



13
2a

Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUIMICA

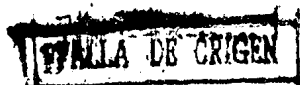
ANALISIS DEL PROCESO DE EXTRUSION



COLEGIO DE INGENIEROS QUÍMICOS

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A
ALFREDO BASTIDA MIRA

MEXICO, D.F.



1990



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

I N D I C E

	Pág.
Introducción	3
 Capítulo I: El Extrusor Plastificador	 6
I.1 Historia	7
I.2 El Extrusor de Tornillo Simple	7
I.3 Extrusor Plastificador y Extrusor de Fundido	10
 Capítulo II: Conceptos Básicos para el Procesa- miento de Termoplásticos	 12
II.1 Materiales Poliméricos	13
II.2 Polímeros Artificiales	14
II.3 Termoplásticos y El Proceso de Extrusión	18
II.4 Morfología	18
II.5 Reología	20
II.6 Presurización	25
II.7 Modelo de Flujo entre Platos Paralelos	26
 Capítulo III: Descripción del Modelo Básico de Tadmor para el Proceso de Extrusión ..	 28
III.1 Antecedentes	29
III.2 Fundamento Teórico	30
III.3 La Bomba de Tornillo	35
III.4 Geometría del Extrusor	39
III.5 Aspectos Prácticos en la Operación de un Extrusor	43

III.6	Deducción del Modelo Básico de Tadmor para el Proceso de Extrusión	48
III.6.1	Zona de Transporte de Sólidos	48
III.6.2	Zona de Plastificación	59
III.6.3	Zona de Bombeo	67
III.7	Conclusiones	69
Capítulo IV:	Estudio de Programas de Computo Existentes del Proceso de Extrusión . . .	70
IV.1	Antecedentes	71
IV.2	Aspectos Básicos Generales	72
IV.3	Modelo Newtoniano	74
IV.4	Algoritmo de Cálculo del Modelo Newtoniano	77
IV.5	Conclusiones sobre el Modelo Newtoniano	86
IV.6	Modelo Newtoniano Modificado	87
IV.7	Modelo no-Newtoniano	89
	- Perfil Lineal de Temperatura	91
	- Perfil no-Lineal de Temperatura	94
IV.8	Cálculo de Potencia para la Fusión	98
IV.9	Descripción de los Programas de Computadora Publicados en la Literatura	102
IV.9.1	Planteamiento Inicial	102
IV.9.2	Análisis del Programa 1 (Modelo Newtoniano)	107
	- Observaciones	127
IV.9.3	Análisis del Programa 2 (Modelo No-Newtoniano)	128
	- Observaciones	183
IV.10	Acople de Subrutinas Adicionales al Programa 2	186
IV.10.1	Función de Error	187

	Pág.
IV.10.2 Modelos de Carreau y Muensted para Viscosidad	188
IV.10.3 Paquete de Graficación	191
IV.11 Análisis de Tolerancia y Mensaje de Error para el Programa 2	196
Listas de Variables	206
Capítulo V: Discusión de Resultados y Conclu- siones	209
V.1 Antecedentes	210
V.2 Análisis de Sensibilidad de Párame- tros para los Programas 1 y 2	210
V.3 Confrontación Experimental	223
V.4 Conclusiones	235
Apéndice A	237
Apéndice B	243
Apéndice C	248
Bibliografía	252

I N T R O D U C C I O N

Actualmente, la industria procesadora de materiales plásticos es la mas vasta. Según datos publicados en septiembre de 1989 - (7), la comercialización de los polímeros artificiales registró 57 billones de libras vendidas en los Estados Unidos; esto es -- justificable si consideramos las ventajas que ofrecen estos mate_ riales:

- Buena resistencia a la corrosión
- Altos módulos de elasticidad
- Facilidad para ser moldeados a cualquier forma

Existen diversos métodos industriales para la obtención de pro ductos plásticos. De entre todos ellos destacan, principalmente:

- a) Inyección-Moldeo
- b) Moldeo estructural por espumado
- c) Moldeo por soplado
- d) Extrusión
- e) Termoformado

Aún cuando cada uno de ellos tiene un uso específico (depen diendo del artículo por obtener), todos ellos requieren de la in tervención, en un momento dado, de un extrusor de tornillo simple. Es

te equipo, basado en el principio de un husillo que gira dentro de un cilindro a una temperatura más alta, se utiliza para transformar los gránulos de plástico sólido en líquido, empujando éste a través de una boquilla a presiones elevadas para darle su forma final.

Con base en lo anterior es evidente que la extrusión es un proceso con gran arraigo industrial. No obstante, la mayor parte de este tipo de maquinaria se opera, y muchas veces se diseña, en forma empírica. Esta manera de trabajar "a posteriori" es satisfactoria cuando se conocen los materiales y sus futuras aplicaciones. Con el advenimiento de nuevas resinas, de modificaciones en los procesos existentes y con la tendencia hacia maquinaria de producción elevada, los métodos de operación y de diseño por prueba y error se vuelven sumamente costosos. Esto debido a la enorme cantidad de tiempo, esfuerzo y materia prima despreciada.

Con vistas a minimizar tales problemas, la implantación de un simulador es un recurso factible de utilizarse. El modelo matemático que sirva de base para tal simulador, ayudará a encontrar las condiciones óptimas de operación, las características geométricas adecuadas del equipo y las variables de control del proceso.

Durante la operación de un extrusor plastificador se distinguen tres zonas (transporte de sólidos, plastificación y transporte de fundido), mismas que han sido modeladas matemáticamente por separado y también en forma integral.

El primer modelo matemático desarrollado, y que ha servido de punto de partida para otros nuevos, es el propuesto por Zehev Tadm_or; se trata de un modelo muy completo aunque muy simplificado. No obstante, a pesar de la existencia de una gran cantidad de -- ecuaciones matemáticas, la conformación de un paquete de cómputo para simulación no se ha hecho propiamente.

El objetivo de este trabajo de tesis es dar un primer paso hacia la elaboración de un programa simulador del proceso de extrusión. Para ello se recurre al análisis de programas publicados en la bibliografía especializada con vistas a volverlos accesibles a cualquier usuario. Cabe resaltar que la deducción del algoritmo utilizado en tales paquetes de cómputo puede ser de gran utilidad para el desarrollo de nuevos y mejores modelos matemáticos.

CAPITULO I
EL EXTRUSOR PLASTIFICADOR

CAPITULO I
EL EXTRUSOR PLASTIFICADOR

I.1 Historia

El proceso de extrusión consiste en forzar a un material a pasar a través de una boquilla para adquirir una forma determinada. La primera máquina extrusiva consistía de una combinación de boquilla con émbolo inventada por Joseph Bramah en 1795. Sin embargo, la patente de la primera extrusora de tornillo simple, se le concedió a Gray en Inglaterra y a Royle en los Estados Unidos de Norteamérica. (2)

A partir de mediados del siglo XIX, este equipo se utilizó para extruir guta-percha (hule), nitrato de celulosa y caseína. El PVC se sometió a este proceso a partir de 1925.

El primer extrusor desarrollado para materiales termoplásticos apareció en 1934 y fue fabricado por Troester en Alemania.

I.2 El Extrusor de Tornillo Simple

Un extrusor de tornillo simple consiste, fundamentalmente, de cinco partes:

- Tolva
- Barril

- Husillo
- Sistema de Calefacción
- Boquilla*

*Todas ellas ilustradas en el siguiente esquema

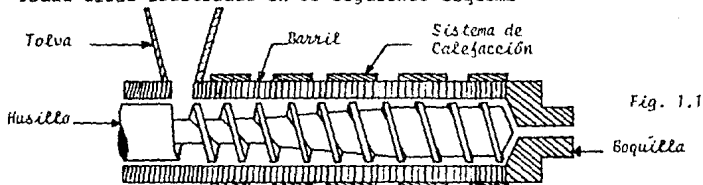


Fig. 1.1

- Tolva: En ella se alimenta el material por procesar. Este aditamento requiere de características adecuadas, dependiendo de tipo de material a extruir. Es importante resaltar que esta sección del equipo requiere de refrigeración para evitar que el polímero se apelmace a la entrada del barril.
- Barril: Junto con el husillo, constituye el sistema de transporte, plastificación y presurización del polímero; por ello requiere ser fabricado con materiales altamente resistentes al desgaste y buenos conductores del calor.
- Husillo: Para efectos de transporte y presurización, existen diferentes tipos de husillos de acuerdo con las propiedades físicas del polímero por extruir y de las características requeridas del extruido.

- Sistema de Calefacción:

El calentamiento del barril o cilindro puede realizarse en diversas formas: resistencias eléctricas, chaquetas de vapor, baños de aceite, etc. Evidentemente, el tipo de sistema calefactor se especificará con base en las dimensiones globales del equipo.

- Boquilla: El extrusor de tornillo simple, puede formar parte de procesos como inyección moldeo, moldeo por soplado o termoformado. Sin embargo, por sí sólo es de mucha utilidad para la elaboración de una gran cantidad de perfiles como mangueras, películas, bolsas, tubos, recubrimientos para cables, etc.; en todos estos últimos la boquilla juega un papel preponderante. El diseño de una boquilla de extrusión presenta dos tipos de problemas, por un lado encontrar las dimensiones convenientes para conseguir una óptima velocidad de producción, con una presión determinada en la boquilla y por otro lado encontrar la forma de los conductos (sección transversal) adecuada y las dimensiones necesarias para conseguir la forma, tamaño y acabado necesarios en el artículo extruído.

I.3 Extrusor Plastificador y Extrusor de Fundido

Para la operación de un extrusor de tornillo simple, puede alimentarse el material polimérico en estado sólido (gránulos), en cuyo caso el equipo se denomina Extrusor Plastificador. Cuando se alimenta el polímero fundido se denomina Extrusor de Fundido.

El extrusor plastificador desarrolla dentro de sí los procesos de plastificación o fundido, transporte, mezclado y presurización del polímero, mientras que el extrusor de fundido solo realiza los tres últimos. Por esto resulta evidente que el plastificador tiene mayor aplicación industrial.

Ante la necesidad de modelarse matemáticamente, por las razones expuestas en la introducción de esta tesis, el extrusor de -- fundido no ofrece grandes dificultades pues maneja el material en estado líquido. Por el contrario, el extrusor plastificador es difícil de modelar pues maneja polímero sólido y polímero fundido simultáneamente.

I.4 Objetivos

La simulación del proceso de extrusión con equipos de tornillo simple puede ser una herramienta de gran utilidad hacia la optimización del proceso.

Para tener un paquete simulador, se tomará como punto de parti

da el estudio del modelo de Tadmor con vistas a:

1. Identificar las suposiciones simplificadoras y limitaciones del mismo.
2. Visualizar su sentido práctico mediante el análisis de programas de cómputo basados en su teoría.
3. Verificar experimentalmente la validez de los resultados -- proporcionados por dichos programas.

De esta forma, el presente trabajo de tesis se constituye como el primer paso fundamentado hacia la consecución de un paquete si mulador de la extrusión.

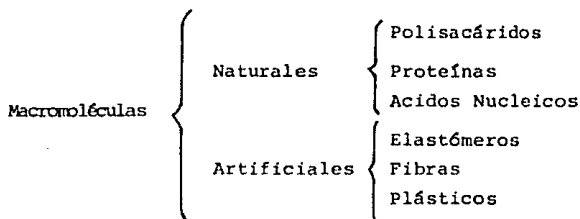
CAPITULO II
CONCEPTOS BASICOS PARA EL PROCESAMIENTO DE
TERMOPLASTICOS

CAPITULO II
CONCEPTOS BASICOS PARA EL PROCESAMIENTO DE
TERMOPLASTICOS

II.1 Materiales Poliméricos

Para el procesamiento industrial de cualquier tipo de material es imprescindible un conocimiento, lo más amplio posible, de sus propiedades físicas y químicas.

Dentro de los materiales existentes, aquellos que en los últimos años han presentado una gran versatilidad y han encontrado un sinnúmero de aplicaciones son los constituidos por macromoléculas. Dichas macromoléculas pueden presentarse en la naturaleza o bien sintetizarse en forma artificial. (8) Visualizando esto esquemáticamente tenemos:



Es evidente que la versatilidad y aplicabilidad a que me refiero no es con respecto a las macromoléculas naturales, mismas que son imprescindibles para la vida misma, sino alusiva a las artificiales

cuya gama de propiedades físicas y químicas es muy basta.

La principal característica de las macromoléculas es su gran tamaño, determinado por la unión de cientos de miles de átomos, arreglados en unidades básicas conocidas como monómeros, y que se repiten gran cantidad de veces. Esto determina que las propiedades químicas de los materiales constituidos por macromoléculas o materiales poliméricos no presenten gran variación para una estructura monomérica dada. De esta forma puede concluirse que son las propiedades físicas las que determinan las funciones especiales de un polímero.

II.2 Polímeros Artificiales

Una vez que se tiene una estructura monomérica determinada, las propiedades físicas de un polímero pueden modificarse de - dos maneras principales:

- a) A partir de soluciones de monómero
- b) A partir de polímeros fundidos

La síntesis de nuevos polímeros en ambos métodos conducirían, si se desarrollaran en forma ideal, a una conformación regular de la forma:



Fig. 2.1

Esta conformación básica o ideal, debido a su regularidad, posee un valor bajo de entropía. Por otra parte, permite un buen empaquetamiento entre varias macromoléculas y, como consecuencia, la existencia de puentes de hidrógeno, interacciones dipolo-dipolo y fuerzas de van der Waals, lo que se traduce en un valor grande de entalpía. La repetición de esta conformación ideal proporciona cristalinidad al material.

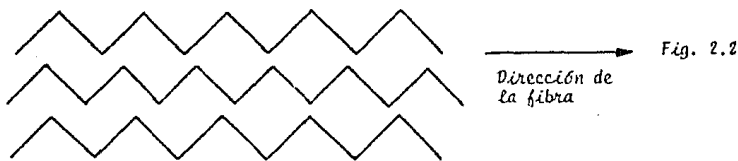
Sin embargo, es imposible lograr que un material esté formado únicamente por dicha estructura básica, es decir, que sea cien por ciento cristalino. Ya sea en solución diluida o en estado fundido, la molécula de polímero está en movimiento continuo debido a su energía térmica y adquiere muchas conformaciones diferentes en rápida sucesión. Al efectuarse la solidificación del material polimérico, aumenta la viscosidad del mismo, lo que obstaculiza el movimiento de las macromoléculas, provoca que se enreden y no se tenga el arreglo regular necesario para la formación del cristal.

Como resultado, el sólido obtenido poseerá regiones irregulares o amorfas y regiones cristalinas denominadas cristalitos. La cantidad de cristalitos que posee un material polimérico se expresa como grado de cristalinidad.

Aunado al grado de cristalinidad de el material, la gran variedad de conformaciones que el polímero puede poseer, determina sus propiedades físicas y sus funciones, mismas que pueden clasificarse en tres tipos:

- Fibras
- Elastómeros
- Plásticos

Las fibras están constituidas por moléculas alargadas, delgadas y filiformes mismas que permiten un alineamiento paralelo y la existencia de fuerzas intermoleculares fuertes que mantengan esta alineación. Su resistencia reside en la fuerza de los enlaces químicos de las cadenas:

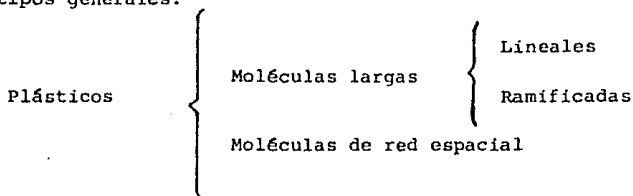


Las fibras poseen un valor bajo de entropía y alto de entalpía, pues poseen regularidad en su estructura.

Los elastómeros son compuestos que también poseen moléculas largas y delgadas pero que se encuentran arregladas en forma más aleatoria. Las cadenas alargadas se conectan entre sí por enla-

ces cruzados ocasionales que son lo suficientemente fuertes para evitar el deslizamiento de moléculas pero no muy rígidos para conferir elasticidad al material. Los elastómeros no poseen sustituyentes fuertemente polares o lugares aptos para puentes de hidrógeno, esto provoca que la entalpía sea baja y, debido a su aleatoriedad, una entropía alta.

Por último, los plásticos son los materiales poliméricos que mayor aplicación han tenido. Su estructura molecular es de dos tipos generales:



Los plásticos de moléculas largas pueden incluir materiales que se usan como Fibras. Estos materiales se ablandan por calentamiento, por lo que se conocen como termoplásticos y son los materiales susceptibles de moldearse y extruirse.

Los plásticos de red espacial son básicamente moléculas con enlaces cruzados en todas direcciones, son irregulares y rígidos. El calentamiento puede generar más enlaces covalentes y volver más rígido al material.

II.3 Termoplásticos y el Proceso de Extrusión

Como ya mencioné en la sección anterior, los materiales útiles para el proceso de extrusión son los denominados termoplásticos. Las características que tienen de ablandarse (e incluso fundirse) por calentamiento así como su gran viscosidad en estado líquido los hace adecuados para procesarse por medio de extrusores de - tornillo simple.

Un estudio completo del proceso de extrusión, a partir del - cual se deriven modelos matemáticos adecuados, debe también fundamentarse en características generales de los polímeros referen - tes a:

- Morfología
- Reología
- Presurización

II.4 Morfología

Los materiales termoplásticos como todos los compuestos poli-
méricos, presentan arreglos geométricos que pueden dividirse en
dos grandes categorías:

- a) Configuraciones: son arreglos determinados por enlaces quí-
micos en la molécula tales como cis y trans o d y l. Es-
tas configuraciones no pueden ser alteradas a menos que -

los enlaces sean rotos o reformados.

- b) Conformaciones: se forman por la rotación de enlaces simples que pueden presentar las macromoléculas tanto en solución como en estado fundido.

El proceso de extrusión en seco que se verifica en los extrusores plastificadores involucra el tratamiento de polímeros fundidos. Sin embargo, es importante resaltar, que el equipo de extrusión sólo es responsable en un 25% de las propiedades finales del producto, un 50% corresponde a los métodos de captación, conformado y enfriamiento y el 25% restante de las propiedades específicas del polímero.

Con base en lo anterior, puede concluirse que la extrusión no afecta en forma alguna a las configuraciones y que sólo afecta en parte a las conformaciones.

Por lo tanto, no es necesario analizar con profundidad los conceptos morfológicos de materiales poliméricos. No obstante, es necesario tener cuidado con la temperatura de operación del extrusor pues, si es demasiado alta, se corre el riesgo de degradar el material.

Para el caso de polímeros amorfos es muy importante el conocimiento de la temperatura de transición vítrea T_g .

II.5 Reología

Etimológicamente, la palabra "reología" proviene de la palabra griega "rheos" que significa "el estudio de flujo". Es la ciencia que se ocupa de la deformación y flujo de la materia.

La morfología de los polímeros, descrita en la sección anterior, estudia la estructuración de los mismos al ser sometidos a tratamientos térmicos. Por su parte, la reología analiza el comportamiento de dichos materiales al ser deformados. Debido a lo anterior, dos conceptos básicos para el estudio reológico de un material son los de deformación y flujo.

Se dice que un cuerpo se deforma cuando, al ser sometido a un sistema apropiado de fuerzas, altera su tamaño y forma. En forma similar se dice que un cuerpo fluye cuando el grado de deformación cambia continuamente con el tiempo.

La operación de un extrusor de tornillo simple (plastificante o de fundido) se basa en la presurización viscosa dinámica del material mediante deformación del mismo. Un equipo de esta naturaleza debe ser versátil y el modelo que represente su comportamiento necesita fundamentarse en las propiedades reológicas del polímero a procesar.

Los materiales poliméricos ya sean sólidos o fundidos, res-

ponden a cualquier estímulo que los lleve fuera de su estado de equilibrio. De esta forma, dichos materiales responderán de cierta manera al someterse a deformación; la evaluación de tal respuesta se da por medio de una ecuación constitutiva.

La extrusión por medio de un husillo es un ejemplo muy claro de la aplicación de los fenómenos de transporte, en particular, en lo referente a transferencia de momentum y de calor, de allí que las leyes de Newton y de Fourier sean consideradas como puntos de partida para el desarrollo de modelos matemáticos que simulen el comportamiento de un extrusor.

La Ley de Newton es una ecuación constitutiva lineal:

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \underline{\underline{D}}$$

donde $\underline{\underline{\tau}}$ = tensor de esfuerzos

μ = viscosidad

$\underline{\underline{D}}$ = tensor rapidez de deformación*

*que representa el comportamiento reológico de los fluidos denominados Newtonianos.

Un fluido newtoniano es aquel que, al ser sometido a una variación de esfuerzo, mantiene un valor constante de viscosidad, mismo que sólo puede modificarse por cambios en la presión y en

la temperatura. Dicha dependencia con P y T es aproximadamente la siguiente:

$$\mu(T, P) = \mu_0 \exp \frac{\Delta E}{R} \left[\frac{T_0 - T}{T_0 T} \right] \exp \beta (P - P_0)$$

donde: μ_0 = Viscosidad a T_0

T_0, P_0 = Temp. y presión de referencia

E = energía de activación para flujo

β = propiedad del material

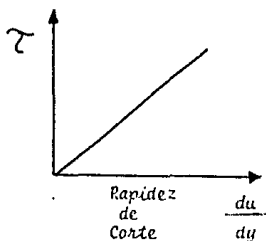
R = constante de los gases

Es muy importante resaltar que, antes de manejar polímero fundido, un extrusor plastificador maneja partidas sólidas, cuya ecuación constitutiva ideal está dada por la Ley de Hooke.

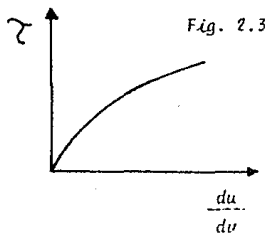
Entre los extremos de sólidos simples Hookeanos y los fluidos Newtonianos, se encuentran materiales de gran importancia -- práctica. Estos materiales se caracterizan porque su comportamiento de flujo no obedece a la Ley de Newton y por ello reciben el nombre de fluidos no-Newtonianos.

Los fluidos no-Newtonianos, a diferencia de los Newtonianos, poseen una viscosidad que es función de la rapidez de corte. Esto se ilustra en las siguientes gráficas:

Esfuerzo
de
Corte



Newtoniano



No Newtoniano

Fig. 2.3

De esta forma, los fluidos no-Newtonianos pueden clasificarse de acuerdo a la manera en que su viscosidad varía con la rapidez de corte:

Fluidos
no
Newtonianos

Bingham
Pseudoplásticos
Dilatantes

Los plásticos Bingham sufren deformación cuando alcanzan un punto de cedencia debido al esfuerzo aplicado.

Por su parte, los materiales dilatantes son aquellos en los cuales la viscosidad se incrementa con la rapidez de corte.

Por último, los materiales pseudoplásticos son tales que la

viscosidad disminuye con la rapidez de corte pero el material se deforma tan pronto como el esfuerzo de corte es aplicado. Debido a que todos los polímeros fundidos siguen este comportamiento, esta clase de materiales tiene el más amplio rango de aplicación industrial.

Esquemáticamente, todo lo anterior se representa de la siguiente forma:

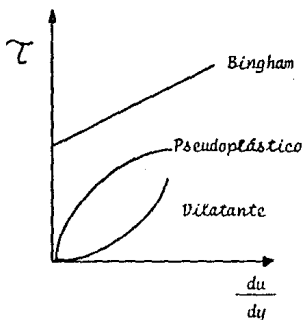


Fig. 2.4

Debido a la enorme importancia de los fluidos no-Newtonianos, se han desarrollado modelos matemáticos como la Ley de Potencias, de modelo de Prandtl-Eyring y el de Sisko que se basan en la aplicación de un factor de corrección a la Ley de Newton.

Los modelos matemáticos elaborados para simular el comporta-

miento de un extrusor se basan en algunos de tales modelos y por ello se tratarán posteriormente con mayor detalle.

II.6 Presurización

La extrusión en forma conceptual, es el proceso por medio del cual se forza a un fluido a pasar a través de un molde o boquilla.

Obviamente, para poder lograr tal objetivo, es necesario el aplicar cierta presión al material que sea suficiente para vencer las resistencias por fricción y viscosidad que se presentan en su flujo de avance.

La presurización de un material, ya sea en estado sólido o fundido, puede efectuarse de dos maneras:

- a) Presurización Estática: se da sin necesidad de que se presente movimiento en las paredes del recipiente que contiene al fluido. El nivel de presurización que se alcanza por éste método es independiente de las propiedades reológicas del fluido. El ejemplo más claro de este método es el de un émbolo con pistón.
- b) Presurización Dinámica: se basa en la inducción de un gradiente interno de presión en el fluido, por medio de -

flujo y deformación en el mismo. El modelo de flujo entre platos paralelos es el fundamento teórico de este método de presurización.

Los polímeros fundidos son materiales que se caracterizan por su elevada viscosidad. Esta propiedad los hace adecuados para ser sometidos a presurización viscosa dinámica misma que se describe a continuación junto con el modelo de flujo entre platos paralelos.

II.7 Modelo del Flujo entre Platos Paralelos

El aspecto característico fundamental de la presurización viscosa dinámica es la existencia de una superficie externa que se mueve paralela a sí misma sin desplazar a una masa de polímero fundido. Dicha masa se encuentra solo adyacente a dicha superficie.

Con base en lo anterior, el modelo de flujo entre platos paralelos consiste en dos superficies planas en movimiento relativo albergando entre ellas a un polímero fundido. Esquemáticamente:

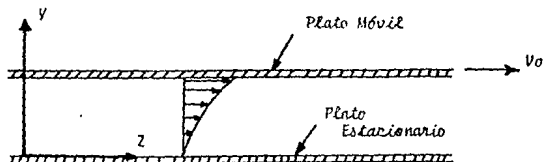


Fig. 2.5

El plato superior o plato móvil arrastra al fundido adyacente y le transfiere cierta cantidad de momentum. A su vez, dicha capa realiza una operación similar con la capa siguiente y así sucesivamente. De esta forma se tiene una transferencia de momentum en la dirección del eje Y que genera un perfil de velocidades.

Las suposiciones fundamentales del modelo son:

- Los platos son infinitos en la dirección X
- La longitud de la dirección Z es suficiente para tener un perfil de velocidades estacionario
- Para generar presión, el colocar una válvula que obstruya la salida de material en el extremo del eje Z presenta dos condiciones: a descarga abierta (no hay presurización y se da flujo por arrastre puro) y a descarga cerrada (máxima presurización).

En la práctica, no pueden tenerse platos de longitudes infinitas; por ello, utilizando un cilindro y un tornillo es posible obtener un efecto de transporte similar al de flujo entre platos paralelos. Este es el principio de operación de un extrusor de tornillo simple.

En el capítulo siguiente se tratarán los principios teóricos de operación de un extrusor plastificador y se analizarán los modelos matemáticos básicos propuestos por Zehev Tadmor.

CAPITULO III
DESCRIPCION DEL MODELO BASICO DE TADMOR PARA EL
PROCESO DE EXTRUSION

CAPITULO III
DESCRIPCION DEL MODELO BASICO DE TADMOR PARA EL
PROCESO DE EXTRUSION

III.1 Antecedentes

El procesamiento de termoplásticos engloba una amplia gama de actividades que varían, fundamentalmente, de acuerdo al tipo de producto que desea obtenerse.

Sin embargo, casi en cualquier proceso que involucre la transformación de un material polimérico, la extrusión constituye un paso intermedio muy importante.

El diseño de cualquier equipo en todo proceso, parte de un fundamento teórico que se deriva del análisis de los fenómenos que se observan y de su representación por medio de modelos matemáticos. Dichos modelos pueden ser tan simples o complicados según la precisión requerida en los cálculos realizados con ellos.

No obstante, el fundamento teórico mencionado arriba casi nunca es completamente práctico y se hace necesario expresarlo matemáticamente en términos de cantidades fáciles de medir experimentalmente para, de esa forma, poder corroborar la validez del modelo.

La secuencia a seguir en el desarrollo del presente capítulo parte de la descripción del fundamento teórico y de la deducción de los modelos matemáticos, continúa con el diseño de un extrusor plastificador simple y el estudio de sus características geométricas y operativas, finalizando con la presentación del modelo global.

III.2 Fundamento Teórico

La extrusión, en forma conceptual, es el proceso por medio del cual se fuerza a un material a pasar a través de un dado o boquilla. En el caso específico de materiales poliméricos, el proceso se realiza con materiales fundidos.

Dado que el objetivo principal es el de forzar al material a que fluya a través de una boquilla, se hace necesario presurizar al material de alguna manera práctica. Como se observó en el capítulo anterior, existen dos formas de presurizar a un fluido y sólo una de ellas es aplicable al verificarse movimiento: La presurización dinámica.

El flujo y la deformación de un material, genera gradientes internos de presión y velocidad, que pueden tener alguna aplicación práctica. En el caso específico de los polímeros fundidos, su gran viscosidad característica los hace adecuados para tales objetivos.

El modelo de flujo entre platos paralelos permite visualizar fácilmente como se genera el gradiente interno de velocidades en el material:

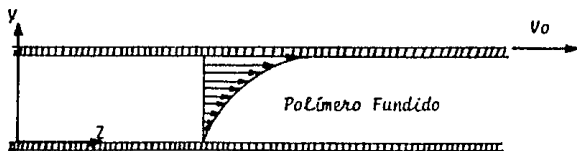


Fig: 3.1

El plato superior se encuentra moviéndose a una velocidad V_0 , mientras que el plato inferior se encuentra estacionario. La capa del fluido adyacente al plato superior tendrá prácticamente la misma velocidad V_0 pero, debido a la gran viscosidad del material, las capas de fluido inferiores irán presentando velocidades menores hasta que, en la capa adyacente al plato inferior, la velocidad es mínima e igual a cero.

El campo de velocidades para tal sistema tendrá las siguientes componentes:

- a) No existe Flujo de material en la dirección normal al plano de esta página, por tanto, la velocidad en la dirección X es igual a cero ($V_x = 0$).
- b) Tampoco existe desplazamiento en la dirección del eje Y y tenemos que $V_y = 0$.

- c) Por último y como puede verse en la figura, se presenta desplazamiento de material en la dirección Z del sistema de coordenadas. Sin embargo dicho movimiento no se da con la misma velocidad a lo largo del eje "y", esto determina que la velocidad V_z es función de la posición en tre ambos platos, por tanto, $V_z = V_z(y)$.

Es muy conveniente recordar del capítulo anterior las suposiciones fundamentales del modelo:

- Placas infinitas en la dirección X.
- Longitud en la dirección Z suficiente para tener un perfil de velocidades estacionario.
- Las placas son lo suficientemente largas en la dirección Z para despreciar los efectos de entrada y de salida.

Ahora bien, en el esquema anterior únicamente se visualiza el perfil de velocidades y aparentemente no se tiene ninguna relación con la presión del sistema. Para verlo se debe recurrir al análisis de la ecuación de movimiento en coordenadas rectangulares: (para un fluido Newtoniano de viscosidad μ)

$$\text{Componente } x: \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right)$$

$$\text{Componente } y: \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) = \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right)$$

$$\text{Componente } z: \rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) = - \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} \right)$$

Como primer paso se eliminaron los términos en función de Z por la presencia de un perfil de velocidades completamente desarrollado en dicha dirección. Ahora, con base en el campo de velocidades deducido anteriormente, se realizan las siguientes eliminaciones:

$$\text{Para componente } x \quad \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \quad \text{puesto que } v_x = v_y = 0$$

$$\text{Para componente } y \quad \frac{\partial P}{\partial y} = 0 \quad \text{puesto que } v_x = v_y = 0$$

$$\text{Para componente } z \quad \frac{\partial P}{\partial z} = \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} \right) \quad \text{puesto que } v_z = v_z(y)$$

De esta última ecuación se deduce que el perfil de presiones a lo largo del eje z es función de la segunda derivada de la velocidad del fluido en dicha dirección. Por tanto, la generación de un gradiente interno de velocidades en el fluido induce la presurización del material en la dirección de flujo.

Las ecuaciones que representan a cada una de las componentes de la ecuación de movimiento constan de dos partes:

- Los términos del lado izquierdo representan la aceleración que el fluido presenta en su movimiento. (inercia)
- Los términos del lado derecho representan las fuerzas viscosas que actúan sobre el sistema durante el flujo.

El caso especial de los polímeros fundidos se caracteriza por que durante su flujo, los términos de inercia tienen un efecto - despreciable respecto a las fuerzas viscosas (a razón del orden de 10^{-5}), de allí se deriva que este tipo de presurización también se denomine como presurización viscosa dinámica.

Como puede observarse fácilmente, la integración de la componente z de la ecuación de movimiento es muy sencilla puesto que, debido a que mientras el lado izquierdo es función de z , el derecho es función de y , ambos lados de la ecuación son iguales a una constante y de allí es fácil obtener el perfil de velocidad:

$$v_z = \frac{\dot{\gamma}^2}{2\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) + C_1 y + C_2 \quad \text{Ec. 3.1}$$

Cabe resaltar que de igual forma podría conocerse el perfil de presiones a lo largo de la dirección z .

Hasta el momento ha sido fácil visualizar como se induce la presurización del fluido cuando se encuentra en movimiento laminar. Sin embargo, para hacer a este modelo teórico más completo,

debe considerarse la situación en que se coloca una obstrucción regulable o válvula al final de la dirección 2.

Si dicha válvula se encuentra totalmente abierta, obvio es pensar que el flujo que se tendrá será el máximo y no habrá caída de presión. Esta situación se denomina como flujo por arrastre puro.

Por otra parte, si la válvula se encuentra cerrada por completo se alcanzará el máximo gradiente de presión y no habrá flujo de material. A este caso se le conoce como flujo por presión.

Para situaciones intermedias en la abertura de la válvula, el flujo de material será el resultado de la combinación de ambos tipos de flujo.

En este punto puede resaltarse que, en principio, este sistema de platos paralelos puede aplicarse a la extrusión de termoplásticos; sin embargo es un modelo muy simplificado.

III.3 La Bomba de Tornillo

El bombeo y la presurización caracterizan al procesamiento de polímeros más que cualquier otro paso elemental; por tanto, todo equipo que se diseñe para hacer fluir a un material polimérico fundido debe fundamentarse en el comportamiento reológico del mismo.

Los polímeros fundidos son materiales extremadamente viscosos y para extruirlos es necesario el manejar presiones incluso mayores a 50 MN/m^2 . Aunado a la limitación anterior y para el caso específico de la extrusión de perfiles, el hecho de necesitar - continuidad de material impide el uso de los métodos de presurización estática (bombas de pistón). Por otra parte, para mantener al material en estado líquido se hace necesaria la implementación de sistemas de calefacción adecuados.

En resumen la extrusión de perfiles requiere de un equipo con las siguientes características:

- a) Gran capacidad de presurización.
- b) Manejo continuo de material.
- c) Capacidad para el transporte de calor.

El modelo de flujo entre platos paralelos encuentra aplicación práctica en la extrusión cuando se realizan las siguientes modificaciones:

- I) Puesto que no puede disponerse de platos infinitos, el plato inferior se delimita con paredes laterales a manera de canal con sección transversal rectangular.

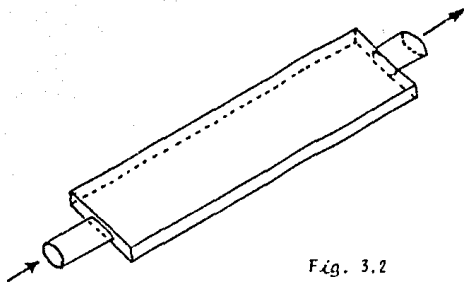


Fig. 3.2

II) Dicho canal tendrá una longitud finita y presentará obstrucciones a la entrada y a la salida con solo pequeñas aberturas para el paso de material (boquillas de entrada y salida).

Si se alimentara polímero fundido a través de la boquilla de entrada, sería necesario disponer de una superficie superior lo suficientemente larga para inducir flujo en toda la extensión del canal. Si dicho canal es recto, la longitud puede ser muy grande y también la superficie; esto no sería práctico de manejarse. Las limitaciones anteriores fundamentan las siguientes modificaciones:

III) Dar al canal un sentido helicoidal que permita compactar la longitud axial del sistema. Esto es lo que da origen al tornillo o husillo que, al ser sometido a giro, proporciona una longitud de transporte infinita.



Fig. 3.3

IV) En forma similar para volver infinita a la superficie superior, se le da forma cilíndrica, de tal manera que, al acoplarse con el husillo anterior se obtiene el siguiente sistema.

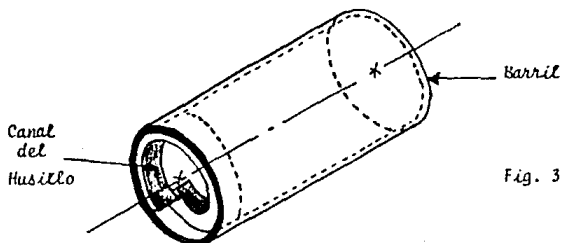


Fig. 3.4

Esto es lo que da origen a las bombas de tornillo para materiales viscosos las cuales, como se ha visto, fundamentan su operación en la presurización viscosa dinámica y en el modelo de platos paralelos.

Surge de esta manera el equipo conocido como Extrusor, el cual posee las características necesarias para el transporte continuo de material polimérico fundido. Adicionando dispositivos de alimentación como una tolva y de conformado o boquilla a la entrada y salida del cilindro respectivamente, el equipo completo es el siguiente:

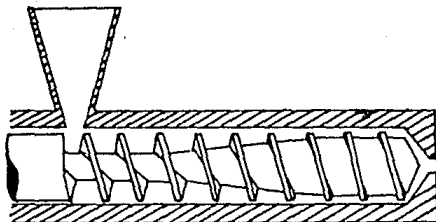


Fig. 3.5. Extrusor de Tornillo Simple

Ahora que ya se ha fundamentado el principio de operación de un extrusor, el siguiente paso es describir los modelos matemáticos propuestos por Zehev Tadmor para representar el comportamiento de dicho equipo.

III.4 Geometría del Extrusor

Las bombas de tornillo o extrusores han sido sometidas en los últimos años a grandes modificaciones en lo concerniente a su geometría y tamaño.

Como primer paso, es importante una descripción geométrica del equipo que sienta las bases para el análisis matemático.

- El Sistema Tornillo-Cilindro

Considerando el siguiente esquema para un tornillo con sección transversal rectangular y de profundidad constante

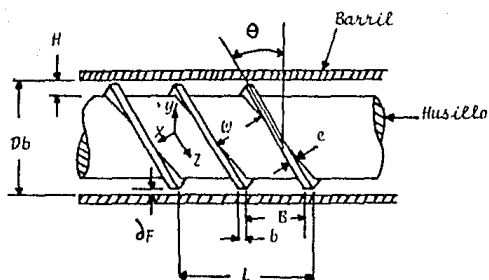


Fig. 3.6

donde: D_b = Diámetro de barril

δ_f = claro de filetas

H = distancia entre la raíz del tornillo y la superficie interna del barril

L = distancia axial de una vuelta completa

B = distancia axial entre filetas

$W(r)$ = ancho del canal (función del radio)

$b(r)$ = ancho de la fileta del tornillo en la dirección axial (función del radio)

e = ancho de fileta en la dirección perpendicular a la misma

$\Theta(r)$ = ángulo formado entre la fileta y el plano normal al eje del tornillo. Se denomina ángulo de hélice.

Es útil dividir a los parámetros geométricos anteriores en tres grupos:

Parámetros geométricos sistema Tornillo-cilindro	}	Constantes	{	$L, B, e, \delta f, D_b$
		VARIABLES en la Dirección Axial	{	H, L y B (para algunos husillos)
		VARIABLES en la Dirección Radial	{	$W(r), \Theta(r), B$ y $b(r)$

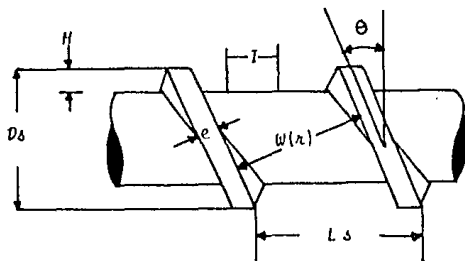
En lo referente a las magnitudes usuales de estos equipos, es importante resaltar que, de acuerdo con el fundamento teórico expuesto en páginas anteriores, los elementos más importantes del extrusor son el husillo y el cilindro. Por ello, la capacidad de operación de este equipo depende de las dimensiones de ambos dispositivos.

