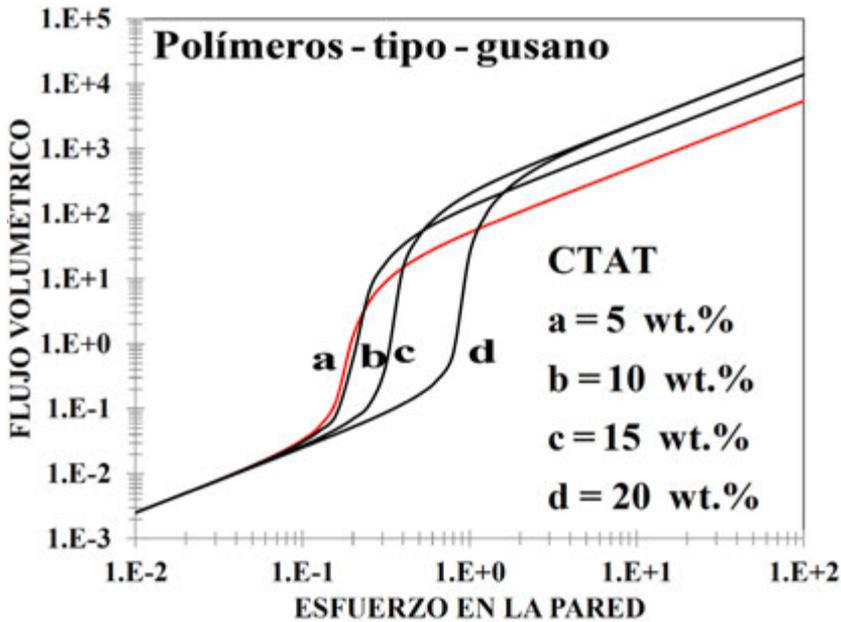


**Figura VIII.6.** Perfil de velocidades vs la coordenada radial en función de la concentración de CTAT.

### VIII.8.3 Flujo volumétrico

En la **Figura VIII.17** ilustra el flujo volumétrico adimensional vs esfuerzo en la pared en función de la concentración del sistema. En todas las simulaciones se observan dos zonas lineales a bajo y alto corte y una zona de transición tipo ley de potencia. En la **Figura VIII.17** se observa que, al aumentar la concentración, la zona lineal a esfuerzos en la pared bajos se extiende debido a que el número  $A_0$ , asociado a los procesos de disipación-cinéticos y estructurales, disminuye. En el caso anterior, la energía asociada a la cinética y estructuración es favorecida por lo que el material presenta transiciones de estructura a mayores esfuerzos en la pared. Nótese que el número adimensional  $B$  bajo esta concentración, es el mayor, es decir,  $B = 2857$ . Esto implica que el aumento en la concentración está asociado con los procesos estructurales a través del adelgazamiento. Por otra parte, cuando la muestra contiene una concentración del 5 %, la relación lineal entre el flujo volumétrico y el esfuerzo en la pared decrece, como se observa en la **Figura VIII.17**, es decir, al aumentar el número adimensional  $A_0$ , la zona lineal entre el flujo volumétrico y el esfuerzo decrece. En este caso, el valor numérico del esfuerzo en la pared,

para el cual el sistema pasa de estados de menor a mayor flujo volumétrico, es menor que aquel correspondiente a una mayor concentración. Estas relaciones particulares sólo son válidas en el régimen de concentraciones diluidas o semi-diluidas de la muestra del sistema complejo, ya que cuando la concentración aumenta hay muchos procesos estructurales y cinéticos que no pueden explicarse con esta formulación matemática y muchas veces se necesitarían modelos multimodales para poder obtener expresiones útiles.



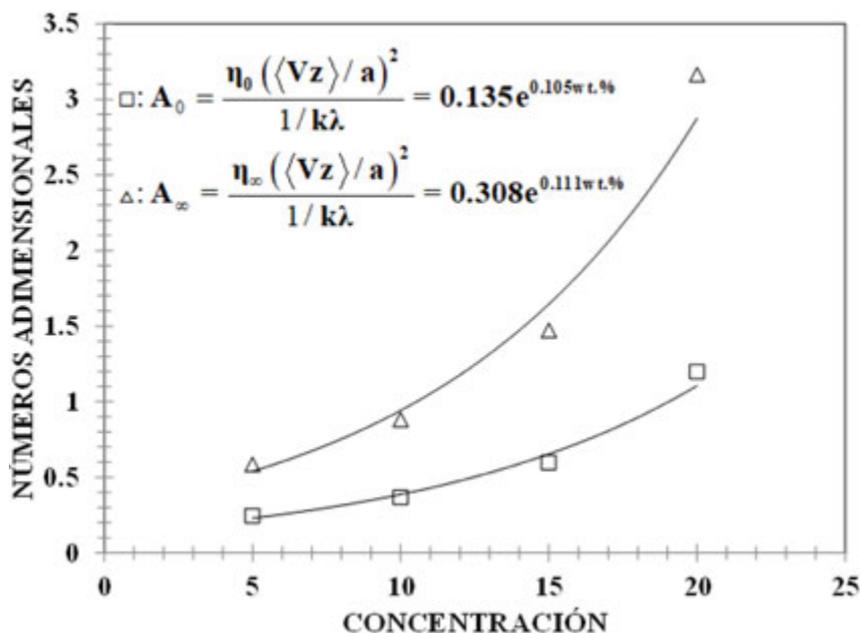
**Figura VIII7.** Flujo volumétrico adimensional vs el esfuerzo en la pared adimensional en función de la concentración de la muestra en el sistema.

Finalmente, en la **Figura VIII18** se observa la dependencia de los números adimensionales en función de la concentración del polímero asociativo. Se observa, que, al aumentar la concentración del sistema, el valor de los números adimensionales aumenta. El ajuste de los puntos experimentales muestra una dependencia de tipo exponencial de acuerdo a las Ecs. (VIII.34) y (VIII.35):

$$A_0 = \frac{\varphi_0^{-1} (\langle Vz \rangle / a)^2}{1/K\lambda} = 0.135 \text{Exp}[105 \text{wt.}\%] \quad (\text{VIII.34})$$

$$A_\infty = \frac{\varphi_\infty^{-1} (\langle Vz \rangle / a)^2}{1/K\lambda} = 0.308 \text{Exp}[111 \text{wt.}\%] \quad (\text{VIII.25})$$

Es claro que esta relación de números adimensionales sigue una tendencia exponencial y es válida solamente en el régimen de soluciones poliméricas diluidas y semi-diluidas. Soluciones poliméricas con mayor concentración, no siguen las expresiones exponenciales desarrolladas aquí. Para esto se tendría que modificar la teoría desarrollada en este capítulo.



**Figura VIII.8.** Dependencia de los números adimensionales en función de la concentración de CTAT.

### VIII.8.4 Factor de fricción

El factor de fricción fue calculado de acuerdo con su definición básica la cual relaciona los mecanismos viscosos con la energía cinética del fluido. En esta propuesta se demostró que el factor de fricción no newtoniano es un múltiplo del newtoniano y el factor de aumento o decremento del mismo está dada por la función viscosidad. El factor de fricción reducido, que describe los procesos de adelgazamiento o engrosamiento al corte se expresa mediante la Ec. (VIII.36):

$$f_{r0} = \frac{f_{\text{BMP}}}{f_{\text{N0}}} = \varphi_0^{*-1}(A_0, B) = \eta_0^*(A_0, B) \quad (\text{VIII.36})$$

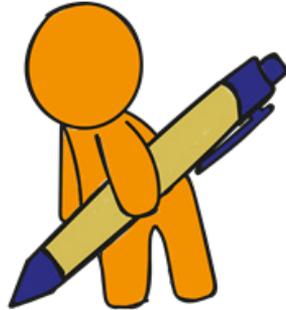
Y en el caso de los mecanismos de cedencia:

$$f_{r\infty} = \frac{f_{\text{BMP}}}{f_{\text{N}\infty}} = \varphi_\infty^{*-1}(B_1, B^{-1}) = \eta_\infty^*(B_1, B^{-1}) \quad (\text{VIII.37})$$

Es decir, el factor fricción depende de los números adimensionales  $A_0$ ,  $B$ ,  $B^{-1}$ ,  $B_1$ . Estos números controlan los mecanismos adelgazantes, engrosantes, tixotrópicos, reopéticos y de cedencia en el sistema, respectivamente. Nótese que los números  $B^{-1}$ ,  $B_1$  son independientes y su relación es lineal. El factor de fricción reducido es equivalente a la viscosidad aparente en el sistema, por lo tanto, su análisis es el mismo que el presentado anteriormente. Las aportaciones principales del factor de fricción serán retomadas en la sección de conclusiones y trabajo futuro.

