

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

**SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS MULTICAMADAS DE POLÍMEROS
VISCOELÁSTICOS À BASE DE POLI(ETILENO TEREFALATO)**

Autor: Roberto Antônio de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Chang Tien Kiang

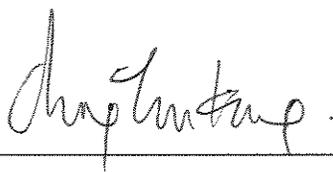
Dissertação apresentada à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

31 / Maio - 1996

CAMPINAS - SP

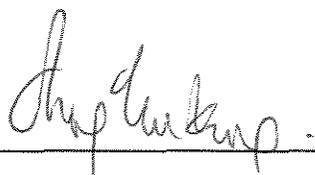


Esta versão corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado apresentada por Roberto Antônio de Oliveira e aprovada pela banca examinadora em 31 de maio de 1996.

A handwritten signature in cursive script, appearing to read 'Chang Tien Kiang', positioned above a horizontal line.

Prof. Dr. Chang Tien Kiang

Dissertação defendida e aprovada, em 31 de maio de 1996, pela banca
examinadora constituída por:



Prof. Dr. Chang Tien Kiang

Orientador



Dr. Ronald Krauss



Prof. Dr. Sergio Persio Ravagnani

A todos de minha família,
pelo imenso carinho e apoio constante.

AGRADECIMENTOS

Ao prof. Dr. Chang Tien Kiang, pela orientação e auxílio no desenvolvimento deste trabalho.

Ao Eng^o. Nilson Andreis Witkoski pelas interessantes discussões sobre o processo de coextrusão.

À Rhodia-Ster Filmes pelo fornecimento de polímeros utilizados neste trabalho.

À FAPESP pelo auxílio-pesquisa recebido através do projeto 94/5367-7.

Ao CNPq pela ajuda na forma de bolsa concedida.

Às analistas de sistemas Andréia e Maria Luíza pelo auxílio na instalação de softwares na estação de trabalho.

Ao técnico Disney pelo auxílio prestado nos laboratórios.

Aos colegas do Dept^o. de Tecnologia de Polímeros: Ana Paula, Andréa, Betina, Carla, Juliane, Karim, Kitaoka, Maria Alice, Paula, Rodrigo, Rosana, Ruth, Sandro e Vera, pela companhia e amizade.

Aos amigos da residência "P.S.": Diego, Hosiberto e Jorge pelos momentos alegres, enormes em qualidade. E aos novatos Alexandre e Cleber pelo companheirismo.

A todos amigos pelos momentos prazerosos de descontração compartilhados.

Enfim, meus sinceros agradecimentos a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho.

RESUMO

Estudou-se os escoamentos multicamadas de polímeros no processo de fabricação de filmes planos. As soluções numéricas das equações de conservação juntamente com equações constitutivas foram obtidas pelo método de elementos finitos, utilizando o pacote comercial “Polyflow”.

Especificamente, analisou-se através de simulação numérica o processo de fabricação de filmes planos, contendo três camadas de polímeros (A, B e C) à base de poli(etileno tereftalato) (PET). A caracterização reológica das camadas realizou-se em fluxos de cisalhamento e elongacional, obtendo-se as propriedades materiais: viscosidade de cisalhamento, viscosidade elongacional e módulos dinâmicos. Estes dados experimentais permitiram o ajuste de equações constitutivas dos modelos de fluidos newtonianos generalizados e de fluidos viscoelásticos.

Estudou-se diversas variáveis de processo, tais como ângulo de introdução das camadas, velocidades das camadas e geometria do canal no ponto de confluência das camadas, através de simulações bidimensionais e tridimensionais. Analisou-se também, o comportamento da interface entre as camadas que pode ocasionar o surgimento de instabilidades nesta região.

Os modelos atuais, entretanto, apresentaram limitações para a simulação do processo de coextrusão em três dimensões, devido à incapacidade de descrever inequivocamente a região de contato da interface móvel com paredes rígidas.

ABSTRACT

Multilayer polymer flow in flat sheet production process was studied. Numerical solutions of conservation and constitutive equations were obtained by a commercial finite element code, "Polyflow".

More specifically, the flat sheet production process was applied to three layers of polymers based on polyethylene terephthalate (A, B and C) by using numerical simulations. The rheological characterization of these layers was obtained in extensional and shear flows, in order to measure the material properties: elongational and shear viscosities and complex moduli. These experimental data allowed the adjustment of constitutive equations of generalized Newtonian and viscoelastic fluid models.

Many process variables were studied, including layers introduction angle, velocity and channel geometry of layer confluence region, in bidimensional and tridimensional simulations. The layers interfacial behavior, which can lead to instabilities in these regions, was also studied.

Nevertheless, the current models showed limitations in the coextrusion process simulation in three dimension, due to their inability to describe the contact regions of the mobile interface on the walls.

NOMENCLATURA

\overline{A}	função tensorial
A	área do disco
a	deslocamento horizontal dos centros dos discos do reom. ortogonal
A	índice para a camada A
a_T	fator de deslocamento horizontal da curva de viscosidades
B	altura do canal da caixa de coextrusão
B	índice para a camada B
B'	altura equivalente do canal da caixa de coextrusão
C	índice para a camada C
C_p	Calor específico do polímero
\overline{C}_T	tensor de deformação Cauchy-Green
\overline{C}_T^{-1}	tensor de deformação de Finger
$d_{crit.}$	razão de espessuras críticas
D	diâmetro do capilar
D_i	diâmetro do disco inferior
D_i	vetor diretor de deslocamento
D_s	diâmetro do disco superior
D_{zz}	componente elongacional do tensor taxa de deformação
E	Parâmetro material
E_s	eixo superior
F_{escor}	Parâmetro material
\overline{F}_t	tensor gradiente de deformação relativa
\overline{f}_n	componente normal do vetor força
\overline{f}_s	componente tangencial do vetor força
F_x	componente elástica da força medida pelo reômetro ortogonal