En la práctica, el cilindro presenta diámetros internos que van desde 2 cm. o menos hasta 75 cm. o más. Generalmente se reporta como dato de diseño la relación longitud a diámetro L/D con magnitudes del orden de 24 a 26 como valores típicos (se han llegado a tener valores máximos de 40 y mínimos de 8).

Como sistema tornillo-cilindro, el claro de filetas varía entre 0.2 y 0.5 mm. En la mayoría de los extrusores de tornillo simple se tiene que la distancia axial de una vuelta completa es igual al diámetro del husillo considerando a las filetas; estos tornillos se denominan como de pitch cuadrado ($L_s = D_s$).

Por último, el tornillo presenta gran diversidad de geometrías de acuerdo al tipo de material que vaya a manejarse, pero para el modelo básico de Tadmor se considerará que tiene sección transversal rectangular con profundidad y ancho de canal constantes.

Para analizar la funcionalidad de θ , W y Z (longitud helicoidal) con respecto al radio se tomará como base el siguiente esquema:



a) Para el caso del ángulo de hélice θ su tangente puede expresarse en términos de L_s y D

$$\tan \theta = \frac{L_s}{\pi D} \quad \text{Ec. 3.2}$$

cabe resaltar que D es el diámetro correspondiente al tornillo y varía desde la raíz hasta el tope de la fileta. Por tanto, θ es máximo en la raíz y mínimo en el tope de la fileta.

b) El ancho de canal W es la distancia perpendicular entre filetas:

$$W = Ls \cos \Theta - e \quad e = \text{ancho de fileta} \quad \text{Ec. 3.2}$$

dado que Θ varía con el radio, de igual forma lo hace W .

c) Para el caso de la longitud helicoidal $Z = l / \text{Sen } \Theta$ y se tiene la misma funcionalidad respecto a la posición radial.

Ahora que ya han sido definidos todos los parámetros geométricos de importancia, se está en posibilidades de exponer los fundamentos de la teoría de Tadmor para la operación de los extrusores.

III.5 Aspectos Prácticos en la Operación de un Extrusor

Hasta el momento se han desarrollado los conceptos que han dado origen al surgimiento de las bombas de tornillo o extrusores y se han expuesto los principales parámetros geométricos del sistema tornillo-cilindro.

En el medio industrial, los extrusores utilizados para el manejo de material polimérico presentan dos modalidades de operación importantes: en una de ellas, el material se alimenta al sistema en estado fundido y el equipo se denomina extrusor de fundido. La segunda modalidad involucra a los equipos que son alimentados con material en estado sólido y se conocen como extrusores plastificadores.

La mayor parte de las aplicaciones industriales corresponden a los extrusores plastificadores y de ello se deriva el interés por optimizar el proceso. Es muy importante resaltar que la operación con plastificación no es fácil de modelar matemáticamente, debido a la presencia de dos fases.

Los pasos que se verifican durante el funcionamiento de un equipo de tornillo simple se resumen de la siguiente manera:

- a) Alimentación de partículas sólidas de polímeros en la tolva.
- b) Transporte de polímero sólido.
- c) Reblandecimiento de material sólido.
- d) Inicio de la fusión del polímero.
- e) Aumento de la relación polímero fundido a polímero sólido.
- f) Fin de la etapa de fusión del polímero.
- g) Transporte de material fundido.
- h) Inyección de material a la boquilla conformadora.

La secuencia anterior ha sido sólidamente apoyada en la práctica por medio de experimentos de enfriamiento repentino ideados por Maddock. Dichas experiencias consistían en detener a la máquina una vez que se alcanzaba la operación estacionaria, posteriormente se enfriaban tornillo y cilindro hasta la total solidificación del material fundido y, finalmente, se extraía el husillo del cilindro, el análisis de la apariencia física del políme

ro a lo largo del extrusor evidenciaba los cambios sufridos por el material.

Con base en los aspectos anteriores, los primeros análisis teóricos del proceso distinguían tres zonas de operación de un extrusor plastificador:

1. Zona de Transporte de Sólidos
2. Zona de Plastificación
3. Zona de Bombeo o dosificación (1)

La zona de transporte de sólidos comprende la longitud del extrusor en la cual se halla presente únicamente material sólido. Por otra parte, la zona de plastificación abarca toda la sección en donde se tiene coexistencia de polímero sólido y fundido; se inicia donde se localiza la primera gota de fundido y termina cuando todo el material se encuentra completamente líquido. Finalmente, la zona de bombeo o dosificación sólo maneja polímero fundido y comprende la sección final del extrusor previa a la boquilla.

La esquematización que hace Ramón Anguita Delgado en su libro "Extrusión de Plásticos" es muy clara y útil para entender el mecanismo de operación de un extrusor plastificador:

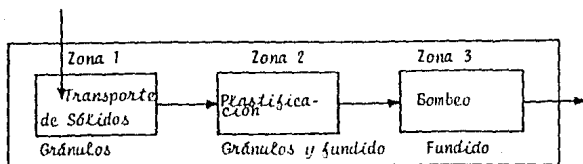


Fig. 3.8 Zonas de Operación de un extrusor plastificador.

Obviamente, el comportamiento global del equipo será el resultado de las características de operación de cada zona.

La zona 1 ha sido estudiada experimentalmente de manera muy pobre y se tienen algunas teorías para el efecto. Por su parte, la zona dos ofrece severas dificultades para modelarse matemáticamente pues presenta variaciones debidas, más que nada, a las propiedades características del material que se está procesando. Finalmente, la zona 3 o de bombeo es la mejor estudiada pues su función descansa sobre las teorías de flujo de líquidos viscoelásticos.

Otro aspecto práctico en el trabajo del extrusor contempla la forma de suministrar la energía calorífica necesaria para fundir al polímero sólido. El suministro puede hacerse de dos maneras:

- a) Por medio de aditamentos de calefacción externos (resistencias eléctricas, chaquetas de vapor, etc.).
- b) Transformando la potencia aplicada en la flecha del husillo en energía calorífica por disipación viscosa al deformarse el material (operación autógena o adiabática).

El primer mecanismo de calentamiento es el más utilizado en el medio industrial aunque el segundo es muy útil para el procesamiento de materiales sensibles al calor. Esto es debido a que evita sobrecalentamientos locales al existir flujo de calor desde el material hacia las paredes del cilindro.

Es importante considerar que las longitudes que ocupa cada zona no están perfectamente delimitadas; dependiendo de la geometría del husillo, de las condiciones de operación y de la naturaleza del material polimérico por procesar, cada zona ocupará mayor o menor espacio dentro del cilindro.

Con base en lo anterior, puede concluirse fácilmente que el diseño de un extrusor plastificador debe tomar en cuenta cuál de las tres zonas será predominante en rangos de operación específicos y con respecto a determinados materiales por procesar. De esta forma, habrá ocasiones en que la zona de plastificación ocupe el 60% de la longitud total del extrusor, lo que determina a la fusión del polímero como el paso controlante de la operación; en forma similar puede ocurrir con las dos zonas restantes.

Finalmente, las características de funcionamiento del equipo tales como velocidad de extrusión, temperatura de fundido, presión desarrollada por el husillo y la potencia consumida en el eje, presentan interrelaciones entre sí y con respecto a la geometría del sistema tornillo-cilindro. Zehev Tadmor ha desa-

rollado modelos matemáticos para cada zona y serán descritos en la siguiente sección.

III.6 Deducción del Modelo Matemático de Tadmor para el Proceso de Extrusión

Como se mencionó en la sección anterior, durante la operación de un extrusor plastificador se distinguen tres zonas de operación que se diferencian, fundamentalmente, por el estado físico en el cual se encuentra el material que manejan. El modelamiento matemático de un extrusor plastificante plantea la severa limitante de tener que predecir, con la mayor exactitud posible, los cambios de fase que el material irá presentando a lo largo de la longitud helicoidal del tornillo.

Es evidente que es muy difícil que un solo modelo matemático sea capaz de predecir las características de funcionamiento de todo el equipo global. Es mucho más sencillo modelar cada zona por separado y acoplar los modelos resultantes.

III.6.1 Zona de Transporte de Sólidos

Comprende el espacio entre la zona que está justo debajo de la

tolva y el punto en el cual aparece la primera gota de polímero fundido.

Ya anteriormente se hizo incapié en lo primordial del papel - que juega el sistema tornillo-cilindro para el transporte del polímero en cualquier estado físico (sólido o fundido), mediante el arrastre de material por parte del equipo. Cabe recordar que el material por procesar se encuentra sujeto a dos fuerzas de arrastre opuestas: una por parte del cilindro y otra por parte del canal del tornillo.

Para el caso en el cual se maneja material sólido, dicha fuerza de arrastre no es otra cosa más que la fricción que las superficies metálicas de ambos componentes ejercen sobre el material.

Dado que la fricción o esfuerzo cortante es la fuerza motriz para el transporte de material en un extrusor, Tadmor considera - necesario el incluir, de una manera cuantitativa, los efectos de dicho fenómeno. Para ello se basa en la teoría de Bowden y Tabor.

Los puntos principales de tal teoría son:

- a) Supone la existencia de adhesión en las zonas de contacto real entre superficies.
- b) La fuerza de fricción es la necesaria para romper dichas adhesiones.

- c) Se considera (por evidencia experimental) que la fricción es independiente del área de contacto y que la fuerza de fricción es proporcional a la carga normal entre superficies.

$F \propto W$ donde

F = fuerza de fricción

W = Carga normal entre superficies

De esta forma: $F = fW$ donde f es una constante de proporcionalidad denominada coeficiente de fricción.

A su vez $F = A S$ donde

A = área real de contacto

S = fuerza de corte de la unión

y $W = A P_m$ donde

P_m = presión del material

Por tanto $f = \frac{F}{W} = \frac{As}{AP_m} = \frac{S}{P_m}$

como se ve el coeficiente de fricción es un parámetro útil para la evaluación cuantitativa del efecto de arrastre, es independiente del área de contacto y puede calcularse determinando S y P_m experimentalmente.

Los coeficientes de fricción para materiales poliméricos fueron medidos experimentalmente por Schneider quien llegó a las siguientes conclusiones.

- a) Alta dependencia de estos coeficientes con el estado de uso del tornillo.
- b) Dependencia de los mismos con respecto a la temperatura y a la carga.

Tal como afirma Tadmor en uno de sus libros (2), las teorías de la zona de transporte de sólidos dependen en gran medida de la selección apropiada de los coeficientes de fricción; tarea nada fácil debido a las condiciones cambiantes a lo largo de la sección.

Un primer modelo considera que el polímero se encuentra entre dos superficies paralelas e infinitas, en cuyo caso:

1. Si $f_s > f_b$ el sólido se desacelera hasta detenerse.
2. Si $f_s < f_b$ el sólido se acelera hasta alcanzar la velocidad de la superficie en movimiento.
3. Si $f_s = f_b$ el sólido se mueve con cualquier velocidad u tal que $0 < u < v_b$
(v_b = velocidad de la superficie móvil)

Donde f_s es el coeficiente de fricción entre el material y la superficie estática y f_b el correspondiente entre el material y la superficie móvil.

Para el caso en que se tiene material contenido entre un canal y una superficie móvil en la parte superior (como en el sistema - tornillo-cilindro), las tres afirmaciones anteriores son igualmente válidas, siendo la superficie estática la correspondiente al - tornillo y la móvil la referente al cilindro. De hecho, un criterio de operación para un extrusor de tornillo recomienda mantener altos valores de fricción entre polímero y cilindro y bajos valores entre polímero y tornillo.

Para comprender los principios de transporte del material sólido, considere el siguiente diagrama.

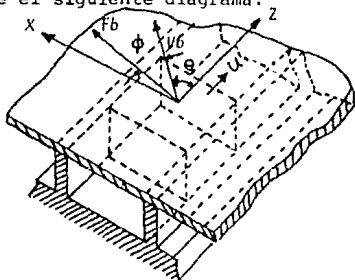


Fig. 3.9

La fuerza ejercida por el plato superior (barril) es:

$$F_b = A_b f_b P \quad (\text{Subíndice } b = \text{barril})$$

dicha fuerza actúa en una dirección θ respecto a la dirección -- del fondo del canal.

Si además el sólido tiene una velocidad particular U como se indica en el diagrama, la fuerza que ejerce el barril actúa en

la dirección resultante $(\Theta + \phi)$; tal como se deduce a partir del diagrama, el ángulo ϕ depende de las velocidades del barril (V_b) y de la masa sólida (u) .

El movimiento de la masa sólida está compuesta por una translación axial y una rotación rígida, por tanto, la fuerza friccional que el cilindro ejerce sobre la masa sólida puede descomponerse en componentes axiales y tangenciales. Las componentes axiales, para determinarse, necesitan de la resolución de un balance de fuerzas mientras que las componentes tangenciales conducen a un balance de torques.

El ángulo $(\Theta + \phi)$ es la dirección en la cual actúa la fuerza de arrastre del barril sobre las partículas sólidas; es el ángulo de hélice de las filetas, el cual es una característica geométrica del husillo, y ϕ es un ángulo que puede calcularse a partir de los balances de torques y de fuerzas que se desarrollan en el canal del husillo.

Considerando el siguiente diagrama:

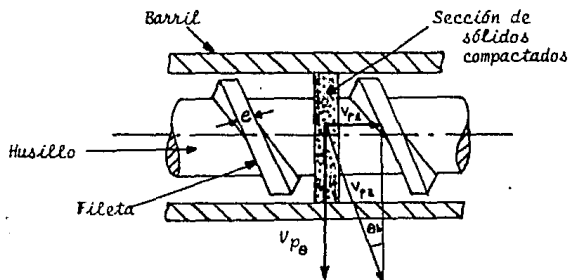


Fig. 3.10

Las partículas compactadas se desplazarán a lo largo del canal con una velocidad V_{pz} . Dicha velocidad poseerá componentes rectangulares V_{pL} (velocidad en la dirección axial) y $V_{p\theta}$ (velocidad en la dirección tangencial).

Un diagrama vectorial para representar las velocidades presentes en las diferentes direcciones es el siguiente:

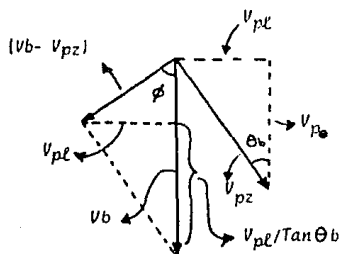


Fig. 3.11

donde: V_b = velocidad del barril

V_{pz} = velocidad de la masa de sólido en el canal

V_{pL} = velocidad axial de la masa de sólidos

$V_{p\theta}$ = velocidad tangencial

θ_b = ángulo de hélice

ϕ = ángulo al cual se mueven los sólidos relativo al barril

Es muy fácil deducir, a partir del diagrama vectorial que,

$$a) \tan \phi = \frac{V_{pL}}{V_p - V_{pL}} = \frac{V_{pL} \tan \theta_b}{(\tan \theta_b) V_b - V_{pL}}$$

Entonces

$$((\tan \theta_b) V_b - V_{p_L}) \tan \phi = V_{p_L} \tan \theta_b$$

$$(\tan \theta_b) (\tan \phi) V_b - V_{p_L} \tan \theta = V_{p_L} \tan \theta_b$$

$$V_b (\tan \theta_b) (\tan \phi) = V_{p_L} (\tan \theta_b + \tan \phi)$$

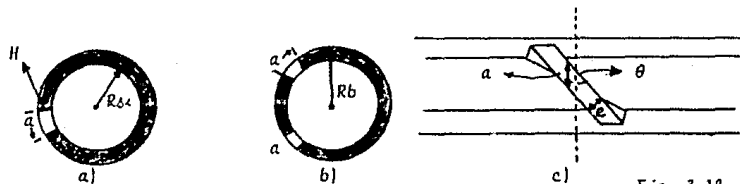
Por tanto
$$V_{p_L} = V_b \frac{(\tan \theta_b) (\tan \phi)}{\tan \theta_b + \tan \phi}$$
 Velocidad del polímero en la dirección axial del husillo

Ec. 3.3

Esta velocidad es independiente de la profundidad de canal.

Por otra parte, para calcular el flujo volumétrico de polímero sólido en la dirección axial del tornillo, es necesario multiplicar dicha velocidad V_{p_L} por la sección transversal de área ocupada por el polímero sólido.

Dicha área transversal se encuentra delimitada por la raíz del tornillo, el cilindro y la presencia de las filetas. Para determinarla considérese el siguiente diagrama:



- Corte transversal de un husillo monofileteado
- Corte transversal de un husillo bifileteado
- Determinación geométrica del área ocupada por la fleta (vista axial)

Es fácil deducir que el área transversal puede calcularse por la siguiente expresión:

$$A_T = \int_{R_S}^{R_D} \left(2\pi R - \frac{pe}{\text{sen}\theta} \right) dR$$

y, por consiguiente, el flujo volumétrico del polímero sólido será

$$Q_s = V_{p\lambda} \int_{R_S}^{R_D} \left(2\pi R - \frac{pe}{\text{sen}\theta} \right) dR \quad p = \text{número de filetas en paralelo}$$

El ángulo θ es función del radio, sin embargo, al considerar un valor promedio $\bar{\theta}$ no produce un error considerable y simplifica la integración. Esta da como resultado:

$$Q_s = V_{p\lambda} \left[\frac{\pi}{4} (D_b^2 - D_s^2) - \frac{peH}{\text{sen}\theta} \right]$$

Sustituyendo a $V_{p\lambda}$ por su expresión en términos de la velocidad del barril.

$$Q_s = \pi N D_b \frac{\tan\theta \tan\theta_b}{\tan\theta + \tan\theta_b} \left[\frac{\pi}{4} (d_b^2 - D_s^2) - \frac{peH}{\text{sen}\theta} \right] \quad \text{Ec. 3.4}$$

No obstante, esta última ecuación para flujo volumétrico de sólido solo será útil si es posible determinar el valor del ángulo

Ø. Para tal efecto un balance de fuerzas sobre un segmento de sólido es un buen recurso.

Dicho balance se realiza bajo las siguientes suposiciones:

- 1) El polímero sólido en el canal del tornillo se comporta como un continuo.
- 2) El sólido tiene contacto con todas las superficies del canal (filetas, tornillo y barril).
- 3) La profundidad del canal es constante.
- 4) El claro de la fileta puede despreciarse.
- 5) La velocidad del polímero es constante en el tiempo y uniforme en el espacio.
- 6) La presión varía únicamente en la dirección helicoidal del canal.
- 7) El coeficiente de fricción es independiente de la presión pero varía con la temperatura.
- 8) Se desprecian las fuerzas gravitacionales.
- 9) Se desprecian las variaciones de densidad.

El sistema de fuerza a considerar es el siguiente:

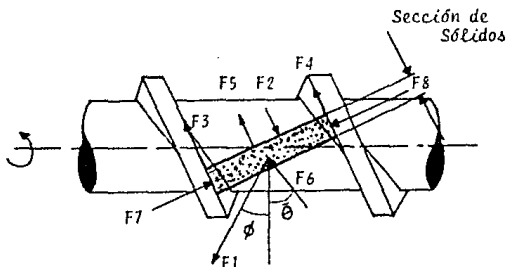


Fig. 3.13

La descripción extensa sobre el balance de fuerzas realizado se da en el libro de Tadmor, "Engineering Principles of Plasticating Extrusion". El resultado final es el siguiente:

$$\begin{aligned} \cos \phi = & K \operatorname{sen} \phi + 2 \frac{H}{Wb} \frac{f_s}{f_b} \operatorname{sen} \theta_b \left(K + \frac{\bar{D}}{D_b} \cotan \bar{\theta} \right) \\ & + \frac{Ws}{Wb} \frac{f_s}{f_b} \operatorname{sen} \theta_b \left(K + \frac{Ds}{Db} \cotan \theta_s \right) \\ & + \frac{\bar{W}}{Wb} \frac{H}{Zb} \frac{1}{f_b} \operatorname{sen} \bar{\theta} \left(K + \frac{\bar{D}}{D_b} \cotan \bar{\theta} \right) \ln \frac{P_2}{P_1} \end{aligned}$$

donde

$$K = \frac{\bar{D}}{D_b} \left\{ \frac{\operatorname{sen} \bar{\theta} + f_s \cos \bar{\theta}}{\cos \bar{\theta} - f_s \operatorname{sen} \bar{\theta}} \right\}$$

Otro de los resultados importantes a que conduce el balance de fuerzas sobre un segmento de cama sólida, es una expresión para el perfil de presiones existente en la zona de transporte de sólidos.

$$P = P_1 \exp \left\{ \left[\frac{B_1 - A_1 K}{B_2 - A_2 K} \right] z \right\} \quad \text{Ec. 3.5}$$

Siendo:

$$A_1 = fb Wb \operatorname{sen} \phi + 2 H f_s \operatorname{sen} \theta_b + Ws f_s \operatorname{sen} \theta_b$$

$$A_2 = H \bar{W} \operatorname{sen} \bar{\theta}$$

$$B_1 = fb Wb \cos \phi - 2 H f_s \operatorname{sen} \theta_b \cotan \bar{\theta} \frac{\bar{D}}{D_b} - Ws f_s \operatorname{sen} \theta_b$$

$$\cotan \theta_s \frac{Ds}{D_b}$$

$$B_2 = H \bar{W} \cos \bar{\theta} \frac{\bar{D}}{D_b}$$

El cálculo del perfil de presión por medio de la ecuación anterior solo es posible si se conoce el valor de P_1 (presión inicial). Dicha presión P_1 , para el caso de un extrusor plastificador, será proporcional a la altura de polímero en la tolva de alimentación.

Un aspecto sobresaliente es que la zona de transporte de sólidos, para el caso de extrusión plastificante, es por lo general - muy corta y el incremento de la presión a través de ella no es muy grande.

III.6.2 Zona de Plastificación

La zona de plastificación es la segunda zona de operación de - un extrusor plastificador, verificándose en ella el reblandecimiento y fusión gradual de las partículas de polímero sólido.

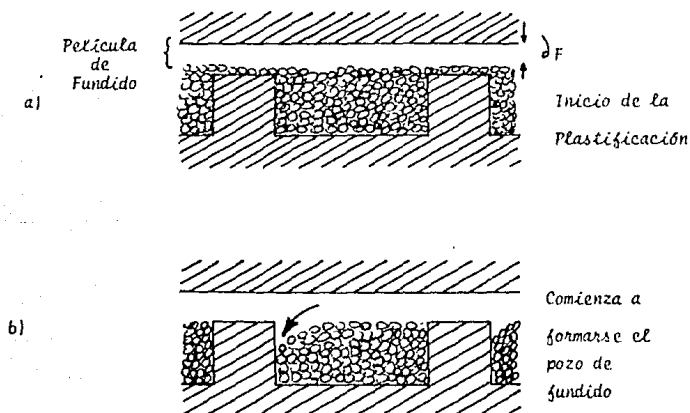
Esta región del extrusor constituye la parte medular de la operación, iniciándose en el punto donde aparece la primera gota de material fundido y finalizando cuando todo el polímero se halla - completamente líquido.

Las partículas sólidas de polímero son compactadas y reblandecidas durante las primeras vueltas del husillo, en un punto determinado, se alcanza la temperatura de fusión del material, y - aparece la primera gota de fundido. A partir de ese momento se

inicia la fusión gradual del polímero, incrementándose la cantidad de fundido y disminuyendo la de sólido en el canal del husillo.

Durante el inicio de la plastificación, una delgada película de polímero fundido aparece entre la superficie interna del cilindro y la cama sólida, pero su espesor es menor al claro de filetas (δ_f). Al avanzar la fusión, el espesor de dicha película se incrementa de tal forma que, en un momento determinado, supera al claro de las filetas, dándose inicio a un proceso de acumulación de polímero fundido en la parte posterior del canal del husillo o creación de una alberca de fundido.

Para ilustrar lo anterior considérese la siguiente figura :



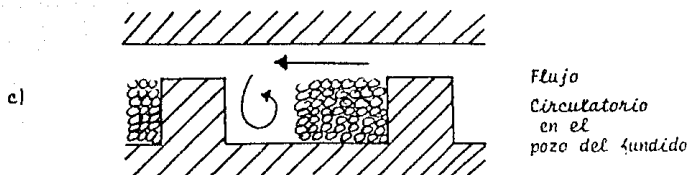


Fig. 3.14 Mecanismo de la Plastificación

En el esquema C puede observarse que el fundido acumulado en la parte posterior del canal empuja al sólido residual hacia la parte frontal del canal. Esto determina que a lo largo de la dirección helicoidal del husillo, el espesor de la cama sólida (X) se reduce gradualmente, mientras que el ancho del pozo de fundido se incrementa.

El ancho de la cama sólida es, por tanto, función de la posición helicoidal. Si es posible calcular el valor de dicho ancho en cada punto del husillo, el resultado obtenido es un perfil de cama sólida.

Durante la operación de un extrusor plastificador, la zona de plastificación es la que generalmente ocupa la mayor longitud helicoidal del husillo. Por tanto, el determinar el perfil de la cama sólida es de gran utilidad para calcular la longitud necesaria para la fusión del material polimérico, lo que repercute en el diseño y simulación del equipo.

No obstante, por albergar al polímero en dos fases (sólido y fundido), esta zona presenta serias dificultades para modelarse matemáticamente. Hasta el momento, los modelos propuestos intentan representar, de la mejor manera posible, los siguientes perfiles:

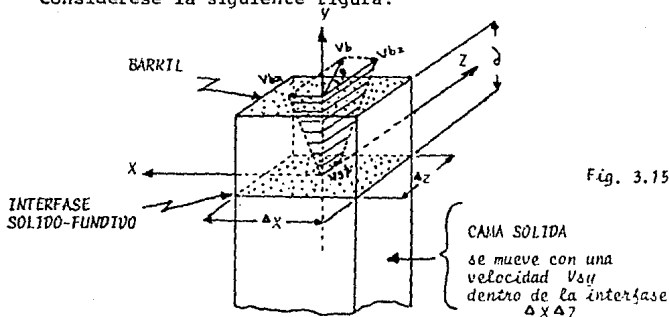
- a) Cama sólida
- b) Temperatura
- c) Presión

Todos ellos dentro de la zona de plastificación.

Dado que en esta sección se verifica un cambio de fase gradual en el polímero, la transferencia de calor juega un papel muy importante tanto en el perfil de temperatura como en el perfil de cama sólida.

La rapidez con que irán desapareciendo las partículas sólidas de polímero ejerce influencia directa sobre el perfil de cama sólida. Además, Tadmor asevera en su modelo cualitativo que la fusión del polímero se da en la interfase película de fundido-cama sólida y no en la interfase pozo de fundido-cama sólida ya que, en la primera, las condiciones son muy favorables para el transporte de energía (alto gradiente de temperaturas ($T_b - T_m$) y pequeña distancia de transferencia δ).

Considérese la siguiente figura:



donde: x, y, z = coordenadas rectangulares del canal del husillo.

δ = ancho película del fundido

V_b = velocidad del barril

V_{bx} = componente de la velocidad del barril en la dirección x

V_{bz} = componente de la velocidad del barril en la dirección z

θ = ángulo de hélice

V_s = velocidad de sólidos en la dirección helicoidal

Con base en las ecuaciones de energía y movimiento, se obtiene el siguiente perfil de temperaturas en la película:

$$\frac{T - T_m}{T_b - T_m} = \frac{v_j^2 \mu}{2 K_m (T_b - T_m)} \left(\frac{\gamma}{\delta} \right) \left(1 - \frac{\gamma}{\delta} \right) + \frac{\gamma}{\delta} \quad \text{Ec. 3.6}$$

donde

$$v_j = (v_b^2 + v_{sz}^2 - 2 v_b v_{sz} \cos \theta_b)^{1/2}$$

v_j = diferencia vectorial entre las velocidades de barril y de sólidos.

T_b = temperatura de barril

T_m = " de fusión del material

T = " puntual en la película

Sin embargo, el perfil de temperatura anterior no es de utilidad si no se conoce el valor del ancho de la película (δ). No es el objetivo de esta tesis, el describir detalladamente todos los pasos que Tadmor realizó para llegar a las ecuaciones finales de su modelo. Para calcular el valor de δ , planteó un balance de masa y uno de energía en un incremento Δz (dirección helicoidal) del canal del husillo.

Resolviendo ambos balances obtuvo las siguientes expresiones

$$\delta = \left\{ \frac{[2 \cdot K_m (T_b - T_m) + \mu v_j^2] X}{V_b x \beta_m [C_s (T_m - T_s) + \lambda]} \right\}^{1/2} \quad \begin{array}{l} \text{Espesor película} \\ \text{de fundido} \end{array} \quad \text{Ec. 3.7}$$

$$\omega = \left\{ \frac{V_b x \beta_m [K_m (T_b - T_m) + \frac{\mu}{2} v_j^2] X}{2 [C_s (T_m - T_s) + \lambda]} \right\}^{1/2} = \Phi X^{1/2} \quad \begin{array}{l} \text{Rapidez} \\ \text{de fusión} \end{array} \quad \text{Ec. 3.8}$$

donde:

$$\Phi = \left\{ \frac{v_b x \rho_m \left[K_m (T_b - T_m) + \frac{\mu}{2} v_b^2 \right]}{2 \left[C_s (T_m - T_s) + \lambda \right]} \right\}^{1/2} \quad \text{Ec. 3.9}$$

Como puede observarse, tanto el espesor de la película de fundido como la rapidez de fundido son funciones del ancho de cama sólida (X).

Si se realiza ahora un balance de masa sobre un elemento diferencial de cama sólida (ΔZ), se distinguen los siguientes términos.

Flujo másico de sólido que

entra al elemento diferencial $= \rho_s v_{sz} H X \Big|_z$
en z .

Flujo másico de sólido que

sale del elemento diferencial $= \rho_s v_{sz} H X \Big|_{z + \Delta z}$
en $z + \Delta z$

Flujo másico de sólido que

sale del elemento diferencial
por fusión en la interfase $= \omega \Delta z$
película de fundido-cama sólida.

De esta forma el balance completo es:

$$\rho_s v_{sz} H X \Big|_z = \rho_s v_{sz} H X \Big|_{z + \Delta z} + \omega \Delta z$$

Resolviendo para $\omega \Delta z$, dividiendo por Δz y tomando el límite cuando Δz tiende a cero

$$-\frac{d(\rho_s V_{sz} H X)}{dz} = \omega$$

pero considerando que la densidad de los sólidos es invariable ($\rho_s = \text{cte}$) y régimen estacionario ($V_{sz} = \text{cte}$), se llega a la siguiente ecuación diferencial:

$$-\frac{d(H X)}{dz} = \frac{\omega}{V_{sz}} \quad \text{Ec. 3.10}$$

La integración de esta última expresión puede realizarse para dos casos:

a) Husillos con profundidad constante de canal ($H = \text{cte}$)

$$\frac{X}{W} = \left(1 - \frac{\Phi W^{1/2}}{2 G H} H_0 - z \right)^2$$

siendo $G = V_{sz} H_0 \rho_s$ (flujo másico de sólido)

$H_0 =$ profundidad inicial de canal

b) Husillos con profundidad de canal variable

$$\frac{X}{W} = \frac{X_1}{W} \left[\frac{\Psi}{A} - \left(\frac{\Psi}{A} - 1 \right) \left(\frac{H_1}{H_1 - \Delta z} \right) \right]^{1/2} \quad \text{Ec. 3.11}$$

donde:
$$\Psi = \frac{\Phi}{V_{sz} \rho_s X_1^{1/2}} = \frac{\Phi X_1^{1/2}}{W \left(\frac{G}{H_0} \right)}$$

$$A = \frac{H_1 - H_2}{E}$$

A = grado de adelgazamiento

H₁ = profundidad inicial de canal

H₂ = " final de canal

E = longitud helicoidal total de la sección con profundidad variable

X₁ = ancho inicial de la cama sólida

III.6.3 Zona de Bombeo

La tercera zona de operación de un extrusor plastificador maneja únicamente material polimérico fundido. Esta zona ha sido, de hecho, la más fácil de modelar matemáticamente pues se apoya en las teorías de flujo de materiales viscoelásticos.

Según Tadmor, un modelo satisfactorio para esta zona debe involucrar ecuaciones que:

- Calculen rapidez de flujo, presión, temperatura y perfiles de velocidad transversal y helicoidal del canal.

- Incluyan propiedades físicas adecuadas (flujo y propiedades térmicas).
- Manejen información geométrica de tornillo y barril y condiciones de operación.
- Calculen potencia consumida en esta zona, rapidez de corte y distribución de el tiempo de residencia de el polímero que abandona al extrusor.
- Predigan fluctuaciones de temperatura y flujo con el tiempo.

Como ya se dijo antes, esta zona ha tenido una gran cantidad de modelos que cubren solo parcialmente los requerimientos listados arriba. Tadmor resume a los modelos existentes de la siguiente forma:

Modelos Basados en
flujo en Canales
Prismáticos Poco
Profundos

Flujo Isotérmico de Fluidos Newtonianos.
Flujo No-Isotérmico de Fluidos Newtonianos.
Flujo Isotérmico de Fluidos No-Newtonianos.
Flujo No-Isotérmico de Fluidos No-Newtonianos.

Modelos Basados en
flujo en Canales
Curvos Profundos

Flujo Isotérmico de Fluidos Newtonianos.
Flujo Isotérmico de Fluidos No-Newtonianos.

La descripción detallada de estos modelos no se dará en este trabajo de tesis, pues el objetivo fundamental es analizar el cálculo de perfil de cama sólida en la zona de plastificación con base en los programas de cómputo existentes y que se manejan en algunas industrias. Esto se realizará en el siguiente capítulo.

III.7 Conclusiones (Capítulo III)

El modelo de Tadmor constituye el punto de partida para la búsqueda de mejores ecuaciones y criterios que permitan el predecir, de una forma más cercana a la realidad, los resultados experimentales de la operación de un extrusor.

Los modelos descritos y mencionados para las tres zonas operativas de un extrusor plastificador (transporte de sólidos, plastificación y bombeo) se basan en una gran cantidad de suposiciones simplificadoras que, en muchas ocasiones, son muy lejanas a la realidad. Un ejemplo claro de esto es el suponer un comportamiento isotérmico del equipo despreciando las variaciones en las propiedades físicas del polímero a lo largo del extrusor.

En el siguiente capítulo se analizarán las principales modificaciones realizadas al modelo básico de Tadmor. Otro de los objetivos es el de analizar y corroborar experimentalmente los programas de cómputo basados en dichas modificaciones, delucidar las posibles fallas y proponer alternativas de solución.

CAPITULO IV
ESTUDIO DE PROGRAMAS DE COMPUTO EXISTENTES
DEL PROCESO DE EXTRUSION

CAPITULO IV
ESTUDIO Y VERIFICACION EXPERIMENTAL DE
PROGRAMAS DE COMPUTO EXISTENTES DEL PROCESO DE EXTRUSION

IV.1 Antecedentes

En el capítulo anterior, se trataron los aspectos fundamentales para el modelamiento matemático de un extrusor de tornillo simple. También se expusieron las principales ecuaciones constitutivas del modelo básico de Tadmor, en cada una de las zonas de operación.

Como se dijo ya en el capítulo introductorio de este trabajo de tesis, el objetivo es analizar programas de cómputo referentes a la zona de plastificación la cual, en gran parte de las condiciones de operación, es la que rige el funcionamiento global del equipo.

Para Zehev Tadmor, el modelamiento de la zona de fusión de un extrusor plastificador tiene tres metas principales:

- a) Calcular la longitud total requerida para fundir todo el polímero.
- b) Evaluar la dependencia de las dos anteriores con la naturaleza del polímero, la geometría del husillo y las condicio

nes de operación.

Con base en estas metas, Tadmor ha derivado tres modelos matemáticos para calcular el perfil de cama sólida en extrusores -- plastificadores:

1. Modelo Newtoniano
2. Modelo Newtoniano modificado
3. Modelo no-Newtoniano

Estos modelos son secuencias y a continuación se exponen sus características principales en forma resumida.

IV.2 Aspectos Básicos Generales

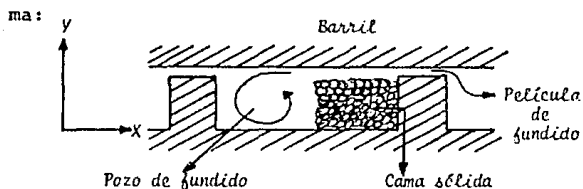
Todos los modelos se basan en las siguientes consideraciones simplificadoras:

- 1.- El husillo tiene un canal prismático rectangular.
- 2.- Existe un estado estacionario.
- 3.- La cama sólida se considera homogéna y continua.
- 4.- Para la transferencia de calor desde el barril hacia la interfase película de fundido-cama sólida, se considera que esta última tiene una profundidad infinita, debido a la baja conductividad térmica del polímero y a su movimiento constante.
- 5.- Debido a su muy pequeño tamaño con respecto al ancho de

cama-sólida, se considera la película de fundido confinada entre dos placas infinitas paralelas: la placa superior (barril) y la placa inferior (cama sólida), cada una con sus respectivas temperaturas. Debido a esto último, se considera la existencia de una temperatura promedio (T_{av}) para la película.

- 6.- Se considera que la fusión solo se da en la interfase película de fundido-cama sólida y no en la interfase cama sólida-pozo de fundido, ya que en la primera las condiciones para la transferencia de calor son muy favorables.

Para la derivación del modelo considérese el siguiente esquema:



Es útil recordar que el mecanismo de fundido considera el hecho de que la cama sólida presenta desplazamiento en las direcciones "z" (dirección helicoidal) y "y" (hacia la interfase película-cama sólida), lo que produce la reducción gradual en el ancho de la misma (dirección X). Además el polímero desaparece gradualmente en la interfase mencionada y es la rapidez de fusión la que determina el perfil de cama sólida, por tanto, el modelo debe basarse en el cálculo de la velocidad de transferencia de calor desde el barril hacia dicha interfase.

Cabe resaltar que el espesor de película de fundido es un parámetro desconocido así como también la velocidad de los sólidos a lo largo de la dirección "y" (V_{sy}). Estos parámetros son importantes para el efecto de la transferencia de calor, y la primera relación entre ellos se encuentra al observar que el proceso ajusta el espesor de la película, de manera que la cantidad de fundido que se lleva al pozo iguala a la cantidad de polímero sólido que se funde en la interfase. No obstante, esta relación introduce una tercera incógnita: el ancho de cama sólida.

Este ancho de cama sólida puede expresarse en términos de variables conocidas por medio de un balance de masa diferencial. Esto es lo que determina el perfil de cama sólida.

IV.3 Modelo Newtoniano

La derivación de las ecuaciones que se mostrarán a continuación se halla desarrollada, paso a paso, en el apéndice A de esta tesis. La descripción de las variables se halla al final del capítulo. De esta forma tenemos:

$$1.) \quad T = (T_b - T_m) \left[\frac{v_j^2 \mu}{2 k_m (T_b - T_m)} - \frac{y}{\delta} \left(1 - \frac{y}{\delta} \right) + \frac{y}{\delta} \right] + T_m \quad \text{Ec.4.1}$$

Perfil de Temperatura en la película como una función de la posición "y". Calcula temperaturas puntuales.

$$2.) \quad \bar{T} = \frac{T_b + T_m}{2} + \frac{\mu v_j^2}{12 K_m} \quad \text{Ec. 4.2}$$

Temperatura promedio de la película

$$3.) \quad \delta = \left\{ \frac{[2 K_m (T_b - T_m) + \mu v_j^2] X}{V_{bx} \rho_m [C_s (T_m - T_s) + \lambda]} \right\}^{1/2} \quad \text{Ec. 4.3}$$

Espesor de la película de fundido como una función del ancho de cama sólida X.

$$4.) \quad \omega = \left\{ \frac{V_{bx} \rho_m [K_m (T_b - T_m) + \frac{\mu}{2} v_j^2] X}{2 [C_s (T_m - T_s) + \lambda]} \right\}^{1/2} = \Phi X^{1/2} \quad \text{Ec. 4.4}$$

Rapidez de fusión del polímero por unidad de distancia helicoidal. El término Φ es una medida de la rapidez de fusión. Un valor alto de Φ implica una gran rapidez de fusión.

$$5.) \quad \psi = \frac{\Phi}{V_{sz} \rho_s X_1^{1/2}} = \frac{\Phi W^{1/2}}{\frac{X_1^{1/2}}{W} \frac{G}{H_0}} = \frac{\Phi X_1^{1/2}}{\frac{X_1 - G}{W} H_0} \quad \text{Ec. 4.5}$$

Parámetro adimensional que representa la relación de la rapidez de fusión por unidad de distancia helicoidal al flujo másico de sólidos por unidad de profundidad del canal.

$$6.) \quad \frac{X}{W} = \frac{X_1}{W} \left(1 - \frac{\psi}{2 H} (z - z_1) \right)^2 \quad \text{Ec. 4.6}$$

Perfil reducido de cama sólida como función de la posición helicoidal para husillos con canales paralelos

$$7.) \frac{x}{W} = \frac{x_1}{W} \left[\frac{\psi}{A} - \left(\frac{\psi}{A} - 1 \right) \left(\frac{H_1}{H_1 - A_2} \right)^{1/2} \right]^2 \quad \text{Ec. 4.7}$$

Perfil reducido de cama sólida para husillos con reducción gradual del canal.

