UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

MODELO DE WILLIAMS: FLUJO LAMINAR ISOTERMICO ENTRE PLACAS PARALELAS

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUIMICO

PRESENTA

ISAÍAS EMMANUEL GARDUÑO OLVERA

MEXICO, D.F. 2007





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 esta 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.

lurada	aciana	40
Jurado	asiuna	ICIC).
	0.0.90	

Presidente Prof. Marco Antonio Uresti Maldonado

Vocal Prof. Luis Ángel López Latorre

Secretario Prof. Francisco López Serrano Ramos

1er. Suplente Prof. Martha Imelda Moreno Bravo

2ndo. Suplente Prof. Ángel Enrique Chávez Castellanos

Sitio donde se desarrolló el tema:

Facultad de Química. Ciudad Universitaria, D.F.

Dr. Luis Ángel López Latorre Asesor

Isaías Emmanuel Garduño Olvera Sustentante

AGRADECIMIENTOS

A mis padres (Juan, Lucia) gracias por darme la oportunidad de vivir, buscar y alcanzar mis sueños.

A mis hermanos (Ángel, Rosa, Dulce)

A mis sobrinos (Iván, Kenia, Samantha, Grecia)

A mis tíos (María, Mercedes, Raúl, Teresa, Jorge, Gloria) por sus consejos y apoyo.

A mis abuelos (Mariquita, Genaro, Conchita)

A mis amigos, no quiero dejar a nadie fuera de una lista que sería interminable, por otro lado no es necesario ya que ustedes saben quienes son y que tan importantes son para mí.

A Mutt-Ne Natura y todos los que están alrededor de este proyecto.

Dr. Luis Ángel López Latorre por su paciencia, ayuda, amistad, consejos y brindarme algo de su conocimiento.

Dr. Francisco López-Serrano Ramos por sus consejos, ayuda y amistad.

A mi alma matter: Universidad Nacional Autónoma de México "Por mi raza hablará el espíritu".

A la mejor escuela de ingeniería química: Facultad de Química.

Leticia: sin ti no hubiera sido, ni seré.

ÍNDICE

1. INTRODUCCION	4
1.1 Objetivos	5
2. CONCEPTOS GENERALES	6
2.1 Fundamentos de modelado de procesamiento de polímeros	6
2.2 Extrusor de tornillo sencillo	10
2.3 Fundamentos de fenómenos de transporte	12
3. DESARROLLO MATEMÁTICO	16
3.1 Flujo laminar isotérmico entre placas paralelas	16
3.2 Curva de flujo	16
3.3 Perfil de velocidades y gasto volumétrico	18
3.4 Desarrollo numérico	21
3.5 Métodos numéricos	23
3.6 Intervalos de perfiles de velocidad	25
4. RESULTADOS	28
5. ANÁLISIS DE RESULTADOS	52
6. CONCLUSIONES	54
APÉNDICES	56
A1 Algoritmo de cálculo	56
A2 Programas de cálculo	58
A3 Nomenclatura	70
REFERENCIAS	71

ÍNDICE DE GRÁFICOS Y ESQUEMAS

Figura 1. Esquema extrusor de tornillo sencillo.	8
Figura 2. Procedimiento para desarrollar modelos de proceso.	9
Figura 3. Distribución de temperatura en un extrusor de tornillo sencillo.	11
Figura 4. Geometría del canal helicoidal desenrollado del tornillo.	12
Figura 5. Viscosidad como función de la rapidez de deformación.	14
Figura 6. Gráfica log-log viscosidad contra rapidez de deformación.	14
Figura 7. Flujo unidimensional entre placas paralelas.	15
Figura 8. Perfiles de velocidad contraflujo.	25
Figura 9. Perfiles de velocidad simple 1.	26
Figura 10. Perfil de velocidad flujo por arrastre.	26
Figura 11. Perfiles de velocidad simple 2.	26
Figura 12. Perfiles de velocidad flujo por presión.	26
Figura 13. Curva de flujo para distintos valores de λ .	31
Figura 14. Perfiles de velocidad λ =1.	34
Figura 15. Perfiles de velocidad λ =2.	37
Figura 16. Perfiles de velocidad λ =3.	40
Figura 17. Perfiles de velocidad λ =5.	43
Figura 18. Perfiles de velocidad λ =8.	46
Figura 19. Perfiles de velocidad λ =13.	49
Figura 20. Efecto de la rapidez de deformación sobre la viscosidad.	51
Figura 21. Efecto de la rapidez de deformación sobre el esfuerzo cortante.	51
Figura 22. Diagrama de flujo: Cálculo tipo I.	56
Figura 23. Diagrama de flujo: Cálculo tipo II.	57

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Ecuaciones dinámicas y de continuidad.	13
Tabla 2. Resumen intervalo de perfiles de velocidad.	27
Tabla 3. Parámetros para la simulación.	28
Tabla 4A. Curva de flujo.	29
Tabla 4B. Curva de flujo.	30
Tabla 5A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 1.	32
Tabla 5B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 1.	33
Tabla 6A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 2.	35
Tabla 6B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 2.	36
Tabla 7A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 3.	38
Tabla 7B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 3.	39
Tabla 8A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 5.	41
Tabla 8B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 5.	42
Tabla 9A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 8.	44
Tabla 9B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 8.	45
Tabla 10A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 13.	47
Tabla 10B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 13.	48
Tabla 11. Efecto de la rapidez de deformación sobre la viscosidad.	50
Tabla 12. Efecto de la rapidez de deformación sobre el esfuerzo cortante.	50

1. INTRODUCCIÓN

El procesamiento de polímeros ha tenido durante los últimos años un rol de gran importancia en la industria química, en la cual la extrusión es uno de los procesos más recurridos (Middleman, 1997). Esta operación esta definida como un proceso continuo en el cual el material polimérico es cambiado a una forma viscosa, bombeado y presurizado usando un tornillo, y moldeado a una forma final. Ésta es una operación estándar en el campo del procesamiento de polímeros, y es ampliamente usada para muchos productos tales como perfiles, láminas, tubos, tuberías, películas, etc. Es también empleada en una variedad de técnicas de manufactura, por ejemplo, moldeo por inyección y soplado (Tadmor et. al. 2006).

El proceso consiste en cargar el material plástico en forma de partículas en una tolva, para pasar a lo largo de una cámara caliente, a través de la cual son transportados por la acción de un tornillo. Al final de la cámara caliente, el plástico fundido es forzado a salir a través de una pequeña boquilla abierta que es la que proporciona la forma del producto final (Wilczyński, 2001).

Los procesos de extrusión contemplan tres diferentes zonas: alimentación, compresión y dosificación. [Figura 1]

La descripción del proceso en la zona llamada de compresión es muy complicada ya que en esta zona se presentan dos procesos: uno de fusión y el otro de bombeo, así como también la presencia de dos fases una fase sólida y una fase liquida, lo cual, explica el porque los estudios han sido enfocados a la zona de dosificación, puesto que en esta zona el fluido se encuentra en estado liquido y en suma, esta zona es la determinante en la producción.

La descripción de la zona de dosificación puede ser lograda utilizando un modelo matemático basado en las leyes físicas y suposiciones para predecir el comportamiento del flujo en respuesta a las condiciones de proceso.

La carencia de modelos que puedan representar la realidad física dentro de este tipo de procesos, ha llevado a lo largo de estos años a proponer diferentes modelos que tienen diferentes intervalos de aplicación (Laid et. al. 2000).

Este trabajo de tesis está enfocado a aplicar un modelo matemático para la simulación del flujo de un polímero fundido a través de la región de dosificación de un extrusor de tornillo sencillo, en esta zona es donde se presentan las condiciones óptimas para realizar los experimentos numéricos. Es aquí donde se puede tratar al polímero como fluido homogéneo, seudoplástico, incompresible e isotérmico.

Los conjuntos de las ecuaciones gobernantes son resueltos usando el método de residuos ponderados de Galerkin. El modelo de Williams es usado para describir el comportamiento reológico no newtoniano del fluido.

La metodología empleada contempla los siguientes pasos:

- Análisis del problema
- Herramientas matemáticas
- Diagrama de flujo del problema.
- Algoritmo de cálculo.
- Codificación del algoritmo.
- Pruebas numéricas.
- Análisis de resultados

Al final se obtendrán los diferentes perfiles de velocidad, que permitirán dimensionar y dar validez al modelo propuesto por Williams, así como, la aplicación de diferentes métodos numéricos (Métodos de: Galerkin, Marquardt y Gauss-Legendre) que llevan a la solución correcta de problemas de ingeniería química y siendo más específicos, de la industria de procesamiento de polímeros. Por lo tanto, se establecen los siguientes objetivos:

1.1 Objetivos

- Desarrollar el algoritmo numérico de cálculo para la simulación del flujo entre placas paralelas de un polímero fundido que obedece el Modelo de Williams, mediante el método de residuos ponderados de Galerkin.
- Obtener los perfiles de velocidad y los flujos másicos con el algoritmo desarrollado.

2. CONCEPTOS GENERALES

2.1 Fundamentos de modelado de procesamiento de polímeros

Para analizar cuantitativamente el comportamiento de un fluido y cómo éste interactúa con el sistema de procesamiento, es necesario formular y resolver ecuaciones, las cuales describen el proceso. Esto se llama modelado matemático. El proceso de modelado, en su forma más general, empieza cuando se escriben las ecuaciones generales de conservación (masa, momentum y energía) que un sistema debe obedecer, junto con las ecuaciones constitutivas; las cuales describen las propiedades de los materiales que están siendo procesados. Las ecuaciones de conservación a ser resueltas deben estar sujetas a ciertas restricciones, condiciones límite, las cuales típicamente describen factores como la geometría del sistema y las fuerzas de deformación impuestas en o por las fronteras (Kumar et. al. 2003).

Generalmente tales formulaciones matemáticas son muy complejas para admitir simples soluciones analíticas e incluso esos problemas requieren soluciones numéricas (computacionales) de tal longitud y complejidad que el esfuerzo no esta justificado. El término modelado es referido específicamente para referirse a la modificación de la fórmula matemática para producir un "modelo" matemático que es fácilmente manejable.

Las simulaciones computacionales se han convertido en una gran herramienta para los ingenieros en las operaciones de procesamiento de polímeros. Ellas suplantaron los métodos tradicionales de prueba y error que no son adecuados hoy en día en el ambiente tan competitivo.

Los principios básicos de los materiales termoplásticos fueron establecidos por los años 50 (Wilczyński, 2001) desde entonces las modernas simulaciones computacionales ofrecen los medios para aplicar todas las capacidades de la ingeniería de plásticos de modo rutinario y económico, para optimizar los procesos poliméricos que se expanden a diversas operaciones como el moldeo por inyección, extrusión, calandrado, mezclado, etc. La respuesta a las demandas de altos niveles de calidad y productividad en procesamiento de plásticos, puede ser encontrada solo a través del modelado computacional de las operaciones relevantes.

Como se había mencionado, un modelo es una representación matemática idealizada de un sistema físico. Los modelos de procesamiento de materiales son construidos sobre leyes físicas, suposiciones y datos experimentales, regularmente las ecuaciones son complejas. Antes de que las computadoras se volvieran baratas y de uso cotidiano, se tenia que resolver el problema lidiando con las habilidades propias en matemáticas para poder resolver las ecuaciones, o incluso simplificar los modelos usando un razonamiento sobre el proceso físico. Las computadoras han alterado la práctica del "modelado", permitiendo incorporar geometrías más complejas y resolver ecuaciones más complicadas numéricamente. Consecuentemente, los modelos ahora representan un nivel de detalle que antes era impensable. (Tucker et. al. 1989)

La combinación de un modelo matemático, un método numérico para resolver las ecuaciones, y el software computacional para llevar a cabo la solución numérica son llamados modelo computacional o simulación. Las simulaciones por computadora permiten que los modelos sean aplicados rutinariamente y con un mínimo de esfuerzo para explorar el comportamiento del proceso.

Una pregunta que sale a la luz en este punto es: ¿Por qué los modelos son útiles? La primera respuesta sería porque ellos expresan entendimiento. El modelo es la hipótesis, porque ellos proveen predicciones cuantitativas, las cuales pueden ser examinadas contra los experimentos. Los modelos son una forma conveniente para codificar o expresar el conocimiento.

Segundo, un modelo matemático fiable puede también probar ideas de diseño, reducir la necesidad o cantidad de experimentos. Usados en esta forma, los modelos no proveen información científica adicional. Más bien, ellos amplían el conocimiento previo.

Tercero, los modelos dan información usualmente más detallada que los experimentos.

Con los modelos se puede analizar el comportamiento de las variables y como afectan individualmente al proceso. Por lo tanto, los modelos ayudan a los científicos e ingenieros en su tarea principal: entender el mundo físico y estructurarlo a sus necesidades.

Con el razonamiento anterior, lo siguiente es preguntarnos ¿Cómo se construye un modelo? Los siguientes pasos, quedan ilustrados de manera más amplia en la figura 2.

- 1. Definir el problema. El propósito de un modelo es calcular el comportamiento de un proceso para un rango de entradas y condiciones. Antes de construir un modelo, se debe definir el proceso físico, las entradas, salidas y su posible comportamiento.
- 2. Formular el modelo matemático. Un modelo matemático es un conjunto de ecuaciones que representan el proceso físico. Matemáticamente los modelos deben estar desarrollados a partir de los principios fundamentales, observaciones empíricas o analogías con otros sistemas.
- 3. Resolver las ecuaciones. Métodos de soluciones numéricas son el corazón de la simulación en computadora, dado que el método numérico determina el tiempo, y el costo de implantar, configurar, ajustar y correr una simulación.
- 4. Evaluar el modelo. Las soluciones numéricas son examinadas por la precisión que ellas tengan comparándolas con la solución analítica a problemas clásicos.

Para analizar este punto, bien se puede establecer la siguiente pregunta.

- ¿El modelo describe las propiedades físicas? Esto se puede llevar a cabo comparando los resultados del modelo con el comportamiento del sistema físico; un modelo exitoso debe predecir el resultado de los experimentos.
- 5. Revisar el modelo. Cuando se revisa un modelo es particularmente importante separar las deficiencias en el modelo de las limitaciones en el método numérico. Porque las ecuaciones del modelo y sus soluciones numéricas están entremezcladas en un solo programa computacional y se tiende a considerarlos como una solo entidad. Esto es, sin duda, equivocado. Las ecuaciones son el modelo, el método numérico es una herramienta conveniente para resolver las ecuaciones, respuestas inexactas de los métodos numéricos no implican errores en el modelo, y una solución numérica exacta no implica un modelo correcto. El resultado final, con la solución numérica y el modelo correcto, se puede considerar que la simulación computacional produce predicciones útiles y satisfactorias.

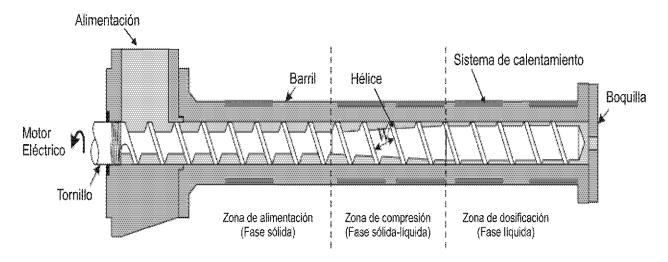


Figura 1. Esquema extrusor de tornillo sencillo.

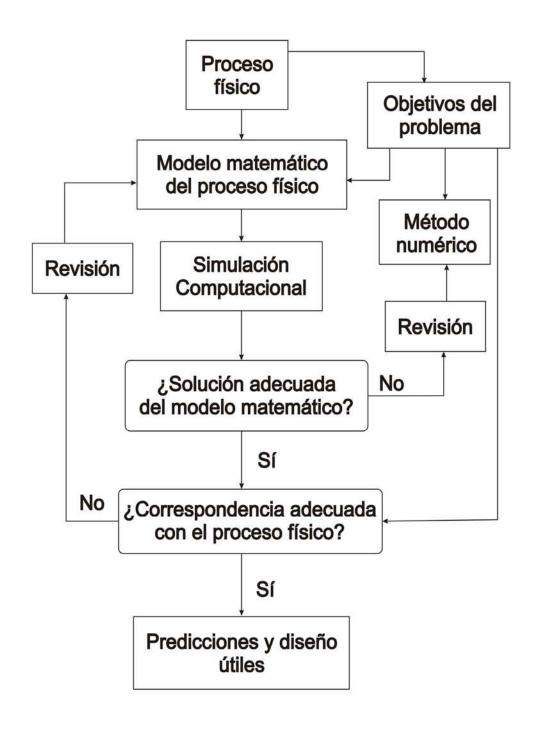


Figura 2. Procedimiento para desarrollar modelos de proceso. Morton, D. Process Modeling, Longman, New York, 1986.

2.2 Extrusor de tornillo sencillo

Extrusión es una operación de procesamiento de polímeros, en la cual un material termoplástico sólido fundido o ablandado, es forzado a través de un orificio (boquilla) de sección transversal, y finalmente enfriado. El proceso es usado para plásticos y para la producción de tubos, tuberías, hojas, películas, recubrimientos de cables, y perfiles. Todas las líneas de extrusión incluyen una bomba de fusión llamada extrusor, pero otros equipos adicionales se requieren para procesos específicos. Aunque hay muchos tipos de extrusores, los tipos más comunes son los extrusores de tornillo sencillo, de doble tornillo, y extrusores de cañón para procesos especiales (Kumar et. al. 2003).

