



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR DE
INGENIEROS
INDUSTRIALES

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES

Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN TUTELADO

**Simulación numérica bidimensional de la orientación molecular y
la cristalización en chorros líquidos poliméricos**

Autor: Francisco José Blanco Rodríguez

Director: Dr. Juan Ignacio Ramos Sobrados

Titulación: Diploma de Estudios Avanzados (DEA)

MÁLAGA, junio de 2009

Índice general

1. Introducción y objetivos	1
1.1. Introducción	1
1.2. Antecedentes y estado actual del tema	4
1.3. Orientación molecular y cristalización	7
1.3.1. Estado del arte de los diferentes modelos de orientación y cristalización en <i>melt spinning</i>	10
1.4. Objetivos	14
2. Fundamentos teóricos del proceso de <i>melt spinning</i>	17
2.1. Introducción	17
2.2. Formulación del problema	17
2.3. Adimensionalización del problema	26
3. Métodos asintóticos y numéricos	33
3.1. Introducción	33
3.2. Análisis asintótico de chorros líquidos compuestos no isotermos a bajo número de Reynolds	33
3.2.1. Influencia de la disipación viscosa y generación de calor por cristalización	39
3.2.2. Ecuación para el tensor de orientación molecular	40
3.2.3. Esfuerzos axiales e interfaciales	40
3.3. Acoplamiento entre flujo, orientación y cristalización. Modelo completo 1D en estado estacionario.	42
3.3.1. Esquema numérico de resolución	46
3.4. Modelo híbrido de $1 + 1/2D$	49
3.4.1. Transformación de coordenadas	52
3.4.2. Temperatura promedio global del chorro	56
3.4.3. Esquema numérico de resolución	57
4. Resultados numéricos	59
4.1. Introducción	59
4.2. Resultados del modelo 1D con tensor de orientación completo	59
4.2.1. Comparación con el modelo 1D de Forest	59
4.2.2. Influencia de la conducción axial	62

4.3. Resultados del modelo híbrido o $1 + 1/2D$	64
4.3.1. Efecto de los parámetros térmicos en fibras compuestas amorfas	64
4.3.2. Comparación del modelo 1D con tensor de orientación completo y el modelo híbrido	69
4.3.3. Análisis de sensibilidad	72
4.3.4. Efecto de perfiles radiales en las condiciones iniciales	80
4.4. Conclusiones	92
5. Conclusiones	93
5.1. Introducción	93
5.2. Implementación numérica del problema	93
5.3. Contribuciones del trabajo actual y futuros estudios	95
A. Validación del método numérico e independencia de la malla	97
A.1. Introducción	97
A.2. Regimen capilar viscoso	97

Índice de figuras

1.1.	Típico proceso de <i>melt spinning</i> (a) y regiones de la zona de estirado (b) [1]. . .	3
2.1.	Figura esquemática de una fibra compuesta donde se puede apreciar el núcleo (<i>core</i>) y el revestimiento (<i>cladding</i>). Se ha denotado a R de la figura como R_1 a lo largo del texto.	18
3.1.	Geometría de la fibra compuesta en el dominio físico adimensional (\hat{r}, \hat{x}) y en el transformado (ξ, η)	53
4.1.	Resultados obtenidos por los modelos unidimensionales con tensor de orientación completo (-) y de Forest (- -) para el caso 6 de la Tabla 4.1.	61
4.2.	Componentes del tensor de orientación del núcleo (rojo) y revestimiento (negro) para los modelos unidimensionales con tensor completo (-) y de Forest (·) para el caso 6 de la Tabla 4.1.	62
4.3.	Resultados obtenidos por el modelo unidimensional con tensor completo considerando conducción axial (-) y despreciándola (- -) para el caso 6 de la Tabla 4.1.	63
4.4.	Esfuerzos axiales en una fibra compuesta obtenidos con el modelo unidimensional con tensor completo considerando conducción axial (-) y despreciándola (- -) para el caso 6 de la Tabla 4.1.	64
4.5.	Geometría de la fibra compuesta, velocidad axial, promedio de temperatura y viscosidad dinámica promediada (núcleo: verde, revestimiento: negro) para los casos 1 (-), 2 (--) y 3 (- · -) de la Tabla 4.2.	66
4.6.	Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 2 (--) y 3 (- · -) de la Tabla 4.2.	67
4.7.	Campo térmico bidimensional para los casos 1(a), 2(b) y 3(c) de la Tabla 4.2. . .	68
4.8.	Geometría de la fibra compuesta, velocidad axial, promedio de temperatura y viscosidad dinámica promediada (núcleo: verde, revestimiento: negro) para los casos 1 (-), 4 (--) y 5 (- · -) de la Tabla 4.2.	69
4.9.	Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 4 (--) y 5 (- · -) de la Tabla 4.2.	70
4.10.	Campo térmico bidimensional para los casos 1(a), 4(b) y 5(c) de la Tabla 4.2. . .	71

4.11. Geometría de la fibra compuesta, velocidad axial, promedio de temperatura y viscosidad dinámica promediada (núcleo: verde, revestimiento: negro) para los casos 1 (-), 6 (--) y 7 (- · -) de la Tabla 4.2.	72
4.12. Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento(azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 6 (--) y 7 (- · -) de la Tabla 4.2.	73
4.13. Campo térmico bidimensional para los casos 1(a), 6(b) y 7(c) de la Tabla 4.2.	74
4.14. Resultados obtenidos por los modelos unidimensional (-) y bidimensional (- · -) con tensor de orientación completo para el caso 4 de la Tabla 4.1.	75
4.15. Gráfico tridimensional del campo de temperaturas para el caso 4 de la Tabla 4.1.	76
4.16. Tensor de orientación molecular bidimensional para el caso 4 de la Tabla 4.1.	77
4.17. Campos bidimensionales del parámetro de orientación molecular (a) y grado de cristalización (b) para el caso 4 de la Tabla 4.1.	78
4.18. Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (-), 2 (--) y 3 (- · -) de la Tabla 4.1.	80
4.19. Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento(azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 2 (--) y 3 (- · -) de la Tabla 4.1.	81
4.20. Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (-), 4 (--) y 5 (- · -) de la Tabla 4.1.	82
4.21. Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento(azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 4 (--) y 5 (- · -) de la Tabla 4.1.	83
4.22. Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (-), 6 (--) y 7 (- · -) de la Tabla 4.1.	84
4.23. Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento(azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 6 (--) y 7 (- · -) de la Tabla 4.1.	85
4.24. Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (-), 8 (--) y 9 (- · -) de la Tabla 4.1.	86
4.25. Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento(azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 8 (--) y 9 (- · -) de la Tabla 4.1.	87
4.26. Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (-), 10 (--) y 11 (- · -) de la Tabla 4.1.	88
4.27. Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento(azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 10 (--) y 11 (- · -) de la Tabla 4.1.	89

4.28. Campos bidimensionales de la magnitud de velocidad axial (a), velocidad radial (b), temperatura (c), $\log(\hat{\mu}_e)$ (d), parámetro de orientación molecular (e) y grado de cristalización (f) para el caso 4 de la Tabla 4.1 con $Bi = 5$ 90

4.29. Grado de cristalización en varias secciones transversales ($\hat{x} = 0,01$ (a); $\hat{x} = 0,03$ (b); $\hat{x} = 0,06$ (c); $\hat{x} = 0,10$ (d); $\hat{x} = 0,20$ (e); $\hat{x} = 0,30$ (f)) del núcleo de la fibra compuesta para el caso 4 de la Tabla 4.1 con $Bi = 5$ 91

Índice de tablas

4.1. Valores de los parámetros usados en algunos cálculos.	60
4.2. Valores de los parámetros usados en los cálculos de la sección 4.3.1.	65
4.3. Esfuerzos axiales promediados adimensionales en el núcleo para los casos de la Tabla 4.1.	79
4.4. Esfuerzos axiales promediados adimensionales en el revestimiento para los casos de la Tabla 4.1.	79
A.1. Error entre la solución analítica y la numérica para el estirado de fibras amorfas isotermas en el regimen capilar viscoso para distintos espaciados en la dirección axial.	98

Capítulo 1

Introducción y objetivos

1.1. Introducción

En los diez últimos años ha habido un gran interés en el desarrollo de fibras ópticas microestructuradas (MOF), es decir, fibras que contienen agujeros u otro tipo de estructura repetitiva a lo largo de toda su longitud. En estas fibras, la luz puede ser guiada a lo largo de su núcleo (*core*) por dos mecanismos, la reflexión total interna (RTI), como en las fibras ópticas convencionales, y la reflexión especular de Bragg. En las primeras, el índice de refracción del núcleo es mayor que el índice de refracción “efectivo” del revestimiento (*cladding*) gracias a la presencia de la microestructura, por lo que requieren que el núcleo sea sólido (*solid core*) [2].

Las fibras microestructuradas pueden fabricarse en torres de estirado por diferentes procedimientos. El más usado, cuando se precisan agujeros grandes en el revestimiento, es el estirado de una preforma constituida por la unión de varios capilares alrededor de un sólido [2]. Hasta muy recientemente se han fabricado MOF's de sílice, pero hoy en día también se fabrican de polímeros (POF), e incluso se ha llegado a fabricar una fibra que combina materiales conductores, semiconductores y dieléctricos [3].

La transparencia y ancho de banda de estas POF's junto con su alta capacidad de transmisión, facilidad de manejo, flexibilidad y economía permiten que estas fibras puedan sustituir a los cables de cobre y a fibras ópticas de vidrio en enlaces de comunicaciones así como en otros dispositivos optoelectrónicos. La sección transversal de una POF puede ser microestructurada o circular. Éstas generalmente constan de tres capas: la capa interna es el núcleo (*core*), la parte intermedia el revestimiento (*cladding*) y la parte externa es la cubierta de protección.

En la manufactura de POF's circulares, un cilindro sólido llamado preforma de varios centímetros de diámetro y aproximadamente medio metro de longitud cuya estructura determina los perfiles de los índices de refracción en el núcleo y revestimiento se extrusiona en un proceso de *melt spinning* análogo al que se utiliza en la fabricación de fibras textiles y fibras de vidrio. El perfil del índice de refracción en el núcleo en la dirección radial puede obtenerse diseñando la preforma con dicho perfil; cuando se necesitan perfiles más complejos tales como perfiles graduales (*graded indices*), se utiliza un proceso de estirado en el que un extremo de la preforma se calienta hasta alcanzar la temperatura de fusión (*melting*).

Actualmente, la producción de POF's con índice de refracción gradual se basa en procesos

de polimerización de gel y difusión. La polimerización del gel requiere la fabricación de un cilindro hueco de polímeros tal como PMMA que da lugar al revestimiento y que se rellena con monómeros, un iniciador, y un dopante que cuando se calientan dan lugar a la formación de un polímero que constituye el núcleo de la fibra. Una vez obtenida la preforma, uno de sus extremos se calienta en un horno hasta alcanzar la viscosidad necesaria para ser extruida a la velocidad adecuada para obtener el diámetro requerido de la fibra. Finalmente, se aplica una protección (*coating*) a la fibra con objeto de mejorar su resistencia y facilitar su manejo.

La fabricación de MOF's tanto de vidrio como de polímeros (POF's) así como la preforma del *cladding* en POF's de sección circular requiere el estirado de fibras anulares huecas, mientras que la fabricación de POF's de sección circular requiere el análisis de fibras compuestas. Por ello, en los siguientes párrafos, se revisan los antecedentes y estado actual de los estudios realizados sobre fibras anulares y fibras macizas compuestas así como se realiza una breve descripción del proceso de fabricación de fibras mediante *melt spinning*. Debe señalarse que las fibras anulares también tienen aplicaciones en la industria química (filtración, separación) y biomédica (cirugía por láser, ingeniería de tejidos, prótesis) mientras que las fibras compuestas son de gran importancia en las industrias textil y de fabricación de materiales compuestos (*composites*) ya que la combinación de dos materiales distintos para el núcleo y el revestimiento puede resultar en materiales compuestos con buenas propiedades mecánicas, químicas, eléctricas, térmicas, etc.

Proceso de fabricación de *melt spinning*. El proceso de *melt spinning* involucra la extrusión y el estirado de un cilindro de líquido. Un diagrama típico del proceso se muestra en la Figura 1.1 (a). Copos o bolas de polímero son fundidas en el dispositivo de extrusión, proceso tras el cual se bombea el líquido a través de la boquilla de salida para formar las fibras líquidas. Este filamento es estirado y enfriado hasta que solidifica en la zona de estirado. La velocidad final de la fibra es fijada por el tambor de recogida de la misma el cual consiste en una o más ruedas que giran a velocidad constante. La fibra ya sólida se mueve a la misma velocidad lineal que las ruedas debido a las fuerzas de fricción en la zona de contacto. Como las bobinas de hilo, la fibra es finalmente enroscada en un carrete para su almacenaje. El estirado de fibras compuestas se distingue del estirado de una fibra sólida en que en el primero de ellos dos fluidos han de ser extruidos y estirados al mismo tiempo. El chorro interno o núcleo, a menudo, consiste en un gas inerte pero puede ser otro fluido.

Estos procesos son, generalmente, divididos en cuatro regiones para su análisis: (1) la región de flujo cortante que se da en el interior de la boquilla de salida; (2) la región de flujo reorganizado en la que el flujo cortante se convierte en elongacional; (3) la zona de estirado del fluido fundido donde la fibra es estirada hasta el diámetro deseado en contacto con un fluido refrigerante (aire) para facilitar la transferencia de calor; (4) la región de solidificación donde el fluido ya frío se transforma en sólido. Cada una de esas regiones están identificadas en la Figura 1.1 (b).

Las variables de operación que se especifican de forma más habitual son el diámetro de la boquilla de salida y la temperatura de los chorros en esa posición, la temperatura del aire circundante y su velocidad, los flujos máxicos extruidos y la velocidad de rotación del tambor de recogida. La relación entre la velocidad media del fluido a la salida de la boquilla y la velocidad lineal de recogida se denomina relación de estirado, D_r , y, a menudo, es especificada en lugar

de la tasa de extrusión. Las especificaciones correctas de las variables de operación permiten la producción de fibras para un tamaño y tasa de fabricación dadas.

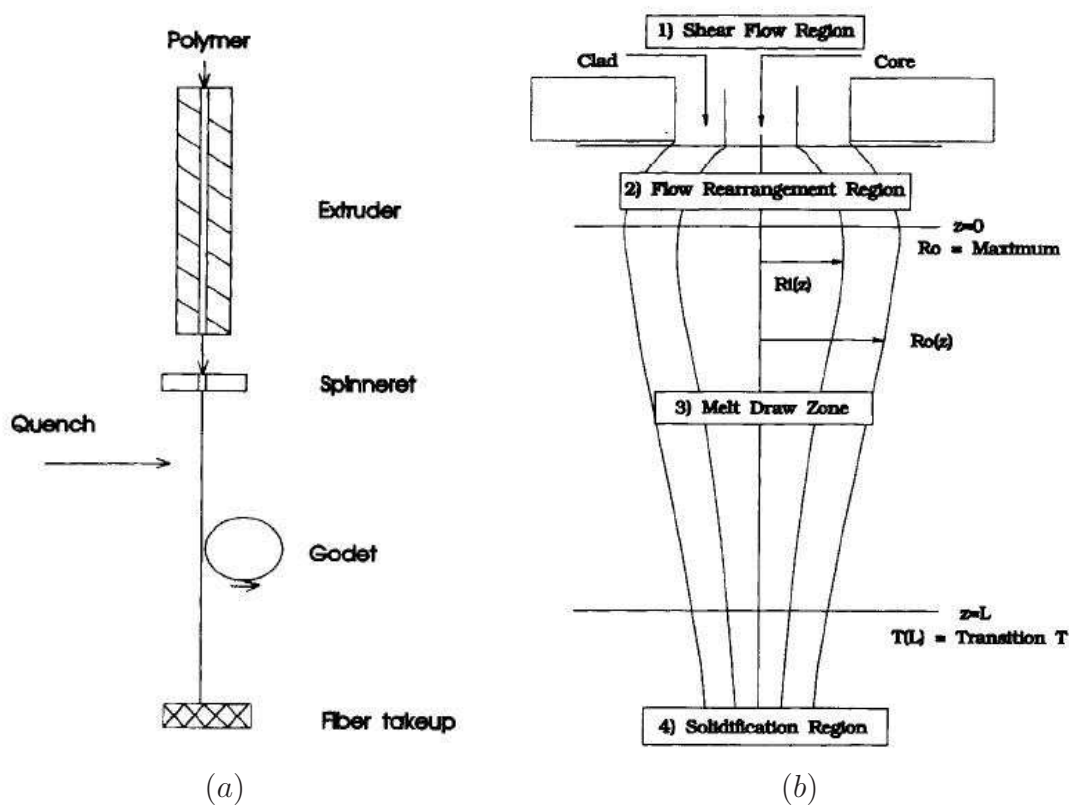


Figura 1.1: Típico proceso de *melt spinning* (a) y regiones de la zona de estirado (b) [1].

Un análisis riguroso del proceso requiere resolver las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía en un dominio complejo tridimensional. Para evitar cálculos numéricos costosos, se han introducido un número de aproximaciones simplificadas en la literatura que han dado como resultado las bases para el análisis del filamento esbelto.

El tratamiento explícito de las **regiones 1 y 2** es evitado asumiendo que el flujo cortante del interior de la boquilla se modifica hacia el flujo elongacional en una distancia mucho más pequeña que la longitud total de la zona de estirado. Cálculos mediante elementos finitos verifican esta hipótesis e indican que esta transición ocurre en una distancia igual a dos o tres veces el diámetro de la boquilla [4]. Aunque el origen exacto de la zona de estirado no está definido, esta ambigüedad es mucho más pequeña que la longitud de la zona de estirado. El diámetro de la fibra inicial suele seleccionarse igual al diámetro de la boquilla de salida o al máximo radio de la zona de hinchado (*maximum die swell radius*) si ésta es significativa. No obstante, para la zona de hinchado se requieren medidas experimentales o correlaciones apropiadas [5].

El análisis de la **región 4** es evitado mediante la hipótesis de una transición instantánea e isoentálpica hacia un sólido rígido a una temperatura de transición apropiada (temperatura

de fusión o de transición vítrea). El significado de esta hipótesis no está bien definido en la literatura existente. Para materiales cristalinos, especialmente a altas velocidades (velocidades mayores de 1000 m/min) la validez es cuestionable porque la transición vítrea puede ser una función muy dependiente de la cristalinidad y la orientación molecular [5]. Para materiales vítreos a bajas velocidades de estirado, el uso de una temperatura de transición vítrea acarrea resultados razonables. Pequeñas variaciones en la temperatura de transición vítrea no provocan cambios significativos en los niveles de esfuerzos finales en el fluido ni en la geometría final de la fibra [5, 6].

Las hipótesis realizadas hasta ahora reducen el problema únicamente al análisis de la **región 3** que constituye la zona de estudio objeto del presente proyecto de investigación. El hecho de que el diámetro de la fibra sea típicamente mucho más pequeño que la longitud de la zona de estirado permite simplificar el análisis de una forma extraordinaria. Los mecanismos de esta simplificación han tomado varias formas en la literatura pero todos alcanzan el mismo resultado: las ecuaciones para fibra esbelta (*thin filament equation*). Las aproximaciones más comunes incluyen: (1) balance macroscópico de fuerzas [7], (2) promediado radial de las ecuaciones de conservación [8] y (3) métodos de expansión mediante perturbaciones de la solución exacta utilizando la esbeltez de la fibra como parámetro [9]. En todos los casos se asume que el flujo es axilsimétrico. Los métodos asintóticos de aproximación son los más rigurosos proporcionando correcciones a los resultados de la teoría de fibra esbelta que no están disponibles en los otros métodos. Algunos trabajos demostraron que la única consideración del primer orden del análisis asintótico era un aproximación muy buena para un amplio rango de condiciones para una fibra sólida de una única fase.

1.2. Antecedentes y estado actual del tema

Fibras anulares huecas. Los primeros estudios de fibras anulares huecas fueron realizados por Pearson y Petrie [10] en sus análisis de flujos axilsimétricos estacionarios de películas (*films*) isotermas a bajos números de Reynolds utilizando ecuaciones promediadas válidas para espesores pequeños. Estos autores también realizaron un estudio de las ecuaciones en el plano de fase en ausencia de gravedad y tensión superficial [11], mientras que Yeow [12] estudió la estabilidad lineal del modelo de Pearson y Petrie [10] bajo condiciones isotermas. Posteriormente, Yarin et al. [13] consideraron la pérdida de estabilidad en procesos de estirado de fibras anulares huecas por medio de un modelo unidimensional basado en la teoría de Cosserat y analizaron la estabilidad lineal de dichas fibras llegando al mismo criterio que el obtenido previamente por Pearson y Matovich [9] y Schultz y Davis [14] para chorros líquidos isotermos axilsimétricos a bajos números de Reynolds. Yarin et al. [13] también estudiaron numéricamente la dinámica no lineal de chorros anulares isotermos a bajos números de Reynolds y mostraron la existencia de un fenómeno de resonancia (*draw resonance*) bien conocido en el proceso de estirado de fibras axilsimétricas. Posteriormente, Ramos [15] utilizó métodos asintóticos de perturbaciones para chorros líquidos anulares isotermos a bajos números de Reynolds basados en la esbeltez de dichos chorros, obtuvo ecuaciones en derivadas parciales unidimensionales para la geometría

y velocidad axial del chorro, encontró soluciones analíticas para los regímenes viscoso, no gravitatorio y viscoso-gravitatorio, estudió la estabilidad lineal de dichos chorros y demostró que la ecuación que rige dicha estabilidad es la misma que la que rige el régimen viscoso de hojas líquidas planas [16], chorros axilsimétricos [9, 14], chorros axilsimétricos compuestos [17] y chorros anulares compuestos [18]. Por medio de un análisis de estabilidad débilmente lineal, Ramos [15] mostró que existe una bifurcación supercrítica de Hopf para valores de la velocidad de estirado ligeramente superiores al determinado en el estudio de estabilidad lineal. Para velocidades superiores a la velocidad crítica, Ramos [15] mostró numéricamente que la fluidodinámica de chorros líquidos anulares isotermos es caótica y los planos de fase contienen agujeros. Fitt et al. [19] han desarrollado un modelo análogo al de Ramos [15] para el estudio de chorros líquidos anulares isotermos.

Gospodinov y Yarin [20] utilizaron un modelo de Cosserat unidimensional para estudiar la dinámica de fibras ópticas huecas no isotermos y mostraron que velocidades de estirado superior a la crítica determinada en el análisis lineal de fibras huecas isotermos dan lugar a respuestas quasiperiódicas. Debe mencionarse que su modelo de transferencia de calor no incluye conducción en la dirección axial aunque sí que incluye la dependencia de la viscosidad dinámica con la temperatura a través de una expresión de Arrhenius. Sin embargo, un análisis perturbativo [15] basado en la esbeltez muestra que los efectos de conducción axial deben mantenerse en la ecuación para la energía y que sólo para valores elevados del número de Péclet térmico pueden despreciarse dichos efectos excepto en una capa límite situada en la posición axial donde se recoge la fibra. Fitt et al. [21] han desarrollado un método basado en perturbaciones para el estudio de chorros anulares no isotermos que no tiene en cuenta la disipación viscosa, y obtuvieron soluciones para casos isotermos y el mismo criterio de estabilidad lineal que Ramos [15]. Además, estudiaron el colapso y la explosión de chorros anulares isotermos cuando la diferencia de presión es inferior o superior, respectivamente, a un valor crítico que depende de la tensión superficial considerada idéntica en las dos superficies del chorro. Ramos [22] ha modelado numéricamente el proceso de calentamiento de la preforma y fibra de cristal anular compuesta usando un modelo de radiación zonal y considerando el movimiento bidimensional de los gases que rodean la preforma y la fibra, pero utilizando un modelo unidimensional para la fibra una vez que la temperatura de la preforma alcanza la temperatura de fusión.

Los modelos de fibras ópticas revisados en este apartado o bien consideran flujos isotermos o han sido desarrollados para fibras de cristal o vidrio y no son válidos para polímeros semicristalinos donde los esfuerzos afectan la orientación molecular y ésta, a su vez, afecta a los esfuerzos. Tampoco tienen en cuenta fenómenos de cristalización que afectan a la orientación molecular y a los esfuerzos que a su vez influyen en la orientación molecular y la cristalización. Ramos [23] incluyó los efectos de orientación molecular y cristalización en fibras poliméricas anulares compuestas en su modelo previo de fibras anulares amorfas por medio de dos ecuaciones de transporte para el grado de orientación molecular y para el grado de cristalización. En este modelo, la orientación molecular se rige por un parámetro de orden derivado del tensor de orientación deducido de la teoría de Doi-Edwards para polímeros cristalinos líquidos en el que los momentos de cuarto orden del vector de orientación se aproximan por una función de los momentos de segundo orden. Sin embargo, esta aproximación da lugar a predicciones no físicas tales como que la orientación molecular disminuye una vez que el polímero ha solidificado [23].

El modelo de cristalización desarrollado por Ramos [23] se basa en la teoría de Avrami–Kolmogorov y tiene en cuenta tanto los efectos de orientación molecular como los del tensor de la tasa de deformación, por lo que considera la cristalización inducida por el flujo (*flow-induced crystallization*, FIC) además de la causada por el enfriamiento de la fibra. Por otra parte, dicho modelo tiene en cuenta los efectos de la orientación molecular y cristalización sobre la fluidodinámica de la fibra polimérica a través de una viscosidad dinámica efectiva que contiene dos sumandos. El primero es el producto de la viscosidad en la ausencia de cristalización y orientación molecular y un factor exponencial que depende de la cristalización (la cual a su vez depende de la orientación molecular), mientras que el segundo de ellos es sólo función de la orientación molecular.

Fibras macizas compuestas. La literatura existente sobre los procesos fluidodinámicos y térmicos que tienen lugar en la fabricación de fibras macizas compuestas, es decir, fibras que constan de un núcleo y al menos un revestimiento, es relativamente pequeña a pesar de que el uso de dos materiales de distintas propiedades puede resultar en materiales compuestos con buenas propiedades mecánicas, químicas, eléctricas, térmicas, etc.

La mayor parte de los estudios sobre fibras compuestas realizados hasta la fecha han sido isoterms. Por ejemplo, Park [24] utilizó métodos de perturbaciones basados en la esbeltez de las fibras a bajos números de Deborah en sus estudios estacionarios de fibras compuestas isoterms que constan de un fluido Newtoniano para el núcleo y un fluido rígido por una reología del tipo Maxwell para el revestimiento. Lee y Park [25] utilizaron las ecuaciones unidimensionales de Park [24] y mostraron que la estabilidad de fibras compuestas isoterms es mayor que las de fibras compuestas por un solo material. Nabousli y Bechtel [26] han introducido un modelo unidimensional para fibras compuestas isoterms caracterizadas por fluidos Newtonianos y han examinado los efectos de las relaciones de densidad, viscosidad y tensión superficial del núcleo y revestimiento sobre los esfuerzos axiales en los dos materiales. Ji y Yang [27] y Ji et al. [28] han considerado fibras compuestas isoterms con un núcleo Newtoniano y un revestimiento con la reología de Phan–Thien/Tanner.

Ramos [17, 29] ha desarrollado modelos de fibras compuestas isoterms basados en métodos de perturbaciones, ha obtenido soluciones analíticas para fibras isoterms, ha determinado que la estabilidad lineal de estas fibras en el régimen viscoso es idéntica a la de chorros axilsimétricos, hojas líquidas planas y fibras anulares, y ha demostrado numéricamente que estas fibras compuestas exhiben una dinámica caótica cuando la velocidad de estirado es superior a la velocidad crítica determinada en el análisis de estabilidad lineal de estas fibras o chorros. Ramos [30] también ha desarrollado un modelo unidimensional que tiene en cuenta la orientación molecular y la cristalización de fibras compuestas no isoterms con reología Newtoniana que requiere que las temperaturas de fusión de los dos materiales que forman la fibra sean muy próximas.

Críticas sobre los modelos unidimensionales. Los modelos mencionados anteriormente basados en ecuaciones unidimensionales no tienen en cuenta las variaciones radiales del campo de velocidades, temperatura, orientación molecular y cristalización. En particular, el modelo asintótico desarrollado por Ramos [23] indica que, para fibras esbeltas, el número de Biot debe escalar con la cuarta potencia de la esbeltez por lo que estos modelos unidimensionales general-

mente no predicen adecuadamente la transferencia de calor desde la superficie externa de la fibra y, como consecuencia, predicen campos de temperatura bastante inexactos. Esta inexactitud influye a su vez en los campos de velocidades, esfuerzos, orientación molecular, cristalización y geometría de la fibra debido al acoplamiento no lineal entre las ecuaciones y la dependencia de la cristalización y viscosidad con la temperatura. Por otra parte, la dependencia de la cinética de cristalización con la temperatura y la orientación molecular da lugar a variaciones radiales del grado de cristalización y estas variaciones ejercen una gran influencia sobre la microestructura y propiedades de las fibras poliméricas semicristalinas. Por otra parte, estos modelos son incapaces de predecir el fenómeno de *necking* que ocurre a altas velocidades de estirado.

1.3. Orientación molecular y cristalización

La mayor parte de los productos plásticos se fabrican mediante el calentamiento de un polímero hasta alcanzar su temperatura de fusión y el posterior enfriamiento del mismo en el interior un molde por inyección o deformación del fundido mientras simultáneamente se va enfriando hasta conseguir la forma deseada. Las propiedades del producto final dependen de las condiciones de procesado a las cuales el polímero está sujeto durante su fabricación. Además, dependiendo de la estructura molecular y de las condiciones de procesado, el producto final se puede presentar en estado amorfo o semicristalino. Los polímeros que no pueden cristalizar durante su enfriamiento por debajo de la temperatura de transición vítrea forman sólidos amorfos, y, si estos sólidos se forman por deformación del polímero mientras se enfrían a la temperatura de transición vítrea, pueden exhibir una fuerte anisotropía. Cuando el polímero amorfo deformado se enfría por debajo de su temperatura de transición vítrea, sus moléculas pierden movilidad y permanecen con esta configuración.

Los polímeros que tienen una forma molecular regular u ordenada forman un sólido semicristalino cuando son mantenidos a una temperatura por debajo de la de fusión durante un plazo de tiempo suficiente. Bajo condiciones estacionarias, el proceso de cristalización puede ser muy lento, especialmente a temperaturas algo inferiores a la temperatura de fusión de equilibrio, y el sólido que resulta tiene una morfología esferulítica.

La tasa de la cristalización depende de la orientación molecular en el fundido; cuando éstas son conformes a las deformaciones que alinean las moléculas del polímero, el índice de la cristalización aumenta drásticamente, y, cuando la temperatura cae por debajo de la temperatura de transición vítrea, hay un cese del movimiento molecular y la tasa de la cristalización disminuye llegando incluso a hacerse nula. Mientras que la cristalinidad aumenta, se retarda el proceso de cristalización y disminuye la movilidad de las moléculas del polímero en la fase amorfa.

Algunos polímeros como por ejemplo, el polietileno, encuentran aplicaciones a temperaturas entre sus temperaturas de fusión y de transición vítrea. A estas temperaturas, el sólido está consistido esencialmente por una mezcla de cristales rígidos y una fase amorfa flexible lo que le proporciona solidez y resistencia.

Las propiedades del producto final dependen de la morfología de las fases amorfas y semicristalinas; la morfología, en cambio, depende de las historias térmicas y de la deformación

experimentadas por el material durante el proceso. Por otra parte, muchos productos tales como fibras y películas están sujetos a grandes deformaciones inelásticas después de la fabricación, y, durante el curso de estas deformaciones, tiene lugar una cristalización adicional, y la morfología y las características del producto se desarrollan con la deformación.

Las fases de las soluciones líquidas cristalinas pueden separarse incluso bajo condiciones isotermas debido a las interacciones electrostáticas tridimensionales que resultan de la rigidez de las espinas dorsales de la cadena polimérica incluso a bajas concentraciones, y forman fases anisotrópicas con un grado de orientación molecular incluso en el estado inactivo según lo demuestra su capacidad de exhibir birrefringencia bajo condiciones estáticas. Durante el proceso, estas moléculas son alineadas por el flujo, obteniendo así productos con propiedades altamente anisotrópicas [31]. Por ejemplo, algunas fibras textiles ultrarresistentes tales como *Vectran* y *Kevlar* alcanzan sus características comerciales distinguidas (módulo de extensión) como resultado de la interacción entre la escala molecular anisotrópica de la estructura del fundido, la hidrodinámica macroscópica de flujos y los efectos no isotermos incluyendo la transferencia térmica radial a través de la superficie libre de la fibra, la dependencia térmica de las características de los materiales, la cristalización y el cambio de la fase.

El cambio de fase de la etapa amorfa a la semicristalina se denomina *transición de fase*. Los primeros trabajos sobre transiciones de fase consideraban que los fenómenos de conducción de calor eran dominantes y asumían que la temperatura era la variable básica. Los modelos de campos de fase promediada (*Mean-phase field models*) fueron desarrollados posteriormente; estos modelos introducen la temperatura y un parámetro de orden, modifican la ecuación de la energía para tener en cuenta el parámetro de orden, e introducen una ecuación adicional a la original la cual se puede remontar a la teoría de Landau–Ginzburg de las transiciones de fase. Sin embargo, en la mayoría de las situaciones de interés práctico, otros mecanismos aparte de la conducción de calor, es decir, convección en el líquido y deformación del sólido, ocurren y deben ser considerados introduciendo la cinemática del líquido y del sólido. Por otra parte, estos modelos no pueden predecir las características mecánicas del sólido recién formado, y, en muchos materiales, después de que se inicie la cristalización, el material pasa a través de un conjunto de estados intermedios donde están mezclados un líquido y un sólido, antes de ser transformado totalmente en un sólido. Aunque ha habido algunos estudios sobre esta problemática, éstos no han tratado las aplicaciones de los cambios en la simetría asociada al cambio de fase y las grandes deformaciones del sólido.

En la fase líquida, hay fluctuaciones de la densidad causadas por la agitación térmica [32, 33]. Estas fluctuaciones pueden crear eventualmente pequeños núcleos (*clusters*) o moléculas de polímero agregadas que tienen las mismas características que la fase cristalina; los pequeños cristales están siendo creados y destruidos continuamente por fluctuaciones debido a la formación de un cristal lo que implica la creación de una interface entre el líquido y el cristal con el consiguiente coste energético, es decir, la creación de cristales es un proceso competitivo por el que hay una disminución de energía debido al hecho de que el potencial químico de la fase cristalina es menor que el de la fase líquida y un aumento de energía y un coste energético asociado a la creación de interfaces. Por otra parte, los efectos superficiales son dominantes en núcleos de tamaño pequeño y, por consiguiente, su crecimiento no es energéticamente favorable, y los cristales pequeños tienden a disolverse. Existe, sin embargo, un tamaño crítico más

allá del cual los efectos volumétricos dominan sobre los superficiales, y el crecimiento del núcleo es favorecido por una reducción global de la energía. El tamaño que determina la estabilidad de los núcleos se llama *tamaño crítico*, y el proceso de la formación de los cristales de tamaño mayor o igual al tamaño crítico, *nucleación*. Hay dos tipos básicos de nucleación: la nucleación homogénea que ocurre en el interior de una sustancia pura y la nucleación heterogénea que ocurre en presencia de impurezas, de cristales preexistentes, etc.

La nucleación es el primer paso en el proceso de cristalización, porque determina el aspecto de los primeros núcleos cristalinos que son el germen de la segunda etapa de la cristalización, es decir, el crecimiento. En esta segunda etapa, los núcleos más grandes que el tamaño crítico tienden a crecer a través de la adición de monómeros o actuando como sitios de nucleación heterogénea, por ejemplo, la nucleación en la superficie de un cristal en crecimiento.

Los cristales crecen libremente hasta que comienzan a rellenar totalmente el espacio. Una vez que se golpeen, el crecimiento se detiene en la superficie de contacto. Este fenómeno, designado como choque (*impingement*), determina la morfología final del polímero procesado. En la etapa final de la cristalización, el choque impide el subsecuente crecimiento de los cristales y, por lo tanto, se encuentran restos de materia amorfa atrapados entre los núcleos cristalinos. Además, éstos, por sí mismos, no son completamente cristalinos porque pueden contener algunas inclusiones amorfas. Este material atrapado puede ensamblar eventualmente la estructura cristalina principal y, por lo tanto, aumentar el grado de cristalinidad en el proceso designándose este fenómeno como *cristalización secundaria*.

Según lo indicado previamente, el primer paso en la cinética de las transiciones de fase es la nucleación. Este es un proceso de activación donde se debe superar una barrera energética para formar núcleos de un tamaño crítico, a partir del cual la nueva fase crece espontáneamente. Los modelos para la cristalización de polímeros se han basado principalmente en la ecuación de Avrami–Kolmogorov [34, 35, 36, 37] que se basa en la teoría del llenado de espacio a través de la nucleación y el crecimiento de una fase en otra. Esta ecuación fue desarrollada inicialmente para la cristalización isoterma, aunque se ha ampliado para explicar los procesos con condiciones no–isotermas [38, 39, 40, 41]. Los resultados experimentales para el polietileno y el polipropileno demuestran que hay una caída de la temperatura antes de que se inicie la cristalización, después de la cual se presenta un tramo donde ocurre una cristalización vigorosa a una temperatura prácticamente constante, seguida de un descenso de la temperatura hasta la del ambiente después del cese de la cristalización.

Cuando ocurren las transiciones de fase en el flujo polimérico fundido, la cristalización ocurre bajo tensión y condiciones no–isotermas, y la morfología del polímero procesado depende de la temperatura y del proceso e historia de la deformación. De hecho, se ha observado que se puede realizar la cristalización por la presencia de esfuerzo cortante, presión y tensión, y que el esfuerzo cortante puede aumentar la densidad de nucleación, mientras que la tasa de cristalización disminuye conforme se aumenta la tasa de enfriamiento. Generalmente, una morfología cristalina altamente orientada se obtiene bajo deformaciones isotermas y no–isotermas, al contrario de la morfología esferulítica observada bajo condiciones estáticas (no flujo). En fibras estiradas, por ejemplo, las láminas se encuentran perpendiculares al eje de la fibra y la cristalización realizada es causada por la extensión de los enredos de la cadena presentes entre las moléculas del polímero. La orientación en el fundido acelera generalmente el proceso de transición de

fase, pero la orientación molecular se puede realzar o relajar dependiendo de la historia de la deformación y del tiempo de relajación del fundido.