## CAPÍTULO IX

# Conclusiones y trabajo futuro



Conclusiones



## IX.1 Conclusiones

En este trabajo se realizó el estudio de la reología y transferencia de momento de un polímero asociativo (CTAT), sometido a un gradiente de presión en la dirección de la velocidad (axial). Las condiciones de procesos en el sistema fueron: (a) Proceso en estado estacionario, (b) isotérmico, (c) fluido incompresible, (d) viscoelástico. El campo de velocidades en este estudio fue unidireccional. El flujo y la reología fueron caracterizados por la ecuación constitutiva de Bautista-Manero-Puig (BMP). Físicamente, este modelo describe el cambio estructural inducido por la evolución del flujo. Adicionalmente, el modelo BMP acopla la ecuación convectiva superior de Maxwell con una ecuación de tipo cinético que cuantifica la evolución de la estructura a través de los procesos de construcción y destrucción por efecto de corte. En su forma más simple, este modelo contiene 5 propiedades materiales las cuales enlistamos a continuación: (i) Viscosidad a alto y bajo corte  $[\phi_0, \phi_\infty]$ , (iii) El módulo elástico referente a la recuperación del material  $G_0$ , (iv)  $\lambda$  tiempo de reestructuración del sistema después de un periodo de deformación, (v)  $K_0$  puede ser interpretado como una constante cinética que describe la cinética física de puntos estructurales por efecto del corte. Los mecanismos que se simularon en este trabajo fueron los siguientes: (a) Adelgazamiento o engrosamiento al corte, que tiene que ver con el número de punto estructurales a bajo y alto corte. (b) Tixotropía y reopexia que relacionan los mecanismos estructurales y de flujo en el sistema, es decir, se obtiene las curvas de histéresis asociada a los procesos cinéticos-estructurales y disipativos. (c) Mecanismos de cedencia los cuales están relacionados con un número muy grande de puntos estructurales y el esfuerzo aplicado al sistema para romper la estructura y fluya el material, (d) Efecto de la concentración; esta se expresa indirectamente en el sistema a través de las propiedades materiales. Es evidente que, al aumentar la concentración, se incrementan los puntos estructurales y a su vez adquiere un incremento en sus propiedades viscoelásticas.

Para describir la naturaleza del sistema se emplearon los siguientes números adimensionales que definen los mecanismos de transferencia de momento y reología en el sistema de flujo. El primero de ellos es el número B (asociado al adelgazamiento y engrosamiento al corte) el cual se puede interpretar como una relación de estructura a alto y bajo corte. El segundo es el número  $A_0$  que está asociado a los mecanismos de tixotropía y reopexia, es decir, a los procesos de construcción y destrucción de la estructura. El tercero de ellos, es el  $B_1$ , el cual se conoce como número de Bingham que relaciona el esfuerzo de cedencia interno del material con el esfuerzo en la pared que se aplica por efecto del corte; este número describe la transición de un fluido ( $Bi = 0$ ) a un sólido ( $Bi = 1$ ). El cuarto y último número es el Weissenberg el cual representa las propiedades viscoelásticas del sistema. El

cual, a las condiciones presentadas en este trabajo, se calcula multiplicando la rapidez de deformación del sistema por el tiempo de relajación.

A partir de las suposiciones de estado estacionario, proceso isotérmico, fluido incompresible y utilizando las variables adimensionales, se obtuvieron expresiones cerradas para el esfuerzo cortante, función viscosidad y rapidez de deformación del modelo BMP en forma adimensional. A partir de la ecuación de momento se obtuvo una expresión para el esfuerzo cortante ( $\sigma_{zz}$ ). Expresando la rapidez de deformación en términos del esfuerzo cortante y los números adimensionales, se obtuvieron: (i) los perfiles de velocidad en el sistema, (ii) fluidez aparente, y (iii) flujo volumétrico y (iv) factor de fricción.

## IX.2 Perfil de velocidades

En general en todos los casos se observa un perfil parabólico, es decir que en las paredes la velocidad del fluido es cero, mientras que en el centro es máxima. Y el máximo queda determinado por un acoplamiento entre los mecanismos cinéticos, estructurales y viscosos. El efecto del número B sobre el perfil es aumentar los estados de velocidad ( $B \gg 1$ ), mientras que el caso opuesto ( $B \ll 1$ ) el perfil decrece. El efecto del número  $A_0$  es contribuir a los procesos cinético estructurales del fluido. Si  $A_0 = 1$  el fluido es Newtoniano, mientras que si  $A_0 \gg 1$ , el fluido es no newtoniano adelgazante o engrosante al corte.  $A_0$  está relacionado con el valor del esfuerzo en la pared para el cual el fluido experimenta cambios en la estructura, i.e. aumenta o disminuye el número de puntos estructurales.

## IX.3 Función fluidez aparente

La fluidez aparente es el inverso de la viscosidad. De acuerdo con el formalismo del modelo BMP se tiene dos tipos de fluideces. La primera describe los efectos adelgazantes, engrosantes, tixotrópicos y reopécticos a través de los números adimensionales  $A_0$  y B, y del esfuerzo en la pared que se aplica al sistema por efecto del gradiente de presión. En el caso de  $B \gg 1$ , el fluido experimenta una transición de estados de mayor a menor estructura, asociados a los mecanismos de adelgazamiento al corte. Si  $B = 1$  se tiene el mismo número de punto estructurales a alto, bajo y medianos cortes el (fluido Newtoniano). Para  $B \gg 1$  el fluido experimenta estados de menor a mayor estructura por efecto de corte. físicamente, se tiene una estructura más compacta (enredada) lo que induce un mayor número de entrecruzamientos físicos asociados a los mecanismos engrosantes al corte.

Si  $A_0$  es igual a cero, i.e.  $A_0 = 0$ , el sistema a bajo y alto corte presenta la misma estructura por lo que, el fluido es newtoniano. Si  $A_0 \ll 1$ , el valor del esfuerzo en la pared en donde el sistema cambio de estados de mayor a menor estructura (adelgazamiento al corte) o, de menor a mayores entrecruzamientos físicos (engrosamiento al corte) es mayor. Si  $A_0 \gg 1$ , el sistema a menores esfuerzos en la pared presenta cambios en la estructura (adelgazante o engrosante).

La fluidez en el esfuerzo de cedencia es escalada con la fluidez a alto corte, debido a que la fluidez a corte bajo tiende a infinito (se comporta como sólido). En este caso, la fluidez depende de dos números, el inverso del número  $B$ , i.e.  $B^{-1}$ , el cual es una relación entre la fluidez a bajo y alto corte. Este número nos permite analizar el caso de fluidez a bajo corte iguala cero. i.e.  $\phi_0 = 0$  (viscosidad infinita). En este caso, el sistema responde como un sólido, es decir el número de Bingham,  $B_i = 1$ , mientras que, el caso opuesto  $B_i = 0$ , el sistema se comporta como fluido. En este caso, el inverso  $B^{-1} = 1$ . La relación entre el inverso de  $B$  y el número de Bingham es lineal.

## IX.4 Flujo volumétrico

El flujo volumétrico del modelo BMP se puede expresar como el producto de la fluidez del BMP con el flujo volumétrico newtoniano. Esta fluidez, se puede expresar como una desviación del comportamiento newtoniano. El flujo volumétrico depende de las propiedades materiales a través de los grupos adimensionales antes expuestos, i.e.  $Q = Q(A_0, B)$  para el adelgazamiento o engrosamiento al corte, de  $Q = Q(B^{-1}, B_i)$  para el mecanismo de cedencia. En general los mecanismos adelgazantes y engrosantes incrementan o decrecen el valor numérico del flujo volumétrico y el valor de  $A_0$ , solamente está relacionado con el esfuerzo en la pared asociado al gradiente de presión para el cual, el sistema experimenta un cambio en la estructura (adelgazante o engrosante). Por otra parte, el flujo volumétrico en función del número de Bingham en sistemas con esfuerzo de cedencia es mayor a  $B_i = 0$  y conforme este aumenta el sistema experimenta una transición de fluido viscoso hacia solido elástico por efecto de un aumento de puntos estructurales, para  $B \gg 1$  el sistema no fluye.