El extrusor de tornillo simple consiste de un tornillo en un cilindro de metal o barril. En una terminal del barril está incluida una boca de alimentación y por el otro lado se encuentra abierto. El depósito de alimentación (Tolva) está localizado por encima de la boca de alimentación y el barril esta rodeado por elementos para calentar y enfriar. El tornillo está acoplado a través de un rodamiento o cojinete y un engrane, o reductor, a un motor que rota el tornillo en el barril. Una boquilla está conectada a la terminal "abierta" del extrusor con una placa y una pantalla formando un sello entre el extrusor y la boquilla. [Figura 1]

Durante la extrusión, las partículas de resina son alimentadas desde la tolva, a través de la boca de alimentación del extrusor, hacia dentro del barril del extrusor. Las resinas caen dentro del tornillo rotatorio y son condensadas en la primera sección o zona de alimentación del tornillo. Las partículas condensadas son fundidas conforme van avanzando a través de la sección media (zona de transición o de compresión) del tornillo [Figura 3], y el fundido es mezclado en la sección final o zona de dosificación. La presión generada en el extrusor empuja al polímero fundido a través de la boquilla.

Las tres zonas básicas del extrusor de tornillo [Figura 1] son las siguientes (Mckelvey, 1966):

Zona de alimentación. La función de esta zona es precalentar el plástico y transportarlo hacia las zonas subsecuentes. El diseño de esta sección es importante dado que la profundidad constante del tornillo debe proporcionar suficiente material a la zona de dosificación, pero por otro lado no proporcionar demasiado material de tal manera que la zona de dosificación esté desbordada. El diseño óptimo está relacionado con la naturaleza y forma de la alimentación, la geometría del tornillo y las propiedades de fricción del tornillo y el barril en relación al plástico que se desea procesar. El comportamiento de la fricción del material alimentado tiene una influencia considerable en la rapidez de fundido que puede lograrse.

Zona de compresión. En esta zona la profundidad del tornillo gradualmente decrece tanto como para compactar el plástico. Esta compactación tiene el doble papel de estrujar cualquier bolsa de aire atrapada en la zona de alimentación y mejorar la transferencia de calor a través de la reducción del espesor del material.

Zona de dosificación. En esta sección la profundidad del tornillo está de nuevo constante pero mucho menos que en la zona de alimentación. En la zona de dosificación el fundido está homogeneizado para proveer una velocidad constante, temperatura uniforme del material y presión a la boquilla. Esta zona es la más uniforme para analizar, dado que, involucra un fluido fundido viscoso a lo largo de un canal constante.

La longitud de las zonas en un tornillo particular depende del material por ser extruído. Por ejemplo, con nylon, el fundido es muy rápido y la compresión del fundido puede llevarse a cabo en una vuelta del tornillo, PVC por otro lado, es muy sensible al calor y se prefiere una zona de compresión que cubra la longitud completa del tornillo.

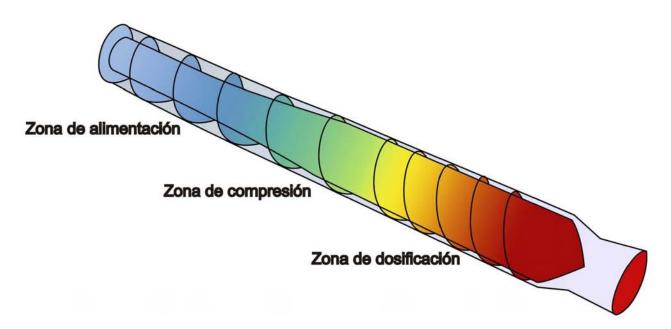


Figura 3. Distribución de temperatura en un extrusor de tornillo sencillo. Zona de mayor temperatura: Dosificación, zona de menor temperatura: Alimentación.

2.3 Fundamentos de fenómenos de transporte

Para realizar el análisis pertinente se deben dejar bien establecidos conceptos de fenómenos de transporte, que serán, el punto de partida para establecer las suposiciones que se harán para delimitar el modelo.

Geometría

Como el tornillo rota dentro del barril, el movimiento del plástico a lo largo del tornillo depende si se adhiere al tornillo o al barril. En teoría hay dos extremos. En un caso el material se pega solamente al tornillo y el material rota como un cilindro sólido dentro del barril. Esto resultaría en una salida nula y es obviamente algo indeseable. En el segundo caso el material resbala en el tornillo y tiene una alta resistencia a la rotación dentro del barril. Esto resulta en un movimiento completamente axial del fundido siendo ésta la situación ideal. En la práctica el comportamiento está ubicado entre estos dos límites; así el material se adhiere a ambos, al tornillo y al barril. La salida útil del extrusor es el resultado de un flujo por arrastre debido a la interacción de la rotación del tornillo con el barril estacionario. Esto es equivalente al flujo de un líquido viscoso entre dos placas paralelas cuando una placa está estacionaria y la otra se encuentra en movimiento.

Para iniciar el análisis se reconoce que el flujo que ocurre a causa de la fricción en la superficie del barril, hace que el material fundido se deslice sobre el canal y vaya hacia la salida del extrusor conforme el tornillo va rotando. Este movimiento de un elemento de material es resultado de la velocidad relativa entre el barril y el tornillo; pudiendo ser estudiado más fácilmente, permitiendo que el barril rote en una dirección opuesta a la rotación del tornillo y manteniendo el tornillo estacionario. Además, suponemos que la curvatura del tornillo no es sentida por el polímero, así se puede considerar que el polímero se esta moviendo, bajo un canal muy largo rectangular de sección transversal, por el movimiento de la superficie superior. [Figura 4]

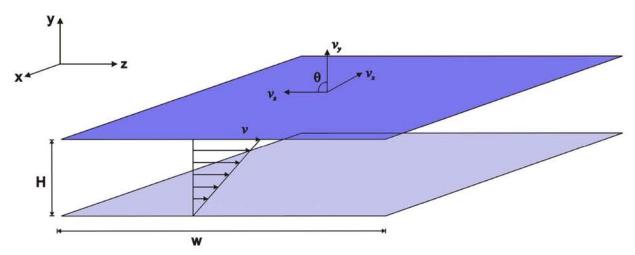


Figura 4. Geometría del canal helicoidal desenrollado del tornillo. La superficie superior representa al barril moviéndose en un ángulo θ del eje helicoidal.

La simplificación geométrica empieza con desenrollar el canal helicoidal del tornillo como se mostró en la figura 4; el movimiento relativo del tornillo y el barril son equivalentes al movimiento estacionario de un plano en un ángulo θ del eje helicoidal z. Así se genera un flujo por arrastre con componentes en las direcciones x y z. De este modo, se puede usar la ecuación de Navier-Stokes (Bird et. al. 2002) en coordenadas rectangulares [Tabla 1], esta simplificación geométrica hace posible tratar el caso de una manera más simple.

Tabla 1. Ecuaciones dinámicas y de continuidad en coordenadas rectangulares.

Ecuaciones dinámicas. (2.1)

$$x: \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + \rho g_x$$

$$y: \rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) + \rho g_y$$

$$z: \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + \rho g_z$$

Ecuación de continuidad. (2.2)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho v_z) = 0$$

Fluidos seudoplásticos

"Los fluidos tratados dentro del campo de procesamiento de polímeros, principalmente polímeros fundidos, son usualmente seudoplásticos" (Mckelvey, 1962).

Aquellos materiales cuya viscosidad decrece cuando se incrementa la rapidez de corte son denominados seudoplásticos. Materiales que exhiben una viscosidad que se incrementa con el aumento de la rapidez de corte son llamados dilatantes (Williams, 1966). Esos términos están ilustrados en la figura 5. Virtualmente todos lo polímeros fundidos presentan comportamiento seudoplástico. Esto se puede entender tomando en cuenta consideraciones de la naturaleza macromolecular de esos materiales. En el estado imperturbado, las moléculas del polímero tienden a asumir una conformación aleatoria. Por lo tanto a baja rapidez de deformación la resistencia a fluir es más grande debido numerosos entrecruzamientos de cadenas intramoleculares intermoleculares, lo cual hace difícil que las moléculas del polímero fluyan entre ellas, en la dirección de flujo. La viscosidad es, por lo tanto, reducida para permitir el flujo. Estos conceptos son ilustrados en la figura 6

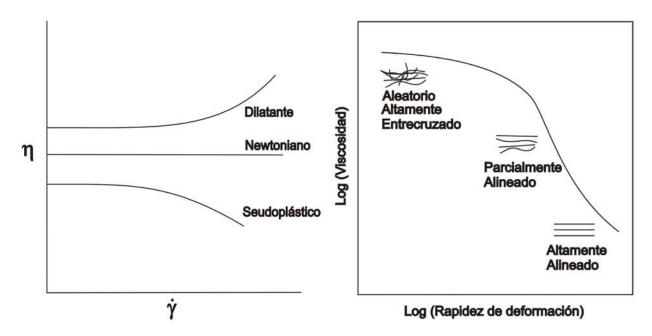


Figura 5. Viscosidad como función de la rapidez de deformación.

Figura 6. Gráfica log-log viscosidad contra rapidez de deformación.

A modo de resumen, los fluidos seudoplásticos han sido definidos como fluidos no newtonianos independientes del tiempo, es decir, el tiempo que toma a estos para fluir es instantáneo debido al alineamiento de las partículas en la dirección de flujo. Esta tendencia se amplifica con el aumento en la velocidad de deformación al mismo tiempo que la viscosidad efectiva disminuye. En el mismo contexto, la alta viscosidad de los polímeros fundidos no permite que alcancen el régimen turbulento cuando fluyen, por ejemplo, entre dos laminas planas y paralelas lo que los mantiene en régimen de flujo laminar (Tadmor et. al. 2006).

El movimiento de cualquier fluido debe satisfacer necesariamente las tres ecuaciones fundamentales de transporte: Materia (Ec. de continuidad), Momentum (Ec. de movimiento), Energía (Ec. de energía). La suposición de flujo isotérmico elimina el uso de la ecuación de energía, ya que la temperatura es constante a lo largo de las placas. Aunque ningún flujo viscoso puede ser verdaderamente isotérmico, ya que la fricción entre las capas de fluido genera calor, llamado disipación viscosa. Sin embargo, puede suponerse para flujo lento viscoso en un canal estrecho en comparación con la longitud de las placas, como primera aproximación, sea isotérmico. Esta suposición simplifica enormemente la solución y provee ecuaciones de trabajo; simples y útiles.

Se debe notar que la ecuación de continuidad (ecuación 2.2) es una ecuación diferencial parcial, lo cual, la hace difícil de manejar. Como se mencionó, la extrusión es una operación continua; con lo cual, se puede suponer que el flujo está en estado estacionario. Sin embargo, esta suposición no es suficiente para

simplificar dicha ecuación, por lo que adicionalmente se supone que la densidad es constante. Así, se puede escribir la ecuación de continuidad como:

$$\frac{\partial}{\partial x}v_x + \frac{\partial}{\partial y}v_y + \frac{\partial}{\partial z}v_z = 0$$
 (2.3)

Lo cual quiere decir, que la divergencia de la velocidad es cero. En un sentido físico significa, que el fluido es incompresible; lo que en general ocurre para los materiales termoplásticos fundidos ya que se encuentran en estado liquido.

Si hablamos de placas paralelas infinitas estamos diciendo que se ignoran los efectos de entrada y salida, es decir se ignoran las paredes normales al eje x, además, con esto se fija que el flujo es unidimensional [Figura 7] en la dirección del eje coordenado z así la ecuación 2.3 finalmente queda como:

$$\frac{\partial}{\partial z}v_z = 0 \tag{2.4}$$

Esta ecuación muestra la situación de flujo completamente desarrollado en la que no existen efectos de entrada y de salida en el volumen de control, apoyando la suposición de placas paralelas infinitas.

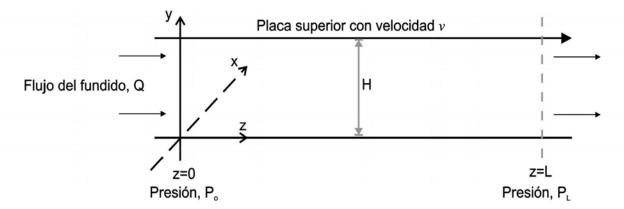


Figura 7. Flujo unidimensional entre placas paralelas.

3. DESARROLLO MATEMÁTICO 3.1 Flujo laminar isotérmico entre placas paralelas

Para iniciar el análisis del modelo se fijan las siguientes suposiciones (S):

- S1. Régimen independiente del tiempo
- S2. Fluido homogéneo seudoplástico
- S3. Fluido incompresible (ej., densidad ρ constante)
- S4. Flujo laminar unidimensional (i.e., $\underline{v} = (0, 0, v_z(y))$)
- S5. Flujo isotérmico
- S6. Flujo completamente desarrollado (i.e., $\partial v_z / \partial z = 0$)
- S7. Placas paralelas infinitas

3.2 Curva de flujo

Tomando la suposición S2 es decir, que el fluido es puramente viscoso y S4 la relación entre el esfuerzo cortante $\tau_{yz} \equiv \tau$ y la velocidad de deformación $\dot{\gamma}_{yz} \equiv \dot{\gamma}$ siguen el comportamiento siguiente:

$$\tau = \eta \dot{\gamma} \tag{3.1}$$

En la cual η representa a la viscosidad no newtoniana.

$$\dot{\gamma} = -\frac{dv}{dy} \tag{3.2}$$

La ecuación 3.2 establece que la velocidad de deformación $\dot{\gamma}$ que es la nomenclatura usual para $d\dot{\gamma}/dt$ o gradiente de velocidad (lado derecho en la identidad 3.2) expresan lo mismo.

La viscosidad no newtoniana del modelo de Williams (Williams, 1966) es:

$$\eta = \frac{a}{\left[1 + \left(b\dot{\gamma}\right)^2\right]^c} \tag{3.3}$$

La curva experimental se ajusta con los parámetros a, b y c. a representa la viscosidad a velocidad de deformación cero o $a = \eta(\dot{\gamma} = 0)$ y depende de la temperatura normalmente de la siguiente forma:

$$a = a_1 \exp\left(-a_2 \frac{T - T_R}{T_R T}\right) \tag{3.4a}$$

b y c de igual manera pueden ser función de la temperatura, sin embargo, algunas veces se comportan como constantes verdaderas. Cuando esto no es posible b y c se ajustan con las siguientes expresiones.

$$b = b_1 + b_2 \left(\frac{T - T_R}{T_R}\right) \tag{3.4b}$$

$$c = c_1 + c_2 \left(\frac{T - T_R}{T_R}\right) \tag{3.4c}$$

Para HDPE y usando el sistema internacional de unidades (SIU), la siguiente tabla contiene los valores de las constantes para r^2 =0.9928, T_R = 170 °C, τ (kPa) \in [0, 10³], $\dot{\gamma}$ (s⁻¹) \in [0, 10⁴] y sus unidades.

a ₁ [kPa]	a ₂ [K]	<i>b</i> ₁ [s]	b ₂ [adim.]	c_I [adim.]	c_2 [adim.]
5.0442	2686.2	0.14094	4.9556	0.28024	0.0

Donde:

 T_R es la temperatura de referencia.

 a_1 es la viscosidad (η_0) .

 a_2 es un parámetro de ajuste asociado a la temperatura del fluido.

 b_1 es un parámetro de ajuste asociado al tiempo.

 b_2 , c_1 y c_2 son parámetros de ajuste adimensionales.

Si se analiza dimensionalmente la ecuación 3.3 se observa que las unidades para los parámetros son, a [=] kPa·s, b [=] s y c [=] adim.

Utilizando la ecuación 3.3 se puede reescribir la ecuación 3.1 como

$$\tau = \frac{a}{\left[1 + \left(b\dot{\gamma}\right)^2\right]^c}\dot{\gamma} \tag{3.5}$$

Usando el sistema de coordenadas usado en la figura 7 el vector aceleración de gravedad es

$$g = (g_x, g_y, g_z) = (0, -g, 0)$$
(3.6)

En la que -g = |g|.

3.3 Perfil de velocidades y gasto volumétrico

Las componentes laminares de momentum (ecuación 2.1) se reducen usando las suposiciones y la ecuación 3.6 a:

Componente x:
$$-\frac{\partial p}{\partial x} = 0$$
 (3.7)

Componente y:
$$-\frac{\partial p}{\partial y} - \rho g = 0$$
 (3.8)

Componente z:
$$-\frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0$$
 (3.9)

En donde p es la presión termodinámica usual. Por otro lado, es imprescindible realizar un análisis más profundo sobre estos componentes para determinar si realmente p(x, y, z). Así, S1 elimina la posibilidad de que p(t).

En primera instancia, la ecuación 3.7 establece de manera explicita que p no depende de la dirección x. Por lo tanto p no sería más que p=f(y,z) por lo cual su descripción solamente podría hacerse en términos de ecuaciones diferenciales parciales, por lo que se supone adicionalmente que la contribución del peso del fluido es despreciable cuando se le compara con los valores usuales de p que se tienen durante el procesamiento de fluidos de alta viscosidad, de tal forma, que la única dependencia importante es p(z). Por lo tanto, concluimos que la ecuaciones 3.7 y 3.8 no son necesarias en este análisis.

El balance de materia (S6) ayuda de manera indirecta a establecer la condición de gasto volumétrico Q independiente de z ya que cuando la distancia H entre las placas depende de z entonces la ecuación 3.9 no es estrictamente valida porque $\partial v_{_{\mathcal{I}}}/\partial z$ no sería cero.