Como puede observarse en las ecuaciones anteriores, los parámetros T , \bar{T} , δ y W son funciones de la viscosidad μ del material, la cual se considera constante a todo lo ancho de la película de fundido. En forma similar, los denominadores de las ecuaciones 4.3 y 4.4 involucran el binomio:

$C_s (T_m - T_s) + \lambda$, cuyos términos expresan:

- a) El calor para calentar el polímero sólido a la temperatura de fusión ($C_s (T_m - T_s)$)
- b) El calor de fusión (λ) del polímero.

Por tanto se desprecia el calor para calentar el polímero recién fundido de T_m a T_{av} .

Estas dos suposiciones son las principales fuentes de error para este modelo. El considerar a la viscosidad del fundido como independiente de la temperatura implica que el flujo de fundido hacia el pozo situado en la parte posterior del canal presentará

un perfil lineal de velocidades. Esquemáticamente tenemos:

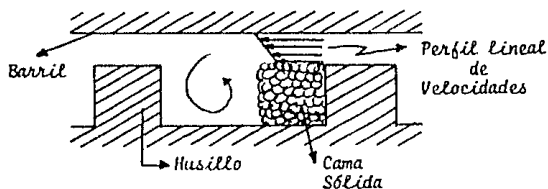


Fig. 4.2 Si la viscosidad fuese independiente de T entonces la película presentaría un perfil lineal de velocidades.

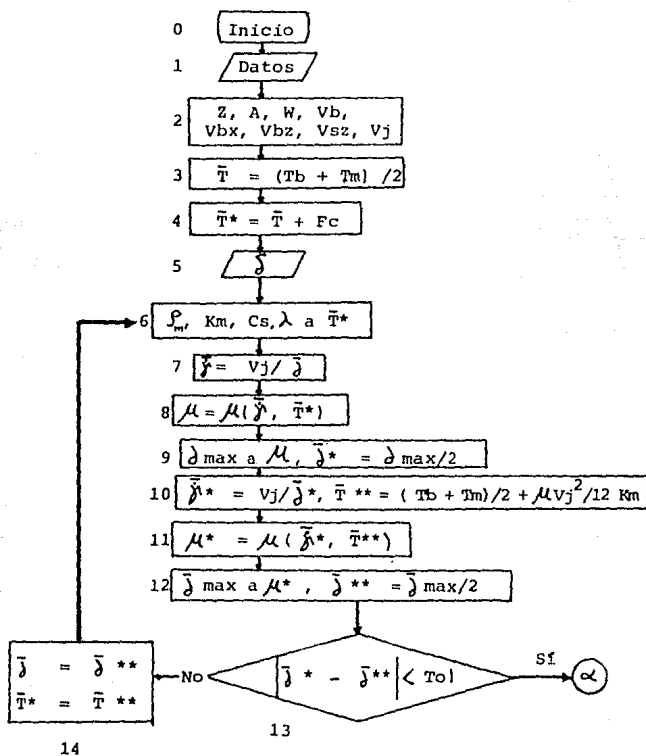
Aun cuando experimentalmente se ha demostrado que este modelo no representa satisfactoriamente el fenómeno, es útil analizar el algoritmo de cálculo que utiliza para entender mejor las posteriores modificaciones.

IV.4 Algoritmo de Cálculo de Modelo Newtoniano

Suponer a la viscosidad μ como independiente de la temperatura, es un aspecto que simplifica enormemente los cálculos a realizar para determinar el perfil de cama sólida. Para visualizarlo claramente compárese la derivación de la ecuación para T_{av} en los apéndices A (modelo Newtoniano) y B (modelo no-Newtoniano).

El desarrollo de los cálculos no requiere del uso de computa

dora, basta con una calculadora de escritorio. Como diagrama de flujo, el algoritmo es el siguiente:



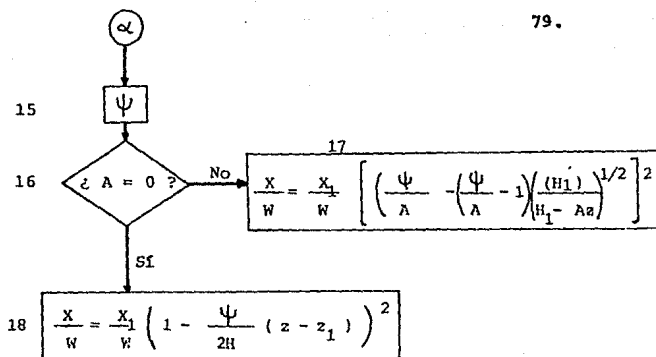


Fig. 4.3

A continuación se expone la descripción del algoritmo por cajas:

Caja 1

Es la sección de introducción de datos geométricos del equipo así como de condiciones de operación. Estos datos son:

- Longitud axial y profundidad de canal de cada sección del husillo.
- Ancho de fileta (e).
- Tipo de fileteado (sencillo o doble).
- Gasto másico de extruido (G).
- Velocidad del husillo (RPM).
- Temperatura del barril (Tb).
- Diámetro del barril (Db).

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Caja 2

Una vez tomados los datos, se procede al cálculo de parámetros geométricos e invariantes como son:

- a) Longitudes helicoidales para las diferentes zonas del husillo (z).
- b) Grado de adelgazamiento para las zonas que lo presenten (A).
- c) Ancho de canal a todo lo largo del husillo (W).
- d) Velocidad relativa del barril (V_b) y sus componentes en las direcciones transversal (V_{bx}) y helicoidal (V_{bz}) respecto al canal del husillo.
- e) Velocidad de la cama sólida (V_{sz}).
- f) Diferencia vectorial entre V_b y v_{sz} (V_j).

Cajas 3, 4 y 5

Para el cálculo del perfil de cama sólida y de acuerdo con las ecuaciones 4.1 a 4.4 debe considerarse una viscosidad constante μ . Esta viscosidad influye en el parámetro $\bar{\Phi}$ el cual, a su vez, afecta el valor de ψ repercutiendo en los perfiles de cama sólida (Ecs. 4.6 y 4.7).

Por tanto, el determinar en forma precisa el valor de μ es fundamental para este modelo. Dicha propiedad debe evaluarse a la temperatura media de película (\bar{T}); sin embargo, \bar{T} también es función de μ . Además, debido a que los polímeros son fluidos no-Newtonianos, es necesario el considerar una viscosidad aparente a la rapidez de corte promedio ($\bar{\dot{\gamma}}$) y \bar{T} . Finalmente $\bar{\dot{\gamma}}$ depende del espesor de la película (δ), mismo que necesita -- de las propiedades físicas del polímero a \bar{T} .

Todo lo anterior implica que la resolución debe hacerse por un método de prueba y error.

En la caja 3 se calcula una temperatura media entre la temperatura del barril (T_b) y la temperatura de fusión (T_m). En la caja 4 se adiciona a la temperatura media anterior un factor estimado para considerar la disipación viscosa (\bar{T}^*). Por último, en la caja 5 se proporciona un valor estimado para el espesor promedio de película

Los valores de \bar{T}^* y $\bar{\delta}$ son parámetros iniciales para iniciar un ciclo de cálculos cuyo objetivo es determinar los valores correctos de μ y \bar{T} para la película.

Caja 6

En este punto se procede a la evaluación de las propiedades físicas de polímero a la temperatura \bar{T}^* . Dichas propiedades son las siguientes:

- Densidad del fundido (ρ_m)
- Conductividad térmica (k_m)
- Calor específico del polímero sólido (C_s)
- Calor de fusión (λ)

Puesto que la temperatura media de película es el parámetro a determinar por iteraciones, esta caja será el punto de retorno para los cálculos repetitivos hasta satisfacer el criterio de convergencia expuesto en la caja 13.

Caja 7

Puesto que el modelo supone un comportamiento Newtoniano del polímero, la viscosidad es independiente de la temperatura y la rapidez de corte puede calcularse por la siguiente expresión:

$$\bar{\gamma} = \frac{v_j}{\bar{\delta}}$$

donde

$\bar{\gamma}$ = rapidez de corte promedio
 v_j = velocidad relativa de la película de fundido.
 $\bar{\delta}$ = espesor promedio de película.

Caja 8

La viscosidad aparente de los polímeros es función de la rapidez de corte y de la temperatura. El valor constante de μ para este modelo Newtoniano se calculará a la rapidez de corte promedio, evaluada en la caja anterior, y a la temperatura media de película considerada.

Por tanto

$$\mu = \mu(\bar{\dot{\gamma}}, \bar{T}^*)$$

Caja 9

Considerando la viscosidad μ calculada en la caja 8, se evalúa un parámetro que denominaremos δ_{\max} , utilizando la ecuación 4.3 y considerando que el ancho de cama sólida (x) es igual al ancho de canal del husillo (W). Cabe resaltar que esta última condición implica que se considera que el espesor de película es invariante a todo lo largo del husillo y, por ello, basta con calcularlo al inicio de la zona de fusión.

Como consecuencia, el espesor promedio de película ($\bar{\delta}^*$) será:

$$\bar{\delta}^* = \frac{\delta_{\max}}{2}$$

Caja 10

Al llegar a esta parte del algoritmo, se han calculado valores de μ y $\bar{\delta}^*$ (cajas 8 y 9). Por un lado, μ se utiliza para evaluar la temperatura media de película corregida por disipación viscosa, recurriendo a la ecuación 4.2

$$\bar{T}^{**} = \frac{(T_b + T_m)}{2} + \underbrace{\frac{\mu v_j^2}{12 \text{ km}}}_{\text{Corrección por disipación viscosa}}$$

Por otra parte, $\bar{\delta}^*$ sirve para corregir a la rapidez de corte promedio. De esta forma:

$$\bar{\delta}^* = \frac{v_j}{\bar{\delta}^*} \quad \text{donde} \quad \bar{\delta}^* = \text{rapidez de corte promedio corregida}$$

Caja 11

Con los valores corregidos de temperatura media de película (\bar{T}^{**}) y rapidez de corte promedio ($\bar{\delta}^*$) se calcula una nueva viscosidad μ^* . Entonces

$$\mu^* = \mu(\bar{\delta}^*, \bar{T}^{**})$$

Caja 12

En forma similar a como se hizo en la caja 9, considerando μ^* se calcula un nuevo espesor promedio de película $\bar{\delta}^{**}$.

Caja 13 y 14

Como criterio de convergencia para este proceso iterativo, se toma la variación en el valor de $\bar{\delta}$. El hecho de que el espesor de película de fundido no presente variación en los cálculos, implica que las propiedades físicas del polímero son las adecuadas y la viscosidad satisface simultáneamente a las ecuaciones 4.2 y 4.3.

En caso de que no se satisfaga aún el criterio de convergencia, se toma $\bar{\delta}^{**}$ y \bar{T}^{**} como nuevos valores iniciales para realizar otra iteración en la caja 6.

Caja 15

Una vez que se han encontrado los valores correctos de viscosidad y temperatura media de película, por medio del ciclo anterior, el siguiente paso es calcular el parámetro adimensional ψ , vía ecuación 4.5.

Nótese que ψ es función de $\bar{\Phi}$, siendo este último el que requiere los valores de μ y \bar{T} para evaluarse.

Cajas 16, 17 y 18

Este último bloque de cálculos tiene como objetivo el cálculo de perfil reducido de cama sólida (x/w) como una función de la posición helicoidal z . Si el grado de adelgazamiento A es igual a cero, entonces se tiene una geometría de husillo de canales paralelos y se utilizará la ecuación 4.6. En caso contrario, se considerará el perfil reducido de cama sólida para husillo con canal gradualmente reducido (Ec. 4.7)

Es importante hacer notar que las ecuaciones 4.6 y 4.7 pueden acoplarse en el cálculo, pues X_1 y Z_1 corresponden al ancho de cama sólida y posición helicoidal en el punto donde termina la primera sección, mismo que será el inicio para un nuevo cómputo usando una ecuación diferente.

IV.5 Conclusiones sobre el Modelo Newtoniano

Evidentemente, los resultados teóricos proporcionados por este modelo se confrontaron con datos experimentales. Las conclusiones son muy claras:

- a) Este modelo presenta una dispersión considerable con respecto a la experimentación. Sin embargo, es importante comentar que dicha dispersión es menor a bajas temperaturas de barril que a altas.

- b) La primera fuente importante de error es despreciar el calor transferido por convección dentro de la película de fundido. Es claro que $T_b > T_m$ y que, entre mayor sea la diferencia entre ambas, más necesario es el considerar una temperatura promedio T_{av} ; en consecuencia, el calor necesario para calentar el polímero recién fundido de T_m a T_{av} es cada vez más importante.
- c) Los polímeros fundidos son fluidos altamente viscosos y su naturaleza es no-Newtoniana. Se deduce entonces que no es válido considerar a la viscosidad aparente como independiente de la temperatura; por tanto, el perfil de velocidad en la película de fundido no es lineal y, en consecuencia, la rapidez de flujo en la película de fundido es menor.

Enfatizando que las fuentes de error b y c se acentúan a mayores temperaturas de barril, (lo que concuerda con la experimentación) es lógico suponer que corrigiéndose se mejore la correlación teoría-experimento.

IV.6 Modelo Newtoniano Modificado

Para que el modelo siga siendo Newtoniano, es necesario suponer a la viscosidad μ como constante. Sin embargo, puede ahora

contabilizarse el calor transferido dentro de la película de fundido, sumando al calor latente de fusión, el calor necesario para calentar dicha película de T_m a una temperatura promedio T_{av} . Entonces:

$$\lambda^* = \lambda + C_m (T_{av} - T_m) \quad \text{Ec. 4.8}$$

El término $C_m (T_{av} - T_m)$ representa el calor transferido por convección dentro de la película de fundido.

Evidentemente, el algoritmo de cálculo es prácticamente el mismo pues la única variante es el considerar dicho calor latente. No obstante, el cálculo de la temperatura promedio presenta un cambio importante pues ahora debe realizarse para un régimen convectivo; de esta forma:

$$T_{av} = \frac{\int_0^{\delta} v_j T dy}{\int_0^{\delta} v_j dy} \quad \text{Ec. 4.9}$$

pero T (perfil de temperatura en la película) se calcula con la ecuación 4.1 y $v_j = \frac{V_j}{\delta} y$ (velocidad puntual de polímero en la posición y , ecuación derivada en el apéndice A). Sustituyendo ambas variables en la ecuación 4.9 y realizando las integraciones se obtiene la siguiente expresión:

$$T_{av} = \frac{2 T_b + T_m}{3} + \frac{\mu V_j^2}{12 k_m} \quad \text{Ec. 4.10}$$

Esta ecuación difiere notablemente con la ecuación 4.2

IV.7 Modelo no-Newtoniano

Con el modelo Newtoniano modificado, se ha eliminado una de las dos principales fuentes de error el modelo Newtoniano, referente a no considerar el calor transferido por convección en la película de fundido. Sin embargo, la segunda fuente de error - contradice por completo al comportamiento reológico de los polímeros fundidos.

Tales materiales son altamente viscosos y su viscosidad es dependiente de la temperatura así como de la rapidez de corte; durante el proceso de extrusión con tornillo simple, estos últimos parámetros se encuentran presentes debido al manejo de altas temperaturas y al flujo por arrastre del material polimérico.

Por tanto, este modelo no-Newtoniano debe considerar lo siguiente:

- Existe un perfil de temperatura en la película de fundido.
- La viscosidad es dependiente de la temperatura.
- Como consecuencia de lo anterior, existe un perfil de velocidad en el flujo del polímero fundido hacia el pozo situado en la parte posterior del canal diferente al lineal.

Debido a estos tres puntos principales, es imposible resolver la ecuación de movimiento sin resolver primero la ecuación de energía. Tadmor (2) enfatiza que la solución analítica de ambas ecuaciones acopladas conduce a serios problemas tanto en el caso Newtoniano como en el no-Newtoniano.

A grandes rasgos, el algoritmo que propone es el siguiente:

- a) Suponer un perfil de temperaturas.
- b) Evaluar la viscosidad en cada punto intermedio de la película con base en el perfil de temperaturas.
- c) Resolver la ecuación de movimiento para obtener el perfil de velocidades.
- d) Utilizar el perfil de velocidades anterior para resolver la ecuación de energía y obtener otro perfil de temperaturas.
- e) Si el perfil calculado es lo suficientemente próximo al su puesto entonces el problema está resuelto.

No obstante que el algoritmo anterior es sencillo, cabe resaltar que existen dos casos para la derivación de las ecuaciones a utilizar:

1. Suponer un perfil lineal de temperatura (despreciando el calor por disipación viscosa).
2. Suponer un perfil significativamente no lineal (cuando el calor por disipación viscosa es considerable).

Tal como se hizo para el modelo Newtoniano, la derivación de las ecuaciones, paso a paso, se realiza en un apéndice (apéndice B) y aquí solo se muestran describiéndose su funcionalidad.

PERFIL LINEAL DE TEMPERATURA

El significado de las variables se encuentra al final de este capítulo, Las ecuaciones son las siguientes:

$$1. \quad T = (T_b - T_m) \frac{y}{\delta} + T_m \quad \text{Ec. 4.11}$$

Perfil lineal supuesto de temperatura en la película como función de la coordenada y entre la superficie del barril y la interfase película de fundido-cama sólida.

$$2. \quad \frac{T - T_m}{T_b - T_m} = \xi + \frac{K_p}{A_1^2 K_m (T_b - T_m)} \left[1 - e^{-A_1 \xi} - \xi (1 - e^{-A_1}) \right]$$

$$\text{donde } \xi = y / \delta$$

Ec. 4.12

Perfil de temperatura en la película obtenido al resolver las ecuaciones de movimiento y energía utilizando el perfil lineal supuesto (ec. 4.11). A_4 y K_3 son constantes descritas en el apéndice B.

$$3. \delta = \left\{ \frac{[2 K_m (T_b - T_m) + U_1] X}{V_{bx} U_2 \rho_m [C_s (T_m - T_s) + \lambda^*]} \right\}^{1/2} \quad \text{Ec. 4.13}$$

Espesor de película como función del ancho de cama sólida. Nótese que, a diferencia de la ecuación 4.3, derivada para el modelo Newtoniano, en el lugar de μ aparecen dos variables U_1 y U_2 - así como λ^* . U_1 y U_2 contabilizan la variación de la viscosidad con la temperatura (ver apéndice B) y λ^* considera el calor transfereido por convección dentro de la película de fundido. Considerando la siguiente expresión:

$$U_1 = \frac{2 K_2}{A_4} (A_4 + e^{-A_4} - 1)$$

y puesto que $K_3 = m_0 \delta^2 K_2^{n+1}$, es importante resaltar que es función de U_1 y, recíprocamente, U_1 es función de δ por tanto para conocer el valor de δ es necesario emplear un método - por prueba y error que será descrito en el algoritmo.

$$4. \Phi = \left\{ \frac{V_{bx} U_2 \rho_m [K_m (T_b - T_m) + U_1/2]}{2 [C_s (T_m - T_s) + \lambda^*]} \right\}^{1/2} \quad \text{Ec. 4.15}$$

Término que representa la rapidez de fusión. Al igual que en

la ecuación 4.13 es importante enfatizar la existencia de las variables U_1 y U_2 en lugar de un valor constante μ que aparece en la ecuación 4.4.

Este parámetro Φ se utilizará en la ecuación 4.5 para calcular ψ , mismo que servirá para evaluar el perfil de cama sólida por medio de las ecuaciones 4.6 y 4.7.

Nótese que estas ecuaciones (4.5, 4.6 y 4.7) se aplican tanto para el modelo Newtoniano como para el no-Newtoniano, pues lo único que varía es el valor de Φ (rapidez de fusión).

$$5.) \quad T_{av} = T_m + (T_b - T_m) \left\{ \frac{\frac{A_4}{2} + e^{-A_4} \left(1 - \frac{1}{A_4}\right) - \frac{1}{A_4}}{A_4 + e^{-A_4} - 1} \right\} \quad \text{Ec. 4.16}$$

Temperatura promedio de la película necesaria para el cálculo del calor transferido por convección dentro de la película (Ec. 4.8).

$$6.) \quad K_m \left(\frac{dt}{dy} \right) = (T_b - T_m) \frac{1}{\delta} + \frac{K_p}{A_4^2 k_m} \left\{ A_4 e^{-A_4 \xi} - (1 - e^{-A_4}) \right\} \quad \text{Ec. 4.16a}$$

Rapidez de Transferencia de calor en la película

PERFIL NO LINEAL DE TEMPERATURA

Según Tadmor, este tipo de perfil se presenta cuando el equipo opera a velocidades altas de rotación de tornillo y temperatura - relativamente baja de barril.

Las ecuaciones en que se basa este modelo son las siguientes:

$$1.- \quad T = A_1 \xi^2 + (T_b - T_m - A_1) \xi + T_m \quad \text{Ec. 4.17}$$

Perfil de temperatura supuesto en la película. La Constante A_1 Tendrá que determinarse por un procedimiento de prueba y error.

$$2.- \quad \frac{T - T_m}{T_b - T_m} = \xi + K_3 \sqrt{\pi} e^{-A_3^2/A_2} \left\{ \xi \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right. \\ - \left(\sqrt{A_2} \xi + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) + (1 - \xi) \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \operatorname{erf} \left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \\ + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\xi \exp \left[- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right] - \exp \left[- \left(\sqrt{A_2} \xi + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right] \right. \\ \left. \left. + (1 - \xi) \exp \left(- \frac{A_3^2}{A_2} \right) \right] \right\}$$

Ec. 4.18

Perfil de temperatura obtenido al resolver sucesivamente las ecuaciones de movimiento y energía. Las constantes A_2 y A_3 son funciones de la cons-

tante desconocida A_1 :

$$A_2 = \frac{a A_1}{n} \quad ; \quad A_3 = \frac{a (T_b - T_m - A_1)}{2 n} \quad \text{Ec. 4.19}$$

Como puede observarse, tanto el perfil supuesto como el calculado están expresados en términos de A_1 , por tanto, existe un valor de A_1 que proporcione un perfil idéntico con las ecuaciones 4.17 y 4.18.

Por otra parte, las expresiones de δ y Φ para este modelo con perfil de temperaturas no lineal son exactamente las mismas que las ecuaciones 4.13 y 4.15, la única variación se presenta en las variables U_1 y U_2 que, como ya se dijo, evalúan la variación de viscosidad y la variación en el flujo debido al cambio en el perfil de velocidad respectivamente.

$$3.- \quad U_1 = \frac{K_3}{A_2} \sqrt{\pi} \exp \left(A_3^2 / A_2 \right) \left\{ \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right.$$

$$\left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\exp \left(- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right) - \exp \left(- A_3^2 / A_2 \right) \right] \left. \right\}$$

$$U_2 = 2 \left\{ \left(1 + \frac{A_3}{A_2} \right) + \frac{- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 - \exp \left(- A_3^2 / A_2 \right)}{\sqrt{\pi} A_2 \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right]} \right\}$$

Por último, el cálculo de la temperatura promedio en la película se complica notablemente, lo que proporciona la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
 4.- \text{Tav} = & \left\{ \left[\frac{A_1}{A_2} \left(\frac{A_3^3}{3A_2^2} + \frac{A_3}{2A_2} + \frac{A_2}{3} \right) + \frac{(T_b - T_m - A_1)}{2\sqrt{A_2}} \left(A_2 - \frac{A_3^2}{A_2} - \frac{1}{2} \right) \right. \right. \\
 & + \left. \left. T_m \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right] \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right] \right. \\
 & + \left. \left[\frac{A_1}{3A_2} \left(1 + \frac{A_3^2}{A_2} \right) - \frac{(T_b - T_m - A_1) A_3}{2A_2} + T_m \right] \right. \\
 & \left. \left[\exp \left(- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right) - \exp \left(- A_3^2 / A_2 \right) \right] \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right. \\
 & + \left. \left[\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{A_3}{A_2} \right) + \frac{(T_b - T_m - A_1)}{2} \right] \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp \left(- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right) \right\} / \\
 & \left\{ \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right] \right. \\
 & + \left. \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\exp \left(- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right) - \exp \left(- A_3^2 / A_2 \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 5.- \quad K_m \left(\frac{dT}{dy} \right)_{y=0} &= \frac{K_m}{\delta} (T_b - T_m) + \frac{K_3 \sqrt{\pi}}{2 A_2} + \frac{K_3 \sqrt{\pi}}{2 d A_2} \exp (A_3^2 / A_2) \\
 &\left\{ \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right) \right] \right\} \\
 &+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\exp \left(- \left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}} \right)^2 \right) - \exp \left(- \frac{A_3^2}{A_2} \right) \right] \left. \right\}
 \end{aligned}$$

Ec. 4.21a

Rapidez de Transferencia de calor en la película.

A juzgar por la magnitud de las ecuaciones de este modelo no-Newtoniano y considerando que forman parte de un proceso iterativo, además de la necesidad de evaluar funciones de error para una gran cantidad de parámetros, es lógico concluir que el uso de una computadora digital es indispensable.

Nótese que las ecuaciones derivadas para el cálculo de perfil de cama sólida en husillo con profundidad de canal constante o variable, son exactamente las mismas para el modelo Newtoniano y el modelo no-Newtoniano. La única variación radica en la evaluación de la rapidez de fusión (parámetro Φ).

El parámetro tiene dos formas de expresarse:

$$\Phi = \left\{ \frac{v_b x U_2 \int_m [K_m (T_b - T_m) + U_{1/2}]}{2 [C_s (T_m - T_s) + \lambda^*]} \right\}^{1/2} \quad \begin{array}{l} \text{Modelo} \\ \text{No-Newtoniano} \end{array}$$

$$\Phi = \left\{ \frac{V_{2x} \int_m \left[K_m (T_b - T_m) + \frac{\mu}{2} V_j^2 \right]}{2 \left[C_s * T_m - T_s \right] + \lambda} \right\}^{1/2}$$

Modelo
Newtoniano

Ec. 4.22

Con base en estas dos ecuaciones es fácil notar que U_1 y U_2 evalúan la variación de viscosidad y λ^* , de acuerdo con la ecuación 4.8, involucra el calor por convección dentro de la película. De esta forma, las dos principales fuentes de error del modelo Newtoniano quedan eliminadas.

Nótese que U_1 , U_2 y T_{av} son funciones de A_1 y es, precisamente esta última, la constante a determinar por un proceso iterativo, tomando como criterio de convergencia el ajuste entre los perfiles de temperatura supuesto y calculado dentro de la película de fundido (Ecs. 4.17 y 4.18).

IV.8 Cálculo de Potencia para la Fusión

Otra gran aportación teórica que ha hecho Tadmor al modelamiento matemático del proceso de extrusión es el cálculo de la potencia consumida en el proceso.

Para el caso de la zona de transporte de fundido, la potencia introducida a través de la flecha hacia un elemento diferencial en la dirección helicoidal dem es:

$$dem = des + dep + dek \quad \text{Ec. 4.23}$$

donde:

dem = potencia total introducida a través de la flecha.

des = potencia consumida por disipación viscosa en el canal y el claro de fileta.

dep = potencia debido al incremento de presión en el fluido.

dek = potencia disipada por cambio en energía cinética.

el cambio en la energía cinética es de muy pequeña magnitud y por ello se considera que $dek = 0$. Por otra parte, en la zona de plastificación, la coexistencia sólido-fundido determina que dep sea también muy pequeño e incluso despreciable.

Debido a lo anterior, la potencia se reduce a:

$$dem = des \quad \text{Ec. 4.24}$$

A su vez, des será la suma de las potencias disipadas por efectos viscosos en el canal (desc) y en las filetas (desf):

$$des = desc + desf \quad \text{Ec. 4.25}$$

la velocidad del barril V_b y el espesor de dicho pozo será la profundidad de canal H . Por tanto, la rapidez de corte en el canal es:

$$\dot{\gamma}_c = \frac{Vb}{H} \quad \text{Ec. 4.26}$$

y la viscosidad en el canal será:

$$\eta_c = \eta(\dot{\gamma}_c, T_b) \quad \text{Ec. 4.27}$$

La potencia consumida por disipación viscosa se expresa como:

$$des_c = (\pi^2 (Db - 2\delta)^2 N^2 p)(W - x) \eta_c \left[\frac{Fz \cos^2}{H} + \frac{4 \sin^2}{\text{sen}} \right] \Delta l$$

Ec. 4.28

Por otra parte, la rapidez de corte del polímero en la fileta será $\dot{\gamma} = Vb/\delta_F$ donde $\delta_F =$ claro de fileta y su viscosidad correspondiente será:

$$\eta_F = \eta(\dot{\gamma}_F, T_b) \quad \text{Ec. 4.29}$$

Por tanto:

$$des_F = \frac{(\pi^2 (Db - 2\delta)^2 N^2 p) \Delta l}{\delta_f \text{ sen } \Theta} e \eta_F \quad \text{Ec. 4.30}$$

El mismo valor de η_F puede utilizarse para calcular la potencia disipada en el claro de fileta:

$$HP_F = Vb \eta_F \dot{\gamma}_F e \Delta z \quad \text{Ec. 4.31}$$

Finalmente, el cálculo de la potencia requerida para transportar el fundido, debe considerar la rapidez de corte y la viscosidad del polímero fundido que fluye en el canal del husillo.

Las velocidades de corte en las direcciones transversal ($\dot{\gamma}_x$) y helicoidal ($\dot{\gamma}_z$) del canal son:

$$\dot{\gamma}_x = \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)_{y=R} = - \frac{4 v_b x}{H}$$

$$\dot{\gamma}_z = \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} \right)_{y=R} = \frac{v_b z}{H} = \frac{v_b \cos \theta}{H}$$

cuya rapidez de corte resultante es:

$$\dot{\gamma}_{b1} = \left(\frac{v_b^2 \cos^2 \theta}{H^2} + \frac{16 v_b^2 x^2}{H^2} \right)^{1/2} \quad \text{Ec. 4.32}$$

y su viscosidad es:

$$\eta_B = \eta (\dot{\gamma}_{b1}, T_b) \quad \text{Ec. 4.33}$$

Por tanto la potencia requerida para transportar el fundido será:

$$HP_m = \frac{v_b}{\cos \theta} \eta_B \dot{\gamma}_{b1}^2 \Delta z (W - \bar{x}) \quad \text{Ec. 4.34}$$

IV.9 Descripción de los programas de Computadora Publicados en la Literatura

IV.9.1 Planteamiento inicial

Como ya se mencionó en el capítulo introductorio de este trabajo de tesis, para la zona de plastificación en un extrusor de tornillo simple se han propuesto diversos modelos:

- Tadmor
- Vermeulen
- Donovan
- Edmonson y Fenner
- Lindt, etc.

No obstante que, como puede verse, la simulación matemática de los extrusores plastificadores es un tema de gran interés científico, en nuestro país no se ha implementado un programa para el análisis de los modelos existentes y el desarrollo de nuevos y mejores.

El presente trabajo de tesis, pretende constituir el primer paso para el desarrollo de un macrosistema de simulación para el proceso de extrusión, que involucre no solo la zona de plastificación sino también las zonas de transporte de sólidos y dosificación.

Naturalmente, un solo modelo matemático no puede predecir todas las situaciones posibles durante la operación del equipo. Sin embargo, puede desarrollarse una configuración global de cómputo que, por medio de diversos modelos, sea capaz de abarcar la totalidad de las mismas.

Modelos matemáticos existen muchos publicados, pero en casi ninguno de ellos se hace explícito un algoritmo de cálculo y menos aún un listado de programa. Hablando en forma más concreta, solo Natti S. Rao ha publicado listados de programa que hacen uso de diversos modelos para la simulación de extrusores, boquillas, tolvas, etc., es decir, se ha preocupado por divulgar el aspecto práctico de los modelos matemáticos propuestos.

Para el caso de interés, es decir, la zona de plastificación de sólidos, Rao ha publicado dos programas de computación basados en las ecuaciones desarrolladas por Zehev Tadmor. El primero de ellos aparece en el libro "Designing Machines and Dies for Polymer Processing with Computer programs", editado en el año 1983 y el segundo aparece en "Computer Aided Design of Plasticating -- Screws", editado en 1986.

Ambos programas, al inicio del presente trabajo presentaron las mismas características y ofrecieron las mismas dificultades. En lo sucesivo, el programa del año 1983, lo denominaré PROGRAMA 1 y al restante PROGRAMA 2 .

A grandes rasgos:

- 1.- Programa 1 y programa 2 se presentaron como listados en lenguaje de programación FORTRAN IV y, por tanto, implementados para el uso de tarjetas.
- 2.- Programa 1 no contaba con diagrama de flujo ni con descripción de variables. Por su parte Programa 2 presentaba un -- enorme diagrama de flujo y describía solo las variables dato requeridas.
- 3.- Ambos estaban acompañados de datos de prueba y sus resultados correspondientes.
- 4.- Programa 1 y Programa 2 solo mostraban resultados teóricos pero no se enfatizaba si habrían sido, o no, corroborados experimentalmente.
- 5.- La diferencia de tamaño entre ambos programas es enorme, pues Programa 1 consta de 126 líneas de instrucciones mientras Programa 2 consta de 430. Cabe resaltar que en dichos tamaños no se toman en cuenta las líneas de formato y manejo de pantalla.
- 6.- Programa 2 carecía de subrutina para el cálculo de funciones de error misma que, como se verá posteriormente, requería ser calculada con una alta precisión.

- 7.- Ambos paquetes solo proporcionaban tablas de datos, lo que hizo necesario acoplarles un paquete de graficación.
- 8.- El cálculo de viscosidades es un aspecto importantísimo para el modelo de Tadmor, sin embargo, Programa 1 utiliza la ecuación de Muensted y Programa 2 el polinomio de Klein. Como se expondrá más adelante, fue necesario uniformizar dicho proceso.
- 9.- Programa 2 se presentaba también en lenguaje Basic pero con un cambio total en la nomenclatura de variables, lo que complicaba notablemente su análisis.

Con base en los nueve puntos anteriores, los principales problemas a resolver para conformar un paquete de cálculo manipulable fueron los siguientes:

- I. Traducir ambos programas a lenguajes de programación más recientes como GWBASIC y FORTRAN 77 para disponer de más recursos.
- II. Hacer explícitos los algoritmos de cálculo elaborando pseudocódigos y diagramas de flujo más detallados (ilustrando criterios y ecuaciones utilizadas).
- III. Acoplar al Programa 2 el cálculo preciso de funciones de error.

IV. Uniformizar el cálculo de viscosidades utilizando una misma correlación en ambos programas teniendo cuidado de las unidades manejadas.

V. Elaborar un paquete de graficación adecuado para ambos - (Programa 1 y Programa 2).

VI. Realizar una sencilla confrontación experimental con los - resultados que proporcionan ambos paquetes.

El Programa 1 al igual que el programa 2 solo se presentan como una "caja negra" a la cual se alimentaban datos y se obtenían resultados. Desde mi punto de vista, el tomar estos programas y manipularlos sin conocer a fondo el fundamento, mecanismo y características de ellos no tiene sentido, pues continuaríamos en la misma situación de dependencia técnica. No obstante, el escudriñar sus detalles, nos hace capaces de desarrollar un espíritu crítico, lo que proporciona las armas para aportar nuevas ideas y buscar mejores caminos.

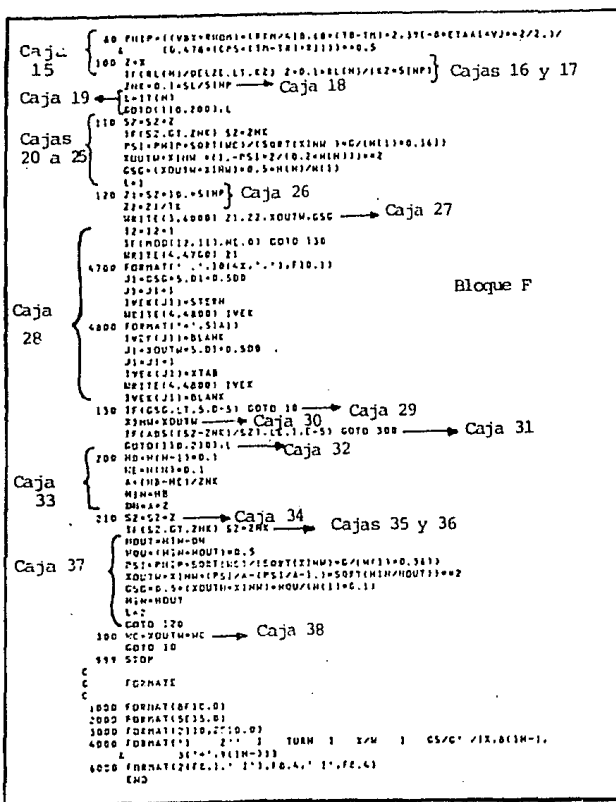
A continuación procedo al análisis de cada uno de los programas citados.

IV.9.2 Análisis del Programa 1 (Modelo Newtoniano)

Como ya se mencionó antes, el listado de este programa se publicó en el año de 1983. Se trata de un listado pequeño de 126 líneas de instrucciones en lenguaje Fortran IV e implementado para el uso de tarjetas.

La presentación original de este programa es la siguiente:

	<pre> C A SIMPLIFIED MELTING MODEL FOR SINGLE SCREW EXTRUSION C IHTGCEP=4 * BLAMEP * ** STEPH/100 * ZTAS/X ** IVEKIS13/51 ** ** ECAL EL(201,1120) , 11120) 10 RLAB11 , 1000 , (100+599) RHDH,RHDS , CPH,CPS , RCR , RI , TG , TR RLAD11 , 2000) 00 , A1 , A2 , A3 , A4 ECAD11 , 2000) 01 , R2 , C1 , C2 , T0 RFAD11 , 1000) 12 , DB , NFIT , RH , RH1 , G , TB , DFE REAV11 , 3000) 2 , KZ , DELZE , EMELT ECAD11 , 1000) 10 , L11 , I1 , J1 , CH11 , I1 , J1 </pre>	Bloque A
	<pre> PI=J1/PI2527 PHI=ATGATEC/(PI+DB3) Cosp=COS(Phi) SInP=SIN(Phi) WC=0.1+1E+6*USP/RH-WFLT) VB=PI+DB+ELI/100. VR=VB*SInP VSZ=C/G/10.3+WC+HE11+RHDS) VZ=SQRT(VB+2*VSZ+2-2*VB+VSZ+COSP) T=0.5*E10+TR) X1K=J1 T=0.1+DELZE/SInP </pre>	Bloque B
	<pre> IT1=1 SL=EL(I1)-EMELT DO 15 I=2 , J IT(I)=1 SL=SL-EL(I) IF(CH1-I1 , EQ , HE11) GO TO 15 IT(I)=2 </pre>	Bloque C
	<pre> 15 CONTINUE I1=SL/150.+DELZE)*0.5 I2=I1 S2=EMELT+0.1/SInP SL=0. WRITE(4 , 4500) (I1 , I10 , I10 , I10) 4500 FORMATE '10 I 65/G/162 I X/M/100', 5(11,12), 3X , 100 X// ' I 4 , 101',') WRITE(3 , 4000) </pre>	Bloque D
<p>Cajas 4 a 7</p> <p>Caja 10</p>	<pre> DO 300 M=1 , J IF (M .GT. 11) WRITE(4 , 4500) 4500 FORMATE '...', 3(11H , J) SL=SL-EL(M) DFC=DFE K=2} → Caja 1 I=1} → Caja 2 20 GAMP1=VJ/10./DFC → Caja 2 30 K=3-E → IF (BI , CO , B , 140 , B7 , EO , B , 3) GO TO 40 AT=BI+EXP(B2/(T-273.15)) GUTO 50 40 IT0=1-T0 AE=10+E-C1+IT0/(C2+IT0) 50 Z11=ALOG10(AT+GAMP1) [TAAZ=10.-10+1E(ETAAZ-20)+A31+2M]+A21+2U1+A1]+2M]+A0+ALOG10(AT) I=0.5+10+1M)+ETAAZ+2.31E+BVZ+2+34.81/RCR → Caja 8 GOTO(160,70) E → Caja 9 60 DFAC=1.68E+20/34+10+1M)+2.31E+BVZ+2+34.81/RCR+VJ+2]+M/1VBZ+RHDS+ (0.237)*CPS*(1M+TR)+0.237+R1]+3]+0.5 GAMP1=Z.1*VJ/DFAC ETAAZ=ETAAZ GUTO 30 70 II (ANSI(ETAAZ-ETAA1)/ETAAZ1 , LC , D , 05) GO TO 80 → Caja 11 I=1+1 → Caja 12 IF (I , GT , 1000) GO TO 100 → Caja 13 DJ=DFAC+0.01 → Caja 14 GUTO 70 </pre>	Bloque E



Para la descripción de los bloques E y F utilicé diagramas de flujo y, por ello, en el listado aparecen indicadas las líneas comprendidas en las diversas cajas.