La cristalización inducida por el flujo (FIC) se ha modelado de un número de maneras diversas. Una aproximación usada con frecuencia se basa en la ecuación de Avrami–Kolmogorov que se modifica para tener en cuenta el realce de la cristalización debido al flujo. En esta aproximación el efecto del flujo es modelado por la inclusión de un factor de orientación que depende del flujo [42]. Otra aproximación se basa en una extensión del trabajo de Flory [43] sobre cristalización inducida por la tensión del caucho. Esta extensión asume que los ensamblajes temporales de la red polimérica desempeñan el mismo papel que los enlaces químicos acoplados en la teoría de la cristalización basados en la disminución de la entropía de las moléculas estiradas y de la tendencia del polímero a cristalizar. Una tercera aproximación se basa en la formulación de ecuaciones constitutivas que implican el concepto de configuración natural múltiple y obtienen las ecuaciones de la evolución para la configuración natural y fracción másica de material cristalino maximizando una tasa de disipación preestablecida [44]. Esta última aproximación combina la continuidad mecánica y la termodinámica, asume que los efectos son aditivos, y que los resultados de los diferentes modelos dependen de las formas usadas para la energía interna, entropía y la tasa de disipación.

1.3.1. Estado del arte de los diferentes modelos de orientación y cristalización en *melt spinning*

Aunque hay muy pocos estudios sobre la orientación molecular y cristalización de fibras poliméricas anulares [23] y fibras poliméricas compuestas [30], éste no es el caso de fibras axil-simétricas tales como las empleadas en la industrial textil y en el soplado de películas poliméricas (*film blowing*). El comportamiento mecánico de polímeros está íntimamente relacionado con su morfología y muchos polímeros cristalizan dando lugar a materiales semicristalinos. Por ejemplo, en el estirado (*melt spinning*) de materiales semicristalinos tales como PET, PP, nylon, etc., se producen grandes esfuerzos que dan lugar a una cristalización inducida por el flujo (*flow-induced crystallization* o *FIC*) y la formación de cristales alargados en la dirección de extensión aumenta la resistencia de las fibras resultantes. En el soplado de películas (*film blowing*), el fluido está sujeto a una extensión biaxial y la formación de cristales da lugar a películas (de buenas propiedades mecánicas) tales como las usadas en botellas para bebidas que contienen gas. Por otra parte, la formación de una capa externa altamente orientada tiene efectos mecánicos perniciosos en el moldeado por inyección (*injection molding*). En el estirado de fibras, un parámetro importante es el esfuerzo axial en el punto de solidificación, así como las propiedades microestructurales de la fibra tales como el grado de cristalización y la orientación de los cristales.

La mayor parte de los modelos desarrollados en el pasado para los procesos de estirado de fibras se han basado en fluidos Newtonianos o viscoelásticos en los que la cristalización está desacoplada de la deformación de la fibra y de los campos de esfuerzos, y el punto de solidificación que debería ser una predicción del modelo es impuesto externamente. Por otra parte, estos modelos introducen los efectos de cristalización a través de la dependencia de la

viscosidad con el grado de cristalización, lo que da lugar a que sean incapaces de predecir el fenómeno de *necking* que ocurre a altas velocidades de estirado. Con objeto de eliminar las deficiencias expuestas, se han desarrollado modelos microestructurales unidimensionales para el FIC que incluyen los efectos combinados de cristalización, reología, enfriamiento de la fibra, resistencia del aire, inercia, tensión superficial y gravedad. Uno de estos modelos [45, 46, 47, 48, 49] se basa en una aproximación de dos fases en la que el *melt* se considera como una suspensión concentrada de macromoléculas flexibles que puede describirse como un fluido del tipo Giesekus con extensibilidad finita, mientras que la fase semicristalina se aproxima como una colección de varillas rígidas que crecen y se orientan en el fluido. Este modelo usa una ecuación para la cristalización que viene dada por una ecuación no isoterma de Avrami–Kolmogorov y contiene un factor que tiene en cuenta la nucleación y la cinética de polímeros y que trata de representar la cinética de la transición de fase. En este modelo, tanto el *melt* como los cristales, están acoplados a través de los esfuerzos y el efecto del grado de cristalización sobre los tiempos de relajación.

Otros modelos [50, 31] que tienen en cuenta la alineación molecular cuantifican la orientación por medio de un parámetro de orden que representa una información promediada con respecto al eje mayor óptico y deducen la dinámica de la orientación a partir de una ecuación de Doi–Edwards que tiene en cuenta tanto el efecto del flujo sobre la orientación como la naturaleza cambiante de la microestructura del polímero. Además, estos modelos relacionan la viscosidad elongacional con el grado de cristalización usando correlaciones empíricas tales como las desarrolladas por Eder [38], mientras que la cinética de la cristalización es considerada con un modelo de Avrami corregido por el modelo de Ziabicki [51] para tener en cuenta el acoplamiento entre el grado de cristalización y la orientación de los polímeros. Estos modelos suponen que existe un número suficiente de sitios de nucleación para inducir el crecimiento de los núcleos y no tienen en cuenta la conformación de los polímeros y los mecanismos que inician la nucleación. Esto significa que estos modelos suponen que se dan las condiciones propicias para el comienzo de la cristalización. Los modelos de Ziabicki [51] y Joo et al. [52] son modelos de una sola fase en el sentido que la reología de la fase cristalina es viscoelástica mientras que la viscosidad varía con el grado de cristalización. Por otra parte, los modelos unidimensionales de Kulkarni y Beris [53] y Kannan y Rajagopal [54] son de dos fases en los que las contribuciones de las fases amorfa y cristalina al esfuerzo total son promediadas en función del grado de cristalización, mientras que el modelo de van Meerveld et al. [55] tiene en cuenta la nucleación y crecimiento de esferulitas y modela la influencia de la cristalización por medio de un término que contribuye a los esfuerzos viscosos.

Algunos modelos que sólo explican las interacciones entre la orientación y la hidrodinámica en procesos de estirado de fibras y, que no tienen en cuenta, por tanto, los efectos de la energía y de los cambios de fase han sido desarrollados por Forest et al. [56, 57] para fibras líquidas poliméricas axilsimétricas cristalinas. Estos autores consideran la evolución de la microestructura en flujos isoterms a partir de ecuaciones cinéticas promediadas tridimensionales de Doi–Edwards antes de emprender el estudio de la cristalización de la fibra bajo condiciones de flujo isoterms [58] y no isoterms [50]. Se acepta comúnmente que la cinética de cristalización es accionada por una combinación de la orientación, tensión y temperatura [42].

El modelo unidimensional de fibras líquidas poliméricas cristalinas de Forest et al. [50]

incluye las ecuaciones de conservación de la masa, momento lineal y energía, y dos ecuaciones para el grado de la orientación, s , definido como el promedio del conjunto de las direcciones de la alineación molecular en dirección axial, y del grado de la cristalinidad, Θ , que se puede expresar como

$$\frac{\partial s}{\partial t} + B \frac{\partial s}{\partial x} = (1 - s)(2s + 1) \frac{\partial B}{\partial x} - \frac{\sigma}{\lambda} U(s), \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + B \frac{\partial \Theta}{\partial x} = k_A(s)(\Theta_\infty - \Theta), \quad (1.2)$$

donde σ es un parámetro de resistencia anisotrópico ($0 < \sigma \leq 1$, $\sigma = 1$ para modelos isotrópicos, y $\sigma \approx 0,5$ para modelos moleculares de varillas rígidas), λ es el tiempo de relajación molecular del polímero líquido cristalino, $k_A(s) = k_A(0) \exp(a_2 s^2)$ es la tasa de crecimiento linealizada, $k_A(0)$ es la tasa de crecimiento amorfa [42], a_2 es una constante, Θ_∞ representa el grado máximo de cristalización, $U(s) = s \left(1 - \frac{N}{3}(1 - s)(2s + 1)\right)$ es la energía libre que se encuentra relacionado con el potencial molecular, N es la densidad adimensional del polímero líquido cristalino, α es un parámetro que relaciona la energía cinética con la inercial del polímero líquido cristalino y la viscosidad que aparece en la ecuación de momento lineal unidimensional se reemplaza por $\mu_{eff} = \mu + \frac{2}{3}\alpha\lambda s^2$.

Es bien sabido que los efectos no isotermos debido al rápido enfriamiento de la fibra por el aire circundante y la baja conductividad térmica de las fibras pueden dar lugar a una fibra con una microestructura y propiedades (mecánicas, eléctricas, químicas, ópticas) no uniformes. Consecuentemente, se pueden observar grandes diferencias en orientación y estructura molecular entre el núcleo y el revestimiento en muchas fibras. Aunque se han hecho esfuerzos considerables para entender la dinámica del proceso de *melt spinning* y la relación entre las condiciones de estiramiento y la estructura de la fibra, la mayoría de los estudios previos se basan en modelos unidimensionales que incluyen un submodelo de una sola fase para describir la cristalización inducida por la tensión a lo largo del eje de la fibra. Sin embargo, los resultados de estos modelos no proporcionan ninguna información sobre variaciones radiales y sobre las implicaciones de estas variaciones en la microestructura de la fibra. Por otra parte, los modelos unidimensionales sobreestiman la transferencia de calor en la superficie externa de la fibra para la región inferior del estirado de la misma y predicen de forma inexacta los campos térmicos que influyen en el cálculo de la velocidad axial, tensión axial, cristalización y forma de la superficie libre (geometría) debido al fuerte acoplamiento entre las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento y energía. Debido a la dependencia de la cinética de cristalización con la temperatura y la orientación, se desarrolla un perfil abrupto de cristalinidad, y la variación radial de la orientación molecular y de la cristalización tiene una gran influencia en la microestructura de la fibra y en sus propiedades, tanto físicas como mecánicas, térmicas, químicas, eléctricas y ópticas, tales como módulo de elasticidad y la birrefringencia óptica.

El modelo unidimensional de estirado de fibras cilíndricas desarrollado por Doufas et al. [46, 47, 59, 60] incluye los efectos combinados de la cristalización inducida por el flujo, viscoelasticidad, enfriamiento del filamento, fricción del aire, tensión superficial, calor latente y gravedad. También incluye una fase amorfa (simulada como líquido modificado de Giesekus) y una fase

semicristalina (aproximada como barras rígidas que crecen y se orientan en el campo fluido) que se encuentran acopladas con la tensión y el balance de cantidad de movimiento, y la re-alimentación de la cristalización con el sistema de tiempos de relajación, predice el *necking* y la disminución de la tensión asociada, y muestra que la cristalización ocurre después del punto de solidificación. Estos autores proponen en el modelo de la microestructura anterior al inicio de la cristalización que el polímero fundido que sale del orificio es grueso-granuloso con una concentración de n moléculas pesadas no lineales por unidad de volumen. En una aproximación media del campo, cada uno de los polímero fundidos se supone que contiene N_0 enlaces flexibles de longitud l . La microestructura del fundido es caracterizada por el tensor conformacional $\mathbf{c} = \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle$ que representa los momentos de segundo orden del vector extremo a extremo \mathbf{R} de las cadenas poliméricas [61], donde el operador $\langle \cdot \rangle$ denota un promedio con respecto a la función de distribución de la fase fundida. Por otra parte, el tensor conformacional se asume que viene determinado por una ecuación diferencial y permite determinar el tensor de esfuerzos adicional. Asimismo, también asumieron que la cristalización comienza cuando la temperatura axial en el filamento alcanza la temperatura de fusión de equilibrio, aunque los datos experimentales sugieren que esa cristalización en procesos de *melt spinning* de alta velocidad ocurre por debajo de esa temperatura. Después del inicio de la cristalización, se asume que este proceso se corresponde con la transformación de los N enlaces de la fase amorfa (del fundido) a la semicristalina en una posición arbitraria a lo largo del eje bajo sobreenfriamiento y tensión; esto implica que el estiramiento y la cristalización pueden ocurrir simultáneamente, y el grado de transformación de la fase amorfa a la semicristalina se define como $z = \frac{N}{N_0}$. Generalmente, la fase semicristalina consta de regiones amorfas y cristalinas, y el grado absoluto de cristalización es definido como la relación entre la masa de material cristalino puro y la masa total del sistema, es decir, $z = \frac{\Theta}{\Theta_\infty}$, donde Θ_∞ es el grado máximo de cristalización dentro de la fase semicristalina, es decir, el cociente entre la masa de material cristalino puro y su máximo valor.

Para explicar los efectos de la cristalización en la reología de los procesos de *melt spinning*, se debe tener presente el comportamiento reológico de la fase amorfa (el fundido), la fase semicristalina y la tasa de cristalización. Desde el punto de vista reológico, se puede asumir que ambas fases (amorfas y semicristalina) actúan en paralelo y, por lo tanto, el tensor de la velocidad de deformación es el mismo en ambas fases, mientras que la tensión total es simplemente la superposición de las tensiones individuales.

Un modelo simple para explicar la cristalización (si lo hay) de moléculas bajo condiciones no isothermas consiste en aproximar la tasa de cristalización *térmica* por una ecuación cuasi-estática de Avrami-Kolmogorov, por ejemplo,

$$\frac{d}{dt}[-\ln(1 - \Theta)]^{\frac{1}{n}} = K_{st}(T, \Delta p), \quad (1.3)$$

donde n denota el exponente de Avrami (que se asume de forma usual como un número entero $1 \leq n \leq 4$), y K_{st} es la tasa de cristalización en estado estacionario la cual depende de la temperatura y de la tensión, Δp , y que se puede aproximar por

$$K_{st}(T, \Delta p) = K_{st}(T, 0) \exp[C_3(\Delta p)^2], \quad (1.4)$$

donde C_3 es una constante y $K_{st}(T, 0)$ es la tasa de cristalización anisotrópica [51]. Esta tasa de

cristalización *térmica* puede ser añadida a la *atérmica* y a las inducidas por el flujo y la tensión para obtener la tasa total de cristalización.

Otra aproximación al análisis de la microestructura formada durante el estirado de la fibra se basa en el uso del campo de velocidades y de la geometría de la fibra determinado asintóticamente para una pequeña esbeltez y en la resolución numérica de las ecuaciones bidimensionales para la temperatura, orientación molecular y cristalización [62, 63, 60, 64]. Una vez que estos tres campos han sido obtenidos, se puede obtener una viscosidad efectiva para la ecuación unidimensional de cantidad de movimiento en dirección axial utilizando un promedio de esta variable en cada sección transversal.

Otra opción (mucho más compleja) consiste en resolver las ecuaciones bidimensionales de continuidad, cantidad de movimiento, energía, cristalización y orientación molecular numéricamente teniendo en cuenta que las superficies libres de la fibra deben determinarse como parte de la solución. Un modelo completo bidimensional en estado estacionario que tiene en cuenta la viscoelasticidad, las condiciones no isotermas, la cinética de cristalización y condiciones de superficie libre ha sido desarrollado por Joo et al. [52] y Sun et al. [65] quienes emplearon un modelo viscoelástico no isoterma de Giesekus, una cristalización no isoterma de Nakamura et al. [66] donde la tasa de cristalización es una función de la temperatura y del grado de orientación y que se evalúa por una ecuación propuesta por Ziabicki [51], la cristalización inducida por la temperatura es una función Gaussiana en la formulación de Ziabicki y la orientación molecular es determinada por una ley tensional que introduce el fenómeno de cristalización inducida por el flujo.

Debe ser observado que Joo et al. [52] asumieron que la viscosidad del solvente se puede expresar como el producto de dos términos; el primer término corresponde al polímero amorfo y depende exponencialmente de la temperatura a través de una ecuación de Arrhenius, mientras que el segundo es una función exponencial de la cristalización relativa definida como el cociente entre la fracción volumétrica cristalizada respecto a la máxima. Por otra parte, su cinética de cristalización se basa en la hipótesis de condiciones isocinéticas, para las cuales el cociente de la tasa de crecimiento del cristal respecto al volumen del grano cristalino no depende del tiempo; también despreciaron la cristalización secundaria y utilizaron una extensión de la ecuación isoterma de Avrami–Kolmogorov para describir la cristalización no isoterma que viene gobernada por una ecuación advecctiva.

1.4. Objetivos

El objetivo de este proyecto de investigación tutelado es múltiple, aunque se puede resumir como el estudio asintótico y numérico bidimensional de la fabricación de fibras macizas compuestas axilsimétricas de líquidos poliméricos semicristalinos tales como las empleadas en las industrias óptica, química (filtración, separación), biomédica, materiales, etc., teniendo en cuenta la orientación molecular y la cristalización.

Para lograr esa finalidad, se propone desarrollar un modelo híbrido de $1 + 1/2$ dimensiones basado en las ecuaciones unidimensionales para la geometría y velocidad axial de las fibras

deducidas por el equipo investigador por medio de métodos de perturbaciones para pequeña esbeltez y en las ecuaciones bidimensionales para los campos de temperatura, orientación molecular y cristalización. En este modelo se usa la teoría de orientación molecular de Doi–Edwards para el tensor de orientación modificada para evitar que el grado de cristalización decrezca una vez que el polímero haya solidificado tal y como se ha observado en modelos unidimensionales, y se incluirán los efectos de interacción entre polímeros en la interfaz entre el núcleo y el revestimiento en fibras axilsimétricas compuestas. También se propone utilizar el modelo de Avrami–Kolmogorov desarrollado por el equipo investigador en sus estudios unidimensionales de fibras anulares y fibras macizas compuestas y que incluye los efectos de cristalización inducida por el flujo. Con este modelo se persiguen dos objetivos: en primer lugar, se pretende verificar la validez de los modelos unidimensionales desarrollados por el equipo investigador para fibras poliméricas macizas compuestas, y en segundo lugar, se pretende verificar la validez del modelo de $1 + 1/2$ dimensiones.

Finalmente, se propone realizar estudios numéricos utilizando las ecuaciones de conservación bidimensionales con objeto de analizar las variaciones radiales de la temperatura, orientación molecular y cristalización que afectan a las propiedades de las fibras de polímeros macizas compuestas en función de los números de Reynolds, Froude, Biot, capilaridad, Prandtl, Brinkmann, Jakob y Arrhenius–Zel’dovich, reología del polímero y condiciones de contorno.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos del proceso de *melt spinning*

2.1. Introducción

En el presente capítulo se presentan los fundamentos físicos y matemáticos que gobiernan el proceso de estirado de fibras macizas compuestas.

En primer lugar, se introducen las ecuaciones fluidodinámicas que gobiernan el fenómeno de *melt spinning* de fibras así como las condiciones de contorno y de operación del proceso. Por último, se adimensionalizan las ecuaciones que modelan el problema para en el capítulo 3 poder realizar un análisis asintótico del mismo.

2.2. Formulación del problema

Considérese un chorro líquido axilsimétrico compuesto como el que se representa en la Figura 2.2, constituido por dos fluidos (Newtonianos o no), incompresibles (densidad constante) e inmiscibles. Los chorros interno (cilíndrico) y externo (anular) corresponden a $0 \leq r \leq R_1(x, t)$ y $R_1(x, t) \leq r \leq R_2(x, t)$, respectivamente, donde r , x y t denotan las coordenadas radial y axial y el tiempo respectivamente y generan dos superficies interfaciales que matemáticamente están definidas por,

$$S_1 : S_1(r, x, t) = r - R_1(x, t) = 0, \quad (2.1)$$

$$S_2 : S_2(r, x, t) = r - R_2(x, t) = 0. \quad (2.2)$$

La fluidodinámica del chorro compuesto está gobernada por las clásicas ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía, a saber:

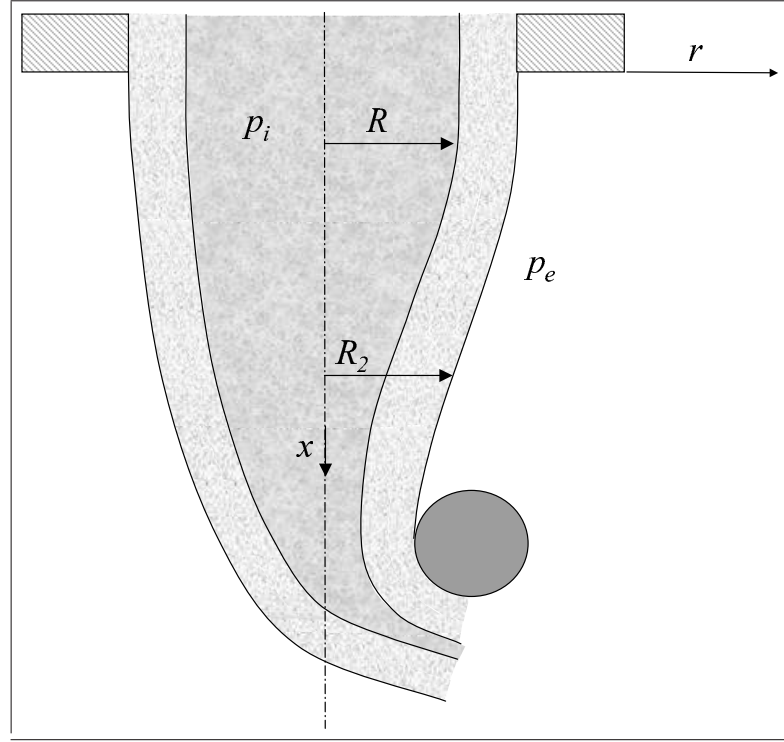


Figura 2.1: Figura esquemática de una fibra compuesta donde se puede apreciar el núcleo (*core*) y el revestimiento (*cladding*). Se ha denotado a R de la figura como R_1 a lo largo del texto.

- Ecuación de conservación de la masa

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_i = 0 \quad i = 1, 2, \quad (2.3)$$

- Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

$$\rho_i \frac{D_i \mathbf{v}_i}{Dt} = \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_i + \rho_i \cdot \mathbf{f}_i^m \quad i = 1, 2, \quad (2.4)$$

- Ecuación de conservación de la energía

$$\rho_i C_i \frac{D_i T_i}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_i + \bar{\bar{\tau}}_i' : \nabla \mathbf{v}_i + h_i \quad i = 1, 2, \quad (2.5)$$

siendo $\mathbf{v}_i = (v_i, 0, u_i)$ el vector velocidad, donde $v_i = v_i(r, x, t)$ y $u_i = u_i(r, x, t)$ son las componentes radial y axial de la velocidad, respectivamente y ρ y C representan la densidad y el calor específico, respectivamente. T es la temperatura, $\mathbf{f}^m = (0, 0, g)$ es la resultante de las fuerzas que actúan sobre el fluido siendo g la aceleración de la gravedad, h_i es la generación de energía interna en cada chorro y $\bar{\bar{\tau}}_i$ representa el tensor de esfuerzos que podemos desglosar en dos componentes de la forma:

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_i = -p_i \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}'_i, \quad (2.6)$$

donde p_i es la presión termodinámica interna de cada chorro y $\bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}'_i$ es el tensor de esfuerzos asociado a cada uno de los fluidos e $\bar{\bar{\mathbf{I}}}$ representa el tensor identidad. El operador $\frac{D_i}{Dt}(\cdot)$ usado en las ecuaciones (2.4)–(2.5) representa la derivada sustancial en cada uno de los chorros y viene definido por:

$$\frac{D_i}{Dt}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \mathbf{v}_i \cdot \nabla(\cdot). \quad (2.7)$$

Ley de Fourier de conducción de calor. Para fluidos isotrópicos, se tiene que el flujo de calor es directamente proporcional a su gradiente de temperaturas,

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (2.8)$$

donde k es la conductividad térmica.

Generación de energía interna en el proceso de cristalización. Se ha considerado la generación de energía interna que se produce en las fibras semicristalinas debido al proceso de cristalización que experimenta ésta durante el enfriamiento que tiene lugar en el fenómeno de *melt spinning*. Si se supone que la densidad de la fase amorfa, ρ_a , es constante e igual a la densidad de la fase semicristalina, ρ_c , entonces podemos modelar esta generación de energía mediante la expresión,

$$h_i = \rho_i \Delta H_i \frac{D\Theta_i}{Dt_i}, \quad (2.9)$$

donde ΔH es el calor latente de cambio de fase y $\Theta = \frac{V_c}{V}$ representa el grado de cristalización como la relación entre el volumen de la fase semicristalina respecto del total en cada polímero.

Utilizando coordenadas cilíndricas (r, θ, x) , teniendo presente la simetría axial e imponiendo las ecuaciones (2.3)–(2.9) al chorro compuesto, se tiene el conjunto de ecuaciones escalares que gobierna el fenómeno de estirado de fibras:

■ **Ecuación de conservación de la masa**

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_i) + \frac{\partial u_i}{\partial x} = 0, \quad (2.10)$$

■ **Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje r**

$$\rho_i \mathcal{L}(v_i) = -\frac{\partial p_i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \boldsymbol{\tau}'_{i rr}) + \frac{\partial}{\partial x} (\boldsymbol{\tau}'_{i rx}) - \frac{\boldsymbol{\tau}'_{i \theta\theta}}{r}, \quad (2.11)$$

▪ **Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje x**

$$\rho_i \mathcal{L}(u_i) = -\frac{\partial p_i}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau'_{i\ rx}) + \frac{\partial}{\partial x} (\tau'_{i\ xx}) + \rho_i g, \quad (2.12)$$

▪ **Ecuación de conservación de la energía**

$$\rho_i C_i \mathcal{L}(T_i) = k_i \left(\frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) \right) + \Phi_i + \rho_i \Delta H_i \mathcal{L}(\Theta_i), \quad (2.13)$$

donde los subíndices $i = 1, 2$ denotan los chorros interno y externo respectivamente, el operador \mathcal{L} viene dado por

$$\mathcal{L}(\alpha_i) = \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + v_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial r}, \quad (2.14)$$

y la tasa de disipación, Φ tiene la siguiente expresión,

$$\Phi_i = \tau'_{i\ rr} \frac{\partial v_i}{\partial r} + \tau'_{i\ rx} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r} + \frac{\partial v_i}{\partial x} \right) + \tau'_{i\ \theta\theta} \left(\frac{v_i}{r} \right) + \tau'_{i\ xx} \frac{\partial u_i}{\partial x}. \quad (2.15)$$

En las ecuaciones formuladas se ha tenido presente que la densidad, el calor específico y la conductividad térmica son constantes para cada uno de los chorros.

Fluidos Newtonianos amorfos. Ley de Navier–Stokes. Para fluidos Newtonianos incompresibles e isotrópicos, la ley de Navier–Stokes relaciona el tensor de esfuerzos viscosos con el tensor de tasa de deformación mediante la ecuación (2.16):

$$\bar{\bar{\tau}}' = 2\mu \bar{\bar{D}} = \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T), \quad (2.16)$$

donde T denota traspuesta y el tensor gradiente de velocidad viene dado para un flujo axil-simétrico por

$$\nabla \mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial r} & 0 & \frac{\partial u}{\partial r} \\ 0 & \frac{v}{r} & 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & \frac{\partial u}{\partial x} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

De esta forma, podemos escribir el tensor de esfuerzos de cada fluido como

$$\bar{\bar{\tau}}_i = -p_i \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 2\mu_i \begin{pmatrix} \frac{\partial v_i}{\partial r} & 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r} + \frac{\partial v_i}{\partial x} \right) \\ 0 & \frac{v_i}{r} & 0 \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x} + \frac{\partial u_i}{\partial r} \right) & 0 & \frac{\partial u_i}{\partial x} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Fluidos Newtonianos semicristalinos. Viscosidad inducida por la orientación.

Para fluidos newtonianos semicristalinos, el tensor de esfuerzos $\bar{\tau}'$ desviador viene caracterizado por:

$$\begin{aligned}\bar{\tau}' &= \bar{\tau}'_V + \bar{\tau}'_S \\ \bar{\tau}'_V &= 2\mu \bar{\mathbf{D}} \\ \bar{\tau}'_S &= 3c k_B T \left[-F(\bar{\mathbf{S}}) \frac{\lambda(T)}{\psi} + 2\lambda(T) (\nabla \mathbf{v}^T : \bar{\mathbf{S}}) (\bar{\mathbf{S}} + \bar{\mathbf{I}}/3) \right]\end{aligned}\quad (2.19)$$

El término $\bar{\tau}'_S$ depende del tensor de orientación, $\bar{\mathbf{S}}$, donde c es el número de moléculas poliméricas por unidad de volumen y $\lambda(T)$ es el tiempo de relajación de las moléculas líquidas poliméricas cristalinas asociadas con la rotación como si fueran varillas rígidas, k_B es la constante de Stefan–Boltzmann y T es la temperatura absoluta. Se puede modelar este tiempo de relajación mediante una expresión de Arrhenius de la forma,

$$\lambda(T) = \lambda_0 \exp(-\omega(T - T_0)), \quad (2.20)$$

donde λ_0 es el tiempo de relajación a la temperatura T_0 y ω es un parámetro (unidades de inversa de temperatura) que debe ser determinado mediante experimentos.

El tensor de orientación $\bar{\mathbf{S}}$ se supone simétrico con cuatro componentes no nulas de la forma,

$$\bar{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} S_{rr} & 0 & S_{rx} \\ 0 & S_{\theta\theta} & 0 \\ S_{rx} & 0 & S_{xx} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

siendo la ecuación de Doi–Edwards [50] la que gobierna su evolución,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\bar{\mathbf{S}}) - (\nabla \mathbf{v}^T \cdot \bar{\mathbf{S}} + \bar{\mathbf{S}} \cdot \nabla \mathbf{v}) &= F(\bar{\mathbf{S}}) + G(\nabla \mathbf{v}, \bar{\mathbf{S}}), \\ F(\bar{\mathbf{S}}) &= -\frac{\psi}{\lambda(T)} \left\{ (1 - N/3) \bar{\mathbf{S}} - N (\bar{\mathbf{S}} \cdot \bar{\mathbf{S}}) + N (\bar{\mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}}) (\bar{\mathbf{S}} + \bar{\mathbf{I}}/3) \right\} \\ G(\nabla \mathbf{v}, \bar{\mathbf{S}}) &= \frac{2}{3} \bar{\mathbf{D}} - 2 (\nabla \mathbf{v}^T : \bar{\mathbf{S}}) (\bar{\mathbf{S}} + \bar{\mathbf{I}}/3)\end{aligned}\quad (2.22)$$

En la ecuación (2.22), ψ es un parámetro adimensional que describe el arrastre anisotrópico experimentado por una molécula que se mueve de forma relativa a la solución fluida; $0 \leq \psi \leq 1$, donde $\psi = 1$ se corresponde con el límite de fricción isotrópica y $\psi = 0$ es el límite de máxima anisotropía. Asimismo, N es una medida adimensional de la densidad c del polímero líquido cristalino que caracteriza la longitud y forma del potencial intermolecular. Se debe notar que F caracteriza la dinámica de orientación independiente del flujo mientras G describe la interacción flujo–orientación.

Modelo de viscosidad dinámica. La viscosidad dinámica, μ , de cada chorro fluido, supuesto Newtoniano, es una función de la temperatura que puede venir dada por una expresión de Arrhenius como, por ejemplo,

$$\mu_i = G_i \exp\left(-\frac{F_i}{\mathbf{R}T_i}\right), \quad (2.23)$$

donde G_i es un factor pre-exponencial constante, F_i es la energía de activación y \mathbf{R} es la constante universal de los gases. Otras expresiones para la viscosidad dinámica pueden ser

$$\mu_i = G_i \exp\left(-\frac{F_i}{\mathbf{R}(T_i - T_i^m)}\right), \quad (2.24)$$

$$\mu_i = G_i \exp(-E_i(T_i - T_i^m)), \quad (2.25)$$

donde T^m denota la temperatura de *melting*. Las ecuaciones (2.24) y (2.25) indican que la viscosidad aumenta de forma exponencial conforme la temperatura, T , disminuye por debajo de la temperatura de fusión, T^m .

Condiciones de contorno. Las ecuaciones (2.10)–(2.13) están sujetas a condiciones de contorno cinemáticas, dinámicas y térmicas en las interfaces de los chorros $S_1(r, x, t)$ y $S_2(r, x, t)$, así como a condiciones de simetría y condiciones en la zona de salida y recogida de la fibra. La condición cinemática establece que las interfaces del chorro compuesto son superficies materiales. Además, en ellas la tensión tangencial es continua y el salto en la diferencia de las tensiones normales a través de la interface es balanceado por la tensión superficial.

Las condiciones de contorno de simetría, cinemáticas, dinámicas y térmicas en las interfaces de un chorro compuesto pueden ser escritas de la siguiente manera:

■ **Condiciones en el eje de simetría ($r = 0$)**

1. Velocidad

$$v_1 = 0, \quad \frac{\partial u_1}{\partial r} = 0, \quad (2.26)$$

2. Presión

$$\frac{\partial p_1}{\partial r} = 0 \quad (2.27)$$

3. Temperatura

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} = 0, \quad (2.28)$$

■ **Condiciones de contorno en la interface núcleo–revestimiento ($r = R_1(x, t)$)**

1. Condiciones de contorno cinemáticas

$$\frac{D_1 S_1}{Dt} = 0$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla S_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad v_1 - u_1 \frac{\partial R_1}{\partial x} = \frac{\partial R_1}{\partial t}, \quad (2.29)$$

$$\frac{D_2 S_1}{Dt} = 0$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + \mathbf{v}_2 \cdot \nabla S_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad v_2 - u_2 \frac{\partial R_1}{\partial x} = \frac{\partial R_1}{\partial t}, \quad (2.30)$$

2. Continuidad de esfuerzos tangenciales

$$(\mathbf{n}_1 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_2) \cdot \mathbf{t}_1^T = (\mathbf{n}_1 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_1) \cdot \mathbf{t}_1^T$$

$$\begin{aligned} & (\tau'_{2\,rr} - \tau'_{2\,xx}) \frac{\partial R_1}{\partial x} + \tau'_{2\,rx} \left(1 - \left(\frac{\partial R_1}{\partial x} \right)^2 \right) \\ &= (\tau'_{1\,rr} - \tau'_{1\,xx}) \frac{\partial R_1}{\partial x} + \tau'_{1\,rx} \left(1 - \left(\frac{\partial R_1}{\partial x} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

3. Salto de esfuerzos normales

$$(\mathbf{n}_1 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_2) \cdot \mathbf{n}_1^T - (\mathbf{n}_1 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_1) \cdot \mathbf{n}_1^T = \sigma_1 \kappa_1$$

$$\begin{aligned} & \tau'_{2\,xx} \left(\frac{\partial R_1}{\partial x} \right)^2 + \tau'_{2\,rr} - 2\tau'_{2\,rx} \frac{\partial R_1}{\partial x} \\ & - \tau'_{1\,xx} \left(\frac{\partial R_1}{\partial x} \right)^2 - \tau'_{1\,rr} + 2\tau'_{1\,rx} \frac{\partial R_1}{\partial x} \\ &= \sigma_1 J_1 - (p_1 - p_2) \left(1 + \left(\frac{\partial R_1}{\partial x} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.32)$$

4. Continuidad de temperatura

$$T_1 = T_2, \quad (2.33)$$

5. Continuidad de flujo de calor

$$-k_1 \nabla T_1 \cdot \mathbf{n}_1 = -k_2 \nabla T_2 \cdot \mathbf{n}_1, \quad (2.34)$$

▪ **Condiciones de contorno en la interface revestimiento–aire ($r = R_2(x, t)$)**

1. Condiciones de contorno cinemáticas

$$\frac{D_2 S_2}{Dt} = 0$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + \mathbf{v}_2 \cdot \nabla S_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad v_2 = \frac{\partial R_2}{\partial t} + u_2 \frac{\partial R_2}{\partial x}, \quad (2.35)$$

2. Continuidad de esfuerzos tangenciales

$$(\mathbf{n}_2 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_2) \cdot \mathbf{t}_2^T = (\mathbf{n}_2 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_\infty) \cdot \mathbf{t}_2^T$$

$$\begin{aligned} & (\boldsymbol{\tau}'_{2\,rr} - \boldsymbol{\tau}'_{2\,xx}) \frac{\partial R_2}{\partial x} + \boldsymbol{\tau}'_{2\,rx} \left(1 - \left(\frac{\partial R_2}{\partial x} \right)^2 \right) \\ &= (\boldsymbol{\tau}'_{\infty\,rr} - \boldsymbol{\tau}'_{\infty\,xx}) \frac{\partial R_2}{\partial x} + \boldsymbol{\tau}'_{\infty\,rx} \left(1 - \left(\frac{\partial R_2}{\partial x} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.36)$$

3. Salto de esfuerzos normales

$$(\mathbf{n}_2 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_\infty) \cdot \mathbf{n}_2^T - (\mathbf{n}_2 \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}_2) \cdot \mathbf{n}_2^T = \sigma_2 \kappa_2$$

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\tau}'_{\infty\,xx} \left(\frac{\partial R_2}{\partial x} \right)^2 + \boldsymbol{\tau}'_{\infty\,rr} - 2\boldsymbol{\tau}'_{\infty\,rx} \frac{\partial R_2}{\partial x} \\ & - \boldsymbol{\tau}'_{2\,xx} \left(\frac{\partial R_2}{\partial x} \right)^2 - \boldsymbol{\tau}'_{2\,rr} + 2\boldsymbol{\tau}'_{2\,rx} \frac{\partial R_2}{\partial x} \\ &= \sigma_2 J_2 - (p_2 - p_e) \left(1 + \left(\frac{\partial R_2}{\partial x} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.37)$$

4. Equilibrio de flujo de calor

$$-k_2 \nabla T_2 \cdot \mathbf{n}_2 = q_\infty, \quad (2.38)$$

donde σ_2 denota la tensión superficial en la superficie exterior del revestimiento, σ_1 es la tensión superficial en la interface de separación entre ambos chorros, \mathbf{n}_i se corresponde con el vector unitario normal (hacia afuera) en S_i ,

$$\mathbf{n}_i = \frac{\nabla S_i}{|\nabla S_i|} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial R_i}{\partial x} \right)^2}} \left(1, 0, -\frac{\partial R_i}{\partial x} \right). \quad (2.39)$$

La curvatura κ de las interfaces viene dada por la divergencia del vector unitario normal asociado a cada superficie interfacial,

$$\kappa_i = \nabla \cdot \mathbf{n}_i = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial R_i}{\partial x}\right)^2}} \left(\frac{1}{R_i} - \frac{\partial^2 R_i}{\partial x^2} \frac{1}{1 + \left(\frac{\partial R_i}{\partial x}\right)^2} \right), \quad (2.40)$$

y J_i está relacionado con la curvatura mediante la ecuación (2.41),

$$J_i = |\nabla S_i|^2 \cdot \kappa_i = \left(1 + \left(\frac{\partial R_i}{\partial x}\right)^2 \right) \cdot \kappa_i = \frac{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial R_i}{\partial x}\right)^2}}{R_i} - \frac{\frac{\partial^2 R_i}{\partial x^2}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial R_i}{\partial x}\right)^2}}. \quad (2.41)$$

El tensor asociado a los gases que rodean la fibra se ha supuesto

$$\bar{\bar{\tau}}_\infty = -p_e \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \bar{\bar{\tau}}'_\infty, \quad (2.42)$$

donde p_e es la presión del gas que puede ser, en general, función de las coordenadas espaciales y el tiempo.