Para continuar podemos reescribir la ecuación 3.9 como:

$$\frac{d\tau}{dy} = -\frac{dp}{dz} \tag{3.10}$$

Si $p \neq p(z)$ entonces el gradiente de presión es constante y la ecuación 3.10 se puede escribir como:

$$\frac{d\tau}{dy} = \frac{\Delta p}{Z} \tag{3.11}$$

En la que se definimos Δp

$$\Delta p = p_O - p_z \tag{3.12}$$

3.11 es una ecuación diferencial ordinaria (EDO) lineal muy simple que esta sujeta a las siguientes condiciones a la frontera (CF):

CF1:
$$V_z(y=0)=0$$
 (3.13)

CF2:
$$V_z(y=H)=V$$
 (3.14)

El primer resultado de la integración de la ecuación 3.11 es:

$$\tau = M_1 + \frac{\Delta p}{Z} y \tag{3.15}$$

En la que la primera constante de integración es M_1 .

Las condiciones de frontera 3.13 y 3.14 no pueden ser usadas en 3.15 para obtener τ ya que están dadas en términos de velocidades locales y no del esfuerzo, por lo que es necesario encontrar el perfil de velocidades general.

Perfil de velocidades entre placas paralelas

La velocidad de deformación $\dot{\gamma}$ para nuestro flujo se sustituye la ecuación 3.15 en la ecuación 3.5 y se obtiene:

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{a} \left(M_1 + \frac{\Delta p}{Z} y \right) \left[1 + \left(b \dot{\gamma} \right)^2 \right]^c \tag{3.16}$$

Sin embargo, se puede notar en la ecuación 3.16 que al contrario de la descripción newtoniana ahora es imposible obtener de manera explicita $\dot{\gamma}$ de la ecuación porque en general el parámetro c no es un número entero. Sustituyendo la ecuación 3.2 en la ecuación 3.16 la situación se complica aun más por lo que se tiene:

$$\frac{dv_z}{dy} = -\frac{1}{a} \left(M_1 + \frac{\Delta p}{Z} y \right) \left\{ 1 + \left(b \frac{dv_z}{dy} \right)^2 \right\}^C$$
 (3.17)

Es decir, en este punto el problema no consiste en hallar las raíces $\dot{\gamma}$ de 3.16 sino integrar la EDO 3.17 que ahora es altamente no lineal.

Prosiguiendo con el análisis se deben definir las siguientes cantidades adimensionales.

$$\xi = \frac{y}{H} \tag{3.18}$$

$$\phi = \frac{v_z}{V} \tag{3.19}$$

Utilizando la regla de la cadena, se obtienen las siguientes derivadas

$$\frac{dv_z}{dy} = \frac{d\xi}{dy} \frac{d\phi}{d\xi} \frac{dv_z}{d\phi} = \frac{V}{H} \frac{d\phi}{d\xi}$$
 (3.20)

$$\frac{d^2v_z}{dy^2} = \frac{d\xi}{dy}\frac{d\phi}{d\xi}\frac{dv_z}{d\phi} = \frac{V}{H^2}\frac{d^2\phi}{d\xi^2}$$
(3.21)

Utilizando las ecuaciones 3.18, 3.19 y 3.20 y sustituyéndolas en la ecuación 3.17 la transforman en:

$$\lambda \phi' + (m + \Gamma \xi) \left[1 + \left(\lambda \phi' \right)^2 \right]^C = 0$$
 (3.22)

En la que $\phi' = d\phi/d\xi$ y por simplicidad, se definen las siguientes cantidades adimensionales:

$$\lambda = b \frac{V}{H} \tag{3.23}$$

$$m = \frac{bM_1}{a} \tag{3.24}$$

$$\Gamma = \frac{bH\Delta p}{aZ} \tag{3.25}$$

El objetivo no se puede lograr a menos que la integración de la ecuación 3.22 se pueda llevar a cabo, en forma analítica en términos de funciones simples (i.e. No series infinitas) o mediante algún método numérico.

A causa del parámetro c la solución analítica no es posible, ya que como se había mencionado ϕ' no puede despejarse. Lo anterior obliga a enfocarnos hacia la solución numérica, dentro de la cual se incluya la manera de obtener el gasto volumétrico Q ya que éste es la cantidad relacionada con la velocidad de producción.

Gasto volumétrico

La definición general de *Q* para este flujo es:

$$Q = \int_{0}^{W} \int_{0}^{H} v_{z}(y) dy dz = W \int_{0}^{H} v_{z}(y) dy$$
 (3.26)

Ya que v_z no depende de z.

La segunda igualdad en la ecuación 3.26 en términos de variables adimensionales es:

$$\psi = \int_{0}^{1} \phi(\xi) d\xi \tag{3.27}$$

En la que se define el gasto volumétrico adimensional ψ como:

$$\psi = \frac{Q}{WVH} \tag{3.28}$$

La ecuación 3.27 nos dice que ψ depende directamente del conocimiento del perfil de velocidades y que de acuerdo a la ecuación 3.22 se sabe que no se puede integrar de forma explícita. Por lo tanto se debe encontrar la manera de poder realizar la integral de manera numérica, tanto de la ecuación 3.22 como de la ecuación 3.27.

3.4 Desarrollo numérico

El primer punto que se debe tocar, es el hecho de que los métodos numéricos de integración, basados en problemas de valor inicial del tipo Runge-Kutta, no sirven ya que el problema que se enfrenta es uno de condiciones a la frontera para los que la aplicación Runge-Kutta no es recomendable porque involucra etapas de iteración que son usualmente difíciles de controlar cuando las EDO son no lineales. (Zienkiewicz et. al. 2000)

De cualquier manera, el entorno numérico se trabaja mejor cuando se parte del problema en forma general; es decir, sin haber obtenido ninguna integral analítica. Lo anterior significa que en lugar de proceder con la ecuación 3.22 se usa su derivada para obtener:

$$\lambda \phi^{"} + \Gamma \left[1 + \left(\lambda \phi^{'} \right)^{2} \right]^{C} + \left(m + \Gamma \xi \right) \left[1 + \left(\lambda \phi^{'} \right)^{2} \right]^{C} \left(2c\lambda^{2} \frac{\phi^{'} \phi^{"}}{1 + \left(\lambda \phi^{'} \right)^{2}} \right) = 0$$
(3.29)

Despejando de la ecuación 3.22 $(m+\Gamma\xi)\left[1+\left(\lambda\phi'\right)^2\right]^C$ e insertando en la ecuación 3.29 se obtiene:

$$\phi' = -\frac{\Gamma}{\lambda} \left[\frac{\left[1 + (\lambda \phi')^2 \right]^{C+1}}{1 + (1 - 2c)(\lambda \phi')^2} \right]$$
(3.30)

La ecuación 3.30 se ajusta a las formas adimensionales de las CF 3.13 y 3.14

CF1:
$$\phi(\xi=0)=0$$
 (3.31)

$$CF2: \quad \phi(\xi=1)=1$$
 (3.32)

Analizando la ecuación 3.30 se nota que no depende de la primera constante de integración.

Con el objetivo de integrar 3.30-3.32 utilizamos el método de residuos ponderados desarrollado por Galerkin. Este consiste en suponer la solución de 3.30 mediante, por ejemplo, una función polinomial de grado M como:

$$\phi = c_0 + c_1 \xi + c_2 \xi^2 + c_3 \xi^3 + \dots + c_M \xi^M$$
 (3.33)

Ya que la ecuación 3.33 es solución de las ecuaciones 3.30-3.32 entonces al usar las ecuaciones 3.31 y 3.32 en la ecuación 3.33 se obtiene c_0 y c_1 como:

$$c_0 = 0$$
 (3.34)

$$c_1 = 1 - c_2 - c_3 - \dots - c_M \xi^M$$
 (3.35)

Insertando las ecuaciones 3.34 y 3.35 en la ecuación 3.33 se transforma en:

$$\phi = \xi + \sum_{i=2}^{M} c_i \left(\xi^i - \xi \right)$$
 (3.36)

La ecuación 3.36 se usa ahora para obtener las siguientes derivadas:

$$\phi' = 1 + \sum_{i=0}^{M} c_i \left(i \xi^{i-1} - 1 \right)$$
 (3.37)

$$\phi^{"} = \sum_{i=2}^{M} i(i-1)c_i \xi^{i-2}$$
(3.38)

La ecuación 3.37 es la expresión que debemos sustituir en el lado derecho de la ecuación 3.30, que por simplicidad de escritura se quedara solamente indicada.

El siguiente paso es definir el llamado residuo \Re y que depende del jésimo coeficiente para las ecuaciones 3.37 y 3.38

$$\Re_{j} = \phi_{j}^{"} + \frac{\Gamma}{\lambda} \left[\frac{\left[1 + (\lambda \phi^{'})^{2} \right]^{c+1}}{1 + (1 - 2c)(\lambda \phi^{'})^{2}} \right]_{j}, \quad j = 2, ..., M$$
(3.39)

Estos residuos se ponderan mediante estos jésimos pesos W_i

$$W_{j} = \frac{\partial \phi}{\partial c_{j}} = \xi^{j} - \xi \quad , \quad j = 2, ..., M$$
(3.40)

Finalmente el método hace uso de la siguiente condición de ortogonalidad, a partir de la cual se obtienen los M-1 coeficientes desconocidos y que remplazan la solución verdadera de la ecuación 3.30

$$\int_{0}^{1} \Re_{j} W_{j} d\xi = 0 \quad , \quad j = 2, ..., M$$
 (3.41)

La técnica anterior permite realizar la integración de la EDO no lineal pero no dice nada acerca de ψ . En este sentido, la ecuación 3.36 la insertamos en la ecuación 3.27 y realizando las integraciones requeridas se transforma en:

$$\psi = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{M} c_i \left(\frac{1-i}{1+i} \right)$$
 (3.42)

El problema, expresado en la ecuación 3.30, original ha sido remplazado por la solución simultánea del sistema de ecuaciones 3.41 cuyas raíces proporcionan las cantidades buscadas.

3.5 Métodos numéricos

El método de residuos ponderados de Galerkin permitió convertir el problema de resolver las ecuaciones 3.30-3.32 a un sistema de ecuaciones no lineales integrales definidas en la ecuación 3.41. Ahora resta por presentar, el modo por el cual se resuelven los c_M coeficientes desconocidos que proporcionan la solución del sistema de ecuaciones, así como, el modo en que se realizará la integración de las ecuaciones. Suena bastante complicado, sin embargo no lo es, utilizando las rutinas numéricas adecuadas.

El problema debe ser escrito en el entorno computacional en el cual no se manejan variables u operaciones de manera simbólica; sino únicamente se pueden realizar de manera numérica o algebraica, por lo tanto, la integración se realiza con el método de cuadratura de Gauss-Legendre. De acuerdo con la fórmula de integración de Gauss-Legendre⁴, las ecuaciones 3.41-3.41 se escriben de la siguiente forma:

$$\int_{0}^{1} \mathfrak{R}_{j} W_{j} d\xi = \frac{\beta - \alpha}{2} \sum_{i=1}^{NGL} w_{i} \cdot \mathfrak{R}_{j} \left(\frac{z_{i}(\beta - \alpha) + \beta + \alpha}{2} \right) \cdot W_{j} \left(\frac{z_{i}(\beta - \alpha) + \beta + \alpha}{2} \right)$$
(3.43)

Donde w_i y z_i son los pesos y raíces de la cuadratura de Gauss-Legendre respectivamente, α y β representan los límites de integración y NGL es el número de pesos de aproximación a utilizar.

Con este método de cuadratura se han transformado las ecuaciones integrales no lineales a un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales, en el cual la variable de integración (ξ) se ha eliminado.

Para el método de solución final del sistema de ecuaciones algebraicas no lineales se utiliza el método propuesto por Marquardt, el cual nos da los valores para los coeficientes c_M del polinomio de aproximación, que satisface el sistema de ecuaciones (3.43). De este modo, ya que se han satisfecho las ecuaciones no lineales, se puede obtener finalmente el gasto volumétrico y el perfil de velocidades.

Haciendo un análisis de las incógnitas contenidas entre 3.41 y 3.42 se tiene λ , Γ , ψ , c_2 ,..., c_M en otras palabras, 3+M-1=M+2 variables. Las ecuaciones generales 3.41 y 3.42 corresponden a 1+M-1=M. El número de grados de libertad ν es por lo tanto $\nu=M+2-M=2$.

Esto quiere decir que se pueden fijar λ y Γ para obtener ψ y los coeficientes, o fijar λ y ψ para calcular los coeficientes y obtener Γ .

Los dos tipos de cálculo quedan de la siguiente manera (Ver apéndice A1).

Cálculo Tipo I

- 1. Se fijan λ y Γ para obtener ψ
- 2. Obtener el valor de los coeficientes
- Evaluar el sistema de ecuaciones
- 4. Realizar la integración con el método de Gauss-Legendre
- 5. Calcular ψ
- 6. Fin

Cálculo Tipo II

- 1. Se fijan λ y ψ para obtener Γ
- 2. Suponer el valor inicial de Γ_i
- 3. Obtener el valor de los coeficientes

- 4. Evaluar el sistema de ecuaciones
- 5. Ecuación adicional $\psi_0 \psi_{calc} = 0$
- 6. Realizar la integración con el método de Gauss-Legendre
- 7. Calcular Γ
- 8. Fin

En el cálculo tipo I ya que se han obtenido los coeficientes c_M , y por lo tanto se resuelven las ecuaciones no lineales, se puede obtener el gasto volumétrico y el perfil de velocidades puede ser evaluado.

Para el cálculo tipo II, es necesario agregar una ecuación adicional: $\psi_0 - \psi_{calc} = 0$ así los coeficientes c_M resuelven las ecuaciones no lineales, además de la ecuación de gasto volumétrico (ψ).

3.6 Intervalos de perfiles de velocidad

La ecuación 3.27 muestra que el perfil de velocidad determina el gasto volumétrico final, así el gasto dependerá de la distribución de velocidades para una misma velocidad de placa. Con lo cual, es posible cuantificar el gasto volumétrico y se determinen las condiciones de operación.

En este desarrollo los perfiles de velocidad obtenidos dependerán altamente de la presión de trabajo, y a su vez, de esto depende el gasto volumétrico final por lo tanto, es de gran importancia conocer el intervalo en el que se presentan los perfiles de velocidad. Así podemos dividir los diferentes tipos de perfiles de velocidad en: (1) Perfil de velocidad simple tipo I (PVS 1), (2) Perfil de velocidad simple tipo II (PVS 2), (3) Perfil de velocidad por arrastre (PVA), (4) Perfil de velocidad por contra flujo (PVF), (5) Perfil de velocidad de flujo por presión (PVP).

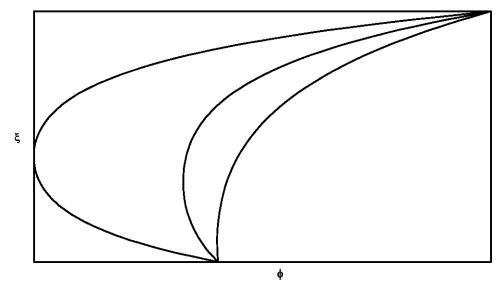
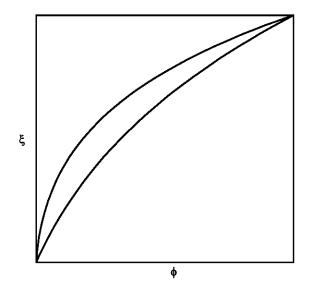


Figura 8. Perfiles de velocidad contraflujo, $\Delta p \ll 0$.



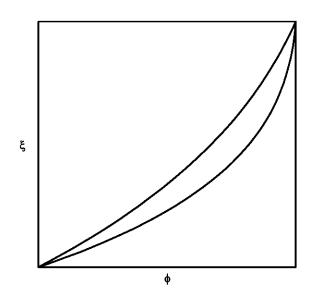
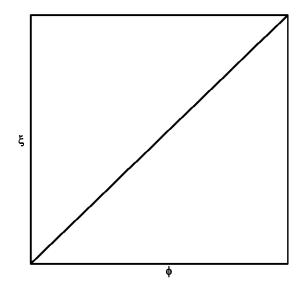
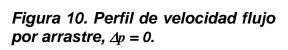


Figura 9. Perfiles de velocidad simple 1, $\Delta p < 0$.

Figura 11. Perfiles de velocidad simple 2, $\Delta p > 0$.





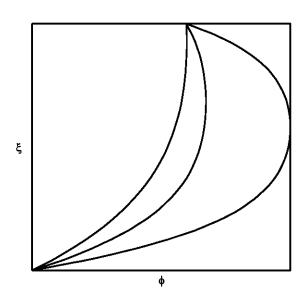


Figura 12. Perfiles de velocidad flujo por presión, $\Delta p >>> 0$.

Como se observa en las diferentes gráficas, existe una correspondencia entre la distribución de presiones y los diferentes perfiles de velocidad para una velocidad de placa específica, como se dijo anteriormente los perfiles de velocidad dependen enormemente del gradiente de presión.

A continuación se presenta un pequeño resumen de los diferentes perfiles de velocidad que se pueden encontrar.

Tabla 2. Resumen intervalo de perfiles de velocidad.

