FACULTAD DE INGENIERIA - UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA

Trabajo Final

"Extrusión de espumas termoplásticos. Modelado y verificación Experimental"

Francisco Sacchetti

08/12/2009



RINFI se desarrolla en forma conjunta entre el INTEMA y la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Mar del Plata. Tiene como objetivo recopilar, organizar, gestionar, difundir y preservar documentos digitales en Ingeniería, Ciencia y Tecnología de Materiales y Ciencias Afines. A través del Acceso Abierto, se pretende aumentar la visibilidad y el impacto de los resultados de la investigación, asumiendo las políticas y cumpliendo con los protocolos y estándares internacionales para la interoperabilidad entre repositorios

Esta obra está bajo una <u>Licencia Creative Commons Atribución</u>-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional.

CONTENIDO

1.	I	Introducción		4
2.	ŀ	Armado de la extrusora		8
3.	Ν	Nedic	ión de propiedades reológicas de polímeros	16
	3.1.	Noc	ciones básicas sobre reología de polímeros	16
	3.1	.1.	Propiedades de flujo de los polímeros fundidos	16
3.1.2		.2.	Flujo newtoniano	17
	3.1.3.		Flujo no newtoniano	19
	3.1.4. cizalladu		Modelos empíricos para dependencia de la velocidad de deformac ira	ión por 20
	3.1	.5.	Medida de las propiedades de flujo - Reometría	22
	3.2.	Med	dición experimental de propiedades reológicas	24
4.	5	Simula	ación Numérica de Funcionamiento de Componentes	31
	4.1.	Ecu	aciones Gobernantes	31
	4.1	.1.	La ecuación de continuidad	31
	4.1	.2.	La ecuación de Movimiento	32
	4.1	.3.	La ecuación de Energía	35
	4.2.	Dise	cretizacion de las ecuaciones	39
	4.2	.1.	Generalidades	39
	4.2	.2.	Acoplamiento de los valores de presión con las velocidades	40
	4.2	.3.	Funciones de forma	41
5.	S	Simula	ación numérica de funcionamiento de Mezclador Estático	42
6.	S	Simula	ación de operación de las extrusoras por métodos numéricos	45
	6.1.	Intro	oducción	45
	6.2.	Esq	uema de cálculos	46
	6.2	.1.	Cálculos Simplificados para Líquidos Newtonianos	46
	6.2	.2.	Profundidad de canal variable	51
	6.3.	Cor	nparación con datos Experimentales	51
	6.3	.1.	Calculo teorico	51
	6.3	.2.	Formulación de un Modelo Numérico	52

6.	3.3.	Resultados	54	
7.	Mode	elo Geométrico para 3 vueltas de filete	55	
7.1.	Intr	oducción	55	
7.2.	Mo	delo Numérico	57	
7.3.	Sim	nulación con el acoplamiento de la ecuación de energía	64	
7.4.	Sim	nulación con fluido no newtoniano	65	
8.	Simul	lación de Tornillo Simple de Extrusora	69	
8.1.	Prir	mer estrategia	69	
8.2. Segunda estrategia			72	
8.3.	Sim	nulación del reómetro de plato y plato	74	
9. Análisis de Mecanismo de Funcionamiento de los tornillos construidos pa Producción de Espumas				
9.1.	Intr	oducción	78	
9.2.	Sim	nulación y análisis	79	
9.	2.1.	Simulación numérica	80	
9.	2.2.	Simplificación de zona sólida de material	81	
9.	2.3.	Resultados	82	
10.	Concl	lusiones	89	
11.	Trabajos futuros		91	
12.	Referencias			

1. INTRODUCCIÓN

Muchos artículos de consumo masivo y de alto valor agregado se fabrican con polímeros termoplásticos espumados, que contienen pequeñas celdas llenas de gas que pueden ocupar una importante fracción del volumen total. Las razones para espumar pueden ser reducción de peso y costos de materia prima, incremento de la rigidez por aumento del momento de segundo orden de una placa o una viga, reducción del coeficiente global de transferencia de calor, o más de una de éstas simultáneamente. Ejemplos típicos de espumas de alta densidad (entre 100 y 300 Kg./m3) se encuentran en los cascos de embarcaciones livianas y en diversos sectores de carrocerías e interiores de automóviles y camiones, y en estos casos la reducción de peso y el aumento de la rigidez son los factores más importantes. aunque la reducción de ruidos también es tomada en cuenta. Espumas de termoplásticos de baja densidad (de 30 a 70 Kg./m3) se encuentran como aislantes en cajas de camiones, instalaciones frigoríficas, edificación en general, y como envases para alimentos (recipientes para helados, bandejas para presentación de cortes y porciones de alimentos en supermercados, cajas para artículos frágiles, etc). y el campo de aplicación más importante se encuentra en los electrodomésticos y en la industria automotriz.

Los procesos de espumado más antiguos se llevan a cabo en dos formas básicas, donde el agente de expansión se genera por medio de: a) Una reacción química que produce gases en el seno del polímero en estado líguido, o b) Un solvente que pasa a fase vapor a temperaturas a las cuales el polímero está en estado líquido. La espuma formada debe ser luego enfriada para recuperar el estado sólido. Ejemplo típico del primer caso es el espumado por diazocarbonamidas, usado para espumados de baja y media densidad; para el segundo basta citar la producción de poliestireno expandido por expansión de pentano que se disuelve en el polímero obtenido inmediatamente después del proceso de polimerización en suspensión. Todos estos sistemas de espumado presentan inconvenientes, y los más importantes son: a) Frecuentemente la reacción que genera gas también produce entrecruzamiento del polímero, facilitando el control del proceso por aumento de la viscosidad extensional, pero formando una espuma de polímero que no puede reciclarse; b) El solvente utilizado para la expansión pasa a la atmósfera en su mayor parte; este proceso tiene también el inconveniente que en muchas instancias no pueden procesarse piezas completas, sino que deben ser compactadas por calentamiento de esferas de espuma preformada, y las propiedades mecánicas de estos materiales son excesivamente pobres.

La tecnología de espumado de polímeros termoplásticos por medio de solventes supercríticos está siendo desarrollada y utilizada a nivel mundial.(1-5) En este tipo de procesos, el polímero en estado líquido es mezclado con un solvente en estado supercrítico (típicamente CO2 y mezclas) a presiones y temperaturas convenientes para solubilizar la cantidad de gas necesaria. Las espumas se obtienen por descenso de la presión, que causa separación y expansión de una fase gaseosa desde la solución y forma gran cantidad de celdas de pequeño tamaño (en el orden de tamaño de unos pocos micrones) en una estructura mecánicamente continua. La conjunción de celdas pequeñas y continuidad mecánica dan a estas espumas propiedades mecánicas y aislantes muy superiores, y el material puede siempre reciclarse. Para termoplásticos amorfos, el procesos de disolución vítrea (Tg), y la

posterior separación del solvente es acompañada por un aumento de Tg que permite estabilizar grandes espesores de espuma sin recurrir a entrecruzamiento del polímero. Este principio puede aplicarse tanto a procesos continuos (extrusión) como discontinuos (inyección). Para el caso de termoplásticos semicristalinos, la ventaja operativa que brindan los cambios de Tg no está presente, y sí se manifiestan los inconvenientes de tener que eliminar el calor de cristalización durante el proceso de solidificación de la espuma.

Los principios físicos que gobiernan los procesos de espumado por separación de fases gaseosas a partir de soluciones de fluidos supercríticos en polímeros son bien comprendidos en un nivel básico. Para lograr diseños de procesos útiles y económicos es necesario disponer de mucha información básica e ingenieril, en detalle y en forma cuantitativa. Esta información cuantitativa no se encuentra disponible en la literatura abierta por obvias razones de competencia empresarial, y en nuestro país no se producen espumas por este tipo de tecnologías, que sí disponen compañías norteamericanas y europeas.

Los procesos de expansión que se utilizan para producir materiales termoplásticos expandidos, también llamados espumados, se basan en cuatro pasos básicos:

- I. Producir un fundido del material a expandir e inyectar en el seno del mismo un agente de expansión conveniente, a presión suficiente para permitir la disolución completa del mismo. Para la mayoría de los sistemas a utilizar en este trabajo la presión de disolución supera los 100 bar. La preparación del fundido y la inyección del agente de espumado se efectúan comúnmente en las primeras etapas de una extrusora diseñada para ese propósito.
- II. Producir un mezclado intensivo del termoplástico con el agente de expansión, para obtener una solución homogénea en composición y en temperatura. Debe mantenerse la presión por encima de la presión de equilibrio de la solución. La extrusora a usar debe tener una sección diseñada expresamente para efectuar el mezclado bajo presión, y el sistema debe tener también algún sistema mezclador intensivo. La disolución de agente espumante en el polímero líquido disminuye la temperatura de transición vítrea de éste, disminuyendo también por este motivo la viscosidad final de la solución, y este efecto debe ser tenido también en cuenta en el diseño. El proceso de desorción del agente espumante produce el efecto inverso
- III. Producir un descenso controlado de la presión que actúa sobre la solución de agente espumante, para llevarla a condiciones de inestabilidad. En condiciones de presión por debajo del valor de equilibrio el agente espumante se separa (desorbe) de la solución, y con aditivos adecuados puede producirse la separación en sitios preferenciales distribuidos uniformemente en el seno de la masa de solución, formándose burbujas ó celdas de pequeño tamaño que son expandidas por evolución posterior del agente espumante en estado gaseoso, que continúa transfiriéndose del material que forma las paredes de las celdas hacia el interior de las mismas, aumentando el tamaño de las éstas.
- IV. Al mismo tiempo que se produce el descenso controlado de presión debe comenzarse el proceso de enfriamiento que conducirá a la formación de celdas expandidas con paredes sólidas que constituyen el material expandido final. En esta etapa la viscosidad del termoplástico cambia al bajar la temperatura y

al desorberse el agente espumante, y el material sólido final de las paredes de las celdas será un polímero muy similar al material de partida sin expandir. (1-3)

En muchos sistemas actuales en uso, las etapas descriptas en el punto a) (fusión y compresión) se realizan en una extrusora, que alimenta con líquido a una segunda extrusora encargada de mezclar, enfriar y dosificar. La razón para usar dos máquinas es la falta de capacidad de diseño, y trae aparejadas numerosas desventajas: excesiva inversión en equipamiento, excesivo gasto de energía, necesidad de mantenimiento constante en la máquina que mezcla y enfría, principalmente debido a que recibe líquido a alta temperatura y presión y debe poseer en la parte trasera un sello para alta temperatura y presión que se desgasta rápidamente. El poseer una herramienta de diseño balanceado permitirá el uso de una única extrusora que cumplirá todas esas funciones en el rango de operación deseado. (4-6)

El proceso de expansión de las celdas implica una extensión del material termoplástico líquido que constituye las paredes de las mismas. Durante el enfriamiento se produce un aumento de la viscosidad extensional del termoplástico, provocado por acercamiento a la temperatura de transición vítrea, que finalmente produce un sólido espumado. La viscosidad extensional del termoplástico es la variable más importante a controlar en la etapa de enfriamiento, y depende fuertemente de la temperatura del termoplástico fundido y de la estructura molecular del mismo. Para el caso de polímeros amorfos de alta temperatura de transición vítrea, el cambio de concentración de agente espumante que se produce en esta etapa es aumentado por el aumento de la temperatura de transición vítrea, que es menor para las soluciones, y es normalmente suficiente para aumentar la viscosidad extensional y controlar la estabilidad de la espuma en formación mientras se enfría. Para el caso de polímeros semicristalinos, el cambio de temperatura de transición vítrea influye mucho menos en el aumento de viscosidad extensional, y puede optarse por combinaciones de pesos moleculares ó materiales con estructura molecular que presente ramificaciones largas, que presentan viscosidad extensional mayor, pero también debe evitarse que aumenten exageradamente la viscosidad al corte, controlando la fracción de material con ramificaciones largas.

En este trabajo se estudian la factibilidad de uso y los rangos de valores de parámetros de operación que deben aplicarse para la obtención de espumas de polímeros termoplásticos usando una extrusora de 30 mm. de diámetro, con dos tipos de tornillos con diseños conceptualmente distintos. Para eso se desarrollaron las siguientes actividades:

- I. Armado de la extrusora, con sistemas de reductores de velocidad para accionamiento de: tornillo, bomba de engranajes y bomba para líquidos a alta presión para inyección de agentes de espumado.
- II. Armado y puesta en funcionamiento de sistemas de calefacción, controles de velocidad con variación continua para: giro del tornillo, giro de bomba de engranajes y accionamiento de la bomba de alta presión para líquidos.
- III. Armado y colocación de sistema de mezclador estático y cabezal de conformado para reducción brusca de la presión a la salida de material en proceso.
- IV. Medición de propiedades reológicas de polímeros que se usarán para el proceso de espumado, para aplicar en cálculos por métodos numéricos.
- V. Simulación numérica de funcionamiento de mezclador estático.

- VI. Simulación de operación de la extrusora por métodos numéricos, para calcular perfiles de presión y caudales de líquido en la extrusora en operación.
- VII. Identificación de límites de validez y orígenes de errores y discrepancias en los resultados de las simulaciones por métodos numéricos.
- VIII. Operación de la extrusora en rangos de velocidad dentro de los límites de diseño, para verificar algunas de las predicciones de las simulaciones numéricas.

2. ARMADO DE LA EXTRUSORA

En este capítulo se detallarán las distintas componentes de la extrusora diseñada para procesar espumas a partir de la inyección de un agente de expansión (Imagen 2.1).



Imagen 2.1- Extrusora para procesamiento de espumas termoplásticas.

Todo el sistema está compuesto por:

- ✓ Moto reductor de la extrusora,
- ✓ Tornillo y camisa,
- ✓ Tolva de carga de polímero sólido,
- ✓ Resistencias para calentamiento,
- ✓ Termocuplas,
- Sensores de presión,
- ✓ Moto reductor de bomba de engranajes,
- ✓ Moto reductor de bomba de agente de espumado,
- ✓ Boquilla de salida para espuma,
- ✓ Mezclador estático,
- ✓ Sistema electrónico de adquisición de datos y controles para temperatura y presiones de líquido en dos puntos seleccionados. El tablero también contiene sistemas para variación independiente de las velocidades de los tres motores eléctricos.
- ✓ Recipiente de alta presión para disolución de CO₂ en isopropanol,

✓ Tablero de válvulas y manómetro para control de inyección.

Esta extrusora utiliza un motor trifásico de 5 KW y 1450 rpm. Su función es brindar el par que impulsa al tornillo. Para modificar el número de revoluciones entregado, se utiliza un reductor de velocidad de 1/20 En la Imagen 2.2 se presentan ambos componentes unidos por 2 correas de transmisión con sus poleas 1/1.



