

Título de la Tesis: “Solución numérica de flujos de procesamiento de polímeros”

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Medeiros Cardozo, Nilo Sergio

Directores: Dr. Enrique Vallés - Dr Lidia Quinzani

Resumen

El efecto que las variaciones en las condiciones de procesamiento de los fluidos poliméricos tienen sobre las propiedades del producto final es, en general, mucho más acentuado que en el caso de los materiales convencionales como consecuencia de la complejidad de los flujos involucrados en las distintas técnicas de procesamiento y del comportamiento reológico de estos materiales. Esto hace que exista un esfuerzo continuo para mejorar las técnicas de procesamiento existentes y desarrollar otras nuevas. La mayoría de los avances logrados en la optimización de las distintas técnicas de procesamiento se han basado en información de naturaleza empírica y/o en métodos de prueba y error. El intento de modificar esta realidad y desarrollar modelos que generen información útil para llevar a cabo de manera más eficaz las tareas de diseño y optimización recién mencionadas ha hecho que la simulación de procesos de flujo de materiales poliméricos haya sido objeto de intensa investigación desde fines de la década del 70. Sin embargo, hasta el momento no ha sido posible llegar a una comprensión tan detallada del flujo de fluidos poliméricos como la que se tiene para los fluidos Newtonianos. La simulación de flujos de fluidos viscoelásticos es, por lo tanto, un campo de gran interés y en plena evolución.

En este trabajo se presenta la implementación de un simulador para procesos de flujo que ha sido desarrollado en base al objetivo de obtener una herramienta lo más general posible en lo que se refiere a la posibilidad de analizar distintas geometrías y distintos modelos reológicos para fluidos viscoelásticos. El simulador se implementó en una computadora personal con un coprocesador 80486 de 66 MHz con 32 megabytes de memoria central, utilizando el sistema operativo Windows 3.1 y los compiladores Microsoft Fortran 3.1 y Microsoft C/C++ 7.0. El algoritmo desarrollado se basa en la utilización del método numérico de elementos finitos y del método DEVSSG (*Discrete Elastic-Viscous Split-Stress-Gradient method*). El método de elementos finitos es bien conocido por su capacidad para el análisis en dominios de geometría compleja. Por otro lado, el DEVSSG es un método muy prometedor para la solución de los problemas comúnmente encontrados en el tratamiento numérico de flujos donde la elasticidad del fluido asume un rol importante.

El estudio se realizó utilizando los modelos de fluido Newtoniano y de fluido viscoelástico descrito por la ecuación de Criminale-Ericksen-Filbey (CEF) para el análisis de flujos en las geometrías de placas paralelas (PP), expansión asimétrica plana 1:2 (S12) y contracción plana 4:1 (C41).

La simulación de flujos de fluido Newtoniano se realizó utilizando una formulación clásica *velocidad-presión* (formulación MEF1) y la formulación *velocidad-presión-tensión-gradiente de*

Título de la Tesis: “Solución numérica de flujos de procesamiento de polímeros”

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Medeiros Cardozo, Nilo Sergio

Directores: Dr. Enrique Vallés - Dr Lidia Quinzani

velocidad resultante de la aplicación del DEVSSG (formulación MEF2). Con la formulación MEF1 se analizaron flujos en un rango amplio de Re (≤ 500). En las tres geometrías analizadas el método ha presentado muy buena convergencia y se ha logrado predecir fenómenos como la aparición de la capa límite de tensión (flujo de entrada entre PP) y la variación del tamaño de los vórtices (S12 y C41) con el aumento del Re . En todos los casos los resultados obtenidos presentan muy buena concordancia con datos experimentales y numéricos reportados en la literatura. En el caso de la geometría C41, el método ha permitido la predicción del segundo vórtice (que aparece para Re cercanos a 200). Los cálculos con MEF2 estuvieron limitados a valores bajos de Re (≤ 1) debido a la limitación impuesta por la computadora utilizada en el número total de grados de libertad. En este rango de Re los resultados de MEF2 presentaron muy buena concordancia con los de MEF1, indicando que MEF2 describe muy bien el límite de comportamiento Newtoniano, lo que constituye una condición necesaria para que un determinado método pueda ser utilizado con éxito en el tratamiento de flujos de fluidos viscoelásticos. Por otro lado, los buenos resultados encontrados con estas formulaciones demuestran que las rutinas básicas del simulador han sido implementadas de manera eficiente.

En el análisis de flujos con el modelo de CEF se consideraron por separado los casos particulares de fluido Newtoniano Generalizado (FNG) y de Fluido de segundo Orden (FSO) como así también el caso general de coeficientes variables.

Se analizó el flujo de FNG entre PP y en la contracción C41, utilizando las formulaciones MEF1 y MEF2. Con MEF1 se consideraron flujos isotérmico y no-isotérmicos, analizando la influencia de la inercia y de la dependencia de la viscosidad con la velocidad de deformación y la temperatura sobre la velocidad de convergencia del método. En este estudio se utilizaron valores de Re , del coeficiente de la ley de la potencia y de $\Delta H/R$ representativos de los encontrados en el procesamiento de polímeros. En todo el rango de valores estudiado se logró convergencia y buena concordancia con los datos disponibles en la literatura. Como en el caso del FN, los flujos isotérmicos a bajos Re se analizaron también con la formulación MEF2. Se observó que también en el caso del FNG los resultados encontrados con MEF2 y la velocidad de convergencia de esta formulación son coincidentes con los de MEF1.

El estudio de flujos con los modelos de FSO y de CEF con coeficientes variables se hizo utilizando la geometría C41 y las formulaciones MEF2 y MEF3. Esta última es una formulación *velocidad-presión-gradiente de velocidad desacoplada*, que sólo se puede aplicar a ecuaciones constitutivas en las cuales la tensión se puede escribir como una función explícita de la velocidad.

Título de la Tesis: “Solución numérica de flujos de procesamiento de polímeros”

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Medeiros Cardozo, Nilo Sergio

Directores: Dr. Enrique Vallés - Dr Lidia Quinzani

Para el FSO el nivel máximo de elasticidad que se pudo analizar con MEF3 fue $We_{lim} = 0.7$. Además se ha encontrado que este límite disminuye con el refinamiento de la grilla. Con la formulación MEF2 se obtuvo $We_{lim} \approx 0.9$, pero los resultados parecen indicar que el valor de We_{lim} aumenta con el refinamiento de la grilla. En el caso del CEF los límites de convergencia fueron $We_{lim} = 0.3$ para MEF3 y $We_{lim} = 3.5$ para MEF2. También en este caso We_{lim} aumenta con el refinamiento de la grilla para MEF2 y disminuye para MEF3. Los problemas de convergencia encontrados con MEF3 son comunes en la literatura y se pueden relacionar con el carácter mixto (elíptico-hiperbólico) de la forma final de la ecuación de momento en esta formulación. Las tendencias encontradas en los estudios con la formulación MEF2 justifican estudios adicionales sobre la utilización de este método.