*BLOQUE A

Este bloque tiene como función el captar los datos necesarios para el desarrollo de los cálculos. Con base en una tabla adjunta a este listado puedo hacer la siguiente correlación entre datos y variables utilizadas.

TABLA 4.1

D A T O S		UNIDADES	VARIABLE	SECCION
Densidad de fundido	m	g/cm ³	R H O M	Propiedades
Densidad de sólido	s	g/cm ³	R H O S	
Calor específico de fundido	Cpm	KJ/KgK	C P M	Físicas
Calor específico de sólidos	Cps	KJ/KgK	C P S	
Conductividad térmica de fundido	Km	W/m-K	R K M	del
Calor latente de fusión		KJ/Kg	R I	Polímero
Punto de fusión	Tm	°C	T M	
Temperatura ambiente	Tr	°C	T R	
Coefficientes de Viscosidad			A0, A1, A2, A3, A4, B1, B2, C1, C2,	Propiedades reológicas del polímero
Temperatura de referencia	To		T O	

DATOS		UNIDADES	VARIABLE	SECCION
Paso del husillo	L	mm	TK	Condiciones de opera- ción y geo- metría del husillo
Diámetro del barril	Db	mm	DB	
Ancho de Fileta	e	mm	WFLT	
Número de canales	N	-	RN	
Velocidad de husillo	N	RPM	RN1	
Gasto másico	G	Kg/h	G	
Temperatura de barril	Tb	°C	TB	
Espesor inicial de película de fundido	di	mm	DFE	
Número de zonas del husillo	J	-	J	
No. de incrementos por zona	-	-	KZ	Formato pa- ra los cálculos
Longitud axial por incremento	-	mm	DELZE	
Retraso en el fundido	-	mm	RMELT	
Longitud/zona de husillo	li	mm	RL(I)	Geometría del husillo
Profundidad/zona	Hi	mm	H (I)	

Es importante resaltar que en la segunda columna se da la notación que utiliza Tadmor en la publicación de sus ecuaciones.

*BLOQUE B

Es la porción del programa donde se realizan cálculos previos a un proceso iterativo. Dichos cálculos son los siguientes:

$$(PHI) \quad \Theta = \tan^{-1} \left(\frac{L}{\pi Db} \right) \dots \text{Angulo de fileta}$$

- (WC) $W_c = \left(\frac{L \cos \theta}{n} - e \right) \dots$ Ancho de canal
- (VB) $V_b = \pi D b N \dots$ Velocidad relativa de barril
- (VBX) $V_{bx} = V_b \sin \theta \dots$ Componente de la velocidad de barril transversal al canal
- (VSZ) $V_{sz} = \frac{G}{\rho_f H W} \dots$ Velocidad de los sólidos en la dirección helicoidal del husillo
- (VJ) $v_j = \sqrt{V_b^2 + V_{sz}^2} - 2V_{sz} \cos \theta \dots$ Diferencia vectorial entre V_b y V_{sz}
- (T) $T = \frac{T_b + T_m}{2} \dots$ Temperatura media entre la Temperatura de barril y la temperatura de fusión
- (X) $\Delta z = \frac{\Delta l}{\sin \theta} \dots$ Incremento helicoidal correspondiente a un incremento axial

Entre paréntesis aparecen las variables utilizadas en el programa. Nótese que COSP y SINP son el coseno y el seno, respectivamente, del ángulo de fileta θ ; por otra parte XINW representa la razón del ancho de cama sólida al ancho de canal al inicio de la fusión, es decir:

$$XINW = \frac{x}{W} = 1$$

es igual 1 porque al inicio de la fusión, x es prácticamente igual a W .

Todas estas son ecuaciones desarrolladas por Zehev Tadmor y no presentan ninguna modificación. (2)

*BLOQUE C

En este bloque, el programa realiza un proceso de identificación de las zonas del husillo con profundidad constante o con profundidad variable.

La variable dimensionada IT (I) sirve como "identificador" de zona pues posteriormente, en el bloque F, con base en el valor de IT (I) (el cual puede ser 1 ó 2) se utiliza la ecuación de perfil de cama sólida para husillos con profundidad constante o para husillos con profundidad variable de canal (Ecs. 4.6 y 4.7).

Para IT (I), el subíndice I representa el número de zona en el husillo. Expresado en pseudocódigo, las actividades de este bloque son las siguientes:

1. Generalmente la primera zona del husillo tiene profundidad de canal constante y, para usar la ecuación adecuada en el bloque F, $IT(1) = 1$.

- 2.- La variable SL será la longitud disponible para la fusión del material. SL contendrá la suma de las longitudes de cada zona del husillo eliminando el retraso en el fundido del material.
- 3.- Para el caso en que se detecte un cambio de profundidades de canal en dos zonas consecutivas del husillo se tendrá una zona de compresión o de expansión en cuyo caso $IT(I) = 2$.

*BLOQUE D

El valor de SL calculado en el bloque anterior se usa para obtener el valor de la variable I1, misma que, junto con I2 se utiliza para el formato de presentación en tarjetas. Dicho formato es intrascendente para el análisis del modelo y por ello no es necesario describirlo,

Lo único importante es el cálculo de la longitud helicoidal correspondiente al retraso en el fundido medido axialmente (SZ) y la reinicialización de SL a cero.

*BLOQUE E

Este programa realiza el cálculo del perfil de cama sólida en forma gradual, es decir, evalúa el ancho de cama sólida para pe-

queños incrementos de longitud axial.

La primera línea de este bloque constituye el inicio de un ciclo de cálculo cuyo punto de retorno se encuentra en la etiqueta 300; dicho retorno se presenta una vez que se han evaluado todos los anchos de cama sólida correspondientes a una sección del husillo. En otras palabras, este ciclo se reanuda para cada zona geométrica del husillo.

La sentencia WRITE-FORMAT localizada en la etiqueta 4500 constituye la separación de los resultados teóricos por medio de una línea punteada que indica un cambio de sección.

En este bloque se encuentra un proceso iterativo para obtener un valor de viscosidad muy importante para el modelo matemático. Para proceder a dicha iteración se inicializan las siguientes variables:

$$SL = SL + RL (N)$$

Nuevamente SL será la suma de las longitudes de todas las secciones geométricas del husillo pero ahora sin eliminar el retraso en el fundido.

$$DFA = DFE$$

DFE se alimentó al programa como dato, se trata de un valor estimado de espesor inicial para la película de fundido. DFE debe

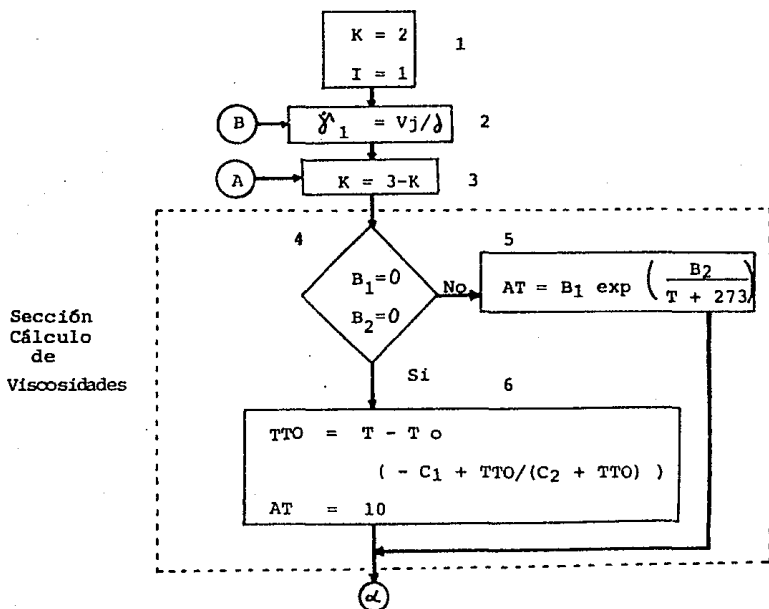
permanecer constante y para ello, será DFA la variable a utilizar en la interacción y estará sujeta a variación.

$$K = 2$$

$$I = 1$$

El parámetro K posee valores que fluctúan entre 1 y 2 y sirve como controlador del proceso iterativo. Por su parte I es un contador de iteraciones.

Para entender el proceso iterativo considérese el siguiente diagrama de flujo:



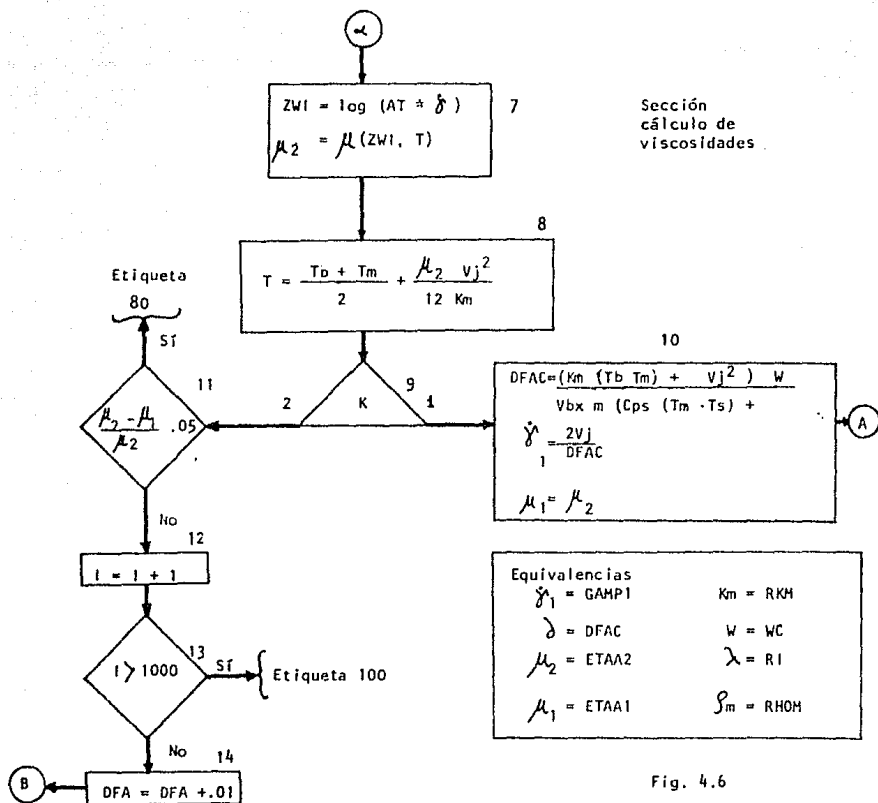


Fig. 4.6

Como puede observarse fácilmente en el diagrama anterior, el objetivo de este proceso iterativo es el de determinar un valor de viscosidad μ prácticamente invariante, recurriendo a las ecuaciones

4.2 y 4.3 para calcular temperatura media de película y espesor de película respectivamente.

El contador I evaluado en la caja 12, sirve para interrumpir - el proceso iterativo en el caso de que sea imposible alcanzar el criterio de convergencia establecido en la caja 11, como puede observarse acepta un máximo de mil iteraciones.

La descripción por cajas de este diagrama es la siguiente:

1. Inicializar la variable de control K y el contador de iteraciones I (Caja 1)
2. Calcular el valor de δ_1 (GAMP1) por medio del valor conocido V_j y el espesor de película δ (DFA) (Caja 2)
3. Modificar el valor de la variable de control K (Caja 3)
4. Calcular un valor de viscosidad utilizando la ecuación de Muensted aplicando el factor de corrimiento AT. Este factor se obtiene por medio de la corrección WLF (Caja 5) o Arrhenius (Caja 6) (Cajas 4,5, 6 y 7)
5. Obtener el valor de temperatura media de película considerando el calor por disipación viscosa (Caja 8)

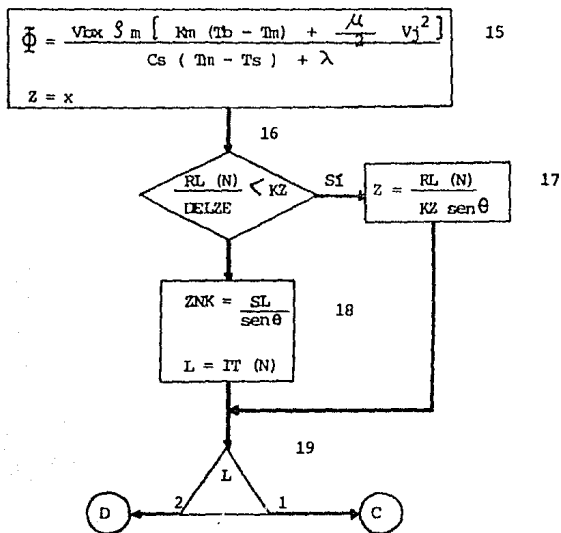
6. Direcciónar la ejecución del programa con base en el valor de la variable de control K (Caja 9)
7. Calcular el espesor de película (DFAC) por medio de la ecuación 4.3 y, con este valor, calcular una nueva δ retornando a la caja 3 para un nuevo cálculo de viscosidad. Todo esto ocurre siempre y cuando $K = 1$ (Caja 10)
8. Para el caso en que $K = 2$ se procede a calcular la variación relativa entre dos valores de viscosidad calculados consecutivamente. Si se satisface el criterio de convergencia establecido, se interrumpe el proceso iterativo y se continua el programa; si no se satisface continuarán las iteraciones (Caja 11)
9. Incrementar el valor del contador de iteraciones (Caja 12)
10. Interrumpir el proceso iterativo en el caso en que se sobrepasen mil iteraciones. Si aún no se excede tal número se incrementa el valor de espesor de película en 0.01 mm, retornando posteriormete a la caja 2 reiniciando el ciclo (Cajas 13 y 14)

* BLOQUE F

Una vez que se ha encontrado un valor invariable de viscosidad

en el bloque E, se procede a calcular el perfil de cama sólida.

Considérese el siguiente diagrama de flujo:



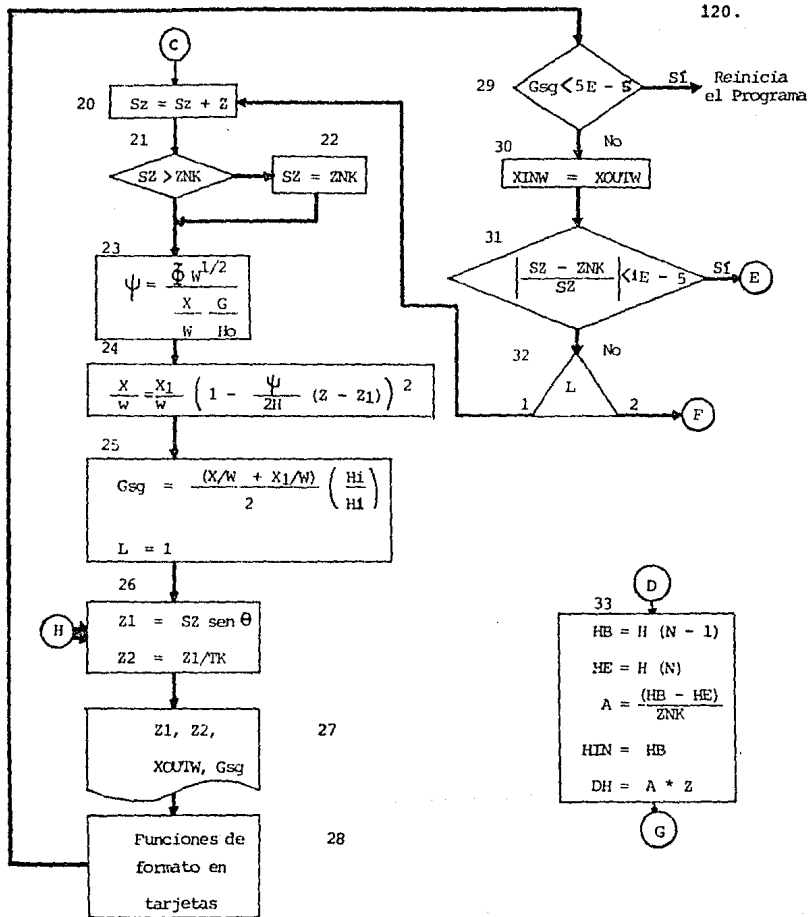


Fig. 4.7

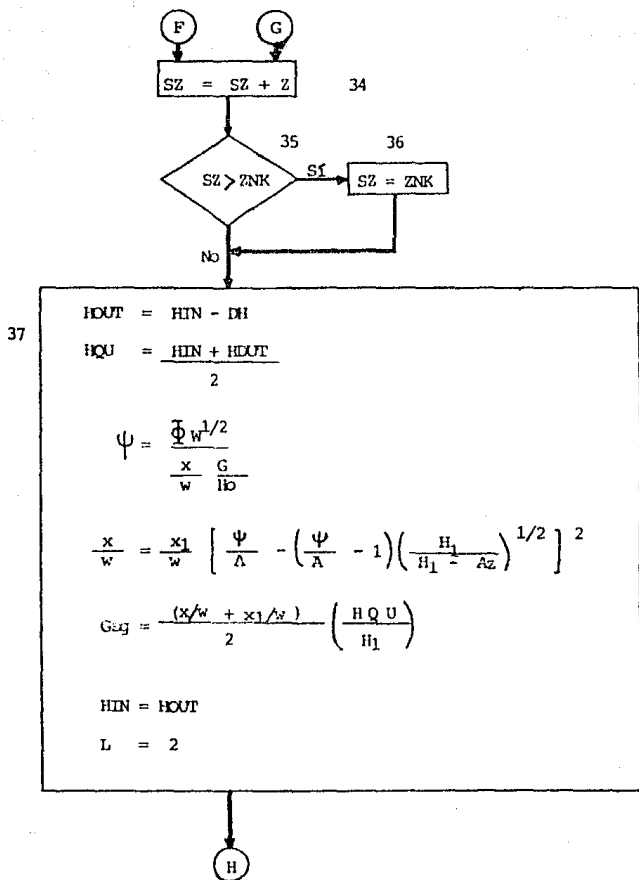
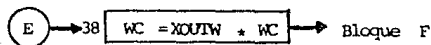


Fig. 4.7



Tal como lo hice para el bloque E, realizaré la descripción por cajas de este diagrama de flujo.

Caja 15

Esta caja abarca las ecuaciones identificadas con las etiquetas 80 y 100 del listado. Como puede verse, la ecuación de la etiqueta 80 es la porción denotada como Φ en la ecuación 4.4, donde Φ es una medida de la rapidez de fusión.

Por otra parte, en la etiqueta 100, la expresión $Z = X$ indica que Z será ahora la longitud helicoidal correspondiente al "paso" de una vuelta del husillo ("Lead" del husillo).

Cajas 16 y 17

En estas cajas se verifica, en caso necesario, la corrección en el incremento de longitud helicoidal z . Si al dividir la longitud de la zona considerada en ese momento del cálculo ($RL(N)$), entre la longitud axial por incremento ($DELZE$) no se sobrepasa el número de incrementos establecido inicialmente (KZ), entonces puede dividirse la longitud helicoidal de la zona ($RL(N)/\text{sen } \theta$) entre tal número de incrementos (KZ) sin tener ningún problema.

Caja 18

En este punto del programa ZNK será la longitud helicoidal correspondiente a las secciones del husillo acumuladas hasta el momento del cálculo. Es importante recordar que SL es la suma de las longitudes de cada zona del husillo y cuyo valor se incrementa en cada cambio de sección. Se inicializa también la variable L.

Caja 19

Aquí se direcciona el proceso hacia el uso de las ecuaciones para el cálculo del perfil de cama sólida en canales con profundidad constante o para canales con profundidad variable.

Para $L=1$ el programa utiliza el modelo para canales con profundidad constante. $L = 2$ para el correspondiente a profundidad variable.

Cajas 20 a 25

Estas cajas constituyen el cálculo del perfil de cama sólida para canales con profundidad constante. En la caja 20 se incrementa el valor de la suma de longitud helicoidal (SZ). En las cajas 21 y 22 se realiza la corrección para SZ en caso de que se sobrepase el valor de las longitudes acumuladas correspondientes a

las secciones del husillo.

Las ecuaciones 4.5 y 4.6 se aplican en las cajas 23 y 24 respectivamente y, por último, en la caja 25 se evalúa el porcentaje de sólidos en el extrudado considerándolo igual al ancho reducido promedio de la cama sólida en el incremento. Se enfatiza que $L = 1$ para asegurar el retorno de la caja 32 hacia la caja 20.

Caja 26

Aquí simplemente se calcula la longitud axial correspondiente al punto helicoidal considerado en el momento del cálculo (Z1) y el número de vuelta respectivo (Z2)

Caja 27

Constituye la sección de impresión de resultados para el incremento en turno, cabe resaltar que

Z1 = Longitud axial del husillo

Z2 = No. de vuelta del husillo

XOUTW = X/W a la salida del incremento axial

GSG = % de sólidos promedio en el incremento axial

Caja 28

Abarca las funciones para formato de presentación en tarjetas,

por ello no es muy importante su descripción y se omite.

Caja 29

Para dar por terminado el proceso de cálculo, se toma como criterio de convergencia el valor de porcentaje de sólidos (GSG) pues, cuando es un valor muy pequeño se considera que la fusión se ha completado.

Caja 30

El ancho reducido de cama sólida a la salida de un incremento (XOUTW) será el ancho reducido inicial para el siguiente (XINW), por ello, para un nuevo avance en la longitud helicoidal es necesaria la identidad expuesta en esta caja.

Caja 31

Calculando el porcentaje de diferencia entre la suma de longitud helicoidal y la longitud helicoidal total de la sección considerada se sabe si es necesario cambiar de sección o no.

Caja 32

Con base en el valor de L se decide si se repite el cálculo para el modelo con profundidad constante o para el correspondiente

a profundidad variable, de acuerdo al criterio expuesto en la caja 19.

Caja 33

En este punto se evalúa la variación de profundidad en las secciones de compresión o expansión del husillo. Como metas principales tiene el cálculo del grado de compresión de la sección (A) y el cambio de profundidad para un incremento en la longitud helicoidal (DH).

Cajas 34 a 37

Se trata de un proceso similar al presentado en las cajas 20 a 25 pero para el caso de husillos con profundidad de canal variable aplicando las ecuaciones 4.5 y 4.7.

Caja 38

Constituye un paso de reanudación de los cálculos para una nueva sección del husillo. En este punto retorna al bloque E.

OBSERVACIONES

El diagrama de flujo anterior pone en evidencia un aspecto importantísimo de este programa: se encuentra basado en el modelo Newtoniano desarrollado por Tadmor para calcular el perfil de cama sólida, de allí la importancia de calcular un valor invariante de viscosidad en el bloque E.

Otra característica importante, es que el algoritmo del programa considera como invariantes a las propiedades físicas alimentadas como datos, esto es una diferencia notable respecto al mecanismo de cálculo propuesto originalmente por Tadmor, y que ya describí previamente.

No obstante a ello, es seguro que para la ejecución de este programa se requerirá el determinar las propiedades físicas del polímero a una temperatura que se estime próxima a la temperatura media por calcular, ello justificaría el considerarlas invariables a lo largo del proceso.

Para el cálculo de viscosidad se ha utilizado en este programa el modelo de Muensted, mismo que tiene un fundamento teórico y que se basa en la aplicación de un factor de corrimiento calculado por la ecuación WLF o por la ecuación de Arrhenius. En caso de que se deseara cambiar a otro método para determinar el valor de μ , la sección punteada de la figura 4.6 podría sustituirse fácilmente.

IV.9.3. Análisis del Programa 2 (Modelo No-Newtoniano)

La diferencia de tamaño entre este programa y el Programa 1 es enorme. El listado original es el siguiente:

```

IMPLICIT KFAL+A (A-H,O-Z)
COMMON/AXOFFF/AX0,AX1,AX11,AX2,AX22,AX12
COMMON/CFOFFF/CO,C1,C2
DIMENSION RL(10),H(10),MPUNKT(10),UEB(10),HQU(10)
DATA RKW/'KW',RMD/'MP',CTEMP/'C',FTEMP/'F'/
INTEGER=4 XTAB(A)/'PHY','AK0','+GEO','+OPE',
      'CKO','+TOL','+TEX','+END'/
INTEGER=4 BLANK/' ',STERN/'',XTAB/'X',IYEX(51)/51*
GOTO 15
10 ZW10=RP4+HPS+HPE
IF(KMASS.EQ.0) ZW10=ZW10+0.745700
WRITE(6,8500) ZW10,DM
RND=RHUS+DB+SUMRNO+5.37AD-L/G
IF(RND.LF.1.0-1) GOTO 13
TEMP=1.00/(4.3108500+RND-RND-0.240470-1)
GOTO 14
13 TEMP=5.00
14 IF(KMASS.EQ.0) TEMP=TEMP+5.00/9.00
ZW10=GGG+1.02
WRITE(6,RND) ZW10
15 READ(1,5000,(NO=000) KENN,MASS
DO 20 I=1,A
IF(KENN.EQ.XTAB(I)) GOTO 30
20 CONTINUE
WRITE(6,A000) KENN
GOTO 900
30 KGN=1
GOTO (40,45,50,60,65,70,80,90),XGO
40 PEAD(1,5100) RNDM,RNOS,CPM,CPS,RKM,RLAH,TH,RHUSO
GOTO 15
45 READ(1,5100) AK0,AK1,AK11,AK2,AK22,AK12
GOTO 15
50 READ(1,5200) J,INCR,DELTA0,DELO,RMELT,TFAKT,RFAKT
HEAD(1,5100) (RL(I),I=1,J),(H(I),I=1,J),RLEAD,DB,W,FLWID,RNY,DELFL
IF(RFAKT.EQ.0.00) RFAKT=1.00
KRND=MASS
GOTO 15
60 READ(1,5100) RH,G,TR
GOTO 15
65 READ(1,5100) CO,C1,C2
GOTO 15
70 READ(1,5100) RMYN,TOLT,TOLDEL,TOL3,TOLX
GOTO 15
80 KMASS=MASS
READ(1,5300) UEB
WRITE(6,8000) UEB
WRITE(4,4150) UEB
WRITE(4,4000) (I,I=10,90,10)
GOTO 15
90 IF(KMASS.EQ.0) GOTO 91
WRITE(6,A100)
DIM=RNPD
TDIM=FTEMP
GOTO 93
91 WRITE(6,4150)
DIM=RKM
TDIM=CTEMP

```

Bloque A

Bloque B

<pre> 93 VSZF=12.00**3.00 DFLF1=144.00/3600.00 DELF2=144.00/778.00 T121F=3600.00/778.00 PHIF1=1.00/12.00**4.00 PHIF2=1.00/3600.00 PHIF3=1.00/778.00 PSIF=3600.00 EF=12.00 EFF=2543.00 UZWIF=1.00/6.01 HPHF=1.00/6.403 ZF=1.00/2.37607 VBF=1.00/60.00 </pre>	Bloque C
<pre> PI=3.141593 XOUTW=1.00 ZWID=RLCAD/(DN*PI) PHID=DATAH(ZWID) WUPI=DSORT(PI) IF(DEFL,EO,0.00) DELFL=FLWID*13.00/1.03 Bloque D IF(DELO,EO,0.00) DELO=5.400*DEFL IF(LW,GT,0.00) GOTO 94 W=RLCAD/PI*GCOS(PHIA)-FLWID </pre>	
<pre> 94 WRITE(6,6200) RNY,RLCAD,FLWID,W WRITE(6,6300) RW,G,DR WRITE(6,6400) ((I,RL(I),H(I)),I=1,J) WRITE(6,6500) </pre>	Bloque E
<pre> IF(KHASS,EO,1) GOTO 98 RHHH=RHHM*A.2501 RHOS=PHOS*6.2501 RHQS=RHOS*6.2501 RKH=RKH*2.43902 RLAM=RLAM*1.H0200 TH=TH*9.00/5.00*3.201 TR=TR*9.00/5.00*3.201 TFAKT=TFAKT*9.00/5.00 DELTA0=DELTA0/2.5400 DELO=DFLO/2.5400 RMCLT=RMCLT/2.5400 DO 97 I=1,J RL(I)=RL(I)/2.5400 </pre>	Bloque F
<pre> 97 H(I)=H(I)/2.5400 RLFAD=RLCAD/2.5400 OB=OB/2.5400 W=W/2.5400 FLWID=FLWID/2.5400 DEFL=DEFL/2.5400 G=G*7.936500 98 SLAM=RLAN GESL=0.00 DO 99 I=1,J 99 GESL=GESL+HL(I) INCTAR=(GESL-RMCLT)/(2.501*DELTA0)*0.500 Bloque G HOUFR=H(I) WUV=DSORT(W) ZSTR=0.00 NSEC=0 </pre>	

<pre> Z=0.00 GL=GESL ZWH=0.00 ZWHG=0.00 HPH=0.00 HPF=0.00 GHET=0.00 TSF=0.00 HEAT=0.00 XOUT=W HOUT=H(1) XOHR=W INC1=-1 ID1=0 A=1.01A TSTR=TH TOUT=PH </pre>	Bloque G (Cont.)
<pre> V2=U*V2F/(MHOS+W*H(1))*PS(F*RY) VR=P1*RL+OR+VH VDS=VB+DSIM(PHIS) VJ=USORT(VB+VR+V2+V2-2.00+V2+VR+DCOS(PHIB)) GAMPF=VR/DELFL THETA=DATAN(2.00+DTAN(PHIB)) COS1=DCOS(THETA-PHIN) OFLT=DB-2.00-DELFL ZWI=P1*P1+OFLT+OFLT+RH+PH+WHY ZWID=DSORT(UZWF+RZM/(RHQ+CPM+RH)) UZWI=1.00-DEFI(DELFL/(FF+ZWI)) / 2.00 RL=0. DELP=DELD XP=ZQUER ZSTR=ZSTR+RMELT </pre>	Bloque H
<pre> IF(RMELT.LT.RL(1)) GOTO 103 HSEC=1. RL=RL(1) 103 PH=DATAN(READ/((OR-2.00+H(1))+P1)) PHIDU=(PHIB+PH)/2.00 Z=ZSTR/DSIM(PHIDU) ZWI=0.00 SUMRNO=0.00 </pre>	Bloque I
<pre> 104 DO 105 I=1,J J1=I-1 IF(J1.EQ.0) J3=1 ZWID=READ/((OR-H(J1)+H(I))+P1) PHI=DATAN(ZWID) PHIDU=(PHIB+PHI)/2.00 ZWID=RL(I) IF(ZWI(1).EQ.0.00) ZWI(1)=1.00 HOU(I)=(H(I)+H(J1))/2.00 SUMRNO=SUMRNO+RL(I)/HOU(I) HPUX(I)=(H(J1)-H(I))/ZWID+DSIM(PHIDU) ZWI=ZWI+RL(I) IF(HPUX(I).GT.0.00) GL=ZWI-RL(I)+RL(I)+RFAKT </pre>	Bloque J
<pre> 105 CONTINUE GL=GL+RMELT IF(KRNO.FO.3) GL=ZWI-RMELT ZWID=ZSTR+DELTA0 </pre>	Bloque K

```

110 KDEL=0
NSEC=NSEC+1
WRITE(A,AA00)
IF(NSEC,GT,1) WRITE(L,4400)
IF(NSEC,GT,3) GOTO 10
MPU=HPUNKT(NSEC)
RL=9LL*ML(NSEC)
IF(DABS(MPU),LE,1,D=3) GOTO 120
IF(RL(NSEC)/DELTA0,GE,1,INCR) GOTO 120
DELTA=RL(NSEC)/INCR
GOTO 130
120 DELTA=DELTA0
130 IF(ZSTR+DELTA,LT,ML) GOTO 140
IF(ZSTR+DELTA,GT,RL) GOTO 135
DELTA=RL-ZSTR
135 KDEL=1
140 ZSTR=ZSTR+DELTA
TR=IZ(ZSTR)
TB=TM+TFAKT
IF(TD,GE,TM) GOTO 141
IF(C1,NE,0.00,04,C2,NE,0.00) GOTO 140
GOTO 991

```

Bloque L

```

141 TQUER=(TM+TB)/2.00
XIN=XOUT
MIN=HOUT
PHI=DATAH(RLEAD/((D0-2.00+HQUER)*PI))
PHI0U=(PHI0+PHI)/2.00
DELTA2=DELTA/OSIN(PHI0U)
DELTAU=HPU+DELTA2
HOUT=MIN-DELTAU
HQUER=(MIN+HOUT)/2.00
IF(KRHO,EQ,2) GOTO 143
IF(KRHO,EQ,1) GOTO 144
IF(ZSTR-RMELT,GT,GL) GOTO 145
RHOS=(RHOS-RHOS0)*(ZSTR-RMELT)/GL+RHOS0
GOTO 145
143 RHOS=RHOS0
GOTO 145
144 RHOS=RHOS

```

Bloque M

```

145 IF(A,EQ,1,058) GO TO 150
IF(T12-TQUER,LE,TOL1) GOTO 210
IF(ID1,GT,100) GOTO 210

```

Bloque N

```

146 ZW10=OSORT(A2)
ZW11=ZW10/MUP1
ZW12=DEXP(-A3+A3/A2)
ZW13=2.00+VJ*ZW11+ZW12/DFL
ZW14=A3/ZW10
ZW15=DERF(ZW10+ZW14)
ZW16=DERF(ZW14)
GAMPH=ZW13/(ZW15+ZW16)
GAMPB=GAMPH+DEXP(-A2-2.00+A3)
GAMP12=GAMPH+DEXP(-A2/4.00-A3)
ZW10=GAMP12/2.00
ETA1=ETA(ZW10,T12)
ZW10=GAMP12*2.00
ETA2=ETA(ZW10,T12)
ETA3=ETA(GAMPH,TM)

```

Bloque N

<pre> FTA4=ETA(GAMP, T8) ETA5=FFA(GAMP12, T12) RH1=DLOG(ETA2/ETA1)/DLOG(4,00)+1,00 A=(DLOG(FTA4/ETA3)*(RH1-1,00)+DLOG(GAMP/GAMP12))/(TB-TM) RH=ETA5/GAMP12*(RH1-1,00) GOTO 160 </pre>	Blocque N (cont.)
<pre> 150 DEL=DELO GAMP=VJ/DEL ZW10=GAMP/2,00 ETA1=ETA(ZW10, TQUER) ZW10=GAMP+2,00 ETA2=ETA(ZW10, TQUER) ETA3=ETA(GAMP, TM) ETA4=ETA(GAMP, T8) RH1=DLOG(ETA2/ETA1)/DLOG(4,00)+1,00 A=DLOG(ETA4/ETA3)/(TB-TM) I12=TQUER+T121F-RHYN-VJ/(8,00+RKM) RH=ETA3/GAMP*(RH1-1,00) </pre>	Blocque O
<pre> 160 RMO=RH/DEXP(A*(T12-TM)) K1F=1 165 A1=4,00*(TQUER-T12) A2=A+A1/RH1 IF(A2,LT,0,00) GOTO 997 A3=A*(TB-TM-A1)/(2,00+RH1) I11=0 166 I11=I11+1 IF(I11,GT,100) GOTO 993 ZW10=DSORT(A2) ZW11=A3/ZW10 ZW12=DERF(ZW11) ZW13=ZW10/2,00 ZW14=DERF(ZW13+ZW11) ZW15=DERF(ZW10+ZW11) ZW16=A3+A3/A2 ZW17=TB-TM-A1 ZW18=DEXP(-(ZW10+ZW11)*(ZW10+ZW11)) ZW19=DEXP(ZW16) ZW110=DEXP(-ZW16) RK2=2,00+VJ/(DEL*WUPI)+ZW10+ZW110/(ZW15-ZW12) RK3=RMO+DEL*DEL*RK2*(RH1+1,00) IF(K1F,EQ,0) GOTO 180 T121=TQUER+T121F+RK3*WUPI+ZW19/(2,00+A2+RKM)+((ZW10+ZW11)/ 1 2,00+ZW15-(ZW13+ZW11)+ZW14+ZW11/2,00+ZW12+(ZW18/2,00+DEXP(-(ZW13 2 +ZW11)*(ZW13+ZW11))+ZW110/2,00)/WUPI) 170 IF(T121-TQUER,LE,0,500+TOL1) GOTO 220 IF(K1F,EQ,0) GOTO 16A 180 I01=I01+1 U1=RK3/A2+WUPI+ZW19+((ZW10+ZW11)+(ZW15-ZW12)+(ZW18-ZW110)/WUPI) U2=2,00*((1,00+A3/A2)+(ZW18-ZW110)/(WUPI+ZW10+(ZW15-ZW12))) DEL=DSORT(TQUER+(DEL*F1-2,00+RKM*(TB-TM)+DEL*F2+U1)/(VHX+U2+RMO+ 2 (CPS+(TM-TR)/SLAM)) RK2=2,00+VJ/(DEL*WUPI)+ZW10+ZW110/(ZW15-ZW12) RK3=RMO+DEL*DEL*RK2*(RH1+1,00) T121=TQUER+T121F+RK3*WUPI+ZW19/(2,00+A2+RKM)+((ZW10+ZW11)/ 1 2,00+ZW15-(ZW13+ZW11)+ZW14+ZW11/2,00+ZW12+(ZW18/2,00+DEXP(-(ZW13 2 +ZW11)*(ZW13+ZW11))+ZW110/2,00)/WUPI) IF(DABS(DEL-DELP),LT,TOLDEL) GOTO 190 </pre>	Blocque P

```

IF(101,GT,100) GOTO 994
DELP=DEL
GOTO 180
190 T122=TOUER-A1/4,00
IF(DABS(T121-T122),LT,TOL3) GOTO 200
T12=(T121+T122)/2,00
KIF=0
GOTO 165
200 TAY=((A1/ZW10+(ZW16-A3/(3,00+A2)+A3/(2,00+A2)+A2/3,00)+ZW17/(2,00+
1 ZW10)+(A2-ZW16-0,500)+TH+(ZW10+ZW11)+(ZW15-ZW12)+(A1/(3,00+
2 A2)+(1,00+ZW16)-ZW17+A3/(2,00+A2)+TH)+(ZW18-ZW11)/WUPI+(A1/
3 3,00+(1,00-A3/A2)+ZW17/2,00)/WUPI+(ZW18)/(ZW10+ZW11)+(ZW15-
4 ZW12)+(ZW18-ZW11)/WUPI)
DTPY=((TA-TH)+RKH+T121F*(H1/2,00+RKS+WUPI+ZW19+(ZW12-ZW15)/
1 (2,00+ZW10))/DEL
GOTO 240
210 A4=A+(TD-TM)/RH1
ZW10=DEXP(-A4)
GAMPH=VJ+A4/(DEL+(1,00-ZW10))
GAMPB=GAMPH+ZW10
GAMP12=GAMPH*DEXP(-A4/2,00)
ZW10=GAMP12/2,00
ETA1=ETA(ZW10,T12)
ZW10=GAMP12+2,00
ETA2=ETA(ZW10,T12)
ETA3=ETA(GAMPH,TH)
ETA4=ETA(GAMPB,TH)
ETA5=ETA(GAMP12,T12)
RH1=DLOG(ETA2/ETA1)/DLOG(4,00)+1,00
A=(DLOG(ETA4/ETA3)+(RH1-1,00)*DLOG(GAMPH/GAMPB))/(TD-TM)
RH=ETA5/GAMP12+(RH1-1,00)
RMO=RH/DEXP(A*(T12-TM))
220 A4=A+(TB-TM)/RH1
ZW10=DSORT(A2)
ZW11=A3/ZW10
ZW12=DERF(ZW11)
ZW13=DERF(ZW10+ZW11)
ZW14=DEXP(-A4)
ID2=0
225 ID2=ID2+1
RK2=2,00+VJ/(DEL+WUPI)+ZW10*DEXP(-A3+A3/A2)/(ZW13-ZW12)
RK3=HMO*DEL+DEL+RK2+(RH1+1,00)
U1=2,00+RK3/(A4+A4)+(A4+ZW14-1,00)
U2=2,00+(1,00/(1,00-ZW14)-1,00/A4)
DEL=DSQRT(XOUFR*(DEL+1+2,00+RKM+(TB-TM)*DEL+U1)/(YBX+U2+RMOH+
2 (CPS*(TM-TR)*SLAM)))
T121=TOUFH+T121F+RK3/(A4+A4+RKH)+(1,00-DEXP(-A4/2,00))-0,500
1 +(1,00-ZW14)
IF(DABS(DEL-DELP),LT,TOLDEL) GOTO 230
IF(102,GT,100) GOTO 995
DELP=DEL
GOTO 225
230 IF(111,GE,100) GOTO 996
IF(101,GT,100) GOTO 231
IF(T121-TOUER,GE,TOL1) GOTO 146
231 TAY=TH+(TB-TM)+(A4/2,00+ZW14+(1,00-1,00/A4)-1,00/A4)/(A4+ZW14-

```

Bloque P (cont.)