Tipo de perfil	Rango de presión	No. Figura
PVF	∆p <<< 0	8
PVS 1	$\Delta p < 0$	9
PVA	$\Delta p = 0$	10
PVS 2	$\Delta p > 0$	11
PVP	$\Delta p >>> 0$	12

4. RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos a través de la simulación por computadora. La programación y ejecución de los algoritmos se realizaron en lenguaje FORTRAN, estos se encuentran en el apéndice A1 y los programas de cálculo y la rutina BSOLVE se encuentran en el apéndice A2. Para realizar la simulación se utilizaron los parámetros para HDPE a 180 $^{\circ}$ C listados en la tabla 3, en este caso los parámetros a, b y c de la curva de flujo de Williams (Ec. 3.3) se comportan como constantes verdaderas a la temperatura dada.

Tabla 3. Parámetros para la simulación. 10

Parámetros para la curva de flujo de Williams.					
Temp. <i>[⁰C]</i>	a [kPa⋅s]	<i>b</i> [s]	c [adim.]		
180	4.41264	0.12676	0.28024		
	Parámetros del extrusor.				
Ancho (W) [m]	Profundidad (<i>H</i>) [m]	Longitud (<i>L</i>) [m]	Velocidad de rotación (<i>V</i>) [<i>m</i> ⋅s ⁻¹]		
0.12	0.01	1.00	0.01		
Propiedades del polímero fundido (HDPE).					
Temp. Fusión Densidad [ºC] [kg·m⁻³]			_		
130		777			

Curva de flujo.*

Se muestran las distintas curvas de flujo (ψ vs. Γ) para distintos valores de λ , figura 13.

Efecto de la presión en el gasto volumétrico a velocidad de placa constante.

En este punto se muestran las gráficas obtenidas para mostrar el efecto de la presión sobre el gasto volumétrico, con los perfiles de velocidad para distintos valores de λ y Γ , figuras 14-19.

Viscosidad y esfuerzo cortante.

Se presentan las gráficas de viscosidad contra rapidez de deformación y del esfuerzo cortante contra la rapidez de deformación, figuras 20 y 21 respectivamente.

^{*} Los resultados se presentan tanto de manera adimensional como con su respectivas dimensiones, de este modo, las tablas (A) corresponden al primer caso y las tablas (B) al segundo.

Tabla 4A. Curva de flujo.

λ	1.0	2.0	3.0
		г-	
Ψ	2 20020	Γ	F 00000
0.0	-3.26820	-4.54998	-5.36030
0.1	-2.74524	-3.86524	-4.62860
0.2	-2.12051	-2.85491	-3.46310
0.3	-1.42868	-1.83268	-2.08170
0.4	-0.71044	-0.86334	-0.95910
0.5	0.00108	0.00137	0.00040
0.6	0.71322	0.87187	0.96187
0.7	1.43156	1.84187	2.08810
8.0	2.13069	2.92187	3.46380
0.9	2.75342	3.87653	4.62910
1.0	3.26825	4.54998	5.36030
λ	5.0	8.0	13.0
Ψ		Γ	
0.0	-6.44467	-7.64125	-9.26568
0.1	-5.65810	-6.70850	-8.01390
0.2	-4.28620	-5.22960	-6.44010
0.3	-2.47620	-2.94810	-3.58300
0.4	-1.13570	-1.36240	-1.66810
0.5	0.00040	0.00040	0.00040
0.6	1.13680	1.36410	1.66840
0.7	2.47680	2.94820	3.58350
8.0	4.28870	5.23240	6.45400
0.9	5.65810	6.70870	8.01450
1.0	6.44468	7.64125	9.26568

Tabla 4B. Curva de flujo.

ν [m⋅s ⁻¹]		0.03471	0.06942	0.10413
$rac{Q}{\left[m^{ ext{-}3}\cdots ight]}$	G		Др	
	[Kg·h ⁻¹]		[kPa]	
0.0000E+00			-15838.9269	-18659.7303
1.2000E-06			-13455.2797	-16112.6108
2.4000E-06		-7381.7034	-9938.2218	-12055.3909
3.6000E-06	5 10.06992	2 -4973.3752	-6379.7389	-7246.6019
4.8000E-06	3.42656	6 -2473.1113	-3005.3712	-3338.7212
6.0000E-06	6 16.78320	3.7595	4.7691	1.3924
7.2000E-06	5 20.13984	4 2482.7888	3035.0650	3348.3638
8.4000E-06	33.49648	3 4983.4008	6411.7302	7268.8810
9.6000E-06	26.85312	2 7417.1409	10171.3162	12057.8277
1.0800E-05	30.20976	9584.9252	13494.5813	16114.3513
1.2000E-05	33.56640	11377.0989	15838.9269	18659.7303
ν [m ⋅s	- ¹ 1	0.17356	0.27769	0.45125
-	G G		Др	
$[m^{-3}\cdots]$	[Kg·h ⁻¹]		[kPa]	
0.0000E+00	0.00000	-22434.52874	-26599.94115	-32254.74140
1.2000E-06	3.35664	-19696.40138	-23352.94686	-27897.17237
2.4000E-06	6.71328	-14920.68284	-18204.75082	-22418.62012
3.6000E-06	10.06992	-8619.89521	-10262.62542	-12472.77463
4.8000E-06	13.42656	-3953.48316	-4742.64810	-5806.81980
6.0000E-06	16.78320	1.39244	1.39244	1.39244
7.2000E-06	20.13984	3957.31236	4748.56597	5807.86413
8.4000E-06	23.49648	8621.98387	10262.97353	12474.51518
9.6000E-06	26.85312	14929.38559	18214.49790	22467.00738
1.0800E-05	30.20976	19696.40138	23353.64308	27899.26103
1.2000E-05	33.56640	22434.56355	26599.94115	32254.74140

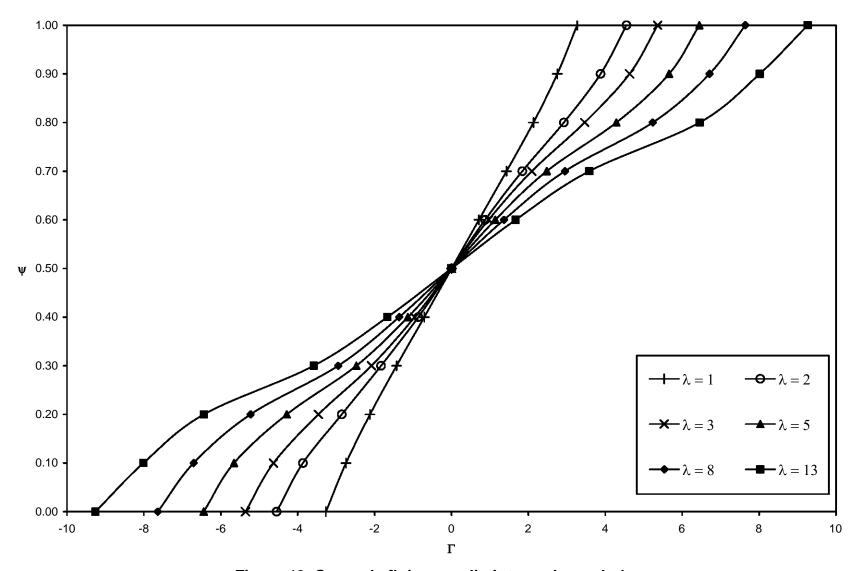


Figura 13. Curva de flujo para distintos valores de λ .

Tabla 5A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 1.

$\lambda = 1.0$							
Γ	-3.26820	-2.00000	-0.50000	0.00000	0.50000	2.00000	3.26825
ξ				ф			
0.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.05	-0.07406	-0.01492	0.03154	0.04998	0.07179	0.15787	0.25875
0.10	-0.13135	-0.02427	0.06473	0.09997	0.14087	0.29661	0.47399
0.15	-0.17460	-0.02838	0.09962	0.14997	0.20733	0.41805	0.65141
0.20	-0.20602	-0.02746	0.13624	0.19997	0.27124	0.52391	0.79622
0.25	-0.22737	-0.02158	0.17464	0.24998	0.33267	0.61577	0.91310
0.30	-0.23986	-0.01069	0.21486	0.30000	0.39169	0.69508	1.00628
0.35	-0.24424	0.00538	0.25694	0.35001	0.44838	0.76318	1.07946
0.40	-0.24077	0.02694	0.30095	0.40002	0.50281	0.82127	1.13587
0.45	-0.22918	0.05443	0.34692	0.45003	0.55503	0.87042	1.17822
0.50	-0.20874	0.08841	0.39491	0.50003	0.60510	0.91158	1.20875
0.55	-0.17821	0.12957	0.44499	0.55003	0.65309	0.94556	1.22919
0.60	-0.13586	0.17872	0.49720	0.60003	0.69906	0.97305	1.24078
0.65	-0.07945	0.23681	0.55162	0.65002	0.74306	0.99462	1.24426
0.70	-0.00627	0.30491	0.60831	0.70001	0.78514	1.01070	1.23987
0.75	0.08691	0.38423	0.66733	0.75000	0.82536	1.02159	1.22738
0.80	0.20380	0.47609	0.72876	0.79999	0.86375	1.02747	1.20603
0.85	0.34860	0.58195	0.79266	0.84998	0.90037	1.02839	1.17460
0.90	0.52602	0.70339	0.85912	0.89998	0.93526	1.02428	1.13136
0.95	0.74125	0.84213	0.92820	0.94998	0.96845	1.01493	1.07406
1.00	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
Ψ	0.00001	0.21851	0.42980	0.50000	0.57020	0.78149	1.00000

Tabla 5B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 1.

v = 0.07889 $[m \cdot s^{-1}]$

[m·s]									
∆p [kPa]	-11376.92494	-6962.19628	-1740.54907	0.00000	1740.54907	6962.19628	11377.09899		
У				V_z					
[m]				[m·s ⁻¹]					
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
0.00050	-0.00074	-0.00015	0.00032	0.00050	0.00072	0.00158	0.00259		
0.00100	-0.00131	-0.00024	0.00065	0.00100	0.00141	0.00297	0.00474		
0.00150	-0.00175	-0.00028	0.00100	0.00150	0.00207	0.00418	0.00651		
0.00200	-0.00206	-0.00027	0.00136	0.00200	0.00271	0.00524	0.00796		
0.00250	-0.00227	-0.00022	0.00175	0.00250	0.00333	0.00616	0.00913		
0.00300	-0.00240	-0.00011	0.00215	0.00300	0.00392	0.00695	0.01006		
0.00350	-0.00244	0.00005	0.00257	0.00350	0.00448	0.00763	0.01079		
0.00400	-0.00241	0.00027	0.00301	0.00400	0.00503	0.00821	0.01136		
0.00450	-0.00229	0.00054	0.00347	0.00450	0.00555	0.00870	0.01178		
0.00500	-0.00209	0.00088	0.00395	0.00500	0.00605	0.00912	0.01209		
0.00550	-0.00178	0.00130	0.00445	0.00550	0.00653	0.00946	0.01229		
0.00600	-0.00136	0.00179	0.00497	0.00600	0.00699	0.00973	0.01241		
0.00650	-0.00079	0.00237	0.00552	0.00650	0.00743	0.00995	0.01244		
0.00700	-0.00006	0.00305	0.00608	0.00700	0.00785	0.01011	0.01240		
0.00750	0.00087	0.00384	0.00667	0.00750	0.00825	0.01022	0.01227		
0.00800	0.00204	0.00476	0.00729	0.00800	0.00864	0.01027	0.01206		
0.00850	0.00349	0.00582	0.00793	0.00850	0.00900	0.01028	0.01175		
0.00900	0.00526	0.00703	0.00859	0.00900	0.00935	0.01024	0.01131		
0.00950	0.00741	0.00842	0.00928	0.00950	0.00968	0.01015	0.01074		
0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000		
G [Kg⋅h⁻¹]	0.00021	7.33453	14.42684	16.78317	19.13956	26.23187	33.56640		

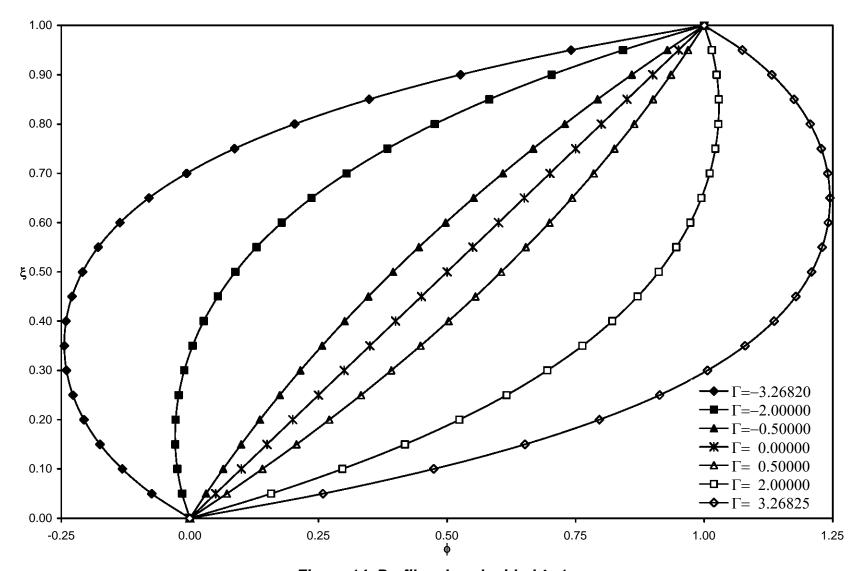


Figura 14. Perfiles de velocidad λ =1.

Tabla 6A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 2.

			λ =	= 2.0			
Γ	-4.54998	-2.00000	-0.50000	0.00000	0.50000	2.00000	4.54998
ξ				ф			
0.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.05	-0.07066	0.00421	0.03456	0.04998	0.06817	0.13222	0.27278
0.10	-0.12394	0.01079	0.07049	0.09997	0.13411	0.25056	0.49593
0.15	-0.16318	0.01992	0.10782	0.14997	0.19790	0.35614	0.67638
0.20	-0.19113	0.03182	0.14659	0.19997	0.25956	0.44998	0.82047
0.25	-0.20994	0.04679	0.18684	0.24998	0.31917	0.53309	0.93392
0.30	-0.22114	0.06517	0.22862	0.30000	0.37678	0.60641	1.02184
0.35	-0.22568	0.08735	0.27197	0.35001	0.43243	0.67081	1.08877
0.40	-0.22387	0.11377	0.31694	0.40002	0.48617	0.72713	1.13859
0.45	-0.21543	0.14495	0.36356	0.45003	0.53806	0.77613	1.17463
0.50	-0.19949	0.18145	0.41189	0.50003	0.58814	0.81855	1.19957
0.55	-0.17455	0.22386	0.46197	0.55003	0.63646	0.85504	1.21551
0.60	-0.13852	0.27287	0.51386	0.60003	0.68308	0.88623	1.22395
0.65	-0.08871	0.32919	0.56759	0.65002	0.72803	0.91266	1.22576
0.70	-0.02180	0.39359	0.62323	0.70001	0.77137	0.93483	1.22122
0.75	0.06612	0.46691	0.68082	0.75000	0.81314	0.95321	1.21000
0.80	0.17955	0.55002	0.74043	0.79999	0.85339	0.96818	1.19118
0.85	0.32363	0.64387	0.80209	0.84998	0.89215	0.98009	1.16322
0.90	0.50408	0.74944	0.86587	0.89998	0.92948	0.98921	1.12396
0.95	0.72722	0.86778	0.93182	0.94998	0.96542	0.99579	1.07068
1.00	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
-							
Ψ	0.00004	0.28462	0.44120	0.50000	0.55880	0.71538	1.00000

Tabla 6B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 2.

v = 0.15778 $[m \cdot s^{-1}]$

Įms j									
∆p [kPa]	-15838.92691	-6962.19628	-1740.54907	0.00000	1740.54907	6962.19628	15838.92691		
у [m]				v _z [m⋅s ⁻¹]					
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
0.00050	-0.00071	0.00004	0.00035	0.00050	0.00068	0.00132	0.00273		
0.00100	-0.00124	0.00011	0.00070	0.00100	0.00134	0.00251	0.00496		
0.00150	-0.00163	0.00020	0.00108	0.00150	0.00198	0.00356	0.00676		
0.00200	-0.00191	0.00032	0.00147	0.00200	0.00260	0.00450	0.00820		
0.00250	-0.00210	0.00047	0.00187	0.00250	0.00319	0.00533	0.00934		
0.00300	-0.00221	0.00065	0.00229	0.00300	0.00377	0.00606	0.01022		
0.00350	-0.00226	0.00087	0.00272	0.00350	0.00432	0.00671	0.01089		
0.00400	-0.00224	0.00114	0.00317	0.00400	0.00486	0.00727	0.01139		
0.00450	-0.00215	0.00145	0.00364	0.00450	0.00538	0.00776	0.01175		
0.00500	-0.00199	0.00181	0.00412	0.00500	0.00588	0.00819	0.01200		
0.00550	-0.00175	0.00224	0.00462	0.00550	0.00636	0.00855	0.01216		
0.00600	-0.00139	0.00273	0.00514	0.00600	0.00683	0.00886	0.01224		
0.00650	-0.00089	0.00329	0.00568	0.00650	0.00728	0.00913	0.01226		
0.00700	-0.00022	0.00394	0.00623	0.00700	0.00771	0.00935	0.01221		
0.00750	0.00066	0.00467	0.00681	0.00750	0.00813	0.00953	0.01210		
0.00800	0.00180	0.00550	0.00740	0.00800	0.00853	0.00968	0.01191		
0.00850	0.00324	0.00644	0.00802	0.00850	0.00892	0.00980	0.01163		
0.00900	0.00504	0.00749	0.00866	0.00900	0.00929	0.00989	0.01124		
0.00950	0.00727	0.00868	0.00932	0.00950	0.00965	0.00996	0.01071		
0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000		
<i>G</i> [Kg ⋅h ⁻¹]	0.00145	9.55364	14.80953	16.78317	18.75680	24.01280	33.56640		

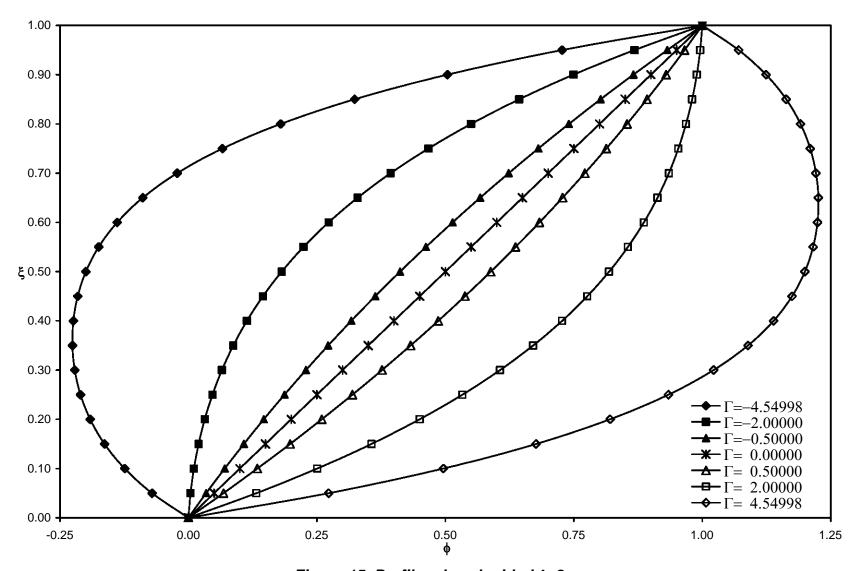


Figura 15. Perfiles de velocidad λ =2.