Imagen 2.2 – A. Reductor, B. Motor, C. Correas.

A continuación del motor, se encuentra la tolva de carga construida en acero inoxidable y el conjunto camisa – tornillo (Imagen 2.3). Los tornillos tienen diseños especiales para este tipo de proceso, y su geometría será detallada más adelante.



Imagen 2.3 – A. Tolva, B. Conjunto camisa y tornillo.

La extrusora tiene instalados 3 conjuntos de resistencias calefactoras para la camisa, como se muestra en la Imagen 2.4. La temperatura de cada uno de estos conjuntos es controlado en base a la lectura de temperatura con una termocupla aislada eléctricamente.



Imagen 2.4 – A. Resistencias, B. Termocuplas.

A aproximadamente 600 mm del comienzo del tornillo se encuentra el punto de inyección del agente de expansión disuelto en isopropanol (Imagen 2.5), que incluye una válvula de no retorno diseñada y construida en acero inoxidable.



Imagen 2.5 – A. Válvula de no retorno para la inyección del agente de expansión.

Como agente de expansión se utilizó CO₂, que se almacena en el tubo para alta presión que se muestra en la Imagen 2.6. El CO₂, luego de salir del tubo a alta presión, se disuelve en el isopropanol. La mezcla CO₂ + alcohol se deja reposar dentro de un recipiente de alta presión (Imagen 2.7) alrededor de 8 horas, para que la concentración del CO₂ en el isopropanol llegue al equilibrio.



Imagen 2.6 – Tubo de CO₂.



Imagen 2.7 - Recipiente de alta presión.

El sistema de control de inyección para agente de expansión (Imágenes 2.8 y 2.9) está compuesto por la bomba de desplazamiento positivo y un tablero que

contiene una válvula de entrada, una de salida, un manómetro, una válvula para venteo y un amortiguador para las oscilaciones de presión causadas por la bomba alternativa de un pistón. Una vez que la mezcla se encuentra en equilibrio debe ser bombeada desde el recipiente de alta presión hasta la extrusora, por medio de la bomba de desplazamiento positivo. Para impulsar la bomba se utiliza un moto - reductor de 0,37 KW y reducción de 1/20 como se observa en la Imagen 2.8. La bomba fue diseñada y construida siguiendo el patrón de una bomba de cromatografía, y ha funcionado bien a presiones de hasta 300 Bar



Imagen 2.8 - A. Válvula para venteo, B. Moto-reductor, C. Amortiguador de Presión.



Imagen 2.9 – Sistema de control de inyección del agente de expansión.

Una vez que el polímero se encuentra fundido y el agente de expansión ya se ha inyectado, se produce el mezclado de ambos por medio del giro del tornillo, y además mediante el mezclador estático.

A continuación del tornillo se encuentra la bomba de engranajes, que permite garantizar un caudal constante a partir de ese punto, a presiones de funcionamiento de hasta al menos 400 Bar. Esto es necesario debido que el proceso de mezclado por mezclador estático enfriado es intrínsecamente inestable. Esta bomba es impulsada por un moto-reductor de 0,37 KW y reducción de velocidad de 1/49 que se encuentra conectado a la bomba de engranajes mediante un acople de goma (Imagen 2.10).

La bomba está calefaccionada con resistencias y posee un control de temperatura independiente con lectura de temperatura de una termocupla. También se realiza una medición de presión antes de que el fluido ingrese a la bomba de engranajes (Imagen 2.10), que servirá para controlar la velocidad de rotación del motor que impulsa al tornillo de la extrusora.



Imagen 2.10 – A. Acople, B. Bomba de engranajes, C. Posición del sensor de presión.

En la zona final de la extrusora se encuentra un mezclador estático seguido de la boquilla de salida. Las dos piezas poseen una sola termocupla para controlar su temperatura, y ambas están calefaccionadas con resistencias. En el cabezal se encuentra un sensor de presión (Imagen 2.11).



Imagen 2.11 – A. Boquilla, B. Mezclador estático, C. Bomba de engranajes, D. Posición del sensor de presión, E y F. Termocuplas para control.

El control de todos los sistemas eléctricos se realiza por medio de una PC conectada a un tablero de control mediante una placa de comunicación. Dentro del tablero de control se encuentran los variadores de frecuencia de los 3 motores, y los contactores de estado sólido (SSR) para controlar la potencia entregada a las resistencias (Imágenes 2.12 y 2.13).



Imagen 2.12 – A. Variadores de frecuencia, B. Relé de estado sólido.



Imagen 2.13 – A. Entrada señal de presión, B. Entrada señales Termocuplas, C. Cable de comunicación con la PC.

3. MEDICIÓN DE PROPIEDADES REOLÓGICAS DE POLÍMEROS

3.1. NOCIONES BÁSICAS SOBRE REOLOGÍA DE POLÍMEROS

Los procesos de transformación de los materiales termoplásticos, tales como: inyección, extrusión, soplado, conformado en caliente, etc., implican el reblandecimiento o fusión del material, su flujo en estado fundido hasta adquirir la forma deseada y, finalmente, su enfriamiento y consolidación. El conocimiento de las variables y de las leyes que regulan el flujo de los materiales termoplásticos permite actuar de la manera más adecuada en la determinación de los parámetros que controlan los procesos de transformación y en la obtención de una calidad superior de las piezas producidas.

El comportamiento de los materiales termoplásticos estudiados es muy distinto del que ofrecen los líquidos newtonianos que estudia la Mecánica de Fluidos. La principal diferencia entre un polímero fundido y un líquido newtoniano radica en que los primeros mantienen un grado de elasticidad, al mismo tiempo que se deforman fluyendo con una determinada viscosidad, que depende no sólo de la temperatura, sino también de la propia velocidad de deformación. Por el contrario, en los líquidos newtonianos la viscosidad es una característica del material, que sólo depende de la temperatura.

El comportamiento de los materiales plásticos corresponde al modelo viscosoelástico (viscoelástico), presentando un mayor carácter elástico a bajas temperaturas (aspecto consistente) y mayor carácter viscoso (aspecto fluido) a altas temperaturas.

3.1.1. PROPIEDADES DE FLUJO DE LOS POLÍMEROS FUNDIDOS.

El comportamiento de los polímeros en el estado fundido está controlado por las siguientes propiedades:

(i)- Baja densidad ($\rho \le 10^3 \text{ kg/m}^3$),

(ii)- Baja conductividad térmica (k = 0.1 W/m.K),

(iii)- Altas viscosidades ($\eta = 10^2 - 10^4$ Pa.seg). (Recordar que la viscosidad del agua a temperatura ambiente es de 10^{-3} Pa·seg),

(iv)- Baja difusividad térmica $\alpha = k/\rho C_n$ (Valor de bibliografía 10⁻⁷ m²/s),

(v)- Propiedades de flujo no newtoniano, esto es, la viscosidad varia con la temperatura y con la velocidad de deformación.

Recordando la definición del número adimensional de Reynolds:

$$R_e = \frac{\rho L u}{\eta} \tag{3.1}$$

Las propiedades (i) y (iii) dan como resultado bajos valores de dicho número (< 1.0), y por tanto el flujo será de tipo laminar en muchas aplicaciones. Aunque esto puede simplificar el análisis, la característica (v) añade complejidad al problema.

3.1.2. FLUJO NEWTONIANO.

Las deformaciones que se originan en los sólidos poco consistentes, amorfos o cristalinos, y en los líquidos (a temperaturas adecuadas) bajo la acción de esfuerzos exteriores, están asociadas a un mecanismo de flujo del material dependiente del tiempo. La propiedad característica que determina el flujo de cualquier fluido es su viscosidad, que es una propiedad típica de los fluidos no ideales.

Entre las moléculas de un fluido existen fuerzas moleculares denominadas fuerzas de cohesión. Al desplazarse las moléculas o láminas contiguas del fluido con relación a otras (las láminas se mueven relativamente entre sí siguiendo un gradiente de velocidades), se produce rozamiento interno o fricción. Por otra parte, entre las moléculas de un fluido en contacto con un sólido y las moléculas del sólido, existen fuerzas moleculares que se denominan fuerzas de adherencia. El coeficiente de rozamiento interno del fluido se denomina coeficiente de viscosidad o simplemente viscosidad y se designa con la letra griega η .

El estudio de la viscosidad se realiza basándose en la ley de Newton. Se define entonces una capa horizontal de fluido newtoniano de espesor Y_o , comprendida entre dos placas planas paralelas, lo suficientemente extensas como para poder despreciar los efectos de borde. Además, se supone que la placa inferior es fija y que la superior es libre, y que sobre ésta actúa una fuerza tangencial constante F en correspondencia con cierta superficie A de la placa móvil (se aplica un esfuerzo cortante τ sobre el plano A). La placa superior se desplaza paralelamente a la inferior con una velocidad V_0 (Figura 3.1).



Figura 3.1. El perfil de velocidades que describe un flujo laminar para un fluido newtoniano.

Por otro lado, se divide la capa de fluido de espesor *Yo* (ver Figura 3.1) en capas infinitesimales, paralelas a las placas y con un espesor *dy*. Debido a las fuerzas de adherencia, la capa infinitesimal de fluido en contacto con la placa inferior se mantiene en reposo, mientras que la que está en contacto con la placa superior móvil adquiriere la misma velocidad *Vo* de la placa. Las capas infinitesimales intermedias de fluido deslizarán unas sobre otras, arrastradas por el movimiento de la placa móvil. Como la velocidad de las partículas de líquido en las sucesivas capas es función de la distancia Y que las separa del plano fijo B, aparecerá un gradiente de velocidad dV/dy.

La ley experimental que rige este fenómeno, enunciada por Newton, propone que la fuerza F es proporcional a la superficie A de la placa en movimiento, al gradiente de velocidades dv/dy generado, y a un coeficiente η que se denomina viscosidad absoluta o dinámica, es decir:

$$F = \eta A \frac{dv}{dy}$$
(3.2)

O bien, en términos del esfuerzo de corte τ :

$$\tau = \frac{F}{A} = \eta \frac{dv}{dy} = \eta \dot{\gamma}$$
(3.3)

La viscosidad es la constante de proporcionalidad y se define como la razón entre el esfuerzo cortante aplicado y el gradiente de velocidad inducido en el líquido. Es una medida de la fricción interna del líquido o resistencia a fluir.

En la Figura 3.2 se representa el diagrama de tensión de corte (τ) vs. velocidad de deformación de corte por cizalladura ($\dot{\gamma}$). La pendiente de dicho diagrama representa la viscosidad.



Figura 3-2 .Diagrama au - $\dot{\gamma}$ para un fluido newtoniano

La variable que ejerce un mayor efecto sobre la viscosidad es la temperatura. La dependencia sigue la forma de una ley exponencial del tipo Arrhenius (Ecuación 3.4).

$$\eta = \tau_0 e^{\frac{Q}{RT}}$$
(3.4)

Donde τ_0 es una constante del fluido, *R* es la constante universal de los gases, *Q* es la energía de activación, y *T* es la temperatura absoluta. De ella se deduce que al aumentar la temperatura la viscosidad disminuye.

En la Figura 3.3 se muestra el efecto de la temperatura sobre la viscosidad de algunos polímeros.



Figura 3-3. Efecto de la temperatura sobre la viscosidad de los polímeros.

3.1.3. FLUJO NO NEWTONIANO.

No todos los fluidos se comportan de la forma descripta en la sección anterior. Muchas suspensiones, particularmente las concentradas, así como soluciones de polímeros y otros materiales moleculares complejos son, usualmente, no newtonianas. La viscosidad de estos materiales (a una determinada temperatura) no es constante como en los fluidos newtonianos, sino que es función del esfuerzo de corte (τ), de la velocidad de deformación cortante ($\dot{\gamma}$) y/o del tiempo. Por lo tanto, la representación gráfica $\tau - \dot{\gamma}$ deja de ser una recta para transformarse en una curva. Se puede definir una viscosidad aparente para un determinado valor de la velocidad de deformación (o tensión), como la pendiente de la secante a la curva que pasa por el origen y por el punto definido por los valores de las variables anteriores.

En la figura 3.4 se representan varias curvas de viscosidad (independiente del tiempo) para fluidos no newtonianos.

La curva 1 representa el comportamiento de un plástico de *Bingham*, el cual comienza a fluir a partir de un cierto valor umbral de esfuerzo cortante (esfuerzo de fluencia).



Figura 3-4. Tipos de flujo no-newtonianos

La curva 2 ilustra el tipo de flujo dilatante ("shear thickening"), en el que la viscosidad de los materiales aumenta cuando lo hacen el esfuerzo cortante (τ) o la velocidad de deformación cortante ($\dot{\gamma}$). Este tipo de flujo es menos frecuente que el pseudoplástico.

La curva 3 ilustra el tipo de flujo pseudoplástico ("*shear thinning*"), y muestra que la viscosidad de los materiales disminuye cuando el esfuerzo cortante (τ), o la velocidad de deformación cortante ($\dot{\gamma}$), aumentan. Para esfuerzos cortantes muy pequeños la viscosidad es máxima y se denomina viscosidad inicial.

Las moléculas poliméricas forman largas cadenas, formando estructuras complicadas. Este enrollamiento existe aún cuando se funden y, en gran parte, es el origen de la componente elástica en el comportamiento que tienen ante un esfuerzo. Sin embargo, cuanto mayor es el esfuerzo de corte en el material, mayor es la facilidad de las cadenas para deslizarse una sobre otra, por lo que disminuye la viscosidad.

3.1.4. MODELOS EMPÍRICOS PARA DEPENDENCIA DE LA VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN POR CIZALLADURA.

Los intentos con más éxito de descripción del comportamiento Esfuerzo cortante-Velocidad de deformación (estacionaria), de fluidos no newtonianos han sido fundamentalmente empíricos. Sería más satisfactorio si se pudiesen derivar ecuaciones a partir de teorías basadas en la estructura molecular, pero actualmente dichas teorías están muy simplificadas y son inadecuadas para describir el comportamiento real. De aquí que, en la actualidad, las observaciones empíricas representan la fuente más fiable de información reológica.

En la práctica, se encuentra que la mayoría de los polímeros se pueden modelar adecuadamente dentro de un intervalo útil de velocidades de corte mediante una expresión de tipo ley de la potencia o de Ostwald (modelo de dos parámetros), que viene dada por:

$$\tau = C(\dot{\gamma})^n \tag{3.5}$$

donde :

n = Exponente de la ley potencial, que da una idea del grado de desviación del fluido con respecto a uno newtoniano. Es una constante empírica denominada índice del comportamiento del flujo.

C =Índice de consistencia.

* Para n = 1, el modelo representa el comportamiento newtoniano, donde $C = \eta$.

* Para n > 1, el modelo sigue un comportamiento dilatante.