Bloque Q

<pre> 1 1,00; DTDY=RKM*(TB-TM)/DEL+RKT*1121F*(A4+DCXP(-A4+DEL)-1,00+ 1 ZW14)/(A4+A4+DEL) </pre>	Bloque Q (cont.)
<pre> 240 QX=DEL/DELFI*VNX*U2/2,00. SLAM=RLAM+CPM*(TAV-TM) GPHI=DSORT(VRX*U2+HHM*PHIF1+(PHIF2+RKM*(TB-TM)+PHIF3)*U1/2,00) / (2,00+(CPS*(TM-TR)+SLAM)) PSI=GPHI+PSIF*WUV*H(1)+RHOS*RNH/(DSORT(XOUTW)+G+RHOS0) IF(DABS(HPII).GT.1,0-1) GOTO 250 XOUTW=XOUTW*(1,00-PSI*DELTAZ/(2,00+HQUER)) / (1,00-PSI*DELTAZ/(2,00+HQUER)) GOTO 240 250 XOUTW=XOUTW*(PSI/HPU-(PSI/HPU-1,00)+DSORT(HIN/HOUT)) / (PSI/HPU-(PSI/HPU-1,00)+DSORT(HIN/HOUT)) 260 IF(XOUTW.GT.1,00) XOUTW=1,00 XOUT=XOUTW*W GS=VSZ*XOUT+HQUER+RHOS+PSIF*RNH/VSZ GSG=GS/G IF(GSG.LE.5,0-3) GOTO 265 XQUER=(XIN+XOUT)/2,00 IF(XQUER-XP.LT.TOLX) GOTO 270 XP=XQUER KIF=0 GOTO 170 265 XOUTW=1,0-6 GSG=1,0-6 </pre>	Bloque R
<pre> 270 TURN=ZSTR/PLEAD Z=Z+DELTAZ ZW10=DELTAZ/EF*(QX+RHOM+(SLAM+CPS*(TM-TR))) ZW11=DELTAZ/EF*XQUER+DTDY ZWVG=ZWVG+ZW10/EF1 ZWHH=ZWHH+ZW11/EF1 HPS=ZWVG-ZWHH WK=V-XQUER PHIS=DATAH(RLEAD/(PI*(DFLT-2,00+HQUER))) PHIST=(PHIS+PHIB)/2,00 SINP=DSIN(PHIST) COSP=DCOS(PHIST) GAMPB1=DSORT(VB+VB+DCOS(PHIB)+DCOS(PHIB)/(HQUER+HQUER)+V81+V82 / (4,00/(HQUER+HQUER))) TAUB=ETA(GAMPB1, TB) HPM=HPM+VB+HPMF/COSTP+TAUB+GAMPB1*DELTAZ*WK TAUF=ETA(GAMPF, TB) HPF=HPF+VB+HPMF*TAUF+GAMPF*FLWID*DELTAZ ZFLT=ZF+ZWI+DELTA*FLWID+TAUF/(DELFL+SINP) GAMPV=VB/HQUER RHYC=ETA(GAMPV, TB) FZ=FFUNK(HQUER, WK) ZC=ZWI+WK+RMYC*(FZ+COSP+COSP+4,00+SINP+SINP)-DELTA*ZF/ / (HQUER+SINP) ZSEG=ZC+7FLT ZSEG1=ZSEG1+ZSEG IF(KMASS.EQ.1) GOTO 300 ZW10=ZSTR*2,5400 ZW11=HQUER*2,5400 ZW12=(TR-3,201)*5,00/9,00 ZW13=(TAV-3,201)*5,00/9,00 </pre>	Bloque S
<pre> IF(KMASS.EQ.1) GOTO 300 ZW10=ZSTR*2,5400 ZW11=HQUER*2,5400 ZW12=(TR-3,201)*5,00/9,00 ZW13=(TAV-3,201)*5,00/9,00 </pre>	Bloque T

300	<pre> ZW14=ZWMG+0.745700 ZW15=ZWHH+0.745700 ZW16=HPS+0.745700 ZW17=HPM+0.745700 ZW18=HPF+0.745700 ZW19=ZSEG1+0.745700 GOTO 310 </pre>	Bloque T (cont.)
310	<pre> WRITE(4,7000) ZW10,TURN,ZW11,ZW12,ZW13,XOUTW,GS6,ZW14,ZW15,ZW16, ZW17,ZW18,ZW19 </pre>	Bloque U
	<pre> INC1=INC1+1 IF(MOD(INC1,INCYAR).NE.0) GOTO 320 WRITE(4,4050) ZW10 J1=GS6+5.01+0.500 J1=J1+1 IVEK(J1)=STERN WRITE(4,4100) IVEK IVEK(J1)=BLANK J1=XOUTW+5.01+0.500 J1=J1+1 IVEK(J1)=XTAB WRITE(4,4100) IVEK IVEK(J1)=BLANK </pre>	Bloque V
320	<pre> IF(XOUTW.LE.1.D-4) GOTO 10 IF(KDEL.FO.0) GOTO 150 GOTO 110 </pre>	Bloque W
991 9910 993 9930 994 9940 995 9950 996 9960 997 999	<pre> WRITE(6,9910) TB,TH FORMAT('OFENLER; ZYLINDERTEMPERATUR ',F6.1,' KLEINER ALS SCHMELZTE MPERATUR ',F6.1) GOTO 15 WRITE(6,9930) TOL3 FORMAT('OGENAUIGKEIT ',F6.4,' FUER [T121-T122] IM NICHTLINIAREN ZW EIG NICHT ERREICHT') GOTO 15 WRITE(6,9940) TOLDEL FORMAT('OGENAUIGKEIT ',F6.4,' FUER DELTA(I)-DELTA(I-1) IM NICHTL INEAREN ZWEIFIG NICHT ERREICHT') GOTO 210 WRITE(6,9950) TOLDEL FORMAT('OGENAUIGKEIT ',F6.4,' FUER DELTA(I)-DELTA(I-1) IM LINEAR EN ZWEIFIG NICHT ERREICHT') GOTO 15 WRITE(6,9960) TOL1 FORMAT('OGENAUIGKEIT ',F6.4,' FUER T121-TOUER IM LINEAREN ZWEIFIG NI ICHT ERREICHT') GOTO 15 WRITE(6,9980) A,A1,RH1,CTA1,ETA2,ETA3,ETA4 GOTO 15 STOP </pre>	Bloque X

Como puede observarse, el igual que con Programa 1 procedí a la división del listado en bloques estratégicos para facilitar su análisis. La descripción de los mismos la doy a continuación:

BLOQUE A

Este bloque involucra la recepción de los datos requeridos para la ejecución del programa. Desde la presentación, Rao proporciona una tabla donde correlaciona las variables con el dato correspondiente.

Los datos necesarios son los siguientes:

D A T O	SIMBOLO	CGS	INGLES	VARIABLE	SECCION
Densidad de fundido	ρ_f	g/cm ³	lb/in ²	RHOM	Propiedades Físicas de Polímero
Densidad de sólidos	s	g/cm ³	lb/ n ²	RHOS	
Calor específico de fundido	C _{pm}	cal/g°C	Btu/lb°F	CPM	
Calor específico de sólidos	C _{ps}	cal/g°C	Btu/lb°F	CPS	
Conductividad térmica de fundido	K _m	cal/scm°C		RKM	
Calor latente de fusión		cal/g	Btu/lb	RLAM	
Punto de fusión	T _m	°C	°F	TM	
Densidad de masa total	s	g/cm ³	lb/ft ³	RHOSO	
Coefficientes de viscosidad	-	-	-	AK ,Ak1, AK11, Ak2, AK22, AK12	
Número de zonas	-	-	-	J	Formato de Cálculo
No. de incrementos por zona	-	-	-	INCR	
Long. de incremento axial	-	cm	in	DELTAO	
Espesor inicial de película	-	cm	in	DELO	
Retraso en el fundido	-	cm	in	RMELT	
Factor de temperatura	-	-	-	TFAKT	
Factor de densidad	-	-	-	RFSKT	

D A T O	SIMB.	CGS	INGLES	VARIABLE	SECCION
Longitud por zona	-	cm	in	RL(I)	Geometría del Husillo
Profundidad por zona	H	cm	in	H(I)	
Long. de una vuelta del husillo	L	cm	in	RLEAD	
Diámetro del barril	DB	cm	in	DB	
Ancho de canal	W	cm	in	W	
Ancho de fileta	e	cm	in	FLWID	
No. de canales	P	-	-	RNY	
Claro de fileta	F	cm	in	DELFL	
Velocidad del husillo	N	RPM	RPM	RN	Condiciones de Operación
Gasto másico	G	g/s	lb/s	G	
Temperatura de sólidos	Tr	°C	°F	TR	
Coefficientes para tem- peratura del barril	μ_i		lbs/in ²	CO, C1, C2	Tolerancias y valores iniciales
Viscosidad inicial su- puesta				RMYN	
Tol. para perfil lineal				TOLI	
Tol. para espesor				TOLDEL	
Tol. para perfil no lineal				TOL 3	
Tol. para ancho de cama sólida	TOLX				

El número de datos requeridos, con respecto al Programa 1, es mucho mayor debido a la presencia de tolerancias, factores de corrección y valores iniciales lo que permite prever que se tendrán varios procesos iterativos durante la ejecución del programa.

BLOQUE B

El presente programa posee la capacidad de recibir los datos - tanto en el sistema de unidades CGS como en el sistema Británico. Sin embargo, cabe resaltar que todos los cálculos durante el pro-

ceso son efectuados en el sistema británico de unidades.

En este bloque el programa simplemente determina qué sistema de unidades utilizará para la lectura de datos y el despligue de resultados, tomando como base el valor de la variable de control KMASS.

KMASS = 0 corresponde a sistema CGS

KMASS \neq 0 corresponde a sistema británico

Las variables DIM y TDIM corresponden a letreros que aparecerán en pantalla indicando las unidades de ciertos resultados.

BLOQUE C

Se trata del bloque de lectura de factores de conversión. Estos son necesarios pues, como se verá posteriormente, aun cuando se alimenten los datos y se obtengan resultados en sistema CGS, todas las iteraciones se realizarán en unidades inglesas.

BLOQUE D

Constituye el primer bloque de cálculos del modelo matemático, determinando el valor de los siguientes parámetros.

$$(XOUTW) \frac{x}{w} = 1$$

$$(PHIB) \theta_b = \tan^{-1} \left(\frac{L}{Db \pi} \right)$$

$$(ZWIO) \tan \theta_b = \frac{L}{Db \pi}$$

ángulo de hélice
evaluado en la superficie del barril

Para el caso en que el claro de fileta se alimente como cero, (DELFL = 0) el programa lo calcula por medio de la siguiente ecua

ción empírica:

$$(\text{DEFL}) \quad \delta_F = \frac{e}{1000} * 13 \quad e = \text{ancho de fileta (FLWID)}$$

Lo mismo realiza con el espesor inicial de película (DELO) y con el ancho de canal (W) en caso de que se desconozcan (DELO = W = 0)

$$(\text{DELO}) \quad \delta = 5.64 * \delta_F$$

$$(W) \quad W = \frac{L}{V} \cos \theta_b - e$$

BLOQUE E

Esta sección del programa muestra en pantalla los principales datos geométricos y de operación para la corrida que se va a efectuar:

Tipo de husillo	(RNY)
Paso de una vuelta	(RLEAD)
Ancho de fileta	(FLWID)
Ancho de canal	(W)
Velocidad del husillo	(RN)
Gasto másico	(G)
Diámetro de barril	(Db)
Profundidad por zona	(H(I))
Longitud por zona	(RL(I))

BLOQUE F

Sólo para el caso en que se alimenten datos en unidades CGS se transforman a unidades inglesas en este bloque.

BLOQUE G

Al pasar por este bloque, el programa inicializa todas las variables que utilizará en las iteraciones. Será de mucha utilidad el definir el significado de cada una de ellas:

SLAM	Variable donde se almacena el valor del calor latente de fusión (RLAM). Durante las iteraciones SLAM cambiará de valor.
GESL	Suma de las longitudes de todas las zonas del husillo.
INCTAB	Variable de control para el formato de presentación en tarjetas.
HQUER	Profundidad de canal promedio ($H(1)$ para la zona 1).
WUW	Raíz cuadrada del ancho de canal W para usarse en la ecuación 4.5.
ZSTR	Será la longitud axial acumulada, pues el cálculo se realizará por incrementos. Suma de los incrementos axiales.
NSEC	Contador de secciones del husillo.
Z	Posición helicoidal del cálculo que se está efectuando.
GL	Contendrá la suma de las longitudes por cada zona.
ZWWH	Suma de la rapidez de transferencia de calor entre el barril y la película de fundido.

ZWWG	Suma de la rapidez de energía total aplicada a la resina en el incremento axial.
HPM	Suma de la potencia requerida para transportar el fundido.
HPF	Suma de la potencia disipada en el claro de fileta.
ZSEG1	Potencia total disipada en el segmento axial.
HOUT	Profundidad de canal a la salida del incremento.
XQUER	Ancho promedio de cama sólida en el incremento.
ID1	Contador de iteraciones para el cálculo del espesor de película.
A	Exponente "a" de la ley de potencias.
TSTR	Temperatura puntual de barril inicial.
TOUT	Temperatura en el incremento.

El uso de estas variables se visualizará mejor en la descripción de los bloques siguientes.

BLOQUE H

Se evalúan los siguientes parámetros:

(VSZ)	$V_{sz} = \frac{G_s}{\rho_s HW}$	Velocidad de sólidos en la dirección helicoidal
(VB)	$V_b = \pi NDB$	Velocidad relativa del barril
(VBX)	$V_{bx} = V_b \sin \theta$	Componente de V_b en la dirección transversal al canal

(VJ)	$V_j = \sqrt{V_b^2 + V_{sz}^2 - 2V_b V_{sz} \cos \theta_b}$	Diferencia entre V_b y V_{sz}
(GAMPF)	$\dot{\delta} = V_b / \delta$	Rapidez de corte
(THETA)	$\Theta_v = \tan^{-1} (D_b / D * \tan \theta_b)$	Angulo de hélice en la raíz del husillo.
(COSTP)	$\cos (\Theta_r - \Theta_b)$	Coseno de la diferencia entre Θ_r y Θ_b -- (calculada en el bloque D)
(DFLT)	$D_b - 2\delta_F$	Diámetro del husillo considerando las filetas
(ZZWI)	$(\pi (D_b - 2 F) N)^2 P$	
(ZWIO)	$\sqrt{K_m / (\rho_m C_{pm} N)}$	
(UZWI)	$1 - \operatorname{erf} \left[\frac{\left(\frac{1}{12} \sqrt{K_m / (\rho_m C_{pm} N)} \right)}{2} \right]$	

La variable (RLL) será la suma de las longitudes de las secciones del husillo mientras que (ZSTR) será la suma de los incrementos axiales fijados para el cálculo. Por su parte (DELP) será el valor del espesor de película de fundido, cuyo valor inicial será (DELO). Finalmente, (XP) es el ancho promedio de cama sólida y ZSTR asume el valor del retraso en el fundido.

BLOQUE I

Al llegar a esta sección del programa, se tienen datos de retraso en el fundido (RMELT) y longitud de la primera zona (RL(1)).

La primera actividad del bloque es la de determinar en que sección del husillo se inicia la plastificación. De esta manera, si el retraso en el fundido es menor que la longitud de la primera zona, quiere decir que el cálculo por incrementos se inicia allí. Para este caso la variable NSEC conserva su valor de cero, de tal forma que posteriormente, se le asigne el valor de 1 en el bloque L. Si, por el contrario, el retraso en el fundido es mayor que la longitud de la primera zona, entonces NSEC = 1 en este bloque y en el bloque L se le asigna el valor de 2, lo que indica que es en la segunda sección del husillo donde se inicia la plastificación.

Para cualquiera de los dos casos anteriores, se calcula un valor de ángulo de hélice en la raíz del husillo. Afirmando lo anterior, porque en la expresión utilizada:

$$(PHI) \theta^* = \tan^{-1} \left(\frac{L}{(D_b - 2H_1)} \right)$$

al diámetro de barril se le resta el doble de la profundidad de canal correspondiente a la primera zona (H_1).

Puesto que el ángulo de hélice evaluado en el barril (θ_b) se obtuvo en el bloque D, es posible en este punto calcular un ángulo promedio de la forma:

$$(PHIQU) \bar{\theta} = \frac{\theta^* + \theta_b}{2}$$

Este ángulo promedio será de utilidad para un cálculo importante. Previo a ello, es necesario resaltar el papel de la variable ZSTR : este parámetro se inicializa a cero en el bloque G y en el bloque H se le asigna el valor del retraso en el fundido (RMELT), que es el punto axial donde se inicia la plastificación.

Contando con esa longitud axial, es posible calcular la longitud helicoidal correspondiente por medio de la siguiente ecuación:

$$(2) \quad z = \frac{ZSTR}{\text{sen } \bar{\theta}}$$

que involucra el ángulo $\bar{\theta}$ evaluado antes.

Como última función de este bloque, las sumas ZW11 y SUMRNQ se igualan a cero como valor inicial, para utilizarse en el siguiente bloque.

BLOQUE J

Si se observa cuidadosamente esta porción del programa puede identificarse con facilidad que se trata de un ciclo de cálculo para las diferentes secciones geométricas del husillo. Los resultados transcendentales de dicho "loop", a utilizarse en los segmentos siguientes son:

- Profundidad de canal promedio para cada zona
(HQU(I)) H_i

- Grado de adelgazamiento por zona

$$A_i \operatorname{sen} \bar{\Theta}_i \quad (\text{HPUNKT (I)})$$

- Suma de las proporciones Longitud-profundidad por zona

$$\frac{L_i}{H_i} \quad (\text{SUMRNQ})$$

- Suma de las longitudes de todas las zonas

$$L_T = \sum L_i \quad (\text{ZWII})$$

La variable G_L contiene la longitud total del husillo, pero, en caso necesario, corrige la longitud de cualquier sección que presente un grado de adelgazamiento (HPUNKT (I)) mayor a cero. La corrección consiste en multiplicar la magnitud de dicha zona por un factor de corrección para considerar el incremento de la densidad de los sólidos por efecto de la compresión (RFAKT). Cabe resaltar que, si en la sección de introducción de datos se determina que RFAKT es igual a cero, en el mismo bloque A se le reasigna el valor de uno, en cuyo caso G_L seguirá siendo igual a la longitud total del husillo. (Obsérvese el listado en la etiqueta 50)

BLOQUE K

Con base en lo anterior, G_L puede definirse como una longitud total de husillo "corregida" por un factor de densidad. Por tanto, el segmento de husillo disponible para la plastificación, se obtiene restando a G_L el retraso en el fundido (RMELT).

Las correcciones en la zonas con profundidad variable, se ignoran para el caso en que la variable de control KRHO es igual a 3 pues: $GL = ZWI1 - RMELT$ y $ZWI1 = \frac{1}{2} li$.

Este bloque es el último previo al cálculo por incrementos axiales. Para ello suma al retraso en el fundido ($ZSTR = RMELT$) el primer incremento axial ($DELTAO$).

BLOQUE L

Contiene los primeros pasos para el cálculo por incrementos dentro de una misma sección; de hecho, cuando se presenta un cambio de zona en el husillo el programa retorna a este punto. La variable que controla este aspecto es KDEL:

KDEL = 0 indica que los cálculos a realizar aún están incluidos en la sección del husillo considerada.

KDEL = 1 indica que los cálculos a realizar serán los últimos dentro de una sección y, por tanto, implica cambio de zona del husillo.

Como ya se dijo, NSEC es el contador de secciones. Cuando NSEC es mayor al número total de zonas, evidentemente concluye la ejecución del programa indicando antes el porcentaje de material sólido contenido en el extrudado; esto ocurre generalmente cuando la lon-

gitud del husillo es insuficiente para fundir el material hasta un porcentaje deseado.

Es necesario resaltar que, cuando se presenta un cambio de sección, el programa retorna a la etiqueta 110 mientras que para el cálculo por incrementos dentro de una misma sección se retorna a la etiqueta 120.

Un aspecto importante en este bloque, es el cálculo de temperatura de barril (TB) como función de la posición axial (ZSTR) en la etique 140. Para ello utiliza la siguiente ecuación empírica:

$$T_b = C_0 (1 - C_1 \exp(-C_2 * ZSTR)) \text{ Subrutina B}$$

Lógicamente si $C_1 = C_2 = 0$ entonces $T_b = \text{cte}$ misma que, forzadamente, tiene que ser mayor a la temperatura de fusión del material (TM). En caso contrario se tiene un gran error y el programa envía el mensaje ubicado en la etiqueta 991.

Nótese que cuando el programa retorna a la etiqueta 110 (cambio de sección), RLL aumenta en la longitud de toda una zona, - mientras que cuando retorna a la 120 ZSTR aumenta en solo un incremento axial DELTAO. Esto permite visualizar mejor la diferencia entre RLL y ZSTR.

BLOQUE M

Este bloque es particularmente importante para las secciones - del husillo con profundidad de canal variable.

Una vez que verifica que $T_b \geq T_m$ entonces calcula una temperatura media entre ambas (TQUER). Acto seguido, toma como ancho inicial de cama sólida y como profundidad inicial de canal los valores a la salida del incremento anterior ($XIN = XOUT$, $HIN = HOUT$).

Posteriormente, calcula un ángulo de hélice θ (PHI) tomando una profundidad de canal promedio (HQUER) cuyo valor es el inicial - (asignado en el bloque G) o bien fue calculado en este mismo bloque en una iteración previa. Este ángulo θ y el ángulo θ_b (calculado en el bloque D) sirven para evaluar un promedio $\bar{\theta}$ cuyo seno es necesario para obtener el incremento diferencial de longitud helicoidal (DELTAZ) correspondiente al incremento de longitud axial (DELTA).

Otro cálculo importante de esta sección del programa es el referente a la variación de profundidad que se presenta en el incremento axial, para ello multiplica el grado de adelgazamiento de la sección HPUNKT (NSEC) por DELTAZ.

$$(\text{DELTAH}) \quad \Delta H = \underbrace{A \text{ sen } \bar{\theta}}_{\text{HPUNKT(I)}} \frac{\overbrace{\Delta l}^{\text{DELTAZ}}}{\text{sen } \bar{\theta}} = \frac{H_{i-1} - H_i}{\cancel{r}} \text{ sen } \bar{\theta} \frac{\cancel{\Delta l}}{\cancel{\text{sen } \bar{\theta}}}$$

HPUNKT(I)

al restar esta variación a la profundidad en la entrada del incremento, se obtiene la profundidad a la salida.

$$HOUT = HIN - DELTAH$$

Por último KRHO es una variable que controla el considerar, o no, el incremento de densidad de los sólidos debido a la compresión. Para ello:

- Si KRHO = 1 se toma la densidad de sólidos (RHOS)
 Si KRHO = 2 se toma la densidad global de sólidos y fundido (RHOSO)
 Si KRHO = 3 entonces se evalúa una densidad corregida por la siguiente ecuación:

$$RHOS = (RHOS - RHOSO) \left[\frac{ZSTR - RMELT}{GL} \right] + RHOSO$$

Factor de corrección

Recuerdese que GL es una longitud corregida por un factor de densidad, por ello esta ecuación da la idea de sumar a RHOSO un porcentaje de la diferencia (RHOS - RHOSO).

BLOQUE N

Este programa, como se confirmará más adelante, está basado en el modelo no-Newtoniano para el cálculo del perfil de cama sólida misma que, como ya se expuso, presenta dos variantes para la eva-

luación de la rapidez de fusión.

- Perfil lineal de temperatura en la película.
- Perfil no-lineal de temperatura en la película.

Los bloques N, O y P constituyen la sección correspondiente al modelo matemático para perfil no-lineal de temperatura. Por otra parte, el bloque Q contiene las ecuaciones referentes al perfil lineal de temperatura.

Como puede verse, en este bloque existen tres criterios de direccionamiento del programa:

1.- $A = 1 \times 10^{38}$

A es el exponente "a" de la ley de potencias. El valor de 1×10^{38} se le asignó en el bloque G y, por ello, solo lo conservará durante la primera corrida del programa; esto quiere decir que el proceso iterativo lo inicia utilizando el modelo no-lineal de temperatura (etiqueta 150, bloque O).

2.- $(T_{12} - T_{QUER}) \leq TOL_1$.

Para los subsecuentes retornos a esta sección del programa, $A \neq 1 \times 10^{38}$ y la decisión sobre qué modelo usar, estará en función del ajuste que presente la temperatura media de película calculada

con la ecuación 4.17 (T_{12}) y la temperatura promedio entre T_b y T_m (T_{QUER}). $TOL1$ es la tolerancia para perfil lineal y si la diferencia citada es menor entonces el programa continúa en la etiqueta 210 donde se inicia el bloque Q.

3.- $ID1 > 100$

$ID1$ es el contador de iteraciones para determinar el valor del espesor de película usando la ecuación 4.13 considerando los términos U_1 y U_2 correspondientes al perfil no-lineal. Si el número de iteraciones sobrepasa a 100 entonces el programa considera que el modelo para perfil no-lineal no es aplicable al problema tratado y pasa al bloque Q.

BLOQUES N, O y P

Estos tres bloques conforman el modelo para perfil no lineal de temperatura. El objetivo primordial de esta sección, al igual que el bloque Q, es determinar el valor de la temperatura promedio de película T_{av} y de la rapidez de transferencia de calor (dT/dy).

T_{av} es necesaria para calcular el valor de λ^* mismo que con-

tabiliza el calor transferido por convección dentro de la película de fundido (ecuación 4.8); a su vez λ^* se utiliza para calcular el parámetro Φ (ecuación 4.15). Por su parte (dT/dy) se requiere para el cálculo de potencia disipada en el proceso de extrusión.

Durante la primera corrida del programa, la ejecución del mismo pasa directamente al bloque O (etiqueta 150) saltando al N (debido que A = 1E38).

En la sección O, el programa calcula un valor de rapidez de corte como primer paso:

$$(GAMP) \quad \dot{\gamma} = \frac{V_j}{\delta}$$

donde δ es el espesor inicial de película (DELO). Con base en esta $\dot{\gamma}$, se evalúan las siguientes viscosidades:

- a) Viscosidad a $\dot{\gamma}/2$ y $(T_b + T_m) / 2$ (ETA1) η_1
- b) Viscosidad a $2\dot{\gamma}$ y $(T_b + T_m) / 2$ (ETA2) η_2
- c) Viscosidad a $\dot{\gamma}$ y T_m (ETA3) η_3
- d) Viscosidad a $\dot{\gamma}$ y T_b (ETA4) η_4

El propósito al evaluar estos cuatro valores de viscosidad, es el determinar los parámetros de la Ley de potencias:

$$\tau_{yj} = -\eta \frac{dv_j}{dy}$$

$$\eta = m \left(\frac{dv_j}{dy} \right)^{n-1} = m \dot{\gamma}^{n-1}$$

$$m = m_0 e^{a(T-T_m)}$$

Para determinar el exponente n (RN1), el programa hace uso de los valores de η_2 y η_1 pues, por estar evaluadas a la misma temperatura, poseen el mismo valor de m ; de esta forma:

$$\eta_1 = m (2 \dot{\gamma})^{n-1}$$

$$\eta_2 = m (\dot{\gamma}/2)^{n-1}$$

Dividiendo ambas $\frac{\eta_2}{\eta_1} = \frac{m (2 \dot{\gamma})^{n-1}}{m (\dot{\gamma}/2)^{n-1}} = 4^{n-1}$

Sacando logaritmos $\log\left(\frac{\eta_2}{\eta_1}\right) = (n-1) \log 4$

Por tanto: $n = \frac{\log(\eta_2 / \eta_1)}{\log 4} + 1$

Realizando anterior, el programa se hace a la tarea de calcular el parámetro a (A), para ello η_3 y η_4 evaluadas a la misma $\dot{\gamma}$ y diferente temperatura son de gran utilidad:

$$\eta_3 = m_0 e^{a(T_m - T_m)} \dot{\gamma}^{n-1}$$

$$\eta_3 = m_0 \dot{\gamma}^{n-1}$$

$$\eta_4 = m_0 e^{a(T_b - T_m)} \dot{\gamma}^{n-1}$$

Dividiendo ambas:
$$\frac{\eta_4}{\eta_3} = \frac{m \delta e^a (T_b - T_m)}{m \delta \cancel{\delta^{n-1}} \cancel{\delta^{n-1}}} -$$

$$\frac{\eta_4}{\eta_3} = e^a (T_b - T_m)$$

Sacando logaritmos:
$$\log \left(\frac{\eta_4}{\eta_3} \right) = a (T_b - T_m)$$

Resolviendo para a:
$$a = \frac{\log (\eta_4 / \eta_3)}{T_b - T_m}$$

y el coeficiente m
$$m = \eta_3 / \delta^{n-1}$$

Recordando la ecuación para el perfil no lineal supuesto de temperatura. (Ec. 4.17)

$$T = A_1 \xi^2 + (T_b - T_m - A_1) \xi + T_m \text{ donde } \xi = \frac{y}{\delta}$$

en la mitad de la película de fundido $\xi = 1/2$, y sustituyéndolo en la ecuación anterior.

$$T = A_1 \left(\frac{1}{2} \right)^2 + (T_b - T_m - A_1) \frac{1}{2} + T_m$$

$$T = \frac{A_1}{4} + \frac{T_b - T_m}{2} - \frac{A_1}{2} + T_m$$

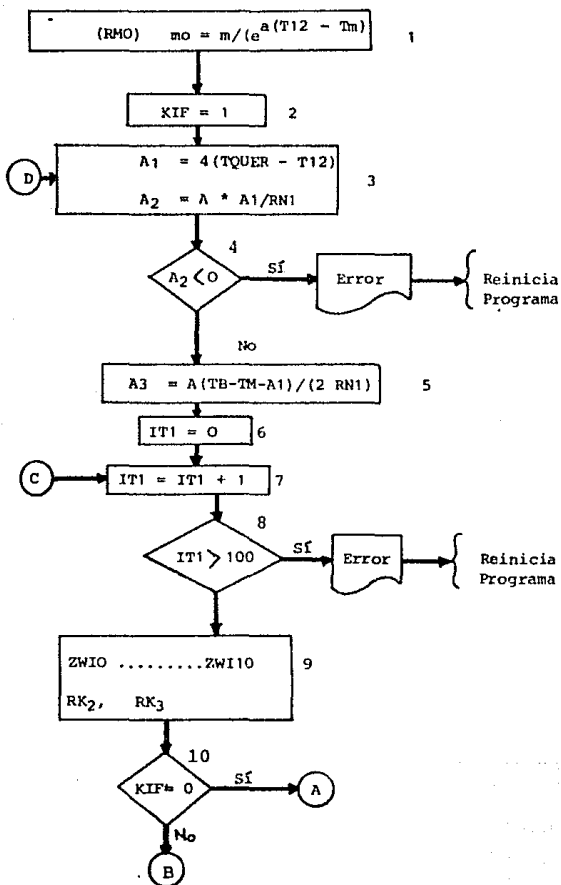
$$T = \frac{T_b - T_m + 2T_m}{2} + A_1 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \right)$$

$$T = \frac{T_b + T_m}{2} - \frac{A_1}{4} \quad \text{pero} \quad A_1 = \frac{-4V_1^2}{2 \text{ km}}$$

$$(T12) \quad T = \frac{T_b + T_m}{2} + \frac{\mu v_j^2}{8 K_m}$$

Es importante resaltar que considerar $A_1 = \mu v_j^2 / 2 K_m$ es solo como valor inicial, pues ésto solo es posible cuando se trata del modelo Newtoniano. También nótese que durante el resto de la ejecución del programa este bloque no vuelve a utilizarse, pues las viscosidades y la temperatura T12 han sido evaluadas con valores supuestos de viscosidad inicial (RMYN) y espesor inicial de película (DELO) respectivamente.

La constante A1 se determinará por un proceso iterativo desarrollado en el bloque P, para entenderlo considérese el siguiente -- diagrama del flujo:



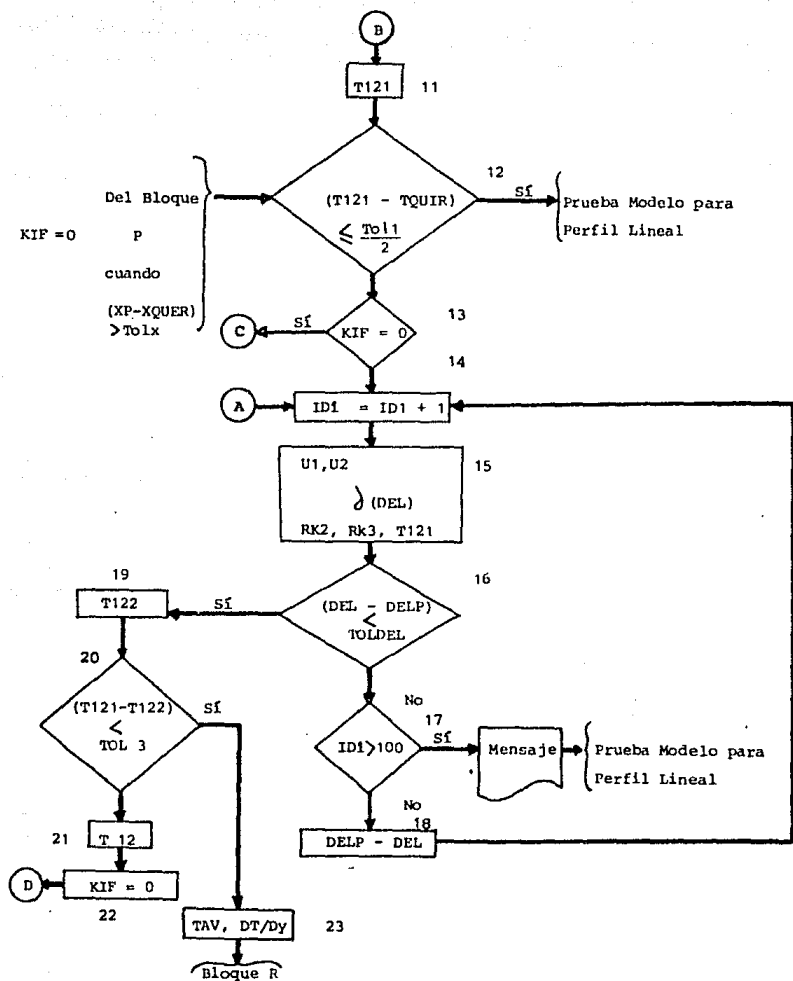


Fig. 4.8

La descripción por cajas es muy útil para entender el proceso

Caja 1

El cálculo del coeficiente preexponencial m es común a los bloques N y O y por ello se involucra en este bloque.

Caja 2

La variable KIF es útil para el control de las iteraciones dentro de este bloque. Los valores que puede adquirir son cero y uno:

KIF = 1 Significa que se trata de la primera iteración - dentro de este bloque para el incremento axial - considerado, ello implica que las cajas 11 y 12 solo se usarán en la primera iteración pues sirve para decidir si el cálculo se realizará en este bloque o en el Q.

KIF = 0 Este valor lo adquiere a partir de la segunda iteración en adelante y sirve simplemente para evitar el paso por las cajas 11 y 12. Cabe resaltar que el cálculo de T121 en la caja 11 se realiza - también en la caja 15.

Caja 3

A_1 y A_2 son constantes a determinar por

el procedimiento por prueba y error ilustrado en el diagrama. Analizando la expresión para A_1 :

$$A_1 = 4 (T_{QUER} - T_{12}) \quad \text{donde } T_{QUER} = \frac{T_b + T_m}{2}$$

$$\text{y } T_{12} = \frac{T_b + T_m}{2} + \frac{\mu v_j^2}{8 \text{ km}}$$

Sustituyendo

$$A_1 = 4 \left[\left(\frac{T_b + T_m}{2} \right) - \left(\frac{T_b + T_m}{2} \right) - \frac{\mu v_j^2}{8 \text{ Km}} \right]$$

Por tanto

$$A_1 = - \frac{\mu v_j^2}{2 \text{ Km}}$$

Este es un valor de A_1 considerado únicamente para la primera iteración ($KIF = 1$) pues en posteriores iteraciones T_{12} se modifica en la caja 21.

La constante A_2 es tal como la define Tadmor

$$A_2 = \frac{a A_1}{n}$$

Caja 4

Como puede deducirse de la expresión para A_1 en el bloque anterior, se trata de un término negativo pues μ , v_j y km son siempre positivas. Por otra parte "a" debe ser un término negativo -

pues como se vió:

$$a = \frac{\log(\eta_4/\eta_3)}{T_b - T_m}$$

y, puesto que $T_b > T_m$ se desprenden dos cosas:

- 1.- $(T_b - T_m) > 0$
- 2.- $\eta_4 < \eta_3$ pues η_4 se evaluó a T_b y η_3 a T_m ;
por tanto $\log\left(\frac{\eta_4}{\eta_3}\right) < 0$ y $a < 0$

Por último, y en forma similar a "a", el exponente "n" debe ser positivo pues para calcularlo $\eta_2 > \eta_1$ ya que la primera se evalúa a una mayor rapidez de corte.

Todo lo anterior determina que la constante A_2 debe ser forzosamente positiva.

Para el caso en que A_2 fuese negativa, el programa emite el mensaje

"ERROR A2 < 0" y presenta en pantalla los valores de a, A_1 , n, η_1 , η_2 , η_3 , η_4 para la fácil identificación del problema.

Caja 5

Consiste en calcular el valor de la constante A_3 tal como la definió Tadmor.

$$A_3 = \frac{a(T_b - T_m - A_1)}{2n}$$

Cajas 6, 7 y 8

Constituyen los bloques de control de las iteraciones a realizarse para determinar el ancho promedio de cama sólida en el incremento axial considerado. En otras palabras, para el cálculo del perfil de cama sólida se debe alcanzar la convergencia en tres parámetros fundamentales:

- a) Temperatura a la mitad de la película de fundido
- b) Espesor de película de fundido
- c) Ancho promedio de la cama sólida

Los primeros dos valores se calculan en los bloques P y Q; el tercero se evalúa en el bloque R.