Tabla 7A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 3.

			λ =	= 3.0			
Γ	-5.36030	-2.00000	-0.50000	0.00000	0.50000	2.00000	5.36030
ξ				ф			
0.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.05	-0.07042	0.00876	0.03589	0.04998	0.06616	0.12100	0.27439
0.10	-0.12332	0.01931	0.07306	0.09997	0.13039	0.23080	0.49843
0.15	-0.16214	0.03199	0.11154	0.14997	0.19274	0.33013	0.67919
0.20	-0.18969	0.04714	0.15137	0.19997	0.25324	0.41968	0.82316
0.25	-0.20817	0.06513	0.19258	0.24998	0.31193	0.50012	0.93618
0.30	-0.21918	0.08637	0.23520	0.30000	0.36885	0.57210	1.02347
0.35	-0.22367	0.11126	0.27926	0.35001	0.42404	0.63625	1.08966
0.40	-0.22199	0.14025	0.32481	0.40002	0.47752	0.69316	1.13873
0.45	-0.21386	0.17381	0.37187	0.45003	0.52935	0.74342	1.17406
0.50	-0.19838	0.21241	0.42048	0.50003	0.57954	0.78759	1.19839
0.55	-0.17405	0.25658	0.47068	0.55003	0.62815	0.82620	1.21387
0.60	-0.13872	0.30684	0.52250	0.60003	0.67521	0.85975	1.22200
0.65	-0.08965	0.36375	0.57598	0.65002	0.72074	0.88874	1.22368
0.70	-0.02347	0.42790	0.63116	0.70001	0.76480	0.91363	1.21919
0.75	0.06383	0.49988	0.68807	0.75000	0.80741	0.93486	1.20818
0.80	0.17684	0.58032	0.74675	0.79999	0.84861	0.95286	1.18969
0.85	0.32081	0.66986	0.80725	0.84998	0.88843	0.96801	1.16214
0.90	0.50158	0.76919	0.86959	0.89998	0.92691	0.98068	1.12333
0.95	0.72561	0.87900	0.93383	0.94998	0.96409	0.99124	1.07043
1.00	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
Ψ	0.00000	0.30699	0.44696	0.50000	0.55304	0.69301	1.00000

Tabla 7B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 3.

v = 0.23667 [m·s⁻¹]

[m·s]										
∆p [kPa]	-18659.73035	-6962.19628	-1740.54907	0.00000	1740.54907	6962.19628	18659.73035			
у [m]				v _z [m⋅s ⁻¹]						
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000			
0.00050	-0.00070	0.00009	0.00036	0.00050	0.00066	0.00121	0.00274			
0.00100	-0.00123	0.00019	0.00073	0.00100	0.00130	0.00231	0.00498			
0.00150	-0.00162	0.00032	0.00112	0.00150	0.00193	0.00330	0.00679			
0.00200	-0.00190	0.00047	0.00151	0.00200	0.00253	0.00420	0.00823			
0.00250	-0.00208	0.00065	0.00193	0.00250	0.00312	0.00500	0.00936			
0.00300	-0.00219	0.00086	0.00235	0.00300	0.00369	0.00572	0.01023			
0.00350	-0.00224	0.00111	0.00279	0.00350	0.00424	0.00636	0.01090			
0.00400	-0.00222	0.00140	0.00325	0.00400	0.00478	0.00693	0.01139			
0.00450	-0.00214	0.00174	0.00372	0.00450	0.00529	0.00743	0.01174			
0.00500	-0.00198	0.00212	0.00420	0.00500	0.00580	0.00788	0.01198			
0.00550	-0.00174	0.00257	0.00471	0.00550	0.00628	0.00826	0.01214			
0.00600	-0.00139	0.00307	0.00523	0.00600	0.00675	0.00860	0.01222			
0.00650	-0.00090	0.00364	0.00576	0.00650	0.00721	0.00889	0.01224			
0.00700	-0.00023	0.00428	0.00631	0.00700	0.00765	0.00914	0.01219			
0.00750	0.00064	0.00500	0.00688	0.00750	0.00807	0.00935	0.01208			
0.00800	0.00177	0.00580	0.00747	0.00800	0.00849	0.00953	0.01190			
0.00850	0.00321	0.00670	0.00807	0.00850	0.00888	0.00968	0.01162			
0.00900	0.00502	0.00769	0.00870	0.00900	0.00927	0.00981	0.01123			
0.00950	0.00726	0.00879	0.00934	0.00950	0.00964	0.00991	0.01070			
0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000			
G [Kg·h⁻¹]	0.00015	10.30462	15.00280	16.78317	18.56353	23.26175	33.56640			

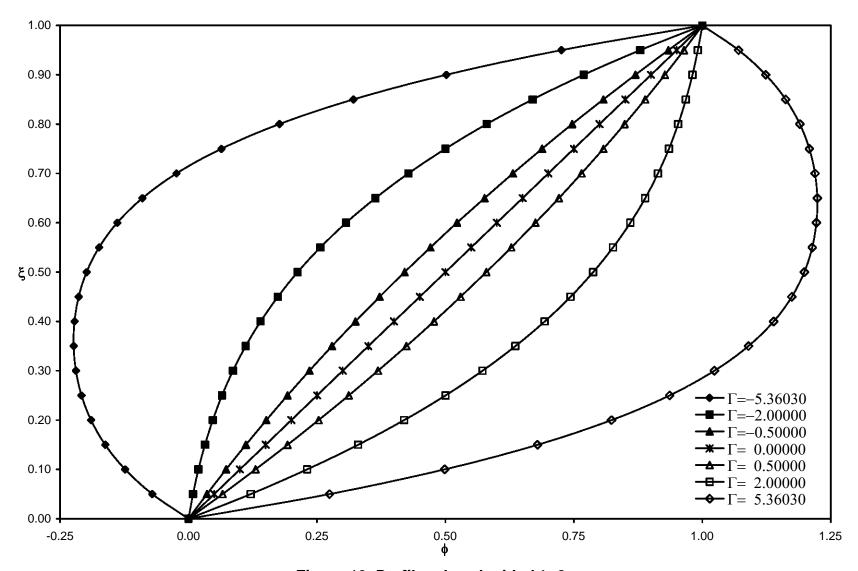


Figura 16. Perfiles de velocidad λ =3.

Tabla 8A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 5.

	$\lambda = 5.0$								
Γ	-6.44467	-2.00000	-0.50000	0.00000	0.50000	2.00000	6.44468		
ξ				ф					
0.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
0.05	-0.07108	0.01221	0.03786	0.04998	0.06343	0.10820	0.27128		
0.10	-0.12482	0.02638	0.07686	0.09997	0.12531	0.20800	0.49357		
0.15	-0.16451	0.04282	0.11704	0.14997	0.18567	0.29979	0.67369		
0.20	-0.19284	0.06186	0.15840	0.19997	0.24451	0.38399	0.81784		
0.25	-0.21191	0.08382	0.20098	0.24998	0.30187	0.46096	0.93164		
0.30	-0.22325	0.10902	0.24479	0.30000	0.35778	0.53111	1.02013		
0.35	-0.22775	0.13781	0.28985	0.35001	0.41224	0.59480	1.08771		
0.40	-0.22574	0.17052	0.33618	0.40002	0.46530	0.65242	1.13825		
0.45	-0.21695	0.20750	0.38382	0.45003	0.51696	0.70434	1.17496		
0.50	-0.20051	0.24910	0.43277	0.50003	0.56725	0.75092	1.20052		
0.55	-0.17496	0.29568	0.48306	0.55003	0.61620	0.79251	1.21696		
0.60	-0.13824	0.34759	0.53472	0.60003	0.66383	0.82949	1.22575		
0.65	-0.08771	0.40521	0.58777	0.65002	0.71016	0.86220	1.22775		
0.70	-0.02012	0.46889	0.64223	0.70001	0.75521	0.89098	1.22325		
0.75	0.06836	0.53903	0.69813	0.75000	0.79901	0.91617	1.21192		
0.80	0.18216	0.61600	0.75548	0.79999	0.84158	0.93812	1.19284		
0.85	0.32631	0.70019	0.81432	0.84998	0.88294	0.95715	1.16451		
0.90	0.50643	0.79198	0.87467	0.89998	0.92311	0.97360	1.12482		
0.95	0.72872	0.89179	0.93656	0.94998	0.96213	0.98777	1.07108		
1.00	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000		
Ψ	0.00000	0.33245	0.45516	0.50000	0.54484	0.66755	1.00000		

Tabla 8B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 5.

v = 0.39445 [m·s⁻¹]

			Įm∙s	s]			
∆p [kPa]	-22434.52874	-6962.19628	-1740.54907	0.00000	1740.54907	6962.19628	22434.56355
у [m]				v _z [m·s ⁻¹]			
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00050	-0.00071	0.00012	0.00038	0.00050	0.00063	0.00108	0.00271
0.00100	-0.00125	0.00026	0.00077	0.00100	0.00125	0.00208	0.00494
0.00150	-0.00165	0.00043	0.00117	0.00150	0.00186	0.00300	0.00674
0.00200	-0.00193	0.00062	0.00158	0.00200	0.00245	0.00384	0.00818
0.00250	-0.00212	0.00084	0.00201	0.00250	0.00302	0.00461	0.00932
0.00300	-0.00223	0.00109	0.00245	0.00300	0.00358	0.00531	0.01020
0.00350	-0.00228	0.00138	0.00290	0.00350	0.00412	0.00595	0.01088
0.00400	-0.00226	0.00171	0.00336	0.00400	0.00465	0.00652	0.01138
0.00450	-0.00217	0.00208	0.00384	0.00450	0.00517	0.00704	0.01175
0.00500	-0.00201	0.00249	0.00433	0.00500	0.00567	0.00751	0.01201
0.00550	-0.00175	0.00296	0.00483	0.00550	0.00616	0.00793	0.01217
0.00600	-0.00138	0.00348	0.00535	0.00600	0.00664	0.00829	0.01226
0.00650	-0.00088	0.00405	0.00588	0.00650	0.00710	0.00862	0.01228
0.00700	-0.00020	0.00469	0.00642	0.00700	0.00755	0.00891	0.01223
0.00750	0.00068	0.00539	0.00698	0.00750	0.00799	0.00916	0.01212
0.00800	0.00182	0.00616	0.00755	0.00800	0.00842	0.00938	0.01193
0.00850	0.00326	0.00700	0.00814	0.00850	0.00883	0.00957	0.01165
0.00900	0.00506	0.00792	0.00875	0.00900	0.00923	0.00974	0.01125
0.00950	0.00729	0.00892	0.00937	0.00950	0.00962	0.00988	0.01071
0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000
<i>G</i> [Kg ·h ⁻¹]	0.00005	13.01897	17.82455	19.58036	21.33621	26.14171	39.16080

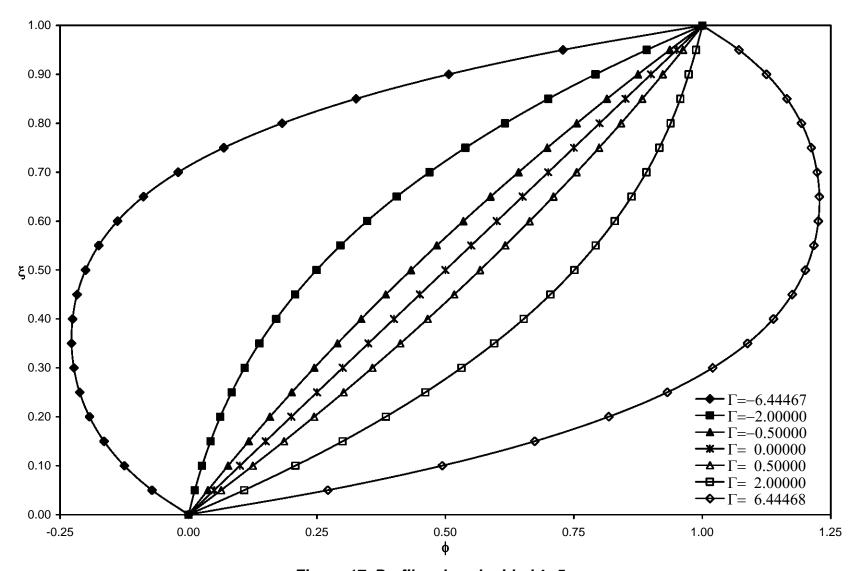


Figura 17. Perfiles de velocidad λ =5.

Tabla 9A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 8.

$\lambda = 8.0$								
Γ	-7.64125	-2.00000	-0.50000	0.00000	0.50000	2.00000	7.64125	
ξ				ф				
0.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	
0.05	-0.07185	0.01581	0.03977	0.04998	0.06107	0.09765	0.26728	
0.10	-0.12663	0.03386	0.08053	0.09997	0.12088	0.18883	0.48735	
0.15	-0.16742	0.05435	0.12230	0.14997	0.17945	0.27378	0.66665	
0.20	-0.19676	0.07751	0.16509	0.19997	0.23680	0.35274	0.81106	
0.25	-0.21662	0.10357	0.20891	0.24998	0.29294	0.42598	0.92590	
0.30	-0.22840	0.13275	0.25378	0.30000	0.34788	0.49373	1.01591	
0.35	-0.23295	0.16528	0.29971	0.35001	0.40164	0.55625	1.08530	
0.40	-0.23056	0.20138	0.34672	0.40002	0.45424	0.61376	1.13771	
0.45	-0.22095	0.24130	0.39481	0.45003	0.50569	0.66652	1.17620	
0.50	-0.20329	0.28526	0.44401	0.50003	0.55601	0.71476	1.20330	
0.55	-0.17620	0.33350	0.49433	0.55003	0.60520	0.75871	1.22096	
0.60	-0.13770	0.38625	0.54577	0.60003	0.65329	0.79863	1.23056	
0.65	-0.08530	0.44376	0.59837	0.65002	0.70029	0.83473	1.23296	
0.70	-0.01591	0.50627	0.65213	0.70001	0.74622	0.86725	1.22841	
0.75	0.07411	0.57401	0.70706	0.75000	0.79108	0.89643	1.21663	
0.80	0.18894	0.64725	0.76320	0.79999	0.83489	0.92248	1.19677	
0.85	0.33335	0.72621	0.82054	0.84998	0.87768	0.94564	1.16743	
0.90	0.51265	0.81116	0.87911	0.89998	0.91945	0.96613	1.12663	
0.95	0.73272	0.90234	0.93892	0.94998	0.96022	0.98418	1.07185	
1.00	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	
Ψ	0.00000	0.35673	0.46266	0.50000	0.53734	0.64327	1.00000	

Tabla 9B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 8.