El flujo de calor a través de la superficie externa del revestimiento, q_∞ , incluye los efectos de transferencia de calor por convección y radiación, es decir,

$$q_\infty = h_c (T(R_2, x, t) - T_\infty) + k_B \varepsilon^* (T(R_2, x, t)^4 - T_\infty^4), \quad (2.43)$$

donde h_c es el coeficiente de película de transferencia de calor por convección, T_∞ es la temperatura de los gases que rodean la fibra compuesta, k_B es la constante de Stefan–Boltzmann y ε^* es la emisividad de la superficie externa de la fibra compuesta. El flujo de calor puede ser escrito como $q_\infty = h(T(R_2, x, t) - T_\infty)$, donde $h = h_c + \sigma \varepsilon^* (T(R_2, x, t)^2 + T_\infty^2)(T(R_2, x, t) + T_\infty)$, el cual depende, entre otros parámetros, de la temperatura de la fibra en R_2 así como de la velocidad de la misma. Por ejemplo, Kase y Matsuo [7] determinaron experimentalmente que, para una fibra cilíndrica de un único componente, $h_c = C \frac{K_\infty}{R(x)} \left(\frac{2\rho_\infty u(x)R(x)}{\mu_\infty} \right)^m$ donde K_∞ , ρ_∞ , y μ_∞ son la conductividad térmica, densidad y viscosidad dinámica, respectivamente del aire a temperatura ambiente, $u(x)$ y $R(x)$ son la velocidad axial y el radio local de la fibra, respectivamente, y C y m se determinan mediante datos experimentales.

La diferencia de las ecuaciones (2.29) y (2.30) implica que $(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{n}_1 = 0$, es decir, la velocidad normal a la interface de separación de ambos chorros ha de ser continua. Si los fluidos son viscosos, entonces $(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{t}_1 = 0$ en $r = R_1(x, t)$ donde

$$\mathbf{t}_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial R_1}{\partial x}\right)^2}} \left(\frac{\partial R_1}{\partial x}, 0, 1 \right), \quad (2.44)$$

representa el vector unitario tangente a $S_1(r, x, t)$ y la componente tangencial de la velocidad es continua en esta interface, es decir,

$$u_1(R_1, x, t) = u_2(R_1, x, t). \quad (2.45)$$

Junto a las condiciones de contorno en la dirección radial, es necesario proporcionar otras condiciones en la dirección axial. Si la fibra compuesta emerge desde una boquilla se produce una relajación en el perfil de velocidades por la transición entre una condición de no deslizamiento justo antes de abandonar la boquilla a un flujo con superficie libre. Este fenómeno puede ocasionar una contracción o hinchado (*swelling*) del chorro lo que implica que la componente radial de la velocidad es importante cerca del orificio de salida. Más aún, esta transición también produce gradientes elevados de presión en la dirección radial cerca del orificio; como consecuencia, un análisis más preciso del flujo cerca de la boquilla de salida requiere una solución completa de las ecuaciones de Navier–Stokes en el interior del orificio y en la superficie libre, lo que precisa del uso de métodos numéricos. A continuación, en la sección 2.3, se adimensionalizan las ecuaciones que gobiernan la fluidodinámica de chorros compuestos amorfos.

2.3. Adimensionalización del problema

Para fibras esbeltas, es decir, $\epsilon = \frac{R_0}{L} \ll 1$, a bajo número de Reynolds es conveniente adimensionalizar las magnitudes $r, x, t, u, v, p, \rho, C, \mu, k$ y ΔH respecto a $R_0, L, t_0 = L/u_0, u_0, v_0, p_0 = \mu_0 u_0/L, \rho_0, C_0, \mu_0, k_0$ y ΔH_0 , respectivamente, donde R_0 y L denotan un radio característico y una longitud en dirección característica del proceso, como pueden ser el radio del orificio de salida del chorro y la distancia entre la zona de inicio y el punto de recogida de la fibra, respectivamente, u_0 es la velocidad axial (constante) característica, $v_0 = \epsilon u_0$, y ρ_0, C_0, μ_0, k_0 y ΔH_0 son una densidad, calor específico, viscosidad, conductividad y calor latente de cambio de fase de referencia, respectivamente. La temperatura conviene adimensionalizarla como $(T - T_r)/\Delta T$ donde $T_r = 0$ y $\Delta T = T_0$ denota la temperatura correspondiente al perfil térmico en el orificio de salida. Puesto que hemos asumido constante la densidad de los fluidos, ρ_0 se puede tomar igual, por ejemplo, a ρ_2 , aunque se ha preferido introducir una densidad de referencia, en general, distinta de las de ambos fluidos. El mismo comentario es aplicable a los valores de referencia empleados en la adimensionalización de los calores específicos, viscosidades dinámicas, conductividades térmicas y calores latentes. Las variables adimensionales quedan, por tanto:

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \frac{r}{R_0} & \hat{x} &= \frac{x}{L} & \hat{t} &= \frac{t}{(L/u_0)} \\ \hat{u} &= \frac{u}{u_0} & \hat{v} &= \frac{v}{(u_0 \epsilon)} & \hat{p} &= \frac{p}{(\mu_0 u_0/L)} & \hat{T} &= \frac{T}{T_0} \\ \hat{\rho} &= \frac{\rho}{\rho_0} & \hat{C} &= \frac{C}{C_0} & \hat{\mu} &= \frac{\mu}{\mu_0} & \hat{k} &= \frac{k}{k_0} & \Delta \hat{H} &= \frac{\Delta H}{\Delta H_0} \end{aligned} \quad (2.46)$$

Usando esta adimensionalización las ecuaciones (2.10)–(2.45) se transforman en

■ Ecuación de conservación de la masa

$$\frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} (\hat{r} \hat{v}_i) + \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial \hat{x}} = 0, \quad (2.47)$$

- Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje \hat{r}

$$(\epsilon Re) \hat{\rho}_i \hat{\mathcal{L}}(\hat{v}_i) = -\frac{\partial \hat{p}_i}{\partial \hat{r}} + \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} (\hat{r} \hat{\tau}'_{i rr}) + \frac{\partial}{\partial \hat{x}} (\epsilon \hat{\tau}'_{i rx}) - \frac{\hat{\tau}'_{i \theta\theta}}{\hat{r}}, \quad (2.48)$$

- Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje \hat{x}

$$(\epsilon Re) \hat{\rho}_i \hat{\mathcal{L}}(\hat{u}_i) = -\epsilon^2 \frac{\partial \hat{p}_i}{\partial \hat{x}} + \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} (\hat{r} \epsilon \hat{\tau}'_{i rx}) + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}} (\hat{\tau}'_{i xx}) + \hat{\rho}_i \frac{Re}{Fr}, \quad (2.49)$$

- Ecuación de conservación de la energía

$$(\epsilon Pe) \hat{\rho}_i \hat{C}_i \hat{\mathcal{L}}(\hat{T}_i) = \epsilon^2 \hat{k}_i \frac{\partial^2 \hat{T}_i}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\hat{k}_i}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left(\hat{r} \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial \hat{r}} \right) + (\epsilon^2 Br) \hat{\Phi}_i + (\epsilon Pe Ja) \hat{\rho}_i \Delta \hat{H}_i \hat{\mathcal{L}}(\hat{\theta}_i), \quad (2.50)$$

donde el operador $\hat{\mathcal{L}}$ viene dado por

$$\hat{\mathcal{L}}(\alpha_i) = t_0 \cdot \mathcal{L}(\alpha_i) = \frac{\partial \alpha_i}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \hat{r}}, \quad (2.51)$$

la tasa de disipación adimensional, $\hat{\Phi}$ viene dada por

$$\hat{\Phi}_i = \left(\frac{t_0}{p_0} \right) \cdot \Phi_i = \hat{\tau}'_{i rr} \frac{\partial \hat{v}_i}{\partial \hat{r}} + \hat{\tau}'_{i rx} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial \hat{r}} + \epsilon \frac{\partial \hat{v}_i}{\partial \hat{x}} \right) + \hat{\tau}'_{i \theta\theta} \left(\frac{\hat{v}_i}{\hat{r}} \right) + \hat{\tau}'_{i xx} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial \hat{x}}, \quad (2.52)$$

y

$$Re = \frac{\rho_0 u_0 R_0}{\mu_0}, \quad Fr = \frac{u_0^2}{g R_0}, \quad Ca = \frac{\mu_0 u_0}{\sigma_2}, \quad Pr = \frac{\mu_0 C_0}{k_0}, \quad (2.53)$$

$$Pe = Re Pr = \left(\frac{\rho_0 C_0}{k_0} \right) u_0 R_0, \quad Br = \frac{\mu_0 u_0^2}{k_0 T_0}, \quad Ja = \frac{\Delta H_0}{C_0 T_0}, \quad Bi = \frac{h R_0}{k_0}, \quad (2.54)$$

denotan los números de Reynolds, Froude, capilaridad, Prandtl, Péclet térmico, Brinkman, Jakob y Biot, respectivamente donde h es el coeficiente de película de transferencia de calor por convección.

El tensor de esfuerzos en forma adimensional queda

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\tau}}' &= \bar{\bar{\tau}}'_V + \bar{\bar{\tau}}'_S \\ \bar{\bar{\tau}}'_V &= \frac{\bar{\bar{\tau}}'_V}{p_0} = 2\hat{\mu} \bar{\bar{D}} \\ \bar{\bar{\tau}}'_S &= \frac{\bar{\bar{\tau}}'_S}{p_0} = \alpha \hat{T} \left[-\hat{F}(\bar{\bar{S}}) \frac{\hat{\lambda}(\hat{T})}{\psi} + 2\hat{\lambda}(\hat{T}) \left(\hat{\nabla} \mathbf{v}^T : \bar{\bar{S}} \right) \left(\bar{\bar{S}} + \bar{\bar{I}}/3 \right) \right] \end{aligned} \quad (2.55)$$

donde $\alpha = \frac{3ck_B T_0}{(\mu_0 u_0/L)}$ y

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}} = t_0 \cdot \bar{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{r}} & 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} + \epsilon \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} \right) \\ 0 & \frac{\hat{v}}{\hat{r}} & 0 \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} + \epsilon \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} \right) & 0 & \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

$$\hat{\nabla} \mathbf{v} = t_0 \cdot \nabla \mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{r}} & 0 & \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} \\ 0 & \frac{\hat{v}}{\hat{r}} & 0 \\ \epsilon \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} & 0 & \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Puesto que la componente $\hat{\boldsymbol{\tau}}'_{rx}$ aparece en las ecuaciones de cantidad de movimiento multiplicada por ϵ se cree conveniente definir

$$\hat{\hat{\boldsymbol{\tau}}}'_{rx} = \epsilon \hat{\boldsymbol{\tau}}'_{rx}. \quad (2.58)$$

Asimismo, se va suponer que el parámetro α_i es pequeño, es decir, $\alpha_i = \epsilon \bar{\alpha}_i$ donde $\bar{\alpha}_i = O(1)$. Esto mismo es aplicable a la componente $\hat{\boldsymbol{\tau}}'_{\infty rx}$ del tensor de esfuerzos viscosos de los gases que rodean la fibra, es decir,

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}'_{\infty rx} = \epsilon \hat{\hat{\boldsymbol{\tau}}}'_{\infty rx}, \quad (2.59)$$

donde $\hat{\hat{\boldsymbol{\tau}}}'_{\infty rx} = O(1)$.

De esta manera, las componentes del tensor de esfuerzos presentan las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\tau}}'_{rr} &= 2\hat{\mu} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{r}} + 2\epsilon \bar{\alpha} \hat{\lambda} \hat{T} \Pi^* \left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) + \epsilon \bar{\alpha} \hat{T} \left\{ S_{rr} - N \left[\left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) (S_{rr} - \Pi_s) + S_{rx}^2 \right] \right\} \\ \hat{\boldsymbol{\tau}}'_{rx} &= \hat{\mu} \left(\frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} + \epsilon^2 \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} \right) + \epsilon^2 S_{rx} \left(2\bar{\alpha} \hat{\lambda} \hat{T} \Pi^* + \bar{\alpha} \hat{T} \left\{ 1 - N \left[\left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) + (S_{xx} - \Pi_s) \right] \right\} \right) \\ \hat{\boldsymbol{\tau}}'_{\theta\theta} &= 2\hat{\mu} \frac{\hat{v}}{\hat{r}} + 2\epsilon \bar{\alpha} \hat{\lambda} \hat{T} \Pi^* \left(S_{\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) + \epsilon \bar{\alpha} \hat{T} \left\{ S_{\theta\theta} - N \left[\left(S_{\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{\theta\theta} - \Pi_s) \right] \right\} \\ \hat{\boldsymbol{\tau}}'_{xx} &= 2\hat{\mu} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} + 2\epsilon \bar{\alpha} \hat{\lambda} \hat{T} \Pi^* \left(S_{xx} + \frac{1}{3} \right) + \epsilon \bar{\alpha} \hat{T} \left\{ S_{xx} - N \left[\left(S_{xx} + \frac{1}{3} \right) (S_{xx} - \Pi_s) + S_{rx}^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

donde

$$\Pi_s = \left(\bar{\bar{\mathbf{S}}} : \bar{\bar{\mathbf{S}}} \right) = S_{rr}^2 + S_{\theta\theta}^2 + S_{xx}^2 + 2S_{rx}^2 \quad (2.60)$$

$$\Pi^* = \left(\hat{\nabla} \mathbf{v}^T : \bar{\bar{\mathbf{S}}} \right) = \left(S_{rr} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{r}} + S_{\theta\theta} \frac{\hat{v}}{\hat{r}} + S_{xx} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} \right) + S_{rx} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} + \epsilon \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} \right) \quad (2.61)$$

El tiempo de relajación adimensional $\hat{\lambda}$ quedaría,

$$\hat{\lambda}(\hat{T}) = \hat{\lambda}_0 \exp \left(\hat{\omega} (1 - \hat{T}) \right), \quad (2.62)$$

donde $\hat{\lambda}_0 = \frac{\lambda_0}{t_0}$ es el tiempo de relajación adimensional a la temperatura T_0 y $\hat{\omega} = \omega T_0$.

Adimensionalizando la ecuación matricial que gobierna la evolución del tensor de orientación $\bar{\bar{\mathbf{S}}}$ se tiene que

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) &= \hat{F}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) + \hat{G}^*(\hat{\nabla}_{\mathbf{v}}, \bar{\bar{\mathbf{S}}}), \\ \hat{F}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) &= -\frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ (1 - N/3) \bar{\bar{\mathbf{S}}} - N (\bar{\bar{\mathbf{S}}} \cdot \bar{\bar{\mathbf{S}}}) + N (\bar{\bar{\mathbf{S}}} : \bar{\bar{\mathbf{S}}}) (\bar{\bar{\mathbf{S}}} + \bar{\bar{\mathbf{I}}}/3) \right\} \\ \hat{G}^*(\hat{\nabla}_{\mathbf{v}}, \bar{\bar{\mathbf{S}}}) &= \frac{2}{3} \bar{\bar{\mathbf{D}}} - 2 (\hat{\nabla}_{\mathbf{v}}^T : \bar{\bar{\mathbf{S}}}) (\bar{\bar{\mathbf{S}}} + \bar{\bar{\mathbf{I}}}/3) + (\hat{\nabla}_{\mathbf{v}}^T \cdot \bar{\bar{\mathbf{S}}} + \bar{\bar{\mathbf{S}}} \cdot \hat{\nabla}_{\mathbf{v}})\end{aligned}\quad (2.63)$$

Tras algunas manipulaciones algebraicas se llega a

$$\hat{F}_{rr}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = -\frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{rr} - N \left[\left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) (S_{rr} - \Pi_s) + S_{rx}^2 \right] \right\}, \quad (2.64)$$

$$\hat{G}_{rr}^*(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = - \left[\left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) \left(-2 \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{r}} + 2\Pi^* \right) - 2\epsilon \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} S_{rx} \right], \quad (2.65)$$

$$\hat{F}_{rx}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = -\frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} S_{rx} \left\{ 1 - N \left[\left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) + (S_{xx} - \Pi_s) \right] \right\}, \quad (2.66)$$

$$\hat{G}_{rx}^*(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = - \left[S_{rx} \left(-\frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} - \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{r}} + 2\Pi^* \right) - \epsilon \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} \left(S_{xx} + \frac{1}{3} \right) - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} \left(S_{rr} + \frac{1}{3} \right) \right], \quad (2.67)$$

$$\hat{F}_{\theta\theta}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = -\frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{\theta\theta} - N \left[\left(S_{\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{\theta\theta} - \Pi_s) \right] \right\}, \quad (2.68)$$

$$\hat{G}_{\theta\theta}^*(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = - \left[\left(S_{\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) \left(-2 \frac{\hat{v}}{\hat{r}} + 2\Pi^* \right) \right], \quad (2.69)$$

$$\hat{F}_{xx}(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = -\frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{xx} - N \left[\left(S_{xx} + \frac{1}{3} \right) (S_{xx} - \Pi_s) + S_{rx}^2 \right] \right\}, \quad (2.70)$$

$$\hat{G}_{xx}^*(\bar{\bar{\mathbf{S}}}) = - \left[\left(S_{xx} + \frac{1}{3} \right) \left(-2 \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} + 2\Pi^* \right) - 2 \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{r}} S_{rx} \right], \quad (2.71)$$

En cuanto a las condiciones de contorno,

▪ **Condiciones en el eje de simetría ($\hat{r} = 0$)**

1. Velocidad

$$\hat{v}_1 = 0, \quad \frac{\partial \hat{u}_1}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (2.72)$$

2. Presión

$$\frac{\partial \hat{p}_1}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (2.73)$$

3. Temperatura

$$\frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (2.74)$$

■ **Condiciones de contorno en la interface núcleo–revestimiento ($\hat{r} = \hat{R}_1(\hat{x}, \hat{t})$)**

1. Condiciones de contorno cinemáticas

$$\hat{v}_1 = \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_1 \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}}, \quad (2.75)$$

$$\hat{v}_2 = \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_2 \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}}, \quad (2.76)$$

2. Continuidad de esfuerzos tangenciales

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 (\hat{\tau}'_{2\,rr} - \hat{\tau}'_{2\,xx}) \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} + \hat{\tau}'_{2\,rx} \left(1 - \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right)^2 \right) \\ &= \epsilon^2 (\hat{\tau}'_{1\,rr} - \hat{\tau}'_{1\,xx}) \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} + \hat{\tau}'_{1\,rx} \left(1 - \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.77)$$

3. Salto de esfuerzos normales

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 \hat{\tau}'_{2\,xx} \left(\frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right)^2 + \hat{\tau}'_{2\,rr} - 2 \hat{\tau}'_{2\,rx} \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \\ & - \epsilon^2 \hat{\tau}'_{1\,xx} \left(\frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right)^2 - \hat{\tau}'_{1\,rr} + 2 \hat{\tau}'_{1\,rx} \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \\ &= \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2} \right) \frac{1}{(\epsilon Ca)} \hat{J}_1 - (\hat{p}_1 - \hat{p}_2) \left(1 + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.78)$$

4. Continuidad de temperaturas

$$\hat{T}_1 = \hat{T}_2, \quad (2.79)$$

5. Continuidad de flujo de calor

$$\hat{k}_1 \left(\frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \hat{r}} - \epsilon^2 \frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right) = \hat{k}_2 \left(\frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \hat{r}} - \epsilon^2 \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{R}_1}{\partial \hat{x}} \right), \quad (2.80)$$

■ **Condiciones de contorno en la interface revestimiento–aire ($\hat{r} = \hat{R}_2(\hat{x}, \hat{t})$)**

1. Condiciones de contorno cinemáticas

$$\hat{v}_2 = \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_2 \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}}, \quad (2.81)$$

2. Continuidad de esfuerzos tangenciales

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 (\hat{\tau}'_{2\,rr} - \hat{\tau}'_{2\,xx}) \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} + \hat{\tau}'_{2\,rx} \left(1 - \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \right)^2 \right) \\ &= \epsilon^2 (\hat{\tau}'_{\infty\,rr} - \hat{\tau}'_{\infty\,xx}) \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} + \epsilon^2 \hat{\tau}'_{\infty\,rx} \left(1 - \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.82)$$

3. Salto de esfuerzos normales

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 \hat{\tau}'_{\infty\,xx} \left(\frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \right)^2 + \hat{\tau}'_{\infty\,rr} - 2\epsilon^2 \hat{\tau}'_{\infty\,rx} \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \\ & - \epsilon^2 \hat{\tau}'_{2\,xx} \left(\frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \right)^2 - \hat{\tau}'_{2\,rr} + 2\hat{\tau}'_{2\,rx} \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \\ &= \frac{1}{(\epsilon Ca)} \hat{J}_2 - (\hat{p}_2 - \hat{p}_e) \left(1 + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.83)$$

4. Equilibrio de flujo de calor

$$- \hat{k}_2 \left(\frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \hat{r}} - \epsilon^2 \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{R}_2}{\partial \hat{x}} \right) = Bi (\hat{T}_2 - \hat{T}_\infty), \quad (2.84)$$

donde

$$\hat{J}_i = \frac{\sqrt{1 + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_i}{\partial \hat{x}} \right)^2}}{\hat{R}_i} - \epsilon^2 \frac{\frac{\partial^2 \hat{R}_i}{\partial \hat{x}^2}}{\sqrt{1 + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \hat{R}_i}{\partial \hat{x}} \right)^2}}, \quad (2.85)$$

y se han adimensionalizado las componentes del tensor viscoso del aire como

$$\begin{aligned}\hat{\tau}'_{\infty rr} &= \frac{\tau'_{\infty rr}}{p_0} \\ \hat{\tau}'_{\infty rx} &= \frac{\tau'_{\infty rx}}{p_0}\end{aligned}\tag{2.86}$$

$$\hat{\tau}'_{\infty xx} = \frac{\tau'_{\infty xx}}{p_0}\tag{2.87}$$

La ley de viscosidad adimensional correspondiente con la ecuación (2.25) puede ser escrita como

$$\hat{\mu}_i = \hat{G}_i \exp\left(\hat{E}_i(1 - \hat{T}_i)\right),\tag{2.88}$$

donde la temperatura se ha adimensionalizado respecto a T_0 donde $T_0 = T^m$, por lo que $\hat{\mu}_i$ aumenta cuando el chorro se enfría por debajo de la temperatura de fusión. Además se tiene que $\hat{G}_i = G_i/\mu_0$ y $\hat{E}_i = E_i T_0$. Se pueden obtener expresiones análogas para las demás leyes viscosas, es decir, Eqs. (2.23)–(2.24).

Las ecuaciones (2.47)–(2.88) dependen de ϵ , Re , Fr , Ca , \hat{p}_e , $\bar{\tau}'_{\infty}$, Pr , Br , Bi , $\frac{\sigma_1}{\sigma_2}$, $\frac{\hat{C}_1}{\hat{C}_2}$, $\frac{\hat{k}_1}{\hat{k}_2}$, $\frac{\hat{\rho}_1}{\hat{\rho}_2}$, $\frac{\hat{G}_1}{\hat{G}_2}$, \hat{E}_1 , \hat{E}_2 , $\bar{\alpha}_1$, $\bar{\alpha}_2$, λ_{01} , λ_{02} , $\hat{\omega}_1$, $\hat{\omega}_2$, N_1 y N_2 . Además, la solución a estas ecuaciones también depende de las condiciones de contorno presentes en el inicio de la zona de estiramiento y en el punto de recogida de la fibra. Este enorme conjunto de parámetros no nos permite obtener soluciones simples excepto para geometrías esbeltas y pequeños valores de los números de Reynolds, Biot y Brinkman. Por lo tanto, consideraremos típicas condiciones de operación en la fabricación de fibras compuestas las cuales usualmente vienen caracterizadas por valores bajos de los números adimensionales anteriormente mencionados.

Capítulo 3

Métodos asintóticos y numéricos

3.1. Introducción

En este capítulo, se realiza un análisis de perturbaciones basado en la esbeltez, ϵ , de las fibras a partir del cual se obtienen el conjunto de ecuaciones unidimensionales que para el orden más bajo caracteriza el estirado de fibras compuestas. Asimismo se acoplan estas ecuaciones en estado estacionario con el modelo de cristalización molecular propuesto en la sección 1.3. A continuación, se deduce un modelo híbrido de $1 + 1/2$ dimensiones para el fenómeno de *melt spinning*. Asimismo, se expone muy brevemente el esquema numérico usado para la resolución de ambos modelos.

3.2. Análisis asintótico de chorros líquidos compuestos no isoterms a bajo número de Reynolds

A bajo número de Reynolds, $Re = \epsilon \bar{R}$ donde $\bar{R} = O(1)$, y, dependiendo de las magnitudes de los números de Froude, capilaridad, Brinkman, Jakob y Biot, varios regímenes de flujos pueden ser identificados. En nuestro caso, consideraremos $Fr = \bar{F}/\epsilon$, $Ca = \bar{C}/\epsilon$, $Br = \epsilon^2 \bar{B}r$, $Ja = \epsilon^2 \bar{J}a$ y $Bi = \epsilon^2 \bar{B}$ donde $\bar{F} = O(1)$, $\bar{C} = O(1)$, $\bar{B}r = O(1)$, $\bar{J}a = O(1)$ y $\bar{B} = O(1)$ que se corresponde con pequeños efectos gravitatorios, pequeñas tensiones superficiales, generación de calor debido a la disipación y cambio de fase despreciables y transferencia de calor por convección baja en la superficie externa de la fibra donde se ha supuesto un valor constante (independiente de la temperatura) para el coeficiente de película, h . También se supone despreciable la transferencia de calor por radiación. Estas hipótesis corresponden a velocidades de estirados moderadamente altas.

Teniendo esto presente, la sustitución de los números adimensionales definidos así como la expansión de las variables dependientes del problema \hat{R}_i , \hat{u}_i , \hat{v}_i , \hat{p}_i y \hat{T}_i , donde $i = 1, 2$ como

$$\Psi_i = \Psi_{i,0} + \epsilon^2 \Psi_{i,2} + O(\epsilon^4), \quad (3.1)$$

donde Ψ_i denota cualquier variable dependiente, en las ecuaciones (2.47)–(2.50) y condiciones de contorno (2.72)–(2.84), proporciona la expansión asintótica del problema.

Las componentes del tensor de esfuerzos presentan para el orden más bajo, es decir, $O(\epsilon^0)$, las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}\hat{\tau}'_{i,0rr} &= 2\hat{\mu}_{i,0}\frac{\partial\hat{v}_{i,0}}{\partial\hat{r}} \\ \hat{\tau}'_{i,0rx} &= \hat{\mu}_{i,0}\frac{\partial\hat{u}_{i,0}}{\partial\hat{r}} \\ \hat{\tau}'_{i,0\theta\theta} &= 2\hat{\mu}_{i,0}\frac{\hat{v}_{i,0}}{\hat{r}} \\ \hat{\tau}'_{i,0xx} &= 2\hat{\mu}_{i,0}\frac{\partial\hat{u}_{i,0}}{\partial\hat{x}}\end{aligned}$$

y la componente extradiagonal del tensor de esfuerzos presenta para el orden $O(\epsilon^2)$ (será necesaria su inclusión en el análisis asintótico) la expresión:

$$\hat{\tau}'_{i,2rx} = \hat{\mu}_{i,0}\left(\frac{\partial\hat{u}_{i,2}}{\partial\hat{r}} + \frac{\partial\hat{v}_{i,0}}{\partial\hat{x}}\right) + \bar{\alpha}_i V_i \quad (3.2)$$

donde

$$V_i = \hat{T}_{i,0} S_{i,rx} \left(2\hat{\lambda}_i \Pi_{i,0}^* + \left\{ 1 - N_i \left[\left(S_{i,rr} + \frac{1}{3} \right) + (S_{i,xx} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\} \right) \quad (3.3)$$

El orden más bajo de la expansión asintótica para las ecuaciones que gobiernan el problema corresponde a

- **Ecuación de conservación de la masa**

$$\frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial\hat{r}} (\hat{r}\hat{v}_{i,0}) + \frac{\partial\hat{u}_{i,0}}{\partial\hat{x}} = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.4)$$

- **Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje \hat{r}**

$$-\frac{\partial\hat{p}_{i,0}}{\partial\hat{r}} + \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial\hat{r}} (\hat{r}\hat{\tau}'_{i,0rr}) + \frac{\partial}{\partial\hat{x}} \left(\hat{\mu}_{i,0} \frac{\partial\hat{u}_{i,0}}{\partial\hat{r}} \right) - \frac{\hat{\tau}'_{i,0\theta\theta}}{\hat{r}} = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.5)$$

- **Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje \hat{x}**

$$\frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial\hat{r}} \left(\hat{r}\hat{\mu}_{i,0} \frac{\partial\hat{u}_{i,0}}{\partial\hat{r}} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.6)$$

- **Ecuación de conservación de la energía**

$$\frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial\hat{r}} \left(\hat{r} \frac{\partial\hat{T}_{i,0}}{\partial\hat{r}} \right) = 0, \quad i = 1, 2. \quad (3.7)$$

En cuanto a las condiciones de contorno,

■ **Condiciones en el eje de simetría ($\hat{r} = 0$)**

1. Velocidad

$$\hat{v}_{1,0} = 0, \quad \frac{\partial \hat{u}_{1,0}}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (3.8)$$

2. Presión

$$\frac{\partial \hat{p}_{1,0}}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (3.9)$$

3. Temperatura

$$\frac{\partial \hat{T}_{1,0}}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (3.10)$$

■ **Condiciones de contorno en la interface núcleo–revestimiento ($\hat{r} = \hat{R}_{1,0}(\hat{x}, \hat{t})$)**

1. Condiciones de contorno cinemáticas

$$\hat{v}_{1,0} = \frac{\partial \hat{R}_{1,0}}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_{1,0} \frac{\partial \hat{R}_{1,0}}{\partial \hat{x}}, \quad (3.11)$$

$$\hat{v}_{2,0} = \frac{\partial \hat{R}_{1,0}}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_{2,0} \frac{\partial \hat{R}_{1,0}}{\partial \hat{x}}, \quad (3.12)$$

2. Continuidad de esfuerzos tangenciales

$$\hat{\mu}_{2,0} \frac{\partial \hat{u}_{2,0}}{\partial \hat{r}} = \hat{\mu}_{1,0} \frac{\partial \hat{u}_{1,0}}{\partial \hat{r}}, \quad (3.13)$$

3. Salto de esfuerzos normales

$$\hat{\tau}'_{2,0 rr} - \hat{\tau}'_{1,0 rr} - 2 \left(\hat{\mu}_{2,0} \frac{\partial \hat{u}_{2,0}}{\partial \hat{r}} - \hat{\mu}_{1,0} \frac{\partial \hat{u}_{1,0}}{\partial \hat{r}} \right) \frac{\partial \hat{R}_{1,0}}{\partial \hat{x}} = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2} \right) \frac{1}{\bar{C} \hat{R}_{1,0}} - (\hat{p}_{1,0} - \hat{p}_{2,0}), \quad (3.14)$$

4. Continuidad de temperatura

$$\hat{T}_{1,0} = \hat{T}_{2,0}, \quad (3.15)$$

5. Continuidad de flujo de calor

$$\hat{k}_{1,0} \frac{\partial \hat{T}_{1,0}}{\partial \hat{r}} = \hat{k}_{2,0} \frac{\partial \hat{T}_{2,0}}{\partial \hat{r}}, \quad (3.16)$$

■ **Condiciones de contorno en la interface revestimiento–aire** ($\hat{r} = \hat{R}_{2,0}(\hat{x}, \hat{t})$)

1. Condiciones de contorno cinemáticas

$$\hat{v}_{2,0} = \frac{\partial \hat{R}_{2,0}}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_{2,0} \frac{\partial \hat{R}_{2,0}}{\partial \hat{x}}, \quad (3.17)$$

2. Continuidad de esfuerzos tangenciales

$$\hat{\mu}_{2,0} \frac{\partial \hat{u}_{2,0}}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (3.18)$$

3. Salto de esfuerzos normales

$$\hat{\tau}'_{\infty rr} - \hat{\tau}'_{2,0 rr} + 2\hat{\mu}_{2,0} \frac{\partial \hat{u}_{2,0}}{\partial \hat{r}} \frac{\partial \hat{R}_{2,0}}{\partial \hat{x}} = \frac{1}{\bar{C}\hat{R}_{2,0}} - (\hat{p}_{2,0} - \hat{p}_e), \quad (3.19)$$

4. Equilibrio de flujo de calor

$$\hat{k}_{2,0} \frac{\partial \hat{T}_{2,0}}{\partial \hat{r}} = 0. \quad (3.20)$$

La solución a estas ecuaciones se obtiene de la siguiente manera:

1. Resolviendo las ecuaciones (3.7) junto con las condiciones de contorno (3.15)–(3.16), (3.20) y (3.10), se concluye que las temperaturas de ambos chorros son idénticas e independientes de la coordenada radial,

$$\hat{T}_{i,0} = \mathcal{F}(\hat{x}, \hat{t}), \quad i = 1, 2. \quad (3.21)$$

2. Como consecuencia de (3.21), y puesto que la viscosidad dinámica es una función de la temperatura, es decir, $\hat{\mu}_i = \hat{\mu}(\hat{T}_{i,0} + \epsilon^2 \hat{T}_{i,2} + O(\epsilon^4))$, una expansión en series de Taylor alrededor de $\hat{T}_{i,0}$ muestra que $\hat{\mu}(\hat{T}_i) = \hat{\mu}_{i,0} + \epsilon^2 \hat{\mu}_{i,2} + O(\epsilon^4)$, donde $\hat{\mu}_{i,0} = \hat{\mu}_i(\hat{T}_{i,0})$ y $\hat{\mu}_{i,2} = \frac{d\hat{\mu}_i}{d\hat{T}_i}(\hat{T}_{i,0}) \cdot \hat{T}_{i,2}$, es decir, las viscosidades de los chorros sólo dependen de la coordenada axial y el tiempo a orden $O(\epsilon^0)$. Por tanto, resolviendo las ecuaciones (3.6) junto con las condiciones de contorno (3.8) (componente axial), (3.13), (3.18) y (2.45), se concluye que las velocidades axiales de ambos chorros son idénticas e independientes de la coordenada radial,

$$\hat{u}_{i,0} = \mathcal{B}(\hat{x}, \hat{t}), \quad i = 1, 2. \quad (3.22)$$

3. Resolviendo las ecuaciones (3.4) junto con las condiciones de contorno (3.8) (componente radial) y la resultante de la diferencia entre las condiciones de contorno (3.11) y (3.12) (en $\hat{R}_{1,0}$), se obtiene que las velocidades radiales de ambos chorros presentan una expresión idéntica dada por

$$\hat{v}_{i,0} = -\frac{\hat{r}}{2} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}}, \quad i = 1, 2. \quad (3.23)$$

4. Resolviendo las ecuaciones (3.5), se tiene que

$$\hat{p}_{i,0} - \hat{\tau}'_{i,0 rr} = \mathcal{D}_i(\hat{x}, \hat{t}), \quad i = 1, 2. \quad (3.24)$$

Sustituyendo (3.23) en las condiciones cinemáticas (3.11), (3.12) y (3.17) se obtienen las ecuaciones de conservación de la masa para el orden más bajo

$$\frac{\partial \mathcal{A}_1}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}}(\mathcal{B}\mathcal{A}_1) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{A}_2}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}}(\mathcal{B}\mathcal{A}_2) = 0, \quad (3.25)$$

donde

$$\mathcal{A}_1 = \frac{\hat{R}_{1,0}^2}{2} = \frac{\mathcal{R}_1^2}{2}, \quad \mathcal{A}_2 = \frac{\hat{R}_{2,0}^2 - \hat{R}_{1,0}^2}{2} = \frac{\mathcal{R}_2^2 - \mathcal{R}_1^2}{2}, \quad (3.26)$$

son las áreas de las secciones transversales adimensionales de los chorros interno y externo, respectivamente. Se debe notar que, por simplicidad, los radios de los chorros $\hat{R}_{1,0}$ y $\hat{R}_{2,0}$ se notarán como \mathcal{R}_1 y \mathcal{R}_2 , respectivamente, en lo sucesivo.

Asimismo, sustituyendo (3.24) en las condiciones de contorno de los esfuerzos normales (3.14) y (3.19) se obtienen las ecuaciones del campo de presiones en los fluidos para el orden más bajo

$$\hat{p}_{1,0} - \hat{\tau}'_{1,0 rr} = \mathcal{D}_1(\hat{x}, \hat{t}) = (\hat{p}_e - \hat{\tau}'_{\infty rr}) + \frac{1}{\bar{C}} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_2} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{1}{\mathcal{R}_1} \right), \quad (3.27)$$

$$\hat{p}_{2,0} - \hat{\tau}'_{2,0 rr} = \mathcal{D}_2(\hat{x}, \hat{t}) = (\hat{p}_e - \hat{\tau}'_{\infty rr}) + \frac{1}{\bar{C}} \frac{1}{\mathcal{R}_2}. \quad (3.28)$$

Puesto que es necesario plantear otras dos ecuaciones para cerrar el sistema ya que tenemos cuatro incógnitas, a saber, \mathcal{R}_1 , \mathcal{R}_2 , \mathcal{B} y \mathcal{F} y sólo dos ecuaciones, (3.25), es imprescindible acudir al orden $O(\epsilon^2)$ de la expansión asintótica. En éste, la componente axial de la ecuación de cantidad de movimiento proporciona

$$\hat{\mu}_{i,0} \frac{\partial \hat{u}_{i,2}}{\partial \hat{r}} = \left[(\mathcal{M}_i + \mathcal{N}_i) \frac{\hat{r}}{2} + \frac{\mathcal{P}_i}{\hat{r}} \right], \quad i = 1, 2, \quad (3.29)$$

donde

$$\mathcal{M}_i = \bar{R}\hat{\rho}_i \frac{D\mathcal{B}}{D\hat{t}} - \frac{\bar{R}}{\bar{F}}\hat{\rho}_i + \frac{\partial \hat{p}_{i,0}}{\partial \hat{x}} - \frac{\partial}{\partial \hat{x}} (\hat{\tau}'_{i,0}{}_{xx}), \quad (3.30)$$

$$\mathcal{N}_i = -\frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left[\hat{r} \left(\hat{\mu}_{i,0} \frac{\partial \hat{v}_{i,0}}{\partial \hat{x}} + \bar{\alpha}_i V_i \right) \right], \quad (3.31)$$

en la que \mathcal{P}_i es una función de \hat{x} y \hat{t} .

