



UNIVERSIDAD  
POLITÉCNICA  
DE MADRID

PROCESO DE  
COORDINACIÓN DE LAS  
ENSEÑANZAS PR/CL/001



E.T.S. de Ingenieros  
Industriales

# ANX-PR/CL/001-01

## GUÍA DE APRENDIZAJE

### ASIGNATURA

**53001423 - Reología Y Procesado De Materiales Poliméricos**

### PLAN DE ESTUDIOS

05BC - Master Universitario En Ingeniería Química

### CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2021/22 - Primer semestre

## Índice

---

### Guía de Aprendizaje

1. Datos descriptivos.....	1
2. Profesorado.....	1
3. Competencias y resultados de aprendizaje.....	2
4. Descripción de la asignatura y temario.....	4
5. Cronograma.....	8
6. Actividades y criterios de evaluación.....	11
7. Recursos didácticos.....	13
8. Otra información.....	15

## 1. Datos descriptivos

### 1.1. Datos de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura</b>	53001423 - Reología y Procesado de Materiales Poliméricos
<b>No de créditos</b>	4.5 ECTS
<b>Carácter</b>	Optativa
<b>Curso</b>	Segundo curso
<b>Semestre</b>	Tercer semestre
<b>Período de impartición</b>	Septiembre-Enero
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano
<b>Titulación</b>	05BC - Master Universitario en Ingeniería Química
<b>Centro responsable de la titulación</b>	05 - Escuela Técnica Superior De Ingenieros Industriales
<b>Curso académico</b>	2021-22

## 2. Profesorado

### 2.1. Profesorado implicado en la docencia

Nombre	Despacho	Correo electrónico	Horario de tutorías *
Aikaterini Foteinopoulou (Coordinador/a)	Materiales	k.foteinopoulou@upm.es	L - 11:00 - 15:30 las horas de tutorías son orientativas y pueden sufrir modificaciones. Se deberá confirmar los horarios de tutorías con el profesorado.

Nikolaos Karagiannis	Materiales	n.karayiannis@upm.es	M - 11:00 - 13:00
----------------------	------------	----------------------	-------------------

\* Las horas de tutoría son orientativas y pueden sufrir modificaciones. Se deberá confirmar los horarios de tutorías con el profesorado.

## 2.2. Personal investigador en formación o similar

Nombre	Correo electrónico	Profesor responsable
Herranz Feito, Miguel	miguel.herranzf@upm.es	Karagiannis, Nikolaos

## 3. Competencias y resultados de aprendizaje

### 3.1. Competencias

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CE1 - Aplicar conocimientos de matemáticas, física, química, biología y otras ciencias naturales, obtenidos mediante estudio, experiencia, y práctica, con razonamiento crítico para establecer soluciones viables económicamente a problemas técnicos.

CE3 - Conceptualizar modelos de ingeniería, aplicar métodos innovadores en la resolución de problemas y aplicaciones informáticas adecuadas, para el diseño, simulación, optimización y control de procesos y sistemas.

CE4 - Tener habilidad para solucionar problemas que son poco familiares, incompletamente definidos, y tienen especificaciones en competencia, considerando los posibles métodos de solución, incluidos los más innovadores, seleccionando el más apropiado, y poder corregir la puesta en práctica, evaluando las diferentes soluciones de diseño

CG4 - Realizar la investigación apropiada, emprender el diseño y dirigir el desarrollo de soluciones de ingeniería, en entornos nuevos o poco conocidos, relacionando creatividad, originalidad, innovación y transferencia de tecnología

CG5 - Saber establecer modelos matemáticos y desarrollarlos mediante la informática apropiada, como base científica y tecnológica para el diseño de nuevos productos, procesos, sistemas y servicios, y para la optimización de otros ya desarrollados

CT1 - Uso de la lengua inglesa

CT3 - Creatividad

CT4 - Organización y planificación

CT7 - Trabajos en contextos internacionales

### **3.2. Resultados del aprendizaje**

RA55 - Conocer los procesos de inestabilidad de flujo en el procesado de polímeros

RA53 - Conocer los modelos constitutivos de los fluidos viscoelásticos

RA57 - Aplicar criterios de selección de aditivos en la formulación de polímeros

RA54 - Aplicar resultados reológicos experimentales a la determinación de parámetros de los modelos constitutivos

RA120 - Conocer el contexto multidisciplinar de la asignatura.

RA36 - Comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

## 4. Descripción de la asignatura y temario

---

### 4.1. Descripción de la asignatura

El curso se centra en el uso de la simulación molecular para aplicaciones modernas relacionadas con la ingeniería química.