El valor de IT1 sólo se incrementa cuando en el bloque R, la diferencia entre dos anchos promedio (XQUER) calculados sucesivamente no es menor a la tolerancia TOLX. Nótese que puede alcanzarse la convergencia en los incisos a y b y no conseguirlo en el c (de hecho, solo puede llegarse al bloque R cuando la temperatura y el espesor convergen).

Cuando el valor de IT1 sobrepasa a 100 el programa considera que es imposible determinar un ancho promedio lo suficientemente preciso y emite el mensaje de error correspondiente (Caja 8).

Caja 9

Debido al gran tamaño de la ecuación 4.21 el programa calcula por separado todos los términos que involucran a las constantes A_1 , A_2 y A_3 y las funciones de error correspondientes. Estos valores (ZWI0 a ZWI9) se utilizarán en la caja 23 para el cálculo de T_{av} .

En la misma forma K_2 y K_3 se evalúan tal y como las definió Tad mor

$$(RK2) \quad K_2 = \frac{\frac{2V_j}{\lambda} \frac{\sqrt{A_2}}{\sqrt{\pi}} e^{- (A_3^2/A_2)}}{\operatorname{erf}\left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}}\right)}$$

$$(RK3) \quad K_3 = m_0 d^2 K_2^{(n+1)}$$

para el modelo con perfil no-lineal de temperatura.

Cajas 10, 11, 12 y 13

Tal como se describió en la caja 2, la variable KIF evita el pa so por las cajas 11 y 12 durante las iteraciones realizadas entre los bloques P y Q. No obstante, es importante resaltar que la caja 12 se reutiliza cuando en el bloque R no se alcanza la convergencia para el ancho promedio de cama sólida ($(X_P - X_{QUER}) < \text{TOLX}$)

Cuando el programa llega a la caja 12 proveniente del bloque R viene con KIF igualada cero; lo que determina su transferencia a la caja 7, incrementándose el valor de IT1 y reiniciándose las iteraciones para obtener un nuevo valor de XQUER y verificar si ha alcanzado la convergencia.

No se olvide que al bloque R se llega exclusivamente cuando la temperatura a la mitad de la película de fundido (T121) y el espesor de la misma (DEL) han alcanzado sus respectivas convergencias.

Cajas 14, 15, 16, 17 y 18

En el diagrama se observa muy fácilmente que estas cajas conforman un ciclo de cálculo. El objetivo de dicho ciclo es el de determinar el espesor de la película de fundido en la forma más precisa posible:

1.- La variable IDI contabiliza el número de iteraciones (Caja 14)

2.- Puesto que se tienen las siguientes relaciones:

$$\begin{array}{ll}
 U1 = U1 (K3) & (U1) \\
 \delta = \delta (U1) & (DEL) \\
 K3 = K3 (K2, \delta) & (RK3) \\
 K2 = K2 (\delta) & (RK2) \\
 T = T (K3) & (T121)
 \end{array}$$

el programa evalúa los parámetros en el siguiente orden

- U1
- U2
- Con U1 y U2 calcula DEL Caja 15
- Con DEL calcula RK_2
- Con RK_2 calcula RK_3
- Con RK_3 calcula T121

- 3.- Si la diferencia entre DEL calculado en la caja 15, respecto a otro espesor de película calculado en esta misma caja, pero en la iteración inmediata anterior (DELP) es menor que la tolerancia prefijada (TOLDEL) entonces se interrumpe el "loop" y el programa continúa. En caso contrario verifica que ID_1 no sea mayor a 100 en la caja 17 (Caja 16)
- 4.- Si el número de iteraciones sobrepasa a 100 entonces se emite un mensaje de aviso y procede a trabajar con el perfil lineal. Si $ID_1 < 100$ protege el valor de DEL en DELP y retorna a la caja 14 para reiniciar el ciclo (Cajas 17 y 18)

Cajas 19, 20, 21 y 22

Una vez que se ha alcanzado la convergencia para el espesor de película (DEL), se tiene su correspondiente valor de temperatura media (T121).

El objetivo primordial de este bloque P es el de determinar el valor correcto de la constante λ_1 que satisfaga simultáneamente a las ecuaciones 4.17 y 4.18. Considérese que T121 se evalúa por medio de la ecuación 4.18 y que la temperatura T122 (etiqueta 190 - en el listado) se evalúa con la ecuación 4.17.

De acuerdo con lo anterior, si T121 y T122 son muy diferentes - se deduce que el valor de λ_1 no es el correcto y es necesario repetir los cálculos a partir de la caja 3 del diagrama (etiqueta 165 del listado) para un nuevo valor de λ_1 .

Caja 23

Al encontrar el valor correcto para la constante λ_1 , se procede a la evaluación de la temperatura promedio de película (TAV) y del parámetro (dT/dy). Por último se transfiere el control al bloque R.

Hasta este punto han sido ya descritos los bloques O y P, sin embargo, el bloque N también forma parte de el modelo para perfil no-lineal de temperatura.

Como ya mencioné antes, el bloque O sólo se utiliza para la primera corrida del programa y no vuelve a utilizarse durante toda la ejecución restante del mismo, esto quiere decir que el programa debe evaluar los parámetros de la ley potencias de alguna forma diferente a la utilizada en el bloque O ... ésta es precisamente la fun

si6n del bloque N.

En su modelo, Tadmor define la rapidez de corte de la siguiente forma:

$$\frac{dv_j}{dy} = K_2 e^{-(A_2 \xi^2 + 2A_3 \xi)}$$

donde:

$$K_2 = \frac{\frac{2V_j}{\delta} \sqrt{\frac{A_2}{\pi}} e^{-A_3^2/2}}{\operatorname{erf}\left(\sqrt{A_2} + \frac{A_3}{\sqrt{A_2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{A_3}{\sqrt{A_2}}\right)}$$

$\xi = y/\delta$, el factor posicional dentro de la pel6cula de fundido.

Consid6rese el siguiente esquema:

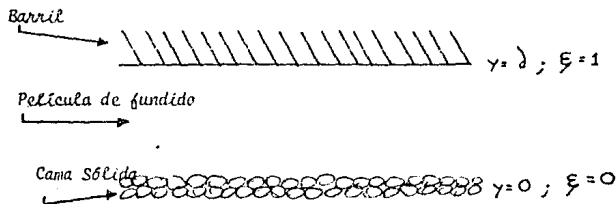


Fig. 4.9

En la interfase pel6cula de fundido-cama s6lida, $\xi = 0$ por lo que la rapidez de corte se reduce a:

$$\left(\frac{dv_j}{dy}\right)_{y=0} = \delta K_2 = \dot{\gamma}_m \quad (\text{GAMPM})$$

Por otra parte, si $\xi = 1$ entonces se tendría el valor de rapidez de corte en la interfase película de fundido-barril.

$$\left(\frac{dv_j}{dy} \right)_{y=\delta} = \delta K_2 e^{-(A_2 + 2A_3)} = \dot{\gamma}_b \text{ (GAMPB)}$$

Finalmente, para $\xi = 1/2$ (mitad de la película)

$$\left(\frac{dv_j}{dy} \right)_{y=1/2\delta} = \delta K_2 e^{-\left(\frac{A_2}{4} + A_3\right)} = \dot{\gamma}_{12} \text{ (GAMP12)}$$

De esta forma, se cuenta con tres valores de rapidez de corte en distintas posiciones de la película:

(GAMPM) $\dot{\gamma}_m$ en la interfase película-cama sólida

(GAMPB) $\dot{\gamma}_b$ en la interfase barril-película

(GAMP12) $\dot{\gamma}_{12}$ en la posición media de la película

Con estos tres valores de gamma se evalúan las siguientes viscosidades:

$$\eta_1 = \eta \left(\frac{12}{2}, T_{12} \right) \quad \text{(ETA1)}$$

$$\eta_2 = \eta \left(2 \dot{\gamma}_{12}, T_{12} \right) \quad \text{(ETA2)}$$

$$\eta_3 = \eta \left(\dot{\gamma}_m, T_m \right) \quad \text{(ETA3)}$$

$$\eta_4 = \eta \left(\dot{\gamma}_b, T_b \right) \quad \text{(ETA4)}$$

$$\eta_5 = \eta \left(\dot{\gamma}_{12}, T_{12} \right) \quad \text{(ETA5)}$$

Puesto que η_1 y η_2 están evaluadas a la misma temperatura pueden utilizarse para calcular el exponente "n" de la Ley de Po tencias en forma similar a como se hace en bloque 0:

$$n = \frac{\log (\eta_2 / \eta_1)}{\log 4} + 1$$

Para evaluar "a" se utilizan los valores de η en los extre mos de la película de fundido:

$$\eta_3 = m_0 e^{a(T_m - T_m)} \dot{\gamma}_m^{n-1}$$

$$\eta_4 = m_0 e^{a(T_b - T_m)} \dot{\gamma}_b^{n-1}$$

dividiendo η_4 por η_3
$$\frac{\eta_4}{\eta_3} = \frac{m_0 e^{a(T_b - T_m)} \dot{\gamma}_b^{n-1}}{m_0 \dot{\gamma}_m^{n-1}}$$

$$\frac{\eta_4}{\eta_3} = e^{-a(T_b - T_m)} \left(\frac{\dot{\gamma}_m}{\dot{\gamma}_b} \right)^{n-1}$$

Sacando logaritmos
$$\log \left(\frac{\eta_4}{\eta_3} \right) = -a(T_b - T_m) - (n-1) \log \left(\frac{\dot{\gamma}_m}{\dot{\gamma}_b} \right)$$

y resolviendo para a:
$$a = \frac{\log (\eta_4 / \eta_3) - (n-1) \log (\dot{\gamma}_m / \dot{\gamma}_b)}{(T_b - T_m)}$$

Por último para calcular el factor preexponencial m:

$$m = \frac{\eta_5}{\dot{\gamma}_{12}^{(n-1)}}$$

En resumen, el bloque 3 realiza la misma función que el bloque 0 pero utilizando valores de $\dot{\gamma}$ calculados con las ecuaciones desa

rrolladas por Tadmor para obtener los parámetros de la Ley de Po
tencias.

Con esto se concluye esta sección de desarrollo del modelo pa
ra perfil no lineal de temperatura cuyas ecuaciones, como puede
verse, se utilizan tal y como las definió Tadmor. A continuación
describiré el modelo para perfil lineal en el bloque Q.

BLOQUE Q

Las ecuaciones para el modelo con perfil lineal de temperatu
ras son mas pequeñas que las correspondientes al perfil no-lineal.
En este bloque, el único proceso iterativo involucrado es el cál
culo del espesor de película (DEL).

Para este modelo A_4 es una constante definida por Tadmor de la
siguiente forma:

$$A_4 = \frac{a (T_b - T_m)}{n} \quad (A4)$$

De manera similar, la rapidez de corte se define

$$\frac{dv_j}{dy} = K_2 e^{-A_4 \xi} \quad \text{donde} \quad \xi = \frac{y}{\delta}$$

En la interfase película de fundido-cama sólido el valor de ξ
es igual a cero, por lo que la rapidez de corte se reduce:

$$\left(\frac{dv_j}{dy} \right)_{y=0} = K_2 = \dot{\gamma}_m \quad (\text{GAMPM})$$

pero
$$K_2 = \frac{A_4 v_1}{\delta (1 - e^{-A_4})}$$

por otra parte en la interfase película de fundido - barril

$\xi = 1$ y en ese caso:

$$\left(\frac{dv_j}{dy}\right)_{y=1} = K_2 e^{-A_4} = \dot{\gamma}_m e^{-A_4} = \dot{\gamma}_b \quad (\text{GAMPB})$$

Por último, a la mitad de la película $\xi = 1/2$ lo que determina que:

$$\left(\frac{dv_j}{dy}\right)_{y=d/2} = K_2 e^{-A_4/2} = \dot{\gamma}_m e^{-A_4/2} = \dot{\gamma}_{12} \quad (\text{GAMP12})$$

Nuevamente, al igual que en los bloques N y O, se evalúan viscosidades con base en los valores de $\dot{\gamma}$ anteriores

$$\eta_1 = \eta\left(\frac{\dot{\gamma}_{12}}{2}, T_{12}\right) \quad (\text{ETA } 1)$$

$$\eta_2 = \eta(2 \dot{\gamma}_{12}, T_{12}) \quad (\text{ETA } 2)$$

$$\eta_3 = \eta(\dot{\gamma}_m, T_m) \quad (\text{ETA } 3)$$

$$\eta_4 = \eta(\dot{\gamma}_b, T_b) \quad (\text{ETA } 4)$$

$$\eta_5 = \eta(\dot{\gamma}_{12}, T_{12}) \quad (\text{ETA } 5)$$

mismas que serán de utilidad para evaluar los parámetros de la Ley de Potencias:

$$(\text{RN1}) \quad n = \frac{\log(\eta_2/\eta_1)}{\log 4} + 1$$

$$(\text{A}) \quad a = \frac{\log(\eta_4/\eta_3) + (n-1) \log(\dot{\gamma}_m/\dot{\gamma}_b)}{T_b - T_m}$$

$$(RM) \quad m = \frac{\eta_5}{\gamma_{12}^{n-1}}$$

$$(RMO) \quad m_0 = \frac{m}{e^{\alpha(T_{12} - T_m)}}$$

Al terminar de realizar estos cálculos, en la etiqueta 220 del listado se corrige el valor de λ_4 utilizando el exponente n (RN1) recién calculado.

Las variables ZWIO a ZWI4 que se aprecian en la sección siguiente del listado, son simplemente las relaciones entre las constantes A_2 , A_3 y A_4 a utilizarse en la ecuación 4.16 para obtener el valor de T_{av} .

El único proceso iterativo de este bloque se ilustra con el siguiente diagrama de flujo:

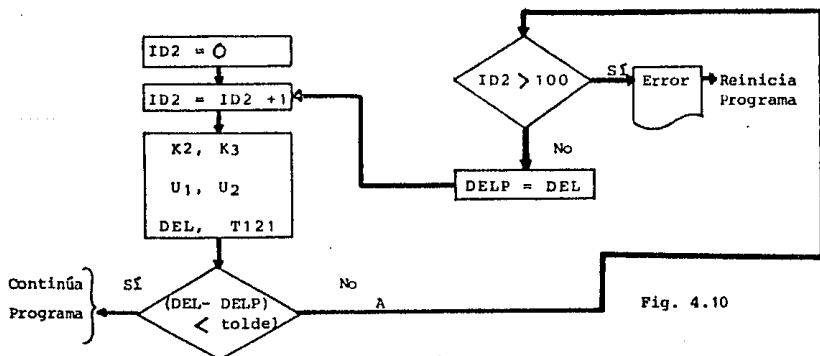


Fig. 4.10

Como puede verse, este loop es muy semejante al descrito para

las cajas 14 a 18 de la figura 4.8, lo único importante por resaltar es que mientras K_2 (RK2) y K_3 (RK3) se evalúan con las mismas ecuaciones utilizadas para el modelo con perfil no lineal (caja 9 bloque P), las variables U_1 , U_2 y T_{121} se obtienen con las siguientes ecuaciones:

$$U_1 = \frac{2K_3}{A_4} (A_4 + e^{-A_4} - 1) \quad (U1)$$

$$U_2 = 2 \frac{1}{1 - e^{-A_4}} - \frac{1}{A_4} \quad (U2)$$

para obtener la ecuación utilizada en la evaluación de la temperatura a la mitad de la película de fundido (T_{121}) considérese la ecuación 4.12:

$$\frac{T - T_m}{T_b - T_m} = \xi + \frac{K_3}{A_4^2 K_m (T_b - T_m)} \left[1 - e^{-A_4 \xi} (1 - e^{-A_4}) \right]$$

en la mitad de la película $\xi = 1/2$, considerando esto y resolviendo para la temperatura puntual T se llega a la siguiente expresión:

$$\underbrace{T}_{(T_{121})} = \underbrace{\frac{T_b + T_m}{2}}_{(T_{QUER})} + \frac{K_3}{A_4^2 K_m} \left[1 - e^{-A_4/2} - \frac{(1 - e^{-A_4})}{2} \right]$$

A continuación el espesor de película se calcula con la misma ecuación empleada en el bloque P (ecuación 4.13) con la variante en -

los valores de U_1 y U_2 .

Antes de proceder a la obtención de T_{av} , el programa verifica ciertos criterios de convergencia basados en las variables $IT1$, $ID1$ y $TOL1$. Para la completa comprensión de lo que ocurre en este segmento del Programa consúltese la sección de "Análisis de Tolerancias y Mensajes de error para el Programa 2" de este trabajo de Tesis.

Finalmente, la temperatura promedio de película (T_{AV}) se calcula por la ecuación 4.16 y la rapidez de flujo de calor ($DTDY$) por la ecuación 4.161a.

BLOQUE R

Al finalizar el proceso iterativo, para cualquiera de los dos modelos utilizados, se cuenta con los datos de T_{av} y (dT/dy) . Con dichos valores se procede al cálculo del ancho de cama sólida (XO UTW) para el incremento axial considerado.

Nuevamente, un diagrama de flujo y su descripción por cajas será muy ilustrativo:

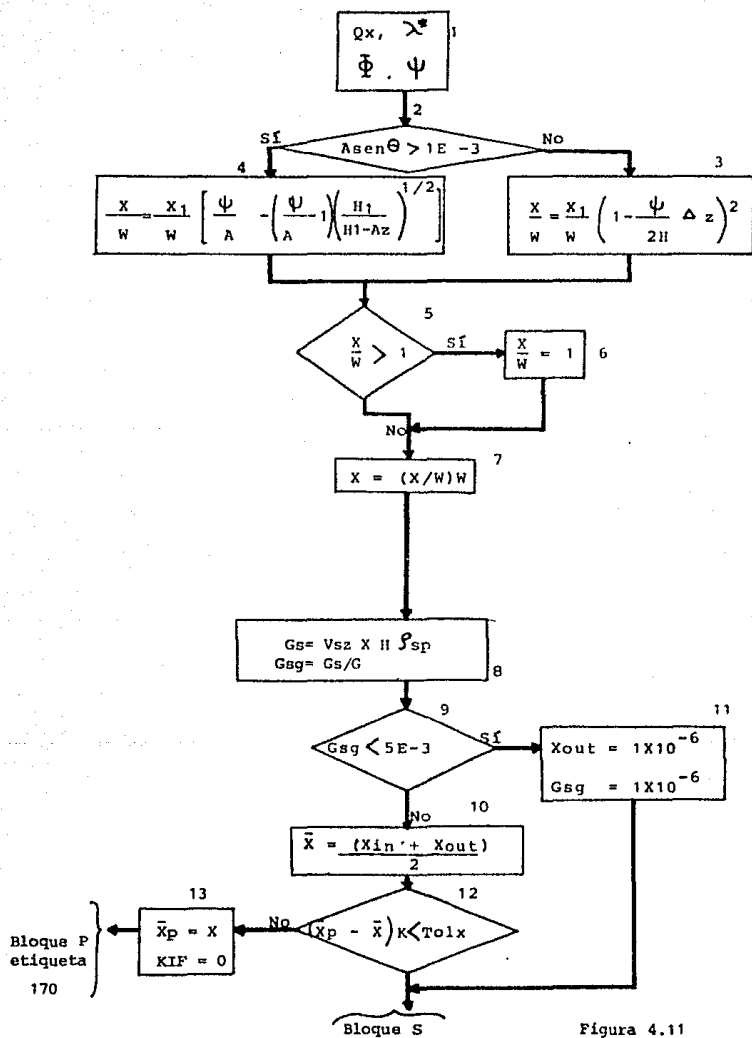


Figura 4.11

Caja 1

Con base en los valores T_{av} y (dT/dy) es posible calcular los siguientes parámetros:

(QX) $Q_x = V_{bx} \frac{U_2}{2}$ Flujo volumétrico de fundido hacia el pozo de fundido

(SLAM) $\lambda^* = \lambda + C_{pm} (T_{av} - T_m)$ Calor total incluyendo el calor por convección dentro de la película. (Ecuación 4.8)

(GPH) Φ Medida de la rapidez de fusión evaluado por la ecuación 4.15.

(PSI) Ψ Número adimensional a utilizarse en las ecuaciones de perfil de cama sólida, calculado por medio de la ecuación 4.5.

Todos ellos fueron definidos por Tadmor y sin tener ninguna modificación.

Cajas 2 a 7

En la caja 2, con base en el valor del grado de adelgazamiento para la zona considerada, $A \sin \Theta$ (HPU), se decide sobre cual ecuación utilizar para calcular el ancho reducido de cama sólida. Lógicamente, si el grado de adelgazamiento es considerable ($HPU > 1 \times 10^{-3}$),

se tiene una sección con profundidad variable de canal en cuyo caso se recurre a la ecuación 4.7; en caso contrario se usa la ecuación 4.6 (Cajas 4 y 3 respectivamente)

Previniendo el caso que X/W ($XOUTW$) sea mayor a uno, se le asigna dicho valor (cajas 5 y 6) y se evalúa el ancho de cama sólida X . (caja 7).

Caja 8

Tadmor definió el gasto másico de sólidos en la siguiente forma:

$$(GS) \quad G_s = V_{sz} XH \rho_{sp}$$

utilizándolo después para calcular el porcentaje de sólidos en el extrudado:

$$(GSG) \quad G_{sg} = \frac{G_s}{G}$$

Cajas 9 a 13

Cuando el porcentaje de sólidos GSG alcanza un valor muy bajo (concretamente menor a 5×10^{-3}), el programa asigna a $XOUT$ y GSG el valor de 1×10^{-6} para evitar un sobreflujo en el proceso. (Cajas 9 y 11)

Si por el contrario, $GSG > 0.005$, se calcula un ancho promedio

de cama sólida \bar{x} (XQUER) en la caja 10, se compara con un ancho promedio calculado en la iteración anterior (caja 12) y, en caso de que la diferencia sea menor a la tolerancia preestablecida -- (TOLX), pasa al bloque S. Una diferencia mayor a dicha tolerancia implica repetir los cálculos a partir de la etique 170 del listado en el bloque P.

Obsérvese que para el despliegue de resultados en el incremento axial considerado (bloque U), es necesario que el ancho promedio (XQUER) alcance la convergencia.

BLOQUE S

Esta es la última sección de aplicación del modelo de Tadmor dentro de un incremento axial. Su función es realizar los cálculos para potencia disipada durante la fusión del material.

Los parámetros a evaluar son los siguientes:

$$\text{(TURN) No. de vuelta} = \frac{\text{Long. acumulada}}{\left(\frac{\text{Longitud axial}}{\text{vuelta}} \right)} \left. \begin{array}{l} \text{(ZSTR)} \\ \text{(RLEAD)} \end{array} \right\} \text{Etiqueta 270}$$

$$\text{(Z) } Z = Z + \Delta Z \quad \text{(DELTAZ)}$$

$$\text{(ZWH) Rapidez de calor transferido en la película y el barril} = \underbrace{\sum K_m \times \left(\frac{dT}{dy} \right)_{y=d}}_{\text{(ZwI1)}} \Delta Z$$

(ZWWG) Rapidez de energía total aplicada a la resina

$$= \sum \Delta z \underbrace{\left[Qx \rho_m (\lambda^* + Cps (Tm - Tr)) \right]}_{ZWIO}$$

(HPS) Rapidez de energía introducida por disipación viscosa en Δz

$$= Qx \rho_m \left[\lambda^* + Cps (Tm - Ts) \right] \Delta z - \underbrace{Kmx \left(\frac{dt}{dy} \right)_{y=\Delta z}}_{ZWWG - ZWWH}$$

(GAMPB1) $\dot{\gamma}_{b_1} = \left(\frac{vb^2 \cos^2 \theta}{H^2} + \frac{4 vb^2 x}{H^2} \right)^{1/2}$ Rapidez de corte en el pozo de fundido (Ec. 4.32)

(TAUB) $\eta_{AUB} = \eta (\dot{\gamma}_{b_1}, Tb)$ Viscosidad en el pozo de fundido (Ec. 4.33)

(HPM) $HPm = \sum \frac{vb}{\cos \theta} \eta_{AUB} \dot{\gamma}_{b_1} \Delta z (W-x)$ Potencia para el transporte del fundido en el pozo (Ec. 4.34)

(TAUF) $\eta_{AUF} = \eta (\dot{\gamma}_F, Tb)$ Viscosidad a la rapidez de corte en el claro de fileta (Ec. 4.29)

(GAMPF) $\dot{\gamma}_F = \frac{vb}{\delta_F}$ Rapidez de corte en el claro de fileta ($\dot{\gamma}_F$)

(HPF) $HP_F = \sum vb \eta_{AUF} \dot{\gamma}_F e^{\Delta z}$ Potencia disipada en el claro de fileta (Ec. 4.31)

(ZFLT) $\Delta e_{SF} = \frac{\pi^2 (Db - 2d)^2 N_p^2 \Delta l e \eta_{AUF}}{\delta_F \text{sen} \theta}$ Potencia introducida por disipación viscosa en el claro de fileta (Ec. 4.30)

$$(GAMPC) \quad \dot{\gamma}_c = \frac{Vb}{\bar{H}}$$

Rapidez de corte en el canal
(Ec. 4.26)

$$(RMYC) \quad \eta_c = \eta(\dot{\gamma}_c, T_b)$$

Viscosidad en el canal (Ec.4.27)

$$(FZ) \quad Fz = e^{\frac{(H/W)}{2}} - \left(\frac{H}{W}\right)^3 + 2.2 \left(\frac{H}{W}\right)^2 - 1.05 \left(\frac{H}{W}\right)$$

$$(ZC) \quad \Delta e_{sc} = (\pi^2 (Db - 2d)^2 N^2 p) (w - x) \eta_c \left[\frac{Fz \cos^2 \theta + 4 \sin^2 \theta}{\bar{H} \sin \theta} \right] \Delta l$$

Potencia introducida por disipación viscosa en el canal. (Ec. 4.28)

$$(ZSEG1) \quad \Delta e_m = \Delta e_{sf} + \Delta e_{sc}$$

Potencia total introducida por la flecha del husillo en el incremento axial considerado.
(Ec. 4.25)

Estos datos para el cálculo de potencias son extremadamente útiles para efectos de optimización.

BLOQUE T

Simplymente se igualan los resultados a las variables a utilizar en la sección para tabulación en pantalla (ZW10 a ZW19). La porción previa a la etiqueta 300 del listado se utiliza cuando se desea que los resultados se muestren en unidades CGS y, por ello, realiza las conversiones indicadas.

BLOQUE U

En este bloque se muestran los resultados en pantalla en forma tabulada. El significado de las variables es el siguiente:

ZWIO	= Z	posición axial (cm o in)
TURN	=	Vuelta No. de vuelta
ZWI1	= H	profundidad de canal (cm o in)
ZWI2	= T_b	temperatura del barril ($^{\circ}\text{C}$ o $^{\circ}\text{F}$)
ZWI3	= T_{av}	temperatura promedio de película ($^{\circ}\text{C}$ o $^{\circ}\text{F}$)
XOUTW	= $\frac{X}{W}$	Ancho reducido de cama sólida
GSG	= Gsg	Porcentaje de sólidos en el extrudado
ZWI4	= E.G	Rapidez de energía total aplicada a la resina
ZWI5	= E.H	Rapidez de flujo de calor transferido entre el barril y la película de fundido
ZWI6	= E.D.	Disipación viscosa en la película de fundido
ZWI7	= HP_m	Potencia requerida para transportar el fundido
ZWI8	= HP_f	Potencia disipada en el claro de fileta
ZWI9	= ZSEG	Potencia total disipada en el segmento axial.

Los términos ZWI4 a ZWI9 se reportan en HP o en KW.

BLOQUE V

Comprende únicamente instrucciones para formato de presentación en tarjetas, mismas que no tienen gran importancia para el proceso de interés y no serán descritas.

BLOQUE W

El presente programa realiza cálculos por pequeños incrementos axiales prefijados por el usuario. En el momento que el valor - de ancho reducido de cama sólida (XOUTW) alcanza un valor menor a un diezmilésimo, el cálculo global se da por terminado y se reinicia el programa.

Si no ocurre lo anterior, evidentemente el cálculo global continuará para otro incremento axial. En este caso, es importante direccionar la ejecución del programa hacia la continuación de los cálculos en una misma sección del husillo (KDEL = 0) o bien pasar a la sección siguiente del mismo (KDEL = 1)

Tal como se explicó en el Bloque L, en la etiqueta 130 se prosigue con los cálculos para una misma sección, mientras que en la - 110 se da un cambio de sección.

BLOQUE X

Contiene las instrucciones de formato para la presentación de mensajes en pantalla.

Los mensajes de error que el programa puede detectar se hallan en este bloque y serán descritos con más detalle en el siguiente punto de este capítulo.

OBSERVACIONES

La descripción de este programa ha permitido delucidar aspectos muy importantes:

1. Se trata del modelo no-Newtoniano para el cálculo del perfil reducido de cama sólida propuesto por Zehev Tadmor, y cuyas ecuaciones no han sufrido modificación.
2. Las subrutinas del programa referentes al cómputo de cálculo de viscosidades, temperaturas puntuales de barril y factor de corrección para el cálculo de potencias no se han explicado aquí, pues se tratarán con más detalle en las páginas siguientes de esta tesis.
3. El modelo utiliza funciones de error en gran parte de sus ecuaciones. El programa no posee ninguna subrutina para el cálculo de las mismas.
4. Todos los cálculos los realiza en unidades del sistema inglés; no obstante, puede leer datos y entregar resultados en unidades CGS.

5. La descripción anterior pudo ser más detallada y en consecuencia, mucho más larga, sin embargo, considero que en la forma como se ha hecho ha quedado esclarecido el algoritmo de cálculo principal.
6. Los resultados se muestran en tabulación.
7. A todo lo largo del programa, desde la recepción de datos hasta el despliegue de resultados, no se realiza ningún cálculo referente a la PRESION del sistema. Esto es desconcertante - pues un extrusor de tornillo simple tiene dos funciones principales:
- Mezclar
 - Presurizar

Lo anterior se debe a las características originales del modelo propuesto, pues en él los efectos de la presión son despreciados. El argumento expuesto por Tadmor para tal medida, es la de considerar a las partículas sólidas del polímero como casi incompresibles además de que la presurización en este tipo de equipos (presurización dinámica, capítulo III) se presenta cuando todo el material está completamente fundido; por esto último, Tadmor reserva el cálculo de perfiles de presión para el modelamiento de la zona de transporte de fundido. Dicho modelamiento está fuera de los alcances de este programa pues solo atañe a la zona de plastificación.

8. Al igual que el programa para el modelo Newtoniano este paquete utiliza propiedades físicas constantes para todo el cálculo. La razón para ello se basa en la consideración de que tales propiedades deben evaluarse a una temperatura media entre la temperatura del barril y la temperatura de fusión, aspecto que no introduce gran error en el cálculo.

Pues bien, estos dos programas han sido plenamente fundamentados en cuanto a algoritmo y ecuaciones utilizadas. Sin embargo, es importante resaltar que ha sido necesario el dotarlos de nuevas subrutinas, así como el analizar la influencia de los valores supuestos sobre los resultados (tolerancias, viscosidad inicial su puesta, etc.).

Es indispensable mencionar que la utilización de este paquete, sin tener conocimiento del proceso y de ciertos criterios en el manejo de tolerancias y valores supuestos, puede impedir el usuario su amplia explotación. El objetivo de esta tesis, es proporcionar un paquete completamente manipulable y fundamentado para evitar que se maneje en forma empírica con las limitaciones que ello implica.

IV.10 Acople de Subrutinas Adicionales al Programa 2

Hasta el momento y tal como puede verse en el listado de este programa, se dispone de tres subrutinas para el cálculo de:

- Viscosidades (Subrutina A)
- Perfil de temperatura de barril (Subrutina B)
- Factor de corrección para el cálculo de potencias (Subrutina C)

No obstante, es importante resaltar que no se cuenta con una subrutina para el cálculo de la función de error, aun cuando es extremadamente importante para la ejecución del programa.

Por otra parte, la subrutina para el cálculo de viscosidades se basa únicamente en el polinomio de Klein, mismo que no es lo suficientemente preciso para una gran cantidad de sustancias. Finalmente, este programa proporciona los resultados en forma tabulada, aspecto que no ilustra muy claramente las tendencias del proceso.

Todo lo anterior determina que para volver asequible este programa debe contarse con las siguientes subrutinas adicionales:

- a) Función de error.
- b) Modelos de Carreau y Muensted para el cálculo -- de viscosidad

c) Paquete de graficación

A continuación describiré los criterios y pasos realizados para acoplar el programa principal cada una de las subrutinas anteriores.

IV.10.1 Función de Error

Esta función se utiliza en gran parte de las ecuaciones desarrolladas para perfil no-lineal de temperatura de película en el modo no-Newtoniano.

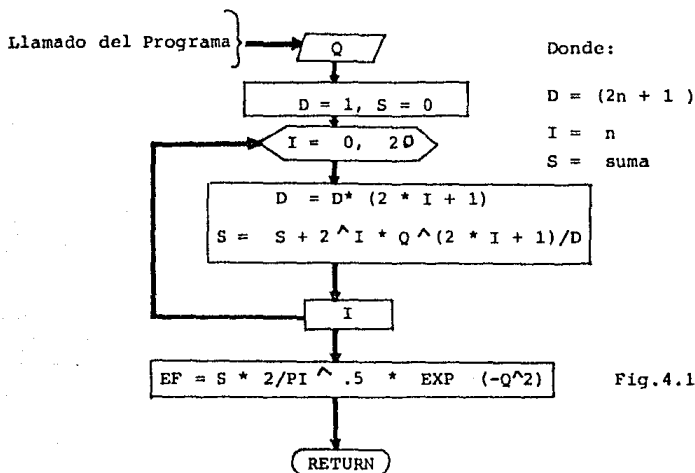
La definición matemática para esta función es la siguiente:

$$\operatorname{erf}(Q) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-Q^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{(2n+1)!} Q^{2n+1}$$

según comentarios realizados por Rao, esta función debe ser evaluada con una alta precisión. Con base en ello, me hice a la tarea de indagar el número de términos en la suma necesarios para alcanzar una precisión hasta de 10^{-6} , tomando como referencia los valores reportados en las tablas matemáticas de Stegun y Abramowitz.

La conclusión de tal tarea, es que son necesarios un mínimo de 21 términos en dicha suma ($n=20$) lo que daría como resultado una

ecuación demasiado grande. En lugar de ella, es muy sencillo aplicar el siguiente algoritmo.



como puede verse, se trató de una subrutina muy fácil de integrar al programa principal. Su aplicación en el desarrollo de los cálculos ha proporcionado resultados muy satisfactorios.

IV.10.2 Modelos de Carreau y Muensted para Viscosidad

Para el modelamiento matemático de un extrusor de tornillo simple, la evaluación precisa de la viscosidad es imprescindible para la obtención de buenos resultados. Esto es aún más enfático para los polímeros fundidos, materiales altamente viscosos.

La descripción del programa 2 ha hecho patente lo primordial del cálculo adecuado de viscosidades en el proceso iterativo para determinar la rapidez de fusión del polímero sólido.

En su presentación original, el programa utiliza el polinomio de Klein:

$$\ln \eta = a_0 + a_1 \ln \dot{\gamma} + a_{11} (\ln \dot{\gamma})^2 + a_2 T + a_{22} T^2 + a_{12} (\ln \dot{\gamma}) T$$

donde: $[\eta] = \text{lbs/in}^2$, $[\dot{\gamma}] = \text{s}^{-1}$ y $[T] = ^\circ\text{F}$

Evidentemente, este polinomio será la mejor correlación para algunos materiales; sin embargo pueden utilizarse otras correlaciones que pueden ajustarse mejor al comportamiento reológico de otros polímeros. Según algunos autores (3), dos correlaciones recomendadas para usarse en diseño son las siguientes:

- Polinomio de Muensted

$$\log \eta = \log a_T + A_0 + A_1 \log (a_T \dot{\gamma}) + A_2 (\log (a_T \dot{\gamma}))^2 + A_3 (\log (a_T \dot{\gamma}))^3 + A_4 (\log (a_T \dot{\gamma}))^4$$

donde: $[\eta] = \text{Pa.s}$, $[\dot{\gamma}] = \text{s}^{-1}$

el término a_T es llamado "factor de corrimiento" y puede evaluarse

en dos formas:

-Para Poliofinas

$$a_T = b_1 T_0 \exp\left(\frac{b_2}{T}\right)$$

(Ec. de Arrhenius)

b_1 y b_2 constantes

T = temperatura de fu
sión ($^{\circ}$ K)

T_0 = temperatura de re
ferencia ($^{\circ}$ K)

-Para Polímeros de Estireno

$$\log a_T = \frac{-C_1 (T - T_0)}{C_2 + (T - T_0)}$$

(Ec. WLF)

C_1 y C_2 constantes

- Ecuación de Carreau

$$\eta = \frac{A a_T}{(1 + B a_T^C)^C}$$

A , B y C constantes

a_T ya definida

donde $[\eta] = \text{Pa} \cdot \text{s}$ y $[\dot{\gamma}] = \text{s}^{-1}$

Evidentemente, al integrar estos modelos al programa 2 se to
mó en cuenta las unidades manejadas en el mismo. Para ello se
da el siguiente factor de conversión:

$$\eta \left[\frac{\text{lb}_f \text{s}}{\text{in}^2} \right] = 6894.4138 \eta \left[\text{Pa} \cdot \text{s} \right]$$

En el caso del programa 1, se utiliza el polinomio de Mues-
ted pero pueden integrarse las ecuaciones de Carreau y KLEIN.

IV.10.3 Paquete de Graficación

Con vistas a dotar al programa de una mejor manera de mostrar sus resultados, la elaboración de gráficas es un recurso muy útil. Para el programa 1 y el programa 2 es factible elaborar -- las siguientes cartas:

Programa 1	}	Z	vs x/w	(Posición contra perfil reducido)
		vuelta		
	}	Z	vs Gsg	(Posición contra porciento de sólidos)
		vuelta		
Programa 2	}	Z	vs x/w	(Posición contra perfil reducido)
		vuelta		
	}	Z	vs Gsg	(Posición contra porciento de sólidos)
		vuelta		
	}	Z	vs Tav	(Posición contra temperatura promedio)
		vuelta		
	}	Z	vs em	(posición contra potencia total disipada en el segmento axial)
		vuelta		

La posición en el husillo puede expresarse en términos de longitud axial (Z) o por el número de vuelta. No obstante, el utilizar la longitud axial permite tener una idea más clara del -- punto considerado en el tornillo, sin necesidad de extraer este

último. A pesar de ello y como se verá mas adelante, para la - confrontación experimental, el número de vuelta como coordenada de graficación fue muy útil.

- Características

Dado las condiciones iniciales de los programas, fue preciso idear la manera mas adecuada para realizar la graficación de -- los resultados. Inicialmente se pensó en la utilización de un - paquete comercial tal como Ener-Graphics y Lotus. Desafortunadamente, el manejar dichos paquetes implicaba un manipuleo adicional de datos por parte del operador, aspecto que quitaba continuidad al proceso e incrementaba el tiempo de máquina.

Con base en ello, decidí que el paquete de graficación debe contar con las siguientes características:

- 1.- Estar codificado en el mismo lenguaje que el programa - principal para no perder continuidad en el proceso.
- 2.- Activar automáticamente los formatos de presentación adecuados.
- 3.- Poseer flexibilidad en la presentación de una u otra carta, según los deseos del operador.
- 4.- Poder activarse en forma autónoma, sin necesidad de re-ejecutar el programa principal (manejo de archivos).
- 5.- Tener capacidad para manejo de dos o más curvas en una - misma carta para confrontaciones teórico-experimentales.

Ante tales características tan específicas, fue necesario el diseño y codificación de un paquete propio.

- Procedimiento

a) Esquema global

Considérese el siguiente diagrama:

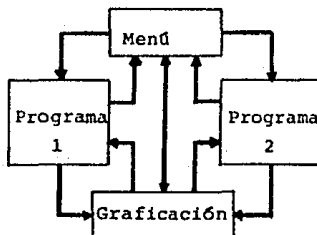


Fig. 4.13

Como puede verse, con esta configuración el paquete de graficación es aplicable a ambos programas y puede también ser ejecutado de forma independiente desde el menú. Por su parte, Programa 1 y Programa 2 pueden recurrir a la graficación o bien presentar sus resultados en tablas.