v = 0.63111 $[m \cdot s^{-1}]$

			Liiis	>			
∆p [kPa]	-26599.94115	-6962.19628	-1740.54907	0.00000	1740.54907	6962.19628	26599.94115
у [m]				v _z [m⋅s ⁻¹]			
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00050	-0.00072	0.00016	0.00040	0.00050	0.00061	0.00098	0.00267
0.00100	-0.00127	0.00034	0.00081	0.00100	0.00121	0.00189	0.00487
0.00150	-0.00167	0.00054	0.00122	0.00150	0.00179	0.00274	0.00667
0.00200	-0.00197	0.00078	0.00165	0.00200	0.00237	0.00353	0.00811
0.00250	-0.00217	0.00104	0.00209	0.00250	0.00293	0.00426	0.00926
0.00300	-0.00228	0.00133	0.00254	0.00300	0.00348	0.00494	0.01016
0.00350	-0.00233	0.00165	0.00300	0.00350	0.00402	0.00556	0.01085
0.00400	-0.00231	0.00201	0.00347	0.00400	0.00454	0.00614	0.01138
0.00450	-0.00221	0.00241	0.00395	0.00450	0.00506	0.00667	0.01176
0.00500	-0.00203	0.00285	0.00444	0.00500	0.00556	0.00715	0.01203
0.00550	-0.00176	0.00334	0.00494	0.00550	0.00605	0.00759	0.01221
0.00600	-0.00138	0.00386	0.00546	0.00600	0.00653	0.00799	0.01231
0.00650	-0.00085	0.00444	0.00598	0.00650	0.00700	0.00835	0.01233
0.00700	-0.00016	0.00506	0.00652	0.00700	0.00746	0.00867	0.01228
0.00750	0.00074	0.00574	0.00707	0.00750	0.00791	0.00896	0.01217
0.00800	0.00189	0.00647	0.00763	0.00800	0.00835	0.00922	0.01197
0.00850	0.00333	0.00726	0.00821	0.00850	0.00878	0.00946	0.01167
0.00900	0.00513	0.00811	0.00879	0.00900	0.00919	0.00966	0.01127
0.00950	0.00733	0.00902	0.00939	0.00950	0.00960	0.00984	0.01072
0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000
G [Kg·h⁻¹]	0.00007	13.96987	18.11810	19.58036	21.04266	25.19089	39.16080

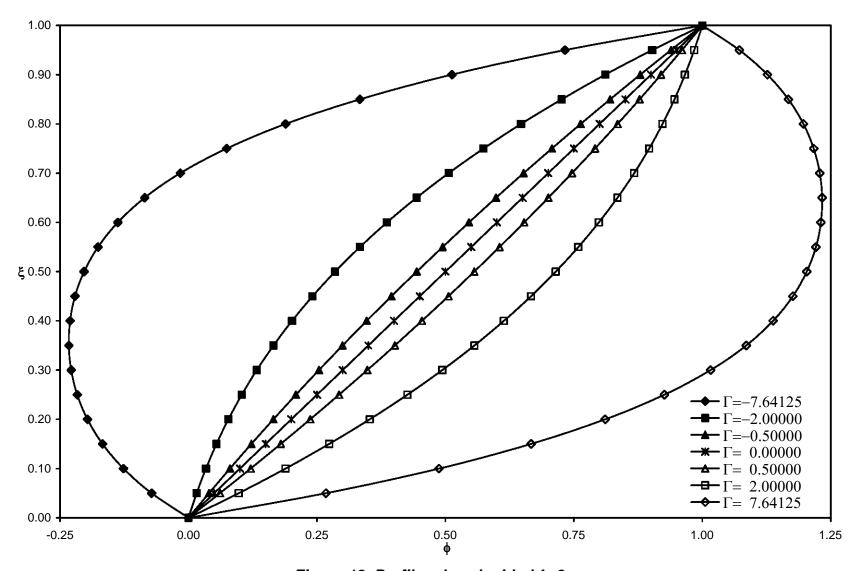


Figura 18. Perfiles de velocidad λ =8.

Tabla 10A. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 13.

	$\lambda = 13.0$								
Γ	-9.26568	-2.00000	-0.50000	0.00000	0.50000	2.00000	9.26568		
ξ				ф					
0.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
0.05	-0.07235	0.02041	0.04157	0.04998	0.05896	0.08829	0.26489		
0.10	-0.12776	0.04304	0.08398	0.09997	0.11692	0.17160	0.48362		
0.15	-0.16923	0.06805	0.12723	0.14997	0.17389	0.25011	0.66242		
0.20	-0.19917	0.09558	0.17134	0.19997	0.22987	0.32396	0.80698		
0.25	-0.21948	0.12576	0.21630	0.24998	0.28489	0.39332	0.92242		
0.30	-0.23151	0.15875	0.26213	0.30000	0.33894	0.45835	1.01334		
0.35	-0.23607	0.19470	0.30884	0.35001	0.39204	0.51920	1.08381		
0.40	-0.23344	0.23375	0.35643	0.40002	0.44419	0.57603	1.13734		
0.45	-0.22333	0.27605	0.40492	0.45003	0.49542	0.62900	1.17690		
0.50	-0.20493	0.32175	0.45430	0.50003	0.54572	0.67826	1.20493		
0.55	-0.17690	0.37101	0.50460	0.55003	0.59510	0.72396	1.22333		
0.60	-0.13734	0.42398	0.55582	0.60003	0.64358	0.76626	1.23344		
0.65	-0.08381	0.48081	0.60798	0.65002	0.69117	0.80531	1.23608		
0.70	-0.01334	0.54165	0.66107	0.70001	0.73786	0.84125	1.23152		
0.75	0.07759	0.60668	0.71511	0.75000	0.78369	0.87424	1.21949		
0.80	0.19303	0.67604	0.77012	0.79999	0.82864	0.90442	1.19917		
0.85	0.33758	0.74989	0.82610	0.84998	0.87274	0.93194	1.16923		
0.90	0.51638	0.82839	0.88307	0.89998	0.91600	0.95695	1.12777		
0.95	0.73512	0.91171	0.94103	0.94998	0.95841	0.97959	1.07235		
1.00	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000		
Ψ	0.00000	0.38110	0.46952	0.50000	0.53048	0.61890	1.00000		

Tabla 10B. Efecto de la presión en los perfiles de velocidad λ = 13.

v = 1.02556 [m·s⁻¹]

[m·s]									
∆p [kPa]	-32254.74140	-6962.19628	-1740.54907	0.00000	1740.54907	6962.19628	32254.74140		
у [m]				v _z [m·s ⁻¹]					
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
0.00050	-0.00072	0.00020	0.00042	0.00050	0.00059	0.00088	0.00265		
0.00100	-0.00128	0.00043	0.00084	0.00100	0.00117	0.00172	0.00484		
0.00150	-0.00169	0.00068	0.00127	0.00150	0.00174	0.00250	0.00662		
0.00200	-0.00199	0.00096	0.00171	0.00200	0.00230	0.00324	0.00807		
0.00250	-0.00219	0.00126	0.00216	0.00250	0.00285	0.00393	0.00922		
0.00300	-0.00232	0.00159	0.00262	0.00300	0.00339	0.00458	0.01013		
0.00350	-0.00236	0.00195	0.00309	0.00350	0.00392	0.00519	0.01084		
0.00400	-0.00233	0.00234	0.00356	0.00400	0.00444	0.00576	0.01137		
0.00450	-0.00223	0.00276	0.00405	0.00450	0.00495	0.00629	0.01177		
0.00500	-0.00205	0.00322	0.00454	0.00500	0.00546	0.00678	0.01205		
0.00550	-0.00177	0.00371	0.00505	0.00550	0.00595	0.00724	0.01223		
0.00600	-0.00137	0.00424	0.00556	0.00600	0.00644	0.00766	0.01233		
0.00650	-0.00084	0.00481	0.00608	0.00650	0.00691	0.00805	0.01236		
0.00700	-0.00013	0.00542	0.00661	0.00700	0.00738	0.00841	0.01232		
0.00750	0.00078	0.00607	0.00715	0.00750	0.00784	0.00874	0.01219		
0.00800	0.00193	0.00676	0.00770	0.00800	0.00829	0.00904	0.01199		
0.00850	0.00338	0.00750	0.00826	0.00850	0.00873	0.00932	0.01169		
0.00900	0.00516	0.00828	0.00883	0.00900	0.00916	0.00957	0.01128		
0.00950	0.00735	0.00912	0.00941	0.00950	0.00958	0.00980	0.01072		
0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000	0.01000		
<i>G</i> [Kg ⋅h ⁻¹]	0.00008	14.92422	18.38686	19.58036	20.77390	24.23658	39.16080		

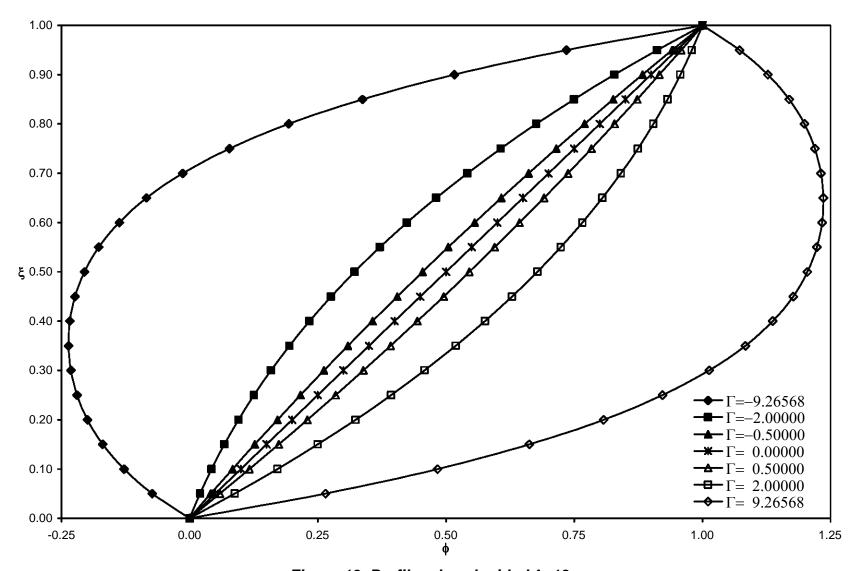


Figura 19. Perfiles de velocidad λ =13.

Tabla 11. Efecto de la rapidez de deformación sobre la viscosidad. $\Delta p = 6962.19628 \ kPa \ (\Gamma=2); \ \nu = 0.03471 \ m\cdot s^{-1} \ (\lambda=1).$

Ϋ́	η	$\log(\dot{\gamma})$	$\log(\eta)$
[s ⁻¹]	[kPa⋅s]	[s ⁻¹]	[kPa⋅s]
3.36176	4.21105	0.52657	0.62439
2.95976	4.25276	0.47126	0.62867
2.59586	4.28733	0.41428	0.63219
2.26748	4.31556	0.35554	0.63504
1.97208	4.33832	0.29492	0.63732
1.70709	4.35641	0.23226	0.63913
1.46996	4.37064	0.16731	0.64054
1.25813	4.38169	0.09973	0.64164
1.06904	4.39020	0.02899	0.64248
0.90014	4.39667	-0.04569	0.64312
0.74886	4.40156	-0.12560	0.64361
0.61265	4.40521	-0.21279	0.64397
0.48895	4.40790	-0.31074	0.64423
0.37520	4.40985	-0.42573	0.64442
0.26885	4.41120	-0.57049	0.64456
0.16734	4.41208	-0.77640	0.64464
0.06811	4.41255	-1.16681	0.64469

Tabla 12. Efecto de la rapidez de deformación sobre el esfuerzo cortante.

γ̈́	τ
[s ⁻¹]	[kPa]
3.36176	14.15653
2.95976	12.58714
2.59586	11.12930
2.26748	9.78546
1.97208	8.55551
1.70709	7.43679
1.46996	6.42466
1.25813	5.51274
1.06904	4.69329
0.90014	3.95760
0.74886	3.29614
0.61265	2.69884
0.48895	2.15523
0.37520	1.65458
0.26885	1.18596
0.16734	0.73831
0.06811	0.30052

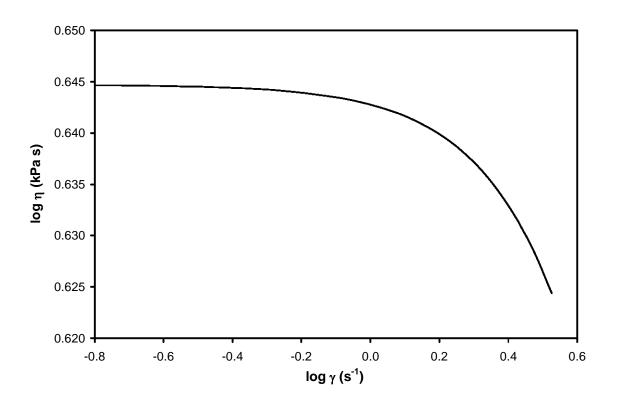


Figura 20. Efecto de la rapidez de deformación sobre la viscosidad.

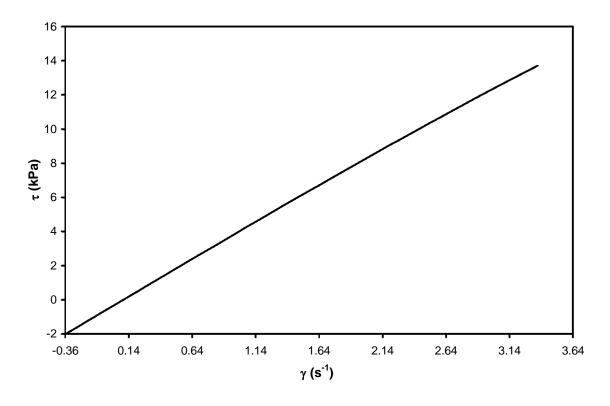


Figura 21. Efecto de la rapidez de deformación sobre el esfuerzo cortante.

5. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Curva de flujo.

La figura 13 muestra la curva de flujo obtenida con el cálculo tipo II para el cual se fija el valor de ψ (Gasto volumétrico adimensional) y el valor de λ (Velocidad de placa adimensional). De la gráfica se puede deducir que a mayor velocidad de placa se necesita mayor presión para obtener un mismo gasto e.g., para ψ =0.7 se tienen, (λ =1, Γ =1.43156) y (λ =8, Γ = 2.94820), esto quiere decir, que se necesita impartir mayor fuerza al fluido dentro del canal de flujo para contrarrestar el efecto del aumento de la velocidad de placa.

Todas las curvas pasan por el punto (Γ =0, ψ =0.5). A estas condiciones el movimiento únicamente de la placa arrastra al fluido hacia la salida, con esto la placa puede ser vista como una bomba. Esta gráfica resulta de interés práctico, ya que la velocidad de placa en las máquinas reales es equivalente a la velocidad de rotación y es, por lo tanto, una variable de operación.

La gráfica de la curva de flujo también permite ver el efecto de mantener la presión constante y variar la velocidad de placa. Para la zona de contra flujo (Γ <0), a Γ constante el aumento de la velocidad de placa produce un aumento en el gasto volumétrico. Por el contrario, en la zona de flujo por presión (Γ >0) a las mismas condiciones (Γ =cte. ψ =variable) es necesario disminuir la velocidad de placa para incrementar el gasto volumétrico, lo que implica que se pueda procesar mayor cantidad de material.

Efecto de la presión sobre el gasto volumétrico a velocidad de placa constante.

Los perfiles de velocidad presentados fueron obtenidos a través del cálculo tipo I, descritos de ψ =0 hasta ψ =1 para distintos valores de λ y Γ . Este análisis es referido a las figuras 14-19.

Los perfiles de velocidad generados por Γ <0, se denominan perfiles de contra flujo, esto es, el flujo tiene una dirección contraria a la dirección de flujo positiva; el fluido regresa por la parte inferior del canal en el intervalo 0< ξ <0.35 y avanza por la parte superior del canal en el intervalo de 0.35< ξ <1. A esta condición pertenece la situación no ideal (en la práctica), en la cual ψ =0.

Un punto importante, es donde Γ =0, esto representa un perfil de flujo por arrastre; se atribuye al movimiento únicamente de la placa que arrastra al fluido hacia la salida.

Conforme aumenta el gradiente de presión (Γ), se contrarresta la carencia de empuje (fuerza) necesaria para llevar al fluido hacia la salida del extrusor,

provocando que el fluido salga con empuje; que finalmente es el objetivo del proceso. Así, con el incremento en el valor de Γ , el perfil de velocidad se aproxima a un perfil parabólico de puro flujo por presión entre dos placas paralelas estacionarias; esto es, que en el valor máximo (ψ =1) la contribución de la velocidad de placa ya no es sentida por el fluido.

Viscosidad.

La figura 20 es una grafica log-log que muestra el efecto que tiene la rapidez de deformación sobre la viscosidad. De manera general, la viscosidad disminuye conforme aumenta la rapidez de deformación, i.e. el fluido se adelgaza con el aumento en el corte. Con esta gráfica se comprueba que el fluido que se está estudiando (HDPE) es seudoplástico. El cálculo de la viscosidad se llevó a cabo con la ecuación 3.3, con $\dot{\gamma}$ obtenida con la ecuación 3.37.

Esfuerzo cortante.

La figura 21 muestra la variación del esfuerzo cortante con respecto a la rapidez de deformación. En esta se muestra a medida que aumenta la rapidez de deformación aumenta el esfuerzo cortante. Por lo tanto, el esfuerzo aplicado no esta relacionado a la deformación del fluido sino a la rapidez a la que el fluido es deformado. El cálculo del esfuerzo cortante (τ) fue realizado con la ecuación 3.1 con Γ =2.

Las gráficas (figuras 20 y 21) son importantes, si lo que se desea es la caracterización reológica del fluido.

6. CONCLUSIONES

Un algoritmo numérico de cálculo fue desarrollado para describir el flujo laminar isotérmico de un fluido seudoplástico entre placas paralelas, que obedece al modelo reológico de Williams. En la construcción del algoritmo de cálculo se utilizaron tres métodos numéricos: Galerkin, Marquardt, Gauss-Legendre. La codificación de los métodos mencionados, se desarrolló en lenguaje FORTRAN.