* Para n < 1, el modelo sigue un comportamiento de tipo pseudoplástico.

Este modelo es el más ampliamente utilizado debido a que es relativamente fácil de incorporar en soluciones analíticas para problemas de flujo. El índice de consistencia C es una medida de la viscosidad newtoniana a bajas velocidades de deformación por cizalla.

A pequeñas velocidades de deformación la viscosidad se mantiene prácticamente constante (viscosidad newtoniana). A partir de un cierto valor, la viscosidad disminuye constantemente (viscosidad estructural). A las velocidades de deformación que trabajan generalmente las máquinas de procesamiento de termoplásticos (de 10¹ a 10⁴ seg-1), las viscosidades estructurales son unas 100 veces inferiores a las newtonianas.

Es normal presentar los datos de flujo en términos de la relación entre la viscosidad aparente y la velocidad de deformación por corte como se indica a continuación:

$$\eta_a = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} = C(\dot{\gamma})^{n-1}$$
 (3.6)

La aproximación de una pequeña región de la curva de flujo por una línea recta es razonable dentro de un intervalo correspondiente a una década de variación de la tensión cortante o de la velocidad de deformación por corte. Esto, usualmente, es suficiente para los cálculos a realizar dentro del rango de operación de una máquina particular y para un determinado material.

La ecuación 3.7 es divergente cuando $\dot{\gamma} \rightarrow 0$. Por lo tanto, para valores pequeños de $\dot{\gamma}$ es más conveniente utilizar una expresión del tipo:

$$\eta_a = \eta_0 \left[1 + (\tau \dot{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2}$$
 (3.7)

En la cual:

- Si
$$(\tau \dot{\gamma}) << 1 \Longrightarrow \eta = \eta_0$$

- Si $(\tau \dot{\gamma}) >> 1 \Longrightarrow \log(\eta) = (n-1)\log(\tau \dot{\gamma})$

La construcción de la aproximación de la ley potencial a partir de los datos de flujo se muestra en la Figura 3.5. Se puede observar que los valores de C y n para un

determinado material, dependen de la magnitud del rango de velocidades de deformación de interés para un determinado proceso.



Figura 3-5 Construcción de aproximaciones a la ley potencial.

3.1.5. MEDIDA DE LAS PROPIEDADES DE FLUJO - REOMETRÍA.

Los datos de flujo que suministran los productores de materiales se obtienen en por medio de reómetros. En ellos se somete al material a esfuerzos de corte que se relacionan con la velocidad de deformación. Dos de los tipos de reómetros más utilizados en la práctica son:

(i).- *Reómetros de flujo de arrastre*: incluyen los de tipo de platos paralelos, de cono y plato, y de dos cilindros concéntricos, que sólo pueden operar hasta un máximo de velocidad de corte de 10 s⁻¹.

(ii).- *Reómetros de flujo por presión*: incluyen al de capilaridad, que está basado en el flujo laminar a lo largo de un conducto de pequeño diámetro. Operan en un rango de velocidades de corte que van desde 0.1 hasta 10⁵ s⁻¹, que son más representativas de las condiciones de procesado.

REÓMETROS DE CONO Y PLATO.

Este dispositivo está constituido por un disco y un cono de ángulo en el vértice, muy próximo a un ángulo de 180 °. La superficie cónica gira alrededor del eje perpendicular que pasa por su centro, mientras que el plato permanece estático. El polímero a analizar se coloca entre el plato y el cono, que como muestra la Figura 3.6. El cono se baja hasta que su vértice contacta con el plato, y como el ángulo entre ambos es de 5 ° o menor, la tensión cortante puede suponerse uniforme a través del flujo.

Cuando un líquido cualquiera se coloca entre el cono y el plato y se hace girar uno de ellos respecto del otro, con una velocidad Ω , aparece un *par de arrastre* T. Con estos dos valores es posible obtener el reograma correspondientes al líquido en cuestión.



Figura 3.6- Viscosímetro de cono y plato.

La tensión de corte puede relacionarse con el par de arrastre del siguiente modo:

Área de la corona circular = $2\pi \cdot r \cdot dr$

Fuerza = $2\pi \cdot r \cdot dr \cdot \tau$

Par de arrastre = $2\pi \cdot r^2 \cdot dr \cdot \tau$

Integrando entre 0 y R se puede determinar el par de arrastre total.

Par de arrastre total:
$$T = 2\pi \int_{0}^{R} r^{2} \cdot \tau \cdot dr$$
 (3.8)

Analizando nuevamente la Figura 3.6 se tiene que:

Punto P: $V_p = r\Omega$ velocidad tangencial

Punto P': $V_{p'} = 0$ velocidad tangencial

Distancia de P a P': $pp' = r \sin \Psi_0 \cong r \Psi_0$

Luego el gradiente de velocidad:

$$\frac{dv}{dz} = \frac{dr\Omega}{dr\Psi} = \frac{\Omega dr}{\Psi dr} = \frac{\Omega}{\Psi} = Cte$$
 (Para una velocidad de rotación dada)

Luego, el gradiente de velocidad es independiente de la posición radial. Esta es la característica fundamental de este tipo de reómetro o viscosímetro.

Como se tiene que $\tau = \eta \frac{dv}{dz}$ se deduce que si $\frac{dv}{dz} = Cte$ entonces, $\tau = Cte$, y como $\tau = \eta \frac{d\gamma}{dt} = \eta \dot{\gamma}$ también lo es la velocidad de deformación.

Puesto que la viscosidad es la relación entre la tensión cortante y la velocidad de deformación por corte, se tiene:

$$\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} = \frac{3T\Psi}{2\pi R^3 \Omega}$$
(3.9)

La desventaja de este tipo de viscosímetro es que su campo de trabajo está limitado a velocidades de deformación en el intervalo de 1 a 10 s⁻¹, mientras que las máquinas de procesado de plásticos suelen trabajar con velocidades de deformación mayor.

3.2. MEDICIÓN EXPERIMENTAL DE PROPIEDADES REOLÓGICAS.

Con el fin de obtener valores para la etapa de simulación del proceso de espumado, se determinaron las propiedades reológicas del PS xxxxxx a 180 °C. La medición de viscosidad del polímero se realizó por dos métodos diferentes, cubriendo de este modo un mayor rango de velocidades de deformación. Para bajas velocidades de deformación se utilizó un reómetro rotacional y oscilatorio en geometría de platos paralelos como el que se presenta en la Figura 3.7. La principal ventaja del reómetro es su mayor precisión en las mediciones y, un mejor control de temperatura durante el ensayo. En la Figura 3.8 se presenta la curva de viscosidad en función de la velocidad de corte, obtenida por este método.



Figura 3.7 – Reómetro de platos paralelos.



Figura 3.8 – Viscosidad Vs. Velocidad de deformación

Las mediciones a mayores velocidades de deformación se realizaron con el método de reometría capilar por extrusión, siguiendo el procedimiento de la norma **ASTM D 5422 – 03.** Se utilizó una extrusora MOROZ modelo E22/24D y tres boquillas

con distinta relación L/D (Tabla 3.1). Para poder aplicar este método es necesario realizar dos correcciones. En primer lugar, deben corregirse los efectos de consumo de energía del líquido en la entrada y salida de la boquilla utilizando el esquema de corrección de Bagley. La segunda corrección que debe tenerse en cuenta es la compensación del comportamiento no newtoniano del polímero, en este caso se utiliza la corrección de Rabinowitsch.

Para cada boquilla se midieron valores de presión aguas arriba de la entrada al capilar cilíndrico y, además, se calculó el caudal volumétrico a partir de la medición del caudal másico. Los valores experimentales se presentan en el gráfico de la Figura 3.9.

Boquilla	Ángulo de entrada	Ltotal(mm)	Lcono(mm)	Lcapilar(mm)	Dcapilar(mm)	L/D
1	45 °	40,60	5,20	35,40	1,75	20,23
2	45 °	79,86	5,60	74,26	1,75	42,43
3	45 °	148,64	5,98	142,66	1,75	81,52

Tabla 3.1



Figura 3.9 – Presión vs. Caudal volumétrico.

A partir de los valores del gráfico de la Figura 3.9 se seleccionaron cuatro caudales volumétricos y se obtuvieron los correspondientes valores de presión para cada relación L/D (Figura 3.10), para construir el gráfico par corrección de efectos de extremos (Tabla 3.2).



Figura 3.10 - Curvas de Bagley

	L/D=20,23	L/D=42,43	L/D=81,52
Q vol (mm3/seg)	Pexp media (Pa)	Pexp media (Pa)	Pexp media (Pa)
70	7.675.513	11.360.125	21.220.350
120	9.302.928	13.984.600	27.349.600
200	11.343.840	17.334.600	33.963.600
250	12.267.565	18.897.625	36.101.850

Tabla	3.2
-------	-----

El ζ corregido y el γ aparente se calcularon mediante las siguientes ecuaciones:

En donde E es el factor de corrección de Bagley, que se obtiene a partir del gráfico de Pexperimental versus L/D para los 4 caudales.

Luego, se obtuvo el parámetro de sensibilidad al corte *n* (corrección de Rabinowitsch) a partir de la pendiente del gráfico Log ζ corr vs. Log γ ap (figura 3.11). El valor obtenido fue **n** = **0,55**.



Figura 3.11 - Log ζcorr vs. Log γap

Una vez obtenido el valor de *n*, se corrigió la velocidad de corte mediante la siguiente ecuación:

$$\gamma_{corr} = \frac{(3 \cdot n + 1)}{4 \cdot n} \cdot \gamma_{aparente}$$

Finalmente se calculó la viscosidad como el cociente entre ζ corregido y γ corregido (Figura 3.12).



Figura 3.12 - Viscosidad vs. Velocidad de deformación.

La velocidad de corte de la extrusora que se intenta modelar varía aproximadamente entre 20 y 70 (1/s). Por el método de reometría de platos paralelos la máxima velocidad de deformación que se puede alcanzar es menor a 10 1/s, mientras que por el método de reometría capilar el mínimo es aproximadamente 70 (Figura 3.13). Por lo tanto, para poder extrapolar valores fue necesario reagrupar los datos de ambas mediciones y ajustarlos a la mejor curva que los contenga (Figura 3.14).

La recta obtenida es:

 $\log \eta = -0.7318 \cdot \log \gamma + 3.1304$

Donde η está dado en Pa.seg, y $\dot{\gamma}$ está en 1/seg

$$\eta = C \gamma^{n-1}$$

Como:

Luego, los valores para los parámetros de la ley de la potencia obtenidos son:



Figura 3.13 - viscosidad vs. Velocidad de deformación



Figura 3.14 – Log de la viscosidad vs. Logaritmo de la velocidad de deformación.

4.1. ECUACIONES GOBERNANTES

4.1.1. LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

Esta ecuación se deduce aplicando un balance de materia a un elemento estacionario de volumen $\Delta x \Delta z \Delta y$, a través del cual esta circulando el fluido. Es decir:



Si consideramos el par de caras perpendicular al eje x. La velocidad de entrada de materia a través de la cara en x es $(\rho v_x)|_x \Delta y \Delta z$ y la velocidad de salida de matera a través de la cara en x+ Δx es $(\rho v_{x+\Delta x})|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z$. Para los otros dos pares de caras se puede escribir expresiones análogas. La acumulación de materia en el elemento de volumen puede ser expresado como $(\Delta x \Delta y \Delta z) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)$. El balance de materia queda por lo tanto.

$$(\Delta x \Delta y \Delta z) \begin{pmatrix} \partial \rho \\ \partial t \end{pmatrix} = (\rho \upsilon_x) |_x \Delta y \Delta z - (\rho \upsilon_{x+\Delta x}) |_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z + (\rho \upsilon_y) |_y \Delta x \Delta z - (\rho \upsilon_{y+\Delta y}) |_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z + (\rho \upsilon_z) |_z \Delta x \Delta y - (\rho \upsilon_{z+\Delta z}) |_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y$$

Divido por $\Delta x \Delta z \Delta y$. Y tomo limites cuando estas dimensiones tienden a cero.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\rho \upsilon_x + \frac{\partial}{\partial y}\rho \upsilon_y + \frac{\partial}{\partial z}\rho \upsilon_z\right)$$

Esta ecuación de continuidad describe la variación de la densidad para un punto fijo, como consecuencia del vector de velocidad masica ρv . La ecuación en forma contraída puede ser escrita:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \rho \upsilon)$$

Esta ecuación establece simplemente que la velocidad con que aumenta la densidad en el interior de un pequeño elemento de volumen en el espacio, es igual a la velocidad neta entrante de densidad de flujo de materia en el elemento dividida por su volumen.

Podemos modificar la ecuación anterior reuniendo todas las derivadas de ρ en el primer miembro y así obtener la derivada material de la densidad, es decir, la derivada con respecto al tiempo para un recorrido que sigue el movimiento del fluido.

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \upsilon)$$

Una forma espacial muy importante de la ecuación de continuidad, que se utilizara en el modelado del problema, es la correspondiente a un fluido de densidad constante, en donde la ecuación nos queda:

$$(\nabla \upsilon) = 0$$

Aunque en realidad ningún fluido es totalmente incompresible, en la práctica puede admitir con mucha frecuencia que la densidad es constante, con lo que se obtiene una considerable simplificación sin cometer casi error. Para que esto sea cierto solo es necesario que la densidad permanezca constante para un elemento de fluido que se mueve a lo largo de una línea de corriente.

4.1.2. LA ECUACIÓN DE MOVIMIENTO

Para un elemento de volumen $\Delta x \Delta z \Delta y$, se puede escribir el siguiente balance de cantidad de movimiento:



Es preciso resaltar que la ecuación es la de un vector, con componentes en cada una de las tres direcciones coordenadas. Para mayor sencillez, comenzaremos

considerando el componente x de cada uno de los términos de la ecuación los componente y y z se pueden obtener por analogía.

Vamos a considerar en primer lugar las velocidades de flujo del componente x de la cantidad de movimiento que entra y sale del elemento de volumen. Esto ocurre en virtud de dos mecanismos: por convección (debido al flujo global del fluido) y por trasporte molecular (a causa de los gradientes de velocidad).