## IX.5 Factor de fricción

El factor de fricción es un cociente entre dos tipos de mecanismos. El primero de ellos está asociado al esfuerzo cortante en la pared y el segundo a la energía cinética del sistema (fluido bulto). En este trabajo, se demostró que el factor de fricción de un fluido no-newtoniano es el producto de la viscosidad aparente no newtoniana multiplicada por el factor de fricción newtoniano, i.e.:

$$f_N = \frac{16}{\text{Re}} \quad (\text{IX.1})$$

El factor de fricción generalizado para fluidos no-newtonianos toma la forma:

$$f_{r0} = \frac{f_{\text{BMP}}}{f_{\text{No}}} = \eta^*(A_0, B) \quad (\text{IX.2})$$

Por lo que la relación entre el factor de fricción no newtoniano y el newtoniano es la función viscosidad que es el inverso de la fluidez. El subíndice 0 del factor de fricción reducido corresponde al caso donde se analizan los procesos de adelgazamiento o engrosamiento, tixotropía o reopexia en el sistema. Por otra parte, los procesos en donde se analiza la transición de fluido a sólido, el factor de fricción debe ser escalado con la viscosidad a alto corte,

$$f_{re} = \frac{f_{\text{BMP}}}{f_{\text{Ne}}} = \eta^*(B_1, B^{-1}) \quad (\text{IX.3})$$

El comportamiento del factor de fricción, es similar a lo estudiado en las simulaciones de la fluidez. Las cuales son enlistadas a continuación:

- a) El factor de fricción es una función de los mecanismos adelgazantes o engrosantes al corte en función del esfuerzo en la pared. Si el número adimensional  $B \gg 1$ , el fluido experimenta una transición de estados de menor a mayor número de puntos estructurales por efecto del flujo. En este punto, el factor de fricción disminuye por efecto de la viscosidad aparente.
- b) Si  $B \ll 1$ , el sistema experimenta un aumento en el número de puntos estructurales inducido por una estructura más enredada y compacta. En este punto el factor de fricción aumenta por efecto de los mecanismos engrosantes al corte.

- c) El número adimensional  $A_0$  relaciona los mecanismos tixotrópicos y de reopexia. El valor de este número está relacionado a la energía necesaria para desestructurar el sistema. Por ejemplo, si  $A_0$  es menor a la unidad  $A_0 \ll 1$ , el sistema necesita un mayor esfuerzo en la pared para cambiar su estructura, por lo que, el factor de fricción se modifica a valores mayores del esfuerzo en la pared. Por otra parte, si  $A_0 \gg 1$ , el factor de fricción cambia a menores valores del esfuerzo en la pared, por lo que se desvía del comportamiento no-newtoniano.
- d) El factor de fricción para un fluido con esfuerzo de cedencia, está determinado por dos números adimensionales. Uno de ellos el inverso del número  $B$ , i.e.  $B^{-1}$ , el cual nos da la posibilidad de analizar el caso de viscosidad infinita, es decir fluidez cero. Estos dos números están ligados a través de una dependencia lineal, i.e.

$$B^{-1}(B_i) = 1 - B_i \quad \text{(IX.4)}$$

- e) En el caso de número de Bingham igual a cero, el sistema se comporta como un fluido, mientras que, para un número de Bingham igual a la unidad, i.e.  $B_i = 1$ , el fluido se comporta como un sólido elástico de memoria perfecta.
- f) En el caso del factor de fricción cuando el número de Bingham es cero, el sistema se comporta como un fluido de viscosidad constante igual a  $\eta_{\infty}$ . En este contexto la fluidez no newtoniana es igual a uno, por lo que el factor de fricción no-newtoniano es igual al newtoniano.
- g) En el caso, de que el Bingham sea igual a la unidad, i.e.  $B_i = 1$ , el sistema presenta una viscosidad tana alta, que se comporta como un sólido de Hooke. En este punto, el factor de fricción muestra un comportamiento infinito debido a que el sistema presenta la mayor cantidad de punto estructurales en el sistema.

## IX.6 Trabajo futuro

Una continuación natural de este trabajo, es incluyendo geometrías diferentes, por ejemplo, sistemas anulares y el flujo en cascarones esféricos. El efecto de la geometría es importante, porque cambia las ecuaciones analíticas a resultados numéricos. Un ejemplo de esto, es si se cambiase la geometría de esta investigación por una rendija, el valor del flujo volumétrico se debe de evaluar numéricamente. Otro camino es en la dirección de incluir nuevos mecanismos. Por ejemplo, uno de los fenómenos más estudiados e interesantes debido a los efectos que tiene en la viscosidad es el flujo bandeado. El flujo

bandeado, en el modelo BMP, se genera cuando la constante cinética depende de la rapidez de deformación:

$$K \left( \frac{\partial V_z}{\partial r} \right) = k_0 \left( 1 + \lambda_B \frac{\partial V_z}{\partial r} \right) \quad (\text{IX.5})$$

El tiempo  $\lambda_B$  es un tiempo característico asociado al flujo bandeado. Este simple cambio induce a una ecuación cúbica al escalar con la rapidez de deformación y debe ser resuelta en términos de las propiedades materiales de este. Otro camino, es estudiar este tipo de sistemas sometidos a diferentes tipos de flujos: (i) extensional uniaxial, (ii) flujo oscilatorio a baja y alta amplitud, (iii) flujo por compresión, (iv) Flujo pulsátil de baja y alta amplitud, respectivamente. Otra línea de investigación sería estudiar ecuaciones acopladas de momento acopladas con calor o masa. Finalmente, estudiar sistemas que presenten al menos dos componentes del vector velocidad en diferentes geometrías de flujo.

Finalmente, el modelo más simple de Bautista-Manero-Puig contiene la necesaria física para describir sistemas complejos en término de los diferentes mecanismos involucrados, a través de las propiedades materiales del sistema. Las propiedades materiales, del modelo BMP, pueden ser calculados con experimentos reológicos en estado estacionario y no estacionario. El modelo BMP puede reproducir los diferentes tipos de flujo: (i) Cortante, (ii) Extensional, (iii) Oscilatorio a baja amplitud, (iv) Pulsátil de baja amplitud.

Este trabajo y los resultados obtenidos en este, representan una búsqueda constante en obtener resultados analíticos en geometrías simples (capilares, rendijas), y que sean punto de partida en problemas más complejos.

## IX.7 Comentarios finales del Libro

En este trabajo se realizó el estudio de la reología y la transferencia de momento de un polímero asociativo, sometido a un gradiente de presión en la dirección de la velocidad (axial). Las condiciones de procesos en el sistema fueron: (a) Proceso en estado estacionario, (b) isotérmico, (c) fluido incompresible, (d) fluido viscoelástico. El campo de velocidades en este estudio fue unidireccional. El flujo y la reología fueron caracterizados por la ecuación constitutiva BMP. Físicamente, este modelo describe el cambio de estructura inducido del por el cambio del flujo. Este modelo acopla la ecuación convectiva superior de Maxwell con una de tipo cinético que cuantifica la evolución de la estructura a través de los procesos de construcción y destrucción por efecto de corte. En

su forma más simple, este modelo contiene 5 propiedades materiales las cuales enlistamos a continuación: (i) Viscosidad a alto y bajo corte  $\{\phi_0, \phi_\infty\}$ , (iii) El módulo elástico referente a la recuperación del material  $G_0$ , (iv)  $\lambda$  tiempo de reestructuración del sistema después de un periodo de deformación, (v)  $K_0$  puede ser interpretado como una constante cinética que describe la cinética física de puntos estructurales por efecto del corte. Los mecanismos que se simularon y reportaron en este libro son los siguientes: (a) Adelgazamiento o engrosamiento al corte, que tiene que ver con el número de punto estructurales a bajo y alto corte. (b) Tixotropía y reopexia que relaciona los mecanismos estructurales y de flujo en el sistema, es decir, se obtiene las curvas de histéresis asociada a los procesos cinético-estructurales y disipativos. (c) **Mecanismos de cedencia los cuales están relacionados con un número muy grande de puntos estructurales y el esfuerzo aplicado al sistema para romper la estructura y fluya el material.** (d) Efecto de la concentración. Esta se expresa indirectamente en el sistema a través de las propiedades materiales. Es evidente que, al aumentar la concentración, se incrementan los puntos estructurales y a su es adquiere un incremento en sus propiedades viscoelásticas.

La asunción de fluido incompresible y utilizando las variables adimensionales, se obtuvieron expresiones cerradas (analíticas) para el esfuerzo cortante, función viscosidad y rapidez de deformación del modelo BMP en forma adimensional. A partir de la ecuación de momento se obtuvo una expresión para el esfuerzo cortante  $\tau_r$ . Al expresar la rapidez de deformación en términos del esfuerzo cortante y los números adimensionales, se obtuvieron: (i) los perfiles de velocidad en el sistema, (ii) fluidez aparente, y (iii) flujo volumétrico y (iv) factor de fricción.