F_y	componente viscosa da força medida pelo reômetro ortogonal
G'	módulo de armazenamento
G''	módulo de perda
\bar{g}	vetor gravidade
h	abertura da fiação
H	altura do canal da caixa de coextrusão
h	grau de liberdade geométrico
i	índice
\bar{I}	tensor unitário
I_1	primeiro invariante do tensor taxa de deformação
I_2	segundo invariante do tensor taxa de deformação
j	índice
K	índice de consistência do cisalhamento
L	comprimento do capilar
L	comprimento característico
L	índice de consistência elongacional
m	índice de consistência do cisalhamento
$m(t - t')$	função de memória do fluido
M	número de Mach
\bar{n}	vetor normal
n	índice de potências da viscosidade de cisalhamento
N_1	1ª diferença de tensão normal
N_2	2ª diferença de tensão normal
p	pressão
P_0	pressão aplicada na entrada do capilar
q	fluxo de calor
Q	vazão volumétrica do fluido

q_0	calor inicial
R	raio do disco inferior
Re	número de Reynolds
r	raio do disco superior
r	razão da viscosidade newtoniana pela viscosidade total
R_0	raio do capilar
R_1	raio do reservatório do reômetro capilar
S	parâmetro de evolução
S_{final}	valor final do parâmetro de evolução
$S_{inicial}$	valor inicial do parâmetro de evolução
\bar{S}_t	tensor dependente da deformação
t	índice de potências da viscosidade alongacional
t'	tempo passado
T	temperatura
t	tempo
tr	traço
U	componente da velocidade na direção x
U	energia interna
V	componente da velocidade na direção y
\bar{v}	vetor velocidade
\bar{v}_A	velocidade média de escoamento da camada A
\bar{v}_B	velocidade média de escoamento da camada B
\bar{v}_C	velocidade média de escoamento da camada C
\bar{v}_n	componente normal do vetor velocidade
\bar{v}_s	componente tangencial do vetor velocidade
v_x	componente da velocidade na direção x
v_y	componente da velocidade na direção y

v_z	componente da velocidade na direção z
\bar{x}	vetor posição
z	componente do vetor posição
W	largura do canal da caixa de coextrusão
W^*	largura equivalente da secção transversal da caixa de coextrusão
We	número de Weissenberg

Símbolos Gregos

ν_1	coeficiente de primeira diferença de tensão normal
ν_2	coeficiente de segunda diferença de tensão normal
σ_{xy}	componente de cisalhamento do tensor de tensões
$\bar{\tau}_1$	componente viscoelástica do tensor de tensões
$\bar{\tau}_2$	componente viscosa do tensor de tensões
$\bar{\tau}_1^{(1)}$	derivada convectiva superior do tensor de tensões
$\bar{\tau}_{1(1)}$	derivada convectiva inferior do tensor de tensões
ϕ_1	função escalar adimensional
ϕ_2	função escalar adimensional
$\bar{\nabla}$	gradiente
δS	incremento do parâmetro de evolução
$\dot{\gamma}$	tensor taxa de deformação
$\dot{\gamma}$	taxa de cisalhamento
$\dot{\epsilon}$	taxa de alongação
$\bar{\tau}$	tensor de tensões

ψ	deformação adimensional
ρ	massa específica
ω	frequência (velocidade angular)
α	parâmetro material do modelo de Giesekus
α	razão de contração do escoamento
ε	parâmetro material do modelo de Phan Thien-Tanner
ξ	parâmetro material do modelo de Phan Thien-Tanner
λ	tempo de relaxação
η	viscosidade
μ	viscosidade newtoniana
$ $	norma
η_e	viscosidade alongacional
η_o	viscosidade no patamar newtoniano
η_∞	viscosidade a taxa de cisalhamento infinita
Δp	perda de carga
η_s	viscosidade de cisalhamento
τ_x	componente elástica da tensão
τ_y	componente viscosa da tensão
τ_w	tensão de cisalhamento na parede do canal de escoamento

LISTA DE TABELAS

	Página
Tabela 2.2.2.1 - Modelos Viscoelásticos Diferenciais	23
Tabela 2.2.3.1 - Modelos Viscoelásticos Integrais	28
Tabela 5.1.1.I - Valores experimentais de Módulos de armazenamento (G') e perda (G'') obtidos para a camada A ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	55
Tabela 5.1.1.II - Valores experimentais de Módulos de armazenamento (G') e perda (G'') obtidos para a camada B ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	56
Tabela 5.1.1.III - Valores experimentais de Módulos de armazenamento (G') e perda (G'') obtidos para a camada C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	56
Tabela 5.1.1.IV - Valores de viscosidade medidos para a camada A ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	57
Tabela 5.1.1.V - Valores de viscosidade medidos para a camada B ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	57
Tabela 5.1.1.VI - Valores de viscosidade medidos para a camada C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	58
Tabela 5.1.1.VII - Equações da Lei de Potências para a viscosidade elongacional ajustadas para as camadas A, B e C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	58
Tabela 5.1.2.I - Equações constitutivas ajustadas para as camadas A, B e C	65
Tabela 5.1.2.II - Parâmetros ajustados para o modelo de Bird-Carreau ($T=280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	65
Tabela 5.1.2.III - Parâmetros dos modelos viscoelásticos diferenciais	

ajustados para a camada A ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	66
Tabela 5.1.2.IV - Parâmetros dos modelos viscoelásticos diferenciais ajustados para a camada B ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	66
Tabela 5.1.2.V - Parâmetros dos modelos viscoelásticos diferenciais ajustados para a camada C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	66
Tabela 5.1.2.VI - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada propriedade material específica da camada A ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	67
Tabela 5.1.2.VII - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada propriedade material específica da camada B ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	67
Tabela 5.1.2.VIII - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada propriedade material específica da camada C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	67
Tabela 5.1.2.IX - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada camada considerando a contribuição conjunta dos dados das três propriedades materiais, priorizando a viscosidade elongacional ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	68
Tabela 5.1.2.X - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada camada considerando a contribuição conjunta dos dados das três propriedades materiais, priorizando a viscosidade em cisalhamento ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)	68

LISTA DE FIGURAS

	Página
Fig. 2.1.1 - Processo de coextrusão para produção de filmes planos	5
Fig. 2.1.2 - Tipos de feira de coextrusão: “Feedblock” (a) e “multi-manifold” (b)	7
Fig. 2.1.3 - Defeitos observados devido a instabilidades interfaciais (a) e encapsulamento de camadas (b)	9
Fig. 2.3.1 - Remeshing tridimensional	34
Fig. 3.2.2.1 Vistas superior e lateral dos discos do reômetro ortogonal.	40
Fig. 4.1.1 - Aproximação tridimensional da caixa de coextrusão	45
Fig. 4.1.2 - Seção do canal principal do “feedblock” e a aproximação retangular	47
Fig. 4.1.3 - Seção transversal equivalente para as camadas A e C	47
Fig. 4.1.4 - Vista lateral da caixa de coextrusão	48
Fig. 5.1.1.I - Dados experimentais de viscosidade de cisalhamento em função da taxa de cisalhamento para as camadas A, B e C à 280 °C	53
Fig. 5.1.1.II - Dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda em função da frequência para a camada A à 280 °C	53
Fig. 5.1.1.III - Dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda em função da frequência para a camada B à 280 °C	54
Fig. 5.1.1.IV - Dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda em função da frequência para a camada C à 280 °C	54
Fig. 5.1.1.V - Dados experimentais de viscosidade elongacional em função da taxa de elongação para as camadas A, B e C à 280 °C	55