Ya se dijo que este trabajo de tesis constituye el primer paso hacia la elaboración de un macro-sistema de simulación que involucre diversos modelos; la configuración global expuesta arriba (Fig. 4.13) permitirá el integrar al sistema más modelos matemáticos realizando algunos ajustes en el menú y la graficación.

b) Enlace de Programas

Para conformar al sistema global de simulación es preferible elaborar programas independientes, con su propia enumeración de instrucciones y subrutinas, encadenándolos posteriormente realizando los ajustes adecuados. Sin embargo, al encadenar un programa con otro, la memoria RAM de la computadora borra toda la información que contiene para almacenar al nuevo programa, esto implica dos cosas:

- 1.- Los programas 1 y 2 deben almacenar sus resultados en archivo antes de enlazarse al paquete de graficación.
- 2.- El paquete de Graficación debe leer dichos archivos y -
graficarlos

Los datos que ambos programas deben archivar son:

Programa 1:

Longitud total de husillo
 No. de vueltas totales
 Longitud por zona de husillo
 No. de datos por graficar
 (z, vuelta, x/w)

Programa 2:

Longitud total de husillo
 No. de vueltas totales
 Longitud por zona del husillo
 Temperatura de barril
 Velocidad de husillo
 No. de datos por graficar
 (z, vuelta, x/w, Gsg, Tav, e_m)

No es mi intención describir con lujo de detalles el funcionamiento de este paquete de graficación, simplemente mostraré - la secuencia de actividades a realizar:

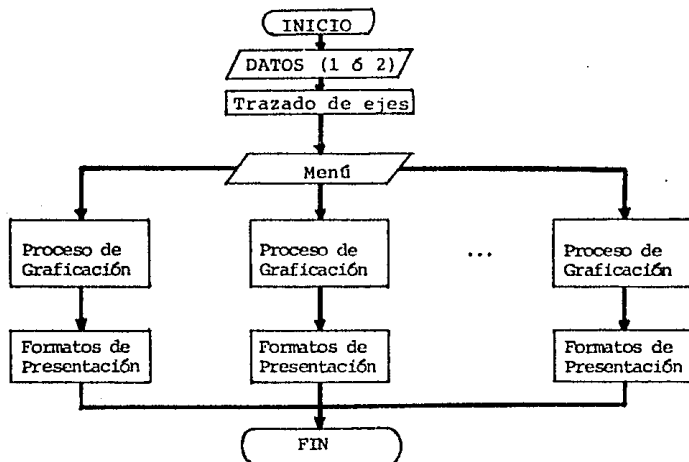


Fig. 4.14

Expresado como pseudocódigo

1. Lee datos para indicar rangos de escalas y desplegar datos importantes en pantalla así como el no. de datos por graficar.
2. Traza los ejes a utilizar sin escalas, esto es para uniformar el tamaño de las gráficas.
3. Con base en el número de opción elegida del Menú por el usuario, el programa direcciona su ejecución.

4. Se realiza el proceso de graficación que involucra la apertura, lectura y cierre de los archivos adecuados realizando su graficación inmediata. (Esto permite ejecutarlo de manera autónoma).
5. Ejecuta los formatos de presentación característico del tipo de carta como son:

- Título
- Escalas
- Acotaciones
- Condiciones de operación

Los resultados obtenidos con este paquete de graficación han sido muy satisfactorios pues posee íntegramente las características requeridas.

IV.11 Análisis de Tolerancias y Mensaje de Error para el Programa 2

a) Tolerancias y Mensajes

El Programa 2, basado en el modelo no-Newtoniano para el cálculo de perfil de cama sólida realiza una gran cantidad de iteracion

nes para dar los resultados mas precisos posibles.

Teniendo como objetivo el cálculo del ancho de cama sólida (x) mas correcto acorde a la capacidad del programa, se efectúa el siguiente proceso iterativo:

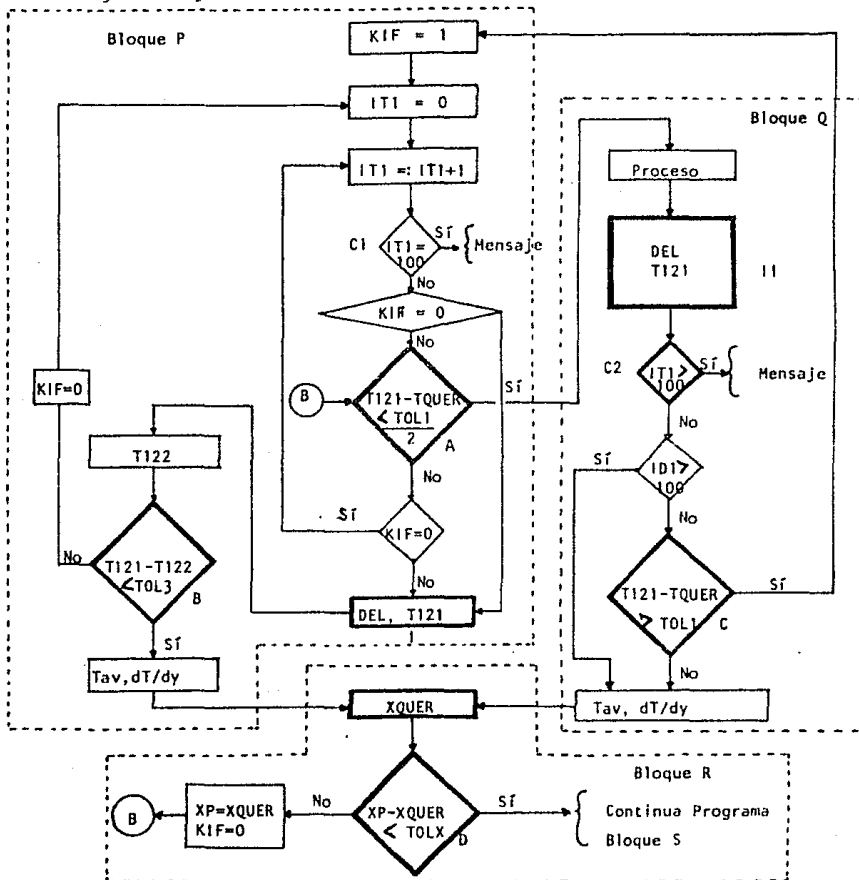


Fig. 4.15

Este segmento del programa busca la convergencia en los siguientes parámetros:

- Perfil de temperaturas lineal (Bloque Q)
- Perfil de temperaturas no lineal (Bloque P)
- Ancho promedio de cama sólida (Bloque R)
- Espesor de película de fundido (Bloque Q y P)

Los direccionamientos se realizan con base en las siguientes tolerancias:

- a) TOL1 tolerancia para perfil lineal (Cajas A y C)
- b) TOL3 tolerancia para perfil no lineal (Caja B)
- c) TOLX tolerancia para ancho de cama sólida. (Caja D)
- d) TOLDEL tolerancia para espesor de película de fundido.

El primer paso del programa por el bloque P emplea la caja A del diagrama, donde se utiliza el valor de TOL1 para decidir si se inicia el proceso con el modelo para perfil lineal (Bloque Q) o con el modelo para perfil no lineal (bloque P).

En caso de que el criterio establecido en dicha caja no se satisfaga, el programa procede a calcular el espesor de película (DEL) y su valor de temperatura a la mitad de la película (T121) correspondiente, cabe resaltar que las cajas I y II también son procesos iterativos. Una vez que se alcanza la convergencia para DEL es necesario satisfacer el criterio expuesto en la caja B, para determinar el valor correcto de T121.

Por otra parte, si se cumple con la condición impuesta en la caja A, ello significará que el modelo para perfil lineal será aplicable, buscándose posteriormente la convergencia simultánea para DEL (caja II) y T121.

Ambos bloques (P y Q) culminan con el cálculo de la temperatura promedio T_{av} y la rapidez para la transferencia de calor $-dT/dy$. Después de ello se evalúa un ancho promedio de cama sólida y se pasa a la caja D en el bloque R. El ancho promedio XQUER se usará en el bloque S para calcular la potencia requerida para el transporte de fundido, y por ello deberá ser lo más preciso posible.

El requisito indispensable para que el programa salga de este loop es que XQUER alcance un valor prácticamente invariante. Mientras no se cumpla tal cosa, el programa retorna a la caja A donde reanuda la ejecución del bloque P o del Q con base en el valor medio de TOL1. En consecuencia se busca la convergencia simultánea de DEL, T121, XQUER para cada incremento axial.

Dos de los mensajes emitidos por el programa en esta sección se dan en las caja C1 y C2 del diagrama. Cuando el valor del contador IT1 es mayor a 100 se emiten los siguientes avisos:

- "Tolerancias para T121-T122 en perfil no-lineal no alcanzada" (Caja C1)
- "Tolerancia para T121 - TQUER en perfil lineal no alcanzada" (Caja C2)

Por otra parte, si se cumple con la condición impuesta en la caja A, ello significará que el modelo para perfil lineal será aplicable, buscándose posteriormente la convergencia simultánea para DEL (caja II) y T121.

Ambos bloques (P y Q) culminan con el cálculo de la temperatura promedio T_{av} y la rapidez para la transferencia de calor $-dT/dy$. Después de ello se evalúa un ancho promedio de cama sólida y se pasa a la caja D en el bloque R. El ancho promedio X_{QUER} se usará en el bloque S para calcular la potencia requerida para el transporte de fundido, y por ello deberá ser lo más preciso posible.

El requisito indispensable para que el programa salga de este loop es que X_{QUER} alcance un valor prácticamente invariante. Mientras no se cumpla tal cosa, el programa retorna a la caja A donde reanuda la ejecución del bloque P o del Q con base en el valor medio de TOL1. En consecuencia se busca la convergencia simultánea de DEL, T121, X_{QUER} para cada incremento axial.

Dos de los mensajes emitidos por el programa en esta sección se dan en las caja C1 y C2 del diagrama. Cuando el valor del contador IT1 es mayor a 100 se emiten los siguientes avisos:

- "Tolerancias para T121-T122 en perfil no-lineal no alcanzada" (Caja C1)
- "Tolerancia para T121 - TQUER en perfil lineal no alcanzada" (Caja C2)

No obstante, obsérvese que el valor de ITI solo se incrementa por dos razones que se dan simultáneamente:

1a. $(XP - XQUER) \geq TOLX$ y

2a. $(T121 - TQUER) > TOL1$

es decir, no se cumplen las condiciones de las cajas D y A. El hecho de que $ITI > 100$ significa que no se satisfacen ambos requisitos después de 100 iteraciones empleando en todas ellas el bloque P.

Todo lo anterior implica que el mensaje emitido en la caja C2 es adecuado, no así el correspondiente a la caja C1 pues en realidad la tolerancia para la diferencia de temperatura (T121-T122) en la caja B sí logra abatirse, pues de no ser así, no se ría posible llegar al bloque R y menos aún a la caja D. Esto puede ser motivo de confusión para el usuario.

No obstante, es importante resaltar que antes de que ITI sobrepase el valor de cien, seguramente en el proceso iterativo representado en la caja I se presentará un mensaje de error. Para el bloque P en la caja I se realiza el siguiente proceso:

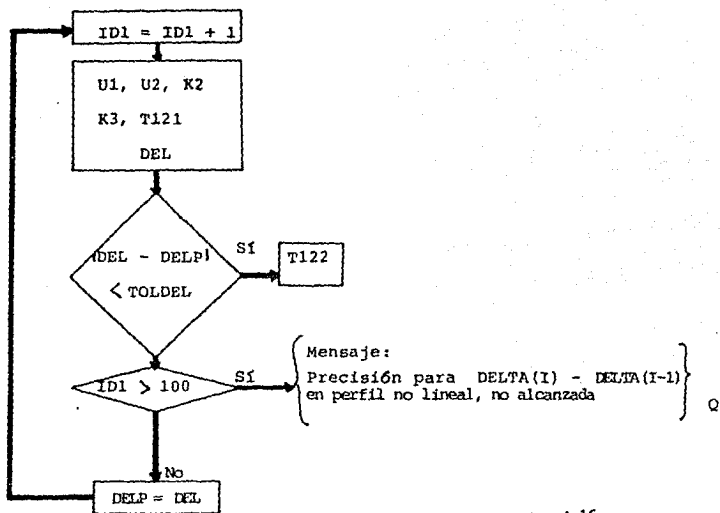


Fig. 4.16

CAJA I de la Fig. 4.15

ID1 es la variable contador de las iteraciones y se inicializó en el bloque G del programa. Obsérvese que, a la par con el incremento de IT1, se presentaría con mayor velocidad el correspondiente aumento de ID1, pues para cada paso el programa por esta sección se dan varias reutilizaciones de la caja I.

Por otra parte en el bloque Q, caja II, se presenta un proceso similar al de la figura 4.16. Este proceso se halla ilustrado en al Fig. 4.10 en donde el mensaje de error es ahora:

"Precisión para $\Delta(I) - \Delta(I-1)$ en perfil lineal no-alcanzada"

Resulta evidente que estos últimos mensajes reflejan verdaderamente lo ocurrido en el proceso.

Hasta el momento, he expuesto las posibles circunstancias bajo las cuales se presentarán los cuatro mensajes intrínsecos del programa, todos ellos basados en las tolerancias que el usuario deberá proporcionar. Sin embargo, surgen varias preguntas referentes a lo anterior:

- 1.- ¿Qué tan dependientes, son los resultados del programa, de los valores de las tolerancias?
- 2.-¿Qué proporción entre tales tolerancias es recomendable?
- 3.- ¿Qué medidas pueden tomarse al presentarse un mensaje de los cuatro expuestos?

Para dar respuesta a tales preguntas, debe considerarse primero que TOLX y TOLDEL son simplemente parámetros para determinar valores invariantes de ancho de cama sólida y espesor de película respectivamente.

Por su parte TOL1 y TOL3 tienen una función aún más importante: determinar si el perfil de temperatura en la película de fun

dido es lineal o no para aplicar las ecuaciones adecuadas en el cálculo de T_{av} y dT/dy .

Por tanto:

- 1) TOLX y TOLDEL deben ser valores muy pequeños, aunque no demasiado.
- 2) TOL1 y TOL3 deben tener valores acordes a las condiciones de operación del equipo por simular.

Si el lector observa con detenimiento todas las ecuaciones - utilizadas en los bloques P y Q, se dará cuenta de que en ellas no interviene ningún parámetro geométrico del equipo, solo aparecen propiedades físicas y reológicas del polímero así como condiciones de operación del extrusor.

Durante el funcionamiento de un extrusor, las variables que afectan la linealidad del perfil de temperatura en la película de fundido son: temperatura de barril y velocidad de rotación - del husillo.

Cuando el extrusor opera a baja temperatura de barril (T_b) y una gran velocidad de rotación del husillo (N), seguramente el material fundido presentará viscosidades muy altas, lo que traerá como consecuencia una gran disipación de calor. En este caso se presentará un perfil no-lineal de temperatura en la película de fundido.

En las condiciones de operación inversas (alta T_b y baja N), el polímero posee bajos valores de viscosidad, se disipa muy poco calor por efectos viscosos y se tiene un perfil lineal de temperatura.

Para las situaciones intermedias, las propiedades físicas del material por procesar juegan un papel importante y no puede predecirse con mucha seguridad cual será el modelo válido. Evidentemente, dichas propiedades influyen en los extremos arriba descritos aunque en menor medida.

Entonces, con base en lo anterior, para fijar los valores de $TOL1$ y $TOL3$ deben tomarse en cuenta las condiciones de operación (T_b y N) así como las propiedades físicas del polímero.

El programa alterna el uso de los modelos basados en perfil lineal o no lineal; por ello es recomendable no bloquear el uso de alguno de ellos con tolerancias muy bajas. Cabe resaltar que a las condiciones de operación propicias para tener perfil lineal, el uso de las ecuaciones 4.17 a 4.21a provoca errores matemáticos que abortan la ejecución del programa.

Por último, es importante mencionar que el mensaje emitido en la caja C1 de la figura 4.15 se modificará para hacerlo más explícito al usuario en cuanto a lo que sucede.

b) Errores

El programa, tal como se presentó originalmente, era potencialmente capaz de indentificar dos errores durante el proceso:

- 1.- $T_b < T_m$ cuando en el bloque L del programa 2 se identifica que T_b es constante ($C_1 = C_2 = 0$) y menor a la temperatura de fusión del polímero T_m entonces se envía mensaje en pantalla, haciéndose necesario el reiniciar el programa para corregir tal dato.
- 2.- $A_2 < 0$ tal como se explicó en la descripción de la caja 4 de la figura 4.8, la constante A_2 debe ser siempre positiva. En caso contrario, el programa envía mensaje e indica los valores de las variables involucradas para la fácil indentificación del problema.

De esta forma concluye el análisis de los programas 1 y 2, - mismos que aplican los modelos Newtoniano y no-Newtoniano respectivamente. En el siguiente capítulo se verificará la validez de las predicciones realizadas por ambos.

LISTA DE VARIABLES

A

A grado de adelgazamiento
 A_1, A_2, A_3, A_4 constantes definidas en el Apéndice B
 a exponente Ley de Potencias
 Ab área interna del barril

C

Cs calor específico de sólidos
 Cv calor específico a volumen constante
 C_1 constante de integración

E

e ancho de fileta
 e base de logaritmos

G

G gasto másico de fundido

H

H profundidad de canal
 Ho altura de cama sólida al inicio de la fusión
 H_1 profundidad de canal al inicio de la zona de husillo

K

k conductividad térmica
 km conductividad térmica de fundido
 K_1, k_2, k_3 constantes definidas en el Apéndice B

L

Δl incremento en la longitud axial del Husillo

M

mo, m términos de la Ley de Potencias

N

N velocidad del Husillo
n exponente Ley de Potencias

P

p no. de canales en el husillo
P presión

Q

qy flujo de calor por unidad de área en la dirección y
Qx flujo volumétrico de fundido en la dirección x

T

T temperatura puntual en la película de fundido
Tav temperatura promedio en la película
Tb temperatura de barril
Tm temperatura de fusión del polímero
Ts temperatura de sólidos
 \bar{T} temperatura promedio en la película

U

U_1, U_2 constantes definidas en el apéndice B

V

Vj velocidad puntual en la película en la dirección
Vb velocidad del barril
Vbx componente de Vb en la dirección x
Vbz componente de Vb en la dirección z

Letras Griegas

α	Conector en diagramas de flujo
δ	Espesor de la película de fundido
δ_F	Claro de Fileta
ξ	Coordenada reducida dentro de la película de fundido
η	Viscosidad no-Newtoniana
Φ	Medida de la rapidez de fusión (parámetro adimensional)
δ'	Rapidez de corte en la película de fundido
λ	Calor latente de fusión
λ^*	Calor de Fusión más calor por convección
μ	Viscosidad Newtoniana
ν	No de filetas en paralelo del husillo
ω	Rapidez de fusión del polímero por unidad de distancia helicoidal
ψ	Parámetro adimensional definido en la ecuación 4.5
ρ_m	Densidad del fundido
ρ_s	Densidad de Sólidos
θ	Angulo de hélice del husillo (función de radio)
τ	Esfuerzo cortante

CAPITULO V

DISCUSION DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

CAPITULO V

DISCUSION DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

V.1 Antecedentes

En el Capítulo IV fueron descritos los programas de cómputo para los modelos Newtoniano (Programa 1) y no-Newtoniano (Programa 2). Con base en el análisis de cada uno de ellos se han delucidado los algoritmos que utilizan y esto ha simplificado enormemente el acoplo de las subrutinas adicionales así como su codificación en lenguaje de programación más modernos que el FORTRAN IV.

Los resultados obtenidos después de realizar las actividades anteriores se exponen a continuación a manera de un análisis de las predicciones realizadas por los programas al variar parámetros geométricos y de operación en el equipo, además de una verificación experimental de los cálculos. Es importante resaltar que los dos modelos mencionados arriba mostraron las mismas tendencias en sus predicciones teóricas, aunque evidentemente, con diferente exactitud.

V.2 Análisis de Sensibilidad de Parámetros para los Programas 1 y 2

Hasta el momento se han alcanzado metas importantes hacia la consecución de un paquete simulador del proceso de extrusión: - fundamentación teórica, acople de subrutinas, análisis de tolerancias. Todo esto lo determina como una herramienta fácil de

utilizarse en un amplio rango de condiciones de operación y para una gran cantidad de equipos de diversos tamaños y características.

El siguiente paso es analizar las tendencias de los resultados teóricos a partir de la variación en las condiciones de operación o en las características geométricas del equipo.

En la industria se cuenta con gran diversidad de geometrías existente para los extrusores de tornillo simple. Evidentemente el presentar un análisis de sensibilidad para todos los tamaños y tipos de equipos es algo fuera de los alcances de este te^{ma}sis, es un trabajo muy extenso.

El presente análisis se limita a la simulación de un extrusor de tornillo simple con las siguientes dimensiones:

L/D = 25:1
 Diámetro de barril (Db) = 0.75 ^{+ 002} - .000 in
 Diámetro externo del husillo = 0.75 ^{+ 0} - 0.002 in
 Profundidad de canal (H) = 0.15 in
 Longitud de una vuelta del husillo (lead) = 0.75 in
 Tipo: monofileteado
 No. de zonas del husillo = 1
 Ancho de Fileta = 0.125 in

se trata de un equipo con husillo de profundidad de canal constante y solo una zona, mismo que se esquematiza en la Fig. 5.1.

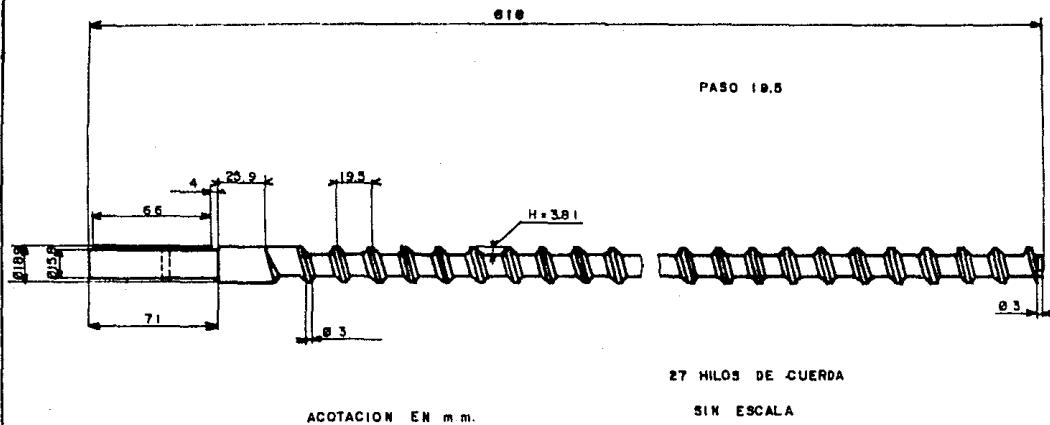


Fig. 5.1 Geometría del Husillo Utilizado para Experimentación

Este husillo fue utilizado para las corridas experimentales.

Una vez que se ha determinado la geometría del equipo por utilizar, procedemos a estudiar las tendencias que muestra el programa cuando se cambian ciertos parámetros. Al operar cualquier extrusor de tornillo simple, podemos distinguir tres variables importantes:

- a) Temperatura de barril (T_b)
- b) Velocidad del husillo (N)
- c) Temperatura inicial de sólidos (T_s)

Para el caso particular del equipo descrito antes, analizaremos también los efectos de sustituir el husillo por otros con geometría ligeramente diferente en los siguientes rasgos:

- d) Claro de fileta (d_f)
- e) Paso de una vuelta (lead)
- f) Profundidad de canal (H)

considerados todos ellos para una sola zona con profundidad constante de canal.

A continuación serán descritos cada uno de los estudios anteriores.

- a) Temperatura de Barril (T_b)

Para una geometría establecida del equipo, a velocidad de hu

sillo constante y temperatura inicial de sólidos fija, el aumentar o disminuir el valor de T_b repercute en la rapidez de fusión del material e implica tener variaciones en el perfil de cama sólida y en la longitud total necesaria para la fusión.

Se realizaron cinco corridas del programa a diferentes temperaturas (130, 140, 150, 160, 170°C) con el husillo a velocidad de 50 rpm y la geometría descrita al principio de esta sección.

Los perfiles obtenidos se ilustran en la figura 5.2.

Puede observarse muy claramente que a mayor T_b la fusión del material es más rápida y la longitud necesaria de husillo para lograrlo es menor. Esto es perfectamente lógico y no requiere de gran profundización para comprenderse.

b) Velocidad del Husillo (N)

Durante el funcionamiento de un extrusor de tornillo simple, el tiempo de residencia del material polimérico es función inversa de la rapidez con que gira el husillo. Un alto valor de N implica un tiempo de residencia corto, esto quiere decir que las partículas sólidas de polímero viajan a una velocidad mayor y la transferencia de calor desde el barril se ve desfavorecida; esto último implica que la longitud del equipo necesaria para la fusión completa del material sea aun mayor. Por el contrario, si la velocidad es baja, se tiene mayor tiempo de

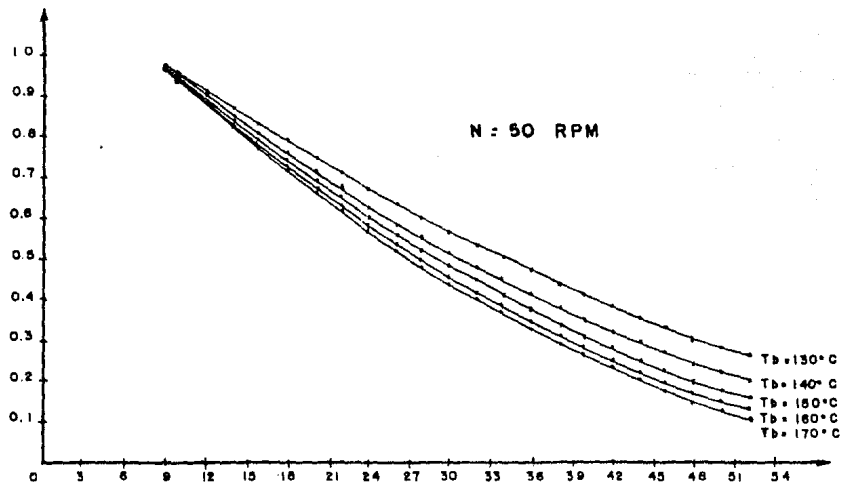


Fig. 5.2 Perfiles Reducidos de Cama Sólida para Diferentes Temperaturas de Barril

residencia, se favorece la transferencia de calor y la longitud para fusión es menor.

Todo lo anterior, se visualiza en las curvas a diferentes valores de N con $T_b = 150^\circ\text{C}$ (figura 5.3).

c) Temperatura Inicial de Sólidos (T_s)

El precalentar las partículas sólidas de polímero resulta de gran ayuda para la función plastificadora del extrusor. Evidentemente, entre mas caliente se alimente el material menor será la longitud del husillo para fundirlo. Las curvas obtenidas para $N = 50$ rpm y $T_b = 150^\circ\text{C}$ a diferentes valores de T_s se muestran en la figura 5.4a.

El precalentar el material provoca un menor consumo de potencia en el extrusor, tal como puede verse en la figura 5.4b.

d) Claro de Fileta (d_f)

Como ya se sabe, el claro de fileta es el espacio libre entre el tope de la fileta del husillo y la superficie interna del barril. Si el lector observa con detenimiento las ecuaciones utilizadas en el proceso iterativo para determinar T_{av} , dT/dy y X/W , se dará cuenta de que este parámetro geométrico del husillo no se utiliza. Sin embargo, en lo concerniente al cálculo de potencia (descrito en el bloque 5 del programa 2), d_f tiene un papel muy importante.

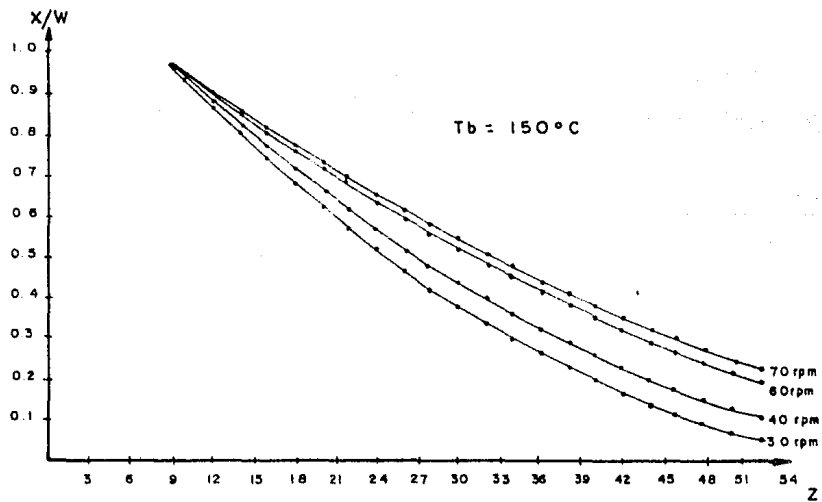


Fig. 5.3 Perfiles Reducidos de Cama Sólida a Diferentes Velocidades de Rotación del Husillo

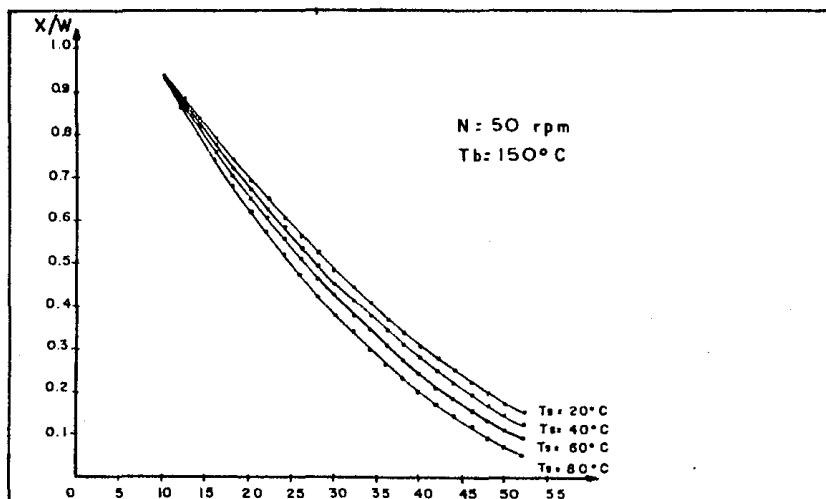


Fig. 5.4 a Perfilos Reducidos de Cama Sólida para Diferentes Valores de Temperatura Inicial de Sólidos (T_s)

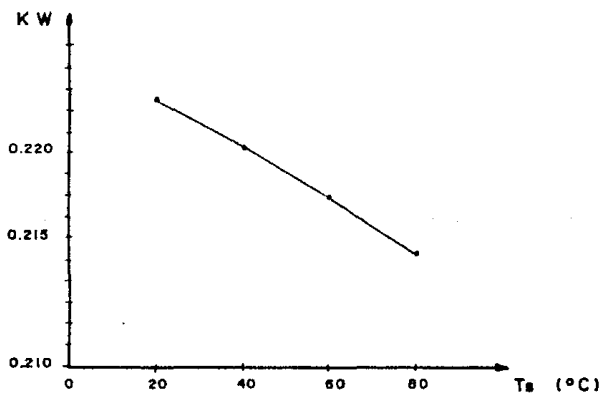


Fig. 5.4 b Potencia Total Consumida para la Fusión como Función de la Temperatura Inicial de Sólidos (T_s)

De acuerdo con las ecuaciones 4.29 y 4.31:

$$\gamma_F = v_b / \delta_F \quad (\text{Ec. 4.29})$$

$$\text{HP}_F = \sum v_b \eta_F \gamma_F^2 dz \quad (\text{Ec. 4.31})$$

es evidente que entre menor sea δ_F , mayor será la potencia disipada en el claro de fileta (HPF).

Graficando la potencia total para fundir el material como función de δ_F se obtuvo la gráfica de la figura 5.5 donde se corrobora lo expuesto antes.

e) Paso de una Vuelta de Husillo (lead)

Tadmor define el ángulo de fileta de la siguiente forma

$$\Theta = \tan^{-1} \left(\frac{L}{\pi D_b} \right) \quad \text{donde } L = \text{paso de una vuelta}$$

Claro que a mayor valor de L mayor Θ se obtiene. Por su parte, el ancho de canal también aumenta con L pues:

$$W = \frac{L}{P} \cos \Theta - e \quad \text{donde } W = \text{ancho de canal}$$

P = número de canales
en paralelo

e = ancho de fileta

este último repercute directamente a las ecuaciones 4.5 a 4.7, determinándose que, para un paso más grande, menor será la longitud de husillo necesaria para fundir el material. Obsérvese la figura 5.6 para corroborar lo anterior.

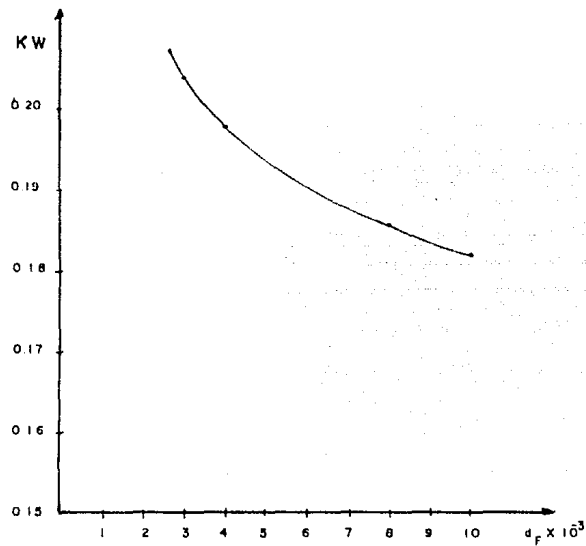


Fig. 5.5 Potencia Consumida para la Fusión del Polímero como Función del Claro de Fileto.

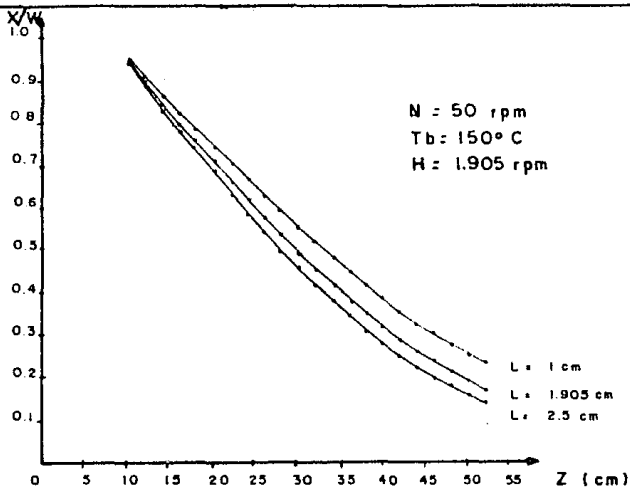


Fig. 5.6 Perfiles Reducidos de Cama Sólida para Diferentes Valores de paso de Husillo (L)

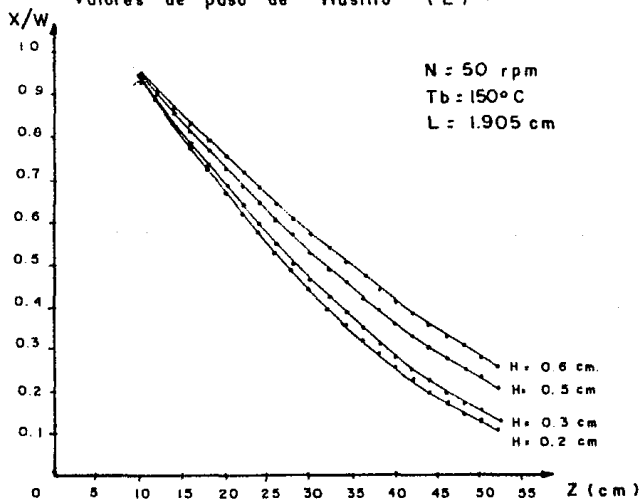


Fig. 5.7a Perfiles Reducidos de Cama Sólida para Diferentes Valores de Profundidad de Canal (H)

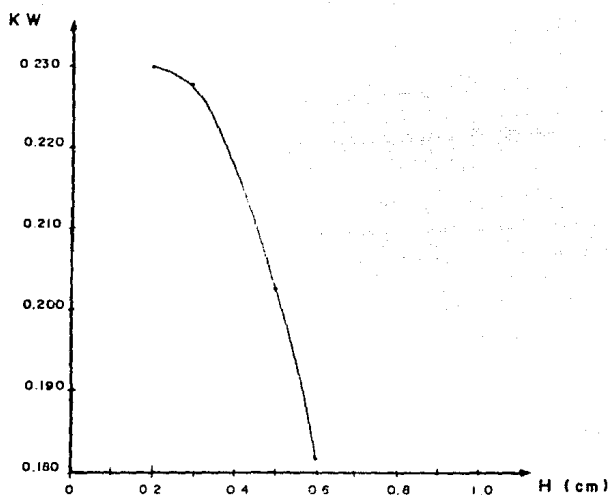


Fig. 5.7b Potencia Total Consumida para la Fusión como Función de la Profundidad de Canal (H)

f) Profundidad de Canal (H)

Para un ancho de canal constante, el aumentar la profundidad del mismo involucra el transporte de una mayor cantidad de material. Al tener más partículas sólidas por fundir, evidentemente la fusión del polímero es más lenta y requiere de mayor longitud de husillo para alcanzarse. Despreciando los cambios en el gasto másico, se obtuvieron las curvas expuestas en la figura 5.7a.

La potencia disipada para el proceso disminuye a la par del aumento en el valor del H (Figura 5.7b).

Desde el punto de vista teórico, los resultados proporcionados por el programa son altamente satisfactorios, pues reflejan perfectamente las tendencias operativas del proceso al variar las condiciones de operación. No obstante, aún falta corroborarlos experimentalmente.

V.3 Confrontación Experimental

Los programas 1 y 2 expuestos anteriormente, fueron sometidos a prueba experimental para diferentes condiciones de operación. La geometría del equipo utilizado se describió en la sección V.2 y se esquematiza en la figura 5.1.

El procedimiento seguido para la experimentación fue el descrito en la sección III.5 de esta tesis. Desafortunadamente,-

tuvo que trabajarse con gránulos de polietileno muy grandes para el canal del husillo utilizado, aspecto que impidió realizar mediciones precisas de ancho de cama sólida en puntos avanzados de la fusión ($X/W < 0.5$).

Por otra parte, las propiedades físicas y reológicas alimentadas como datos, fueron las reportadas en el Apéndice C para las corridas de prueba.

En las gráficas adjuntas, donde se muestran los resultados a diferentes temperaturas de barril con variación en la velocidad del husillo, puede apreciarse que, definitivamente, el mejor ajuste se tiene con el modelo no-Newtoniano. No obstante, el modelo Newtoniano representa muy bien la tendencia en la plasticación del polímero.

Además del ajuste, otro aspecto notable en tales gráficas, es que el modelo no-Newtoniano predice una rapidez de fusión de polímero más lenta que el Newtoniano; esto se debe a que la variación de viscosidad en la película de fundido, genera un perfil no-lineal de velocidades, lo que implica un menor flujo neto de material hacia el pozo de fundido y una menor rapidez de fusión.

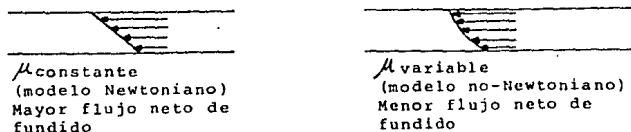
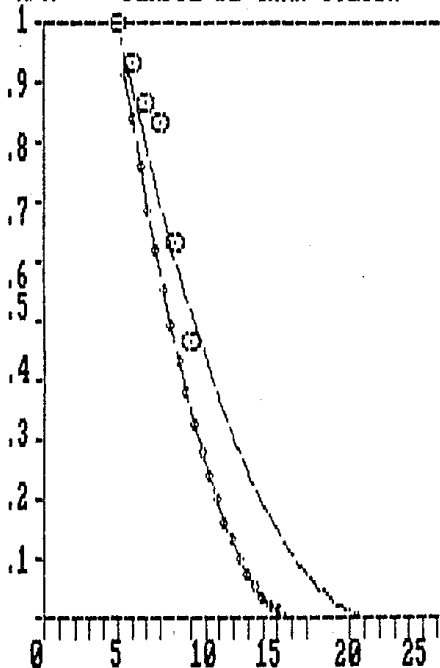


Fig. 4.24 Perfiles de Velocidad en la Película de Fundido para los modelos Newtoniano y no-Newtoniano.