# Apéndice



## IX.8 Apéndice A

En este apéndice se deduce la velocidad axial del modelo BMP para un cilindro, postulando un flujo en estado estacionario y un flujo homogéneo; la rapidez de deformación adimensional, toma la siguiente forma:

$$\dot{\gamma}_{rz}^* = - \frac{A_0 B \left( \sigma_{w0}^* r^* \right)^2 - 1 + \sqrt{\left( A_0 B \left( \sigma_{w0}^* r^* \right)^2 - 1 \right)^2 + 4 A_0 \left( \sigma_{w0}^* r^* \right)^2}}{2 A_0 \left( \sigma_{w0}^* r^* \right)} \quad (0.1)$$

Proponiendo el siguiente cambio de variable en el sistema

$$U = A_0 \left( \sigma_{w0}^* r^* \right)^2 ; dU = 2 A_0 \sigma_{w0}^{*2} dr^* \quad (0.2)$$

Y calculando su diferencial

$$dU = 2 A_0 \sigma_{w0}^{*2} dr^* \quad (0.3)$$

La Ec. (0.1) toma la forma:

$$\dot{\gamma}_{rz}^* = - \frac{BU - 1 + \sqrt{(BU - 1)^2 + 4U}}{2 A_0 \left( \sigma_{w0}^* r^* \right)} \quad (0.4)$$

Finalmente, al integrar la expresión (0.3) se tiene lo siguiente:

$$V_z^* (r^*) = \frac{1}{4 A \sigma_w^*} \left( BU - \text{Ln}|U| + B \int \frac{\sqrt{(U - \varphi_B)^2 + 4\varphi_B^2 U}}{U} dU \right) + C \quad (0.5)$$

La Ec. (0.5) puede ser expresada como:

$$V_z^* (r^*) = \frac{1}{4 A \sigma_w^*} (BU - \text{Ln}|U| + BI) + C \quad (0.6)$$

En donde la integral indefinida I, se define como:

$$I = \int \frac{\sqrt{(U - \varphi_B)^2 + 4\varphi_B^2 U}}{U} dU = \int \frac{\sqrt{(U + \delta)^2 + \delta_1^2}}{U} dU \quad (0.7)$$

Donde  $\delta$  y  $\delta_1$  se han escrito como:

$$\begin{aligned}\delta_1^2 &= \varphi_B^2 - (\varphi_B (2\varphi_B - 1))^2 = (\varphi_B + \varphi_B (2\varphi_B - 1))(\varphi_B - \varphi_B (2\varphi_B - 1)) = 4\varphi_B^3 (1 - \varphi_B) \\ \delta^2 &= (\varphi_B (2\varphi_B - 1))^2\end{aligned}\quad (0.8)$$

Haciendo el siguiente cambio de variable:

$$U + \delta = \delta_1 \tan \theta \quad (0.9)$$

La Ec. (0.7) toma la forma:

$$\begin{aligned}I &= \delta_1 \int \frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{\sin \theta d\theta}{\left(1 - (1 + (\delta/\delta_1)^2) \cos^2 \theta\right)} \\ &+ \delta \int \frac{1}{1 - \sin^2 \theta} \frac{\cos \theta d\theta}{\left((1 + (\delta/\delta_1)^2) \sin^2 \theta - (\delta/\delta_1)^2\right)}\end{aligned}\quad (0.10)$$

Con el fin de resolver las integrales, se propone el siguiente cambio de variable, seguido del uso de fracciones parciales:

$$x_1 = \cos \theta; x_2 = \sin \theta \quad (0.11)$$

Las integrales (0.10) toman la forma:

$$I_1 = \delta_1 \left( \int \frac{1}{x_1^2} \frac{dx_1}{\Delta_1^2 x_1^2 - 1} \right) + \delta \left( \int \frac{1}{1 - x_2^2} \frac{dx_2}{\Delta_1^2 x_2^2 - \Delta_2^2} \right) \quad (0.12)$$

En donde las siguientes expresiones han sido definidas:

$$\Delta_1^2 = 1 + (\delta/\delta_1)^2; \Delta_2^2 = (\delta/\delta_1)^2 \quad (0.13)$$

Las integrales de la primera expresión pueden ser resueltas en términos de funciones analíticas elementales.

$$I_1 = \int \left( \frac{c_1}{x_1} + \frac{c_2}{x_1^2} + \frac{c_3}{\Delta_1 x_1 - 1} + \frac{c_4}{\Delta_1 x_1 + 1} \right) dx_1 = \frac{1}{x_1} + \frac{\Delta_1}{2} \ln \left| \frac{\Delta_1 x_1 - 1}{\Delta_1 x_1 + 1} \right| \quad (0.14)$$

De las Ecs. (0.8) y (0.9) se tiene lo siguiente:

$$\delta_1 B I_1 = \sqrt{(BU+1)^2 + 4U} + \frac{1}{2} \operatorname{Ln} \left| \frac{1 - \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}}{1 + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}} \right| \quad (0.15)$$

La segunda integral toma la forma:

$$I_2 = \int \left( \frac{d_1}{1-x_2} + \frac{d_2}{1+x_2} + \frac{d_3}{\Delta_1 x_2 - \Delta_2} + \frac{d_4}{\Delta_1 x_2 + \Delta_2} \right) dx_2 \quad (0.16)$$

La segunda integral es calculada en la misma forma:

$$I_2 = \frac{1}{2(\Delta_1^2 - \Delta_2^2)} \operatorname{Ln} \left| \frac{1+x_2}{1-x_2} \right| + \frac{\Delta_1 / \Delta_2}{2(\Delta_1^2 - \Delta_2^2)} \operatorname{Ln} \left| \frac{\Delta_1 x_2 - \Delta_2}{\Delta_1 x_2 + \Delta_2} \right| \quad (0.17)$$

De las Ecs. (0.9) y (0.10) se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} B \delta I_2 &= \frac{\delta}{2} B \operatorname{Ln} \left| \frac{\sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} + U + \delta}{\sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} - (U+\delta)} \right| \\ &+ \frac{1}{2} \left( \sqrt{\delta_1^2 + \delta^2} \right) B \operatorname{Ln} \left| \frac{\sqrt{\delta_1^2 + \delta^2} (U+\delta) - \delta \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2}}{\sqrt{\delta_1^2 + \delta^2} (U+\delta) + \delta \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2}} \right| \end{aligned} \quad (0.18)$$

Recolectando todos los términos de integrales  $I_1$  y  $I_2$

$$V_{z(0)}^* = \frac{1}{4\Lambda\sigma_w^*} \left( \begin{aligned} &BU - \operatorname{Ln}|U| + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U} + \frac{1}{2} \operatorname{Ln} \left| \frac{1 - \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}}{1 + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}} \right| \\ &+ \frac{\delta}{2} B \operatorname{Ln} \left| \frac{\sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} + U + \delta}{\sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} - (U+\delta)} \right| \\ &+ \frac{1}{2} \left( \sqrt{\delta_1^2 + \delta^2} \right) B \operatorname{Ln} \left| \frac{\sqrt{\delta_1^2 + \delta^2} (U+\delta) - \delta \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2}}{\sqrt{\delta_1^2 + \delta^2} (U+\delta) + \delta \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2}} \right| \end{aligned} \right) + C \quad (0.19)$$

Simplificando la expresión anterior:

$$Vz_{(0)}^* = \frac{1}{4A\sigma_w^*} \left( \begin{aligned} & BU - \text{Ln}|U| + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U} + \frac{1}{2} \text{Ln} \left| \frac{1 - \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}}{1 + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}} \right| \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{2-B}{B} \right) \text{Ln} \left| \frac{2+B(U-1) + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}}{-2-B(U+1) + \sqrt{(BU+1)^2 + 4U}} \right| \\ & + \frac{1}{2} \text{Ln} \left| \frac{BU + \left( \frac{2-B}{B} \right) - (2-B)\sqrt{(BU+1)^2 + 4U}}{BU + \left( \frac{2-B}{B} \right) + (2-B)\sqrt{(BU+1)^2 + 4U}} \right| \end{aligned} \right) + C \quad (0.20)$$

Finalmente, simplificando se obtiene el perfil de velocidades adimensional para el modelo BMP:

$$Vz_{(0)}^*(A, B, \sigma_w^*, U) = \frac{1}{4A\sigma_w^*} \left\{ \begin{aligned} & -BU - \sqrt{(BU-1)^2 + 4U} + \text{Log} \left| 1 + (2-B)U + \sqrt{(BU-1)^2 + 4U} \right| \\ & + \left( \frac{B-2}{B} \right) \text{Log} \left| 2 + B^2U + B \left( \sqrt{(BU-1)^2 + 4U} - 1 \right) \right| \end{aligned} \right\} \quad (0.21)$$