Fig. 5.1.2.1 - Comparação dos módulos de armazenamento obtidos através do reômetro ortogonal para as três camadas com dados da literatura para um polímero de PET.	63
Fig. 5.1.2.I Ajuste do modelo Bird-Carreau através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A	69
Fig. 5.1.2.II Ajuste do modelo de Bird-Carreau através de dados experimentais de viscosidade em cisalhamento para a camada B	69
Fig. 5.1.2.III Ajuste do modelo de Bird-Carreau através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada C	70
Fig.5.1.2.IV Ajuste proporcionado aos modelos viscoelásticos diferenciais (Maxwell, Oldroyd-B, Giesekus e Phan Thien-Tanner) através de dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda	70
Fig. 5.1.2.V Ajuste proporcionado aos modelos viscoelásticos diferenciais através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento	71
Fig. 5.1.2.VI Ajuste proporcionado aos modelos viscoelásticos diferenciais através de dados experimentais de viscosidade elongacional	71
Fig. 5.1.2.VII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada A	72
Fig. 5.1.2.VIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada B	72
Fig. 5.1.2.IX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de módulos de armazenamento e	

perda para a camada C	73
Fig. 5.1.2.X Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A	73
Fig. 5.1.2.XI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada B	74
Fig. 5.1.2.XII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada C	74
Fig. 5.1.2.XIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada A	75
Fig. 5.1.2.XIV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada B	75
Fig. 5.1.2.XV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada C	76
Fig. 5.1.2.XVI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada A, priorizando η_e	76
Fig. 5.1.2.XVII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada B, priorizando η_e	77
Fig. 5.1.2.XVIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazenamento e	

perda para a camada C, priorizando η_e	77
Fig. 5.1.2.XIX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A, priorizando η_e	78
Fig. 5.1.2.XX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada B, priorizando η_e	78
Fig. 5.1.2.XXI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada C, priorizando η_e	79
Fig. 5.1.2.XXII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada A, priorizando η_e	79
Fig. 5.1.2.XXIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada B, priorizando η_e	80
Fig. 5.1.2.XXIV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada C, priorizando η_e	80
Fig. 5.1.2.XXV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A, priorizando η_s	81
Fig. 5.1.2.XXVI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada B, priorizando η_s	81
Fig. 5.1.2.XXVII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a	

camada C, priorizando η_s	82
Fig. 5.1.2.XXVIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada A, priorizando η_s	82
Fig. 5.1.2.XXIX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada B, priorizando η_s	83
Fig. 5.1.2.XXX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada C, priorizando η_s	83
Fig. 5.1.2.XXXI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada A, priorizando η_s	84
Fig. 5.1.2.XXXII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada B, priorizando η_s	84
Fig. 5.1.2.XXXIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada C, priorizando η_s	85
Fig. 5.2.I - Malha de elem. finitos em torno da entrada C à 30° (Viscoelástico).	92
Fig. 5.2.II - Malha de elem. finitos em torno da entrada C à 30° (Newtoniano)	92
Fig. 5.2.III - Malha de elem. finitos em torno da entrada C à 90° (Visc.)	93
Fig. 5.2.IV - Linha de corrente (L.C.) na interface BC com a entr. C à 30° (Viscoelástico)	93

Fig. 5.2.V - Linha de corrente (L.C.) na interface BC com a entr. C à 30° (Newt.)	94
Fig. 5.2.VI - Linha de corrente na interface BC com a entr. C à 90°	94
Fig. 5.2.VII - Comp. elong. de $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. C à 30° (Visc.)	95
Fig. 5.2.VIII - Comp. elong. de $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. C à 30° (Newt.)	95
Fig. 5.2.IX - Compon. elong. de $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. C à 90°.	96
Fig. 5.2.X - Taxa de cisalham. $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. à 30° (Visc.)	96
Fig. 5.2.XI - Taxa de cisalham. $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. à 30°	97
Fig. 5.2.XII - Taxa de cisalham. $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entrada à 90°	97
Fig. 5.2.XIII - Veloc. v_z na linha de corrente da interface BC com entr. C à 30° (Visc.)	98
Fig. 5.2.XIV - Veloc. v_z na linha de corrente da interface BC com entr. C à 30° (Newt.)	98
Fig. 5.2.XV - Veloc. v_z na linha de corrente da interface BC com entr. C à 90°.	99
Fig. 5.2.XVI - Veloc. v_x na linha de corrente da interface BC com entr. de C à 30°	99
Fig. 5.2.XVII - Veloc. v_x na linha de corrente da interface BC com	

entr. C à 30°.	100
Fig. 5.2.XVIII - Veloc. v_x na linha de corrente da interface BC com entr. C à 90°.	100
Fig. 5.2.XIX - Perfil de velocidade v_x para entr. 30° (Newt.)	101
Fig. 5.2.XX - Perfil de velocidade v_x para entr. 30° (Viscoel.)	102
Fig. 5.2.XXI - Perfil de velocidade v_x para entr. 90° (Viscoel.)	103
Fig. 5.2.XXII - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de confluência das camadas para entr. 30° (Newt.)	104
Fig. 5.2.XXIII - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de confluência das camadas para entr. 30° (Viscoel.)	105
Fig. 5.2.XXIV - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de confluência das camadas para entr. 90° (Viscoel.)	106
Fig. 5.2.XXV - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de saída das camadas para entr. à 30° (Newt.)	107
Fig. 5.2.XXVI - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de saída das camadas para entr. à 30° (Viscoel.)	108
Fig. 5.2.XXVII - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de saída das camadas para entr. à 90° (Viscoel.)	109
Fig. 5.3.I - Malha de elem. finitos para o caso (1a)	116
Fig. 5.3.II - Malha de elem. finitos para o caso (1b)	116
Fig. 5.3.III - Malha de elem. finitos para o caso (1c)	116
Fig. 5.3.IV.a - Malha de elem. finitos para o caso (2a)	117
Fig. 5.3.IV.b - Malha de elem. finitos para o caso (2b)	117
Fig. 5.3.V.a - Velocidades de escoamento para o caso (1a)	118
Fig. 5.3.V.b - Camada A	118
Fig. 5.3.V.c - Camada B	118
Fig. 5.3.VI.a - Velocidades de escoamento para o caso (1b)	119