La velocidad con la que entra por convención el componente x de cantidad de movimiento para la cara situada en x es $\rho v_x v_x |_x \Delta y \Delta z$, y la velocidad en la que sale por x + Δx es $\rho v_x v_x |_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z$. La velocidad con la que entra por y es $\rho v_x v_x |_y \Delta x \Delta z$, para las demás caras se pueden escribir expresiones similares. Considerando el flujo conectivo de cantidad de movimiento x a través de las 6 caras, y que el flujo conectivo neto, de cantidad de movimiento x, en el elemento de volumen, es:

$$\Delta y \Delta z (\rho \upsilon_x \upsilon_x \big|_x - \rho \upsilon_x \upsilon_x \big|_{x+\Delta x}) + \Delta x \Delta z (\rho \upsilon_y \upsilon_x \big|_y - \rho \upsilon_y \upsilon_x \big|_{y+\Delta y}) + \Delta x \Delta y (\rho \upsilon_z \upsilon_x \big|_z - \rho \upsilon_z \upsilon_x \big|_{z+\Delta z})$$

De igual forma, la velocidad con la que el componente x de cantidad de movimiento entra por trasporte molecular por la cara situada en x es $\tau_{xx}|_x \Delta y \Delta z$, para las otras 5 caras obtenemos expresiones similares. Sumando las seis contribuciones, se obtiene:

$$\Delta y \Delta z (\tau_{xx}|_{x} - \tau_{xx}|_{x+\Delta x}) + \Delta x \Delta z (\tau_{yx}|_{y} - \tau_{yx}|_{y+\Delta y}) + \Delta x \Delta y (\tau_{zx}|_{z} - \tau_{zx}|_{z+\Delta z})$$

Estas densidades de flujo de cantidad de movimiento pueden considerarse como esfuerzos. Por lo tanto τ_{xx} es el esfuerzo normal que actúa sobre la cara x y τ_{yx} es el esfuerzo tangencial que actúa sobre la cara y en la dirección x, que resulta como consecuencia de las fuerzas viscosas.

En la mayor parte de los casos, las únicas fuerzas importantes serán las procedentes de la presión del fluido P y las fuerzas gravitatorias por unidad de masa g. La resultante de estas fuerzas en la dirección x será:

$$\Delta y \Delta z (P|_{x} - P|_{x+\Delta x}) + \rho g_{x} \Delta x \Delta y \Delta z$$

Finalmente la velocidad de acumulación de cantidad de movimiento x en el elemento es $\Delta x \Delta y \Delta z \left(\frac{\partial \rho v_x}{\partial t} \right)$. Substituyendo las expresiones anteriores en el balance de

cantidad de movimiento. Dividiendo todas las expresiones por $\Delta x \Delta z \Delta y$ y tomando el límite cuando Δx , Δz y Δy tiende a cero. Se obtiene el componente en dirección x de la ecuación de cantidad de movimiento.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\upsilon_{x} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\rho\upsilon_{x}\upsilon_{x} + \frac{\partial}{\partial y}\rho\upsilon_{y}\upsilon_{x} + \frac{\partial}{\partial z}\rho\upsilon_{z}\upsilon_{x}\right) - \\ -\left(\frac{\partial}{\partial x}\tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial y}\tau_{yx} + \frac{\partial}{\partial z}\tau_{zx}\right) - \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_{x}$$

Las componentes en las direcciones y y z, se pueden obtener de forma análoga.

Es conveniente combinar las componentes en las tres direcciones, con el fin de obtener la sencilla ecuación vectorial:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\upsilon = -\left[\nabla \cdot \rho\upsilon\upsilon\right] - \nabla\rho - \left[\nabla \cdot \tau\right] + \rho g$$

Esta ecuación puede reordenarse con ayuda de la ecuación de continuidad para obtener la ecuación vectorial.

$$\rho \frac{D\upsilon}{Dt} = -\nabla P - \left[\nabla \cdot \tau\right] + \rho g$$

La ecuación de movimiento, expresada en esta forma, establece que un pequeño elemento de volumen que se mueve con el fluido es acelerado por las fuerzas que actúan sobre el.

Rara vez se utiliza esta ecuación en su forma completa para el planteo de problema de fluidos, sino que generalmente resulta más conveniente emplear formas restringidas de las mismas.

Despreciando las fuerzas inerciales y de volumen, las ecuaciones de equilibrio en un volumen de material se pueden escribir de la siguiente manera (Zienkiewicz y Taylor, 1991):

$$\nabla \cdot \tau = 0$$

4.1.3. LA ECUACIÓN DE ENERGÍA

Partiendo de un elemento estacionario de volumen a través del cual fluye un líquido puro, se escribe la siguiente ley de conservación de energía para el fluido contenido en el interior de este elemento de volumen en un determinado instante:



Este es el primer principio de la termodinámica expresado para un sistema abierto no estacionario. En realidad esta expresión del primer principio no es completa puesto que no se incluyen otras formas de energía y transporte de energía, tales como nuclear, radiactiva o electromagnetismo entre otras.

La velocidad de acumulación de energía cinética e interna en el interior de un volumen $\Delta x \Delta z \Delta y$ es:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \hat{U} + \frac{1}{2} \rho \upsilon^2 \right)$$

Donde \hat{U} es la energía interna por unidad de masa de fluido contenido en el elemento y v la velocidad local del fluido.

Para simplificar el análisis solo consideráremos las caras perpendiculares al aje x, por analogía se pueden expresar las otras 4 caras restantes.

La velocidad neta de entrada de energía interna y cinética en el elemento por convención es:

$$\Delta y \Delta z \left\{ \upsilon_x \left(\rho \hat{U} + \frac{1}{2} \rho \upsilon^2 \right) \right|_x - \upsilon_x \left(\rho \hat{U} + \frac{1}{2} \rho \upsilon^2 \right) \right|_{x + \Delta x} \right\}$$

La velocidad neta de entrada de energía por conducción es:

$$\Delta y \Delta z \left\{ q_x \big|_x - q_x \big|_{x + \Delta x} \right\}$$
Siendo qx, el vector de densidad de flujo de calor en dirección x.

El trabajo realizado por el elemento de fluido contra los alrededores conta de dos partes: el trabajo contra las fuerzas de volumen y el trabajo contra las fuerzas de superficie.

La velocidad de producción de trabajo contra la presión estática de p es

$$\Delta y \Delta z \left\{ \left(P \upsilon_x \right)_{x + \Delta x} - \left(P \upsilon_x \right)_x \right\}$$

Análogamente la producción de trabajo contra fuerzas viscosas es

$$\Delta y \Delta z \left\{ \left(\tau_{xx} \upsilon_{x} \right) + \left(\tau_{yx} \upsilon_{x} \right) + \left(\tau_{zx} \upsilon_{x} \right) \right\}_{x + \Delta x} - \left(\tau_{xx} \upsilon_{x} \right) + \left(\tau_{yx} \upsilon_{x} \right) + \left(\tau_{zx} \upsilon_{x} \right) \right\}_{x}$$

Substituyendo ahora las expresiones anteriores en el balance de energía y dividiendo toda la ecuación por $\Delta x \Delta z \Delta y$. Tomando el limite cunado Δx , Δz y Δy tiende a cero. Y estresando en forma compacta empleando notación vectorial tensorial obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\hat{U} + \frac{1}{2}\upsilon^2) = -\nabla \cdot \rho \upsilon \left(\hat{U} + \frac{1}{2}\upsilon^2\right) - (\nabla \cdot q) - (\nabla \cdot p\upsilon) - \left(\nabla \cdot [\tau \cdot \upsilon]\right)$$

Es conveniente ahora reordenar la ecuación de energía con ayuda de las ecuaciones de movimiento y continuidad, de la siguiente forma.

$$\begin{split} \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} (\hat{U} + \frac{1}{2}\upsilon^2) - \upsilon \cdot \nabla \left(\hat{U} + \frac{1}{2}\upsilon^2 \right) \right] + \left(\hat{U} + \frac{1}{2}\upsilon^2 \right) \left[\frac{\partial \rho}{\partial T} + (\nabla \cdot p\upsilon) \right] \\ = -(\nabla \cdot q) - (\nabla \cdot p\upsilon) - \left(\nabla \cdot [\tau \cdot \upsilon] \right) \end{split}$$

El Primer termino del primer miembro de la ecuación es la densidad local del fluido

multiplicada por la derivada substancial de $(\hat{U} + \frac{1}{2}\nu^2)$. Como puede observarse, con ayuda de la ecuación de continuidad, el término es cero. Por lo tanto, se puede escribir:

$$\rho \frac{D}{Dt} (\hat{U} + \frac{1}{2}\upsilon^2) = -(\nabla \cdot q) - (\nabla \cdot p\upsilon) - (\nabla \cdot [\tau \cdot \upsilon])$$

Esta ecuación representa la variación para la suma de $\hat{U} y \frac{1}{2} v^2$. Si a esta ecuación le restamos la variación de $\frac{1}{2}v^2$, que se pude escribir de la siguiente forma:

$$\rho \frac{D}{Dt} (\frac{1}{2}\upsilon^2) = \rho (\nabla \cdot \upsilon) - (\nabla \cdot q) - (\nabla \cdot p\upsilon) - (\nabla \cdot [\tau \cdot \upsilon]) + (\tau : \nabla \upsilon)$$

Obtenemos la variación de \hat{U} :

$$\rho \frac{D}{Dt}(\hat{U}) = -(\nabla \cdot q) - (\nabla \cdot p \upsilon) - \left(\nabla \cdot \left[\tau \cdot \upsilon\right]\right)$$

Por analogía con la ecuación de energía mecánica, puede denominarse ecuación de energía calorífica. Para la mayoría de las aplicaciones ingenieriles es conveniente expresar la ecuación de energía calorífica en función de la temperatura y del calor especifico del fluido en vez de energía interna. Vamos a escribir la ecuación en estos términos, teniendo en cuenta que la energía interna \hat{U} puede considerarse como función de \hat{V} y *T*, será.

$$\rho \frac{D}{Dt}(\hat{U}) = \left[-p + T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\hat{V}} \right] \rho \frac{D\hat{V}}{Dt} + \rho C_{v} \frac{DT}{Dt}$$

Teniendo en cuenta la ecuación de continuidad, el término $\rho \frac{D\hat{V}}{Dt}$ puede transformarse de la siguiente forma:

$$\rho \frac{D\hat{V}}{Dt} = \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2} \frac{D\rho}{Dt} = \left(\nabla \cdot \upsilon\right)$$

Substituyendo las dos últimas ecuaciones en nuestro balance de energía interna obtenemos:

$$\rho C_{\nu} \frac{DT}{Dt} = -(\nabla \cdot q) - T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{\hat{\nu}} (\nabla \cdot \nu) - (\tau : \nabla \nu)$$

Que es la ecuación de energía en función de la temperatura del fluido T.

La primer simplificación de esta ultima ecuación se obtiene expresando q en función de los gradientes de temperatura y τ en función de los gradientes de velocidad. Además para un fluido incompresible (ρ es constante), C_{ν} y C_{p} son iguales y $(\nabla \cdot \upsilon)$ es igual a cero. Por lo tanto la ecuación se reduce a:

$$\rho C_{v} \frac{DT}{Dt} = k \nabla^{2} T + \phi$$

Donde^{ϕ} es la tasa de generación de calor interna por disipación de la potencia viscosa. Se asume que alrededor del 100% de la potencia plástica se convierte en calor.

$$\phi = \beta(\tau : \nabla \upsilon)$$

El coeficiente β en este caso es tomado como 1, es un coeficiente de eficiencia de generación de calor. Pero en otros casos cuando la potencia es consumida para otros propósitos que no están incluidos en la ecuación de energía, este coeficiente puede ser distinto de la unidad.

4.2. DISCRETIZACION DE LAS ECUACIONES

4.2.1. GENERALIDADES

En el método de los volúmenes de control se utiliza una malla para la diiscretización espacial del dominio. Las ecuaciones gobernantes sobre estos volúmenes de control, se conservan en forma discreta para cada volumen de control.

La siguiente figura muestra una malla típica en dos dimensiones, donde los elementos de esta malla están definidos en línea sólida, la superficie del volumen de control se representa con el área rallada, y en líneas punteadas se encuentran las interfases entre los volúmenes de control.



De esta manera cada nodo tiene asociado un volumen de control (Área rallada). Las variables y propiedades del fluido se almacenan en los nodos de los elementos. Las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento en coordenadas cartesianas son:

$$\begin{split} &\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}}(\rho \, \mathbf{U}_{j}) \,=\, 0 \\ &\frac{\partial}{\partial t}(\rho \, \mathbf{U}_{i}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}}(\rho \, \mathbf{U}_{j} \, \mathbf{U}_{i}) \,=\, -\frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_{i}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial \mathbf{U}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \frac{\partial \mathbf{U}_{j}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \right) \right) \end{split}$$

Estas ecuaciones son integradas sobre el volumen de control, y aplicando la teoría de la divergencia de gauss se convierten algunos términos de las integrales de volumen a integrales de superficie. Si los volúmenes de control no se deforman en el tiempo, es decir para una formulación euleriana, Se obtienen las siguientes ecuaciones.

$$\frac{d}{dt} \int_{V} \rho \, dV + \int_{S} \rho \, U_j dn_j = 0$$

$$\frac{d}{dt} \int_{V} \rho \, U_i dV + \int_{S} \rho \, U_j \, U_i dn_j = -\int_{S} \rho \, dn_j + \int_{S} \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial \mathbf{x}_j} + \frac{\partial U_j}{\partial \mathbf{x}_i} \right) dn_j + \int_{V} S \, U_i dV$$

Los términos volumétricos se convierten a sus formas discretas por la aproximación especifica de sus valores en cada sector y luego se integran estos valores sobre todos el sector que contribuye a un volumen de control. Los términos de flujos superficiales se convierten a sus formas discretas mediante una primera aproximación de los flujos en los puntos de integración, ipn, que están ubicados en la mitad de los segmentos que dividen los volúmenes de control. Las cantidades se evalúan integrando los flujos sobre los segmentos de las superficies que contribuyen al volumen de control.



4.2.2. ACOPLAMIENTO DE LOS VALORES DE PRESIÓN CON LAS VELOCIDADES

La estrategia que utiliza el programa cfx para acoplar las velocidades con las presiones radica en una ecuación similar a la de momento para cada punto de integración, obteniendo la siguiente expresión para la advección de la velocidad en cada punto de integración:

$$\boldsymbol{U}_{i,ip} = \left. \overline{\boldsymbol{U}}_{i,ip} + f_{ip} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right|_{ip} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial x_i} \right|_{ip} - c_{ip} f_{ip} (\boldsymbol{U}_{i,ip}^{\circ} - \overline{\boldsymbol{U}}_{i,ip}^{\circ})$$

La barra superior en los términos indica el promedio de los valores de los vértices adyacentes al punto de integración, mientras que el suprandice ⁰ denota los valores en el paso de tiempo anterior. Las constantes Fip, Dip y Cip son primos de esta estrategia y se obtienen a partir de valores en el elementos.

4.2.3. FUNCIONES DE FORMA.

El campo de soluciones se almacena en los nodos de la malla. Sin embargo, varios términos en las ecuaciones requieren los valores o los gradientes de los campos en los puntos de integración. Para tal fin se utilizan las funciones de forma de elementos finitos, utilizando los valores en los nodos. El valor de la variable dentro del elemento se describe de la siguiente forma:

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{node}} N_i \phi_i$$

.