Las condiciones de contorno de esfuerzo tangencial en las interfaces (Eqs. (2.77) y (2.82)), junto con la expresión de $\hat{v}_{i,0}$ y la condición de no deslizamiento (2.45) para el orden $O(\epsilon^2)$ proporciona, tras algunas manipulaciones algebraicas,

$$\begin{aligned} \bar{R}(\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \frac{D\mathcal{B}}{D\hat{t}} &= (\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \frac{\bar{R}}{\bar{F}} + \frac{1}{2\bar{C}} \left(\frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \hat{x}} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \hat{x}} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left\{ 3 (\hat{\mu}_{1,0} \mathcal{A}_1 + \hat{\mu}_{2,0} \mathcal{A}_2) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \right\} - \bar{\alpha}_2 V_2 \frac{\mathcal{R}_2}{2} + (\bar{\alpha}_2 V_2 - \bar{\alpha}_1 V_1) \frac{\mathcal{R}_1}{2} \\ &- \left[(\hat{\tau}'_{\infty xx} - \hat{\tau}'_{\infty rr}) \frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \hat{x}} - \hat{\tau}'_{\infty rx} \right] \mathcal{R}_2 + \frac{\partial}{\partial \hat{x}} (-\hat{p}_e + \hat{\tau}'_{\infty rr}) (\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2) \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde $\frac{D}{D\hat{t}}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial \hat{t}}(\cdot) + \mathcal{B} \frac{\partial}{\partial \hat{x}}(\cdot)$,

La ecuación de la energía (2.50) para el orden $O(\epsilon^2)$ de la expansión asintótica nos da

$$\hat{T}_{i,2} = \left(\bar{P} \frac{\hat{\rho}_i \hat{C}_i}{\hat{k}_i} \frac{D\mathcal{F}}{D\hat{t}} - \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \hat{x}^2} \right) \frac{\hat{r}^2}{4} + \mathcal{H}_i \ln \hat{r} + \mathcal{R}_i, \quad i = 1, 2, \quad (3.33)$$

donde $\bar{P} = \bar{R}Pr$, con $Pr = O(1)$ y \mathcal{H}_i y \mathcal{R}_i son funciones de \hat{x} y \hat{t} .

La ecuación (3.33) sujeta a la condición de simetría en $\hat{r} = 0$ para el chorro interno ($i = 1$) y las condiciones de contorno térmicas en las interfaces ($O(\epsilon^2)$) nos proporcionan

$$\bar{P} \left(\hat{\rho}_1 \hat{C}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \hat{C}_2 \mathcal{A}_2 \right) \frac{D\mathcal{F}}{D\hat{t}} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left(\left(\mathcal{A}_1 \hat{k}_1 + \mathcal{A}_2 \hat{k}_2 \right) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \hat{x}} \right) - \bar{B} \mathcal{R}_2 (\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty), \quad (3.34)$$

la cual muestra que, bajo las condiciones supuestas, un chorro compuesto presenta el mismo comportamiento que una fibra con un único componente con inercia térmica y conductividad proporcionales a las áreas de la sección transversal y capacidades térmicas y conductividades de los materiales que los compone.

La ecuación (3.34) puede ser escrita de forma alternativa como

$$\left[\bar{P}_1 \left(\frac{\hat{k}_1}{\hat{k}_2} \right) \mathcal{A}_1 + \bar{P}_2 \mathcal{A}_2 \right] \frac{D\mathcal{F}}{D\hat{t}} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[\left(\mathcal{A}_1 \left(\frac{\hat{k}_1}{\hat{k}_2} \right) + \mathcal{A}_2 \right) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \hat{x}} \right] - \bar{B}_2 \mathcal{R}_2 (\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty), \quad (3.35)$$

donde $\bar{P}_i = \bar{P} \left(\frac{\hat{\rho}_i \hat{C}_i}{\hat{k}_i} \right)$ y $\bar{B}_2 = \bar{B}/k_2$.

Las ecuaciones (3.25), (3.32) y (3.34) se reducen a las derivadas por Schultz y Davis [67, 14] y Gupta y Schultz [68] para chorros estacionarios de un único componente bajo condiciones isotermas y no isotermas, respectivamente.

Las ecuaciones (3.25), (3.32) y (3.34) constituyen un sistema de cuatro ecuaciones en derivadas parciales unidimensionales para \mathcal{A}_1 , \mathcal{A}_2 , \mathcal{B} y \mathcal{F} . Este sistema, asintóticamente válido para fibras esbeltas para pequeños números de Reynolds, Biot y Brinkman y grandes valores de los números adimensionales de Froude y capilaridad, es mucho más simple que las ecuaciones (2.10)–(2.45), e incluye los efectos de la temperatura a través de la ecuación (3.34) y la dependencia de la viscosidad con la temperatura en las ecuaciones de cantidad de movimiento. Sin embargo, este sistema de ecuaciones unidimensionales implica que, para el orden más bajo, la velocidad axial y la temperatura de los chorros interno y externo son idénticas. Además, cabe reseñar que no se ha considerado el calor latente de la transformación amorfa a cristalina y se ha asumido disipación viscosa pequeña.

Se debe notar que las ecuaciones (3.25), (3.32) y (3.34) son válidas para $Br = O(\epsilon^2)$ porque la ecuación (2.52) para el orden más bajo requiere que las diferencias en la velocidad axial y temperatura a través de la sección transversal de la fibra compuesta sea suficientemente pequeña [67, 69, 68], o que las correcciones entre los radios de las superficies interna y externa sean pequeños. Cualquiera de estos criterios puede ser empleado para verificar la validez de las ecuaciones unidimensionales (3.25), (3.32) y (3.34) derivadas en esta sección usando si es necesario los resultados de simulaciones numéricas.

3.2.1. Influencia de la disipación viscosa y generación de calor por cristalización

Si consideramos la generación de calor debido a disipación viscosa y la generación de energía debido a cristalización, es decir, $Br = \bar{B}r$ y $Ja = \bar{J}a$, donde $\bar{B}r = O(1)$ y $\bar{J}a = O(1)$, entonces la ecuación para la temperatura nos quedaría

$$\begin{aligned} \bar{P} \left(\hat{\rho}_1 \hat{C}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \hat{C}_2 \mathcal{A}_2 \right) \frac{D\mathcal{F}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left(\left(\mathcal{A}_1 \hat{k}_1 + \mathcal{A}_2 \hat{k}_2 \right) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \hat{x}} \right) - \bar{B} \mathcal{R}_2 (\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty) \\ + 3 \bar{B}r \left(\hat{\mu}_{1,0} \mathcal{A}_1 + \hat{\mu}_{2,0} \mathcal{A}_2 \right) \left(\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \right)^2 + \bar{P} \left(\bar{J}a_1 \hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 \frac{DY_1}{Dt} + \bar{J}a_2 \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2 \frac{DY_2}{Dt} \right) \end{aligned} \quad (3.36)$$

donde $\bar{J}a_i = \Delta \hat{H}_i \bar{J}a$.

3.2.2. Ecuación para el tensor de orientación molecular

Teniendo en cuenta los resultados precedentes, la ecuación que gobierna la evolución de cada una de las componentes del tensor de orientación $\bar{\mathbf{S}}$ viene dada para el orden más bajo por

$$\hat{\mathcal{L}}(\bar{\mathbf{S}}_i) = \hat{F}_{i,0}(\bar{\mathbf{S}}_i) + \hat{G}_{i,0}^*(\nabla \hat{\mathbf{v}}_i, \bar{\mathbf{S}}_i), \quad i = 1, 2, \quad (3.37)$$

donde

$$\begin{aligned} \hat{F}_{i,0rr} &= -\frac{\psi_i}{\hat{\lambda}_i(\mathcal{F})} \left\{ S_{i,rr} - N_i \left[\left(S_{i,rr} + \frac{1}{3} \right) (S_{i,rr} - \Pi_{i,0s}) + S_{i,rx}^2 \right] \right\}, \\ \hat{G}_{i,0rr}^* &= - \left[\left(S_{i,rr} + \frac{1}{3} \right) \left(\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} + 2\Pi_{i,0}^* \right) \right], \\ \hat{F}_{i,0rx} &= -\frac{\psi_i}{\hat{\lambda}_i(\mathcal{F})} S_{i,rx} \left\{ 1 - N_i \left[\left(S_{i,rr} + \frac{1}{3} \right) + (S_{i,xx} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\}, \\ \hat{G}_{i,0rx}^* &= - \left[S_{i,rx} \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} + 2\Pi_{i,0}^* \right) \right], \\ \hat{F}_{i,0\theta\theta} &= -\frac{\psi_i}{\hat{\lambda}_i(\mathcal{F})} \left\{ S_{i,\theta\theta} - N_i \left[\left(S_{i,\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{i,\theta\theta} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\}, \\ \hat{G}_{i,0\theta\theta}^* &= - \left[\left(S_{i,\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) \left(\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} + 2\Pi_{i,0}^* \right) \right], \\ \hat{F}_{i,0xx} &= -\frac{\psi_i}{\hat{\lambda}_i(\mathcal{F})} \left\{ S_{i,xx} - N_i \left[\left(S_{i,xx} + \frac{1}{3} \right) (S_{i,xx} - \Pi_{i,0s}) + S_{i,rx}^2 \right] \right\}, \\ \hat{G}_{i,0xx}^* &= - \left[\left(S_{i,xx} + \frac{1}{3} \right) \left(-2 \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} + 2\Pi_{i,0}^* \right) \right], \end{aligned}$$

donde

$$\Pi_{i,0s} = S_{i,rr}^2 + S_{i,\theta\theta}^2 + S_{i,xx}^2 + 2 S_{i,rx}^2, \quad (3.38)$$

$$\Pi_{i,0}^* = -\frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} (S_{i,rr} + S_{i,\theta\theta} - 2 S_{i,xx}). \quad (3.39)$$

3.2.3. Esfuerzos axiales e interfaciales

La expresión para el esfuerzo axial en cada uno de los chorros que componen la fibra viene dada por

$$\tau_{i,xx} = -p_i + \tau'_{i,xx}, \quad i = 1, 2, \quad (3.40)$$

la cual puede ser integrada en la dirección radial para determinar la fuerza axial (local) en el chorro compuesto. Estas fuerzas axiales pueden ser adimensionalizadas respecto a $(\pi R_0^2/2) p_0$ y, para el orden más bajo, ser escritas en forma adimensional como

$$\mathcal{T}_{i\hat{x}} = \mathcal{A}_i [(\hat{\tau}'_{i\hat{x}\hat{x}} - \hat{\tau}'_{i\hat{r}\hat{r}}) - \mathcal{D}_i]. \quad (3.41)$$

La ecuación (3.41) puede ser escrita usando los resultados previamente obtenidos en esta sección como,

$$\mathcal{T}_{1\hat{x}} = \mathcal{A}_1 \left(3\hat{\mu}_{1,0} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} - (\hat{p}_e - \hat{\tau}'_{\infty rr}) - \frac{1}{\bar{C}} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_2} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{1}{\mathcal{R}_1} \right) \right), \quad (3.42)$$

$$\mathcal{T}_{2\hat{x}} = \mathcal{A}_2 \left(3\hat{\mu}_{2,0} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} - (\hat{p}_e - \hat{\tau}'_{\infty rr}) - \frac{1}{\bar{C}\mathcal{R}_2} \right). \quad (3.43)$$

Los esfuerzos en la interface de ambos chorros, $R_1(x, t)$, pueden ser desglosados en sus componentes normal y tangencial denominados aquí esfuerzos interfaciales normal y cortante, y escribirlas como

$$\tau_{in} = (\mathbf{n}_1 \cdot \bar{\bar{\tau}}_i) \cdot \mathbf{n}_1^T = \frac{1}{1 + \tan^2 \theta_1} ((\tau'_{i\hat{x}\hat{x}} - p_i) \tan^2 \theta_1 - 2\tau'_{i\hat{r}\hat{x}} \tan \theta_1 + (\tau'_{i\hat{r}\hat{r}} - p_i)), \quad (3.44)$$

$$\tau_{it} = (\mathbf{n}_1 \cdot \bar{\bar{\tau}}_i) \cdot \mathbf{t}_1^T = \frac{1}{1 + \tan^2 \theta_1} ((\tau'_{i\hat{r}\hat{r}} - \tau'_{i\hat{x}\hat{x}}) \tan \theta_1 + \tau'_{i\hat{r}\hat{x}} (1 - \tan^2 \theta_1)), \quad (3.45)$$

donde $\tan \theta_1 = \frac{\partial R_1}{\partial x}$, y τ'_{ikl} denotan las componentes del tensor de esfuerzos de los chorros interno y externo.

Adimensionalizando τ_{in} y τ_{it} con respecto a $p_0 = \frac{\mu_0 u_0}{L}$ y $\frac{p_0}{\epsilon} = \frac{\mu_0 u_0}{R_0}$, respectivamente, es fácil demostrar que las tensiones en la interface $\hat{r} = \hat{R}_{1,0}(\hat{x}, \hat{t})$ son

$$\hat{\tau}_{1n} = \frac{\tau_{1n}}{\left(\frac{\mu_0 u_0}{L}\right)} = -(\hat{p}_e - \hat{\tau}'_{\infty rr}) - \frac{1}{\bar{C}} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_2} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{1}{\mathcal{R}_1} \right) + O(\epsilon^2), \quad (3.46)$$

$$\hat{\tau}_{2n} = \frac{\tau_{2n}}{\left(\frac{\mu_0 u_0}{L}\right)} = -(\hat{p}_e - \hat{\tau}'_{\infty rr}) - \frac{1}{\bar{C}} \frac{1}{\mathcal{R}_2} + O(\epsilon^2), \quad (3.47)$$

$$\hat{\tau}_{1t} = \frac{\tau_{1t}}{\left(\frac{\mu_0 u_0}{R_0}\right)} = \mathcal{M}_1 \frac{\mathcal{R}_1}{2} - 3\mu_{1,0} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \hat{x}} + \frac{1}{2} \bar{\alpha}_1 V_1 + O(\epsilon^2), \quad (3.48)$$

$$\hat{\tau}_{2t} = \frac{\tau_{2t}}{\left(\frac{\mu_0 u_0}{R_0}\right)} = \mathcal{M}_2 \frac{\mathcal{R}_1}{2} - 3\mu_{2,0} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \hat{x}} + \frac{1}{2} \bar{\alpha}_2 V_2 + O(\epsilon^2), \quad (3.49)$$

por lo que

$$\hat{\tau}_{1n} - \hat{\tau}_{2n} = -\frac{1}{C} \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{1}{\mathcal{R}_1} + O(\epsilon^2), \quad (3.50)$$

$$\hat{\tau}_{1t} - \hat{\tau}_{2t} = 0 + O(\epsilon^2). \quad (3.51)$$

3.3. Acoplamiento entre flujo, orientación y cristalización. Modelo completo 1D en estado estacionario.

En este proyecto nos vamos a preocupar únicamente de la solución estacionaria del problema de fabricación de fibras poliméricas semicristalinas mediante el método de *melt spinning*.

De esta forma, escribiendo (3.26)–(3.34) para el estado estacionario considerando al aire como fluido no viscoso, $\bar{\tau}'_\infty = \bar{\mathbf{0}}$ y suponiendo presión exterior, \hat{p}_e , sólo función del tiempo (los gases se consideran dinámicamente pasivos ya que, en general, poseen densidades y viscosidades dinámicas inferiores a las de los líquidos) se tiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias donde no se ha tenido en cuenta la influencia de V_i en la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección axial por haber supuesto que $\bar{\alpha}_i = 0$,

$$\frac{d}{d\hat{x}} (\mathcal{A}_i \mathcal{B}) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.52)$$

$$\mathcal{A}_1 = \frac{\mathcal{R}_1^2}{2}, \quad \mathcal{A}_2 = \frac{\mathcal{R}_2^2 - \mathcal{R}_1^2}{2}, \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \bar{R}(\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \mathcal{B} \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} &= (\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \frac{\bar{R}}{\bar{F}} + \frac{1}{2\bar{C}} \left(\frac{d\mathcal{R}_2}{d\hat{x}} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{d\mathcal{R}_1}{d\hat{x}} \right) + \\ &\quad \frac{d}{d\hat{x}} \left(3(\hat{\mu}_{e1,0} \mathcal{A}_1 + \hat{\mu}_{e2,0} \mathcal{A}_2) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} \right) \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\bar{P} \left(\hat{\rho}_1 \hat{C}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \hat{C}_2 \mathcal{A}_2 \right) \mathcal{B} \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}} = \frac{d}{d\hat{x}} \left((\mathcal{A}_1 \hat{k}_1 + \mathcal{A}_2 \hat{k}_2) \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}} \right) - \bar{B} \mathcal{R}_2 (\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty). \quad (3.55)$$

La dinámica de cristalización en polímeros es comúnmente modelada por medio de una ecuación de Avrami generalizada [34, 35, 36], dada por

$$\mathcal{Y} = \mathcal{Y}_\infty \left[1 - \exp \left(- \left(\int_0^t k_A dt \right)^{n_a} \right) \right] \quad (3.56)$$

donde \mathcal{Y} es el grado de cristalización, \mathcal{Y}_∞ es el máximo grado de cristalización y k_A es la tasa linealizada de crecimiento. Para imponer el valor de n_a es necesario conocer información acerca

de la geometría cristalina. Se asume que en el tiempo inicial $t = 0$ suficientes sitios de nucleación han sido formados a partir de los cuales el material cristalino va creciendo.

La fuerte dependencia de la tasa de cristalización con la orientación viene caracterizada por una relación empírica para $k_A = k_A(s)$. Asumiendo un valor de $n_a = 1$, podemos reescribir la ecuación generalizada de Avrami como

$$\frac{D\mathcal{Y}}{Dt} = k_A(s) (\mathcal{Y}_\infty - \mathcal{Y}), \quad (3.57)$$

donde ahora $k_A(s)$ es la tasa de crecimiento cuasiestático dependiente de la orientación molecular.

En estado estacionario, la ecuación (3.57) sugiere que la cristalización inducida por la orientación para cada uno de los chorros viene gobernada por

$$\mathcal{B} \frac{d\mathcal{Y}_i}{d\hat{x}} = k_{Ai}(\mathcal{S}) (\mathcal{Y}_{\infty,i} - \mathcal{Y}_i), \quad i = 1, 2, \quad (3.58)$$

En el trabajo de Ziabicki [42], el tiempo relativo entre el material desorientado y el orientado viene dado por

$$t_{1/2}^{-1}(s) = t_{1/2}^{-1}(0) \exp(a_2 s^2 + a_3 s^3 + \dots) \quad (3.59)$$

donde los coeficientes se fijan mediante datos experimentales. Esto sugiere una expansión polinomial similar para la tasa de crecimiento cristalino

$$k_{Ai}(\mathcal{S}) = k_{Ai}(0) \exp(a_{2i} \mathcal{S}_i^2) \quad (3.60)$$

($k_A = \ln 2 \cdot t_{1/2}^{-1}$) para $n_a = 1$ donde $k_A(s \equiv 0)$ es la tasa de crecimiento isotrópico amorfo y sólo se ha retenido un término de la serie (3.59) en primera aproximación. Experimentos han demostrado también que el coeficiente a_{2i} escala de la forma $a_{2i} \sim 10$.

La viscosidad efectiva, $\mu_{ei,0}$, que aparece en la ecuación (3.54) es una función de la temperatura, la orientación molecular y la cristalización modelándose como

$$\hat{\mu}_{ei,0} = \hat{G}_i \exp(\hat{E}_i (1 - \mathcal{F})) \cdot \exp\left(\beta_i \left(\frac{\mathcal{Y}_i}{\mathcal{Y}_{\infty,i}}\right)^{n_i}\right), \quad i = 1, 2, \quad (3.61)$$

donde β_i es la tasa de cristalización y n_i es el índice de cristalización (dependientes del material, por ejemplo, $\beta_i = 4,605$ y $n_i = 12$ para nylon-66, $\beta_i = 4$ y $n_i = 2$ para PET).

Teniendo presente los resultados ya obtenidos a $O(\epsilon^0)$, el tensor gradiente de velocidad para el orden más bajo se puede poner como

$$\hat{\nabla}_{\mathbf{v}} = \frac{1}{2} \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (3.62)$$

Para la resolución del problema (3.37) es necesario aportar las condiciones iniciales ($\hat{x} = 0$) para cada una de las variables que componen el tensor de orientación molecular. Puesto que en

las referencias bibliográficas se tienen valores iniciales del parámetro de orientación \mathcal{S} , aquellas se obtendrán a partir de éste con la introducción de unos parámetros de escalado de la forma:

$$S_{irr}(0) = \delta \sqrt{\frac{2}{3(1+2\gamma^2+\theta^2+\chi^2)}} \mathcal{S}_{i0} \quad (3.63)$$

$$S_{irx}(0) = \gamma S_{irr}(0) \quad (3.64)$$

$$S_{i\theta\theta}(0) = \theta S_{irr}(0) \quad (3.65)$$

$$S_{ixx}(0) = \chi S_{irr}(0) \quad (3.66)$$

donde $\mathcal{S}_i(0) = \mathcal{S}_{i0}$ y $\delta^2 = 1$.

PRIMER MODELO: Una posibilidad para disminuir la complejidad del problema (3.37) consiste en suponer un tensor de orientación diagonal ($\gamma = 0$ y $\theta = 1$) de la forma:

$$\bar{\mathcal{S}} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -s_r & 0 & 0 \\ 0 & -s_r & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

donde s_r y s_x son funciones de la coordenada axial \hat{x} .

La introducción del tensor de orientación (Eq. (3.67)) en las ecuaciones de Doi–Edwards de la sección [3.2.2] proporcionan las ecuaciones que gobiernan los parámetros de orientación $s_r(\hat{x})$ y $s_x(\hat{x})$,

$$\mathcal{B} \frac{ds_{ir}}{d\hat{x}} = (1 - s_{ir}) \left(1 + \frac{2}{3} (s_{ir} + s_{ix}) \right) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} - \frac{\psi_i}{\hat{\lambda}_i(\mathcal{F})} \left\{ s_{ir} - \frac{N_i}{3} \left[(1 - s_{ir}) \left(s_{ir} + \frac{1}{3} (2s_{ir}^2 + s_{ix}^2) \right) \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \quad (3.68)$$

$$\mathcal{B} \frac{ds_{ix}}{d\hat{x}} = (1 + s_{ix}) \left(2 - \frac{2}{3} (s_{ir} + s_{ix}) \right) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} - \frac{\psi_i}{\hat{\lambda}_i(\mathcal{F})} \left\{ s_{ix} - \frac{N_i}{3} \left[(1 + s_{ix}) \left(s_{ix} - \frac{1}{3} (2s_{ir}^2 + s_{ix}^2) \right) \right] \right\}, \quad i = 1, 2. \quad (3.69)$$

A partir de las soluciones de las ecuaciones (3.68)–(3.69) se obtiene el parámetro de orientación de cada uno de los chorros que componen la fibra que viene definido como

$$\mathcal{S}_i = \sqrt{\frac{3}{2} (\bar{\mathcal{S}} : \bar{\mathcal{S}})} = \sqrt{\frac{1}{6} (2s_{ir}^2 + s_{ix}^2)}, \quad i = 1, 2. \quad (3.70)$$

Además, puesto que la condición inicial del problema viene dada para el parámetro de orientación \mathcal{S}_i , se tiene un grado de libertad para imponer las condiciones iniciales para las funciones s_{ir} y s_{ix} de la forma,

$$\begin{aligned}
s_{ix}(0) &= \chi s_{ir}(0), & i &= 1, 2, \\
s_{ir}(0) &= \sqrt{\frac{6}{2 + \chi^2}} \mathcal{S}_{i0}, & i &= 1, 2, \\
s_{ix}(0) &= \sqrt{\frac{6}{2 + \chi^2}} \chi \mathcal{S}_{i0}, & i &= 1, 2,
\end{aligned} \tag{3.71}$$

donde $\mathcal{S}_i(0) = \mathcal{S}_{i0}$.

SEGUNDO CASO: Forest et al. [58] modelaron la orientación molecular suponiendo un tensor de orientación manteniendo la forma del tensor gradiente de velocidad, $\hat{\nabla} \mathbf{v}$, donde $s_x = 2 s_r = 2 s$ ($\chi = 2$) tal como,

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{s}{3} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \tag{3.72}$$

donde s es únicamente función de la coordenada axial, \hat{x} , con el objetivo fundamental de que las ecuaciones (3.68)–(3.69) se solapen en una única ecuación escalar para el parámetro s de la forma

$$\mathcal{B} \frac{ds_i}{d\hat{x}} = (1 - s_i)(2s_i + 1) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} - \frac{\psi_i}{\lambda_i} s_i \left(1 - \frac{N_i}{3}(1 - s_i)(2s_i + 1) \right), \quad i = 1, 2. \tag{3.73}$$

Teniendo en cuenta (3.73) el parámetro de orientación molecular en cada fluido es,

$$\mathcal{S}_i = \sqrt{\frac{3}{2} (\bar{\mathbf{S}}_i : \bar{\mathbf{S}}_i)} = \sqrt{\frac{3}{2} \Pi_{i_s}} = s_i, \quad i = 1, 2, \tag{3.74}$$

y $\mathcal{A}_1, \mathcal{R}_1, \mathcal{A}_2, \mathcal{R}_2, \mathcal{B}, \mathcal{F}, \mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \mathcal{Y}_1$ e \mathcal{Y}_2 son sólo funciones de la variable independiente adimensional $\hat{x} \in [0, 1]$.

La orientación (3.73) viene afectada por la componente axial de la velocidad, \mathcal{B} , y afecta al grado de cristalización a través de la ecuación (3.58); ambas variables, orientación y cristalización, afectan a la componente axial de la velocidad (3.54) a través de la viscosidades dinámicas efectivas (3.61), y, por supuesto, la geometría de la fibra (3.52) y la temperatura (3.55) vienen determinadas por la componente axial de la velocidad. Esto implica que la orientación molecular y la cristalización de una fibra compuesta están acopladas de manera no lineal con la geometría de la fibra, velocidad axial y temperatura, por lo que el sistema de ecuaciones (3.52)–(3.58) debe ser resuelto mediante un esquema numérico iterativo.

Junto con las ecuaciones (3.52)–(3.58) son necesarias ecuaciones de contorno para la velocidad, \mathcal{B} , y temperatura, \mathcal{F} , así como condiciones al inicio de la zona de estirado ($\hat{x} = 0$) para la geometría, \mathcal{R}_1 y \mathcal{R}_2 , y el grado de orientación molecular, \mathcal{S} y cristalización, \mathcal{Y} . Por ello, en este trabajo se ha decidido adoptar las siguientes condiciones de contorno:

- Geometría

$$\mathcal{R}_i(0) = \mathcal{R}_{i0} \quad i = 1, 2, \quad (3.75)$$

- Velocidad axial

$$\mathcal{B}(0) = \mathcal{B}_0, \quad \mathcal{B}(1) = D_r \cdot \mathcal{B}_0, \quad (3.76)$$

- Temperatura

$$\mathcal{F}(0) = \mathcal{F}_0, \quad \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}}(1) = 0 \quad (\text{cuando se considera conducción axial}), \quad (3.77)$$

- Orientación

$$\mathcal{S}_i(0) = \mathcal{S}_{i0} \quad i = 1, 2, \quad (3.78)$$

- Cristalización

$$\mathcal{Y}_i(0) = \mathcal{Y}_{i0} \quad i = 1, 2, \quad (3.79)$$

donde D_r es la relación de estiramiento. Hay que destacar que algunos autores definen la relación de estiramiento como la raíz cuadrada de la utilizada aquí.

3.3.1. Esquema numérico de resolución

En esta sección se presenta una descripción breve del esquema numérico para resolver el modelo unidimensional planteando el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineal necesario para resolver la fluidodinámica del estirado de fibras compuestas semicristalinas.

En primer lugar, las ecuaciones de conservación de la masa de ambos chorros establece que

$$\frac{d}{d\hat{x}} (\mathcal{A}_i(\hat{x}) \mathcal{B}(\hat{x})) = 0, \quad \Rightarrow \quad \mathcal{A}_i(\hat{x}) \mathcal{B}(\hat{x}) = Q_i \quad i = 1, 2, \quad (3.80)$$

donde Q_i es una constante que representa el caudal de cada uno de los chorros y la suma de ambos la representaremos por $Q = Q_1 + Q_2$. Se debe notar que Q_i viene dado por el producto de las condiciones de contorno (geométricas y de velocidad) en el inicio de la zona de estiramiento, es decir,

$$Q_i = \mathcal{A}_i(0) \mathcal{B}(0) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} Q_1 = \frac{\mathcal{R}_{10}^2}{2} \mathcal{B}_0 \\ Q_2 = \frac{\mathcal{R}_{20}^2 - \mathcal{R}_{10}^2}{2} \mathcal{B}_0 \end{cases} \quad (3.81)$$

Teniendo presente (3.81) la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento se puede poner como,

$$\begin{aligned} \bar{R}(\hat{\rho}_1 Q_1 + \hat{\rho}_2 Q_2) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} = (\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \frac{\bar{R}}{\bar{F}} + 3 \frac{d}{d\hat{x}} (\hat{\mu}_{e,10} \mathcal{A}_1 + \hat{\mu}_{e,20} \mathcal{A}_2) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} + \\ 3 (\hat{\mu}_{e1,0} \mathcal{A}_1 + \hat{\mu}_{e2,0} \mathcal{A}_2) \frac{d^2 \mathcal{B}}{d\hat{x}^2} + \frac{1}{2\bar{C}} \left(\frac{d\mathcal{R}_2}{d\hat{x}} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{d\mathcal{R}_1}{d\hat{x}} \right) \end{aligned} \quad (3.82)$$

que reescribimos como

$$\frac{d^2 \mathcal{B}}{d\hat{x}^2} + \left\{ \frac{d}{d\hat{x}} (\ln \Pi_{\mu_e}) - \left(\frac{\bar{R}}{3} \right) W \frac{1}{\Pi_{\mu_e}} \right\} \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} = - \frac{\Pi_\rho}{\Pi_{\mu_e}} \left(\frac{\bar{R}}{3\bar{F}} \right) - \frac{1}{6\bar{C}} \frac{1}{\Pi_{\mu_e}} \left(\frac{d\mathcal{R}_2}{d\hat{x}} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{d\mathcal{R}_1}{d\hat{x}} \right) \quad (3.83)$$

donde $W = \hat{\rho}_1 Q_1 + \hat{\rho}_2 Q_2$ representa una medida del flujo másico adimensional del chorro compuesto y $\Pi_\rho = \hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2$ y $\Pi_{\mu_e} = \hat{\mu}_{e1,0} \mathcal{A}_1 + \hat{\mu}_{e2,0} \mathcal{A}_2$.

La ecuación (3.83) representa una ecuación diferencial ordinaria lineal (supuesto conocidos los valores de \mathcal{R}_1 y \mathcal{R}_2 , y por tanto, \mathcal{A}_1 y \mathcal{A}_2 y \mathcal{F} , \mathcal{S} e \mathcal{Y}) para \mathcal{B} que ha de resolverse bajo las siguientes condiciones de contorno Dirichlet,

$$\mathcal{B}(0) = \mathcal{B}_0, \quad \mathcal{B}(1) = D_r \cdot \mathcal{B}_0. \quad (3.84)$$

Teniendo presente (3.81), la ecuación de conservación de la energía se puede escribir como,

$$\begin{aligned} \bar{P} \left(\hat{\rho}_1 \hat{C}_1 Q_1 + \hat{\rho}_2 \hat{C}_2 Q_2 \right) \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}} = \frac{d}{d\hat{x}} \left(\mathcal{A}_1 \hat{k}_1 + \mathcal{A}_2 \hat{k}_2 \right) \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}} + \\ \left(\mathcal{A}_1 \hat{k}_1 + \mathcal{A}_2 \hat{k}_2 \right) \frac{d^2 \mathcal{F}}{d\hat{x}^2} - \bar{B} \mathcal{R}_2 (\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty), \end{aligned} \quad (3.85)$$

que reescribimos como

$$\frac{d^2 \mathcal{F}}{d\hat{x}^2} + \left\{ \frac{d}{d\hat{x}} (\ln \Pi_k) - \bar{P} W_C \frac{1}{\Pi_k} \right\} \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}} - \bar{B} \frac{1}{\Pi_k} \mathcal{R}_2 \mathcal{F} = -\bar{B} \frac{1}{\Pi_k} \mathcal{R}_2 \mathcal{F}_\infty, \quad (3.86)$$

donde $W_C = \hat{\rho}_1 \hat{C}_1 Q_1 + \hat{\rho}_2 \hat{C}_2 Q_2$ y $\Pi_k = \hat{k}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{k}_2 \mathcal{A}_2$.

La ecuación (3.86) representa una ecuación diferencial ordinaria lineal (supuesto conocidos los valores de \mathcal{R}_1 y \mathcal{R}_2 , y por tanto, \mathcal{A}_1 y \mathcal{A}_2) para \mathcal{F} que ha de resolverse bajo las siguientes condiciones de contorno,

$$\mathcal{F}(0) = \mathcal{F}_0, \quad \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}}(1) = 0. \quad (3.87)$$

Para resolver el problema se puede seguir el siguiente flujo de instrucciones:

1. Suponer como semilla, $\mathcal{B}^{(0)}(\hat{x})$, para la velocidad axial la solución del regimen viscoso isoterma [70] caracterizado por $(\bar{R} = 0, \bar{C} \rightarrow \infty)$ y valor finito no nulo de \bar{F} . Asimismo, se han de suponer el grado de orientación molecular y la cristalización de ambos chorros usando las condiciones de contorno en la sección de salida e imponiendo, por ejemplo, un perfil axial plano para ambas variables (se puede poner también lineal).

2. Calcular la geometría $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2$ del chorro compuesto usando la ecuación de conservación de la masa.
3. Hallar la temperatura $\mathcal{F}^{(n)}(\hat{x})$ del chorro compuesto usando la ecuación de conservación de la energía.
4. Actualizar las viscosidades dinámicas $\hat{\mu}_{ei,0} = f(\mathcal{F}, \mathcal{Y})$ de cada chorro.
5. Determinar la velocidad axial $\mathcal{B}^{(n)}(\hat{x})$.
6. Hallar la orientación molecular $\mathcal{S}_i^{(n)}(\hat{x})$ y la cristalización $\mathcal{Y}_i^{(n)}(\hat{x})$ de ambos chorros.
7. Iterar hasta conseguir convergencia.

La solución del estado estacionario dado por las ecuaciones se obtiene numéricamente por medio de un método implícito en diferencias finitas, iterativo, conservativo que discretiza los términos difusivos por medio de una aproximación en diferencias centradas de segundo orden de precisión y emplea diferencias hacia atrás para los términos advectivos. El número de puntos en la dirección axial ha sido seleccionado de tal manera que los resultados sean independientes de la malla usando al menos, 2000 puntos (ver apéndice A), que corresponde a un espaciado (en la dirección axial adimensional, \hat{x}) de 5×10^{-4} . Debido al acoplamiento no lineal existente entre la geometría de la fibra, velocidad axial, temperatura, grado de orientación molecular y cristalización, factores de relajación iguales a 0.5 han sido empleados para cada una de estas variables, y se ha establecido un criterio de convergencia de

$$\sqrt{\frac{1}{N_x} \sum_{j=1}^{N_x} \left(\psi_j^{(n+1)} - \psi_j^{(n)} \right)^2} \leq 10^{-8}, \quad (3.88)$$

donde N_x denota el número de puntos de la malla en dirección axial, n es la n -ésima iteración, y ψ representa cualquiera de las variables del problema, a saber, \mathcal{B} , \mathcal{S}_i , \mathcal{Y}_i o \mathcal{F} .

Conducción axial despreciable.

Si se supone despreciable la conducción axial, la ecuación (3.86) nos queda mucho más sencilla como

$$\bar{P} W_C \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}} = -\bar{B} \mathcal{R}_2(\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty), \quad (3.89)$$

con la condición inicial $\mathcal{F}(0) = \mathcal{F}_0$ que tiene como solución,

$$\mathcal{F}(\hat{x}) = \mathcal{F}_\infty + (\mathcal{F}_0 - \mathcal{F}_\infty) \cdot \exp\left(-\frac{\bar{S}t}{\bar{W}C} \int_0^{\hat{x}} \mathcal{R}_2(\hat{x}) d\hat{x}\right), \quad (3.90)$$

donde $\bar{S}t = \bar{B}/\bar{P}$ y se ha supuesto un coeficiente de transmisión de calor por convección en la superficie externa del revestimiento constante.

Soluciones semianalíticas para la orientación molecular y la cristalización.

Si $\psi_i = 0$ en (3.73) (o los tiempos de relajación, λ_i de ambos polímeros son muy elevados), entonces la ecuación resultante puede ser escrita como

$$\frac{d\mathcal{S}_i}{(1 - \mathcal{S}_i)(2\mathcal{S}_i + 1)} = \frac{d\mathcal{B}}{\mathcal{B}} \quad i = 1, 2. \quad (3.91)$$

Esta ecuación diferencial posee dos puntos fijos en $\mathcal{S}_i = 1$ and $\mathcal{S}_i = -\frac{1}{2}$, estable e inestable, respectivamente, y, como $\mathcal{S}_i \geq 0$, se puede demostrar fácilmente que las soluciones a estas ecuaciones evolucionan hacia $\mathcal{S}_i = 1$ sin llegar nunca a alcanzar este valor. Además, estas ecuaciones pueden ser integradas analíticamente sujetas a $\mathcal{S}_i(\mathcal{B}_0) = \mathcal{S}_{i0}$, para obtener la orientación molecular como una función de la velocidad axial para el orden más bajo como

$$\mathcal{B}(\mathcal{S}_i) = \mathcal{B}_0 \left(\frac{1 + 2\mathcal{S}_{i0}}{1 - \mathcal{S}_{i0}} \right)^{-1/3} \left(\frac{1 + 2\mathcal{S}_i}{1 - \mathcal{S}_i} \right)^{1/3} \quad i = 1, 2. \quad (3.92)$$

A partir de la expresión (3.92), uno puede obtener fácilmente $\mathcal{S}_i(\hat{x}) = \mathcal{S}_i(\mathcal{B}(\hat{x}))$ como

$$\mathcal{S}_i(\mathcal{B}) = \frac{(\mathcal{B}^3 - \mathcal{B}_0^3) + \mathcal{S}_{i0} \cdot (2\mathcal{B}^3 + \mathcal{B}_0^3)}{(\mathcal{B}^3 + 2\mathcal{B}_0^3) + 2\mathcal{S}_{i0} \cdot (\mathcal{B}^3 - \mathcal{B}_0^3)} \quad i = 1, 2. \quad (3.93)$$

Además, bajo esta hipótesis, (3.58) puede ser integrada analíticamente sujeta a una condición inicial, $\mathcal{Y}_i(0) = \mathcal{Y}_{i0}$ para proporcionar

$$\mathcal{Y}_i(\hat{x}) = \mathcal{Y}_{\infty,i} + (\mathcal{Y}_0 - \mathcal{Y}_{\infty,i}) \exp\left(-\int_0^{\hat{x}} \frac{k_{Ai}(\mathcal{S}_i)}{\mathcal{B}(\hat{x})} d\hat{x}\right), \quad (3.94)$$

donde $k_{Ai}(\mathcal{S}_i)$ puede ser escrita como $k_{Ai}(\mathcal{B})$ una vez usada $\mathcal{S}_i(\mathcal{B})$ de (3.93). Ambas ecuaciones (3.91) y (3.94) indican que la orientación molecular y la cristalización dependen de $\mathcal{B}(\hat{x})$ la cual, a su vez, depende de manera no lineal de las soluciones de las ecuaciones (3.52)–(3.55). Todas estas soluciones semianalíticas, junto a otras que se pueden obtener mediante la identificación de regímenes sencillos, han sido de gran ayuda para la validación del código numérico.