Fig. 5.3.VI.b - Camada A	119
Fig. 5.3.VI.c - Camada B	119
Fig. 5.3.VII.a - Velocidades de escoamento para o caso (1c)	120
Fig. 5.3.VII.b - Camada A	120
Fig. 5.3.VII.c - Camada B	120
Fig. 5.3.VIII.a - Velocidades de escoamento para o caso (2a)	121
Fig. 5.3.VIII.b - Camada C	121
Fig. 5.3.VIII.c - Camada A+B	121
Fig. 5.3.IX.a - Velocidades de escoamento para o caso (2b)	122
Fig. 5.3.IX.b - Camada C	122
Fig. 5.3.IX.c - Camada A+B	122
Fig. 5.3.X.a - Linhas de corrente para o caso (1a)	123
Fig. 5.3.X.b - Valores da velocidade (V_x) ao longo da linha de corrente	123
Fig. 5.3.XI.a - Linhas de corrente para o caso (1b)	124
Fig. 5.3.XI.b - Valores da velocidade (V_x) ao longo da linha de corrente	124
Fig. 5.3.XII.a - Velocidades de escoamento para o caso (1c)	125
Fig. 5.3.XII.b - Valores da velocidade (V_x) ao longo da linha de corrente	125
Fig. 5.3.XIII.a - Camada A deformada (caso 1a)	126
Fig. 5.3.XIII.b - Corte 1	126
Fig. 5.3.XIII.c - Corte 2	126
Fig. 5.3.XIII.d - Corte 3	126
Fig. 5.3.XIV.a - Camada A deformada (caso 1b)	127
Fig. 5.3.XIV.b - Corte 1	127
Fig. 5.3.XIV.c - Corte 2	127
Fig. 5.3.XIV.d - Corte 3	127
Fig. 5.3.XV.a - Camada A deformada (caso 1c)	128
Fig. 5.3.XV.b - Corte 1	128

Fig. 5.3.XV.c - Corte 2	128
Fig. 5.3.XV.d - Corte 3	128
Fig. 5.3.XVI.a - Camada A deformada (caso 2a)	129
Fig. 5.3.XVI.b - Corte 1	129
Fig. 5.3.XVI.c - Corte 2	129
Fig. 5.3.XVI.d - Corte 3	129
Fig. 5.3.XVII.a - Camada A deformada (caso 2b)	130
Fig. 5.3.XVII.b - Corte 1	130
Fig. 5.3.XVII.c - Corte 2	130
Fig. 5.3.XVII.d - Corte 3	130
Fig. 5.3.XVIII - Malha de elem. finitos para os casos 3a, 3b e 3c	131
Fig. 5.3.XIX.a - Velocidades de escoamento para o caso (3a)	132
Fig. 5.3.XIX.b - Camada A'	132
Fig. 5.3.XIX.c - Camada B'	132
Fig. 5.3.XX.a - Velocidades de escoamento para o caso (3b)	133
Fig. 5.3.XX.b - Camada A'	133
Fig. 5.3.XX.c - Camada B'	133
Fig. 5.3.XXI.a - Velocidades de escoamento para o caso (3c)	134
Fig. 5.3.XXI.b - Camada A'	134
Fig. 5.3.XXI.c - Camada B'	134
Fig. 5.3.XXII.a - Camada B' deformada (caso 3a)	135
Fig. 5.3.XXII.b - Corte 1	135
Fig. 5.3.XXII.c - Corte 2	135
Fig. 5.3.XXIII.a - Camada B' deformada (caso 3b)	136
Fig. 5.3.XXIII.b - Corte 1	136
Fig. 5.3.XXIII.c - Corte 2	136
Fig. 5.3.XXIV.a - Camada B' deformada (caso 3c)	137

Fig. 5.3.XXIV.b - Corte 1

137

Fig. 5.3.XXIV.c - Corte 2

137

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO DA LITERATURA	5
2.1 Aspectos Gerais	5
2.2 Escoamentos de Polímeros	15
2.2.1 Modelos de Fluidos Newtonianos Generalizados	18
2.2.2 Modelos de Fluidos Viscoelásticos Diferenciais	20
2.2.2.1 Modelos de Maxwell Conv. Sup. e Oldroyd-B...	23
2.2.2.2 Modelo de White-Metzner	24
2.2.2.3 Modelo P.T.T. e Giesekus-Leonov	25
2.2.3 Modelos de Fluidos Viscoelásticos Integrais	26
2.2.3.1 Modelos de Maxwell e Oldroyd-B	28
2.2.3.2 Modelo de Doi-Edwards	29
2.2.3.3. Modelo KBKZ	29
2.3 Técnicas Numéricas Aplicadas na Solução de Problemas de Escoamento	32
3. MATERIAIS E MÉTODOS	36
3.1 Materiais	36
3.2 Métodos	36
3.2.1 Medidas das Viscosidades de Cisalhamento e Elongacional	37
3.2.2 Medida dos Módulos Dinâmicos	39
3.2.2.1 Procedimento experimental	41

4. APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA	44
4.1 Geometria de Escoamento na Caixa de Coextrusão.....	44
4.2 Condições de Contorno.....	48
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	51
5.1 Características das camadas do escoamento.....	51
5.1.1 Caracterização Reológica.....	51
5.1.2 Ajuste dos Modelos Constitutivos.....	59
5.2 Simulação Viscoelástica em 2-D.....	86
5.3 Simulação da Caixa de Coextrusão em 3-D.....	110
6. CONCLUSÕES	138
7. SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS	140

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1 - INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, o processo de coextrusão tem-se difundido amplamente entre as indústrias de produção de filmes e fibras multicamadas por se tratar de uma operação muito atrativa economicamente.