Donde las fi son las variables en los nodos y las Ni son las funciones de forma asociadas al nodo *i* respectivamente. Los elementos utilizadas en este programa son parametritos con interpolación lineales para todas las variables.

5. SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FUNCIONAMIENTO DE MEZCLADOR ESTÁTICO.

Como se explicó en la sección N^a 2 (Armado de la extrusora), a continuación de la bomba de engranajes, se ubica un mezclador estático. Esta pieza genera un mezclado intensivo del polímero, debido flujos con geometrías convergentes y divergentes que sigue el fluido a medida que va recorriendo el camino tortuoso que presenta el mezclador.

El mezclador está compuesto por un cilindro de 120 mm de longitud y 25 mm de diámetro, dentro del cual van ubicados 7 conjuntos de discos (Figura 5.1).



Figura 5.1 Conjunto completo mezclador estatico

Cada conjunto está formado por 3 discos, dos de ellos con la geometría de la Figura 5.2 A y, un tercero con la de la Figura 5.2B. El ensamblaje de cada conjunto se realiza colocando un disco A sobre uno B y, luego sobre estos dos, se coloca un tercer disco A girado a 45º grados respecto del otro disco A y rotado 180 grados en el eje horizontal (Figura 5.2C).



Figura 5.2A Disco A



Figura 5.2B Disco B



Figura 5.2C- Un conjunto de mezcladores

En este tipo de diseño el polímero ingresa al conjunto por el orificio central del primer elemento tipo A, fluye hacia el borde externo del disco en dirección radial entre las piezas tipos A y B, para salir por los canales laterales, pasar por el exterior del disco e ingresar nuevamente al espacio entre la pieza tipo B y el segundo elemento tipo A, para finalmente salir por el orificio central de la segundo elemento tipo A. Las cavidades circulares del disco tipo B equivalen a discontinuidades en el espesor de la película de líquido que circula en dirección radial, y proveen más componentes de flujo divergente y convergente.

La principal ventaja de este diseño es que le permite al usuario elegir la cantidad de conjuntos que desea utilizar. Cuanto mayor sea dicha cantidad, mayor será el mezclado, no obstante, debe tenerse en cuenta que también se obtendrá una mayor pérdida de presión y una mayor distribución de temperatura a lo largo del mezclador.

Con el fin de verificar el funcionamiento del mezclador estático y para poder determinar la caída de presión que se produce en el mismo, se simuló numéricamente el flujo y mezclado de PS a través del mismo. Para mejorar el mallado de cada pieza, se realizó una pequeña modificación a la geometría de los discos. Las curvas de todas las circunferencias fueron aproximadas por pequeñas sucesiones de rectas. Si bien esta simplificación trae aparejado un pequeño error en el cálculo, la ganancia en disminución de gasto computacional es significativa. Los discos con la geometría modificada se presentan a continuación.



Figura 5.3 A y B

En la Figura 5.4 (a, b y c) se observan las líneas de flujo del PS (líneas azules) dentro del mezclador estático. Las mismas se bifurcan en la entrada, para luego unirse a medida que van pasando a través del conjunto de discos. Las tres figuras corresponden a una misma simulación, en la 5.4a se presenta el mezclador junto con el PS, en la 5.4b los conjuntos de discos y el PS, y en la 5.4c solamente el PS.



Figura 5.4 A, By C

Como se mencionó anteriormente, se calculó la caída de presión a lo largo del mezclador utilizando 4 caudales de entrada distintos: 3, 6, 9 y 12 Kg de PS / hora. Para la viscosidad se utilizaron los valores calculados en el capitulo anterior.

La primera simulación se realizó con un ancho de canal de 5mm en cada mezclador. Luego, se realizo una segunda simulación aumentando el ancho del canal a 10 mm. En ambos casos, los valores de caída de presión obtenidos están dentro del orden esperado para la etapa de mezclado en un proceso de extrusión. Los resultados de ambas simulaciones se presentan a continuación.



Figura 5.5 Presión vs Caudal para el conjunto completo del mezclador estático

6. SIMULACIÓN DE OPERACIÓN DE LAS EXTRUSORAS POR MÉTODOS NUMÉRICOS

6.1. INTRODUCCIÓN

El proceso de extrusión involucra el transporte y fundido de un polímero en estado sólido hasta una boquilla, bajo condiciones no isotérmicas. El polímero ingresa en forma de pellets (sólido) a temperatura ambiente, y es fundido por una combinación de transporte de calor por conducción desde el interior del cilindro caliente y, generación de calor por cizalla en el líquido que se deforma. Tanto el proceso de conducción de calor como el de generación de calor por cizalla son máximos al comienzo del recorrido del líquido en el interior de la extrusora: el primero debido a que en esa zona es máxima la diferencia de temperatura entre el cilindro y el polímero sólido, y el segundo, porque la viscosidad del polímero es máxima a la temperatura más baja a la cual se encuentre como líquido.

Los tornillos más comunes, de uso general para cualquier tipo de polímero y que se presentarán más adelante como un caso de estudio para analizar los resultados de simulación numérica, constan de tres zonas características: en la entrada de material sólido (zona de transporte de sólido) la altura del filete del tornillo es constante, y está llena por material sólido; en la zona cónica que se encuentra a continuación en el camino del polímero, coexisten una capa de material sólido sobre la superficie del tornillo y una capa de líquido en contacto con el interior de la camisa estática; en la última zona el espacio entre el tornillo y la camisa se encuentra completamente lleno de polímero en estado líquido. Este esquema, que constituye la base para un modelo de fusión en la extrusora, ha sido verificado experimentalmente mediante la detención y enfriamiento rápido de una extrusora en operación, y sugiere simplificar los cálculos para perfiles de presión, temperaturas y caudales en la extrusora tomando en cuenta solamente el cuerpo continuo de líquido que comienza en la zona de fusión y continúa hasta la salida de la máguina. Dentro de la máguina, esta capa de líquido tiene el ancho de la distancia entre los filetes, y una altura (en dirección del radio del tornillo) que varía desde unas décimas de milímetro en la zona de fusión hasta la altura completa del filete en la zona final de la máguina.

Consistentes con esta descripción del funcionamiento de una máquina extrusora para polímeros termoplásticos, todos los cálculos simplificados de perfiles de velocidad y presión hechos por métodos numéricos se basan en despreciar el efecto de la velocidad de avance de la capa de polímero sólido sobre la superficie del tornillo, y considerar solamente los mecanismos de flujo por arrastre de la camisa sobre la superficie externa de la capa de líquido de ancho constante y espesor variable a lo largo del camino.



Figura 6.1 – Geometría del tornillo de una extrusora.

Al desarrollar modelos de extrusión de termoplásticos es conveniente empezar con un caso de fluido simple, conocido como Extrusión Newtoniana Isotérmica, que nos permite visualizar fácilmente las líneas de corriente del líquido dentro de la máquina y hacer estimaciones razonables de pendientes de perfiles de presión en el seno del líquido. La simplificación sobre la naturaleza del fluido mencionada hace posible tratar este caso de manera analítica, y como resultado se obtiene una teoría simplificada que servirá posteriormente como base para poder compararla con los resultados de modificaciones subsecuentes de la teoría; enriqueciendo el modelo y aproximándolo más a la realidad.

6.2. ESQUEMA DE CÁLCULOS

6.2.1. Cálculos Simplificados para Líquidos Newtonianos.

La simplificación geométrica comienza desarrollando el canal helicoidal que existe entre la camisa, los filetes y el alma del tornillo (Figura 6.2). El sistema de coordenadas utilizado será el que se muestra en la misma figura.





El movimiento relativo entre la camisa y el tornillo es equivalente a el movimiento en un plano con un ángulo θ_b , en la posición Y=H. Por lo tanto, el flujo de arrastre es generado por las componentes en las direcciones X y Z. Las ecuaciones de movimiento obtenidas para esas direcciones serán entonces:

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right)$$
(6.1)

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} \right)$$
(6.2)

Además, se asume que la geometría es uniforme en la dirección Z y, que la velocidad en esa misma dirección no es función de Z. Con esta suposición el gradiente de presión es remplazado por un valor constante. En la ecuación 6.3, el ΔP es la caída de presión a lo largo de la extrusora y Z es la longitud helicoidal.

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\Delta P}{Z} \tag{6.3}$$

Las condición de contorno para resolver la ecuación es V_{bz} = $V_b \cos \theta$ en la posición Y=H. Éste, es un caso de combinación de Flujo por gradiente de presión y Flujo por arrastre en la dirección *Z*, y dado que el fluido que se considera es newtoniano, se puede escribir la siguiente solución a la ecuación 6.1:

$$Q = \frac{1}{2} \operatorname{V}_{\mathrm{bz}} W H F_D - \frac{W H^3}{12\mu} \frac{\Delta P}{Z} F_P$$
(6.4)

Notar que el flujo generado por la presión es un flujo en retroceso que se opone al flujo por arrastre. En la mayoría de las extrusoras, el tornillo posee una relación de W mucho mayor que H, y es justamente por ello que F_D y F_P pueden aproximarse a la unidad. En la Figura 6.3 se muestra el valor de F_D Y F_P en función de H/W.



Figura 6.3 – Curvas F_D Y F_P en función de H/W.

Debido a que la velocidad de la superficie interna de la camisa tiene una componente en la dirección X ($V_{bx}=V_b \sin \theta$), existe un flujo transversal al canal rectangular que se puede aproximar como independiente de la dirección Y. En otras palabras, la relación de W/H grande (típicamente de 10 o más) permite despreciar los efectos de la presencia de los filetes, y calcular una solución aproximada - válida solamente lejos de ellos - equivalente a un flujo combinado por arrastre y presión entre dos placas planas que se deslizan paralelas una con respecto a la otra, con caudal neto cero debido a la presencia de los filetes del tornillo. De esta manera se puede escribir la siguiente ecuación.

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2}$$
(6.5)

Para resolverla se utilizan las siguientes condiciones de contorno:

$$v_x = \begin{cases} 0 & \text{En } Y=0 \\ \\ -V_{bx} & \text{En } Y=H \end{cases}$$

La solución obtenida integrando dos veces respecto de la dirección Y es:

$$v_x = -V_{bx}\frac{y}{H} - \frac{1}{2\mu}(H - y)\frac{\partial p}{\partial x}$$
(6.6)

En esta integral, el gradiente de presión $\partial p/\partial x$ ha sido tomado para ser independiente de la coordenada Y. Esto es igual a asumir que la velocidad v_x es paralela a la superficie en Y=0 y H. Nuevamente esto no puede ser cierto en las cercanías de los filetes (paredes laterales), pero es una buena aproximación para el cálculo de perfiles de presión.

Esta solución ignora la presencia de paredes en $X = \pm \frac{1}{2} W$, las cuales ejercen un efecto que debe ser tenido en cuenta. No puede haber flujo neto de material en esa dirección, por lo que se debe agregar otra restricción al caudal en dirección *X*, que será expresada del siguiente modo:

$$\int_{0}^{H} v_{x} dy = 0 \tag{6.7}$$

Esta condición requiere que el gradiente de presión tome la siguiente forma:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{6\mu V_{bx}}{H^2}$$
(6.8)

Entonces, la velocidad en X puede ser escrita como:

$$v_x = V_{bx} \frac{Y}{B} \left(2 - \frac{3y}{B} \right)$$
(6.9)

En el mejor de los casos esta aproximación es válida en la porción central del filete.

Como la componente X de la velocidad no contribuye al cálculo del caudal de salida, la aproximación en ese aspecto del modelo no es relevante. Sin embargo, si se quisiese calcular la potencia requerida para el diseño de una extrusora, si seria necesario tenerla en cuenta.

Para calcular la velocidad en dirección Z resulta de gran utilidad tomar la aproximación de que la razón entre el alto y el ancho del filete es muy grande. En ese caso, la ecuación para la velocidad v_z se expresa como:

$$v_z = -V_{bz} \frac{y}{B} - \frac{1}{2\mu} (B - y) \frac{\Delta P}{Z}$$
 (6.10)

Si la extrusora simplemente descargara el fluido sin restricciones a la salida, no habría un mecanismo por el cual se desarrollase un gradiente de presión (caso de descarga libre, $\Delta P=0$). Normalmente existe un molde o boquilla al final de la extrusora, que al imponer una restricción al flujo establece la caída de presión.

Es por eso que para resolver las ecuaciones de velocidad en *Z*, presión y caudal se debe acoplar la ecuación de caída de presión a lo largo del molde en función del caudal.

Para un fluido newtoniano la mayoría de los moldes tienen el siguiente comportamiento:

$$Q = \frac{k}{\mu} \Delta P \tag{6.11}$$

Donde k es una constante relacionada con la geometría del molde.

Al relacionar la ecuación 6.11 con la ecuación 6.4, se obtiene de manera muy sencilla el caudal y el gradiente de presión a lo largo de la extrusora (Figura 6.4).



Figura 6.4 – Velocidad de flujo en función del aumento de presión.

Por mayor practicidad, para graficar los perfiles de velocidad se normalizará el eje Y de la siguiente manera $\xi = y/H$. También se normalizarán las velocidades utilizando la velocidad del barril. Entonces, si Q_p es el caudal producido por diferencia de presión, Q_d el producido por arrastre de la pared, y Q_t el total, los perfiles de velocidad que se encontrarán tanto en dirección *X* como en *Z* son los siguientes:



Figura 6.5 – Perfiles de velocidad en dirección X y en dirección Z.

En la Figura 6.6 se presenta el movimiento de una partícula de fluido a través del canal de la extrusora. Las líneas continuas muestran el paso del fluido en las partes superiores del canal, mientas que las líneas punteadas muestran lo mismo pero en la porción inferior.



Figura 6.6 – Líneas que representan el movimiento de una partícula de fluido a través del canal de la extrusora.

6.2.2. PROFUNDIDAD DE CANAL VARIABLE

La mayoría de los tornillos no tiene una geometría uniforme al avanzar a lo largo de la espiral, generalmente la profundidad varía según el propósito para el cual fue diseñada la extrusora. A continuación se resolverá un caso simple en el que la profundidad del canal varía de forma lineal a lo largo de *Z*.

Si la profundidad del canal es función de Z, luego la velocidad en Z y en Y son función de Z y la ecuación 6.4 no es exactamente correcta. Sin embargo, si la variación de la profundidad del canal a lo largo de Z no es muy grande, y además se agrega la modificación de que B sea variable con la dirección Z y que el gradiente de presión sea también función de Z, entonces se puede esperar que dicha ecuación sea una buena aproximación.