3.4. Modelo híbrido de $1 + 1/2D$

El modelo híbrido, también denominado modelo $1 + 1/2D$, consiste en resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias que gobiernan la geometría y velocidad axial de la fibra compuesta obtenidas mediante el análisis asintótico (Eqs. (3.52)–(3.54)) usando como parámetro perturbativo la esbeltez, ϵ , de la fibra junto con las ecuaciones en derivadas parciales bidimensionales (axilsimétricas) para la temperatura, tensor de orientación y cristalización que, una vez adimensionalizadas, vienen dadas como

$$\bar{P} \left(\frac{\hat{\rho}_i \hat{C}_i}{\hat{k}_i} \right) \left(\hat{u}_{i,0} \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial \hat{r}} \right) = \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left(\hat{r} \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial \hat{r}} \right) \quad i = 1, 2, \quad (3.95)$$

$$\begin{aligned} \left(\hat{u}_{i,0} \frac{\partial S_{irr}}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial S_{irr}}{\partial \hat{r}} \right) &= \left(S_{irr} + \frac{1}{3} \right) (S_{irr} + S_{i\theta\theta} + S_{ixx} - 1) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \\ - \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{irr} - N \left[\left(S_{irr} + \frac{1}{3} \right) (S_{irr} - \Pi_{i,0s}) + S_{irx}^2 \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.96)$$

$$\begin{aligned} \left(\hat{u}_{i,0} \frac{\partial S_{irx}}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial S_{irx}}{\partial \hat{r}} \right) &= S_{irx} \left(S_{irr} + S_{i\theta\theta} + S_{ixx} + \frac{1}{2} \right) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \\ - \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} S_{irx} \left\{ 1 - N \left[\left(S_{irr} + \frac{1}{3} \right) + (S_{ixx} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} \left(\hat{u}_{i,0} \frac{\partial S_{i\theta\theta}}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial S_{i\theta\theta}}{\partial \hat{r}} \right) &= \left(S_{i\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{irr} + S_{i\theta\theta} + S_{ixx} - 1) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \\ - \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{i\theta\theta} - N \left[\left(S_{i\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{i\theta\theta} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.98)$$

$$\begin{aligned} \left(\hat{u}_{i,0} \frac{\partial S_{ixx}}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial S_{ixx}}{\partial \hat{r}} \right) &= \left(S_{ixx} + \frac{1}{3} \right) (S_{irr} + S_{i\theta\theta} + S_{ixx} + 2) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \\ - \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{ixx} - N \left[\left(S_{ixx} + \frac{1}{3} \right) (S_{ixx} - \Pi_{i,0s}) + S_{irx}^2 \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.99)$$

$$\left(\hat{u}_{i,0} \frac{\partial Y_i}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial Y_i}{\partial \hat{r}} \right) = k_{Ai}(0) \exp(a_{2i} \mathcal{S}_i^2) (Y_{\infty,i} - Y_i), \quad i = 1, 2, \quad (3.100)$$

donde $\bar{P} = \epsilon Pe = O(1)$ y \hat{T}_i , S_i e Y_i son funciones de \hat{r} y \hat{x} , y

$$\Pi_{i,0s} = \left(\bar{\mathcal{S}}_i : \bar{\mathcal{S}}_i \right) = S_{irr}^2 + S_{i\theta\theta}^2 + S_{ixx}^2 + 2 S_{irx}^2, \quad i = 1, 2, \quad (3.101)$$

que es una función de \hat{r} y \hat{x} .

Además, se define el parámetro de orientación \mathcal{S}_i de cada chorro como

$$\mathcal{S}_i = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\bar{\mathcal{S}}_i : \bar{\mathcal{S}}_i \right)} = \sqrt{\frac{3}{2} (S_{irr}^2 + S_{i\theta\theta}^2 + S_{ixx}^2 + 2 S_{irx}^2)}, \quad i = 1, 2, \quad (3.102)$$

Conviene mencionar que en la derivación de las ecuaciones para las temperaturas de ambos chorros se ha despreciado la conducción axial por ser de orden $O(\epsilon^2)$ así como la generación de calor por disipación.

Existe una pequeña dificultad asociada a este modelo que consiste en la utilización de un campo bidimensional de viscosidades dinámicas $\hat{\mu}_{ei,0}(\hat{r}, \hat{x})$ en la ecuación unidimensional (3.54) así como funciones V_i que dependen de ambas variables espaciales. Para solucionar este inconveniente es necesario promediar radialmente todas estas magnitudes en cada sección transversal.

Por ejemplo, para la viscosidad dinámica conseguimos un valor medio, $\langle \hat{\mu}_{ei,0} \rangle(\hat{x})$, asociado a cada uno de los chorros usando el promediado efectuado según las expresiones siguientes:

$$\langle \hat{\mu}_{e1}(\hat{x}) \rangle = \frac{\int_0^{\mathcal{R}_1} \hat{\mu}_{e1,0}(\hat{r}_1, \hat{x}) 2\pi \hat{r}_1 d\hat{r}_1}{\pi \mathcal{R}_1^2} = \frac{\int_0^{\mathcal{R}_1} \hat{\mu}_{e1,0}(\hat{r}_1, \hat{x}) \hat{r}_1 d\hat{r}_1}{\mathcal{A}_1}, \quad (3.103)$$

$$\langle \hat{\mu}_{e2}(\hat{x}) \rangle = \frac{\int_{\mathcal{R}_1}^{\mathcal{R}_2} \hat{\mu}_{e2,0}(\hat{r}_2, \hat{x}) 2\pi \hat{r}_2 d\hat{r}_2}{\pi (\mathcal{R}_2^2 - \mathcal{R}_1^2)} = \frac{\int_{\mathcal{R}_1}^{\mathcal{R}_2} \hat{\mu}_{e2,0}(\hat{r}_2, \hat{x}) \hat{r}_2 d\hat{r}_2}{\mathcal{A}_2}, \quad (3.104)$$

donde $0 \leq \hat{r}_1 \leq \mathcal{R}_1(\hat{x})$ y $\mathcal{R}_1(\hat{x}) \leq \hat{r}_2 \leq \mathcal{R}_2(\hat{x})$. Asimismo, podríamos definir una viscosidad promedio de toda la fibra en una sección determinada como,

$$\langle \hat{\mu}_e(\hat{x}) \rangle = \frac{\int_0^{\mathcal{R}_2} \hat{\mu}_e(\hat{r}, \hat{x}) 2\pi \hat{r} d\hat{r}}{\pi \mathcal{R}_2^2} = \frac{\int_0^{\mathcal{R}_2} \hat{\mu}_e(\hat{r}, \hat{x}) \hat{r} d\hat{r}}{\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2}, \quad (3.105)$$

donde $0 \leq \hat{r} \leq \hat{R}_2(\hat{x})$, que indica que

$$(\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2) \langle \hat{\mu}_e(\hat{x}) \rangle = \mathcal{A}_1 \langle \hat{\mu}_{e1}(\hat{x}) \rangle + \mathcal{A}_2 \langle \hat{\mu}_{e2}(\hat{x}) \rangle. \quad (3.106)$$

De esta forma la ecuación (3.32) para la velocidad axial, \mathcal{B} , queda

$$\begin{aligned} \bar{R}(\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \frac{D\mathcal{B}}{D\hat{t}} &= (\hat{\rho}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{\rho}_2 \mathcal{A}_2) \frac{\bar{R}}{\bar{F}} + \frac{1}{2\bar{C}} \left(\frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \hat{x}} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \hat{x}} \right) + \\ &\quad \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left\{ 3 (\langle \hat{\mu}_{e1,0} \rangle \mathcal{A}_1 + \langle \hat{\mu}_{e2,0} \rangle \mathcal{A}_2) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \right\} \\ &\quad - \bar{\alpha}_2 \langle V_2 \rangle \frac{\mathcal{R}_2}{2} + (\bar{\alpha}_2 \langle V_2 \rangle - \bar{\alpha}_1 \langle V_1 \rangle) \frac{\mathcal{R}_1}{2} \end{aligned} \quad (3.107)$$

Las ecuaciones (3.95)–(3.100) han de resolverse junto con las siguientes condiciones de contorno siguientes

- Temperatura inicial de los chorros

$$\hat{T}_i(\hat{r}, 0) = \hat{T}_{i0}(\hat{r}), \quad (3.108)$$

- Condición para la temperatura en el eje de simetría ($\hat{r} = 0$)

$$\frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \hat{r}} = 0, \quad (3.109)$$

- Condiciones para la temperatura en la interface ($\hat{r} = \mathcal{R}_1$)

$$\hat{T}_1 = \hat{T}_2, \quad (3.110)$$

$$\hat{k}_1 \frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \hat{r}} = \hat{k}_2 \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \hat{r}}, \quad (3.111)$$

- Condición para la temperatura en la interface ($\hat{r} = \mathcal{R}_2$)

$$\frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \hat{r}} - Bi_2 \hat{T}_2 = -Bi_2 \hat{T}_\infty, \quad (3.112)$$

- Orientación molecular inicial de los chorros

$$S_{i_{rr}}(\hat{r}, 0) = \delta \sqrt{\frac{2}{3(1 + 2\gamma^2(\hat{r}) + \theta^2(\hat{r}) + \chi^2(\hat{r}))}} S_i(\hat{r}, 0) \quad (3.113)$$

$$S_{i_{rx}}(\hat{r}, 0) = \gamma(\hat{r}) S_{i_{rr}}(\hat{r}, 0) \quad (3.114)$$

$$S_{i_{\theta\theta}}(\hat{r}, 0) = \theta(\hat{r}) S_{i_{rr}}(\hat{r}, 0) \quad (3.115)$$

$$S_{i_{xx}}(\hat{r}, 0) = \chi(\hat{r}) S_{i_{rr}}(\hat{r}, 0) \quad (3.116)$$

- Cristalización inicial de los chorros

$$Y_i(\hat{r}, 0) = Y_{i0}(\hat{r}) \quad i = 1, 2, \quad (3.117)$$

donde $Bi_2 = Bi/\hat{k}_2$ y $\delta^2 = 1$.

Es importante destacar que, debido al carácter hiperbólico de la ecuaciones que rigen la evolución de la orientación molecular y la cristalización en fibras, es imposible imponer condición de contorno alguna en la interface $\hat{r} = \hat{R}_1(\hat{x})$. Este inconveniente puede hacernos pensar que los modelos no son adecuados y que debe existir algún mecanismo a nivel local que controle el proceso de mezcla de polímeros en la interface de separación de ambos chorros. A pesar de esta crítica y, puesto que es de lo mejor que se dispone, se aceptan como válidos en una primera etapa.

3.4.1. Transformación de coordenadas

Las ecuaciones en derivadas parciales (3.95)–(3.100) se pueden resolver de forma cómoda introduciendo el cambio de variables independientes, $(\hat{r}, \hat{x}) \mapsto (\xi, \eta)$, que transforma el espacio $\Omega_{\hat{r}\hat{x}} = \{[0, \mathcal{R}_2(\hat{x})] \times [0, 1]\}$ en un dominio rectangular $\Omega_{\xi\eta} = \{[0, 1] \times [0, 1]\}$ tal y como se aprecia en la Fig. 3.1,

$$\xi(\hat{r}, \hat{x}) = \frac{\hat{r}}{\mathcal{R}_2(\hat{x})} \quad \eta(\hat{r}, \hat{x}) = \hat{x}, \quad (3.118)$$

$$\hat{r}(\xi, \eta) = \mathcal{R}_2(\eta) \xi \quad \hat{x}(\xi, \eta) = \eta. \quad (3.119)$$

De esta forma, los operadores diferenciales expresados en las nuevas variables se obtienen usando la regla de la cadena como

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial \xi}{\partial \hat{x}} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial \hat{x}} \frac{\partial}{\partial \eta} = -\frac{\xi}{\mathcal{R}_2(\eta)} \frac{d\mathcal{R}_2(\eta)}{d\eta} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad (3.120)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{r}} = \frac{\partial \xi}{\partial \hat{r}} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial \hat{r}} \frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{1}{\mathcal{R}_2(\eta)} \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (3.121)$$

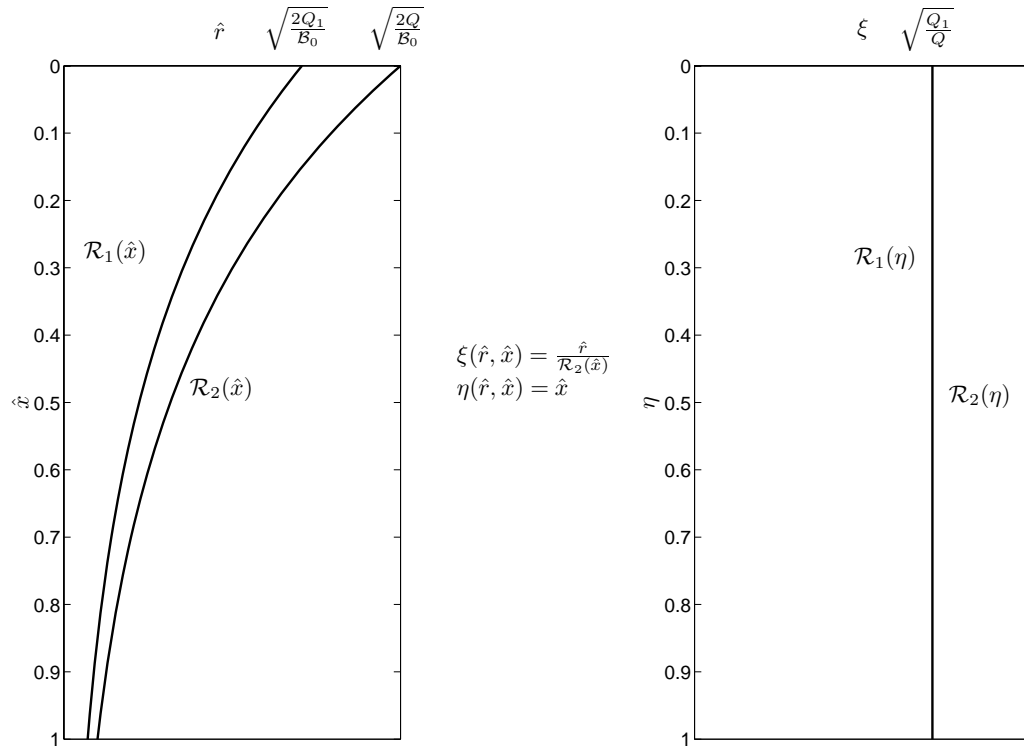


Figura 3.1: Geometría de la fibra compuesta en el dominio físico adimensional (\hat{r}, \hat{x}) y en el transformado (ξ, η) .

El operador convectivo \mathfrak{L} que aparece en (3.95)–(3.100) se puede escribir como

$$\begin{aligned}
\mathfrak{L} &= \hat{u}_{i,0} \frac{\partial}{\partial \hat{x}} + \hat{v}_{i,0} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \\
&= \mathcal{B}(\eta) \left(-\frac{\xi}{\mathcal{R}_2(\eta)} \frac{d\mathcal{R}_2(\eta)}{d\eta} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \right) - \frac{1}{2} \mathcal{R}_2(\eta) \xi \frac{d\mathcal{B}}{d\eta} \frac{1}{\mathcal{R}_2(\eta)} \frac{\partial}{\partial \xi} \\
&= \mathcal{B}(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} - \xi \left(\mathcal{B}(\eta) \frac{1}{\mathcal{R}_2(\eta)} \frac{d\mathcal{R}_2(\eta)}{d\eta} + \frac{1}{2} \frac{d\mathcal{B}}{d\eta} \right) \frac{\partial}{\partial \xi} \\
&= \mathcal{B}(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\xi}{\mathcal{R}_2^2(\eta)} \left(\mathcal{B}(\eta) \mathcal{R}_2(\eta) \frac{d\mathcal{R}_2(\eta)}{d\eta} + \frac{\mathcal{R}_2^2(\eta)}{2} \frac{d\mathcal{B}}{d\eta} \right) \frac{\partial}{\partial \xi} \\
&= \mathcal{B}(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\xi}{\mathcal{R}_2^2(\eta)} \frac{d}{d\eta} \left(\mathcal{B}(\eta) \frac{\mathcal{R}_2^2(\eta)}{2} \right) \frac{\partial}{\partial \xi} \\
&= \mathcal{B}(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta},
\end{aligned} \tag{3.122}$$

donde se ha hecho uso de la ecuación de continuidad

$$\frac{d}{d\eta} \left(\mathcal{B}(\eta) \frac{\mathcal{R}_2^2(\eta)}{2} \right) = \frac{d}{d\eta} ((\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2) \mathcal{B}) = \frac{d}{d\eta} (Q_1 + Q_2) = 0. \tag{3.123}$$

Asimismo, el operador \mathfrak{N} que toma parte en la ecuación de la energía se puede escribir como

$$\mathfrak{N} = \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \right) = \frac{1}{\mathcal{R}_2 \xi} \frac{1}{\mathcal{R}_2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\mathcal{R}_2 \xi \frac{1}{\mathcal{R}_2} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = \frac{1}{\mathcal{R}_2^2 \xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right). \tag{3.124}$$

De esta manera, la ecuación de conservación de la energía así como las ecuaciones que modelan el grado de orientación molecular y la cristalización en el dominio transformado se expresan como

$$\frac{\partial \hat{T}_i}{\partial \eta} = \frac{1}{2} \frac{1}{Q} \frac{1}{P_i} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial \xi} \right) \quad i = 1, 2, \tag{3.125}$$

$$\begin{aligned}
&\mathcal{B} \frac{\partial S_{irr}}{\partial \eta} = \left(S_{irr} + \frac{1}{3} \right) (S_{irr} + S_{i\theta\theta} + S_{i\,xx} - 1) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \\
&- \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{irr} - N \left[\left(S_{irr} + \frac{1}{3} \right) (S_{irr} - \Pi_{i,0s}) + S_{irx}^2 \right] \right\}, \quad i = 1, 2,
\end{aligned} \tag{3.126}$$

$$\begin{aligned}
&\mathcal{B} \frac{\partial S_{irx}}{\partial \eta} = S_{irx} \left(S_{irr} + S_{i\theta\theta} + S_{i\,xx} + \frac{1}{2} \right) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} \\
&- \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} S_{irx} \left\{ 1 - N \left[\left(S_{irr} + \frac{1}{3} \right) + (S_{i\,xx} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\}, \quad i = 1, 2,
\end{aligned} \tag{3.127}$$

$$\mathcal{B} \frac{\partial S_{i\theta\theta}}{\partial \eta} = \left(S_{i\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{i\theta\theta} + S_{i\theta\theta} + S_{i\theta\theta} - 1) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} - \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{i\theta\theta} - N \left[\left(S_{i\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{i\theta\theta} - \Pi_{i,0s}) \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \quad (3.128)$$

$$\mathcal{B} \frac{\partial S_{i\theta\theta}}{\partial \eta} = \left(S_{i\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{i\theta\theta} + S_{i\theta\theta} + S_{i\theta\theta} + 2) \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \hat{x}} - \frac{\psi}{\hat{\lambda}(\hat{T})} \left\{ S_{i\theta\theta} - N \left[\left(S_{i\theta\theta} + \frac{1}{3} \right) (S_{i\theta\theta} - \Pi_{i,0s}) + S_{i\theta\theta}^2 \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \quad (3.129)$$

$$\mathcal{B} \frac{\partial Y_i}{\partial \eta} = k_{Ai}(0) \exp(a_{2i} S_i^2) (Y_{\infty,i} - Y_i), \quad i = 1, 2, \quad (3.130)$$

donde $\bar{P}_i = \bar{P} \left(\frac{\hat{\rho}_i \hat{C}_i}{k_i} \right)$, y $Q_1 = \frac{\mathcal{R}_{10}^2}{2} \mathcal{B}_0$, $Q_2 = \frac{\mathcal{R}_{20}^2 - \mathcal{R}_{10}^2}{2} \mathcal{B}_0$ y $Q = Q_1 + Q_2 = \frac{\mathcal{R}_{20}^2}{2} \mathcal{B}_0$ son los caudales adimensionales del chorro interno, externo y total, respectivamente.

En cuanto a las condiciones de contorno,

- Temperatura inicial de los chorros

$$\hat{T}_i(\xi, 0) = \hat{T}_{i0}(\xi) \quad i = 1, 2, \quad (3.131)$$

- Condición para la temperatura en el eje de simetría ($\xi = 0$)

$$\frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \xi} = 0, \quad (3.132)$$

- Condiciones para la temperatura en la interface entre chorros ($\xi = \sqrt{\frac{Q_1}{Q}}$)

$$\hat{T}_1 = \hat{T}_2, \quad (3.133)$$

$$\hat{k}_1 \frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \xi} = \hat{k}_2 \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \xi}, \quad (3.134)$$

- Condición para la temperatura en la interface externa del chorro externo ($\xi = 1$)

$$\frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \xi} - Bi_2 \mathcal{R}_2 \hat{T}_2 = -Bi_2 \mathcal{R}_2 \hat{T}_\infty, \quad (3.135)$$

- Orientación molecular inicial de los chorros

$$S_{irr}(\xi, 0) = \delta \sqrt{\frac{2}{3(1 + 2\gamma^2(\xi) + \theta^2(\xi) + \chi^2(\xi))}} S_i(\xi, 0) \quad (3.136)$$

$$S_{irx}(\xi, 0) = \gamma(\xi) S_{irr}(\xi, 0) \quad (3.137)$$

$$S_{i\theta\theta}(\xi, 0) = \theta(\xi) S_{irr}(\xi, 0) \quad (3.138)$$

$$S_{ixx}(\xi, 0) = \chi(\xi) S_{irr}(\xi, 0) \quad (3.139)$$

- Grado de cristalización inicial de los chorros

$$Y_i(\xi, 0) = Y_{i0}(\xi) \quad i = 1, 2, \quad (3.140)$$

3.4.2. Temperatura promedio global del chorro

Para poder comparar los resultados del modelo híbrido con los de los modelos 1D es necesario definir la temperatura promedio global del chorro compuesto. Para ello, integrando las ecuaciones en derivadas parciales de conservación de la energía (Eqs. (3.125)) en cada chorro se obtiene

$$2Q\bar{P}_1 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) \frac{d}{d\eta} \left(\langle \hat{T}_1(\eta) \rangle \frac{Q_1}{2Q} \right) = \sqrt{\frac{Q_1}{Q}} \left(\frac{k_1}{k_2} \right) \frac{\partial \hat{T}_1}{\partial \xi} \left(\sqrt{\frac{Q_1}{Q}}, \eta \right), \quad (3.141)$$

$$2Q\bar{P}_2 \frac{d}{d\eta} \left(\langle \hat{T}_2(\eta) \rangle \frac{Q_2}{2Q} \right) = \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \xi}(1, \eta) - \sqrt{\frac{Q_1}{Q}} \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \xi} \left(\sqrt{\frac{Q_1}{Q}}, \eta \right), \quad (3.142)$$

donde se han definido las temperaturas promedio, $\langle \hat{T}_i(\eta) \rangle$, de cada chorro de la misma manera que se hizo para la definición de los promediados parciales de la viscosidad dinámica y que, en el dominio transformado, vienen dadas como

$$\langle \hat{T}_1(\eta) \rangle = \frac{2Q}{Q_1} \int_0^{\sqrt{\frac{Q_1}{Q}}} \hat{T}_1(\xi, \eta) \xi d\xi, \quad (3.143)$$

$$\langle \hat{T}_2(\eta) \rangle = \frac{2Q}{Q_2} \int_{\sqrt{\frac{Q_1}{Q}}}^1 \hat{T}_2(\xi, \eta) \xi d\xi. \quad (3.144)$$

Sumando (3.141) y (3.142), teniendo en cuenta las condiciones de contorno tanto en la interface $\left(\xi = \sqrt{\frac{Q_1}{Q}} \right)$ como la convectiva $(\xi = 1)$ se tiene

$$2Q\bar{P}_1 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) \frac{d}{d\eta} \left(\langle \hat{T}_1(\eta) \rangle \frac{Q_1}{2Q} \right) + 2Q\bar{P}_2 \frac{d}{d\eta} \left(\langle \hat{T}_2(\eta) \rangle \frac{Q_2}{2Q} \right) = \left(2Q\bar{P}_1 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) \frac{Q_1}{2Q} + 2Q\bar{P}_2 \frac{Q_2}{2Q} \right) \frac{d\langle \hat{T}(\eta) \rangle}{d\eta} = \frac{\partial \hat{T}_2}{\partial \xi}(1, \eta) = -\mathcal{R}_2 Bi_2 \hat{T}_2(1, \eta). \quad (3.145)$$

De esta manera, la temperatura promedio global $\langle \hat{T}(\eta) \rangle$ es una función decreciente de η como nos dice la física ya que, debido al fenómeno de convección, el chorro (globalmente) debe enfriarse conforme se va estirando. Además se puede poner como función de las temperaturas promedios parciales de cada chorro como

$$\langle \hat{T}(\eta) \rangle = \frac{\bar{P}_1 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) Q_1 \langle \hat{T}_1(\eta) \rangle + \bar{P}_2 Q_2 \langle \hat{T}_2(\eta) \rangle}{\bar{P}_1 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) Q_1 + \bar{P}_2 Q_2} \quad (3.146)$$

siendo la ecuación que gobierna su evolución a lo largo de la coordenada axial transformada η ,

$$\frac{d\langle \hat{T}(\eta) \rangle}{d\eta} = -\frac{\bar{S}t}{\hat{\rho}_1 \hat{C}_1 Q_1 + \hat{\rho}_2 \hat{C}_2 Q_2} \mathcal{R}_2 \hat{T}_2(1, \eta), \quad (3.147)$$

donde $\bar{S}t = \frac{\bar{B}}{\bar{P}}$.

3.4.3. Esquema numérico de resolución

En esta sección se presenta una descripción breve del esquema numérico para resolver el modelo híbrido.

Para resolver el problema se ha seguido el siguiente flujo de instrucciones:

1. Suponer como semilla, $\mathcal{B}^{(0)}(\eta)$, para la velocidad axial la solución regimen viscoso isotermino [70] caracterizado por $(\bar{R} = 0, \bar{C} \rightarrow \infty)$ y valor finito no nulo de \bar{F} . Asimismo, se han de suponer el grado de orientación molecular y la cristalización de ambos chorros usando las condiciones iniciales e imponiendo, por ejemplo, un perfil radial constante para ambas variables.
2. Calcular la geometría $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2$ del chorro compuesto usando la ecuación de conservación de la masa.
3. Hallar el campo de temperaturas $T^{(n)}(\xi, \eta)$ del chorro compuesto usando la ecuación de conservación de la energía (e.d.p. parabólica) mediante diferencias finitas implícitas de segundo orden en η y de primer orden en ξ . Se han usado nodos ficticios en la dirección radial para tener una aproximación de segundo orden en las condiciones de contorno.
4. Actualizar las viscosidades dinámicas $\hat{\mu}_{ei}(\xi, \eta)$ de cada chorro.

5. Obtener las viscosidades dinámicas promedio $\langle \hat{\mu}_{ei}(\eta) \rangle$ en cada chorro.
6. Determinar la velocidad axial $\mathcal{B}^{(n)}(\eta)$.
7. Hallar los componentes del tensor de orientación molecular $S_{i_{rr}}^{(n)}(\xi, \eta)$, $S_{i_{rx}}^{(n)}(\xi, \eta)$, $S_{i_{\theta\theta}}^{(n)}(\xi, \eta)$ y $S_{i_{xx}}^{(n)}(\xi, \eta)$ así como el parámetro de orientación, $\mathcal{S}_i^{(n)}(\xi, \eta)$, y el grado de cristalización $Y_i^{(n)}(\xi, \eta)$ de ambos chorros.
8. Iterar hasta conseguir la convergencia que para variables bidimensionales se ha tomado como

$$\sqrt{\frac{1}{N_x} \sum_{j=1}^{N_x} \left(\frac{1}{N_r} \sum_{k=1}^{N_r} \left(\psi_{j,k}^{(n+1)} - \psi_{j,k}^{(n)} \right)^2 \right)} \leq 10^{-8}, \quad (3.148)$$

donde N_x denota el número de puntos de la malla en la dirección axial, N_r denota el número de puntos de la malla en la dirección radial, n es la n -ésima iteración, y ψ representa cualquiera de las magnitudes bidimensionales fundamentales del problema, a saber, \mathcal{S}_i , \mathcal{Y}_i o \mathcal{F} .

Capítulo 4

Resultados numéricos

4.1. Introducción

En este capítulo se validan los resultados obtenidos en el pasado por el grupo investigador usando el modelo unidimensional (tensor de orientación con parámetro de orden o modelo de Forest) así como se corrigen algunos errores que se han encontrado en la bibliografía aportada por el mismo. En primer lugar, se presentan los resultados obtenidos para una fibra compuesta usando el modelo unidimensional con el tensor de orientación completo basado en la teoría de Doi–Edwards. Se exponen los resultados obtenidos realizando un análisis de sensibilidad a los parámetros más importantes de orientación y cristalización del problema.

El segundo gran bloque del capítulo se centra en la presentación de los resultados usando el nuevo modelo híbrido desarrollado con tensor de orientación completo. La comparación de estos resultados con los del modelo unidimensional nos sirve para validar este último modelo.

Finalmente, se discuten las conclusiones más importantes que se extraen de los análisis efectuados.

4.2. Resultados del modelo 1D con tensor de orientación completo

4.2.1. Comparación con el modelo 1D de Forest

En primer lugar, se efectúa la comparación entre el modelo de Forest et al. [50] y el modelo unidimensional con tensor de orientación completo desarrollado en este trabajo.

Las ecuaciones unidimensionales en estado estacionario (3.25)–(3.26), (3.32), (3.36), (3.37) y (3.58) han sido resueltas numéricamente sujetas a las siguientes condiciones de contorno:

$$\mathcal{R}_1(0) = \mathcal{R}_{10}, \quad \mathcal{R}_2(0) = \mathcal{R}_{20}, \quad \mathcal{B}(0) = 1, \quad \mathcal{B}(1) = D_r, \quad (4.1)$$

$$\mathcal{F}(0) = 1, \quad \left(\hat{k}_1 \mathcal{A}_1 + \hat{k}_2 \mathcal{A}_2 \right) \frac{d\mathcal{F}}{d\hat{x}}(1) = 0, \quad (4.2)$$

$$\mathcal{S}_1(0) = 0,25, \quad \mathcal{S}_2(0) = 0,50, \quad \mathcal{Y}_1(0) = 0, \quad \mathcal{Y}_2(0) = 0, \quad (4.3)$$

Caso	\hat{E}_1	\hat{E}_2	\bar{P}_1	\bar{P}_2	\bar{B}	$\frac{\hat{k}_2}{\hat{k}_1}$	$\frac{\hat{G}_2}{\hat{G}_1}$	$\hat{\omega}_i$	ψ_i	\bar{C}
1	30	30	5	5	10	1	1	0	0.5	10^{-39}
2	20	30	5	5	10	1	1	0	0.5	10^{-39}
3	40	30	5	5	10	1	1	0	0.5	10^{-39}
4	30	30	1	5	10	1	1	0	0.5	10^{-39}
5	30	30	10	5	10	1	1	0	0.5	10^{-39}
6	30	30	5	5	5	1	1	0	0.5	10^{-39}
7	30	30	5	5	20	1	1	0	0.5	10^{-39}
8	30	30	5	5	10	0.1	1	0	0.5	10^{-39}
9	30	30	5	5	10	10	1	0	0.5	10^{-39}
10	30	30	5	5	10	1	0.1	0	0.5	10^{-39}
11	30	30	5	5	10	1	10	0	0.5	10^{-39}
12	30	30	5	5	10	1	10	5	0.5	10^{-39}
13	30	30	5	5	10	1	10	10	0.5	10^{-39}
14	30	30	5	5	10	1	10	0	0	10^{-39}
15	30	30	5	5	10	1	10	0	0.5	10
16	30	30	5	5	10	1	10	0	0.5	1

Tabla 4.1: Valores de los parámetros usados en algunos cálculos.

que fijan los radios de la fibra compuesta en la sección de salida ($\hat{x} = 0$) a través de \mathcal{R}_{10} y \mathcal{R}_{20} ; D_r , también denominado relación de estiramiento, es la velocidad en el punto de recogida de la fibra ($\hat{x} = 1$) donde se impone condición de contorno de flujo de calor nulo (se ha considerado la conducción axial), y grados de cristalización nulo en punto de salida, para $N_i = 4$, $\bar{\alpha}_i = 5$, $a_{21} = 10$, $a_{22} = 5$, $\hat{\lambda}_{0i} = 1$, $\mathcal{Y}_{\infty i} = 0,8$, $n_i = 12$, $\beta_i = 4$, $\bar{R} = 1$, $\hat{p}_e = 0$, $\frac{\bar{R}}{\bar{F}} = 1$, $\frac{\hat{\rho}_1}{\hat{\rho}_2} = 1$, $\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = 1$, $Q_1 = Q_2 = 0,5$, $D_r = 100$, $k_{A1}(0) = k_{A2}(0) = 0,005$, y $\mathcal{F}_{\infty} = 0$, y los valores de los parámetros que se muestran en la Tabla 4.1, donde Q_1 y Q_2 denotan los flujos volumétricos adimensionales para el núcleo y el revestimiento, respectivamente. Estos valores han sido seleccionados de manera que la tasa de cristalización sea mucho más alta en el núcleo que en el revestimiento, con parámetros de orientación molecular idénticos en ambas zonas. Además, para que los resultados de los modelos de orientación sean comparables es aconsejable que el conjunto de parámetros, $(\delta, \theta, \gamma, \chi)$, que determinan las condiciones iniciales para las componentes del tensor de orientación adquieran los valores $(-1, 1, 0, -2)$ con lo que las condiciones iniciales para estas componentes quedan:

$$S_{i_{rr}}(0) = -\frac{1}{3} \mathcal{S}_{i0}, \quad i = 1, 2, \quad (4.4)$$

$$S_{i_{\theta\theta}}(0) = -\frac{1}{3} \mathcal{S}_{i0}, \quad i = 1, 2, \quad (4.5)$$

$$S_{i_{rx}}(0) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (4.6)$$

$$S_{i_{xx}}(0) = \frac{2}{3} \mathcal{S}_{i0}, \quad i = 1, 2, \quad (4.7)$$

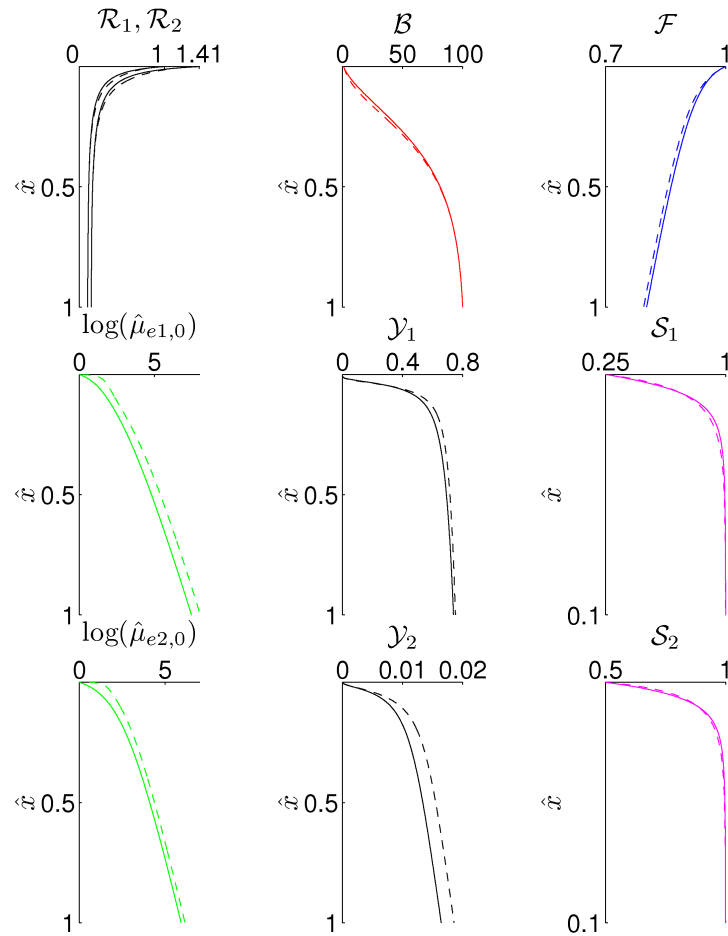


Figura 4.1: Resultados obtenidos por los modelos unidimensionales con tensor de orientación completo (–) y de Forest (– –) para el caso 6 de la Tabla 4.1.

En la figura 4.1 se comparan los resultados obtenidos con ambos modelos para el caso 6. Las curvas con trazo continuo representan el modelo con tensor completo. Como se puede observar los resultados son similares. Existe una mayor discrepancia en los valores de las viscosidades efectivas debido a que el modelo de Forest incorpora en éstas un término adicional directamente proporcional al grado de orientación molecular y al producto de los parámetros $\bar{\alpha}_i$ y $\hat{\lambda}_i$.

Puesto que en el modelo con tensor completo se ha supuesto $\bar{\alpha}_i$ pequeño, este término ha sido despreciado y la viscosidad efectiva sólo depende de la temperatura y la cristalización que son los fenómenos realmente dominantes puesto que la contribución de la orientación molecular en el modelo de Forest a la viscosidad dinámica se supone que es aditiva y no contribuye mucho a dicha viscosidad.

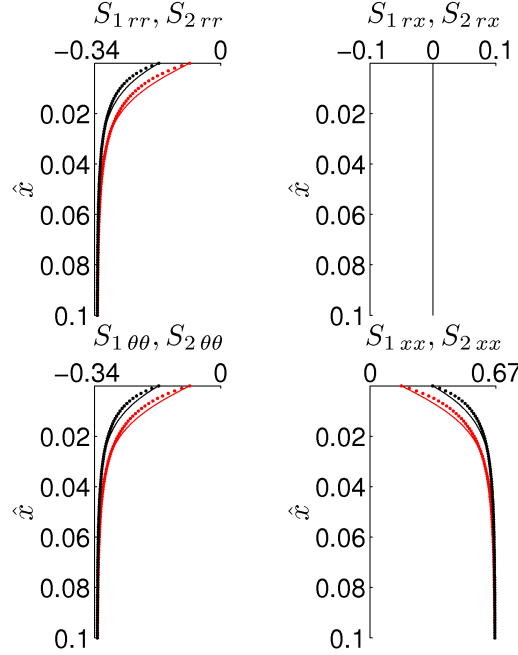


Figura 4.2: Componentes del tensor de orientación del núcleo (rojo) y revestimiento (negro) para los modelos unidimensionales con tensor completo (—) y de Forest (---) para el caso 6 de la Tabla 4.1.