## IX. 9 Apéndice B

### IX.9.1 Deducción del flujo volumétrico en un cilindro para el modelo BMP

En este Apéndice se presenta el cálculo general de la velocidad de flujo del modelo BMP. Al sustituir el esfuerzo cortante y la rapidez de deformación del modelo BMP en la expresión general del flujo volumétrico, se obtiene la siguiente expresión:

$$Q_0^* = \frac{1}{2A_0\sigma_{w0}^*} \int_0^1 \left( A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1 + \sqrt{\left( A_0 B (\sigma_{w0}^* r^*)^2 - 1 \right)^2 + 4A_0 (\sigma_{w0}^* r^*)^2} \right) r^* dr^* \quad (0.22)$$

Al realizar los cambios de variables usados en el apéndice A. El flujo volumétrico está dado por la expresión:

$$Q_0^* = \frac{1}{4A_0^2\sigma_{w0}^{*3}} \int_0^{A_0\sigma_{w0}^{*2}} \left( BU - 1 + \sqrt{(BU - 1)^2 + 4U} \right) dU = \frac{1}{4A_0^2\sigma_w^{*3}} \left( \frac{A_0^2 B}{2} \sigma_{w0}^{*4} - A_0^2 \sigma_{w0}^{*2} + BI \right) \quad (0.23)$$

Resolviendo la integral anterior:

$$I = \int_0^{A_0\sigma_{w0}^{*2}} \left( \sqrt{(U - \varphi_B)^2 + 4\varphi_B^2 U} \right) dU \quad (0.24)$$

El integrando de la (0.24) se expresa de la siguiente manera

$$\begin{aligned} & \sqrt{(U - \varphi_B)^2 + 4\varphi_B^2 U} \\ &= \sqrt{U^2 + 2\varphi_B (2\varphi_B - 1)U + (\varphi_B (2\varphi_B - 1))^2 + \varphi_B^2 - (\varphi_B (2\varphi_B - 1))^2} \end{aligned} \quad (0.25)$$

Las constantes están dadas por:

$$\begin{aligned} \delta_1^2 &= \varphi_B^2 - (\varphi_B (2\varphi_B - 1))^2 = (\varphi_B + \varphi_B (2\varphi_B - 1))(\varphi_B - \varphi_B (2\varphi_B - 1)) = 4\varphi_B^3 (1 - \varphi_B) \\ \delta^2 &= (\varphi_B (2\varphi_B - 1))^2; \delta_1^2 + \delta^2 = \varphi_B^2 \end{aligned} \quad (0.26)$$

Sustituyendo las definiciones anteriores en la integral, tenemos:

$$I = \int_0^{A_0\sigma_{w0}^{*2}} \left( \sqrt{(U + \delta)^2 + \delta_1^2} \right) dU \quad (0.27)$$

Aplicando el mismo cambio de variables en la integral, i.e,  $u + \delta = \delta_1 \tan(\theta)$ ;  $dU = \delta_1 \sec^2 \theta$ , Obtenemos:

$$I = \int_0^{A_0 \sigma_{w0}^2} \left( \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} \right) dU = \delta_1^2 \int_0^{A_0 \sigma_{w0}^2} \text{Sec}^3 \theta d\theta = \frac{1}{2} \left( \text{Sec} \theta \text{Tan} \theta + \text{Ln} |\text{Sec} \theta + \text{Tan} \theta| \right) \quad (0.28)$$

La última integral se puede calcular directamente utilizando una integración cíclica parcial, de acuerdo con el siguiente cambio de variable  $U = \text{Sec} \theta$ ;  $dV = \text{Sec}^2 \theta d\theta$ . El resultado de esta sustitución genera:

$$I = \int_0^{A_0 \sigma_{w0}^2} \left( \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} \right) dU = \delta_1^2 \int_0^{A_0 \sigma_{w0}^2} \text{Sec}^3 \theta d\theta = \frac{1}{2} \left( \text{Sec} \theta \text{Tan} \theta + \text{Ln} |\text{Sec} \theta + \text{Tan} \theta| \right) \quad (0.29)$$

La expresión anterior se puede expresar como:

$$I = \delta_1^2 \int_0^{A_0 \sigma_{w0}^2} \text{Sec}^3 \theta d\theta = \frac{1}{2} \left( \frac{(U+\delta) \sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} - \delta \sqrt{\delta^2 + \delta_1^2}}{\delta^2 + \delta_1^2} + \delta_1^2 \text{Ln} \left| \frac{\sqrt{(U+\delta)^2 + \delta_1^2} + U + \delta}{\sqrt{\delta^2 + \delta_1^2} + \delta} \right| \right) \quad (0.30)$$

Insertando la Ec. (0.30) en la expresión general de la velocidad de flujo (0.5) y cambiando la variable U en términos de los números adimensionales y el esfuerzo en la pared se obtiene la solución analítica para el flujo volumétrico (véase la Ec. (0.22)). Es importante mencionar que la variable de control es la velocidad de flujo y da como resultado una ecuación algebraica no lineal  $\Omega: R^3 \rightarrow R^1$ ;  $\Omega[A_0, B, \sigma_{w0}] = Q_{RMP}[A_0, B, \sigma_{w0}] - Q_N^*[A_0, B, \sigma_{w0}]$ . Dados los números  $[A_0, B]$  de los datos reométricos y el índice de flujo  $Q[A_0, B, \sigma_{w0}^*]$ , el gradiente de presión puede calcularse usando un producto iterativo estándar tal como, por ejemplo, el método de Newton-Rhapson:

$$p_0^* - p_L^* = \int_0^{L^*} \sigma_{w0}^* dz^* = -\frac{1}{2} \int_0^{L^*} \nabla^* p^* dz^* \quad (0.31)$$



# Nomenclatura



## Lista de símbolos

$a$	Longitud característica asociada al radio del capilar [m]
$G_0$	Modulo elástico [Pa]
$K$	Constante cinética [1/Pa]
$L$	Longitud del capilar [m]
$N_1$	Primera diferencia de esfuerzos normales [Pa]
$N_2$	Segunda diferencia de esfuerzos normales [Pa]
$Q$	Flujo volumétrico [m <sup>3</sup> /s]
$r$	Coordenadas radial
$z$	Coordenada axial
$V_z$	Componente axial del vector velocidad [m/s]
$\langle V_z \rangle$	Velocidad promedio [m/s]
$dV_z/dr$	Rapidez de deformación rz [1/s]

## Letras griegas

$\eta$	Función viscosidad [Pa s]
$\eta_0$	Viscosidad a baja rapidez de corte [Pa s]
$\eta_\infty$	Viscosidades a alta rapidez de corte [Pa s]
$\phi$	Función fluidez [1/Pas]

## Letras griegas

$\phi_0$	Fluidez a rapidez de deformación baja [1/Pa·s]
$\phi_{app}$	Fluidez aparente [1/Pas]
$\phi_\infty$	Fluidez a rapidez de deformación alta [1/Pa·s]
$\dot{\gamma}_{rz}$	Rapidez de deformación [ $s^{-1}$ ]
$\lambda$	Tiempo de reestructuración[s]
$\lambda_0$	Tiempo de relajación de Maxwell a baja rapidez de corte [s]
$\lambda_\infty$	Tiempo de relajación de Maxwell a alta rapidez de corte [s]
$\sigma_{rz}$	Componente rz del tensor de esfuerzos [Pa]
$[\sigma_{rr}, \sigma_{\theta\theta}, \sigma_{zz}]$	Componentes normales del tensor de esfuerzos [Pa]
$\sigma_w$	Esfuerzo en la pared [Pa]
$\theta$	Coordenada angular
$\rho$	Densidad del fluido [ $m^3/s$ ]

## Vector, diádica y tensores

$\sigma$	Tensor de esfuerzo cortante [Pa]
$\mathbf{V}$	Vector velocidad [m/s]
$\mathbf{V} \otimes \mathbf{V}$	Producto diádico de la velocidad [ $m^2/s^2$ ]
$\mathbf{D}$	Tensor rapidez de deformación [1/s]
$\mathbf{f}$	Fuerzas de volumen [N/m <sup>3</sup> ]
$\mathbf{W}$	Tensor de vorticidad [1/s]
$\nabla \mathbf{V}$	Tensor gradiente de velocidad [1/s]
$\nabla \mathbf{V}^T$	Transpuesta del tensor gradiente de velocidad [1/s]
$\mathbf{g}$	Aceleración de la gravedad [ $m^2/s$ ]