La ecuación diferencial no lineal que describe al sistema, deducida a partir de las suposiciones o limitaciones puede ser resuelta a través de la metodología propuesta por Galerkin, que convierte la ecuación diferencial no lineal en un sistema de ecuaciones integrales no lineales, para las cuales, la solución es aproximada por un polinomio. Esta metodología permite la solución de problemas de condiciones a la frontera, contrario a lo que sería emplear técnicas como el método de Runge-Kutta en los cuales es necesario suponer las condiciones iniciales.

La rutina BSOLVE (método de Marquardt) permite la solución de los c_M coeficientes desconocidos que satisfacen las ecuaciones no lineales integrales. La integración numérica se realiza con el método de cuadratura de Gauss-Legendre, el cual permite eliminar la variable de integración y convertir la forma integral a forma algebraica.

Para altas velocidades de placa, es necesario aumentar el gradiente de presión para obtener el mismo flujo volumétrico que se obtendría a bajas velocidades de placa y por lo tanto, a gradientes de presión bajos. Con el cálculo tipo I se obtienen los perfiles de velocidad en los que se observa que gradientes de presión negativos generan perfiles de velocidad de contra flujo (sentido contrario a la dirección de flujo), gradientes de presión positivos producen perfiles de velocidad de flujo por presión y un gradiente de presión nulo (Γ =0) produce un perfil de velocidad de flujo por arrastre.

Al mantener la velocidad de rotación constante y variar la caída de presión (Δp) permite ver la capacidad máxima de material que se puede procesar, así como, los requisitos necesarios para obtener la mayor cantidad de material procesable, esto se infiere a partir de los resultados obtenidos con el cálculo tipo II. La discusión de los resultados obtenidos proporcionan la seguridad para predecir el comportamiento que ocurre en la zona de bombeo.

Con el cálculo de la viscosidad se comprueba que el fluido de trabajo (HDPE) es un fluido seudoplástico, el cual conforme aumenta la rapidez de deformación disminuye la viscosidad, contrario a la descripción de un fluido newtoniano donde la viscosidad permanece constante.

La relación entre las dos cantidades $(\tau, \dot{\gamma})$ depende de manera particular a la naturaleza y constitución del fluido que esta siendo deformado, así el cálculo del

esfuerzo cortante (τ) como función de la rapidez de deformación ($\dot{\gamma}$) demostró que para un fluido seudoplástico, τ aumenta con el incremento en la rapidez de deformación.

Si bien es aceptable tratar de corroborar los cálculos realizados, también es cierto que la única manera de comprobarlos es sujetando el modelo desarrollado a determinaciones experimentales, ya que el flujo analizado no corresponde a la simplicidad lineal newtoniana, como se demostró con los cálculos anteriores.

Como ya se ha mencionado la contribución de este trabajo es el desarrollo de un algoritmo de cálculo para la simulación del flujo isotérmico de un fluido seudoplástico que fluye entre placas paralelas. El uso de las herramientas teóricas para imponer las limitaciones al sistema, que dan validez por si mismas al modelo; así como, el uso de la adimensionalización y de los métodos numéricos para construir el algoritmo de cálculo; constituyen la simulación por computadora, que permite describir la situación física de problemas de ingeniería química; y en este caso la descripción de un fluido polimérico (HDPE) en la zona de dosificación de un extrusor de tornillo sencillo.

APÉNDICES

A1 Algoritmo de cálculo

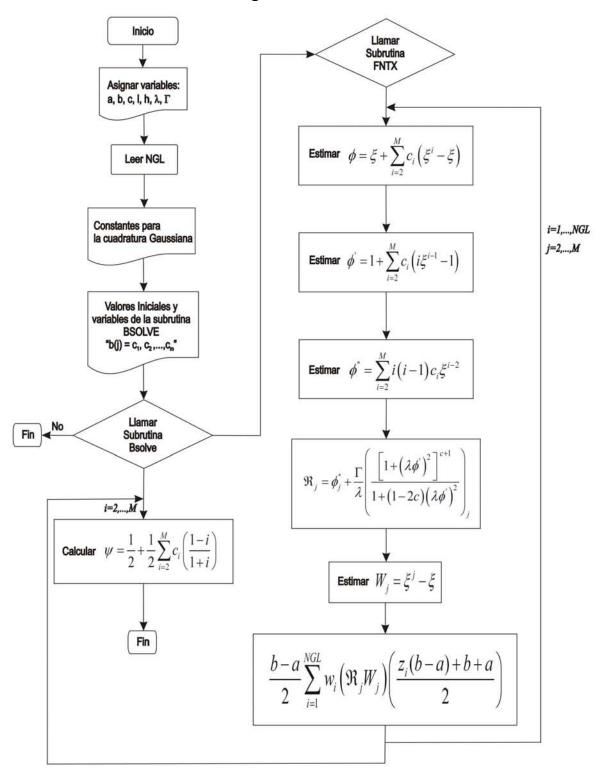


Figura 22. Diagrama de flujo: Cálculo tipo I.

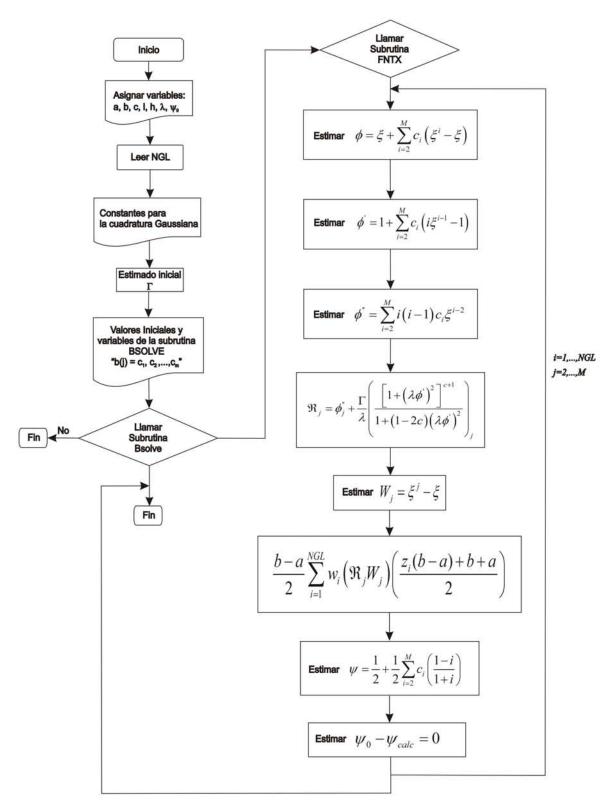


Figura 23. Diagrama de flujo: Cálculo tipo II.

A2 Programas de cálculo

Programa Principal

```
program WILLIAMS
      implicit none
      EXTERNAL FNTX, deriv
      ! Variables
      INTEGER(KIND=4)::KD,KK,N,J,IC,ICON,m
      REAL(KIND=8)::FNU,FLA,TAU,EPS,PHMIN,PH,DV,GAMM,FV
      REAL(KIND=8),ALLOCATABLE,DIMENSION(:)::B,Z,Y,BV,BMIN,BMAX,P
      REAL(KIND=8),ALLOCATABLE,DIMENSION(:,:)::A,AC
      real(kind=8),DIMENSION(1:20)::ZGL,WGL
      real(kind=8),DIMENSION(1:21)::xk,difk,x,FI,dfi
      integer(kind=4)::morder,ngl,nc,nn,i,ITMAX,np
      real(kind=8)::SB,SBP1,UM2B,XLAM,GAM,pi,ck,trc,trk,a1,a2,sa,tc,tk,ty,eta0,h,xl,v,dp,dx,y
a,sum,d1
      real(kind=8)::psi,term,promk,xldfi
      CHARACTER(len=160)::noma
      COMMON SB,SBP1,UM2B,XLAM,GAM,NGL,MORDER,ZGL,WGL
! LECTURA DE ARCHIVOS DE INTEGRACION GL
      NOMA='C:\GLQ16.dat'
      OPEN(UNIT=6,FILE=NOMA,MODE='READ',STATUS='UNKNOWN')
      READ(6,*)NGL
      DO I=1.NGL
      READ(6,*)ZGL(I),WGL(I)
      END DO
      CLOSE(6)
!
      CONSTANTES
      PI=4*dATAN(1.d+0)
      CK=2.7315e+2
1
      Ajuste de Williams para HDPE (r^2=0.997605)
      A1[=]Pas
                   A2[=]K
                                SA[=]seg
                                             SB[=]SIN
      TRC=1.7e+2
      TRK=TRC+CK
      A1=5.0442e+3
      A2=2686.2
      SA=0.12676
      SB=0.28024
      SBP1=SB+1.
      UM2B=1.-2.*sb
      TC=1.8e+2
      TK=TC+CK
      TY=(TK-TRK)/(TRK*TK)
      ETA0=A1*dEXP(-A2*TY)
      WRITE(*,*)ETA0
```

```
!
      GEOMETRIA
!
      H,L[=]m
      H=1e-2
      XL=1.0
!
      VELOCIDAD DE PLACA
!
      V[=]m/s
      V=1e-2
      DIFERENCIA DE PRESIONES
!
!
      DP[=]Pa
      DP=-2D+6
      XLAM=SA*V/H
!
      XLAM=1.0
!
      GAM=H*sa*dp/(xl*eta0)
      GAM=0! ignorar cuando se realiza el cálculo II
!
      CONTROL PARA BSOLVE
      MORDER=4
      NC=MORDER+1-2
      KK=NC
      NN=KK
      n=nn
      kd=kk
      ALLOCATE
(B(1:KK),Z(1:N),Y(1:N),BV(1:KK),BMIN(1:KK),BMAX(1:KK),P(1:KK*(N+2)+N))
      ALLOCATE(A(1:KD,1:KK+2),AC(1:KD,1:KK+2))
      DO I=1,NN
      Y(I)=0.
      END DO
      DO I=1,KK
      BV(I)=1.
      BMIN(I)=-1e+3
      BMAX(I)=1e+3
      B(I)=(-1./PI)**(I+1)
      END DO
!
      CUERPO DE Bsolve
      FV=0.
      IC=0
      FNU=0.
      FLA=0.
      TAU=0.
      EPS=0.
      PHMIN=0.
      ICON=kk
      ITMAX=50
      WRITE(*,2) (CHAR(205),I=1,16)
  2 FORMAT(/32X, 'ALGORITMO BSOLVE'/32X, 16A1/27X, 'IT', 5X, 'ICON', 8X, 'LSS')
  DO WHILE(ICON.NE.0.AND.ic.LE.ITMAX)
      CALL
BSOLVE(KK,B,N,Z,Y,PH,FNU,FLA,TAU,EPS,PHMIN,IC,ICON,FV,DV,BV,BMIN,BMAX,P,FNTX,
DERIV, KD, A, AC, GAMM)
```

```
WRITE(*,4) IC,ICON,PH
 4 FORMAT(25X,2(I4,5X),1PE12.5)
      IF(ICON.EQ.(-1).OR.ICON.EQ.(-4)) GOTO 6
      END DO
 6 PRINT '(30X,A20)','...PULSAR TECLA...'
      READ(*,*)
!
      INTERVALO DE POSICIONES
      NP=21
      X(1)=0.
      X(NP)=1.
      DX=(X(NP)-X(1))/DBLE(NP-1)
      DO I=2,NP-1
      X(I)=X(I-1)+DX
      END DO
!
      PERFIL DE VELOCIDADES
      DO I=1,NP
      YA=X(I)
      SUM=YA
      D1=0.
      DO M=2,MORDER
      SUM=SUM+B(M-1)*(YA**M-YA)
      D1=D1+B(M-1)*(DBLE(M)*(YA**(M-1))-1.)
      END DO
      FI(I)=SUM
      DFI(I)=1.+D1
      END DO
!
      GASTO VOLUMETRICO
      PSI=1.
      DO M=2,MORDER
      TERM=(1.-DBLE(M))/(1.+DBLE(M))
      PSI=PSI+B(M-1)*TERM
      END DO
      PSI=5e-1*PSI
      CONSTANTE DE INTEGRACIÓN
!
      PROMK=0.
      DO I=1,NP
      YA=X(I)
      XLDFI=XLAM*DFI(I)
      TERM=(1.+XLDFI*XLDFI)**SB
      XK(I)=-(XLDFI/TERM)-GAM*YA
      PROMK=PROMK+XK(I)
      END DO
      PROMK=PROMK/DBLE(NP)
      DO I=1,NP
      DIFK(I)=XK(I)-PROMK
      END DO
!
      RESULTADOS
      WRITE(*,8)
 8 FORMAT(/29X,'K',13X,'K-<K>')
      DO I=1,NP
```

WRITE(*,9) XK(I),DIFK(I) 9 FORMAT(27X,2(1PE12.5,2X)) **END DO** WRITE(*,10) PROMK 10 FORMAT(32X,'<K>=',1PE12.5) PRINT '(30X,A20)','...PULSAR TECLA...' READ(*,*) WRITE(*,11) 11 FORMAT(26X,'y/H',5X,'Vz/V',4X,'d(Vz/V)/d(y/H)') DO I=1,NP WRITE(*,12) X(I),FI(I),DFI(I) 12 FORMAT(25X,F6.3,2X,F8.5,2X,1PE12.5) **END DO** WRITE(*,15) XLAM 15 FORMAT(32X,'LAMBDA=',F8.5) WRITE(*,13) PSI 13 FORMAT(32X, 'PSI=', 1PE12.5) WRITE(*,14) GAM 14 FORMAT(32X, 'GAMMA=', F8.5) PRINT '(30X,A20)','...PULSAR TECLA...' DEALLOCATE (B,Z,Y,BV,BMIN,BMAX,P) DEALLOCATE(A,AC) end program WILLIAMS

Cálculo Tipo I

FNTX FUNCION DEL PROBLEMA Fijas λ y Γ se obtiene ψ y los coeficientes. Estas son las funciones para la subrutina Bsolve subroutine FNTX(KK,B,NN,Z,FV) implicit none integer(kind=4)::morder,ngl real(kind=8)::xlam,gam,sbp1,sb,um2b integer(kind=4)::j,k,m INTEGER(KIND=4),INTENT(IN)::KK,NN real(kind=8),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:KK)::B real(kind=8),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:NN)::Z real(kind=8),INTENT(INOUT)::FV real(kind=8)::bma,bpa,si,zp,d1,d2,xn,xd,c2,rj,wj real(kind=8),DIMENSION(1:20)::ZGL,WGL COMMON SB,SBP1,UM2B,XLAM,GAM,NGL,MORDER,ZGL,WGL DO J=2,MORDER BMA=5E-1 **BPA=BMA** SI=0. DO K=1.NGL ZP=BMA*ZGL(K)+BPA D1=0.

```
D2=0.
      DO M=2,MORDER
      D1=D1+B(M-1)*(DBLE(M)*(ZP**(M-1))-1.)
      D2=D2+DBLE(M^{*}(M-1))^{*}B(M-1)^{*}(ZP^{**}(M-2))
      END DO
      D1=1.+D1
      C2=XLAM*XLAM*D1*D1
      XN=(1.+C2)**SBP1
      XD=1.+UM2B*C2
      RJ=D2+(GAM*XN/(XLAM*XD))
      WJ=ZP**J-ZP
      SI=SI+BMA*WGL(K)*RJ*WJ
      END DO
      Z(J-1)=SI
      END DO
      RETURN
end subroutine FNTX
```

Cálculo Tipo II

```
FNTX FUNCION DEL PROBLEMA
!
       Fijas \lambda y \psi se obtiene \psi y los coeficientes.
       Estas son las funciones para la subrutina Bsolve
subroutine FNTX(KK,B,NN,Z,FV)
implicit none
integer(kind=4)::morder,ngl
real(kind=8)::xlam,gam,sbp1,sb,um2b
integer(kind=4)::j,k,m,n
INTEGER(KIND=4), INTENT(IN)::KK, NN
real(kind=8),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:KK)::B
real(kind=8),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:NN)::Z
real(kind=8),INTENT(INOUT)::FV
real(kind=8)::bma,bpa,si,zp,d1,d2,xn,xd,c2,rj,wj,psi,term,psin,psic,CT,GC
real(kind=8),DIMENSION(1:20)::ZGL,WGL
COMMON SB,SBP1,UM2B,XLAM,GAM,NGL,MORDER,ZGL,WGL,psin,psi,psic
!
       CALCULO TIPO 2
       DO J=2,MORDER
       BMA=5E-1
       BPA=BMA
       SI=0.
       DO K=1,NGL
       ZP=BMA*ZGL(K)+BPA
       D1=0.
       D2=0.
       GAM=0.0 !estimado inicial
       PSIC=0.
       PSI=1.0
       PSIN=0.90
       DO M=2,MORDER
       D1=D1+B(M-1)*(DBLE(M)*(ZP**(M-1))-1.)
```

```
D2=D2+DBLE(M^{*}(M-1))^{*}B(M-1)^{*}(ZP^{**}(M-1))
      GAM=GAM-B(M-1)
      END DO
      DO N=2,MORDER
      TERM=(1.-DBLE(N))/(1.+DBLE(N))
      PSI=PSI+B(N-1)*TERM
      END DO
      PSI=5e-1*PSI
      D1=1.+D1
      C2=XLAM*XLAM*D1*D1
      XN=(1.+C2)**SBP1
      XD=1.+UM2B*C2
      RJ=D2+(GAM*XN/(XLAM*XD))
      WJ=ZP**J-ZP
      SI=SI+BMA*WGL(K)*RJ*WJ
      PSIC=PSIN-PSI
      END DO
      Z(J-1)=SI
      Z(J-1)=PSIC
      END DO
      RETURN
end subroutine FNTX
```