En la Figura 4.2 se representan las componentes del tensor de orientación para ambos modelos de orientación. Se puede observar que no existe evolución de $S_{i\,rx}$ puesto que se ha colocado la condición inicial en su atractor, $S = 0$ (ver Eqs. (3.37)). De esta forma, el tensor de orientación completo, al igual que su homólogo del modelo de Forest, tiene forma diagonal. Además, y puesto que se han asignado condiciones iniciales idénticas, las componentes $S_{i\,rr}$ y $S_{i\,\theta\theta}$ son iguales y presentan un atractor en $S = -1/3$. La componente del tensor de orientación en dirección axial presenta un atractor en $S = 2/3$. A raíz de estos resultados, y visto que para el conjunto de parámetros $(\delta, \theta, \gamma, \chi)$, se obtienen análogos resultados, la hipótesis de tensor con un único parámetro de orden (3.72) efectuada por Forest et al [50] está justificada.

4.2.2. Influencia de la conducción axial

La Figura 4.3 refleja las diferencias que existen en los resultados si se tiene en cuenta la conducción axial o, si por el contrario, esta transferencia de calor es despreciada en el modelo 1D con el tensor de orientación completo. Para el caso 6 de la Tabla 4.1, los resultados

obtenidos indican que sin conducción axial las pérdidas de calor tienen lugar a través de la interface revestimiento–aire por convección y la fibra sufre un enfriamiento más acusado, lo que está acorde con lo que se representa en la Figura 4.3. Por esta razón, la viscosidad efectiva, $\hat{\mu}_{ei,0}$, adquiere valores mayores para fibras en las que no se considera la conducción axial. Como consecuencia de todo esto, la orientación molecular adquiere su máximo valor para una sección transversal más cercana a la de salida. Además, aunque es inapreciable en la figura, es de destacar que el flujo de calor en dirección axial en el punto de recogida de la fibra es no nulo cuando la conducción axial se desprecia.

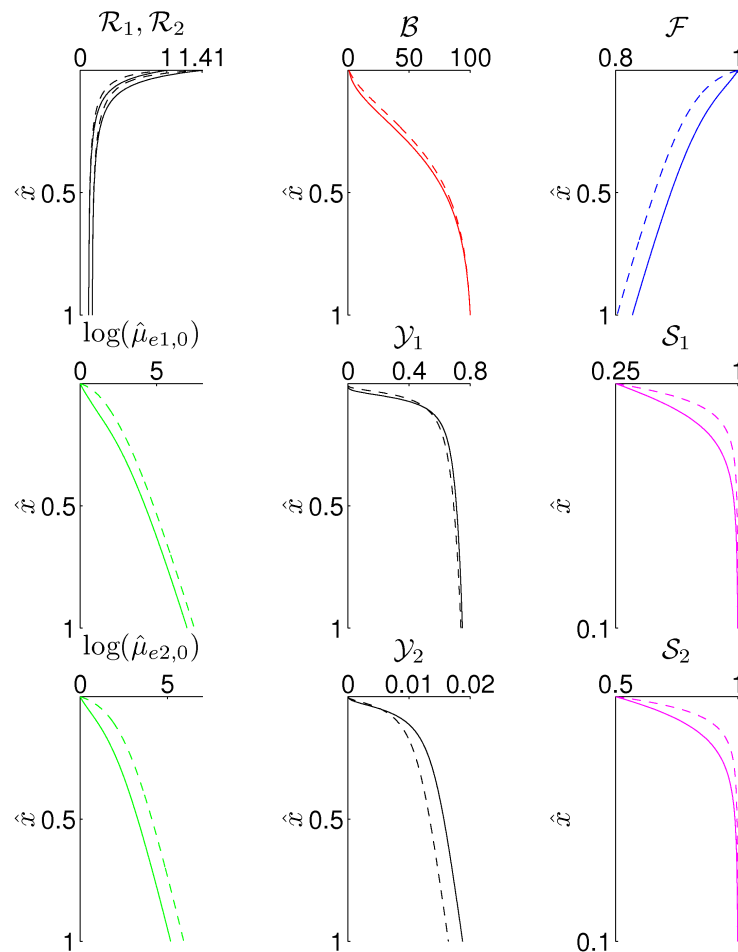


Figura 4.3: Resultados obtenidos por el modelo unidimensional con tensor completo considerando conducción axial (—) y despreciándola (- -) para el caso 6 de la Tabla 4.1.

En la Figura 4.4 se representan los valores de los esfuerzos axiales adimensionales necesarios para el estiramiento tanto del núcleo como del revestimiento. Es de observar que las diferencias son significativas y ello es debido a que los valores de estas magnitudes son directamente proporcionales a las viscosidades efectivas y éstas dependen exponencialmente de la temperatura y grado de cristalización. Se requieren esfuerzos mayores para estirar la zona interna de la

fibra debido a que estas zonas llegan a cristalizar más rápidamente que el revestimiento pues $a_{21} > a_{22}$.

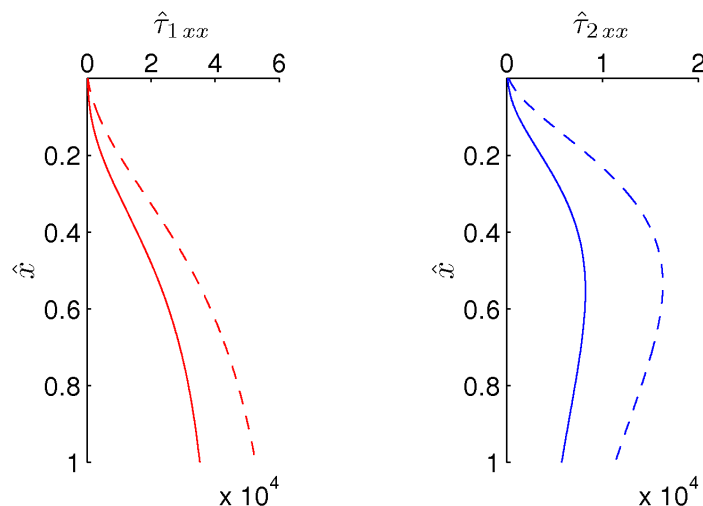


Figura 4.4: Esfuerzos axiales en una fibra compuesta obtenidos con el modelo unidimensional con tensor completo considerando conducción axial (—) y despreciándola (- -) para el caso 6 de la Tabla 4.1.

4.3. Resultados del modelo híbrido o $1 + 1/2D$

4.3.1. Efecto de los parámetros térmicos en fibras compuestas amorfas

Puesto que una de las aportaciones de este trabajo es el cálculo del campo térmico bidimensional en el chorro compuesto, y con objeto de exponer los primeros resultados obtenidos mediante el modelo híbrido, consideraremos, en primer lugar, el efecto que los parámetros térmicos fundamentales, es decir, \bar{P}_1 , \bar{P}_2 , Bi , $\frac{\hat{k}_2}{\hat{k}_1}$ ejercen sobre la geometría, velocidad axial y temperatura de fibras compuestas amorfas (sin orientación ni cristalización).

Para ello, se ha resuelto los casos que se presentan en la Tabla 4.2 donde las condiciones de contorno para la geometría y velocidad son las mismas que las utilizados en el problema presentado en la sección 4.2 mientras que las condiciones de contorno para la ecuación bidimensional de la temperatura fueron discutidas en el capítulo 3 y se ha impuesto que

$$\hat{T}(\xi, 0) = 1, \quad (4.8)$$

$$\hat{T}_\infty(\eta) = 0. \quad (4.9)$$

Se han seleccionado valores unitarios para los números de Reynolds, \bar{R} y Froude, \bar{F} y el número de capilaridad, $\bar{C} = 10$.

Caso	\hat{E}_1	\hat{E}_2	\bar{P}_1	\bar{P}_2	Bi_2	$\frac{\hat{k}_2}{\hat{k}_1}$	$\frac{\hat{G}_2}{\hat{G}_1}$
1	20	10	1	1	5	1	1
2	20	10	5	1	5	1	1
3	20	10	10	1	5	1	1
4	20	10	1	1	10	1	1
5	20	10	1	1	30	1	1
6	20	10	1	1	5	0.1	1
7	20	10	1	1	5	10	1
8	20	10	1	5	5	1	1
9	20	10	1	10	5	1	1
10	20	20	1	1	5	1	1
11	20	50	1	1	5	1	1
12	10	10	1	1	5	1	1
13	30	10	1	1	5	1	1
14	20	10	1	1	5	1	0.1
15	20	10	1	1	5	1	100

Tabla 4.2: Valores de los parámetros usados en los cálculos de la sección 4.3.1.

Para las simulaciones se han usado mallas equiespaciadas en ambas direcciones ($N_\eta = 2001$ y $N_\xi = 1001$) donde N_η y N_ξ representan el número de nodos en la dirección axial y radial (el número de puntos no cambia con el mapeo), respectivamente. Es de destacar que se considera igual número de nodos en dirección radial (500) en cada chorro lo que no implica el mismo espaciado radial en cada chorro, a no ser que $Q_2 = 3Q_1$.

Los efectos de la capacidad térmica de la fibra compuesta han sido investigados variando los números de Péclet térmicos tanto del núcleo como del revestimiento, es decir, mediante la variación de $\bar{P}_i = \bar{P} \frac{\hat{\rho}_i \hat{C}_i}{\hat{k}_i}$ para $i = 1, 2$, y algunos resultados se presentan en las Figuras 4.5–4.7. La Figura 4.5 indica que la caída de temperatura a lo largo de la fibra se incrementa conforme el número de Péclet en el núcleo disminuye debido al aumento en la conducción radial. Puesto que $\hat{E}_1 > \hat{E}_2$, un análisis unidimensional nos revelaría que la variación de la viscosidad dinámica del núcleo a lo largo de la dirección axial es mayor que la del revestimiento. Sin embargo, y como se trata de un análisis bidimensional, esto no se cumple en la zona próxima a la sección de salida $x < 0,2$ puesto que el modelo 1D utiliza una viscosidad promediada a lo largo de la dirección radial mientras que la temperatura presenta variaciones radiales como se puede observar en la Figura 4.7 en la cual se presentan los campos térmicos bidimensionales para los casos que estamos analizando y se observa que, mientras el revestimiento se está enfriando, el núcleo permanece prácticamente isoterma.

La Figura 4.6 muestra los esfuerzos axiales promediados adimensionales tanto en el núcleo como en el revestimiento para las mismas condiciones que las de la Figura 4.5 e indica que

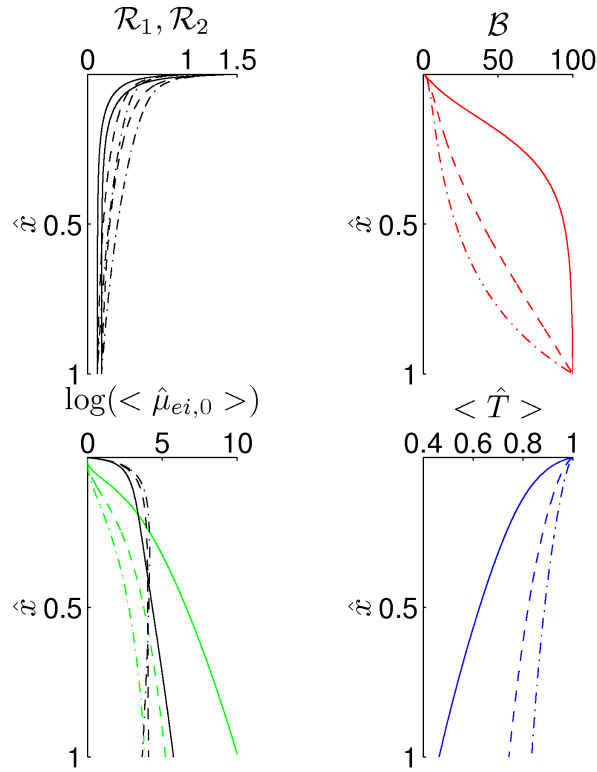


Figura 4.5: Geometría de la fibra compuesta, velocidad axial, promedio de temperatura y viscosidad dinámica promediada (núcleo: verde, revestimiento: negro) para los casos 1 (—), 2 (---) y 3 (- · -) de la Tabla 4.2.

éstos aumentan en el núcleo de forma monótona desde el punto de salida hasta el punto de recogida de la fibra. Sin embargo, este comportamiento no se aprecia en el revestimiento pues se observan máximos globales que no se encuentran en el punto de recogida de la fibra lo cuál es consistente con los resultados del modelo 1D mostrados en la Figura 4.4. Se debe también notar que para $\bar{P}_1 = 1$ estos esfuerzos axiales tienden hacia un valor constante en el núcleo. Conviene recordar aquí que la contribución de los efectos viscosos a los esfuerzos axiales es nula cuando la fibra solidifica como consecuencia de la reología Newtoniana usada.

La Figura 4.8 muestra la dependencia del enfriamiento y el incremento en la viscosidad dinámica a lo largo de la fibra conforme el número de Biot del revestimiento, Bi_2 , es aumentado debido al aumento de la pérdida de calor por convección. Como consecuencia, el punto de solidificación se desplaza hacia la sección de salida de la fibra conforme el número de Biot es aumentado. Es de notar que un incremento del Bi_2 de 5 a 30 da como resultados incrementos de hasta 4 órdenes de magnitud y hasta 2 órdenes de magnitud en las viscosidades dinámicas del núcleo y revestimiento, respectivamente, en el punto de recogida de la fibra. Las diferencias en las viscosidades del núcleo y revestimiento vienen causadas por el número de Biot y las energías de activación de la ley de Arrhenius propuesta para la viscosidad dinámica.

Los efectos del número de Biot en los esfuerzos axiales en el núcleo y en el revestimiento

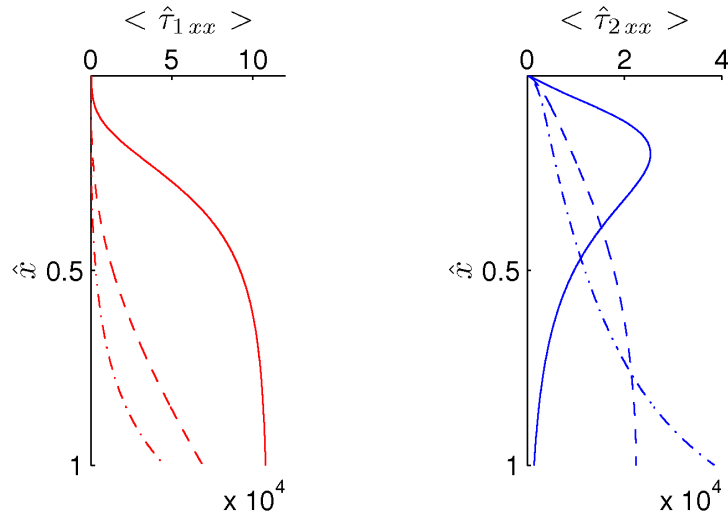


Figura 4.6: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 2 (---) y 3 (- · -) de la Tabla 4.2.

son ilustrados en la Figura 4.9, y exhiben un comportamiento similar aunque con unos valores superiores a los de la Figura 4.6.

En la Figura 4.10 se representan los campos térmicos para los casos analizados mediante variación del número de Biot. Es de destacar que la capa límite en la superficie externa del revestimiento se hace más gruesa conforme mayores son los valores del número de Biot. Además conforme éste aumenta, la temperatura mínima en la fibra adquiere valores menores pues se está favoreciendo la transferencia de energía por convección a través de la superficie externa de la fibra.

La Figura 4.11 ilustra los efectos de la relación de conductividades térmicas, \hat{k}_2/\hat{k}_1 , en la geometría, velocidad axial y temperatura media de la fibra compuesta. Para relaciones de conductividades térmicas menores que la unidad, la velocidad axial es cóncava y para valores $\hat{k}_2/\hat{k}_1 \geq 1$, el perfil de velocidad axial aumenta rápidamente alcanzando un valor constante igual a la velocidad del punto de recogida de la fibra. La Figura 4.11 también muestra que la temperatura media alcanzada en la sección de recogida de la fibra decrece conforme la relación de conductividades térmicas se incrementa; este decrecimiento implica un aumento de la viscosidad dinámica y unos valores prácticamente constantes de los radios, tanto interno como externo, de la fibra compuesta.

Los esfuerzos axiales promediados en la fibra compuesta se muestran en la Figura 4.12. Para los valores de los parámetros considerados en esta figura, los esfuerzos axiales en el núcleo son funciones monótonas crecientes con la distancia axial y la relación de conductividades térmicas. Para el revestimiento, los esfuerzos axiales medios presentan un comportamiento similar para $\frac{\hat{k}_2}{\hat{k}_1} = 0,1$ y, primero un incremento seguido de un posterior descenso como función de \hat{x} (se obtienen máximos globales para secciones transversales cercanas a la sección de salida) para

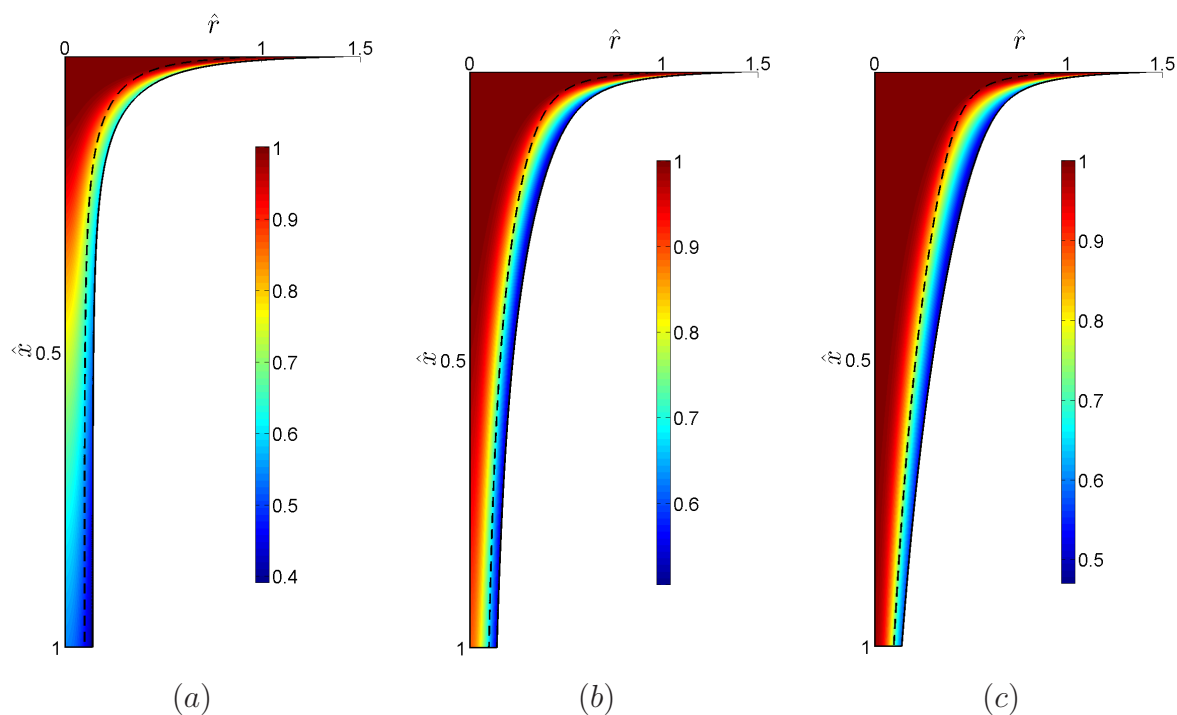


Figura 4.7: Campo térmico bidimensional para los casos 1(a), 2(b) y 3(c) de la Tabla 4.2.

$\frac{\hat{k}_2}{\hat{k}_1} \geq 1$. Como consecuencia, los esfuerzos axiales medios máximos del revestimiento aumentan desplazándose hacia la sección de salida conforme $\frac{\hat{k}_2}{\hat{k}_1}$ aumenta pero son inferiores a los máximos esfuerzos axiales medios del núcleo.

En la Figura 4.13 se representan los campos térmicos para los casos analizados mediante variación de la relación de conductividades térmicas. Las conclusiones que se derivan son similares a las del análisis efectuado cuando se varió el Biot teniendo presente que un aumento de la relación de conductividades exhibe un comportamiento análogo a un incremento del número de Biot.

Se podría reportar una gran cantidad de resultados adicionales puesto que el conjunto de parámetros que gobierna el problema es muy amplio. Sin embargo, algunos de ellos se describen en secciones posteriores resolviendo el problema fluidodinámico junto con los modelos de orientación molecular y cinéticas de cristalización para los modelos unidimensional e híbrido con tensor de orientación completo desarrollados en este trabajo.

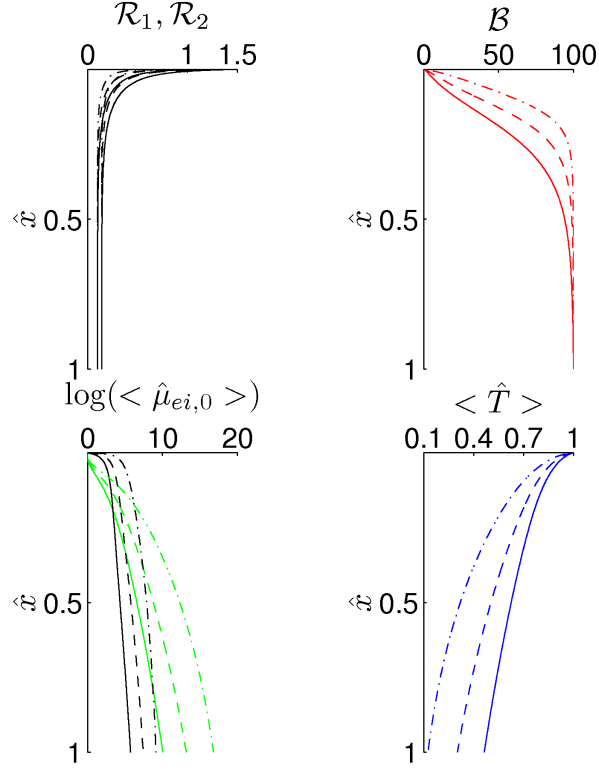


Figura 4.8: Geometría de la fibra compuesta, velocidad axial, promedio de temperatura y viscosidad dinámica promediada (núcleo: verde, revestimiento: negro) para los casos 1 (—), 4 (---) y 5 (— · —) de la Tabla 4.2.

4.3.2. Comparación del modelo 1D con tensor de orientación completo y el modelo híbrido

En esta sección se comparan los resultados de los modelos desarrollados en este trabajo (modelos 1D y 1+1/2D con tensor de orientación completo). Para ello, se han resuelto los casos de la Tabla 4.1 con las condiciones de contorno para geometría y velocidad axial expuestas en la sección 4.2. Asimismo, se han usado perfiles planos de orientación molecular y cristalización en la sección de salida para poder realizar una comparación realista entre estos modelos de tal forma que,

$$S_{i_{rr}}(\xi, 0) = -\frac{1}{3} \mathcal{S}_i(0), \quad i = 1, 2, \quad (4.10)$$

$$S_{i_{rx}}(\xi, 0) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (4.11)$$

$$S_{i_{\theta\theta}}(\xi, 0) = -\frac{1}{3} \mathcal{S}_i(0), \quad i = 1, 2, \quad (4.12)$$

$$S_{i_{xx}}(\xi, 0) = \frac{2}{3} \mathcal{S}_i(0), \quad i = 1, 2, \quad (4.13)$$

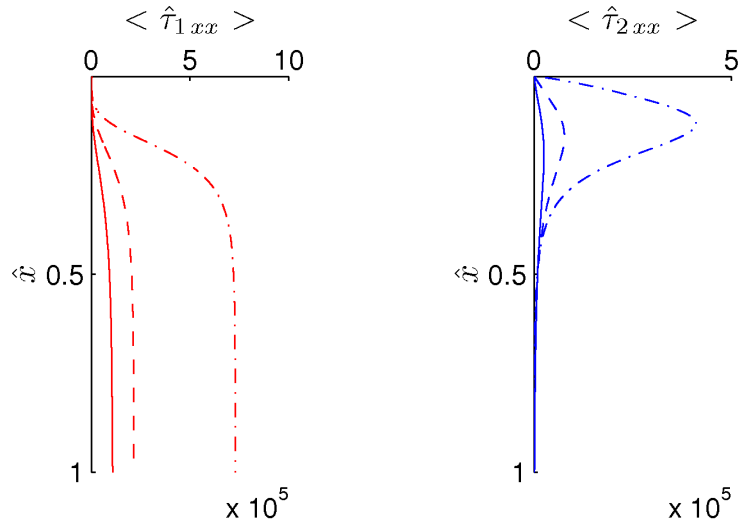


Figura 4.9: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 4 (---) y 5 (- · -) de la Tabla 4.2.

$$Y_i(\xi, 0) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (4.14)$$

Es de destacar que para poder realizar esta comparación es necesario promediar radialmente todas las magnitudes bidimensionales (temperatura, orientación molecular y cristalización) del modelo híbrido. Asimismo, se ha resuelto el modelo unidimensional sin tener en cuenta la conducción axial ni la disipación viscosa ($\overline{Br} = 0$) puesto que en el modelo bidimensional se han supuesto despreciables. Debido a la bidimensionalidad de la temperatura, componentes del tensor de orientación y grado de cristalización en el problema, se ha creído conveniente reducir el número de nodos en ambas direcciones respecto de simulaciones anteriores. Por ello, se ha tomado $N_\eta = 1001$ nodos en dirección axial y $N_\xi = 401$ nodos en dirección radial. Éstos han sido distribuidos de forma desigual entre el núcleo ($N_{\xi_1} = 101$) y el revestimiento ($N_{\xi_2} = 301$) debido a la necesidad de resolver la capa límite térmica.

La Figura 4.14 muestra los resultados obtenidos con los modelos unidimensional e híbrido con tensor de orientación completo y cinética de cristalización de Avrami–Kolmogorov e indican una gran diferencia entre las viscosidades efectivas de estos modelos, sobre todo, en el núcleo debido al hecho de que el modelo unidimensional sobreestima el enfriamiento en la zona cercana al eje de simetría de la fibra.

Un análisis bidimensional nos demuestra que el núcleo se encuentra a una temperatura “mucho” más elevada que el revestimiento cuya superficie externa constituye la única puerta de evacuación de energía de la fibra. En términos globales, podemos concluir que la temperatura promedio del modelo bidimensional y la temperatura del modelo unidimensional son similares. Sin embargo, el modelo 1D es incapaz de predecir la temperatura en las zonas cercanas al eje y a la superficie externa del revestimiento donde se dan los valores más alejados a los del prome-

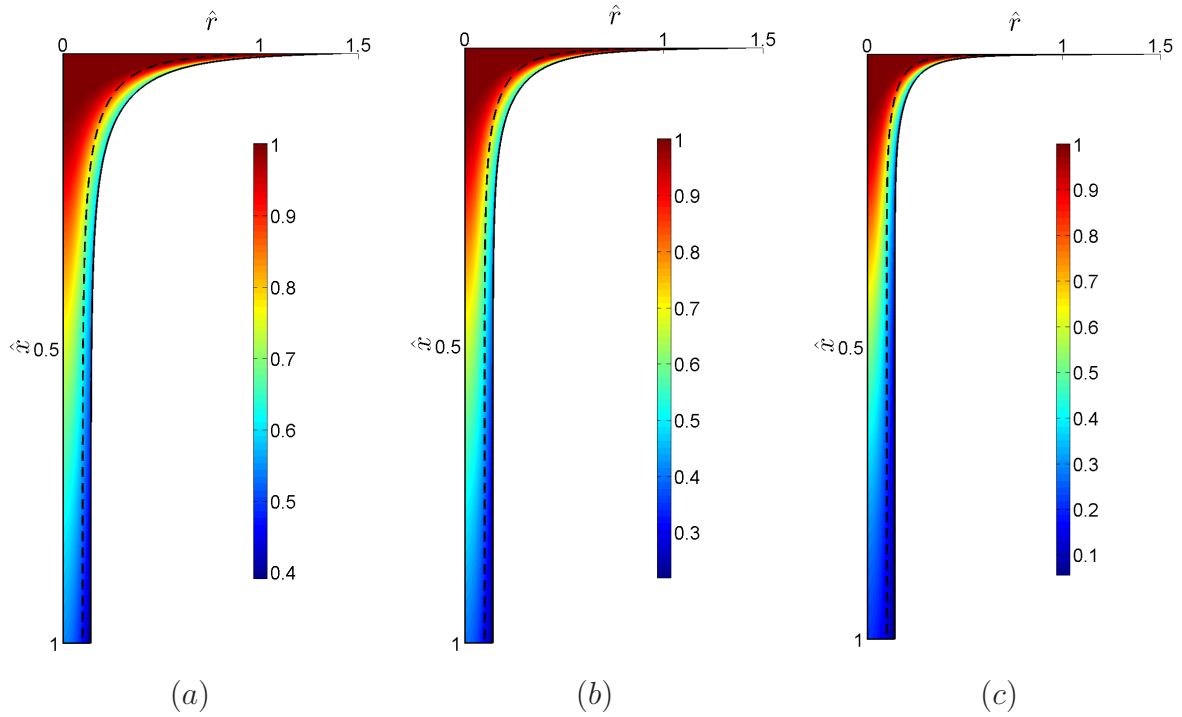


Figura 4.10: Campo térmico bidimensional para los casos 1(a), 4(b) y 5(c) de la Tabla 4.2.

dio en cada sección transversal. Estas diferencias no tienen efecto alguno sobre la geometría de la fibra ni sobre los perfiles de velocidad puesto que éstos están regidos por ecuaciones unidimensionales. Asimismo, es importante notar también que los grados de cristalización y los parámetros de orientación molecular medidos por estos modelos son prácticamente idénticos tanto para el núcleo como para el revestimiento.

La Figura 4.15 muestra un gráfico tridimensional de la temperatura para el caso 4 de la Tabla 4.1 en la que se muestra de una forma clara la situación de la capa límite térmica, en la que se observan gradientes radiales térmicos muy elevados, así como el comportamiento casi adiabático del núcleo hasta $\hat{x} < 0,1$ lo que hace que la viscosidad dinámica del núcleo sea prácticamente igual al factor pre-exponencial, \hat{G}_1 , hasta alcanzar esas secciones (ver Figura 4.14).

Otros resultados interesantes los constituyen tanto los campos bidimensionales de las componentes del tensor de orientación molecular y del grado de cristalización. En la Figura 4.16 se presentan las componentes del tensor de orientación donde se observan de forma muy clara un comportamiento similar al mostrado en la Figura 4.2 cuando tratamos el modelo 1D. Es importante notar que no existen gradientes radiales (a $O(1)$ la parte derecha de la ecuación de Doi-Edwards no depende de la coordenada radial) puesto que se ha supuesto un perfil plano en la condición inicial del tensor de orientación. Comentar, además que, debido a hiperbolicidad de la ecuación de Doi-Edwards, no existe continuidad en la interface entre ambos fluidos puesto que el carácter de las ecuaciones que modelan la orientación molecular nos impide imponerla.

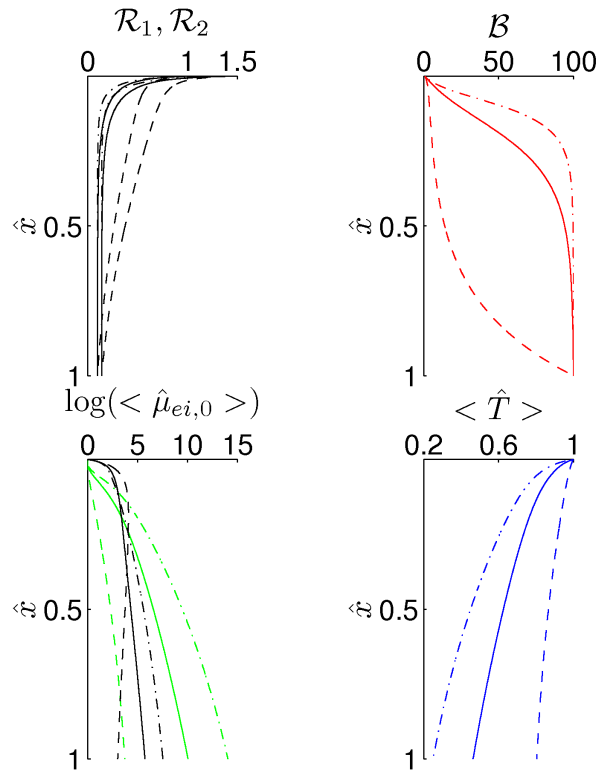


Figura 4.11: Geometría de la fibra compuesta, velocidad axial, promedio de temperatura y viscosidad dinámica promediada (núcleo: verde, revestimiento: negro) para los casos 1 (—), 6 (— —) y 7 (— · —) de la Tabla 4.2.

Estos mismos comentarios son extensibles para el parámetro de orientación molecular y grado de cristalización que se presentan en la Figura 4.17 donde se pueden observar con mucha claridad las enormes diferencias en el grado de cristalización existentes entre el núcleo (prácticamente cristalino) y el revestimiento (prácticamente amorfo) así como la rapidez con que la fibra alcanza la orientación máxima después de abandonar la sección de salida. Estos resultados pueden confundir al lector puesto que lo que uno espera (si los parámetros de orientación molecular, cristalización y viscosidad son idénticos para ambos chorros) es una mayor cristalización en el revestimiento debido a bajas temperaturas.

4.3.3. Análisis de sensibilidad

En este apartado se reporta un análisis de los efectos que la variación de algunos parámetros ejerce en la determinación de la solución del problema de estirado de fibras líquidas cristalinas mediante el método de *melt spinning*. Para ello se resuelven los casos que se presentan en la Tabla 4.1 usando el modelo híbrido que se ha usado en secciones anteriores para validar el modelo unidimensional. Las condiciones de contorno no varían respecto a las señaladas durante

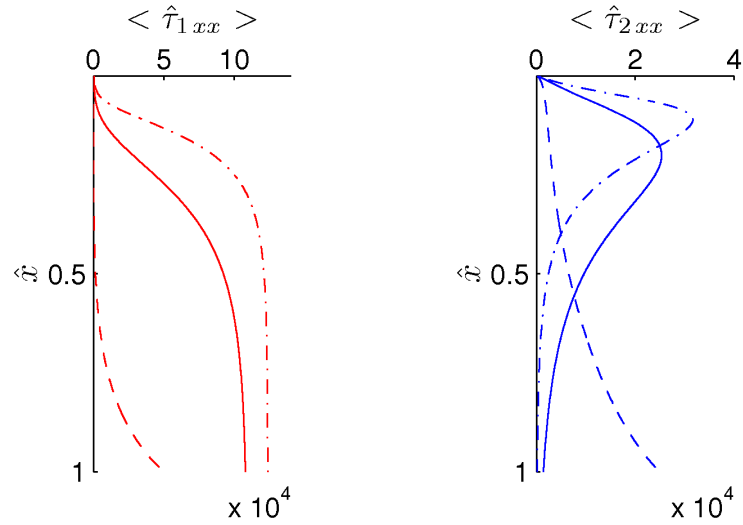


Figura 4.12: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 6 (---) y 7 (- · -) de la Tabla 4.2.

todo este capítulo.

Los efectos de la energía de activación, \hat{E}_1 , de la viscosidad dinámica del núcleo sobre la geometría, velocidad axial y promedios de temperatura, orientación molecular y grado de cristalización de una fibra compuesta se muestran en la Figura 4.18. Se puede concluir que la variación de este parámetro no tiene mucho efecto sobre los resultados del problema a excepción de la viscosidad efectiva del núcleo, por supuesto, que aumenta conforme aumenta la energía de activación del mismo.

Un análisis unidimensional del mismo caso [71] revelaría una mayor sensibilidad del problema a la variación de la energía de activación de la viscosidad efectiva del núcleo debido a la, ya comentada, sobreestimación que estos modelos realizan del enfriamiento de las zonas cercanas al eje de la fibra. Además, este estudio concluiría que el grado de cristalización y la pendiente del perfil de velocidad axial aumentan conforme \hat{E}_1 se incrementa, efecto que no está de acuerdo con los resultados del modelo híbrido bidimensional.

La Figura 4.19 muestra los esfuerzos axiales promediados adimensionales tanto en el núcleo como en el revestimiento para las mismas condiciones que la Figura 4.18. Puesto que los valores de las energías de activación de las viscosidades del núcleo y del revestimiento son iguales para el caso base considerado en la Tabla 4.1 (caso 1), el fluido que experimente mayor enfriamiento será el que requiera de unos esfuerzos axiales medios mayores para conseguir su estiramiento debido a la variación de viscosidad con la temperatura. En la Figura 4.19 se aprecia este hecho ya que la viscosidad dinámica del revestimiento tiene aproximadamente un par de órdenes más de magnitud que la del núcleo (ver también Figura 4.18). También se aprecian comportamientos distintos en los perfiles de los esfuerzos axiales promediados. En el núcleo, y puesto que éste no comienza su enfriamiento hasta $\hat{x} \approx 0,15$, el esfuerzo está prácticamente gobernado por la

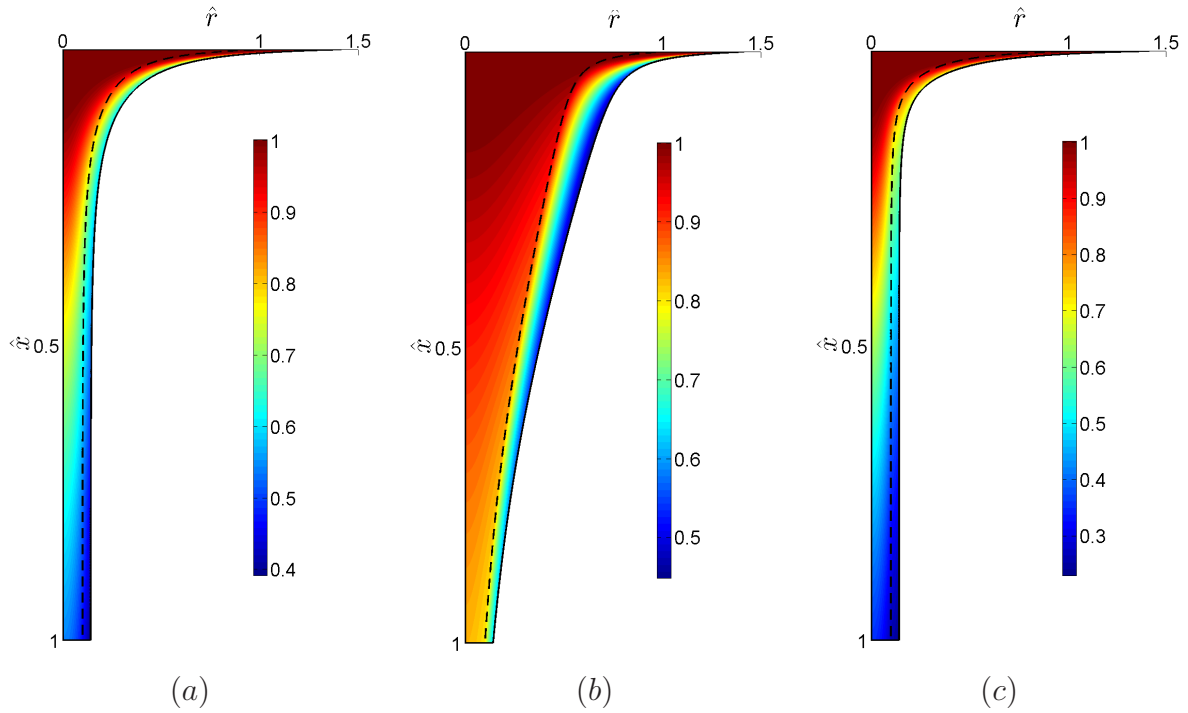


Figura 4.13: Campo térmico bidimensional para los casos 1(a), 6(b) y 7(c) de la Tabla 4.2.

derivada de la velocidad, $\frac{dB}{dx}$, con un valor máximo muy cercano a la sección de salida de la fibra. Esto no sucede en el revestimiento debido al dominio que la viscosidad dinámica tiene frente a la aceleración axial en la ecuación (3.42). Este fenómeno se dará en todos los casos que presentemos para el problema debido a la condición de contorno de simetría en el eje.