## Variables adimensionales

$V_z^*$	Velocidad axial [1]
$P^*$	Gradiente de presión [1]
$r^*$	Coordenada radial [1]
$z^*$	Coordenada axial [1]
$Q^*$	Flujo volumétrico [1]
$\varphi^*$	Función fluidez [1]
$\eta^*$	Función viscosidad [1]
$\sigma_{rz}^*$	rz-Componente del tensor de esfuerzo cortante [1]
$[\sigma_{rr}^*, \sigma_{\theta\theta}^*, \sigma_{zz}^*]$	Componentes de tensor de esfuerzo normal [1]

## Otros símbolos

$()^T$	Transposición de una matriz [1]
$\nabla$	Operador gradiente [ $m^{-1}$ ]
$\nabla \cdot$	Operador divergencia [ $m^{-1}$ ]
$\nabla^2$	Operador Laplace [ $m^{-2}$ ]
$\Pi_D$	Segundo invariante del tensor de esfuerzo cortante [1/s]
$\overset{\vee}{\chi}$	Derivada codeformacional del tensor $\chi$ [1/s]

## Números adimensionales

$A_0$	Relación cinético-estructural a baja rapidez de corte [1]
$A_\infty$	Relación cinético-estructural a alta rapidez de corte [1]
B	Viscosidades de fluidez [1]
Bi	Número Bingham [1]
$We_0$	Weissenberg escalado con la viscosidad a corte bajo [1]
$We_\infty$	Weissenberg escalado con la viscosidad a corte alto [1]



# Glosario



- Deformación:** Cambio de posición de un punto material a otro.
- Ecuación constitutiva:** Ecuación que relaciona las variables dinámicas en un sistema (Rapidez de deformación, Esfuerzo, Deformación)
- Ecuación de continuidad:** Ecuación diferencial parcial que representa la conservación de materia en un sistema físico.
- Ecuación de movimiento:** Segunda ley newton aplicada aun medio continuo.
- Esfuerzo en la pared:** Esfuerzo evaluado en la pared.
- Estado estacionario:** Estado en el que ninguna propiedad dinámica del sistema depende del tiempo.
- Fluido:** Es aquel que al aplicarle un esfuerzo cortante sufre una deformación continua e irreversiblemente.
- Fluido biológico:** Son las diferentes excreciones y secreciones que provienen del organismo.
- Fluidos complejos:** Son aquellos que presentan comportamiento reológico en estado estacionario y no estacionario.
- Flujo cortante:** Flujo que se aplica una fuerza tangencial al sistema que se deforma continua e irreversiblemente.
- Flujo homogéneo:** Es el flujo en la cual las propiedades del sistema no dependen de la posición.
- Fluido incompresible:** Fluido que tiene una densidad constante.
- Fluido Newtoniano:** Son aquellos donde la viscosidad muestra una relación lineal entre el esfuerzo cortante y la velocidad de deformación.

- Fluido no-Newtoniano:** La viscosidad no muestra una relación lineal entre el esfuerzo cortante y la velocidad de deformación.
- Flujo oscilante:** Es el flujo que se origina cuando un plato oscila a una función periódica.
- Flujo pulsátil:** Flujo asociado a un gradiente de presión pulsátil representado por una función matemática estocástica.
- Fluido viscoelástico:** Es aquel fluido que tiene una contribución viscosa y otra elástica.
- Flujo volumétrico:** Volumen por unidad de tiempo.
- Frecuencia angular:** Se refiere a la frecuencia del movimiento circular expresada en proporción del cambio de ángulo.
- Función de transferencia:** Relaciona la variable de entrada y salida en un estado dinámico.
- Función estocástica:** Función probabilística que evoluciona en el tiempo.
- Gradiente:** Operador matemático espacial que físicamente describe los cambios de la propiedad respecto al espacio.
- Modelo de Jeffreys:** Ecuación geológica viscoelástico lineal que acopla un solvente con un polímero.
- Modelo de Maxwell:** Ecuación constitutiva que describe el estado viscoelástico de un sistema en el régimen de rapidez de deformación bajas (viscoelasticidad lineal).
- Módulo elástico:** Está asociado con la energía almacenada en el material, y se mide en pascal.
- Módulo viscoso:** Está asociada con la energía disipada por el material, y se mide en pascal.
- Módulo complejo:** Es el módulo del vector obtenido como suma de las contribuciones de los módulos elásticos y viscosos.
- Rapidez de deformación:** Rapidez con la que se deforma un fluido.



<b>Sangre:</b>	Fluido biológico que presenta dos fases y que es viscoelástico.
<b>Reología:</b>	Ciencia que estudia el flujo de materia y su deformación.
<b>Tensor de esfuerzo:</b>	Es una matriz simétrica de nueve elementos (3x3) en el cual se describe el estado de las fuerzas en un elemento de control.
<b>Tiempo de relajación:</b>	Es el tiempo que tarda el sistema en alcanzar un estado de equilibrio después de un periodo.
<b>Tiempo de retardo:</b>	Es el tiempo en el que tarda el material en llegar al equilibrio debido a la aplicación de un esfuerzo cortante.
<b>Velocidad promedio:</b>	Es la velocidad axial promediada a través del área de flujo.
<b>Viscoelasticidad lineal:</b>	Es la región a bajas deformaciones, en donde el fluido presenta repuestas viscosas y elásticas.
<b>Viscoelasticidad no lineal:</b>	Es la región a medias y altas deformaciones, en donde el fluido presenta repuestas viscosas y elásticas.
<b>Viscosidad:</b>	Es una medida de la resistencia a fluir de un material.



# Bibliografía



1. **Bautista, F., et al.**, *Understanding thixotropic and antithixotropic behavior of viscoelastic micellar solutions and liquid crystalline dispersions. I. The model.* Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1999. **80**: p. 93-113.
2. **Manero, O., et al.**, *Dynamics of worm-like micelles: The Cox-Merz rule.* Journal of Non-Newtonian Fluids Mechanics, 2002. **106**: p. 1-15.
3. **Herrera-Valencia, E.E., et al.**, *On the pulsating flow behavior of a biological fluid: human blood.* Rheologica Acta, 2017. **56**: p. 387-407.
4. **Macosko, C.W.**, *Rheology: Principles, Measurements and Applications.* 1994, Weinheim: Wiley-VCH.
5. **Fredrickson, A.G.**, *A model for the thixotropy of suspensions* AIChE Journal, 1970. **16**: p. 436-441.
6. **Bautista, F., et al.**, *On the shear banding flow of wormlike micelles.* Journal of Physical Chemistry B, 2002. **106**: p. 13018-13026.
7. **Rey, A.D.**, *Capillary models for liquid crystal fibers, membranes, films, and drops.* Soft Matter, 2007. **3**: p. 1349-1368.
8. **Soulé, E.R., N.M. Abukhdeir, and A.D. Rey**, *Thermodynamics Transition Dynamics, and Texturing in Polymer-Dispersed Liquid Crystals with Mesogens Exhibiting a Direct Isotropic/Smectic-A Transition.* Macromolecules, 2009. **42**: p. 9486-9497.
9. **Rey, A.D.**, *Liquid crystal models of biological materials and process.* Soft Matter, 2010. **6**(16): p. 3402-3429.
10. **Barnes, H.A.**, *A handbook of elementary rheology.* 2000, Wales: University of Wales.
11. **De Andrade, L.R.P. and A.D. Rey**, *Pulsatile Poiseuille flow of discotic mesophases.* Chemical Engineering Science, 2005. **60**: p. 6622-6636.

12. **Davies, J.M., S. Bhumiratana, and R.B. Bird**, *Elastic and inertial effects in pulsatile flow of polymeric liquids in circular tubes*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1978. **3**: p. 237-259.
13. **Dunwoody, J.**, *Time periodic flows*. Rheology series, 1991. **8**: p. 137-178.
14. **Rey, A.D. and T. Tsuji**, *Recent advances in theoretical liquid crystal rheology*. Macromolecular theory and simulations, 1998. **7(6)**: p. 623-639.
15. **Anderson, V.J., E.S. Boek, and J.R.A. Pearson**, *The rheology of worm-like micellar fluids*. Rheology Reviews, 2006. **213**.
16. **Anderson, V.J., et al.**, *Flow of entangled wormlike micellar fluids: Mesoscopic simulations, rheology and  $\mu$ -PIV experiments*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2007. **146(1-3)**: p. 11-21.
17. **Bautista, F., et al.**, *Irreversible thermodynamics approach and modelling of shear-banding flow of wormlike micelles*. Journal of Physical Chemistry B, 2002. **106**: p. 13018-13026.
18. **Bautista, F., et al.**, *On the rheological modelling of associative polymers*. Rheologica Acta, 2006. **46**: p. 45-57.
19. **Bautista, F., et al.**, *Stability analysis of shear banding flow with the BMP*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2007. **144**: p. 160-169.
20. **Manero, O., et al.**, *A thermodynamic approach to rheology of complex fluids: The generalized BMP model*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2007. **149**: p. 22-29.
21. **Bautista, F., et al.**, *Critical phenomenon analysis of shear-banding flow in polymer-like micellar solutions.1. Theoretical approach*. Journal of Physical Chemistry B, 2009. **113**: p. 16101-16109.
22. **De Andrade, L.R.P. and A.D. Rey**, *Pulsatile flows of Leslie-Ericksen liquid crystals*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2006. **135**: p. 32-45.
23. **De Kee, D. and C.F. Chan-Man-Fong**, *Rheological Properties of Structured Fluids*. Polymer Engineering Science, 1994. **34**: p. 438-445.
24. **Bird, R.B., R.C. Armstrong, and O. Hassager**, *Dynamics of polymeric liquids*. 1977, New York: Wiley.