Se espera que los estudiantes:

- aprendan los principios fundamentales del origen atomístico que se basa la complejidad reológica de los polímeros
- aprendan a manejar modelos atomísticos de configuración de cadenas poliméricas
- aprendan a trabajar con las ecuaciones fundamentales de mecánica de fluidos acopladas con las leyes constitutivas de polímeros en formato tensorial
- aprendan las funciones de materia que se usan para describir el comportamiento reológico de polímeros
- aprenden el comportamiento reológico de los polímeros por presentación de resultados experimentales de las funciones de materia para varios polímeros
- aprenden leyes constitutivas que se utilizan para describir este comportamiento reológico
- distinguir entre leyes empíricas y avanzadas basadas a nivel molecular
- aprender a sacar los parámetros en las leyes constitutivas a partir de resultados experimentales

La evaluación continua implica la finalización de un conjunto de trabajos de clase y tareas y un mini proyecto final.

La asignatura se imparte completamente en inglés.

## 4.2. Temario de la asignatura

1. Introduction
2. Polymers: General Concepts
  - 2.1. Introduction, Definitions
  - 2.2. Classification of polymers
  - 2.3. polymer properties
3. Polymers: Configurations
  - 3.1. Chain configurations
    - 3.1.1. Configurations, presentation
    - 3.1.2. chain size
    - 3.1.3. superimposition
    - 3.1.4. Type of interactions
    - 3.1.5. unperturbed chain
    - 3.1.6. chain size measures
  - 3.2. Atomistic models
    - 3.2.1. Freely jointed chain
      - 3.2.1.1. Random Walk
    - 3.2.2. Freely rotating chain
    - 3.2.3. Worm like chain
    - 3.2.4. Rotational Isomeric state model
4. Introduction to polymer rheology
  - 4.1. Presentation-Introduction
  - 4.2. Applications
  - 4.3. Understanding polymer rheology
  - 4.4. Connect: Atomistic Models to polymer rheology
5. Tensor Calculus
  - 5.1. Tensor: Definition, Einstein Notation
  - 5.2. Tensor: products and definitions

5.3. Importance in using tensor notation in polymer rheology

5.4. The vector differential operator

## 6. Fluid Mechanics

6.1. Important tensors

6.1.1. Strain tensor

6.1.2. Gradient of velocity (rate of strain) tensor

6.2. Standard flows

6.2.1. Simple shear

6.2.2. Simple shear-free

6.3. The stress tensor

6.3.1. Definition

6.3.2. Physical origin-microscopic definition

6.3.3. The stress tensor in standard flows

6.4. Equations of change

6.4.1. Mass conservation

6.4.2. Momentum conservation

6.4.3. Applications in polymer processing

## 7. Material Functions

7.1. Definitions and Role of Material Functions

7.1.1. Steady shear flow

7.1.2. Steady elongational flow

7.2. Generalized Newtonian model

7.2.1. predictions in shear flow

7.2.2. Power law liquid

7.2.3. Carreau - Yosuda model

7.2.4. Bingham Fluid

7.2.5. Applications

7.3. Material Functions- Unsteady Shear

7.3.1. Experimental findings

### 7.3.2. Shear Creep

### 7.3.3. Step shear strain

### 7.3.4. Small Amplitude oscillatory shear (SAOS)

## 7.4. Material functions-Unsteady Elongation

### 7.4.1. Experimental findings

### 7.4.2. Start-up of steady elongation

## 8. Constitutive Equations-Memory effects

### 8.1. Simple memory fluid

#### 8.1.1. Definition: relaxation time

### 8.2. Maxwell model

#### 8.2.1. Presentation, origin

#### 8.2.2. Differential form

#### 8.2.3. Linear, viscoelastic fluids

#### 8.2.4. Applications: Predictions of various linear, viscoelastic fluids

## 9. Polymer Rheology

### 9.1. Freely jointed chain of Kuhn Monomers

### 9.2. Rouse Model

### 9.3. Time-Temperature Superposition

### 9.4. Tube Model

### 9.5. Reptation Theory

#### 9.5.1. Stress relaxation in reptation

#### 9.5.2. Computation Result: Mapping to reptation Theory

## 5. Cronograma

### 5.1. Cronograma de la asignatura \*

Sem	Actividad presencial en aula	Actividad presencial en laboratorio	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	<b>Chapter 1: Introduction</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>Chapter2: Introduction, Definitions</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
2	<b>Chapter 2: Classification of polymers, polymer properties</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>Chapter3: Polymers chain configuration</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas			Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
3	<b>Chapter 3: Polymers: chain size, superimposition, Type of interactions, unperturbed chain, chain zise measures</b> Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
4	<b>Chapter 3: Atomistic Models, freely jointed chain, Random Walk</b> Duración: 03:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas			
5	<b>Chapter 3: Atomistic Models: Freely Rotating chain, Worm like chain, ROTational isomeric state model</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>Chapter 3:Atomistic Models: Exercises</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas			Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
6	<b>Chapter 4: Introduction to polumer rheology</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>Chapter 5: Tensor Calculus: definitions, products</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			