Los efectos ejercidos por la inercia térmica de la fibra compuesta en el parámetro de orientación molecular y grado de cristalización (ya se hizo en el resto de variables para fibras amorfas) han sido investigados variando los números de Péclet térmicos tanto del núcleo como del revestimiento, es decir, mediante la variación de $\bar{P}_i = \bar{P} \frac{\hat{\rho}_i \hat{C}_i}{k_i}$ para $i = 1, 2$, y algunos resultados se presentan en las Figuras 4.20–4.21.

La Figura 4.20 indica que la caída de la temperatura media a lo largo de la fibra se incrementa conforme el número de Péclet en el núcleo disminuye. Sin embargo, no afecta prácticamente nada a la geometría de la fibra, perfiles de velocidad axial, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización. Esto contradice los resultados unidimensionales presentados en [71] en el cual éstos se mostraban mucho más sensibles a variaciones del número de Péclet en el núcleo, lo cual es debido a la ya discutida problemática del modelo 1D.

La Figura 4.21 muestra los esfuerzos axiales promediados adimensionales tanto en el núcleo como en el revestimiento para las mismas condiciones de la Figura 4.20 e indica que éstos aumentan en el revestimiento de forma monótona desde el punto de salida hasta el punto de recogida de la fibra. Sin embargo, este comportamiento no se aprecia en el núcleo pues se

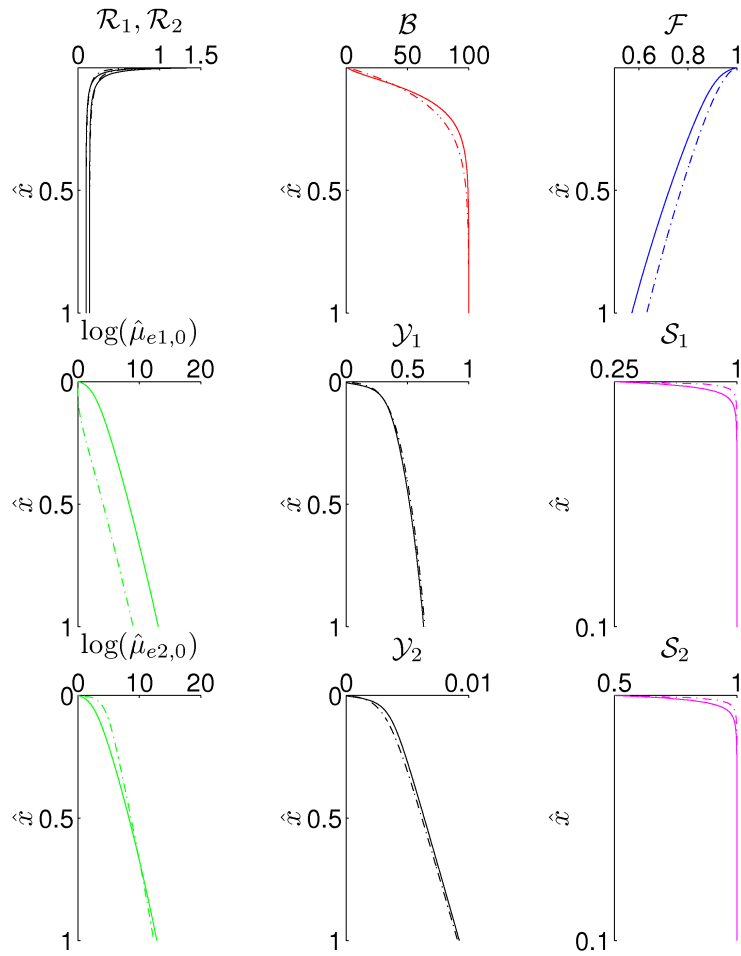


Figura 4.14: Resultados obtenidos por los modelos unidimensional (—) y bidimensional (---) con tensor de orientación completo para el caso 4 de la Tabla 4.1.

observan máximos globales que no se encuentran en el punto de recogida de la fibra debido al menor enfriamiento del núcleo y, por consiguiente, menor variación de la viscosidad dinámica con la temperatura. Es necesario recordar aquí que la contribución de los efectos viscosos a los esfuerzos axiales es nula cuando la fibra solidifica.

La Figura 4.22 ilustra los efectos del número de Biot, Bi_2 , o las pérdidas por transferencia de calor por convección en la superficie externa del revestimiento. Para los tres valores del Bi_2 , las pendientes de los perfiles de la velocidad axial en la sección de salida aumentan con el Bi_2 y alcanzan un valor casi constante e igual a la velocidad en la sección de recogida de la fibra. Asimismo, la pendiente de la velocidad axial se incrementa conforme aumentan las pérdidas de calor. La Figura 4.22 también nos revela que la temperatura en el punto de recogida de la fibra disminuye conforme el número de Biot aumenta; esta disminución supone un incremento en la viscosidad dinámica (del revestimiento, sobre todo) lo que provoca un radio de la fibra casi constante. Se ha de notar que la viscosidad dinámica en el núcleo aumenta hasta

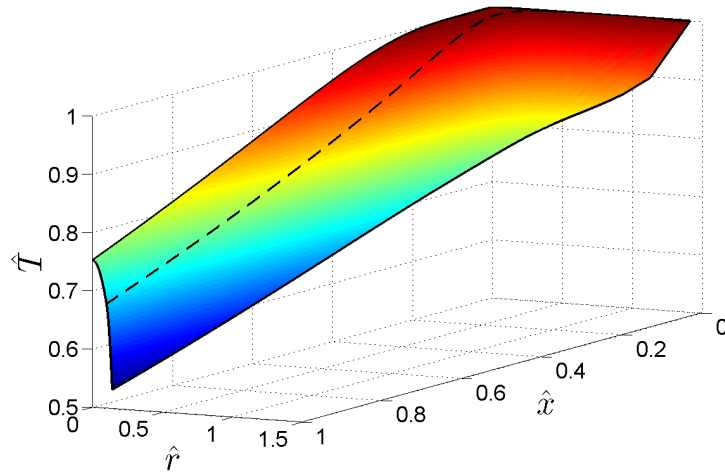


Figura 4.15: Gráfico tridimensional del campo de temperaturas para el caso 4 de la Tabla 4.1.

aproximadamente 4 órdenes de magnitud al pasar el número de Biot de 5 a 20.

La cristalización media, tanto en el núcleo como en el revestimiento, es tanto mayor conforme menor es el número de Biot. Sin embargo, el grado de orientación máximo se alcanza en secciones axiales más próximas a la sección de salida de la fibra conforme mayor es el enfriamiento que experimenta la fibra.

Los efectos del número de Biot en los esfuerzos axiales promediados en el núcleo y en el revestimiento se ilustran en la Figura 4.23. Se observa que los esfuerzos axiales en el revestimiento alcanzan los mayores valores que se han observado en todo el análisis conforme el número de Biot se incrementa. El comportamiento en el núcleo es similar al que se exhibe en la Figura 4.21.

La Figura 4.24 ilustra los efectos de la relación de conductividades térmicas, \hat{k}_2/\hat{k}_1 , en la geometría, velocidad axial, temperatura, orientación molecular y grado de cristalización de la fibra compuesta. En ella se observa que la temperatura promedio alcanzada en la zona de recogida de la fibra decrece conforme la relación de conductividades térmicas se incrementa; este decrecimiento implica un aumento de la viscosidad dinámica (el núcleo experimenta cambios más acusados debido que la tasa de enfriamiento en él se muestra más sensible a la variación de \hat{k}_2/\hat{k}_1) y un valor prácticamente constante en los radios, tanto interno como externo, de la fibra.

Los esfuerzos axiales promediados de la fibra compuesta se muestran en la Figura 4.25.

Los efectos de la relación de los factores pre-exponenciales de las leyes de viscosidad dinámica del núcleo y del revestimiento, $\frac{\hat{G}_2}{\hat{G}_1}$, se muestran en la Figura 4.26 que ilustra un mínimo incremento en la pendiente del perfil de velocidad axial cuando esta relación aumenta. Comentar también que tanto la caída de temperatura como el parámetro de orientación y grado de cristalización no muestran una gran sensibilidad a este parámetro, aunque la viscosidad dinámica del revestimiento crece conforme la relación de factores pre-exponenciales es incrementada.

Los esfuerzos axiales promediados para el revestimiento presentados en la Figura 4.27 son

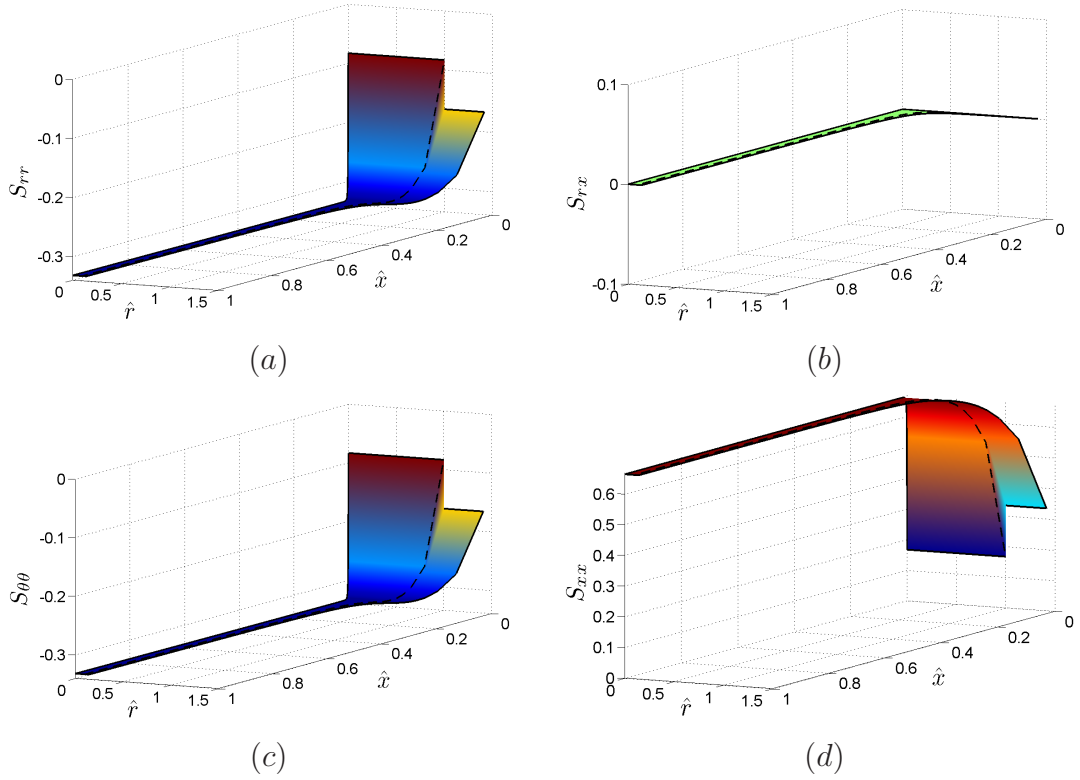


Figura 4.16: Tensor de orientación molecular bidimensional para el caso 4 de la Tabla 4.1.

funciones monótonas crecientes de la coordenada axial alcanzado un valor final constante, tanto mayor cuanto mayor sea la relación $\frac{\hat{G}_2}{\hat{G}_1}$, a partir de la tercera parte de la longitud total de la zona de estirado. Este comportamiento no se manifiesta en el núcleo pues en la zona inicial la inercia del fluido domina sobre el enfriamiento, como se ha comentado con anterioridad.

Se han realizado las simulaciones de los casos 12–16 no encontrándose en la geometría, velocidad axial y promedios de temperatura, parámetro de orientación y grado de cristalización diferencias apreciables respecto al caso base (caso 1).

Los tres primeros casos (12–14) tienen por objeto reflejar la sensibilidad del problema a la disminución, hasta anularlo en el caso 14, del potencial de Maier–Saupe que viene dado en la ecuación (3.37) por el término $\hat{F}_{i,0}(\bar{\bar{\mathcal{S}}}_i)$. Esto nos hace pensar que, para el conjunto de parámetros elegidos, el término dominante en la formulación de Doi–Edwards es el relativo al estiramiento de la fibra ($\hat{G}_{i,0}(\bar{\bar{\mathcal{S}}}_i)$) que es directamente proporcional a la tasa de deformación e inversamente proporcional a la velocidad del fluido. Además, este término sólo tiene importancia cerca de la sección de salida de la fibra, $\hat{x} \leq 0,05$, pues, como han demostrado las figuras expuestas, las componentes del tensor de orientación y, por tanto, el parámetro de orientación molecular se mantiene constante a partir de esa sección ya que

$$\frac{d\mathcal{S}_i}{d\hat{x}} = 0, \quad \hat{x} \geq 0,05. \quad (4.15)$$

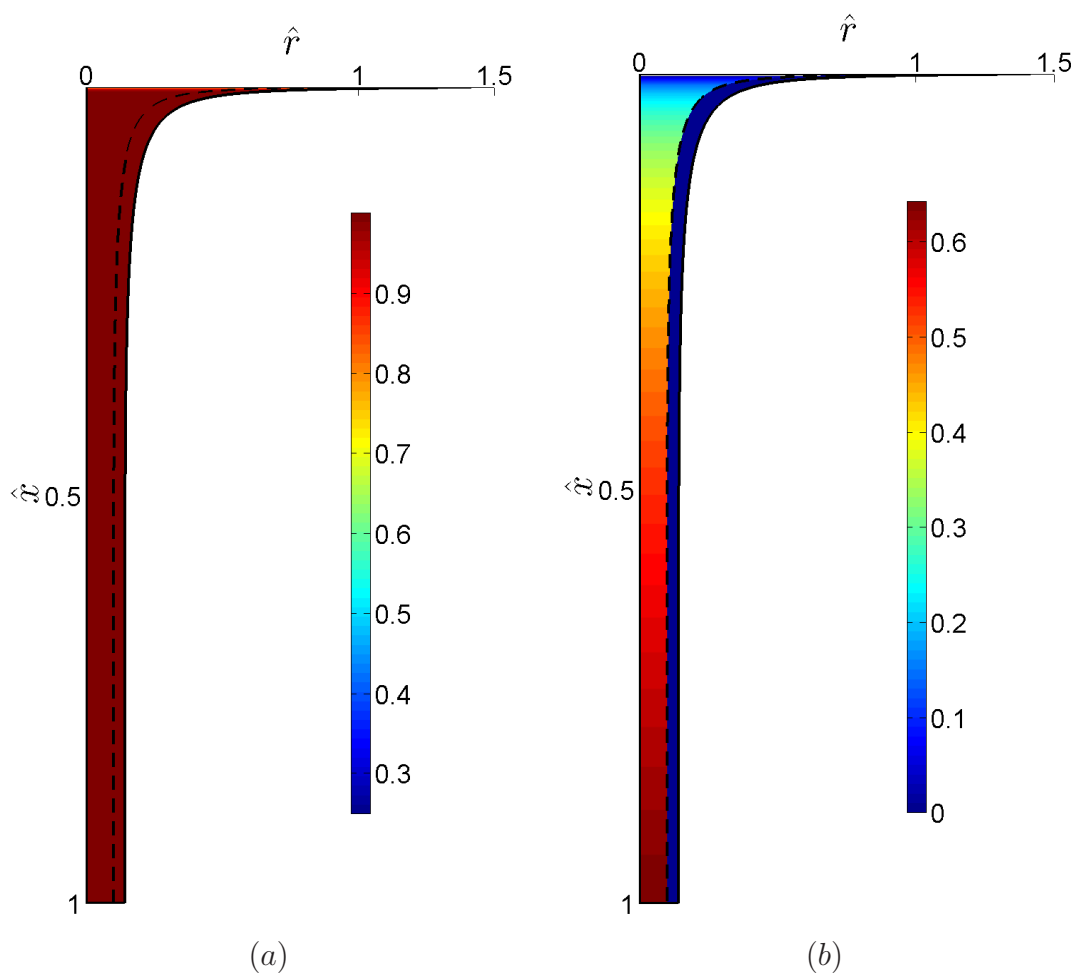


Figura 4.17: Campos bidimensionales del parámetro de orientación molecular (a) y grado de cristalización (b) para el caso 4 de la Tabla 4.1.

Con los dos últimos casos (15 y 16) se estudia el efecto del número de capilaridad, \bar{C} , del problema. Se puede comprobar que para los valores seleccionados esta variación no tiene efecto alguno sobre las variables del problema. Es obvio que valores de \bar{C} más próximos a 0 ocasionarán mayores influencias puesto que la ecuación de cantidad de movimiento depende del inverso del número de capilaridad, pero estos valores nos son relevantes en el proceso real de estirado de fibras.

En las tablas 4.3 y 4.4 se presentan los valores de los esfuerzos axiales promediados adimensionales, tanto en el núcleo como en el revestimiento, para la secciones de salida y recogida de la fibra así como sus valores máximos y las secciones donde éstos se alcanzan para los casos de la Tabla 4.1.

Caso	$\langle \hat{\tau}_{1xx} \rangle_{\hat{x}=0}$	$(\hat{x}_{max}, \langle \hat{\tau}_{1xx} \rangle_{max})$	$\langle \hat{\tau}_{1xx} \rangle_{\hat{x}=1}$
1	1474	(0.0040, 2250)	995
2	1474	(0.0040, 2250)	160
3	1474	(1.0000, 6791)	6791
4	1474	(1.0000, 10858)	10858
5	1474	(0.0040, 2248)	440
6	558	(1.0000, 10462)	10462
7	4066	(0.0015, 6985)	161
8	1472	(0.0040, 2237)	216
9	1474	(1.0000, 4813)	4813
10	776	(1.0000, 4084)	4084
11	1910	(0.0030, 2732)	657

Tabla 4.3: Esfuerzos axiales promediados adimensionales en el núcleo para los casos de la Tabla 4.1.

Caso	$\langle \hat{\tau}_{2xx} \rangle_{\hat{x}=0}$	$(\hat{x}_2, \langle \hat{\tau}_{2xx} \rangle_{max})$	$\langle \hat{\tau}_{1xx} \rangle_{\hat{x}=1}$
1	1474	(1.0000, 316425)	316425
2	1474	(1.0000, 317259)	317259
3	1474	(0.8400, 311981)	310631
4	1474	(0.7030, 310706)	306676
5	1474	(1.0000, 316916)	316916
6	558	(1.0000, 120844)	120844
7	4066	(0.9585, 863656)	863650
8	1472	(1.0000, 316771)	316771
9	1475	(0.7550, 313963)	312794
10	78	(0.9290, 102704)	102582
11	19105	(1.0000, 2118698)	2118698

Tabla 4.4: Esfuerzos axiales promediados adimensionales en el revestimiento para los casos de la Tabla 4.1.

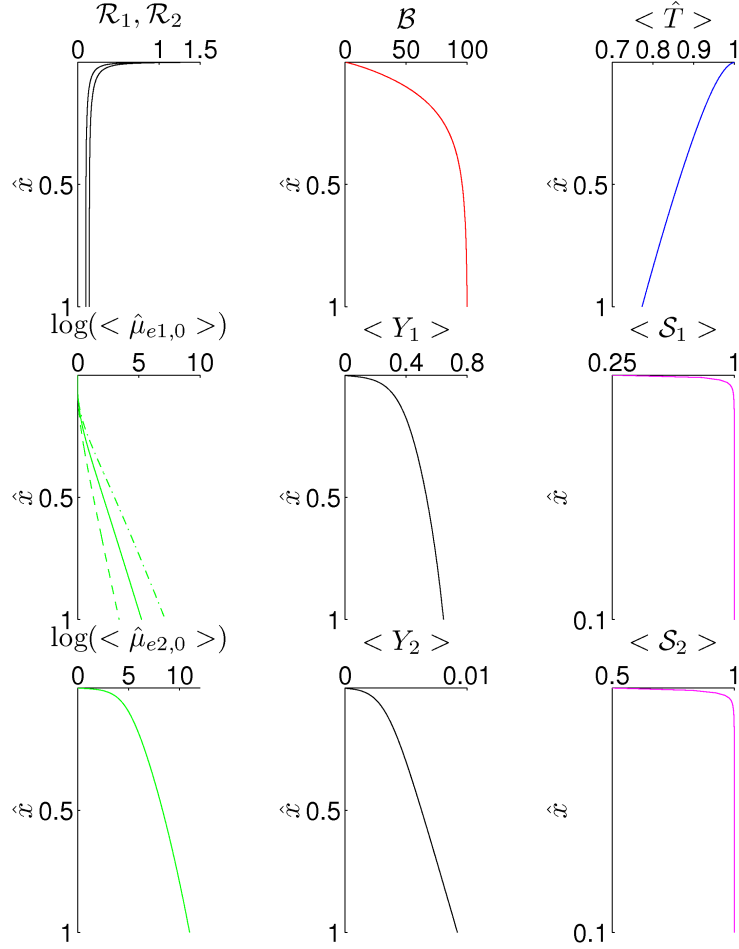


Figura 4.18: Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (—), 2 (---) y 3 (- · -) de la Tabla 4.1.

4.3.4. Efecto de perfiles radiales en las condiciones iniciales

En esta sección se exponen los resultados que se obtienen de la imposición de perfiles radiales (parabólicos o trigonométricos) para las condiciones iniciales de temperatura y orientación molecular. Para ello, se han implementado las siguientes funciones

- Funciones parabólicas

$$\hat{J}(\xi, 0) = \begin{cases} \hat{J}_{10}(\xi; \mathcal{J}_{01}, \mathcal{J}_{max1}) = \mathcal{J}_{01} + \frac{\mathcal{J}_{max1}}{\left(\frac{\xi_i}{2}\right)^2} \xi (\xi_i - \xi) & 0 \leq \xi \leq \xi_i \\ \hat{J}_{20}(\xi; \mathcal{J}_{02}, \mathcal{J}_{max2}) = \mathcal{J}_{02} + \frac{\mathcal{J}_{max2}}{\left(\frac{1-\xi_i}{2}\right)^2} (1 - \xi) (\xi_i - \xi) & \xi_i \leq \xi \leq 1 \end{cases} \quad (4.16)$$

- Funciones trigonométricas

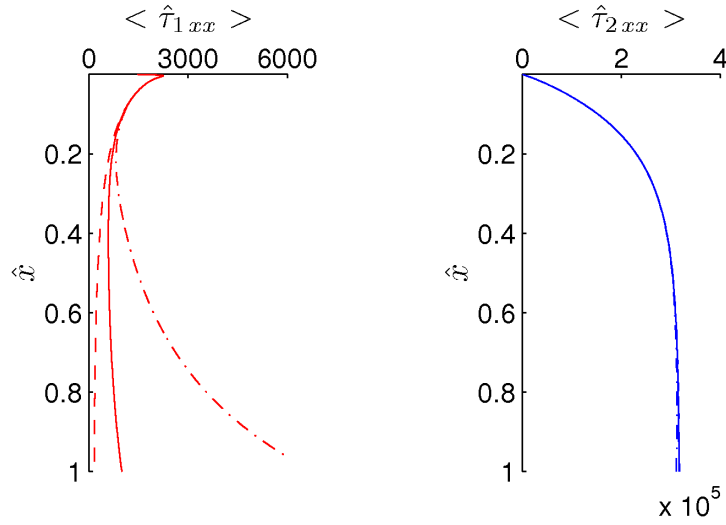


Figura 4.19: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 2 (---) y 3 (- · -) de la Tabla 4.1.

$$\hat{J}(\xi, 0) = \begin{cases} \hat{J}_{10}(\xi; \mathcal{J}_{01}, \mathcal{J}_{max1}) = \mathcal{J}_{01} + \frac{\mathcal{J}_{max1}}{2} \left[1 + \sin \left(\frac{\pi}{2} \left(3 - \frac{4\xi}{\xi_i} \right) \right) \right] & 0 \leq \xi \leq \xi_i \\ \hat{J}_{20}(\xi; \mathcal{J}_{02}, \mathcal{J}_{max2}) = \mathcal{J}_{02} + \frac{\mathcal{J}_{max2}}{2} \left[1 + \sin \left(\frac{\pi}{2} \left(3 - \frac{4(\xi-1)}{\xi_i-1} \right) \right) \right] & \xi_i \leq \xi \leq 1 \end{cases} \quad (4.17)$$

donde \hat{J} puede ser la temperatura o el parámetro de orientación molecular y $\xi_i = \sqrt{\frac{Q_1}{Q}}$ con las que se obtienen los perfiles deseados. Utilizando los parámetros de la Tabla 4.1 y las condiciones de contorno, ya familiares, de secciones anteriores se ha resuelto la geometría, velocidad axial, temperatura, orientación molecular y grado de cristalización usando el modelo híbrido don tensor de orientación completo teniendo presente,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{01} &= \mathcal{F}(0) - 0,2, \\ \mathcal{F}_{max1} &= 0,1, \\ \mathcal{F}_{02} &= \mathcal{F}(0) - 0,2, \\ \mathcal{F}_{max2} &= 0,2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{01} &= \mathcal{S}_1(0) + 0,05, \\ \mathcal{S}_{max1} &= -0,1, \\ \mathcal{S}_{02} &= \mathcal{S}_2(0) + 0,1, \\ \mathcal{S}_{max2} &= -0,2. \end{aligned}$$

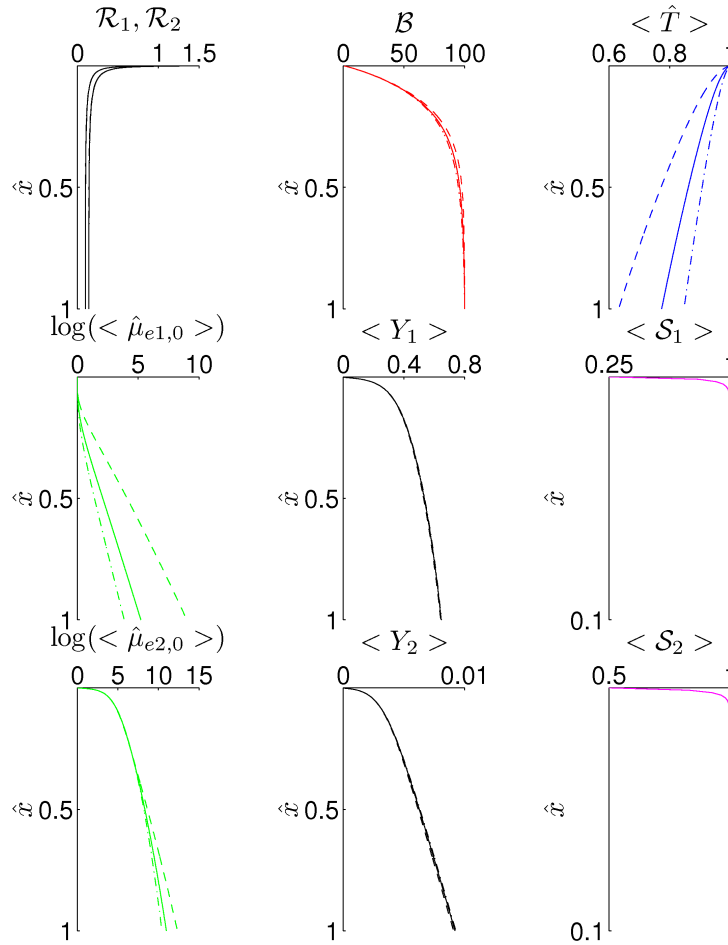


Figura 4.20: Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (—), 4 (---) y 5 (- · -) de la Tabla 4.1.

En la Figura 4.28 se muestran los campos bidimensionales de todas las variables de interés del problema para el caso 4 de la Tabla 4.1 para un número de Biot, $Bi_2 = 5$. De especial interés es la figura (b) donde se muestra la velocidad radial que posee valores negativos pues la sección transversal del chorro disminuye respecto a la de la sección de salida. Además, puede observarse que, a partir de $\hat{x} \approx 0,5$, la componente radial de la velocidad es prácticamente nula debido a que la pendiente de la velocidad axial adquiere valores muy pequeños puesto que el chorro está solidificándose. Es interesante observar también que el núcleo se enfría considerablemente comparado con otros casos estudiados. En cuanto a la cristalización (el núcleo cristaliza mucho más que el revestimiento debido a que $a_{21} > a_{22}$) y la orientación molecular no hay nada nuevo que añadir respecto a lo ya comentado durante todo este capítulo.

Por último, se representa en la Figura 4.29 el grado de cristalización en el núcleo para algunas secciones transversales en las que se puede comprobar los gradientes radiales de cristalización así como la disminución de sección transversal que experimenta la fibra compuesta. Puesto que

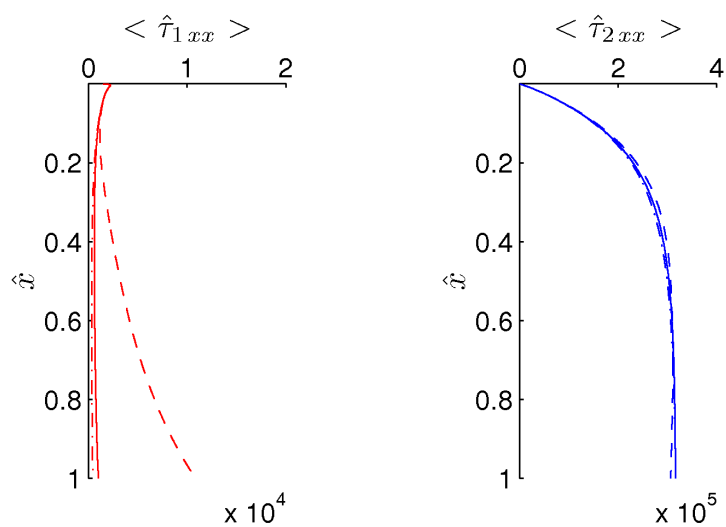


Figura 4.21: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (-), 4 (---) y 5 (- · -) de la Tabla 4.1.

se ha impuesto un perfil parabólico para el parámetro de orientación molecular en la sección de salida con valores máximos en el eje de simetría e interface de separación de ambos chorros, en estas posiciones radiales, donde se obtienen las cristalizaciones máximas.

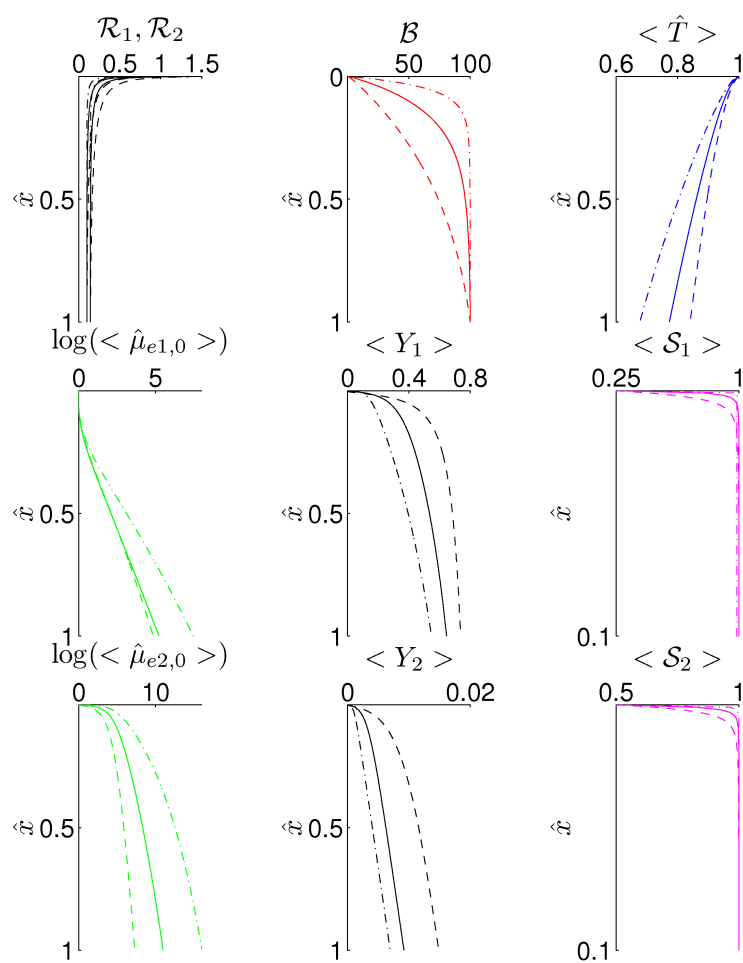


Figura 4.22: Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (—), 6 (---) y 7 (- · -) de la Tabla 4.1.

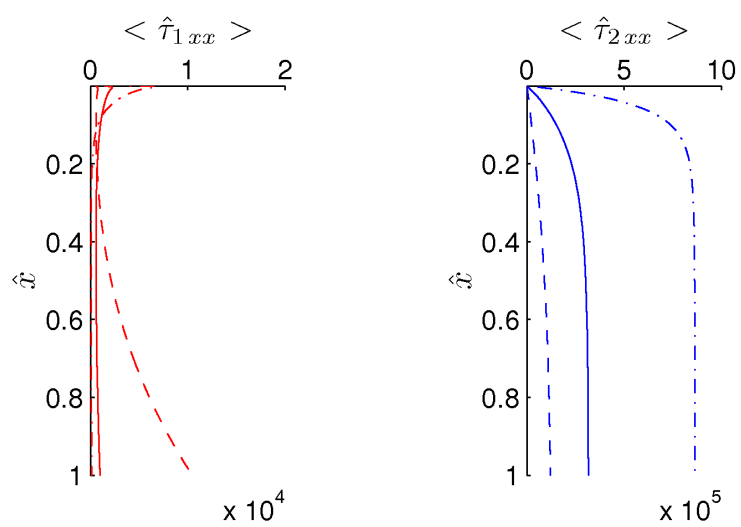


Figura 4.23: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 6 (---) y 7 (- · -) de la Tabla 4.1.

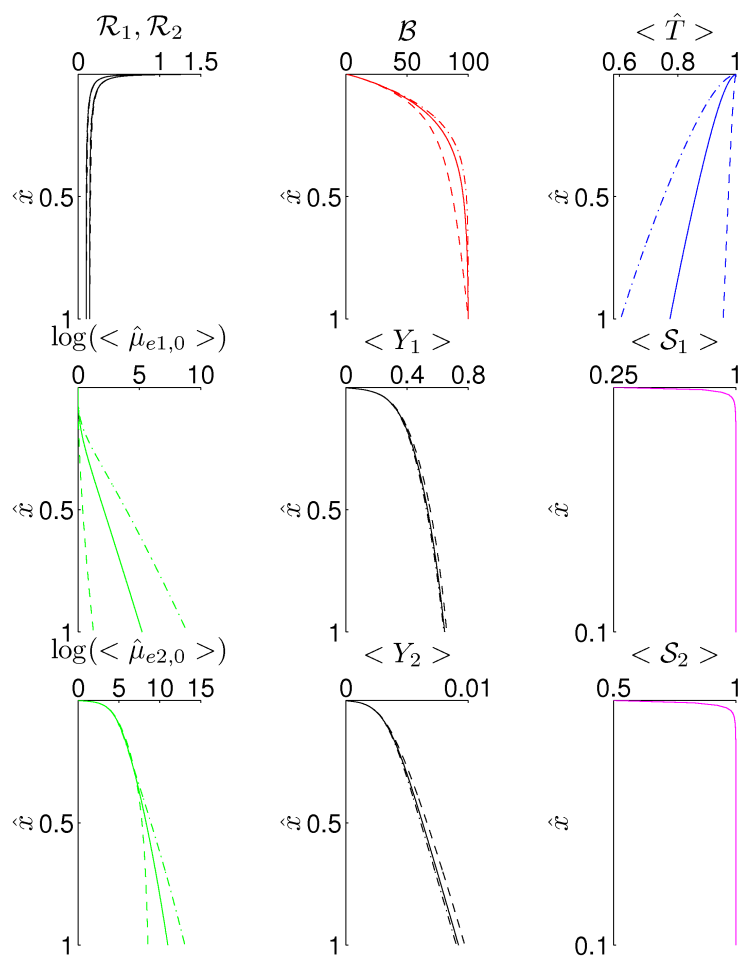


Figura 4.24: Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (—), 8 (---) y 9 (- · -) de la Tabla 4.1.

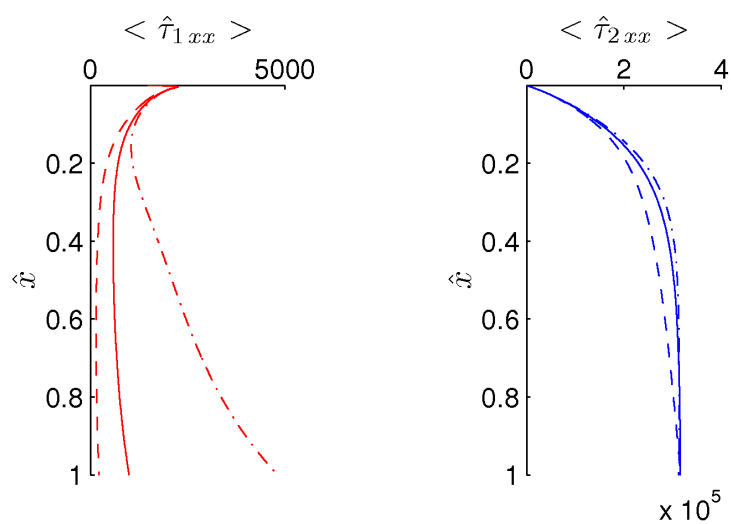


Figura 4.25: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 8 (---) y 9 (- · -) de la Tabla 4.1.