O processo de coextrusão surgiu no final da década de 60, devido à necessidade de produção de embalagens com brilho superficial. Notou-se que os produtos acondicionados em embalagens com estas características tinham maior aceitação dos consumidores, mas estas eram produzidas apenas por injeção, o que tornava elevado os custos de produção. Assim, experimentou-se produzir filmes com tais características através da laminação com um filme fino de poli(estireno) orientado, mas os custos de produção através deste novo sistema continuavam elevados e resultavam em muitos defeitos à altas velocidades de produção. Como solução para o problema, idealizou-se uma adaptação na fiação que produzia o filme comum sem brilho, de tal forma que uma corrente do poli(estireno) fundido fosse injetada sobre a camada fundida de filme, obtendo-se placas ou filmes bicomponentes de qualidade superior aos laminados. Este novo processo, denominado coextrusão, permitiu a fabricação de embalagens termoformadas com características similares às obtidas por injeção. Em poucos anos, o processo de coextrusão recebeu novas implementações e aperfeiçoamentos, surgindo inclusive, uma grande série de novas aplicações, tornando-se extremamente importante principalmente no ramo de embalagens [Finch, 1989].

O processo de coextrusão pode ser definido como a extrusão simultânea de duas ou mais camadas de polímeros provenientes de diferentes extrusoras em uma única fiação produzindo-se filmes multicamadas.

A capacidade de produção de filmes multicamadas através de uma única operação de processamento, aliada à possibilidade de combinação de propriedades de diferentes polímeros em uma mesma estrutura tornam o processo de coextrusão extremamente vantajoso.

Deve-se ressaltar também, que a coextrusão é economicamente mais viável que os processos convencionais para a produção de filmes multicamadas, pois permite a obtenção de produtos com maior aderência entre as camadas, filmes mais finos, enfim, produtos de qualidades finais melhores a custos inferiores.

A tecnologia da coextrusão, entretanto, não está livre de problemas. As características geométricas dos escoamentos envolvidos e as propriedades reológicas dos polímeros que formam um determinado sistema multicamadas, podem ocasionar problemas de instabilidades interfaciais e o encapsulamento das camadas do sistema. Estes fenômenos são bastante prejudiciais às qualidades ópticas e mecânicas do produto obtido.

Os fenômenos interfaciais são causados pelo surgimento de tensões na região onde as correntes fluidas se combinam. Assim, o conhecimento das condições as quais estas tensões são geradas permite a escolha adequada de sistemas a serem processados e o estabelecimento das condições ideais de processamento. O cálculo destas variáveis pode ser realizado por modelagem matemática e simulação dos escoamentos.

Para aumentar a capacidade preditiva das simulações do escoamento polimérico, é importante selecionar adequadamente modelos viscoelásticos que consigam representar realisticamente os fenômenos físicos encontrados em tal processo.

A seleção apropriada de um modelo viscoelástico é certamente uma das etapas mais importantes do processo de simulação de um escoamento

viscoelástico, pois polímeros com comportamentos similares em cisalhamento podem ser bastante distintos em características elongacionais. Deste modo, conforme a propriedade material enfocada na seleção de um modelo pode-se obter respostas comportamentais diferentes. Portanto, deve-se coletar tantos dados quanto possível sobre as propriedades do fluido. Neste trabalho são caracterizadas três camadas de polímeros PET, poli(etileno tereftalato), em reômetros ortogonal e capilar, obtendo-se valores de módulos dinâmicos, viscosidade de cisalhamento e viscosidade elongacional.

Os dados de viscosidade de cisalhamento caracterizam o fluido na presença de grandes deformações, enquanto que os módulos dinâmicos caracterizam o escoamento em pequenas deformações. Já a viscosidade elongacional é uma propriedade essencial na escolha de equações constitutivas, pois permite a estimativa do comportamento material frente às deformações extensionais sofridas pelo polímero.

A equação constitutiva foi selecionada e ajustou-se os seus parâmetros, em seguida realizou-se estudos de simulação de casos bidimensionais e tridimensionais, utilizando-se o programa “Polyflow”, o qual foi desenvolvido para estudos de escoamentos viscosos e viscoelásticos pela técnica de elementos finitos. Os casos simulados têm por objetivo investigar a influência da geometria do canal, onde as correntes fluidas se encontram, sobre os perfis de velocidade de escoamento das camadas e sobre a posição da interface; e, como estas informações podem ser utilizadas na previsão de instabilidades interfaciais e encapsulamento das camadas.

Atualmente, existem poucas informações sobre o processo de coextrusão no que se refere a instabilidades interfaciais e encapsulamento de camadas, sendo

que os trabalhos publicados são em sua maioria, de caráter experimental ou em geometrias bidimensionais, não enfocando o fenômeno de encapsulamento.

A carência de trabalhos publicados sobre a coextrusão é devido à elevada complexidade numérica encontrada na modelagem deste processo. A maior dificuldade é a determinação da localização da interface que separa as camadas adjacentes, pois a sua posição é a priori desconhecida. Este fato, origina problemas de caráter fortemente não-linear, mesmo quando os fluidos são newtonianos. O estudo dos escoamentos multicamadas viscoelásticos são ainda mais difíceis de serem realizados, pois as equações constitutivas viscoelásticas são também, em geral, não-lineares adicionando maiores complicações ao problema.

Este trabalho visa complementar os estudos realizados por Witkoski em 1996, incluindo a influência das características viscoelásticas dos polímeros nos escoamentos bidimensionais e tridimensionais na caixa de coextrusão.

2 - REVISÃO DA LITERATURA

2.1 - ASPECTOS GERAIS

O principal objetivo do processo de coextrusão é a obtenção de filmes, placas, garrafas etc, multicamadas, através da extrusão simultânea de correntes de polímeros fundidos, provenientes de diferentes extrusoras, em uma única matriz que é responsável pela distribuição das camadas fluidas, de acordo com as características desejadas para o produto final. A figura 2.1.1 apresenta um esquema do processo de produção de filmes planos coextrudados.