X/W PERFIL DE CAMA SOLIDA

Curva Experimental

1



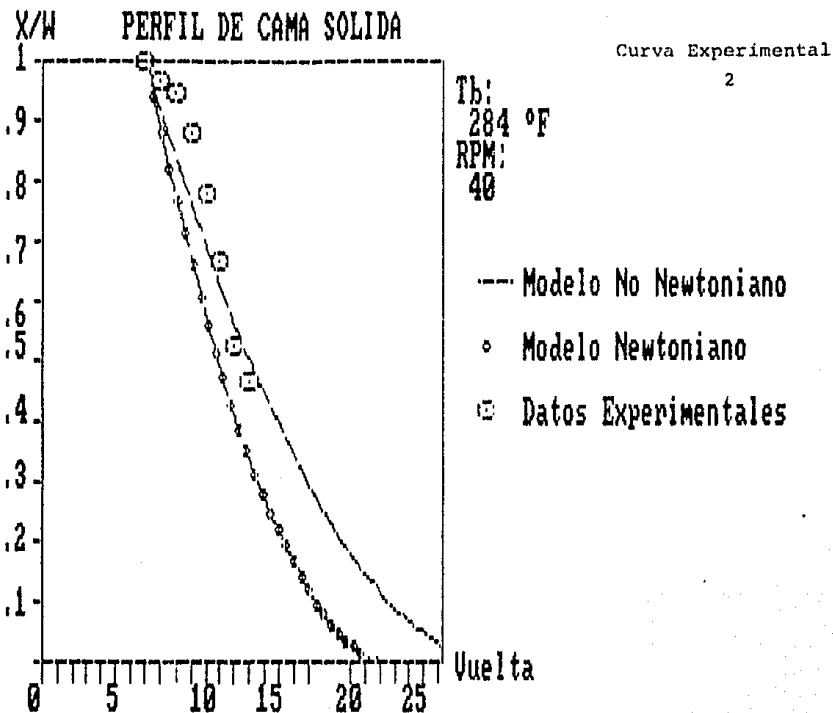
Tb:
284 °F
RPM:
20

--- Modelo No Newtoniano

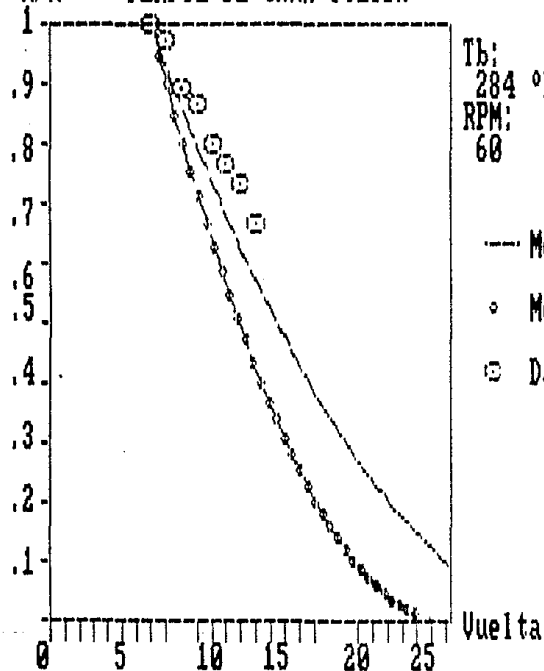
o Modelo Newtoniano

⊙ Datos Experimentales

Vuelta

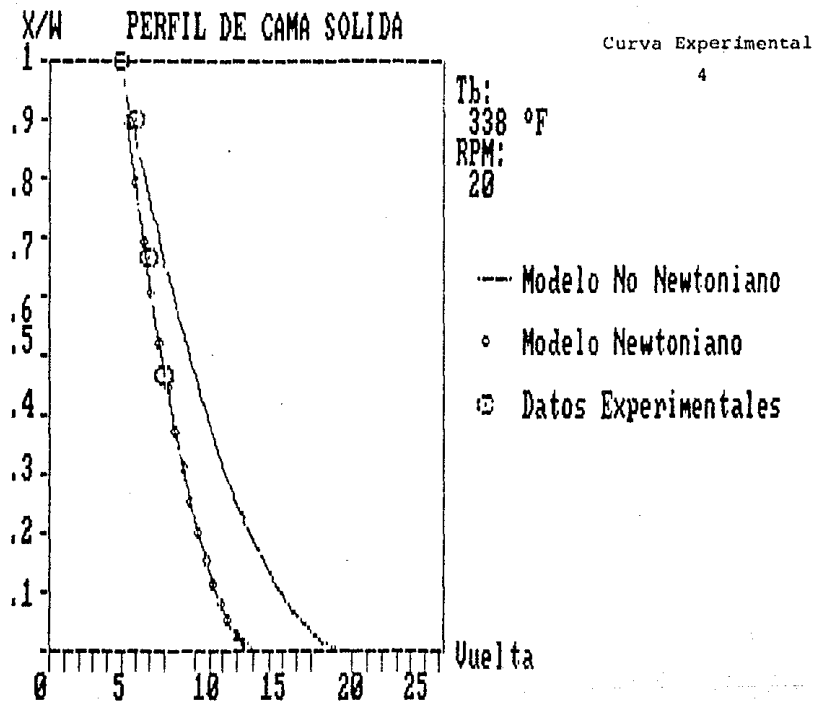


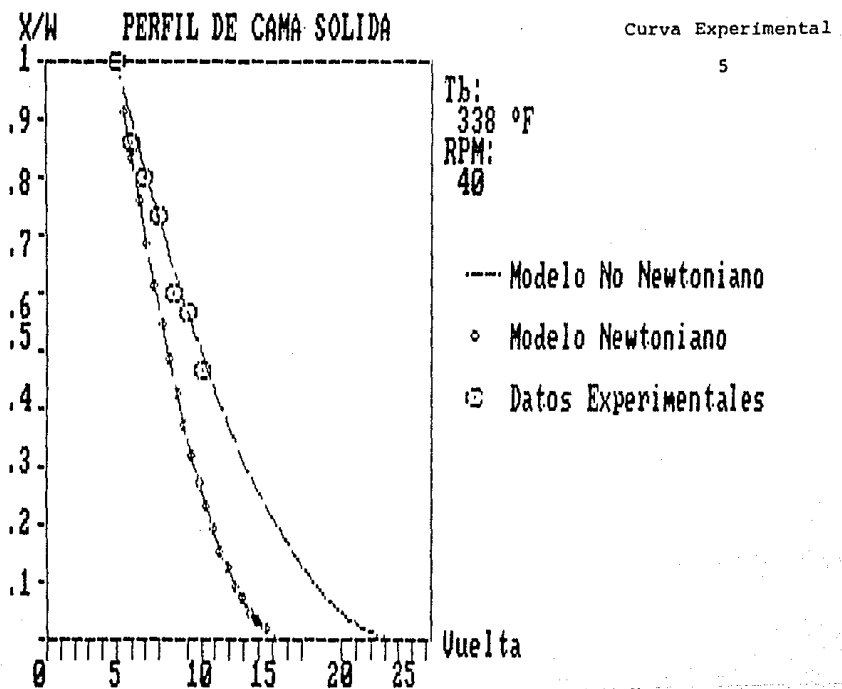
X/W PERFIL DE CAMA SOLIDA

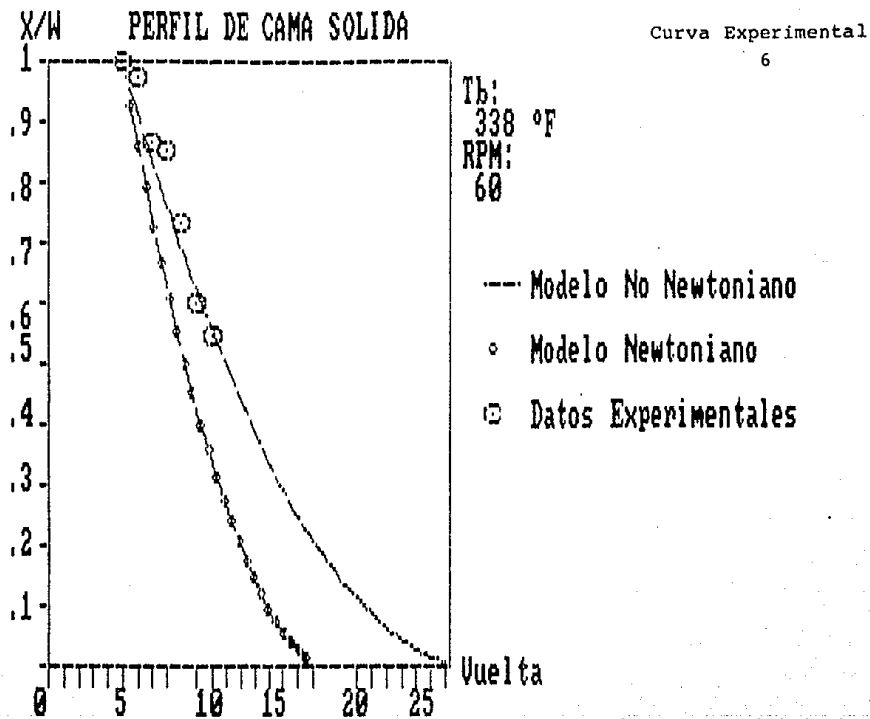


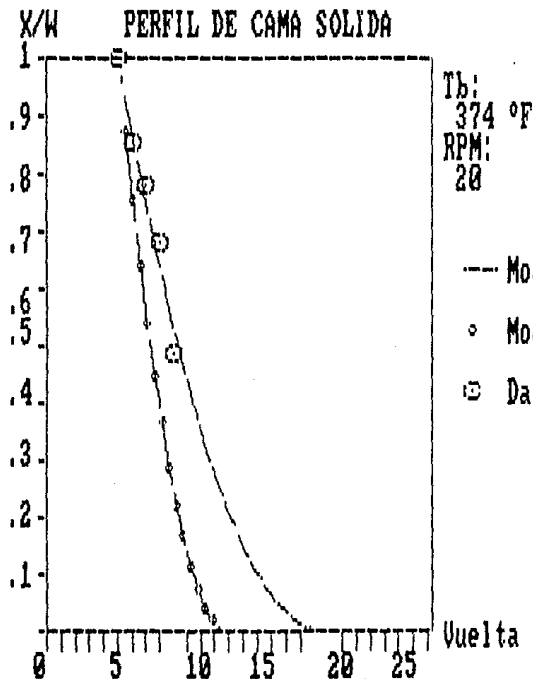
Curva Experimental

3



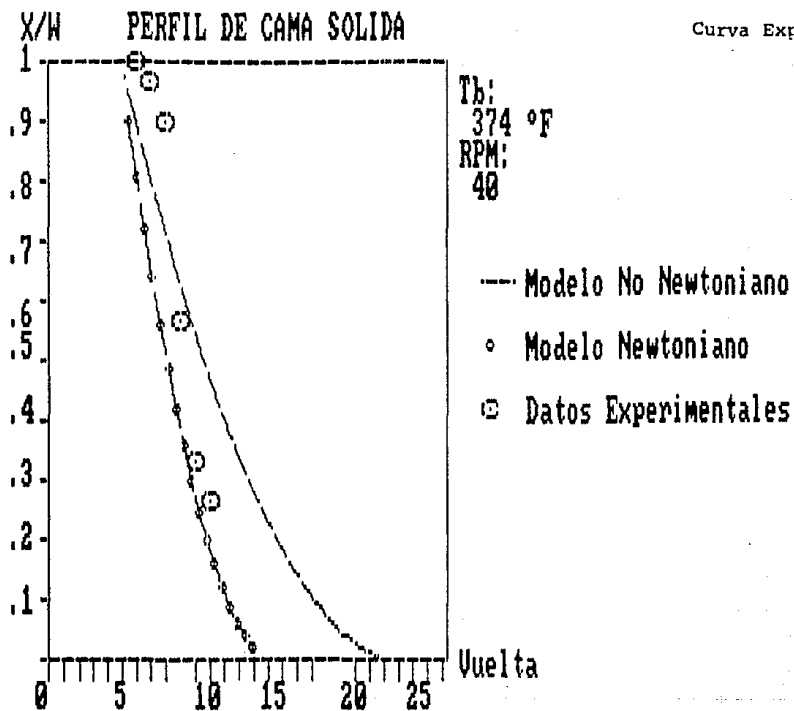






Curva Experimental

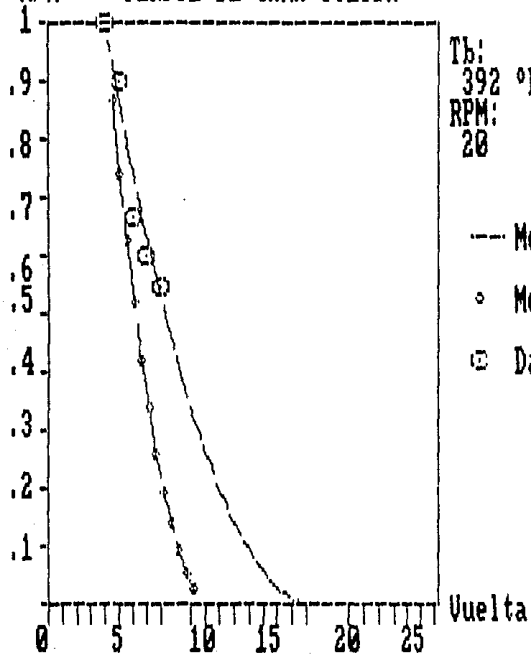
7



X/W PERFIL DE CAMA SOLIDA

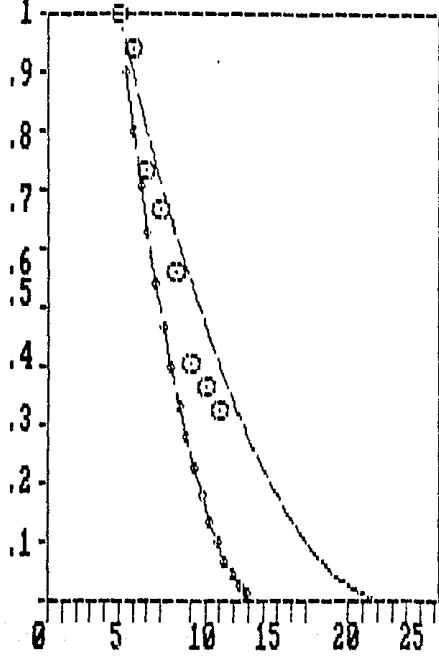
Curva Experimental

9



X/W PERFIL DE CAMA SOLIDA

Curva Experimental
10



Tb:
392 °F
RPM:
40

- Modelo No Newtoniano
- o Modelo Newtoniano
- ⊙ Datos Experimentales

Uuelta

Salta a la vista también el cabal cumplimiento de lo predicho en la sección V.2 (en lo referente a T_b y velocidad del husillo) durante la experimentación: a mayor T_b y mayor velocidad se tendrá un fundido más rápido.

A pesar de lo satisfactorio de los resultados hasta este punto, es necesario enfatizar la necesidad de analizar teórica y experimentalmente una gran cantidad de situaciones variando dimensiones y geometría del equipo, condiciones de operación así como tipo de polímero.

V.4 Conclusiones

Tal como lo revela el análisis de sensibilidad de parámetros y la confrontación experimental, el programa 2 proporciona los mejores resultados respecto a la simulación del proceso de extrusión. Este programa está basado en el modelo no-Newtoniano desarrollado por Tadmor.

La fundamentación teórica de dicho programa y el acoplo de las subrutinas expuestas en el Capítulo IV, permite disponer de dicho paquete como una herramienta de cálculo muy útil en la operación y diseño de equipos de tornillos simples.

Un aspecto muy importante y que puede ser motivo para el desarrollo de un trabajo posterior, es la utilización de este paquete de cómputo en la simulación de extrusión con diversas re

sinas, para varias geometrías equipo y diferentes condiciones de operación. Asimismo, será de gran interés la confrontación experimental del cálculo de potencia predicho.

El modelo matemático no-Newtoniano predice satisfactoriamente las tendencias en la fusión del material polimérico, sin embargo, y tal como puede verse en casi todas las curvas experimentales, en las primeras vueltas del husillo se tiene una fusión más lenta que la predicha por el programa (puntos por encima de la curva); por el contrario para vueltas posteriores, el modelo pronostica una fusión más lenta (puntos por debajo de la curva). Esta falta de precisión en los cálculos se debe a que las ecuaciones utilizadas se basan en la suposición de contar con un husillo refrigerado pues se desprecia el calor transferido desde las filetas y del fondo del canal hacia el polímero; no obstante, en la práctica el husillo se calienta y ello favorece la fusión del polímero sobre todo cuando se tiene una proporción elevada de material fundido en el canal (últimas vueltas del husillo). En las primeras vueltas se tiene una cantidad mayor de sólidos en el canal, mismos que poseen una conductividad térmica muy baja y ello impide que el husillo se caliente mucho localmente.

Con base en lo anterior, es recomendable el desarrollo de un plan experimental que confronte, de una manera más profunda, el modelo no-Newtoniano para introducir modificaciones que mejoren el ajuste con los datos experimentales.

APENDICE A

Apéndice A

Ecuaciones Modelo Newtoniano

a) Perfil de temperatura en la película (Ecuación 4.1)

Con base en la figura 3.15:

(A.1) $V_j = V_b - V_{sz}$ Velocidad relativa entre barril y cama sólida

(A.2) $V_j = (V_b^2 + V_{sz}^2 - 2 V_b V_{sz} \cos \theta)^{1/2}$ módulo de V_j

(A.3)
$$C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_j \frac{\partial T}{\partial j} + v_y \frac{\partial T}{\partial z} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = K \left[\frac{\partial^2 T}{\partial j^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]$$

$$+ 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_j}{\partial j} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} + \mu \left\{ \left(\frac{\partial v_j}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial j} \right)^2 \right.$$

$$\left. + \left(\frac{\partial v_j}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial j} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 \right\}$$

Ecuación de energía con
x = j

Eliminando términos irrelevantes:

(A.4)
$$K_m \frac{d^2 T}{dy^2} + \mu \left(\frac{dv_j}{dy} \right)^2 = 0$$

Ahora, a partir de la ecuación de movimiento en coordenadas rectangulares y en términos de gradientes de velocidad para un fluido Newtoniano con constantes:

(A.5)
$$\rho \left(\frac{\partial v_j}{\partial j} + v_j \frac{\partial v_j}{\partial j} + v_y \frac{\partial v_j}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_j}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_j}{\partial j^2} + \frac{\partial^2 v_j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_j}{\partial z^2} \right)$$

+ ρg_j

eliminando términos irrelevantes:

(A.6)
$$\frac{d^2 v_j}{dy^2} = 0$$

(A.7)
$$\int \frac{d^2 v_j}{dy^2} = \frac{dv_j}{dy} = C_1 ; \int dv_j = \int C_1 dy \Rightarrow v_j = C_1 y + C_2$$

condiciones a la frontera:

para $y = 0$, $v_j = 0$ por tanto $C_2 = 0$

para $y = \delta$, $v_j = V_j$ por tanto $C_1 = V_j / \delta$

sustituyendo C_1 y C_2

(A.8) $v_j = \frac{y}{\delta} V_j$ perfil de velocidad en la película

(A.9) $\left(\frac{dv_j}{dy}\right)^2 = \left(\frac{V_j}{\delta}\right)^2$ derivada de (A.8)

Sustituyendo A.9 en A.4:

$$(A.10) \quad Km \left(\frac{d^2 T}{d y^2} \right) + \mu \left(\frac{v_j^2}{\delta} \right) = 0$$

Integrando A.10 dos veces:

$$(A.11) \quad T = \frac{\mu}{Km} \left(\frac{v_j}{\delta} \right)^2 \frac{y^2}{2} + C_1 y + C_2$$

Condiciones a la frontera:

para $y = 0$, $T = T_m$ por tanto $C_2 = T_m$
 para $y = \delta$, $T = T_b$ por tanto $C_1 = \frac{T_b - T_m}{\delta} + \frac{\mu V_j^2}{2 Km \delta}$

y finalmente:

$$\frac{T - T_m}{T_b - T_m} = \frac{V_j^2 \mu}{2 Km (T_b - T_m)} \frac{y}{\delta} \left(1 - \frac{y}{\delta} \right) + \frac{y}{\delta} \quad \text{Ec. 4.1}$$

b) Temperatura Promedio de Película (Ec. 4.2)

Para calcular la temperatura promedio en la película

$$(A.12) \quad \bar{T} = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} T dy$$

y sustituyendo la ecuación 4.1, explícita en T, dentro de la integral:

$$\bar{T} = \frac{T + T_m}{2} + \frac{\mu V_j^2}{12 Km} \quad \text{Ec. 4.2}$$

c) Espesor de Película de Fundido (Ec. 4.3) y Rapidez de Fusión (Ec. 4.4)

Se obtiene por resolución simultánea de los balances de masa y de calor en la película de fundido:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Flujo de calor} \\ \text{dentro de la interfase} \\ \text{por unidad de área} \end{array} \right\} = \frac{Km}{\delta} (T_b - T_m) + \frac{\mu V_j^2}{2 \delta}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Flujo de calor fuera} \\ \text{de la interfase por} \\ \text{unidad de área} \end{array} \right\} = \int_S C_s v_{sy} (T_m - T_s)$$

Rapidez de fusión
por unidad de área } = $v_{sy} \rho_s \lambda$

$$(A.13) \quad \left[\frac{Km}{\delta} (T_b - T_m) + \frac{V_j^2}{2\delta} \right] - \left[\rho_s C_s v_{sy} (T_m - T_s) \right] = v_{sy} \rho_s \lambda \quad \text{Balance de calor}$$

Flujo másico entrando
al incremento en z } = $\frac{(V_{bz} + B_{sz})}{2} \rho_m (X \delta)$

Flujo másico saliendo
del incremento en $z + \Delta z$ } = $\frac{(V_{bz} + V_{sz})}{2} \rho_m (X \delta)^2_{z+\Delta z}$

Flujo másico entrando
por la interfase } = $v_{sy} \rho_s \bar{X} \Delta z$

Flujo másico hacia el
pozo de fundido } = $\frac{V_{bx}}{2} \rho_m \bar{\delta} \Delta z$

$$(A.14) \quad \frac{(V_{bz} + V_{sz})}{2} \rho_m \left[(X \delta) \Big|_z - (X \delta) \Big|_{z+\Delta z} \right] + v_{sy} \rho_s \bar{X} \Delta z - \frac{V_{bx}}{2} \rho_m \bar{\delta} \Delta z = 0$$

Balance de
masa

dividiendo por Δz y tomando límite cuando $\Delta z \rightarrow 0$

$$(A.15) \quad \left(\frac{V_{bz} + V_{sz}}{2} \right) \rho_m \frac{d(X \delta)}{dz} + v_{sy} \rho_s X - \frac{V_{bx}}{2} \rho_m \bar{\delta} = 0$$

Según demuestra Tachor (2) el primer término es despreciable, por lo que la ecuación A.15 se reduce a:

$$(A.16) \quad v_{sy} \rho_s X = \frac{V_{bx}}{2} \rho_m \bar{\delta}$$

Resolviendo la ecuación A.13 y sustituyendo la ecuación A.16 se obtienen las ecuaciones 4.3 y 4.4.

$$\delta = \left\{ \frac{[2Km (T_b - T_m) + \mu V_j^2] X}{V_{bx} [(C_s (T_m - T_s) + \lambda)]} \right\}^{1/2} \quad \text{Ec. 4.3}$$

$$w = \left\{ \frac{V_{bx} \rho_m [Km (T_b - T_m) + \frac{\mu}{2} V_j^2] X}{2 [C_s (T_m - T_s) + \lambda]} \right\} \quad \text{Ec. 4.4}$$

d) Perfiles de Cama Sólida (Ecs. 4.6 y 4.7)

Se obtienen realizando un balance de masa diferencial en la dirección horizontal del canal;

Flujo másico dentro del elemento diferencial en z } = ρ_s V_{sz} $H X$ | z

Flujo másico fuera del elemento diferencial en $z + \Delta z$ } = ρ_s V_{sz} $H X$ | $z + \Delta z$

Flujo másico de polímero fundido en la interfase $y=0$ } = $\omega \Delta z$

$$(A.17) \quad \rho_s V_{sz} \left(H X \right) \Big|_z - \left(H X \right) \Big|_{z + \Delta z} - \omega \Delta z = 0 \quad \text{Balance de masa}$$

dividiendo por Δz y tomando límite cuando Δz tiende a cero:

$$(A.18) \quad - \frac{d(HX)}{dz} = \frac{\omega}{X V_{sz}}$$

Para husillos con profundidad de canal constante:

$$(A.19) \quad - \frac{dx}{dz} = \frac{\omega}{\rho_s V_{sz} H}$$

integrando A.19

$$(A.20) \quad 2X^{1/2} = \frac{\omega}{\rho_s V_{sz} H} z + C1 \quad \text{pero } X(z_1) = X_1 \text{ donde}$$

$z_1 = \text{distancia helicoidal arbitraria}$

entonces

$$(A.21) \quad \frac{X}{W} = \frac{X_1}{W} \left(1 - \frac{\omega}{2 \rho_s V_{sz} H} (z - z_1) \right)^2$$

pero :

$$(A.22) \quad G = V_{sz} H_0 W \rho_s \quad H_0 = \text{profundidad de canal al inicio de la fusión.}$$

$G = \text{flujo másico total.}$

Sustituyendo A.22 en A.21

$$(A.23) \quad \frac{X}{W} = \frac{X_1}{W} \left(1 - \frac{\omega H_0}{2 G X_1^{1/2} H} (z - z_1) \right)^2$$

sustituyendo la definición de O (Ec. 4.5) en A.23)

$$\frac{X}{W} = \frac{X_1}{W} \left(1 - \frac{\psi}{2H} (z - z_1) \right)^2$$

Para husillos con profundidad de canal variable

$$(A.24) \quad H = H_1 - A_2 \quad A = \text{grado de adelgazamiento} = \Delta H / \Delta Z$$

Sustituyendo A.24 en A.18, y después de sustituir W (Ec. 4.4) por $\bar{\Phi} X^{1/2}$, obtenemos:

$$(H_1 - A_2) \frac{dX}{dZ} - XA = \frac{\bar{\Phi} X^{1/2}}{V_{sz} f_s}$$

por medio del cambio de variable $X = X^{1/2}$, resolviendo la ecuación diferencial de primer orden y utilizando la definición de :

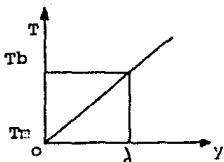
$$\frac{X}{W} = \frac{X_1}{W} \left[\frac{\Psi}{A} - \left(\frac{\Psi}{A} - 1 \right) \left(\frac{H_1}{H_1 - A_2} \right)^{1/2} \right]^2$$

APENDICE B

Apéndice B

Ecuaciones Modelo no-Newtoniano

a) Perfil Lineal Supuesto de Temperatura en la Película (Ec.4.11)



$$\text{pendiente} = \frac{T_b - T_m}{\delta}$$

Ordenada al origen = T_m
por tanto

$$T = \left(\frac{T_b - T_m}{\delta} \right) y + T_m$$

Ec. 4.11

b) Perfil Lineal de Temperatura Calculado (Ec. 4.12)

(B.1) $\tau_{yj} = -\eta \left(\frac{dv_j}{dy} \right)$

(B.2) $\eta = m \left(\frac{dv_j}{dy} \right)$

(B.3) $m = m_0 e^{a(T - T_m)}$

(B.4) $\tau_{yj} = -K_1$

de la ecuación de movimiento al considerar:

- (1) fluido incomprensible (2) flujo estacionario
- (3) gravedad despreciable (4) flujo laminar
- (5) no hay deslizamiento en las paredes
- (6) efectos despreciables de la presión sobre las propiedades físicas.

$K_1 = \text{etc. de integración}$

(B.5) $\frac{dv_j}{dy} = \left(\frac{K_1}{m} \right)^{1/n} e^{-a(T - T_m)/n}$

Combinando ecuaciones B.1 a B.4.

(B.6) $\frac{dv_j}{d\xi} = \delta K_2 e^{-A_4 \xi}$ sustituyendo la ec. 4.11 en B.5

$$\xi = y / \delta \quad (\text{B.6a})$$

$$A_4 = a (T_b - T_m) / n \quad (\text{B.6b})$$

$$K_2 = \left(\frac{K_1}{m_0} \right)^{1/n} \quad (\text{B.6c})$$

$$(B.7) \quad V_j = \frac{\delta K_2 e^{-A_4}}{-A_4} + C_1$$

Resolviendo la ecuación diferencial ordinaria B.6.

$$C_1 = \frac{\delta K_2}{A_4}$$

Considerando las condiciones a la frontera

$$K_2 = \frac{A_4 V_j}{(1 - e^{-A_4})}$$

para $\xi = 0, V_j = 0$
para $\xi = 1, V_j = V_j$

$$(B.8) \quad \frac{v_j}{V_j} = \frac{1 - e^{-A_4}}{1 - e^{-A_4}}$$

Sustituyendo C_1 y K_2 se obtiene el perfil de velocidades

$$(B.9) \quad \frac{dv_j}{dy} = \frac{v_j A_4 e^{-A_4}}{\delta (1 - e^{-A_4})}$$

Tomando la derivada de B.8 (distribución de rapidez de corte)

$$(B.10) \quad K_m \frac{d^2 T}{dy^2} = - \frac{K_3}{K_m} e^{-A_4}$$

Ecuación de energía considerando conducción de calor sólo en la dirección y

$$(B.11) \quad \frac{d^2 T}{d^2} = - \frac{K_3}{K_m} e^{-A_4}$$

Combinando las ecuaciones B.4, B.6c, B.9 y B.10 donde $K_3 = \text{no } \delta^2 K_2^{n+1}$ (B.11a)

$$(B.12) \quad T = \frac{-K_3}{K_m A_4^2} e^{-A_4} + C_2 \xi + C_3$$

Perfil de temperatura al integrar dos veces la ecuación B.11

Considerando las condiciones a la frontera: para $\xi = 0, T = T_m$ y para $\xi = 1, T = T_b$, se obtienen los valores de C_2 y C_3 , mismos que al sustituirse en la ecuación B.12 y tras algunos arreglos se obtiene la ecuación 4.12.

c) Flux de Calor en la Interfase Película-Cama Sólida (Ec. 4.16a)

$$(B.13) \quad - (q_y)_{y=0} = K_m \left(\frac{dT}{dy} \right)_{y=0}$$

Flux de calor en la interfase (y = 0)

Derivando la Ecuación 4.12 con respecto a y se obtiene la ecuación 4.16a. Al multiplicar esta última por K_m se obtiene la expresión completa para el flux de calor en la interfase (Ec. B.13).

$$(B.14) \quad - (q_y)_{y=0} = \frac{K_m}{\delta} (T_b - T_m) + \frac{U_1}{2\delta}$$

Insertando = 0 en la ecuación 4.16a y definiendo

$$U_1 = \frac{2K_3}{A_4^2} (A_4 + e^{-A_4})$$

d) Espesor de Película y Rapidez de Fusión Ecs. 4.13 y 4.15)

$$(B.15) \quad \frac{v_x}{v_x} = \frac{1 - e^{-A_4 y}}{1 - e^{-A_4 \delta}} \quad \text{Distribución de velocidad en la dirección X.}$$

$$(B.16) \quad Q_x = \delta \int_0^{\delta} v_x dy \quad \text{Flujo volumétrico en la dirección X.}$$

$$(B.17) \quad Q_x = \frac{\delta v_{bx}}{2} U_2$$

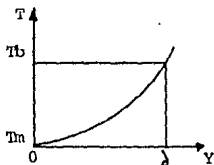
Sustituyendo B.15 en B.16, realizando la integración y definiendo.

$$U_2 = 2 \left(\frac{1}{1 - e^{-A_4 \delta}} - \frac{1}{A_4 \delta} \right)$$

Sustituyendo la ecuación B.14 en la ecuación A.13 y utilizando la ecuación B.17 en lugar de el flujo másico hacia el pozo de fundido (balance de masa modelo Newtoniano) dentro de la ecuación A.15, se obtienen las ecuaciones 4.13 y 4.15.

e) Temperatura Promedio de Película Tav (Ec. 4.16)

Esta ecuación se obtiene sustituyendo la ecuación 4.12 y la B.15 dentro de la ecuación 4.9 con su integración correspondiente.

f) Perfil no lineal de Temperatura Supuesto en la Película Ec. 4.17)

La pendiente en cada punto de la curva es función de y:

$$T_b - T_m - \frac{A_1 (1 - y/\delta)}{\delta} \quad \text{corrección en función de y}$$

$$(B.18) \quad T = \left(\frac{T_b - T_m - A_1 (1 - y/\delta)}{\delta} \right) y + T_m$$

$$(B.19) \quad T = \left(T_b - T_m - A_1 \left(1 - \frac{y}{\delta} \right) \right) \frac{y}{\delta} + T_m$$

Sustituyendo $\xi = y/\delta$ y reorganizando B.19 se obtiene la ecuación 4.17.

g) Perfil no-lineal de Temperatura Calculado (Ec. 4.18)

$$(B.20) \quad \frac{dv_j}{d\xi} = \delta K_2 e^{-\lambda_2 \xi + 2A_3 \xi} \quad \text{Sustituyendo la ecuación 4.17 en la ecuación B.5 y definiendo } A_1 = \frac{a A_1}{n}$$

$$A_3 = \frac{a (T_b - T_m - A_1)}{2n}$$

y tomando la definición de K_2 (Ec. B.16c)

(B.21)
$$\frac{V_j}{V_j} = \frac{\operatorname{erf}\left(\sqrt{\Lambda_2} \xi + \frac{\Lambda_3}{\sqrt{\Lambda_2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\Lambda_3}{\sqrt{\Lambda_2}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\sqrt{\Lambda_2} + \frac{\Lambda_3}{\sqrt{\Lambda_2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\Lambda_3}{\sqrt{\Lambda_2}}\right)}$$

Perfil de velocidad obtenido al integrar B.20 bajo las condiciones de frontera $V_j(0) = 0$ y $V_j(1) = V_j$

(B.22)
$$\frac{dv_j}{dy} = \frac{2V_j}{\delta} \sqrt{\frac{\Lambda_2}{\pi}} e^{-A_3^{2/\Lambda}} \frac{\exp\left[-(\Lambda_2 \xi^2 + 2\Lambda_3 \xi)\right]}{\operatorname{erf}\left(\sqrt{\Lambda_2} + \frac{\Lambda_3}{\sqrt{\Lambda_2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\Lambda_3}{\sqrt{\Lambda_2}}\right)}$$

Rapidez de corte a partir de la derivación de B.21

(B.23)
$$\frac{d^2 T}{d\xi^2} = -\frac{K_3}{K_m} e^{-(\Lambda_2 \xi^2 + 2\Lambda_3 \xi)}$$

Sustituyendo B.22 y B.4 en B.10

La integración de B.23 con las condiciones a la frontera $T(0) = T_m$ y $T(1) = T_b$ da como resultado la ecuación 4.18.

h) Ecuaciones para U_1 , U_2 y T_{av} (Ecs. 4.20 y 4.21)

Las expresiones para U_1 y U_2 son las mismas que las definidas para derivar B.14 y B.17 pero en términos de las constantes Λ_3 y Λ_2 . Por otra parte, la ecuación 4.12 se obtiene sustituyendo B.21 y 4.18 en la ecuación 4.9.

i) Flux de Calor en la Interfase Película-Cama Sólida (Ec. 4.21a)

Esta ecuación se obtiene diferenciando la expresión 4.18.

APENDICE C

Apéndice C

Datos para Corrida de Prueba

1. Datos Geométricos en el Husillo y extrusor

No. de zonas del husillo	1
Longitud de la zona del husillo (L)	52 cm.
Profundidad de canal en la zona (H)	0.381 cm.
Longitud de una vuelta del Husillo (Lead)	1.905 cm.
Diámetro del barril (Db)	1.905 cm.
Ancho de canal (W)	0 cm.
Ancho de fileta (e)	0.3175cm.
Claro de fileta (j)	0.0051cm.
Tipo de husillo	Monofileteado

2. Condiciones de Operación

Velocidad del Husillo (N)	40 rpm
Gasto másico (G)	0.5471 g/s
Temp. del barril (Tb)	190 °C
Temperatura de sólidos (Ts)	20 °C

3. Propiedades Físicas del Material

Material: Polietileno de Baja Densidad	
Densidad del fundido (ρ_m)	0.78 g/cm ³
Densidad de sólidos (ρ_s)	0.918g/cm ³
Cp del fundido (Cpm)	0.62 cal/g°C
Conductividad Térmica (km)	0.0004305 cal/scm°C
Calor latente de Fusión (λ)	30.969 cal/g
Temp. de fusión (Tm)	110 °C
Co de los sólidos (Cps)	0.66 cal/g°C

Polinomio para Cálculos de Viscosidad: Klein

Coefficientes:

$$a_0 = 3.7972, \quad a_1 = - .702366, \quad a_{11} = -0.0149352, \quad a_2 = -0.0082753$$

$$a_{22} = 6.8 \text{ E-7}, \quad a_{12} = 6.1154 \text{ E-4}$$

4. Tolerancias:

Para Perfil lineal de Temperatura (TOL1)	2
Para Perfil no-lineal de Temperatura (TOL3)	0.1
Para espesor de película (TOLDEL)	0.0001
Para ancho de cama sólida (TOLX)	0.0001

5. Valores iniciales e incrementos:

Viscosidad inicial supuesta (μ_i)	0.15
No de incrementos para el cálculo	50
Longitud del incremento axial (Δl)	1 cm.
Espesor inicial de película (δ_i)	0.0038
Retraso en el fundido (RMELT)	8 cm.
Factor de densidad	0
Factor de temperatura	0

RESULTADOS DE LA CORRIDA DE PRUEBA

P.Axial (cm)	Vuelta	X/W
9.0	4.7	.945
10.0	5.2	.902
11.0	5.8	.841
12.0	6.3	.791
13.0	6.8	.743
14.0	7.3	.697
15.0	7.8	.653
16.0	8.4	.609
17.0	8.9	.568
18.0	9.4	.527
19.0	10.0	.488
20.0	10.5	.451
21.0	11.0	.415
22.0	11.5	.380
23.0	12.1	.347
24.0	12.6	.316
25.0	13.1	.296
26.0	13.6	.258
27.0	14.2	.231
28.0	14.7	.205
29.0	15.2	.181
30.0	15.7	.159
31.0	16.3	.138
32.0	16.8	.119
33.0	17.3	.092
34.0	17.8	.084
35.0	18.4	.068
36.0	18.9	.055
37.0	19.4	.043
38.0	19.9	.032

BIBLIOGRAFIA

1. Anguita Delgado, Ramón - "Extrusión de Plásticos. Parte I Teoría y Equipos". 1a. Edición Española. H. Blume Ediciones (1977) 247pp.
2. Tadmor, Zehev, Klein Imrich - "Engineering Principles of Plasticating Extrusion"- Polymer Science and Engineering Series. Van Nostrand Reinhold Company (1970).
3. Rao, Natti S. - "Computer Aided Design of Plasticating - Screws" - Hanser Publishers. USA (1986).
4. Tadmor, Z., Duvdevani, I.J. y Klein, I. :Polymer Engineering and Science, 7 (1967), p. 198.
5. Sociedad Polimérica de México - IV Congreso Nacional de Polímeros - Septiembre 1988.
6. Stegun, Irene A. y Abramowitz Milton - Handbook of Mathematical Functions - Dover Publications. 1a. edición (1964) 1050 pp.
7. Chem. Eng. Sept. 1989 pp. 123 - 128.
8. Tadmor, Zehev - "Principles of Polymer Processing-J. - Willey. New York (1979) 736 pp.