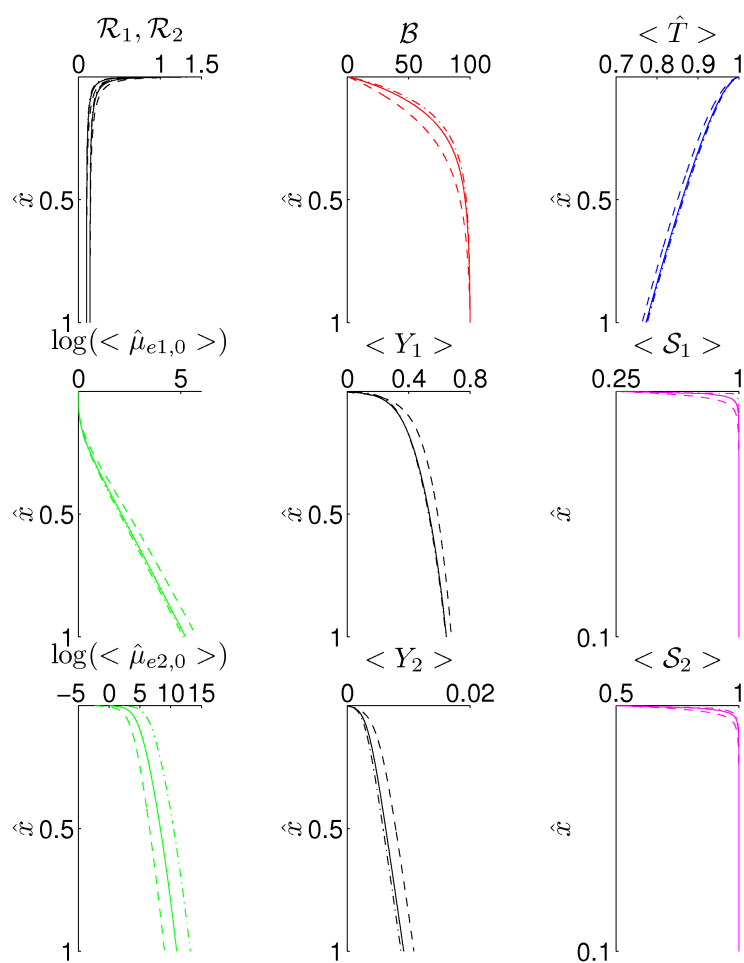


Figura 4.26: Geometría, velocidad axial, promedio de temperatura, viscosidad dinámica promediada de la fibra compuesta, parámetro de orientación molecular y grado de cristalización para los casos 1 (—), 10 (---) y 11 (- · -) de la Tabla 4.1.

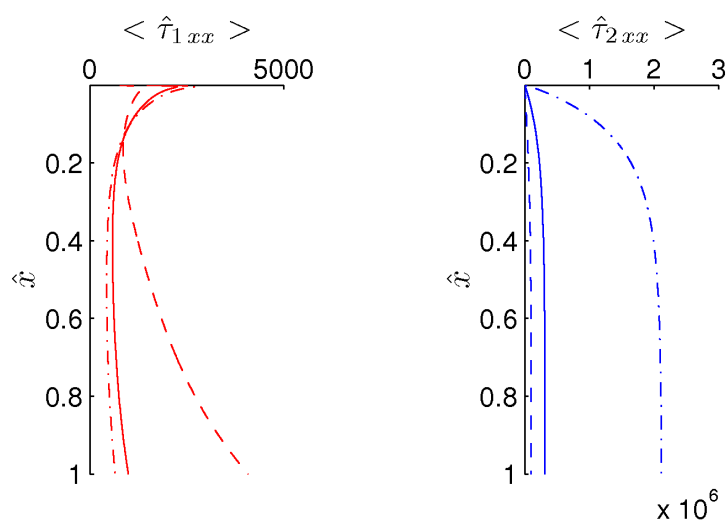


Figura 4.27: Esfuerzos axiales promediados en el núcleo (rojo) y revestimiento (azul) de una fibra compuesta obtenidos mediante el modelo híbrido para los casos 1 (—), 10 (---) y 11 (-·-) de la Tabla 4.1.

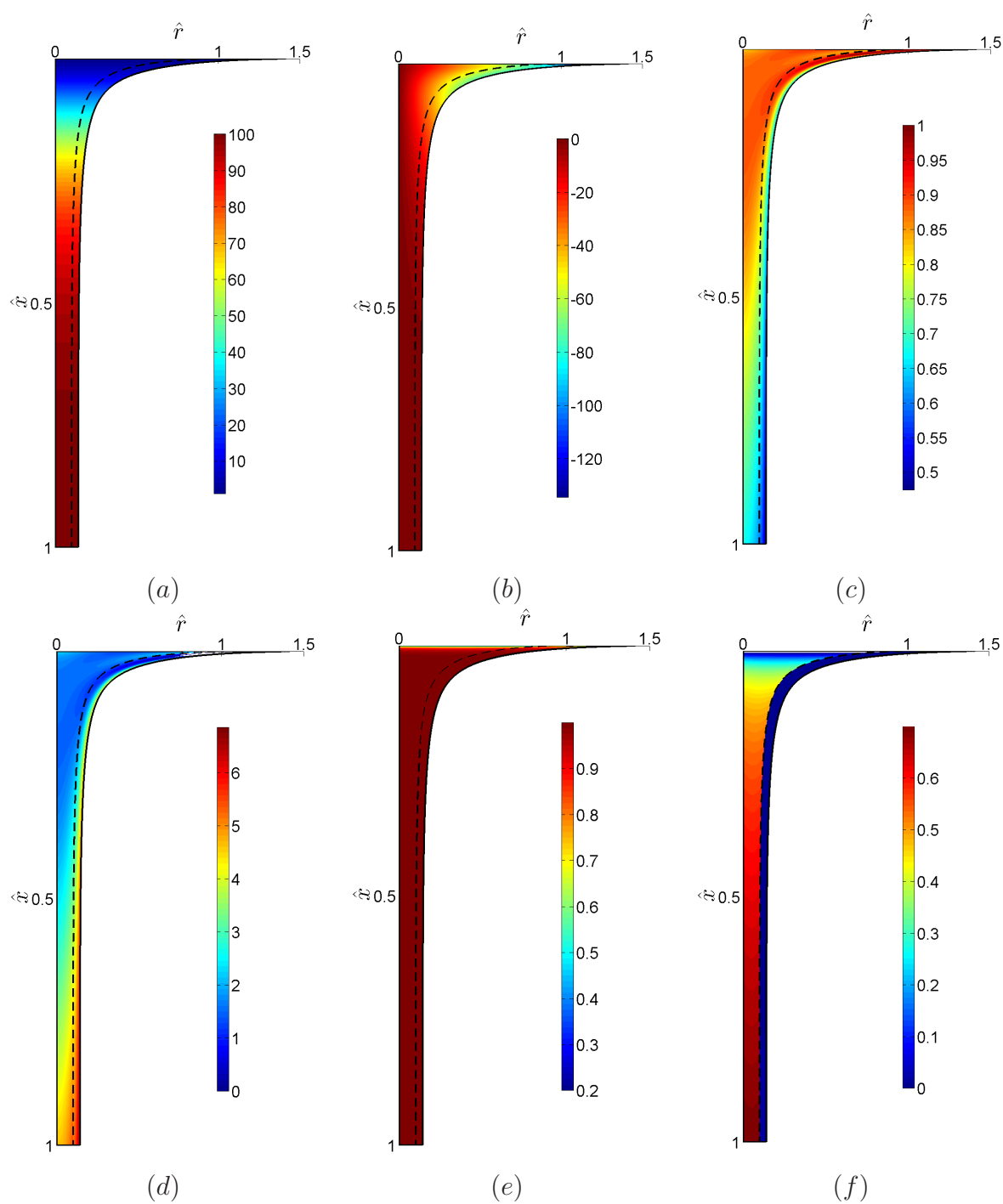


Figura 4.28: Campos bidimensionales de la magnitud de velocidad axial (a), velocidad radial (b), temperatura (c), $\log(\hat{\mu}_e)$ (d), parámetro de orientación molecular (e) y grado de cristalización (f) para el caso 4 de la Tabla 4.1 con $Bi = 5$.

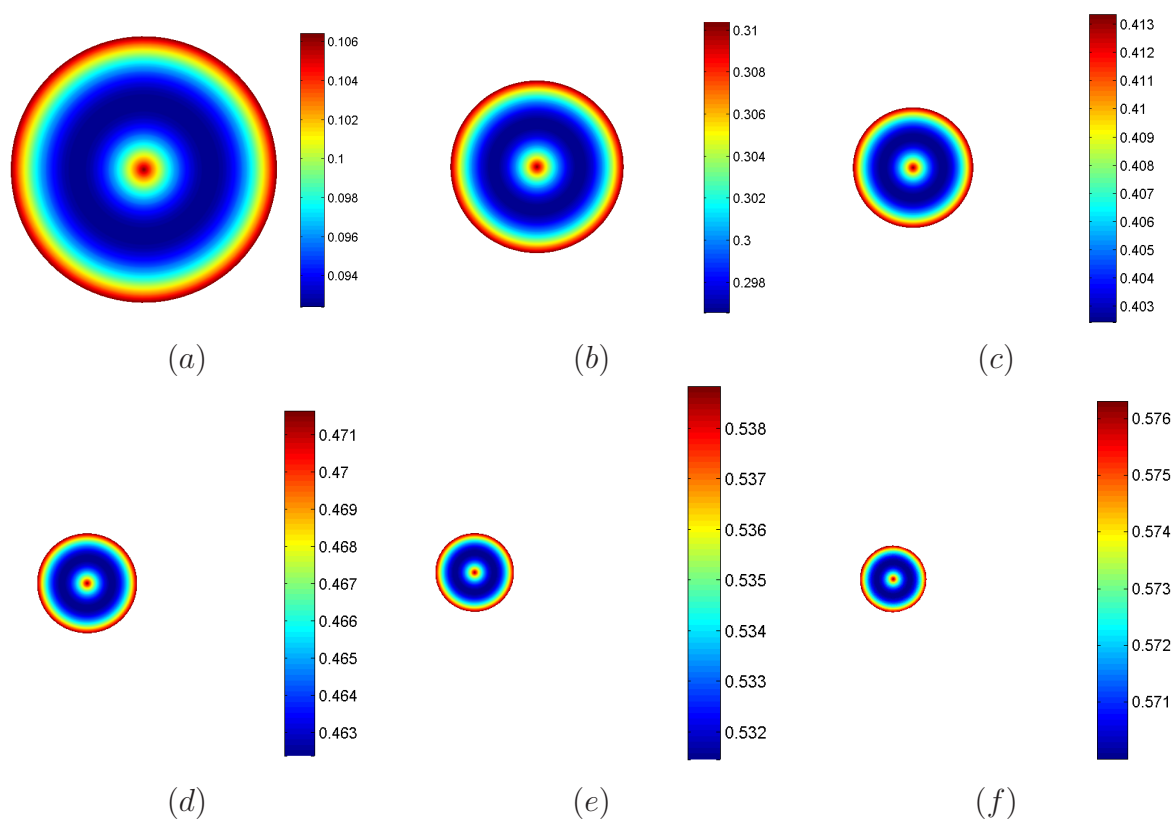


Figura 4.29: Grado de cristalización en varias secciones transversales ($\hat{x} = 0,01$ (a); $\hat{x} = 0,03$ (b); $\hat{x} = 0,06$ (c); $\hat{x} = 0,10$ (d); $\hat{x} = 0,20$ (e); $\hat{x} = 0,30$ (f)) del núcleo de la fibra compuesta para el caso 4 de la Tabla 4.1 con $Bi = 5$.

4.4. Conclusiones

En este capítulo se han comparado los modelos unidimensionales desarrollados por el autor y el propuesto por Forest et al. [50] con parámetro de orden para fibras amorfas poliméricas no cristalinas obteniéndose resultados similares por lo que el uso de un tensor diagonal con la forma reportada por estos autores es adecuado para este tipo de fibras. Posteriormente, se han presentado los primeros resultados del modelo híbrido para fibras amorfas mediante los cuales se pudieron comprobar la influencia de los parámetros térmicos fundamentales en la solución del fenómeno de *melt spinning* en fibras amorfas. A continuación, se validó el modelo híbrido previa comparación con el modelo 1D con tensor de orientación completo y se realizó un análisis de la sensibilidad del fenómeno de estirado de fibras semicristalinas a alguno de los parámetros que controlan el proceso. Finalmente, se presentó un último caso con las condiciones iniciales de temperatura y orientación molecular dependientes de la coordenada radial mediante un perfil parabólico.

Una de las principales conclusiones que se obtienen es la concordancia entre ambos modelos unidimensionales así como la correcta validación del modelo unidimensional usando el nuevo modelo de $1 + 1/2$ dimensiones implementado.

Tras el estudio detallado realizado en este capítulo, se concluye que la aproximación a primer orden de una temperatura que no depende de la coordenada radial en el modelo unidimensional se hace menos precisa cuanto mayor es el enfriamiento de la fibra, fenómeno que viene favorecido por altos valores del número de Biot, Bi , y/o de la relación de conductividades, $\frac{k_2}{k_1}$, o bajos valores de los números de Péclet tanto del núcleo, \bar{P}_1 , como del revestimiento, \bar{P}_2 (no ha sido reportado aquí). Es en el núcleo donde los resultados son más relevantes pues, en secciones cercanas a la de la salida de la fibra, la temperatura del núcleo permanece casi constante e idéntica a la de fusión del polímero. De todas formas, en el análisis asintótico se dejó claro que para que el modelo 1D tuviera validez se requerían valores pequeños del número de Biot, \bar{B} .

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. Introducción

En este capítulo se presentan las principales conclusiones extraídas del presente trabajo de investigación, explicándose brevemente los resultados obtenidos para los distintos problemas que se han formulado y resuelto.

Además, se comentarán otras líneas de investigación relacionadas con el tema principal de este trabajo así como posibles investigaciones futuras siguiendo la línea presentada en esta memoria.

Los objetivos alcanzados con este trabajo son

- la construcción de un modelo matemático derivado de las ecuaciones unidimensionales asintóticas para fibras esbeltas de balance de masa y cantidad de movimiento, y las ecuaciones bidimensionales de energía así como la inclusión de las ecuaciones de Doi–Edwards para la orientación molecular y la cinética de Avrami–Kolmogorov para cristalización, para el estudio de los procesos de fabricación de fibras compuestas semicristalinas mediante *melt spinning*.

y

- el uso de este modelo como herramienta para explorar cómo afectan las condiciones del proceso en la manufactura de fibras mediante el proceso de fabricación de *melt spinning* así como la validación de modelos 1D tanto para fibras amorfas como semicristalinas incluyendo el tensor de orientación molecular o el parámetro de orden molecular.

5.2. Implementación numérica del problema

La implementación numérica de las ecuaciones que gobiernan el problema de estirado de fibras semicristalinas se ha realizado mediante el uso de un método de diferencias finitas previa

aplicación de un análisis asintótico usando la esbeltez, $\epsilon = \frac{R_0}{L} \ll 1$, de la fibra como parámetro perturbativo.

Se han formulado los siguientes esquemas numéricos:

- **Modelo 1D con parámetro de orden para la orientación molecular:** En este modelo sólo se dispone de una ecuación hiperbólica para el cálculo del parámetro de orientación molecular, \mathcal{S}_i . El modelo ha sido depurado, trasladándolo a MatLab, el código existente implementado en Fortran por el grupo de investigación al que pertenece el autor.
 - Considerando la conducción axial (BVP para la temperatura)
 - Despreciando la conducción axial (IVP para la temperatura)
- **Modelo 1D con tensor de orientación completo:** El parámetro de orientación, \mathcal{S}_i , se obtiene a partir de la solución de un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias para cada una de las cuatro componentes del tensor de orientación, $\bar{\bar{\mathcal{S}}}_i$.
 - Considerando la conducción axial (BVP para la temperatura)
 - Despreciando la conducción axial (IVP para la temperatura)
- **Modelo 1+1/2D con tensor de orientación completo:** En este modelo se implementa la ecuación bidimensional de la energía despreciando la conducción axial así como las ecuaciones de Doi–Edwards para el tensor de orientación con o sin la cinética de Avrami–Kolmogorov para fibras poliméricas semicristalinas.

Para la resolución de todas las ecuaciones que gobiernan el problema, se han implementado todas las funciones necesarias haciendo uso del software matemático MatLab. Uno de los grandes méritos de este trabajo, según mi opinión, radica en la implementación numérica de los métodos numéricos sin hacer uso para ello de ninguna función específica de MatLab.

Para conseguir resultados fiables se ha de mallar finamente el dominio del problema, dando como resultado matrices grandes para la resolución del problema. Sin embargo, estas matrices al ser poco densas, se han tratado en MatLab como matrices *sparse* con lo que se consigue un ahorro en memoria y tiempo de computación muy importante. Asimismo, se han usado métodos implícitos para las ecuaciones en diferencias finitas para no tener problemas de estabilidad. Para el mallado de la geometría se ha utilizado un tamaño de paso fijo en cada una de las direcciones del problema pero a la vista de los resultados, podríamos plantear la posibilidad de usar mallas adaptativas (tamaño de paso variable) realizando mallados más finos en el revestimiento de la fibra, que es donde tienen lugar los gradientes radiales de temperatura más elevados, así como cerca del punto de salida de la misma que es donde se producen las variaciones axiales más importantes. Para la ejecución de las simulaciones se han usado dos ordenadores distintos (durante el proceso total de cálculo se ha producido una renovación de material informático) con las siguientes características:

- PC 1
 - Procesador: Intel Pentium 4 @ 3,00 GHz

- Memoria Ram: 512 MB
- Disco Duro: 120 GB
- PC 2
 - Procesador: Quad Core Q9650 @ 3,00 GHz
 - Memoria Ram: 4 GB
 - Disco Duro: 750 GB

5.3. Contribuciones del trabajo actual y futuros estudios

La línea de investigación del presente trabajo se centra en el estirado de fibras compuestas semicristalinas mediante el método de *melt spinning* donde el enfriamiento de las fibras es el mecanismo impulsor de la solidificación de la misma. Además, utilizando las ecuaciones de Doi–Edwards para el tensor de orientación y una cinética de cristalización de Avrami–Kolmogorov para el grado de cristalización se consigue un modelo completo del problema en el que todas las variables fundamentales (geometría, velocidad, temperatura, orientación y cristalización) se encuentran acopladas no linealmente.

Entre las principales contribuciones del mismo se encuentran

- Desarrollo del modelo asintótico 1D con tensor de orientación molecular que incluye como caso especial el desarrollado por Forest et al. usando un parámetro de orden en la formulación de Doi–Edwards.
- Desarrollo de un modelo de $1 + 1/2D$ tanto para fibras amorfas como para semicristalinas con reología Newtoniana.
- Validación del rango de aplicabilidad del modelo 1D con el modelo de $1 + 1/2D$.
- Determinación del campo bidimensional de temperaturas, $\hat{T}(\hat{r}, \hat{x})$, orientación molecular y grado de cristalización para la fibra compuesta. Hay que destacar que los modelos 1D y $1 + 1/2D$ propuestos en este trabajo son aplicables tanto a fibras amorfas como semicristalinas.

Los futuros trabajos a realizar siguiendo la misma línea de investigación se pueden resumir mediante:

- Implementación del problema para fibras compuestas semicristalinas anulares.
- Coeficiente de transmisión de calor por convección y radiación dependiente de las variables del problema (sobre todo de la temperatura de la fibra) mediante el uso de correlaciones experimentales.

- Inclusión de los fenómenos de arrastre del aire en las ecuaciones de cantidad de movimiento.
- Inclusión de la disipación viscosa en la ecuación bidimensional de la energía.
- Formulación de otras cinéticas de cristalización.
- Estudio del problema en función del conjunto de parámetros, $(\delta, \gamma, \theta, \chi)$ que determinan la condición inicial de las componentes del tensor de orientación.
- Análisis de sensibilidad a la variación de todos los parámetros y condiciones de operación que gobiernan el problema.

Existe, además, una línea de investigación paralela a la presentada que consiste en el estirado de fibras compuestas semicristalinas mediante el método de *dry spinning* donde el mecanismo impulsor de la solidificación de las fibras lo constituye la evaporación de solventes presentes en un baño.

El problema bidimensional completo de ambos procesos también podría resolverse mediante algún software comercial (Fluent, Inc. o similar) para validar el modelo de $1 + 1/2D$ propuesto en este trabajo, incluyendo la fluidodinámica aguas arriba del orificio de salida y la formación del fenómeno de *necking* que se da para altas relaciones de estiramiento ($D_r > 1000$) usando reologías newtoniana y no newtoniana puesto que los modelos presentados en este trabajo sólo son válidos aguas abajo de la sección transversal máxima de la fibra. Asimismo, se plantea el desarrollo de un modelo bifásico en el que las fases cristalina y amorfa obedecen reologías distintas.

Apéndice A

Validación del método numérico e independencia de la malla

A.1. Introducción

En este apéndice se realiza la validación del método numérico implementado para el cálculo de la geometría y velocidad axial en fibras amorfas isothermas usando resultados analíticos conocidos. Para ello se han desarrollado simulaciones del regimen capilar viscoso caracterizado por un número de Reynolds nulo, $\bar{R} = 0$ y número de capilaridad finito ($1/\bar{C} \neq 0$) y distinto de 0. Además se han realizado estudios de los errores de la solución numérica respecto de la exacta para distintos espaciados axiales con el objetivo de verificar el número de nodos en la dirección axial necesarios para obtener la precisión deseada. Conviene notar que esta validación no es posible hacerla para fibras semicristalinas no isothermas pues no se conoce la solución exacta.

A.2. Regimen capilar viscoso

La ecuación para la velocidad axial que caracteriza al regimen capilar viscoso para fibras amorfas isothermas viene dada por

$$\frac{1}{2\bar{C}} \left(\frac{d\mathcal{R}_2}{d\hat{x}} + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \frac{d\mathcal{R}_1}{d\hat{x}} \right) + \frac{d}{d\hat{x}} \left(3(G_1 \mathcal{A}_1 + G_2 \mathcal{A}_2) \frac{d\mathcal{B}}{d\hat{x}} \right) = 0, \quad (\text{A.1})$$

que tiene como solución analítica [30]

$$\mathcal{B}^a(\hat{x}) = \left(\delta \exp\left(\frac{\alpha}{2P}\hat{x}\right) + \frac{Q}{\alpha} \right)^2, \quad (\text{A.2})$$

donde α y δ son constantes de integración que dependen de la velocidad axial en la sección de salida de la fibra y $P = 3(G_1 Q_1 + G_2 Q_2)$ y $Q = \frac{1}{\sqrt{2\bar{C}}} \left(\sqrt{Q_T} + \sqrt{Q_1 \frac{\sigma_1}{\sigma_2}} \right)$. Se debe notar que puesto que el problema es isoterma las viscosidades dinámicas de los chorros son constantes y coinciden con los factores pre-exponenciales de la ecuación de Arrhenius.

N_x	E	$N_{iteraciones}$	$t_{cpu}(s)$
101	$2,000 \cdot 10^{-2}$	124	0.1739
501	$8,054 \cdot 10^{-4}$	125	0.4038
1001	$2,014 \cdot 10^{-4}$	125	0.8481
2001	$5,037 \cdot 10^{-5}$	125	2.1040
4001	$1,259 \cdot 10^{-5}$	125	11.8068

Tabla A.1: Error entre la solución analítica y la numérica para el estirado de fibras amorfas isotermas en el regimen capilar viscoso para distintos espaciados en la dirección axial.

Se ha calculado la solución numérica del problema para una fibra caracterizada por $G_1 = G_2 = 1$, $\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \sqrt{2}$, $\bar{C} = \frac{20\sqrt{2}}{66 \ln(21)}$, $Q_1 = Q_2 = 0,5$, $\mathcal{B}(0) = 1$ y $\mathcal{B}(1) = D_r = 100$ para varias mallas en dirección axial ($N_x = 101$, $N_x = 501$, $N_x = 1001$, $N_x = 2001$ y $N_x = 4001$). En los estudios considerados en este apéndice

$$P = 3,$$

$$Q = \frac{66}{20} \ln(21).$$

Para la determinación de la precisión de la solución se ha definido el error entre la solución analítica y la numérica como

$$E = \sqrt{\frac{1}{N_x} \sum_{j=1}^{N_x} (\mathcal{B}_j^a - \mathcal{B}_j)^2}, \quad (\text{A.3})$$

donde N_x denota el número de puntos de la malla en dirección axial y \mathcal{B}^a y \mathcal{B} son la solución analítica y la numérica, respectivamente.

El cálculo de los parámetros α y δ requiere la solución de una ecuación no lineal mediante la cual se obtiene

$$\alpha = 2P \ln(21) = 6 \ln(21)$$

$$\delta = 1 - \frac{Q}{\alpha} = \frac{9}{20}$$

por lo que la solución exacta del problema viene dada por

$$\mathcal{B}^a(\hat{x}) = \left(\frac{9}{20} (21)^{\hat{x}} + \frac{11}{20} \right)^2, \quad (\text{A.4})$$

En la Tabla A.1 se muestran los errores, número de iteraciones y tiempos de ejecución en segundos para cada una de las mallas usadas. Se puede apreciar como los errores disminuyen considerablemente conforme aumenta el refinado de la malla. Es notable el dato de que el número de iteraciones necesario para alcanzar la convergencia es prácticamente independiente del número de puntos de la malla. Asimismo, y a partir de estos resultados para un problema sencillo, se tomó la decisión de usar mallas con $N_x = 2001$ para problemas unidimensionales y $N_x = 1001$ para problemas bidimensionales.

Bibliografía

- [1] G. G. Lipscomb. The melt hollow fiber spinning: Steady-state behavior, sensitivity and stability. *Polymers for Advanced Technologies*, 5:745–758, 1993.
- [2] R. F. Cregan, B. J. Mangan, J. C. Knight, T. A. Birks, P. St. J. Russell, P. J. Roberts, and D. C. Allan. Single-mode photonic band gap guidance of light in air. *Science*, 285:1537–1539, 1999.
- [3] M. Bayindir, F. Sorin, A. F. Abouraddy, J. Viens, S. D. Hart, J. D. Joannopoulos, and Y. Fink. Metal-insulator-semiconductor optoelectronic fibres. *Nature*, 431:826–829, 2004.
- [4] R. Keunings, M. J. Crochet, and M. M. Denn. Profile development in continuous drawing of viscoelastic liquids. *Polymers for Advanced Technologies*, 22:347–355, 1983.
- [5] H. H. George. Model of steady-state melt spinning at intermediate take-up speeds. *Polymer Engineering and Science*, 22:292–299, 1982.
- [6] H. H. George, A. Holt, and A. Buckley. A study of structural development in the high speed spinning of poly(ethylene terephthalate). *Polymer Engineering and Science*, 23:95–99, 1983.
- [7] S. Kase and T. Matsuo. Studies of melt spinning. i. on the stability of melt spinning. *Journal of Polymer Science A*, 3:2541–2554, 1965.
- [8] M. M. Denn. Continuous drawing of liquids to form fibers. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 12:365–387, 1980.
- [9] J. R. A. Pearson and M. A. Matovich. Spinning a molten threadline: Stability. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 8:605–609, 1969.
- [10] J. R. A. Pearson and C. J. S. Petrie. The flow of a tubular film. part 1. formal mathematical representation. *The Journal of Fluid Mechanics*, 40:1–19, 1970.
- [11] J. R. A. Pearson and C. J. S. Petrie. The flow of a tubular film. part 2. interpretation of the model and discussion of solutions. *The Journal of Fluid Mechanics*, 40:609–625, 1970.
- [12] Y. L. Yeow. Stability of tubular film flow: a model of the film-blowing process. *The Journal of Fluid Mechanics*, 75:577–591, 1976.

- [13] A. L. Yarin, P. Gospodinov, O. Gottlieb, and M. D. Graham. Newtonian glass fiber drawing: Chaotic variation of the cross-sectional radius. *Physics of Fluids*, 11:3201–3208, 1999.
- [14] W. W. Schultz and S. H. Davis. Effects of boundary conditions on the stability of slender viscous fibers. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 51:1–5, 1984.
- [15] J. I. Ramos. Drawing of annular liquid jets at low reynolds numbers. *Computational and Theoretical Polymer Science*, 11:429–443, 2001.
- [16] J. I. Ramos. Stability and nonlinear dynamics of planar film casting processes. *International Journal of Engineering Science*, 39:1949–1961, 2001.
- [17] J. I. Ramos. Compound liquid jets at low reynolds numbers. *Polymer*, 43:2889–2896, 2002.
- [18] J. I. Ramos. Nonlinear dynamics of hollow, compound jets at low reynolds numbers. *International Journal of Engineering Science*, 39:1289–1314, 2001.
- [19] A. D. Fitt, K. Furusawa, T. M. Monro, and C. P. Please. Modelling the fabrication of hollow fibers: Capillary drawing. *Journal of Lightwave Technology*, 19:1924–1931, 2001.
- [20] P. Gospodinov and A. L. Yarin. Draw resonance of optical microcapillaries in non-isothermal drawing. *International Journal of Multiphase Flow*, 23:967–976, 1997.
- [21] A. D. Fitt, K. Furusawa, T. M. Monro, C. P. Please, and D. J. Richardson. The mathematical modelling of capillary drawing for holey fiber manufacture. *Journal of Engineering Mathematics*, 43:201–227, 2002.
- [22] J. I. Ramos. Convection and radiation effects in hollow, compound optical fibers. In G. de Vahl Davis and E. Leonardi, editors, *Proceedings of the ICHMT Symposium: CHT-04 International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer III*, pages 81–86. International Centre of Heat and Mass Transfer, Begell House, Inc., New York, USA, April 2004.
- [23] J. I. Ramos. Flow and crystallization of holey, compound, optical fibers. In W. Gutkowski and T. A. Kowalewski, editors, *Proceedings of XXI International Congress of Theoretical and Applied Mechanics*. IPPT PAN (Institute of Fundamental Technological Research, Polish Academy of Sciences, Warszawa), August 2004.
- [24] C-W. Park. Extensional flow of a two-phase fiber. *AIChE Journal*, 36:197–206, 1990.
- [25] W-S. Lee and C-W. Park. Stability of a bicomponent fiber spinning flow. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 62:511–516, 1995.
- [26] S. K. Naboulsi and S. E. Bechtel. Bicomponent newtonian fibers. *Physics of Fluids*, 11:807–820, 1999.

- [27] C-C. Ji and J-C. Yang. Mechanics of steady flow in coextrusion fiber spinning. *Polymer Engineering and Science*, 36:1399–1409, 1996.
- [28] C-C. Ji, J-C. Yang, and W-S. Lee. Stability of newtonian coextrusion fiber spinning. *Polymer Engineering and Science*, 36:2685–2693, 1996.
- [29] J. I. Ramos. Asymptotic analysis of compound liquid jets at low reynolds numbers. *Applied Mathematics and Computation*, 100:223–240, 1999.
- [30] J. I. Ramos. *Polymer Research Developments*, chapter Chapter 7. Mathematical models of compound, polymer optical fibers, pages 127–185. Nova Science Publishers, Inc., New York, USA, 2006.
- [31] S. Ramalingam and R. C. Armstrong. Analysis of isothermal spinning of liquid-crystalline polymers. *Journal of Rheology*, 37:1141–1169, 1993.
- [32] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. (*Course of Theoretical Physics*) *Statistical Physics: Part 1*, volume 5. Pergamon Press, New York, USA, 1980.
- [33] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. (*Course of Theoretical Physics*) *Statistical Physics: Part 2*, volume 9. Pergamon Press, New York, USA, 1980.
- [34] M. Avrami. Kinetics of phase change. i. general theory. *Journal of Chemical Physics*, 7:1103–1112, 1939.
- [35] M. Avrami. Kinetics of phase change. ii. transformation–time relations for random distribution of nuclei. *Journal of Chemical Physics*, 8:212–224, 1940.
- [36] M. Avrami. Kinetics of phase change. iii. granulation, phase change, and microstructure. *Journal of Chemical Physics*, 9:177–184, 1941.
- [37] A.Ñ. Kolmogorov. On the statistical theory of the crystallization of metals. *Bulletion of the Academy of Sciences of the USSR, Mathematical Series*, 1:355–359, 1937.
- [38] G. Eder, H. Janeschitz-Kriegl, and S. Liedaues. Crystallization processes in quiescent and moving polymer melts under heat transfer conditions. *Progress in Polymer Science*, 15:629–714, 1990.
- [39] G. Eder. *Macromolecular design of polymeric materials*. K. Hatada, T. Kitayama and O. Vogl, Marcel Dekker, New York, USA, 1997.
- [40] M. Burger, V. Capasso, and G. Eder. Modelling of polymer crystallization in temperature fields. *ZAMM, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 82:51–63, 2002.
- [41] V. Capasso. *Mathematical Modelling for Polymer Processing*. Springer-Verlag, New York, USA, 2003.

- [42] A. Ziabicki. *Fundamentals of Fibre Formation*. John Wiley and Sons, New York, USA, 1976.
- [43] P. J. Flory. Thermodynamics of crystallization in high polymers i. crystallization induced by stretching. *Journal of Chemistry and Physics*, 15:397–408, 1947.
- [44] I. J. Rao and R. K. Rajagopal. A thermodynamic framework for the study of crystallization in polymers. *ZAMP, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 53:365–406, 2002.
- [45] A. K. Doufas, I. S. Dairanieh, and A. J. McHugh. A continuum model for flow-induced crystallization of polymer melts. *Journal of Rheology*, 43:85–109, 1999.
- [46] A. K. Doufas, A. J. McHugh, and C. Miller. Simulation of melt spinning including flow-induced crystallization. part i: Model development and predictions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 92:27–66, 2000.
- [47] A. K. Doufas, A. J. McHugh, C. Miller, and A. Immaneni. Simulation of melt spinning including flow-induced crystallization. part ii: Quantitative comparisons with industrial spinline data. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 92:81–103, 2000.
- [48] R. M. Patel, A. K. Doufas, and R. P. Paradkar. Raman spectroscopy for spinline crystallinity measurements. ii. validation of fundamental fiber-spinning models. *Journal of Applied Polymer Science*, 109:3398–3412, 2008.
- [49] P. Shrikhande, W. H. Kohler, and A. J. McHugh. A modified model and algorithm for flow-enhanced crystallization-application to fiber spinning. *Journal of Applied Polymer Science*, 100:3240–3254, 2006.
- [50] M. G. Forest and T. Ueda. An isothermal model for high-speed spinning of liquid crystalline polymers: coupling of flow, orientation and crystallization. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 84:109–121, 1999.
- [51] A. Ziabicki, A. Jarecki, and A. Wasiak. Dynamic modelling of melt spinning. *Computational and Theoretical Polymer Science*, 8:143–157, 1998.
- [52] Y. L. Joo, J. Sun, M. D. Smith, R. C. Armstrong, R. A. Brown, and R. A. Ross. Two-dimensional numerical analysis of non-isothermal melt spinning with and without phase transition. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 102:37–70, 2002.
- [53] J. A. Kulkarni and N. A. Beris. A model for the necking phenomena in high-speed fiber spinning based on flow-induced crystallization. *Journal of Rheology*, 42:971–994, 1998.
- [54] K. Kannan and K. R. Rajagopal. Simulation of fiber spinning including flow-induced crystallization. *Journal of Rheology*, 49:683–703, 2005.
- [55] J. van Meerveld, M. Hutter, and G. W. M. Peters. Continuum model for the simulation of fiber spinning with quiescent and flow-induced crystallization. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 150:177–195, 2008.

- [56] M. G. Forest, Q. Wang, and S. E. Bechtel. 1-d isothermal spinning models for liquid crystalline polymer fibers. *Journal of Rheology*, 41:821–850, 1997.
- [57] M. G. Forest, Q. Wang, and S. E. Bechtel. 1-d models for thin filaments of liquid crystalline polymers: Coupling of orientation and flow in the stability of simple solutions. *Physics D*, 99:527–554, 1997.
- [58] M. G. Forest, H. Zhou, and Q. Wang. Thermotropic liquid crystalline polymer fibers. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, 60:1177–1204, 2000.
- [59] A. K. Doufas and A. J. McHugh. Simulation of melt spinning including flow-induced crystallization. part iii. quantitative comparisons with pet spinline data. *Journal of Rheology*, 45:403–420, 2001.
- [60] A. K. Doufas and A. J. McHugh. Two-dimensional simulation of melt spinning with a microstructural model for flow-induced crystallization. *Journal of Rheology*, 45:855–879, 2001.
- [61] R. B. Bird, C. F. Curtis, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids: Kinetic Theory*, volume 2. John Wiley and Sons, New York, USA, 1987.
- [62] G. Henson, D. Cao, S. E. Bechtel, and M. G. Forest. A thin-filament melt spinning model with radial resolution of temperature and stress. *Journal of Rheology*, 42:329–360, 1998.
- [63] P. W. Bell and D. D. Eddie. Calculated internal stress distributions in melt spun fibers. *Journal Applied Polymer Science*, 33:1073–1088, 1987.
- [64] J. I. Ramos. Molecular orientation and crystallization of composite fibres. In G. de Vahl Davis and E. Leonardi, editors, *Proceedings of the ICHMT Symposium: CHT-08 International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer IV*, pages 81–86. International Centre of Heat and Mass Transfer, Begell House, Inc., Redding, Connecticut, USA, May 2008.
- [65] J. Sun, S. Subbiah, and J. A. Marchal. Numerical analysis of nonisothermal viscoelastic melt spinning with ongoing crystallization. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 93:133–151, 2000.
- [66] K. Nakamura, K. Katayama, and T. Amano. Some aspects of nonisothermal crystallization of polymers. ii. consideration of the isokinetic condition. *Journal of Applied Polymer Science*, 17:1031–1041, 1973.
- [67] W. W. Schultz and S. H. Davis. One-dimensional liquid fibers. *Journal of Rheology*, 26:331–345, 1982.
- [68] G. Gupta and W. W. Schultz. Non-isothermal flows of newtonian slender glass fibers. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 33:151–163, 1998.

- [69] W. W. Schultz, A. Zebib, S. H. Davis, and Y. Lee. Nonlinear stability of newtonian fibres. *Journal of Fluid Mechanics*, 149:455–475, 1984.
- [70] J. I. Ramos. Thermal analysis of bicomponent fibres. *Applied Thermal Engineering*, 27:586–598, 2007.
- [71] J. I. Ramos. Modelling of liquid crystalline compound fibres. *Polymer*, 46:12612–12625, 2005.