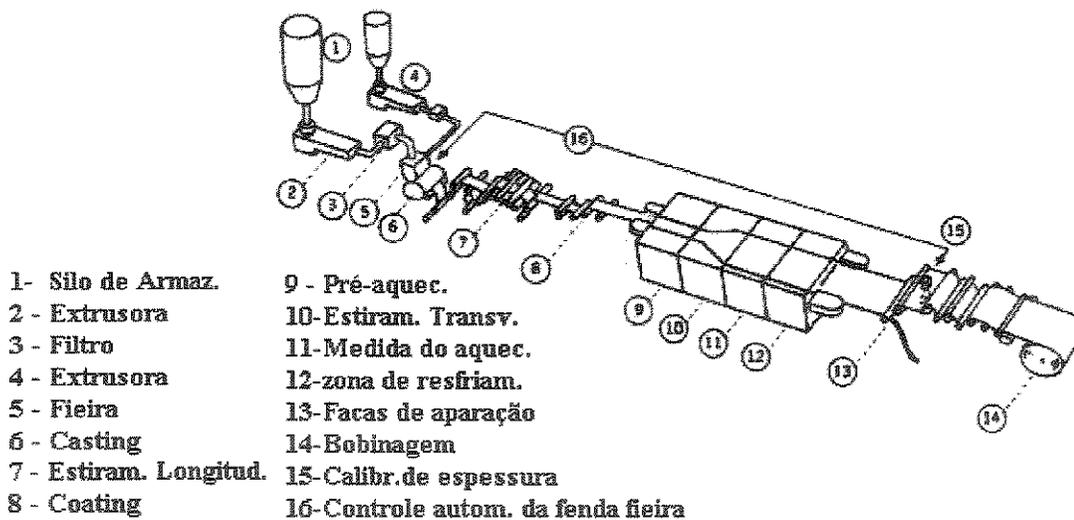


Fig. 2.1.1 - Processo de coextrusão para produção de filmes planos [Werner & Janocha, 1987.].

A coextrusão constitui-se em um processo economicamente mais vantajoso que processos convencionais de laminação. As características que a tornam atrativa são a possibilidade de conjugar as propriedades de diferentes polímeros em um mesmo produto, obtido através de uma única operação de processamento,

reduzindo os custos do processo em relação à produção individual das camadas e posterior laminação no produto de interesse. Em adição ao caráter econômico, o processo de coextrusão permite a obtenção de filmes muito finos com excelente adesão entre as camadas.

As indústrias atualmente, necessitam de produtos com novas propriedades, como por exemplo a indústria de embalagens. Com o objetivo de manter intactas a qualidade do produto que chega ao consumidor, as indústrias de embalagens devem estar em constante evolução para atender as exigências do mercado sem descuidar da relação custo/benefício. Neste contexto, o processo de coextrusão é extremamente interessante, devido a sua flexibilidade de operação para alterar estruturas multicamadas e conjugar propriedades de polímeros.

Desta forma, obtém-se embalagens com excelentes propriedades, como barreira à umidade, luz, oxigênio, gordura e aromas, selabilidade, imprimibilidade, coeficiente de atrito, resistência à perfuração etc, através da combinação em uma única estrutura multicamada de resinas adequadas.

O processo pelo qual as diversas camadas combinam-se é responsável pelo sucesso da coextrusão. Quando dois ou mais polímeros são coextrudados, é importante produzir interfaces planas entre as camadas, pois uma interface irregular é prejudicial à qualidade do produto, em relação as propriedades ópticas e mecânicas, devido a intermistura das camadas.

Existem, basicamente, duas categorias de feira que fazem a combinação das múltiplas camadas, “feedblock” e “multi-manifold” [Perdikoulías e col., 1991]. O modelo “feedblock” combina todas as camadas antes que entrem na feira, a qual distribui todas elas conjuntamente. O modelo “multi-manifold” distribui cada camada separadamente e as combina na saída da feira.

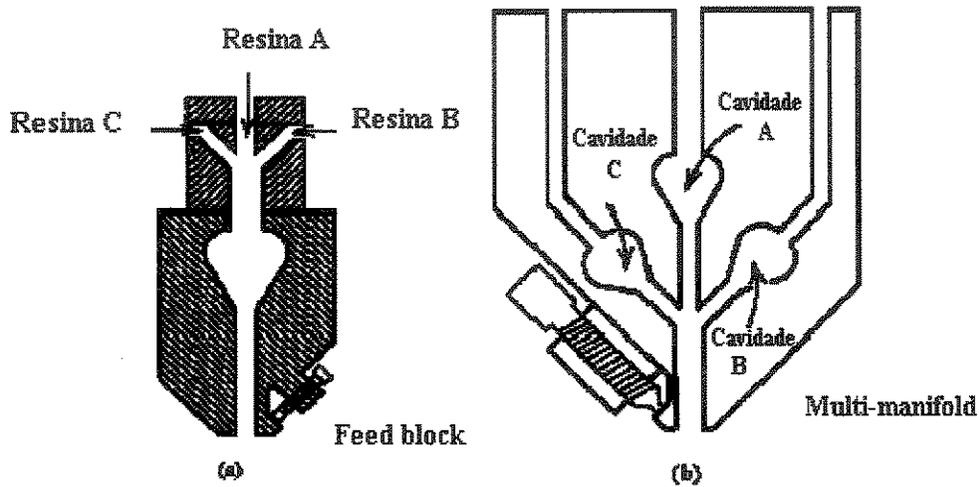


Fig. 2.1.2 - Tipos de feira de coextrusão: “Feedblock” (a) e “Multi-manifold” (b) [Park e colab., 1987].

No ponto onde as correntes se unem é formada uma região de transição, na qual os perfis de velocidade são rearranjados, sendo diferente daqueles encontrados nas correntes individuais e, depende fundamentalmente das diferenças de propriedades reológicas e/ou condições em que os materiais são processados, tais como geometria dos canais, razão de espessura das camadas, temperatura das correntes fluidas, etc.

O desbalanceamento de forças verificado nestas regiões de transição, acredita-se ser a causa de instabilidades na interface das correntes fundidas em escoamento, similarmente a instabilidades observadas em outros sistemas físicos [Wilson, G.M.].

O fenômeno físico de instabilidade interfacial para dois fluidos newtonianos superpostos em escoamento Poiseuille é explicado por Wilson. Ele propôs que a instabilidade surge quando existe uma descontinuidade na taxa de cisalhamento interfacial. Assim, quando uma perturbação ao sistema faz a interface mover-se de sua posição inicial e desde que, as taxas de cisalhamento

sobre cada lado da interface não são iguais, a interface perturbada moverá de volta em direção a sua posição inicial, projetando-se sobre o outro lado da interface. Agora, a interface está sobre o lado oposto e novamente mudará sua direção, tentando retornar à sua posição original, projetando-se com uma intensidade maior. A taxa a qual estas projeções aumentam ou diminuem, depende das razões de viscosidade e de espessura das camadas, estando relacionada diretamente a taxa de crescimento da onda interfacial. Este fenômeno é verificado quando a posição da taxa de cisalhamento zero (isto é, a posição de máxima velocidade) situa-se na camada menos viscosa; o efeito contrário é observado, ou seja, a perturbação interfacial será estabilizada, no caso em que a taxa de cisalhamento zero situar-se no fluido menos viscoso, desde que a projeção diminuirá permanentemente até a interface retornar a sua posição não perturbada.