Subrutina BSOLVE

```
! mARQ.f90
! Free Format
! FUNCIONES:
! mARQ - Punto de entrada a la aplicación de consola.
! REFERENCIA: Henley & Rosen: Cálculo de Balances de Materia y Energía
! PROGRAM: mARQ
                     (Marquardt)
! Solución de NN ecuaciones en KK incógnitas por el método de Marquardt
!
       KK = Número de incógnitas - entrada
!
!
       B(I) = Vector de incógnitas (longitud KK)
!
              en la primera entrada estimados iniciales
             en la salida final son las respuestas
!
       NN = Número de ecuaciones - Debe ser más grande o igual a KK - Entrada
       Z(I) = Vector de valores calculados (longitud NN) - Salida
              Quiere Z(I) = Y(I)
       Y(I) = Vector de valores dados (longitud NN) - Entrada
       PH = Valor de la función suma de (Z(I)-Y(I))^{**}2) - Salida
!
!
       FNU = Factor Nu (ajustado a 10.0 if 0.) - Entrada
ļ
!
       FLA = Factor Lambda (ajustado a 0.01 if 0.) - Entrada
ļ
```

TAU = Factor 7	Tau (ajustado a 0.001 if 0.) - Entrada
EPS = Factor E	Eps (ajustado a 0.00002 if 0.) - Entrada
	o de corte para recalcular la matriz jacobiana Ilmente debe ser ajustado a cero.
I = Conteo de i	teraciones – Inicialmente debe ser cero
ICON = Númer	ro de conocidos que no satisfacen los requisitos de convergencia definidos
Como	ABS(DELTA B(i))/(ABS(DELTA B(i))+TAU).LE.EPS =0 Respuesta no encontrada =-1 Si no es posible mejorar la función =-2 Si más variables que funciones =-3 Si el total de las variables es cero =-4 Si las correcciones satisfacen los requisitos de convergencia, pero FLA sigue siendo grande
FV	= Vector de variable transferido a la FUNC y DERIV
DV	= Vector de variable transferido hacia DERIV
BV(I)	 = code para tipo de variable (longitud KK) - Entrada =0. Si B(i) Si no es variable (Entrada) =1. Si B(i) Son derivadas numéricas y variables para ser usadas =-1 Si B(i) Son derivadas variables y analíticas para ser usadas Subrutina deriv es requerida
BMIN(I)	= Valores mínimos de B(i) (longitud KK) - Entrada
BMAX(I)	= Valores máximos de B(i) (longitud KK) - Entrada
P(I)	= Vector Jacobiano arreglado en el sentido de las columnas NN por KK – longitud del vector es NN*KK P(L)= DZ(i)/DB(j) con L = i+(j-1)*NN Longitud total del vector es = KK*(NN+2)+NN Lugares empezando con NN*KK+1 usados para uso temporal Nota este vector es calculado por DERIV Si cualquier BV(i)=-1
nomb	ore del subprograma de la función para ser escrito por el usuario – re debe ser declarado como EXTERNAL en el programa principal rutina debe ser siempre proporcionada call FUNC(KK,B,NN,Z,FV)
	 KK = Número de incógnitas - Entrada B(I) = Vector de incógnitas (longitud KK) - Entrada NN = Número de ecuaciones - Entrada Z(I) = Vector (longitud NN) de valores calculados por FUNC FV = Un vector dummy transmitido hacia FUNC por BSOLVE para ser usado como se deseé
Es lla	ore del subprograma usado para evaluar las derivadas indicadas por BV(i). mado solo por aquellas variables para las cuales BV(i)=-1. El nombre del rograma debe aparecer en el PROGRAMA declarado como EXTERNAL.

```
KK
                            = Numero de incógnitas - Entrada
!
                            = Vector de incógnitas (longitud KK) - Entrada
!
                     B(I)
١
                     NN
                            = Numero de ecuaciones - Entrada
                     Z(I)
                            = Vector (longitud NN) de valores de las ecuaciones - necesita
                              no ser calculado en no menos JTEST=-1 REGRESADO
                     PJ(I)
                            = El vector de derivadas (longitud NN) calculado por el
                              subprograma – Este es la Jsima columna de el Jacobiano
                     FV
                            = Un vector dummy transmitido hacia DERIV por BSOLVE
                     DV
                            = Una variable transmitida hacia DERIV por BSOLVE
                            = El índice de la variable para la cuales las derivadas serán
                     J.
                              calculadas por DERIV
                     JTEST = Si las derivadas han de ser calculados ajustar JTEST a cero.
                              Si un valor de -1 es regresado BSOLVE
                              Intentara tomara derivadas numéricas basadas en el vector Z
                              regresado
١
       KD
                     = El número de filas de las matrices almacenadas A y AC en el
                       programa. KD DEBE ser más grande o igual que KK
       A, AC = matrices de uso temporal de dimensión KD por (KK+2)
       GAMM = El ángulo en grados entre la dirección modificada de Newton-Rhapson y la
               dirección de paso descendiente - Salida
 PROPÓSITO: Punto de entrada a la aplicación de consola..
   ************************
       RUTINA BSOLVE
SubroutineBSOLVE(KK,B,NN,Z,Y,PH,FNU,FLA,TAU,EPS,PHMIN,I,ICON,FV,DV,BV,BMIN,BMA
& X,P,FUNC,DERIV,KD,A,AC,GAMM)
       implicit none
       ! Variables
       INTEGER(KIND=4), INTENT(IN)::KK, NN, KD
       INTEGER(KIND=4).INTENT(INOUT)::I.ICON
       REAL(KIND=4),INTENT(INOUT)::FNU,FLA,TAU,EPS,PHMIN,PH,GAMM
       real(kind=4),INTENT(IN),DIMENSION(1:NN)::Y,DV
       real(kind=4).INTENT(INOUT)::FV
       real(kind=4),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:NN)::Z
       real(kind=4),INTENT(IN),DIMENSION(1:KK)::BMIN,BMAX
       real(kind=4),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:KK)::BV
       real(kind=4),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:KK)::B
       real(kind=4),INTENT(INOUT),DIMENSION(1:KK*(NN+2)+NN)::P
       real(kind=4).INTENT(OUT).DIMENSION(1:KD.1:KK+2)::A.AC
       INTEGER(KIND=4)::11,J1,J2,J3,J4,JB,JGAM,JTEST,K,KB,KBI1,KBI2,KP1,KP2,KZI,L1,
      & L2,L3,L4,N,N1,N2,N3,N4
       REAL(KIND=4)::COSG,DEN,DN,FL,GN,DG,PHI,ARCOS
       EXTERNAL FUNC
       ! Cuerpo de BSOLVE
       k=kk
       n=nn
```

```
kp1=k+1
        kp2=kp1+1
        kbi1=k*n
        kbi2=kbi1+k
        kzl=kbi2+k
        if(FNU .le. 0.) FNU=10.0
        if(fla .le. 0.) fla=0.01
        if(tau .le. 0.) tau=0.001
        if(eps .le. 0.) eps=0.00002
        if(phmin.le.0.) phmin=0.
        kb=0
        do i1=1,k
                if(bv(i1) .ne. 0.) kb=kb+1
        END DO
        if(kb .gt. 0) go to 170
162
        icon=-3
163
        go to 2120
170
        if(n .ge. kb) go to 500
180
        icon=-2
190
        go to 2120
500
       i1=1
530
        if(i .gt. 0) go to 1530
        do 560 j1=1,k
550
        j2=kbi1+j1
        p(j2)=b(j1)
        j3=kbi2+j1
        p(j3)=abs(b(j1))+1.0E-02
560
        go to 1030
590
        if(phmin .gt. ph .and. i .gt. 1) go to 625
        do 620 j1=1,k
        n1=(j1-1)*n
        if(bv(j1)) 601,620,605
        call deriv (K,B,N,Z,p(n1+1),FV,DV,J1,JTEST)
601
        if(jtest .ne. (-1)) go to 620
        bv(j1)=1.0
605
        do 606 j2=1,k
       j3=kbi1+j2
606
        p(i3)=b(i2)
        j3=kbi1+j1
       j4=kbi2+j1
        den=0.001*amax1(p(j4),abs(p(j3)))
        if(p(j3)+den .le. bmax(j1)) go to 55
        p(j3)=p(j3)-den
        den=-den
        go to 56
55
        p(j3)=p(j3)+den
        call FUNC (K,p(kbi1+1),N,p(N1+1), fv)
56
        do 610 j2=1,n
        jb=j2+n1
610
        p(jb)=(p(jb)-z(j2))/den
620
        continue
!
        Preparar las Correcciones a las Ecuaciones
625
        do 725 j1=1,k
```

```
n1=(j1-1)*n
       a(i1,kp1)=0.
       if(bv(j1)) 630,692,630
630
       do 640 j2=1,n
       n2=n1+i2
640
       a(j1,kp1)=a(j1,kp1)+p(n2)*(y(j2)-z(j2))
       do 680 j2=1,k
650
660
       a(j1,j2)=0.
665
       n2=(j2-1)*n
670
       do 680 j3=1,n
672
       n3=n1+j3
674
       n4=n2+j3
       a(j1,j2)=a(j1,j2)+p(n3)*p(n4)
680
       if(a(j1,j1).gt.1.E-20) go to 725
692
       do 694 j2=1,kp1
694
       a(j1,j2)=0.
695
       a(j1,j1)=1.0
725
       continue
       qn=0.
       do 729 j1=1,k
729
       gn=gn+a(j1,kp1)**2
!
       Escalar las correcciones de las ecuaciones
       do 726 j1=1,k
726
       a(j1,kp2)=sqrt(a(j1,j1))
       do 727 j1=1,k
       a(j1,kp1)=a(j1,kp1)/a(j1,kp2)
       do 727 j2=1,k
727
       a(j1,j2)=a(j1,j2)/(a(j1,kp2)*a(j2,kp2))
730
       fl=fla/fnU
       go to 810
800
       fl=fnU*fl
       do 840 j1=1,k
810
820
       do 830 j2=1,kp1
830
       ac(j1,j2)=a(j1,j2)
840
       ac(j1,j1)=ac(j1,j1)+fl
!
       Resolver las correcciones de las ecuaciones
       do 930 l1=1.k
       12=11+1
       do 910 l3=l2,kp1
910
       ac(11,13)=ac(11,13)/ac(11,11)
       do 930 l3=1,k
       if(I1-I3)920,930,920
920
       do 925 l4=l2,kp1
       ac(13,14)=ac(13,14)-ac(11,14)*ac(13,11)
925
930
       continue
       dn=0.
       dq=0.
       do 1028 j1=1,k
       ac(j1,kp2)=ac(j1,kp1)/a(j1,kp2)
       j2=kbi1+j1
       p(j2)=amax1(bmin(j1),amin1(bmax(j1),b(j1)+ac(j1,kp2)))
       dg=dg+ac(j1,kp2)*a(j1,kp1)*a(j1,kp2)
       dn=dn+ac(j1,kp2)*ac(j1,kp2)
```

```
1028
       ac(j1,kp2)=p(j2)-b(j1)
       cosg=dg/sqrt(dn*gn)
       jgam=0
       if(cosg) 1100,1110,1110
1100
       jgam=2
       cosg=-cosg
1110
       continue
       cosg=amin1(cosg, 1.0)
       gamm=arcos(cosg)*180./(3.14159265)
       if(jgam .gt. 0) gamm=180.-gamm
1030
       call func (K,p(kbi1+1),N,p(kzi+1), fv)
1500
       phi=0.
       do 1520 j1=1,n
       j2=kzi+j1
1520
       phi=phi+(p(j2)-y(j1))**2
       if(phi.lt. 1.E-10) go to 3000
       if(i .gt. 0) go to 1540
1521
       icon=k
       go to 2110
1540
       if(phi .ge. ph) go to 1530
       Probar EPSILON
1200
       icon=0
       do 1220 j1=1,k
       j2=kbi1+j1
1220
       if(abs(ac(j1,kp2))/(tau+abs(p(j2))) .gt. eps) icon=icon+1
       if(icon .eq. 0) go to 1400
!
       Probar GAMMA-LAMBDA
       if(fl .gt. 1.0 .and. gamm .gt. 90.0) icon=-1
       go to 2105
       Probar GAMMA-EPSILON
1400
       if(fl.gt. 1.0 .and. gamm .le. 45.0) icon=-4
       go to 2105
!
1530
       if(i1-2) 1531,1531,2310
1531
       i1=i1+1
       go to (530,590,800),i1
       if(fl .lt. 1.0E+8) go to 800
2310
1320
       icon=-1
2105
       fla=fl
       do 2091 j2=1,k
       j3=kbi1+j2
2091
       b(j2)=p(j3)
2110
       do 2050 j2=1,n
       j3=kzl+j2
2050
       z(j2)=p(j3)
       ph=phi
       i=i+1
2120
       return
3000
       icon=0
       go to 2105
```

end SUBROUTINE BSOLVE

```
FUNCIÓN ARCO COSENO
       real(kind=4) function arcos(z)
       implicit none
       real(kind=4),intent(in)::z
       real(kind=4)::x
       integer(kind=1)::key
       X=Z
       kev=0
       if(x .lt. (-1.)) x=-1.
       if(x .gt. 1.) x=1.
       if(x .ge. (-1.) .and. x .lt. 0.) key=1
       if(x .lt. 0.) x=abs(x)
       if(x .eq. 0.) arcos=1.5707963
       arcos=atan(sqrt(1.-x*x)/x)
       if(key .eq. 1) arcos=3.14159265-arcos
       return
       end function arcos
     **FNTX FUNCIÓN DEL PROBLEMA
       En esta sección van las ecuaciones introducidas por el usuario
       para ser resueltas por BSOLVE (Cálculo I y Cálculo II)
       DERIV FUNCIÓN DEL PROBLEMA
           ********************
REAL(KIND=4) FUNCTION DERIV(K,B,N,Z,PP,FV,DV,J1,JTEST)
DERIV=0.
END FUNCTION DERIV
```

A3 Nomenclatura

∆p Caída de presión

a, b, c Constantes del modelo reológico de Williams

H Distancia entre las placas

τ Esfuerzo cortante

 W_i Función peso de Galerkin

G Gasto másico

Q Gasto volumétrico

 ψ Gasto volumétrico adimensional

HDPE Polietileno de alta densidad

w_i Pesos de Gauss-Legendre

p Presión termodinámica

z_i Raíces de Gauss-Legendre

Residuo de Galerkin

Γ Variable adimensional asociada a la presión

λ Variable adimensional asociada a la velocidad de la placa

 ξ Variable adimensional de posición

φ Variable adimensional de velocidad

g Vector aceleración de gravedad

<u>v</u> Vector velocidad

 $\dot{\gamma}$ Velocidad de deformación

 η Viscosidad no newtoniana

REFERENCIAS

- 1. Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot E. N. *Transport phenomena*, Ed. John Wiley & Sons, New York, 2002.
- 2. Brodkey, Robert S. *Transport phenomena: A unified approach*, Ed. McGraw-Hill, 1988.
- 3. Carnahan B., Luther H., Wilkes J. *Applied numerical methods*, Ed. Krieger, Malabar Florida, 1990.
- 4. Cheremisinoff N. *Advanced polymer processing operations*, Ed. Noyes, Ney Jersey, 1998.
- 5. Dealy John M. *Official nomenclature for material functions describing the response of a viscoelastic fluid to various shearing and extensional deformations*, J. Rheol. Vol. 39, No. 1, January/February, 1995, 253-265.
- 6. Henley E., Rosen E. *Material and energy balance computations*, Ed. John Wiley & Sons, New York, 1969.
- 7. Holmes M. *Introduction to numerical methods in differential equations*, Ed. Springer, New York, 2007.
- 8. Kumar A., Gupta R. *Fundamentals of polymer engineering*, Ed. Decker, USA, 2003.
- Laid E., Wen Yu D. Modeling of the plasticating process in a single-screw extruder: A fast-track approach, Polym. Eng. Sci. Vol. 40, No. 5, May, 2000, 1074-1084.
- 10. López Latorre, Luis A. Comunicación privada.
- 11. Madsen K., Nielsen H. B., Tingleff O. *Methods for nonlinear least-squares problems*, IMM, DTU, Denmark, 2004.
- 12. Marquardt, Donald W. *An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters*, J. Soc. Indust. Appl. Math. Vol. 11. No. 2, June, 1963, 431-441.
- 13. Mckelvey J. *Polymer processing*, Ed. John Wiley & Sons, New York, 1962.
- 14. Middleman S. *Fundamentals of polymer processing*, Ed. McGraw-Hill, New York, 1997.
- 15. Tadmor Z., Gogos C. *Principles of polymer processing*, 2nd ed., Ed. John Wiley & Sons, New York, 2006.

- 16. Tucker C., Baron M. *Fundamentals of computer modeling for polymer processing,* Ed. Hanser, Munich, 1989.
- 17. Wilczyński, K. **SSEM: A computer model for a polymer single-screw extrusion**, J. Mater. Process. Technol. Vol. 109. No. 3, February 2001, 308-313
- 18. Williams, Michael C. Stresses in concentrated polymer solutions: part I, shear dependence of viscosity, AICHE Journal, Vol. 12. No. 6, 1966, 1064-1070.
- 19. Zienkiewicz C., Taylor R.L. *The finite element method Vol. 1: the basis*, Ed. Butterworth-Heinemann, 5th ed., Massachusetts, 2000.
- 20. Zienkiewicz C., Taylor R.L. *The finite element method Vol. 3: fluid dynamics*, Ed. Butterworth-Heinemann, 5th ed., Massachusetts, 2000.