Por lo tanto, la ecuación 6.10 se debe reescribir de la siguiente forma.

$$v_z = -V_{bz} \frac{y}{H(z)} - \frac{1}{2\mu} (H(z) - y) \frac{\partial p}{\partial z}$$
(6.12)

El flujo volumétrico a través de un plano normal al helicoide seguirá siendo constante:

$$Q = \frac{1}{2} V_{bz} WH(z) - \frac{WH^3}{12\mu} \frac{\partial p}{\partial z}$$
(6.13)

Resolviendo para el gradiente de presión, se encuentra:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{6\mu V_{bz}}{H^2(z)} - \frac{12\mu Q}{W} \frac{1}{H^3(z)}$$
(6.14)

A modo de ejemplo, si se asume que que H (z) tiene una dependencia lineal, entonces:

$$H(z) = \frac{H_0 H_z}{\frac{1}{2}(H_0 + H_z)} + z \frac{H_z - H_0}{Z}$$
(6.15)

La ecuación 6.14 puede ser integrada entre z=0 y z=Z, quedando:

$$Q = \frac{1}{2} V_{bz} W \frac{H_0 H_z}{\frac{1}{2} (H_0 + H_z)} - \frac{W}{12\mu} \frac{(H_0 H_z)^2}{\frac{1}{2} (H_0 + H_z)} \frac{\Delta P}{Z}$$
(6.16)

De esta manera se puede resolver sin grandes modificaciones un problema en el que la altura del filete varía a lo largo del mismo.

6.3. COMPARACIÓN CON DATOS EXPERIMENTALES

6.3.1. CALCULO TEORICO

A continuación se resolverá un problema numérico con profundidad de canal variable en forma lineal. Las variables geométricas de extrusora son las siguientes:

D=19.05 mm	Z=1252.22 mm	B0=3.81 mm
W=15.14 mm	θ =17.7°	Bz=1.68 mm

Se utilizó una boquilla cilíndrica con las siguientes dimensiones:

D=0.79 mm L=2.38 mm

Con respecto al fluido, se utilizó uno newtoniano con una viscosidad igual a 2 Pa·seg y una densidad de 1400 Kg/m³.

Utilizando las ecuaciones 6.11 y 6.16, se llega a las siguientes expresiones que relacionan el caudal y el gradiente de presión con las revoluciones del barril.

Q = 0.289 N	(6.17)
ΔP = 1.82E+3 N	(6.18)

Donde N es el número de revoluciones por minuto, quedando Q en g/minuto, y ΔP Pa.

6.3.2. FORMULACIÓN DE UN MODELO NUMÉRICO

A continuación se desarrollará un modelo numérico para verificar, en primer lugar, una geometría análoga a la del problema anterior. Es decir, una sección rectangular con la profundidad variable a lo largo del eje z, y con una boquilla cilíndrica al final de la sección (Figura 6.7).



Figura 6.7 – Sección rectangular con profundidad variable a lo largo del eje z y con una boquilla cilíndrica al final de la sección.

Las condiciones de contorno utilizadas para resolver este modelo fueron:

- ✓ Presión cero en ambos extremos,
- ✓ Deslizamiento nulo en todas las paredes excepto en la pared superior, donde se impuso velocidad según las ecuaciones 6.19, 6.20 y 6.21.

$$V_b = N\pi D \tag{6.19}$$

 $V_{bz} = V_b \cos \theta \tag{6.20}$

$$V_{bx} = V_b \sin\theta \tag{6.21}$$

Se resolvieron la ecuación de cantidad de movimiento y la ecuación de continuidad, utilizando en ambos casos las simplificaciones explicadas en el capitulo anterior.

El modelo se resolvió usando 3 velocidades de rotación distintas: 1, 2 y 3 revoluciones por segundo.

Para resolverlo de forma correcta fue necesario densificar el mallado en la zona de la boquilla, diminuyendo el tamaño de los elementos a la mitad. En la Figura 8 se puede observar una imagen de la placa con su respectivo mallado.



Figura 6.8 – Mallado de la sección rectangular simulada.

6.3.3. RESULTADOS

En los gráficos de la Figura 6.9 se presentan los 3 conjuntos de datos. El primero resulta de la resolución de las ecuaciones 6.17 y 6.18 (línea roja), el segundo pertenece al modelo numérico para las tres velocidades (puntos azules), y el último pertenece a datos experimentales (puntos verdes).



Figura 6.9 – En el gráfico superior se presenta la variación del Caudal en función de las rpm del tornillo, mientras que en el inferior se representa la diferencia de Presión también en función de las rpm del tornillo.

7. MODELO GEOMÉTRICO PARA 3 VUELTAS DE FILETE

7.1. INTRODUCCIÓN

En este apartado se realizará un análisis de la simulación del proceso de extrusión de un polímero, pero a diferencia de lo expuesto en el capítulo anterior, aquí se modelará una geometría más compleja y similar a la de una extrusora real (Figura 7.1). El polímero ocupa el espacio existente entre el tornillo y la camisa, resultando en la geometría que se muestra en la Figura 7.2.



Figura 7.1 – Sección de camisa- tornillo



Figura 7.2- Cavidad interna de sección de camisa - tornillo

Entre el tornillo y la camisa, a la altura del final de cada filete, existe una cavidad muy pequeña (una fracción de milímetros) a través de la cual el fluido puede pasar. Dicha cavidad fue despreciada, ya que el costo computacional requerido para simularla es demasiado grande, y no aporta diferencias substanciales a los resultados.

Las dimensiones de la geometría que representa el polímero se detallan a continuación:

- Paso del filete= 30 mm,
- Ancho del filete = 4 mm,
- Altura del filete = 5 mm,
- Largo tornillo = 90 mm,
- Diámetro interno de la camisa = 30mm.

La velocidad de rotación del tornillo varía desde unas pocas revoluciones por minuto hasta 3 revoluciones por segundo aproximadamente.

Para caracterizar el comportamiento del polímetro dentro de la extrusora y poder corroborar el buen funcionamiento del simulador, se realizó una primera corrida a una velocidad de rotación de 2 revoluciones por segundo.

Es importante remarcar que en el presente análisis se consideró que gira la pared externa de la camisa, en lugar del giro real del tornillo. Esta simplificación facilita el análisis y permite tener un modelo muy similar al de sección rectangular (capítulo 6), pero no modifica la solución.

En esta etapa del modelado, se utilizaron los siguientes datos de viscosidad y densidad para un fluido newtoniano:

Viscosidad	\rightarrow	$\mu = 1500 Pa.seg.$
Densidad	\rightarrow	ho = 1000 kg/m ³ .

Solo se modelaron las ecuaciones de cantidad de movimiento y de continuidad, no teniéndose en cuenta la ecuación de balance de energía. También se consideró aquí que el polímero se comporta como un fluido incompresible.

Condiciones de Contorno - ecuación de cantidad de movimiento

- En un extremo (entrada) se consideró un caudal constante de 5 Kg. /h. (valor de caudal típico para una extrusora de estas dimensiones).
- Se fijó en la pared externa una velocidad de rotación de 2 rev. / seg.
- En el otro extremo (salida), se fijó un valor cualquiera de presión de referencia.
- En todas las demás paredes se utilizó como condición de contorno velocidad igual a cero.

Para tener una estimación del comportamiento del fluido y establecer si la aproximación de régimen laminar es correcta, se puede hacer un cálculo aproximado del número de Reynols. Este número adimensional pondera el peso de la parte inercial de la ecuación de cantidad de movimiento sobre los esfuerzos viscosos. Considerando el área mojada como la sección de entrada del fluido, la velocidad como la velocidad de entrada del fluido, y el largo como la longitud mayor perpendicular al área de entrada del fluido, el valor del número de Reynols calculado es de 8.10⁻⁵. Este valor indica que efectivamente el fluido presenta un régimen laminar.

La viscosidad del fluido que se utilizó en este modelo es 1 orden de magnitud mayor al de los polímeros reales, por lo tanto el número de Reynols calculado es mayor al de un polímero en condiciones de procesamiento reales. Sin embargo, sigue siendo un número suficientemente pequeño como para seguir considerando que el flujo es laminar.

7.2. MODELO NUMÉRICO

Antes de realizar una simulación es necesario, en primer lugar, dibujar la pieza con algún graficador 3D, para luego parametrizarla (mallarla). En este caso se utilizó el software *SolidWorks 2007* para hacer el dibujo tridimensional (Figura 7.2), mientras que el mallado con elementos tetraédricos se realizó con el software CFX 11.0 (Figura 7.3).

Se realizaron 4 simulaciones variando el tamaño de la malla (Figura 7.3), con el fin de evaluar el error en la solución debido al tamaño de los elementos. Para comparar las soluciones de las simulaciones se analizó la diferencia de presión entre la entrada y la salida. En la Tabla 7.1 se presentan los valores obtenidos.



Figura 7.3 – Diferentes mallas par la geometría de estudio

	Mínima longitud de elemento (mm)	№ de nodos	N⁰ de elementos	Δ Presión (MPa)
Malla 1	0.002	1449	5035	6.8
Malla 2	0.001	7922	34835	10.2
Malla 3	0.0005	55342	280643	13.0
Malla 4	0.00025	446737	2390574	14.3

Tabla 7.1 – Diferencia de presión entre la entrada y la salida en función del tamaño de elemento

En la Tabla 7.1 se observa que a medida que disminuye el tamaño de los elementos, la diferencia de presión entre la entrada y la salida aumenta, convergiendo a un valor cercano a 14.5 MPa. A partir de estos valores se graficó el error de cada malla en función del número de elementos, tomando como referencia el error de la malla más refinada (Figura 7.4). Eso da un error cero para el tamaño de elementó mas chico utilizado, pero esto no es cierto. En función de esto y, teniendo en cuenta la relación de compromiso entre costo computacional y error de la solución, se decidió utilizar un tamaño de longitud minima de elemento de 0.005 m. Por lo tanto el error en la solución fue de aproximadamente un 10 %.



Figura 7.4 Erro v. 1/Tamaño de elemento

A continuación se presentan las figuras que exhiben el campo del módulo de velocidades, sus componentes en $x \in y$, y además las líneas de corriente.

Campo del módulo de velocidades











Figura 7.6 A y B

Campo de velocidades vectores



Figura 7.7

Líneas de corriente



Figura 7.8

En la siguiente figura se muestra el campo de valores de presión, que se representó sobre el tornillo. Sin embargo, si se tiene en cuenta que la presión es hidrostática, el gráfico da una idea de la presión en todo el volumen.



Figura 7.9 Perfil de Presión

La curva de presión que se muestra en la Figura 7.11 corresponde al gráfico de presión de la Figura 7.9. Los datos se basan en los resultados del campo de presión sobre una línea que se encuentra a una distancia de 0.014 mm del diámetro, como se observa en la Figura 7.10 (línea amarilla).



Figura 7.10. Línea para trazar curva de presión vs. Posición en x



Figura 7.11 Presión sobre la línea de la figura anterior

De este gráfico se extraen las siguientes conclusiones: a) la presión aumenta a medida que se avanza a lo largo del tornillo; b) sobre una sección trasversal, la presión aumenta. Esto se debe a que la presión en el filete de arrastre es mayor que la del filete opuesto.

Al analizar este perfil de presiones se podría asumir que la presión a lo largo del tornillo debe ser constante, ya que no existe ningún tipo de cabezal a la salida que restrinja el paso del fluido. Sin embargo, como se impone un caudal de entrada menor al caudal generado por el arrastre de la pared, para cumplir con la condición del caudal de entrada, la solución debe introducir una diferencia de presión entre la entrada y la salida. Esta diferencia genera un flujo en caudal de retroceso, permitiendo de esta manera que el caudal total sea igual al caudal impuesto por la condición de contorno.

Para mostrar este comportamiento se simularon 4 casos distintos, modificando el caudal de entrada. Los resultados se presentan en las Figuras 7.12 y 7.13, en donde se observa que los perfiles de velocidad y de presión dan resultados acordes con lo que la teoría predice.

Al observar la curva resultante de la Figura 7.12 se aprecia el comportamiento característico de una bomba, es decir, con el aumento del caudal se produce una

disminución en la presión generada. Comparando con la Figura 6.4, se puede notar que el hecho de fijar un caudal es análogo a colocar una boquilla.

En la Figura 7.13, se observan las diferencias que se producen en las líneas de corriente y en los perfiles de velocidad en el líquido, al variar el caudal neto. Este comportamiento concuerda cualitativamente con lo descripto por las ecuaciones utilizadas para un flujo de líquido newtoniano en una extrusora, descriptas en el capítulo 6.2.



Figura 7.12. Presión vs. Caudal



Figura 7.13. Perfiles de velocidad y líneas de corriente en función del caudal.

7.3. SIMULACIÓN CON EL ACOPLAMIENTO DE LA ECUACIÓN DE ENERGÍA

Para enriquecer aún más el modelo se acopló a este mismo problema la ecuación de energía. Las propiedades térmicas del fluido utilizadas fueron las siguientes:

- Capacidad calorífica a presión constante \rightarrow Cp = 1200J /(kgK)
- Conductividad térmica $\rightarrow k = 0.2w/(mK)$.

Como condiciones de contorno se eligió una temperatura de entrada del fluido de 10 °C por encima de la temperatura de fusión del mismo, y para todas las paredes que no incluyen la entrada se impuso que Q = 0, es decir, condición de paredes adiabáticas.

Para analizar si es correcto utilizar el método de aceleración de convergencia conocido como "upwindi", se puede utilizar el número adimensional Peclet (Pe), que pondera en la ecuación de energía el peso del término conductivo versus los términos convectivos.

Particularmente en este problema se obtiene un valor muy bajo del número Pe, lo que indica que tiene una mayor importancia lo que sucede aguas arriba, y sugiere, en principio, la conveniencia de usar el método de aceleración de convergencia mencionado anteriormente.

El perfil de temperatura no se mostrará debido a que, luego de repetidos intentos, el software usado no pudo resolver el campo de temperaturas convergiendo de manera correcta a valores lógicos.

En el cuarto caso que se analizó, se aplicó una pequeña modificación. Ésta consistió en cambiar la condición de contorno adiabática a convectiva para las paredes externas de la camisa de la extrusora.

Se utilizó un coeficiente de convección $h=3.000 \text{ W/m}^2 \text{ y}$, una temperatura externa de 230°C. Estos valores surgen del siguiente análisis: la parte externa de la camisa de la extrusora está calefaccionada a una temperatura de 230°C, y el valor de h se estimó dividiendo el de la conductividad térmica del acero por el espesor de la pared de la camisa.

No se incluyó el término de generación de calor por cizalla, y se consideró que el calentamiento se debe solamente a la convección de la pared externa. El perfil de temperatura obtenido se observa a continuación (Figura 7.14).