No caso de polímeros fundidos, o problema é adicionalmente complicado, desde que a viscosidade é uma função da taxa de cisalhamento e de tensões normais, devido a elasticidade presente.

Outro tipo de fenômeno interfacial observado nos escoamentos multicamadas é o denominado encapsulamento de camadas, que caracteriza-se pela deformação ou deslocamento da interface, não havendo a formação de ondulações na região interfacial, predominante na instabilidade interfacial propriamente dita. A figura 2.1.3 mostra os fenômenos de instabilidade interfacial e o encapsulamento de camadas que podem ser gerados devido à um sistema de coextrusão deficiente.

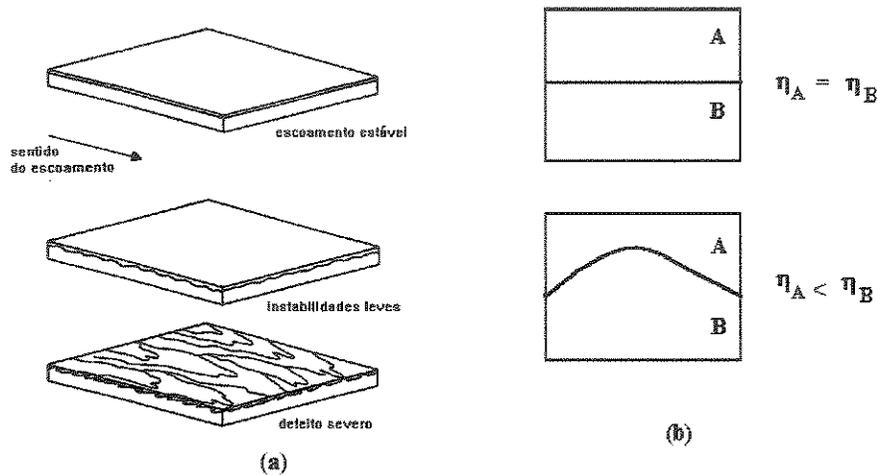


Fig. 2.1.3 - Defeitos observados devido a instabilidades interfaciais [Schrenk & Bradley, 1978] (a) e encapsulamento de camadas [Southern & Ballman, 1975] (b)

Southern e Ballman realizaram um estudo sobre a forma da interface para escoamentos bicomponentes em um tubo capilar. Eles estudaram a influência da razão de viscosidade, da razão de elasticidade e também da relação L/D (comprimento-diâmetro) do capilar. Verificaram que o componente de menor viscosidade envolve o componente de viscosidade mais elevada, encapsulando-o. Em testes com capilares de comprimento muito longo a taxas de cisalhamento acima do ponto onde as curvas de viscosidade dos componentes se cruzam, observaram um duplo comportamento da interface, ou seja, na região próxima a parede, onde a taxa de cisalhamento é máxima, o componente B encapsula A e, em direção ao centro do capilar, onde a taxa de cisalhamento tende a zero, o comportamento é inverso, com A encapsulando B. Este resultado demonstra que o comportamento pseudoplástico dos materiais deve ser levado em consideração na escolha dos materiais coextrudados, pois a razão de viscosidade dos polímeros controla a forma da interface ao longo de cada ponto desta. Os estudos com pares de componentes com viscosidades similares, mas características elásticas

significativamente diferentes, evidenciadas por valores medidos de primeira diferença de tensão normal, indicaram uma influência muito pequena desta propriedade sobre a forma da interface. Contudo, o fato mais importante observado é que a interface deste sistema de elasticidade diferentes apresenta ondulações, diferentemente das interfaces planas observadas quando trabalhou-se com polímeros de viscosidade diferentes e elasticidades similares, demonstrando a influência da elasticidade sobre a instabilidade interfacial do sistema, embora não desloque consideravelmente a posição da interface. Southern e Ballman, também verificaram, que a relação L/D do capilar produz mudança significativa na forma da interface. Em capilares onde a razão L/D aproxima-se de 1, o componente de viscosidade mais elevada, que desloca-se mais lentamente, tende a ocupar mais que a metade da área do tubo. Assim, na entrada do capilar ocorre um movimento imediato da interface, com o objetivo de manter as vazões dos componentes iguais as da saída das extrusoras e conseqüentemente igualar a pressão aplicada nestes. Entretanto, este movimento é invertido em tubos onde a relação L/D é grande suficiente para permitir que o perfil de velocidade torne-se uniforme e outra vez sejam requeridas áreas iguais para a vazão dos componentes. Em casos extremos de tubos muito longos, o polímero de viscosidade mais baixa tende a encapsular completamente o mais viscoso.

A pressão para manter vazões iguais, provavelmente não produzirá o movimento da interface na parede do capilar, onde a velocidade é aproximadamente zero; assim fatores de mínima dissipação de energia, produzem a gradual inversão do encapsulamento, com o componente menos viscoso passando a envolver o polímero mais viscoso, pois o primeiro possui maior tendência de molhamento da parede do tubo.

Em relação aos fenômenos de encapsulamento, pelos resultados obtidos, pode-se afirmar que a causa principal são as diferenças de viscosidade entre os polímeros. Outro fenômeno de instabilidade do escoamento observado é a “fratura do fundido” que refere-se a obtenção de extrudados de superfícies fortemente ásperas e rugosas. A fratura do fundido em um polímero simples é explicado como sendo devido a tensão de cisalhamento crítica atingida na parede da fieira, estando relacionado a fatores que afetam a “adesão-deslizamento” do polímero às paredes da fieira [Han & Shetty, 1978]. Os fenômenos de instabilidade interfacial, entretanto, necessitam de melhores esclarecimentos.

Han e Shetty realizaram experimentos com o objetivo de explicar as instabilidades interfaciais, em termos das propriedades reológicas dos polímeros envolvidos e das variáveis de processamento. Eles observaram que à partir de uma determinada vazão volumétrica havia o surgimento de irregularidades na interface dos polímeros, com o aparecimento de pequenos glóbulos do polímero da camada interna na saída da fieira (eles estudaram uma coextrusão em três camadas do tipo A-B-A). Uma vez atingida a instabilidade, o número de glóbulos observados, aumentavam com o acréscimo da taxa de escoamento. Os pesquisadores, então construíram gráficos da tensão de cisalhamento na parede da fieira, τ_w , em função da vazão, Q , sendo: $\tau_w = -\frac{\partial P}{\partial z} \frac{h}{2}$, em que h é a abertura da fieira e, $-\frac{\partial P}{\partial z}$ é o gradiente de pressão axial. Contudo, não chegaram a nenhuma conclusão à respeito de valores críticos de instabilidade. Porém, através de expressões teóricas calcularam a posição da interface e por sua vez, a tensão de cisalhamento interfacial, $\tau_{(yz)int} = \tau_w y_{int} / (h/2)$ e concluíram que para um determinado sistema polimérico, existe uma tensão de cisalhamento interfacial crítica, a qual inicia-se a instabilidade interfacial. Assim, conhecendo-se o valor

da tensão interfacial crítica, que é diretamente dependente da tensão de cisalhamento na parede, pode-se obter sistemas estáveis. Por exemplo, pode-se alterar a temperatura de extrusão do fundido, e por consequência reduzir a viscosidade e a tensão de cisalhamento na parede.