7	<p><b>Chapter 5: Tensor calculus: importance, vector differential form, different coordinate systems</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p><b>Chapter 5: Problems application to rheology experiments</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p><b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00</p>
8	<p><b>Chapter 6: Fluid Mechanics: Important tensors, standard flows</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p><b>Chapter 6: Fluid Mechanics: Problems Applications</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p><b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00</p>
9	<p><b>Chapter 6: Fluid Mechanics the stress tensor, equations of change</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p><b>Chapter 6: Fluid Mechanics: Applications in polymer processing</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			
10	<p><b>Chapter 7: Material functions, Generalized Newtonian model</b> Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			<p><b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00</p>
11	<p><b>Chapter 7: Generalized Newtonian model applications- problems</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p> <p><b>Chapter 7: Material Functions: Unsteady Shear, unsteady elongation and applications</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			
12	<p><b>Chapter 8: Constitutive equations memory effects</b> Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			<p><b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00</p>
13	<p><b>Chapter 8: Constitutive equations memory-effects: Applications various models</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p> <p><b>Chapter 9: Polymer Rheology: Freely jointed chain, Rouse Model</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p><b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00</p>

14	<b>Chapter 9: Polymer Rheology: Tube Model, Reptation Theory</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>Chapter 9: Polymer Rheology: Application solving in computers</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas			
15				<b>Assignment of a small project to used additional for the evaluation</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 03:00
16				
17				<b>Examen final</b> EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación sólo prueba final Presencial Duración: 03:00  <b>Examen final</b> EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación continua Presencial Duración: 03:00

Para el cálculo de los valores totales, se estima que por cada crédito ECTS el alumno dedicará dependiendo del plan de estudios, entre 26 y 27 horas de trabajo presencial y no presencial.

\* El cronograma sigue una planificación teórica de la asignatura y puede sufrir modificaciones durante el curso derivadas de la situación creada por la COVID-19.

## 6. Actividades y criterios de evaluación

### 6.1. Actividades de evaluación de la asignatura

#### 6.1.1. Evaluación continua

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
2	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
3	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
5	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
7	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CB7 CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
8	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3

10	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
12	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
13	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CB7 CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3
15	Assignment of a small project to used additional for the evaluation	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	03:00	%	/ 10	CG4 CB7 CB9
17	Examen final	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	03:00	20%	/ 10	CB9 CE1 CG5 CT1 CT4 CT7 CE3

### 6.1.2. Evaluación sólo prueba final

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
17	Examen final	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	03:00	100%	/ 10	CE1 CG5 CB7 CT1 CT4 CT7 CE4 CE3 CB9

### 6.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

No se ha definido la evaluación extraordinaria.

## 6.2. Criterios de evaluación

1. Course in English
2. Applications related to present industrial problems (Horizon 2020 etc)
3. Learning to solve existing problems of chemical engineering with novel methods
4. Learning of state-of-the-art computational techniques
5. Learning to work in an international environment
6. Hierarchical approach to problem solving
7. Multidisciplinary thematic area

## 7. Recursos didácticos

---

### 7.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
P. G. de Gennes, ?Scaling Concepts in Polymer Physics?, Cornell University Press (1979); ISBN: 080141203X.	Bibliografía	Polymer Science
P. J. Flory, ?Principles of Polymer Chemistry?, Cornell University Press (1953); ISBN: 0801401348.	Bibliografía	Polymer Science
F. Bueche, ?Physical Properties of Polymers?, Interscience (1962).	Bibliografía	Polymer Science
M. Rubinstein and R. H. Colby, ?Polymer Physics?, Oxford University Press (2003); ISBN: 019852059X	Bibliografía	Polymer Science

A. Dodos, 'Synthetic Macromolecules: Basic Concepts', Kostarakis (2002); ISBN: 9608278007 (in greek). General	Bibliografía	Polymer Science
F. A. Morrison, 'Understanding Rheology', Oxford University Press (2001); ISBN: 0195141660.	Bibliografía	Polymer Rheology
R. G. Owens and T. N. Phillips, 'Computational Rheology', Imperial College Press (2005); ISBN: 1860941869	Bibliografía	Polymer Rheology
R. Byron Bird, R. C. Armstrong and O. Hassager, 'Dynamics of Polymer Liquids, Vol1: Fluid Mechanics', Wiley (1987); ISBN: 0-471-80245-X	Bibliografía	Polymer Rheology
R. Byron Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong and O. Hassager, 'Dynamics of Polymer Liquids, Vol2: Kinetic Theory', Wiley (1987); ISBN: 978-0471802440	Bibliografía	Polymer Rheology
M. Doi and S. F. Edwards, 'The Theory of Polymer Dynamics', Clarendon Press (1990); ISBN: 0198520336.	Bibliografía	Polymer Dynamics and Rheology
M. Kroger, 'Models for Polymeric and Anisotropic Liquids', Springer (2005); ISBN: 3540262107.	Bibliografía	Polymer Dynamics and Rheology
R. G. Larson, 'Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions', Butterworths (1987); ISBN: 0-409-90119-9	Bibliografía	Polymer Dynamics and Rheology

## 8. Otra información

---

### 8.1. Otra información sobre la asignatura

Idioma principal del curso: **Inglés** / main language of the course: **English**

La asignatura se impartirá de forma presencial. Si las circunstancias requieren se puede convertir en online.