Figura 7.14- Perfil de temperatura

7.4. SIMULACIÓN CON FLUIDO NO NEWTONIANO

Una vez acoplada la ecuación de energía, lo único que falta agregar para tener el modelo completo es tener en cuenta que el fluido usado no es un fluido newtoniano, sino que éste posee un comportamiento pseudo plástico. Para poder introducir numéricamente este comportamiento a la simulación, se utilizó la ecuación de ley de la potencia, que aproxima de manera satisfactoria el comportamiento de la viscosidad del polímero estudiado.

Debido a que: a) no se pudo modelar de forma correcta la generación de calor producida por cizalla; b) que el perfil de temperatura generado por la convección no brinda información, ni grandes cambios que modifiquen los resultados, y c) que la viscosidad de los polipropileno a la temperatura de trabajo de una extrusora (T=180 a 200 °C) no tienen un cambio muy grande, se decidió modelar a partir de este punto solamente modelos isotérmicos.

En las siguientes Figuras se incluyen los resultados obtenidos para simulación isotérmica del funcionamiento del sector de extrusora para nuestro PS. Nuevamente, el comportamiento concuerda cualitativamente con lo descripto por las ecuaciones utilizadas para flujo de líquido newtoniano en una extrusora, descriptas en el capítulo 6.2.



Figura 7.15- Líneas de corriente



Figura 7.16- Perfil de presión



Figura 7.17- Perfil de Viscosidad



Figura 7.18- Perfil de velocidad de deformación



Figura 7.19- Vectores velocidad

8. SIMULACIÓN DE TORNILLO SIMPLE DE EXTRUSORA

8.1. PRIMER ESTRATEGIA

Mediante la utilización del software CFX 11.0 se simuló el proceso de extrusión de Poliestireno en una extrusora MOROZ modelo E22/24D. En esta simulación no se tuvo en cuenta la zona de la camisa en la que el material se encuentra en estado sólido. El objetivo de esta simulación es, en primer lugar, determinar si los valores obtenidos en ella son comparables con los valores reales del proceso. Para ello se compararon los resultados con los obtenidos en el ensayo de reometría capilar por extrusión, debido a que el arreglo y el tornillo de la extrusora son los mismos. En segundo lugar, se desea verificar que la simplificación de modelar a la extrusora de manera isotérmica es correcta en este rango de velocidades de rotación de tornillo para un polímetro como el Poliestireno.

Geometría de la extrusora MOROZ modelo E22/24D

- Paso del tornillo = 21 mm (constante) (Figura 8.1)
- Diámetro de camisa = 21 mm
- Largo = 520 mm
- Profundidad del canal = varía linealmente a lo largo del tornillo desde una profundidad inicial de 3.5 mm (H_0) hasta un profundidad final de 1 mm (H_z).

En la Figura 8.1 se presenta la geometría del líquido contenido en la extrusora de 21 mm de diámetro.



Figura 8.1 geometría del líquido contenido en la extrusora de 21 mm de diámetro.

Para realizar las simulaciones se usaron tres cabezales de geometría cilíndrica, de 1.75 mm de diámetro y 40, 80 y 120 mm de largo cada uno. Entre la extrusora y los cabezales se colocó una pieza, también de geometría cilíndrica (12 mm de diámetro y 80 mm de largo), con el fin de colocar en la misma un sensor de presión.

En el mallado se utilizaron elementos de tamaño 0.5 mm, y se consideró un error numérico inherente a la etapa de mallado de 10 % aproximadamente, debido a que la geometría del problema es similar a la analizada en el caso anterior (Capitulo 7).

Se simuló el fluido a una temperatura constante de 180 °C, en correspondencia con el ensayo de medición de viscosidad por reometría capilar. En la Tabla 8.A se detallan los valores experimentales de caudal y presión medida para este último ensayo, aclarando en cada caso la velocidad de rotación del tornillo.

Cabezal	revoluciones (rpm)	Presión (Mpa)	Caudal (g/min)
1	10	7,5	4,11
1	20	10,5	9,21
1	30	12	14,1
1	40	12,8	18,56
1	50	13,5	24,52
2	10	10,8	4
2	20	15,2	8,78
2	30	17,8	13,5
2	40	19,5	17,5
2	50	20,8	22,2
3	10	18,2	3,01
3	20	26,2	6,41
3	30	31,1	9,53
3	40	34,2	12,75
3	50	36,6	15,83

Tabla 8. A - Resultados experimentales por reometría capilar.

En la simulación se impuso como condición de contorno una presión cero a la entrada y a la salida de la extrusora, y una velocidad de rotación en rpm en la pared externa. Los resultados de la simulación se presentan en la Tabla 8.B y Figuras 8.2 y 8.3.

Cabezal	Revoluciones(rpm)	Presión (MPa)	Caudal (g/min)
1	20	1,1	12,6
1	30	1,3	19,2
1	40	1,4	25,8
2	20	1,9	10,5
2	30	2,1	15,6
2	40	2,3	21
3	20	3	7,8
3	30	3,5	11,8
3	40	3,8	15,6

Tabla 8.B - Resultados simulación.



Figura 8.2 Presión vs. Revoluciones del tornillo


Figura 8.3 Caudal vs. Revoluciones del tornillo

Al comparar los valores experimentales con los obtenidos en la simulación se observa que la presión calculada está muy por debajo de la medida. Como consecuencia de estos resultados, se intentó hacer una nueva simulación para la misma geometría pero con una malla más pequeña (mayor número de elementos). Debido a limitaciones en la capacidad de cálculo de la computadora utilizada, este segundo intento no tuvo éxito (excesivo número de elementos).

8.2. SEGUNDA ESTRATEGIA

Otro modo de hacer la simulación es tener en cuenta solamente la extrusora, descartando el cabezal situado al final de la misma (Figura 8.4), e imponiendo como condición de contorno caudal a la entrada y presión de referencia a la salida. Así, se obtiene una curva de Presión vs. Caudal para diferentes revoluciones de la extrusora.

Como consecuencia del descarte del cabezal, ahora se tiene un mayor número de elementos en la extrusora (los que antes mallaban el cabezal, ahora se agregan a la extrusora), y por lo tanto se logra una mejor discretización de los resultados. Inicialmente el tamaño de elemento fue de 0.55 mm, y luego se modificó a 0.5 mm.

A continuación se muestra una figura en la cual se presenta la geometría utilizada.



Figura 8.4 geometría del líquido contenido en la extrusora de 21 mm de diámetro sin cabezal.

Los valores de caudal utilizados para la condición de contorno son los reales del ensayo de reología capilar, así como también el número de revoluciones. A partir de los resultados obtenidos en esta nueva simulación, solo se analizará la diferencia de presión entre la entrada y la salida. Solamente se simularon los caudales correspondientes al cabezal L/D = 13 y, los caudales correspondientes a los tres cabezales a 40 rpm. Los resultados se presentan a continuación, en la Tabla 8.C y Figura 8.5. Si bien con este nuevo método de simulación los valores de presión son mayores, siguen siendo muy distantes a los valores reales.

Caudal (g/min)	Presion (Mpa)	Revoliciones (rpm)	
6,4	4,4	20	
9,5	4,9	30	
12,75	5,3	40	
16,2	3,4	40	
18,6	2,2	40	

Tabla 8.C - Resultados simulación.



Figura 8.5 Presión vs. Caudal El conjunto de puntos rojos pertenecen a la simulación echas con una malla con elementos de menor tamaño

8.3. SIMULACIÓN DEL REÓMETRO DE PLATO Y PLATO

Para comprobar que la simulación implementó bien los valores de viscosidad del polímero, se procedió a simular el reómetro de plato y plato. Se utilizó un reómetro con un cilindro central de 25 mm de diámetro y 1 mm de espesor (Figura 8.6 - se representa el cilindro central en donde se coloca el polímero). Además, se utilizaron los valores de torque en función de la velocidad de deformación presentados en la Tabla 8.D. El *torque medido* es un dato obtenido del ensayo de reometría por plato y plato, el *torque teórico* es el valor obtenido usando las ecuaciones del capítulo 3.1 ajustadas por ley de la potencia y, el *torque numérico* es el calculado mediante la simulación del reómetro.



Figura 8.6 el cilindro central en donde se coloca el polímero en el reómetro de plato y plato

Velocidad de deformación [1/seg]	Torque Torque medido [µNm] teórico [µNm]		Torque numérico [µNm]
0,1	2,36E+03	3,09E+03	3,10E+03
1	4,05E+03	5,75E+03	5,70E+03
2,8	5,39E+03	7,59E+03	7,60E+03
5	6,32E+03	8,88E+03	8,90E+03

Tabla 8.D - Resultados simulación.

A partir de estos resultados se comprueba que el error en los valores corresponde a un mal ajuste de la ecuación de viscosidad para bajas velocidades de

deformación. El error se encuentra probablemente en la calidad del ajuste que brinda la "ley de la Potencia" para bajas velocidades de deformación, donde los valores de viscosidad son sobreestimados. La integración de la ecuación teórica contemplando la variación de velocidad de deformación a lo largo del radio del plato del reómetro brinda valores que son consistentes con los obtenidos en la simulación (los valores numéricos son prácticamente iguales a los teóricos).

Una posible causa de la gran diferencia entre los resultados experimentales y los computacionales, radica en lo siguiente: con un tamaño de elemento de 0.5 mm, es decir, 8 elementos en el espesor para una profundidad del filete de 4 mm, se obtiene un error del 10%. En el caso de esta extrusora, la profundidad del filete es de 1 mm, por lo tanto se tendrán solamente entre 1 y 2 elementos en el espesor. Luego, la aproximación del perfil de velocidad presentará un error mucho mayor.

Otra causa que también aumenta el error en los resultados computacionales se debe a que en este modelo no se utiliza una ley de viscosidad newtoniana, sino que se utiliza una ley pseudo-plástica.

Para observar de qué manera el número de elementos en el espesor afecta a la solución, se realizó un análisis de convergencia de la solución en función del número de elementos en el espesor mediante una simulación de una sección rectangular de 1 mm de espesor, 5 mm de ancho y, 50 mm de longitud (Figura 8.7). En este caso se utilizaron las propiedades reológicas de un fluido newtoniano con una viscosidad de 100 Pa.seg.



Figura 8.7 Geometría rectangular para la cual se realizo el análisis de convergencia

Debido a que el programa calcula las presiones en función del perfil de velocidades, y que el perfil de velocidades presenta mayores gradientes cuanto menor es el caudal y mayor el número de revoluciones (o en este caso mayor es la velocidad de arrastre en la pared superior), se calculó el error, primero en función del tamaño de malla para la situación de mayor exigencia computacional (mayores gradientes de velocidad) y, posteriormente, se analizó de qué manera se modifica este error en condiciones menos severas.

Como condiciones de mayor exigencia se decidió utilizar un caudal de entrada de 0.01 g/seg. La velocidad de las paredes se calculó utilizando las ecuaciones 6.20 y 6.21, y teniendo en cuenta:

- una velocidad angular de la extrusora de 50 rpm,
- un diámetro del barril de la extrusora de 21 mm,
- un ángulo de filete de 15 grados,

A partir de estos valores se obtiene una velocidad en X de 53mm/seg y, una velocidad en Y de 14mm/seg., para la pared superior.

Es decir, se analizará cómo se modifica la diferencia de presión entre la entrada y la salida, en función del tamaño de elemento usado. En la Tabla 8.E y la Figura 8 se presentan los resultados obtenidos. En dicha Figura se observa que para un tamaño de elementos de 0.005 m, el error cometido es mucho mayor que el 10% (aproximadamente 50 % si se toma como error cero a la solución con menor tamaño de elemento).

Caudal (g/seg)	Presión (Mpa)	h (mm)	Error (%)
0,07	0,295	0,55	58,4507042
0,07	0,485	0,4	31,6901408
0,07	0,637	0,2	10,2816901
0,07	0,71	0,1	0
0,045	0,449	0,55	59,1818182
0,045	0,718	0,4	34,1284404
0,045	0,934	0,2	14,3119266
0,045	1,09	0,1	0
0,01	0,615	0,55	63,1736527
0,01	1,03	0,4	38,3233533
0,01	1,38	0,2	17,3652695
0,01	1,67	0,1	0

Tabla 8.E – Resultados del análisis de convergencia



Figura 8.8 Error vs. 1/Tamaño de elementó

También se observa en la misma figura que a medida que aumenta el caudal, para un tamaño de elemento fijo, se produce una disminución en el error. Esto se debe a que los gradientes de velocidad son menores en la dirección del espesor (eje z), donde existe una menor densidad de elementos. De esta manera, podemos inferir que el error del cálculo de presiones se debe a una mala discretización por una falta de capacidad computacional para captar correctamente los gradientes de velocidad.

Como conclusión de este apartado, es interesante aclarar que si bien los resultados obtenidos por medio de estos dos métodos de simulación solo pueden ser utilizados para cálculos cualitativos, resultan de gran ayuda a la hora de diseñar un nuevo tornillo.

9. ANÁLISIS DE MECANISMO DE FUNCIONAMIENTO DE LOS TORNILLOS CONSTRUIDOS PARA PRODUCCIÓN DE ESPUMAS.

9.1. INTRODUCCIÓN

Las Figuras 9.1.y 9.2 contienen perspectivas de los dibujos en 3 dimensiones de los tornillos construidos para la extrusora de 30 mm que se usará para producción de espumas. Sobre la izquierda puede observarse la zona donde ingresa el sólido a la máquina, vecina a la zona de fusión. Ambos tornillos poseen zonas de transporte de sólidos y de fusión sobre el lado izquierdo de las figuras, análogos a los de las extrusoras convencionales, que deben generar suficiente presión para disolver el agente de expansión inyectado; las diferencias entre ambos se encuentran en las secciones ubicadas a la derecha en las Figuras 9.1y 9.2

Sobre la derecha de la Figura 9.1 (Tornillo 1) se encuentran dos secciones del tornillo con paso más reducido y aberturas en el filete, destinadas a proporcionar mezclado por el flujo de retroceso por presión en las aberturas del filete y a facilitar que el gradiente de presión esté dirigido hacia el extremo del tornillo situado a la derecha. El gradiente de presión dirigido hacia delante es necesario para evitar que el agente de expansión inyectado a alta presión fluya hacia la zona de entrada de sólidos de la máquina. Esta geometría con mezclado en la zona final de líquido debería independizar al proceso del uso de un mezclador estático que en el sistema experimental armado se ubica exactamente a continuación de la bomba de engranajes, para independizar al sistema de las variaciones de temperatura y viscosidad que hacen al sistema de mezclador estático inherentemente inestable.