25. **Bautista, F., et al.**, *On the shear banding flow of elongated micellar solutions*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2000. **106**: p. 1-15.
26. **Bautista, F., et al.**, *Shear-banded flow and transient rheology of cationic wormlike micellar solutions*. Langmuir, 2003. **19**: p. 6620-6626.
27. **Núñez-Ramírez, D.M., et al.**, *A rheological study of the bioleaching process of an iron ore for the elimination of gangue minerals*. Minerals Engineering, 2019. **144**: p. 1-10.
28. **Sarabia-Aldana, C.A., et al.**, *Hemorheological and biochemical study in patients with liver cirrhosis*. Physics of Fluids, 2022. **34**(4): p. 1-9.
29. **Cook, L.P., et al.**, *Wormlike micellar solutions: II. Comparison between experimental data and scission model predictions*. Journal of Rheology, 2010. **54**(4): p. 881-913.
30. **Cates, M.E.**, *Reptation of living polymers: dynamics of entangled polymers in the presence of reversible chain-scission reactions*. Macromolecules, 1987. **20**: p. 2289-2296.
31. **Cates, M.E. and S.J. Candau**, *Statics and dynamics of worm-like surfactants micelles*. Journal of Physics: Condensed Matter, 1990. **2**: p. 6869-6892.
32. **Cooper, S.L. and S.X. Ma**, *Shear thickening in aqueous solutions of hydrocarbon and end-capped poly (ethylene oxide)*. Macromolecules, 2001. **34**(10): p. 3294-3301.
33. **Collet, A., et al.**, *Perfluoroalkyl end-capped poly (ethylene oxide). Synthesis, characterization, and rheological behavior in aqueous solution*. Macromolecules, 2003. **36**: p. 449-457.
34. **Bassett, D.R., et al.**, *A structural model of hydrophobically modified urethane-ethoxylate (HEUR) associative polymers in shear flow*. Macromolecules, 1998. **31**(13): p. 4149-4159.
35. **Branched, L.Z.**, *Worm-like micelles and their networks*. Langmuir, 1996. **12**: p. 1729-1737.
36. **Berret, L.F.**, *Transient Rheology of Wormlike Micelles*. Journal of Rheology, 1997. **39**: p. 725-741.
37. **Padding, J.T., E.S. Boek, and W.J. Briels**, *Rheology of wormlike micellar fluids from Brownian and molecular dynamics simulations*. Journal of condensed matter, 2005. **17**: p. S3347-S3352.

38. **Boek, E.S., et al.**, *Flow of wormlike micelles in an expansion-contraction geometry*. *Soft-Matter*, 2008. **4**: p. 870-879.
39. **Boek, E.S., et al.**, *Review of multi-scale particulate simulation of the rheology of wormlike micellar fluids*. *Soft-Matter*, 2009. **5**: p. 4367-4375.
40. **Cooper, R.A.**, *Influence of increased membrane cholesterol on membrane fluidity and cell function in human red blood cells*. *Journal of Supramolecular Structure*, 1978. **8**: p. 413-430.
41. **Arrault, J., M.E. Cates, and C. Grand**, *Slow transients and metastability in wormlike micelle rheology*. *Journal de Physique II*, 1997. **7**: p. 1071-1086.
42. **Aguayo, J.P., et al.**, *Numerical investigation of transient contraction flows for worm-like micellar systems using Bautista-Manero models*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2011. **166**: p. 102-117.
43. **Boek, E.S., et al.**, *Influence of system size and solvent flow on the distribution of wormlike micelles in a contraction-expansion geometry*. *European Physical Journal*, 2008. **26**: p. 63-71.
44. **Glass, J.E. and J.P. Kaczmariski**, *Synthesis and solution properties of hydrophobically-modified ethoxylated urethanes with variable oxyethylene spacer lengths*. *Macromolecules*, 1933. **26**: p. 5149-5156.
45. **Herrera-Valencia, E.E., et al.**, *Effect of random longitudinal vibration on the Poiseuille flow of a complex liquid*. *Rheologica Acta*, 2009. **48**: p. 779-800.
46. **Herrera-Valencia, E.E., et al.**, *Study on the pulsating flow of a worm-like micellar solution*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2010. **165**: p. 174-183.
47. **Rothstein, J.P.**, *Strong flows of viscoelastic wormlike micelle solutions*. *British Society of Rheology*, 2008: p. 1-46.
48. **Castillo, H.A.**, *Análisis de estabilidad de reología de soluciones micelares de CTAT*. 2013: IIM-UNAM. p. 139.
49. **Chinesta, F. and G. Ausias**, *Rheology of Non-Spherical Particle Suspensions*. 2015, London: iSTE press.

50. **Pérez-Camacho, M., et al.**, *Pressure-drop and kinematics of viscoelastic flow through an axisymmetric contraction-expansion geometry with various contraction-ratios*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2015. **222**: p. 260-271.
51. **Bird, R.B., W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot**, *Transport Phenomena*. 2002, New York: John Wiley & Sons.
52. **Oliveira, P.J. and F.T. Pinho**, *Analytical solution for fully developed channel and pipe flow of Phan-Thien-Tanner fluids*. Journal of Fluid Mechanics, 1999. **387**: p. 271-280.
53. **Pinho, F.T. and P.J. Oliveira**, *Axial annular flow of a nonlinear viscoelastic fluid-an analytical solution*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2000. **93**: p. 325-337.
54. **Phan-Tien, N.**, *A non-linear network viscoelastic model*. Journal of Rheology, 1978. **22**: p. 259-283.
55. **Phan-Tien, N. and R.I. Tanner**, *A new constitutive equation derived from network theory*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1977. **2(4)**: p. 353-365.
56. **Alves, M.A., F.T. Pinho, and P.J. Oliveira**, *Study of steady pipe and channel flows of a single-mode Phan-Thien-Tanner fluid*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2001. **101**: p. 55-76.
57. **Cruz, D.O.A., F.T. Pinho, and P.J. Oliveira**, *Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a Newtonian solvent contribution*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2005. **132**: p. 28-35.
58. **Oliveira, P.J.**, *An exact solution for tube and slit flow of a FENE-P fluid*. Acta Mechanica, 2002. **158**: p. 157-167.
59. **Afonso, A.M., M.A. Alves, and F.T. Pinho**, *Analytical solution of mixed electro-osmotic/pressure driven flows of viscoelastic fluids in microchannels*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2009. **159(1-3)**: p. 50-63.
60. **Armstrong, M., et al.**, *Evaluating rheological models for human blood using steady state, transient, and oscillatory shear predictions*. Rheologica Acta, 2018. **57**: p. 705-728.
61. **Welty, J., G.L. Rorrer, and D.G. Foster**, *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer*. 2018, Oregon: Wiley.

62. **Narasimhan, M.N.L.**, *Principles of continuum mechanics*. 1993, New York: John Wiley & Sons.
63. **Reklaitis, G.V. and D.R. Schneider**, *Introduction to Material and Energy Balances*. 1983, New York: John Wiley & Sons.
64. **Barnes, H.A., J.F. Hutton, and K. Walters**, *An introduction to rheology*. 1989, Amsterdam: Elsevier.
65. **Fredrickson, A.G.**, *Principles and Applications of Rheology*. 1964, New Jersey: Prentice-Hall.
66. **Herrera-Valencia, E.E., et al.**, *Fenómenos de transporte y reología de fluidos complejos: Flujo pulsátil de sangre humana*. 2022, Ciudad de México: UNAM-FESZ.
67. **Ferry, J.D.**, *Viscoelastic properties of polymers*. 1980, New York: John Wiley & Sons.
68. **Yamamoto, T.**, *White-Metzner type viscoelastic model for cellulose nanofiber suspensions based on population balance equations for fiber floc aggregation-breakage*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2019. **264**: p. 98-106.
69. **Hilborn, R. and M. Mangel**, *The ecological Detective Confronting Models with Data*. 1997, New Jersey: Princeton University Press.
70. **Turcio, M., et al.**, *Calculation of effective permeability for the BMP model in fractal porous media*. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2013. **103**: p. 51-60.
71. **Macias, E.R., et al.**, *On the shear thickening flow of dilute CTAT worm-like micellar solutions*. *Journal of Rheology*, 2003. **47**: p. 643-658.
72. **Soltero, J.F., J.E. Puig, and O. Manero**, *Rheology of Cetyltrimethylammonium p-Toluenesulfonate-Water System 3: Nonlinear Viscoelasticity*. *Langmuir*, 1999. **15**: p. 1604-1612.
73. **Mendoza-Fuentes, A.J., et al.**, *On the flow of associative polymers past a sphere: Evaluation of negative wake criteria*. *Physics of Fluids* 2009. **21**: p. 1-13.
74. **Calderas, F., et al.**, *The Transient Flow of the PET-PEN-Montmorillonite Clay Nanocomposite*. *Macromolecular Symposia*, 2009. **283(1)**: p. 354-360.
75. **Pinho, F.T. and J.H. Whitelaw**, *Flow of non-newtonian fluids in a pipe*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1990. **138**: p. 7-21.

76. **Pinho, F.T. and P.M. Coelho**, *Fully-developed heat transfer in annuli for viscoelastic fluids with viscous dissipation*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2006. **138**: p. 7-21.
77. **Giesekus, H.**, *Die Elastizität von Flüssigkeiten*. Rheologica Acta, 1966. **5**: p. 29-35.
78. **Giesekus, H.**, *A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility* Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1982. **11**: p. 69-109.
79. **Giesekus, H.**, *On Configuration-Dependent Generalized Oldroyd Derivatives*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1984. **14**: p. 47-65.
80. **Giesekus, H.**, *Constitutive equation for Polymer Fluids Based on the Concept of Configuration dependent Molecular Mobility: A Generalized Mean-Configuration Model*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1985. **17**: p. 349-372.
81. **Tanner, R.I.**, *Engineering Rheology*. 2000, Oxford: Oxford University Press.
82. **Acierno, D. and A.A. Collyer**, *Rheology and Processing of Liquid Crystal Polymers*. 1996, Glasgow: Springer-Science+Business Media, B.V.
83. **Jongschaap, R.J.J.**, *Derivation of the Marrucci model from transient-network theory*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1981. **8**: p. 183-190.
84. **Mewis, J., L. Pellens, and R. Gamez-Corrales**, *General nonlinear rheological behavior of associative polymers*. Journal of Rheology, 2004. **48**(2): p. 379-393.
85. **Rincon, E., et al.**, *Rheological modelling of complex fluids: A transient network model with microstates*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2005. **131**: p. 64-77.
86. **Calderas, F., et al.**, *On the yield stress of complex materials*. Korea-Australia Rheology Journal, 2013. **25**: p. 233-242.
87. **García-Sandoval, J.P., et al.**, *Inhomogeneous Flow of Wormlike Micelles: Predictions of the Generalized BMP Model with Normal Stresses*. MDPI: Fluids, 2019. **425**: p. 1-15.
88. **Caram, Y., et al.**, *On the rheological modelling of associative polymers*. Rheologica Acta, 2005. **46**(1): p. 45-47.
89. **Castillo, H.A., et al.**, *Derivation of the mechanical and thermodynamic potentials from the generalized BMP model under shear-banded flow*. Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, 2014. **39**: p. 231-248.

90. **García-Rojas, B., et al.**, *Thermodynamic approach to rheology of complex fluids: Flow-concentration coupling*. Physical Review E, 2009. **80**: p. 1-12.
91. **García-Sandoval, J.P., et al.**, *The interface migration in shear-banded micellar solutions*. Rheologica Acta, 2017. **56**: p. 765-778.
92. **Calabrese, V., et al.**, *Microstructural Dynamics and Rheology of Worm-like Diblock Copolymer Nanoparticle Dispersions under a Simple Shear and a Planar Extensional Flow*. Macromolecules, 2022. **55**(22): p. 10031-10042.

# Fenómenos de transporte y reología de fluidos estructurados



El estudio de la transferencia de momentum y la reología de fluidos complejos es uno de los tópicos más importantes en la enseñanza de la ingeniería química y en la industria ya que precisan la aplicación de estas dos disciplinas de manera simultánea. Los avances tecnológicos en la computación y en la matemática aplicada han permitido la intersección de estas dos grandes ramas del conocimiento.

En esta obra se plantean distintas situaciones de flujo de un sistema micelar de tipo gusano que, por su composición química y estructura molecular, exhibe un comportamiento reológico complejo. Los parámetros reológicos de este tipo de sistemas ya se han reportado en la literatura científica, dichos parámetros son alimentados a las simulaciones computacionales en las que la transferencia de momentum y la Reología convergen. La unión de estas dos ramas del saber se da, desde el punto de vista matemático, por medio del tensor de esfuerzos viscoelástico, presente tanto en la transferencia de momentum como en la ecuación constitutiva reológica. La ecuación reológica que se usó en esta obra, para describir las distintas situaciones de flujo, acopla el un comportamiento viscoelástico no lineal de los materiales con una cinética de estructuración de primer orden basada en un balance población logístico; esta ecuación fue ideada por tres reólogos mexicanos: el Dr. Fernando Bautista Rico, el Dr. Octavio Manero Brito y el Dr. Jorge Emilio Puig Arévalo (modelo BMP).

Los flujos que se estudian son controlados, es decir, tanto la dirección de la velocidad del flujo como los parámetros geométricos del sistema están establecidos y son sencillos. El primero de ellos es el flujo cortante simple el cual se genera cuando un fluido es colocado entre dos placas cuya distancia de separación es  $H$ . Una placa es móvil y transmite el movimiento a las otras capas de fluido para llevar a cabo la transferencia de momentum. El parámetro más usado en este tipo de prueba es la viscosidad cortante.

El segundo tipo de flujo que se estudia es el oscilatorio de baja amplitud. Este sistema es de los más interesantes debido a que separa la contribución viscosa y elástica del tensor de esfuerzos viscoelástico. El fluido es colocado entre dos platos, el plato superior rota en ambos sentidos (levógiro y dextrógiro) con una cierta frecuencia y una deformación lo suficientemente baja para considerarse dentro de la región viscoelástica lineal.

El tercer tipo de flujo es el extensional. Este tipo de flujo se presenta en sistemas en donde hay un cambio en la geometría, por ejemplo, en una contracción o en una expansión. El flujo extensional puro está presente en la industria del petróleo, en el flujo a través de medios porosos, en el diseño de recubrimientos de pinturas, en la ciencia de polímeros, en la fabricación de hilados biológicos y en la bioingeniería del tejido humano y, en particular, en la formación de películas de colágeno en un sustrato. El parámetro más común de este tipo de flujo es la viscosidad extensional; de hecho, esta última está relacionada con la viscosidad cortante por medio de la regla de Trouton.

Es conveniente recordar que en situaciones de flujo no controladas existe una combinación de los tres flujos anteriores y puede dominar uno u otro dependiendo del tipo de proceso: flujo sanguíneo, procesamiento de polímeros fundidos, extracción de petróleo, solo por mencionar algunos casos. Adicionalmente, se estudia el flujo de Poiseuille a gradiente de presión constante (flujo no-homogéneo) en una tubería. El flujo de Poiseuille es utilizado para la descripción del transporte de líquidos en tuberías (flujo de fluidos); en este sentido, la presente obra muestra la metodología para la descripción de flujo de fluidos reológicamente complejos a través de tuberías.

Finalmente, las simulaciones computacionales permitieron observar el efecto de la variación de los parámetros reológicos en las propiedades del proceso tales como el perfil de velocidades, el flujo volumétrico, la función fluidez aparente y el factor de fricción, para clasificar su respuesta en términos de mecanismos reológicos como lo son: adelgazamiento/engrosamiento, tixotropía/reopéctia, cedencia y viscoelasticidad



Facultad de Estudios Superiores Zaragoza,  
Campus I. Av. Guelatao No. 66 Col. Ejército de Oriente,  
Campus II. Batalla 5 de Mayo s/n Esq. Fuerte de Loreto.  
Col. Ejército de Oriente.  
Iztapalapa, C.P. 09230 Ciudad de México.  
Campus III. Ex fábrica de San Manuel s/n,  
Col. San Manuel entre Corregidora y Camino a Zautla,  
San Miguel Conlla, Santa Cruz Tlaxcala.

<http://www.zaragoza.unam.mx>