Sobre la parte media de la Figura 9.2 (Tornillo 2) se encuentra una reducción del diámetro del alma del tornillo, que equivale a un aumento en la sección transversal de la zona de transporte de líquidos. Este detalle se incluyó para permitir una reducción de la presión en esa zona, forzando de esa forma un gradiente de presión hacia delante que impida el retroceso del agente de expansión inyectado. La sección cónica inmediatamente a continuación está destinada a permitir una recuperación de la presión para impedir la desorción del agente de expansión. Este tornillo no incluye una sección de mezclado y necesitara de un mezclador estático a continuación, pero se espera que desarrolle un caudal mayor que el Tornillo 1.



Figura 9.1 Tornillo 1



Figura 9.2 Tornillo 2

9.2. SIMULACIÓN Y ANÁLISIS

Conociendo las limitaciones de nuestra simulación, y comprendiendo bien el comportamiento del polímero dentro de la extrusora, se procedió a modelar dos tornillos de geometría compleja con la finalidad de comparar las variables de procesamiento y el comportamiento (presión versus caudal) de cada uno. La geometría del líquido contenido en el espacio existente entre la camisa de la extrusora y cada tornillo se muestra en las Figuras 9.3 A y 9.3 B.



Figura 9.3 A cavidad interna entre camisa y tornillo 1



Figura 9.3 B cavidad interna entre camisa y tornillo 2

9.2.1. SIMULACIÓN NUMÉRICA

Para la simulación de estos tornillos, al final de cada uno de ellos se incluyó un cabezal de 10mm de diámetro y 30mm de longitud, para usar condiciones de borde de presión atmosférica en ambos extremos de la máquina. En el caso del tornillo que utiliza mezcladores estáticos, se incluyeron éstos entre el cabezal y el tornillo.

Las condiciones de contorno utilizadas en este modelo son análogas a las del capitulo anterior, presión cero a la entrada y salida del fluido y velocidad de rotación de la camisa. Las velocidades de rotación elegidas en estas simulaciones fueron de 1, 2 y 3 revoluciones por segundo.

Las propiedades reológicas de los polímeros utilizados fueron las correspondientes a un polipropileno 2500E y a un 1100N de la empresa Petroquímica Cuyo. Para modelar su reología se utilizó una ley de la potencia. Las propiedades se midieron con un viscosímetro de plato y plato a una temperatura de 200 °C. Dichos valores se presentan a continuación en el gráfico de la Figura 9.4.



Figura 9.4 Viscosidad vs. Velocidad de corte para PP 2500 E y PP 1100N

Luego, los valores de las constantes de ajuste de la ley de la potencia para cada polímero son los siguientes:

Polímero	Constantes		
1100N	n=0,45	c=427	
2500E	n=0,25	c=1235	

Tabla 9.1 Valores de las constantes de ajuste de la ley de la potencia

9.2.2. SIMPLIFICACIÓN DE ZONA SÓLIDA DE MATERIAL.

Cada uno de los tornillos simulados posee en su recorrido varias etapas. La primera de ellas es la de transporte y fundido del polímero. Esta primera sección es difícil de modelar debido a que el material está en estado sólido. Como se mencionó previamente, el software utilizado para la simulación fluido-dinámica del material dentro de la extrusora no permite este tipo de análisis, por lo que se debió hacer la simplificación de modelar solamente la etapa del fundido.

La primera estrategia que se decidió utilizar para aplicar esta simplificación fue comenzar a simular el proceso 10 cm después del inicio del tornillo ("aguas abajo"), considerando que a partir de ese punto todo el polímero se encontraba por encima de la temperatura de fusión. El problema de esta simplificación es que la presión inicial de condición de contorno utilizada (es decir, presión atmosférica a la entrada) no es del todo real, porque la zona de fusión también contribuye a la generación de diferencias de presión inmediatamente después de la entrada. Con esta misma simplificación se modeló la extrusora del capitulo anterior.

La segunda estrategia de simulación elegida fue comenzar a simular 7 cm más adelante de la entrada del polímero, y a partir de ahí, considerar un perfil cónico de espesor de la capa de sólido de aproximadamente unos 15 cm de longitud a lo largo del eje del tornillo, que represente el material polimérico sólido que todavía no fundió. El problema de esta estrategia radica en que supone que inicialmente todo el fluido entra por una sección muy pequeña, lo cual no es exactamente real. No se considera el material que, a medida que se va fundiendo, se suma al fluido.

No obstante, en este segundo caso la condición de presión atmosférica es más realista que en el caso anterior, debido a que el polímero es un medio poroso mientras no se encuentre en estado fundido, y la presión de entrada de los pellets es presión atmosférica. Cabe aclarar que la posición en la cual se encuentra ese punto de presión atmosférica no es sencilla de establecer a priori, y solo se podría medir dicho punto de manera experimental.

9.2.3. RESULTADOS

Los resultados de valores de Caudal y Presión obtenidos en esta simulación se presentan a continuación, en la Tabla 9.2. En la columna *tornillo*, el número 1 corresponde al tornillo que posee una etapa de mezclado (Figura 9.1), mientras que en la columna de *cavidad*, el 1 corresponde a la primera simplificación de la zona sólida (simplificación de 10mm aguas abajo a partir del comienzo del tornillo).

Tornillo	Cavidad	Polímero	Revoluciones (rps)	Caudal (Kg/h)	Presión Máxima (Mpa)	Diferencia de presión entrada- salida (Mpa)
1	2	1100N	1	0,00113	0,64	0,32
1	2	1100N	2	0,0023	0,8	0,39
1	2	1100N	3	0,0035	0,92	0,44
1	1	1100N	1	0,00065	0,37	0,26
1	1	1100N	2	0,00138	0,47	0,33
1	1	1100N	3	0,00213	0,56	0,38
1	2	2500E	1	0,0011	1,1	0,58
1	2	2500E	2	0,0022	1,27	0,65
1	2	2500E	3	0,0033	1,39	0,73
1	1	2500E	1	0,00058	0,67	0,53

1	1	2500E	2	0,0012	0,76	0,61
1	1	2500E	3	0,0018	0,85	0,67
2	2	1100N	1	0,001	1,65	1,6
2	2	1100N	2	0,0022	2,05	1,9
2	2	1100N	3	0,00332	2,28	2,2
2	1	1100N	1	0,00096	1,65	1,5
2	1	1100N	2	0,002	2,01	1,8
2	1	1100N	3	0,0031	2,26	2
2	2	2500E	1	0,001	3,33	3,1
2	2	2500E	2	0,0021	3,71	3,5
2	2	2500E	3	0,0032	3,97	3,6
2	1	2500E	1	0,0009	3,3	2,9
2	1	2500E	2	0,00192	3,65	3,3
2	1	2500E	3	0,00291	3,924	3,4

Tabla 9.2 Resultado de las simulaciones

A partir de los valores contenidos en esta tabla se graficaron en la Figura 9.5 los datos para cada tornillo, polímero y simplificación de zona sólida según corresponda. En una misma serie de datos se encuentran las 3 velocidades de rotación del tornillo (1, 2 y 3 revoluciones por segundo).

De ellos podemos inferir la siguiente conclusión: con un polímero de mayor viscosidad, la diferencia de presión entre la entrada y la salida aumenta si la extrusora entrega caudales similares.

Otra observación de los resultados es que a igual número de revoluciones de la extrusora, la misma entregará para estos dos arreglos de tornillo-cabezal,

aproximadamente el mismo caudal. Sin embargo, las presiones desarrolladas por la segunda configuración tornillo-cabezal (tornillo definido en la Figura 9.2) serán mucho mayores.





En los gráficos de las Figuras 9.6 y 9.7 se presentan las mismas curvas de la Figura 3, pero con un cambio de escala que permite verlos con mayor claridad. Si analizamos la diferencia de los resultados, la geometría usada para la construcción del tornillo 1 es mucho más sensible a la geometría usada para la simplificación geométrica de la zona, posiblemente debido a que la mayor parte de la diferencia de presión generada en este caso se basa en la sección de tornillo al comienzo de la máquina, cercana a la zona de fusión. La geometría usada para la construcción del tornillo 2 contiene dos zonas de generación de presión más alargadas, cónicas, y separadas y alejadas de la zona de fusión, por lo que el efecto de la simplificación usada para el cálculo es menor. Puede inferirse que los diseños del tipo 2 podrán ser estimados con más precisión con este tipo de simplificaciones. Un caso a estudiar sería el de un diseño con una zona de descompresión extra incluida entre la zona de fusión del tornillo 2 y la zona cónica inmediatamente a continuación.





Al analizar el comportamiento de la simplificación de la zona de trasporte de sólido para el tornillo 2, se puede ver que los valores de caudal calculados son similares, mientras que los valores de presión son un poco superiores al del tornillo 1.



Figura 9.7

Finalmente, se presentan dos perfiles de presión obtenidos para cada una de los tornillos (Figuras 9.8 a 9.11). La posición donde se inyecta el agente de expansión se encuentra en muy cercana a la posición de 0.6 m con respecto al comienzo del tornillo. Se puede ver que ambos perfiles de presión tienen el comportamiento esperado, y que si el perfil de presión real se comporta como el calculado, el agente de expansión no retrocederá sino que circulará hacia delante a lo largo del gradiente de presión. Más adelante se verá que el funcionamiento real de la extrusora es como se describe, peor debe tenerse en cuenta que el caudal de líquido que avanza podría disolver pequeñas porciones de agente de expansión que circulen hacia atrás por efecto de las oscilaciones provocadas por la bomba de inyección.



Figura 9.8



Figura 9.9



Figura 9.10



Figura 9.11

10. CONCLUSIONES

- a. Las estrategias utilizadas para verificar el funcionamiento del programa CFX 11.0 permitieron verificar que los resultados –en forma de perfiles de velocidades y de presiones en sistemas simples- son correctos si el tamaño de los elementos utilizados es suficientemente pequeño. Los resultados obtenidos para el modelado de mediciones de viscosidad en el reómetro de platos paralelos dan valores exactos dentro del error esperable a partir del ajuste de la curva real de viscosidad con una expresión como la Ley de la Potencia, que sobreestima exponencialmente la viscosidad a las bajas velocidades de deformación por cizalla que aparecen cerca del centro de los platos del reómetro. La integración analítica de las ecuaciones de movimiento para esta geometría da resultados idénticos a los de la simulación.
- b. Los resultados obtenidos para la simulación del funcionamiento de la extrusora de diámetro pequeño (20 mm) permiten identificar dos fuentes de error, que son la geometría asumida para el lecho de material sólido al comienzo de recorrido a lo largo del tornillo y el tamaño de los elementos (dimensiones de la malla) usados para la simulación. Aún así, los resultados son cualitativamente correctos, obteniéndose cambios en los valores predichos para presiones y caudales que varían con la velocidad de rotación del tornillo en forma corroborada por el ensayo experimental.
- c. Aún con las diferencias observadas para los valores locales de presión, los perfiles de presión calculados con las simulaciones numéricas son cualitativamente correctos en el sentido que: 1) predicen un máximo de presión en la zona en que se colocó la entrada para inyección del agente de expansión, y 2) ubican correctamente la zona de mayor presión, con un gradiente de presión dirigido hacia delante del tornillo. Estos dos detalles se verifican en las corridas experimentales, ya que no se observa que el agente de expansión fluya hacia la entrada de material sólido.
- d. Analizando la diferencia de los resultados obtenidos por simulación para los dos tornillos de diámetro 30 mm podemos concluir que la geometría usada para la construcción del tornillo 1 es mucho más sensible a los detalles de la suposición usada para la simplificación geométrica de la zona de ingreso de material sólido a la extrusora, posiblemente debido a que la mayor parte de la

diferencia de presión generada en este caso se basa en la sección de tornillo al comienzo de la máquina, cercana a la zona de fusión. La geometría usada para la construcción del tornillo 2 contiene dos zonas de generación de presión más alargadas, cónicas, y separadas y alejadas de la zona de fusión, por lo que el efecto de la simplificación usada para el cálculo es menor. Puede inferirse que los diseños del tipo 2 podrán ser estimados con más precisión con este tipo de simplificaciones.

 e. Sugerido por la conclusión anterior, puede señalarse cono un caso a estudiar el de un diseño de tornillo con una zona de descompresión extra incluida entre la zona de fusión del tornillo 2 y la zona cónica inmediatamente a continuación. La zona inmediatamente delante de la zona de descompresión funcionaría solo con líquido, y la precisión del método de simulación pasaría a ser entonces función solamente del tamaño y número de elementos usados. 11. TRABAJOS FUTUROS

12. **REFERENCIAS**

1)- K. A. Arora, A. J. Lesser, and T. McCarthy, "Preparation and Characterization of Microcellular Polystyrene Foams Processed in Supercritical Carbon Dioxide", Macromolecules 31, 4614-4620 (1998).

2)- A. R. Berens, G. S. Huvard, "Supercritical Fluid Science and Technology", K. P. Johnston and J. M. L. Penniger, Eds. American Chemicalsociety, Washington DC, (1989), 207-253.

3)- L. Chen, H. Sheth, and R, Kim, "Gas Absorption with Filled Polymer Systems", ANTEC 2000 Proceedings, 1950-1954.

4)- D. G. Baird and D. I. Collias, "Polymer Processing, Principles and Design", John Wiley & Sons, New York (1998), 213-240.

5)- J. F. Agassant, P. Avenas, J. Ph. Sergent, and P. J. Carreau, "Polymer Processing, Principles and Modeling", Hanser Publishers, New York (1991), 189-220.

6)- M. J. H. Bulters and P. H. M. Elemans, "The Influence of Screw Design on the Stability of a Reactive Twin-Screw Extrusion Process" ANTEC 2001

7)- X. Han, K. W. Koelling, D. L. Tomasko, and L. J. Lee "Process optimization in microcellular foam extrusion" ANTEC 2001 Proceedings.

8)- S. G. Kazarian "Polymer Processing with Supercritical Fluids" Polymer Science Ser. C, Vol 42, No 1, 78-101, (2000)

9)- Y. Yuan and F. Shutov, "Double Foam-in-Foam Polymer Materials", ANTEC 2001 Proceedings

10)- M. Xanthos, R. Dhavalikar, V. Tan, S. K.Dey, and U. Yilmazer, "Properties and Applications of Sandwich Panels Based on PET Foams", ANTEC 2000 Proceedings, 1886-1890..

11)- ProceedingsR.Koningsveld, W.H.Stocmeyer and Nies, "Polymer Phase Diagrams" Oxford University Press, (2001) 12)- Marco Dondero, José Carella and Julio Borrajo "(CO2 + 2-propanol) mixture as a foaming agent for polystyrene: A simple thermodynamic model for the high pressure VLE-phase diagrams taking into account the foam vitrification". ,, Journal of Applied Polymer Science, 104(4), 2663-2671 (2007) - ISSN: 0021-8995

13)- Aldao, Celso "On the net radiation metered for heat transfer". European Journal of Physics 24, 81-89 (2003)