Han e Shetty também construíram diagramas relacionando razão de viscosidade e razão de primeira diferença de tensão normal, determinadas na parede da fieira que possibilitaram verificar as condições que produziriam regiões de instabilidade e estabilidade na interface das camadas. Estes diagramas de η_A/η_B versus $(\tau_{11} - \tau_{22})_A / (\tau_{11} - \tau_{22})_B$ com a relação de espessuras das camadas h_A/h_B como parâmetro, podem ser extremamente úteis para serem usados em guias de operação para prever interfaces estáveis quando dois ou mais polímeros são coextrudados. Todavia, estas relações não explicam claramente o fenômeno na interface, pois as propriedades materiais, como viscosidade e diferença de tensão normal são determinadas na parede da fieira e, ambas propriedades variam da parede para o centro. No presente, não existe nenhum caminho prático de medir propriedades reológicas na interface.

A conclusão que Han e Shetty chegaram é que a violação de condições críticas com respeito a razão de viscosidade e/ou de elasticidade, que são propriedades reologicamente independentes permitem o surgimento de instabilidade interfacial na coextrusão.

Schrenk e col. chegaram a conclusões similares a Han e Shetty, associando o surgimento de instabilidades interfaciais a uma tensão de cisalhamento interfacial crítica. Com o objetivo de determinar a causa das instabilidades interfaciais, Schrenk e col. investigaram as regiões de uma fieira de coextrusão onde estes fenômenos desenvolviam-se, sendo possíveis duas regiões:

- No canal onde ocorre a confluência dos polímeros. Região caracterizada por uma forte transição no perfil de velocidade com reajustes na localização da interface, quando porções de corrente da camada de fundido aceleram para velocidades elevadas enquanto outras porções desaceleram.
- No final da fieira. Esta região geralmente apresenta taxas e tensões de cisalhamento elevadas, quando a multicamada fundida é modelada à dimensão final antes de deixar a fieira.

Como resultado, observaram que as interfaces das camadas (no caso três camadas) permaneciam uniformes e claramente definidas na saída do “feedblock”; entretanto, no interior da fieira começavam a desenvolver distorções onduladas na interface. Este fato levou-os à hipótese que existe uma tensão de cisalhamento interfacial crítica.

Schrenk e col. também realizaram uma modelagem matemática do escoamento multicamada não-newtoniano paralelamente a um outro experimento de coextrusão de três camadas com um par de polímeros, para verificar quais variáveis no processo de coextrusão influenciavam mais a instabilidade do escoamento interfacial. Os resultados indicaram que em ambos, modelagem e experimento, as variáveis de processo que mais influenciavam foram:

- a) temperatura e viscosidade da camada externa,
- b) A razão de espessura da camada externa pela interna,
- c) As vazões utilizadas na extrusão,
- d) A abertura da fenda.

Verificaram também, através das condições na instabilidade incipiente, a existência de um valor aproximado para a “tensão de cisalhamento crítica”, independentemente este valor da variável que estava sendo variada. Entretanto, a teoria da existência de uma tensão de cisalhamento crítica tem gerado profundas

controvérsias em relação a sua veracidade. Trabalhos recentes de pesquisadores [Wilson, Su e Khomami], que baseiam suas investigações na teoria da estabilidade linear não sustentam a tese da existência de uma tensão crítica. Segundo os trabalhos destes pesquisadores, as instabilidades interfaciais originam-se do desbalanceamento de forças na região interfacial. Assim, como ocorre em outros sistemas físicos, as instabilidades interfaciais podem surgir a qualquer momento, desde que exista uma descontinuidade na taxa de cisalhamento interfacial.

A uniformidade da espessura de camadas coextrudadas, também foram estudadas por Dooley e Hilton, em 1993, contudo, analisaram a influência da geometria do canal ligado à saída do “feedblock”. Realizaram experimentos de coextrusão de duas camadas utilizando o mesmo polímero em ambas camadas, sendo diferenciadas pelo uso de pigmentos em uma das camadas. O mesmo polímero foi utilizado com o objetivo de minimizar ou evitar efeitos devido a diferença de viscosidade. Para garantir que o “feedblock” não produzia distorções na espessura das camadas, realizaram experimentos sem a colocação da fieira, obtendo-se como resultado camadas de espessuras uniformes. Utilizaram canais de formas geométricas quadradas, circulares e no formato de “gota”. As formas quadradas e em “gota” produziram substancial rearranjo das camadas, sendo que para as formas circulares o rearranjo foi muito menor. Este rearranjo de espessura observado para as geometrias citadas é explicado devido a presença de possíveis escoamentos secundários dos polímeros nos canais. Dooley e Hilton citam que algumas publicações [Grenn e col., 1956; Han, 1976] predizem escoamentos secundários ou perpendiculares a direção do escoamento principal, para escoamento de fluidos viscoelásticos em canais não-circulares. Contudo, estes escoamentos secundários são pequenos em comparação com o

escoamento principal do fluido, e portanto estes fenômenos paralelos são explicados por um desbalanceamento nas forças normais do canal.

Estes estudos são significantes, porque grande parte dos escoamentos laminares manipulados na indústria são produzidos através de canais de distribuição em formato de gotas. O trabalho realizado por Dooley e Hilton indica que embora selecione-se resinas condizentes em relação a viscosidade para coextrusão, podem ser obtidas camadas de espessuras não-uniformes quando as resinas são coextrudadas em canais com elevadas relações largura-altura. Assim, estes fenômenos podem ser minimizados pela escolha do polímero e da geometria adequada do canal.

2.2 - ESCOAMENTO DE POLÍMEROS

Os fluidos poliméricos por serem constituídos de macromoléculas de peso molecular muito elevado, não apresentam uma viscosidade constante ao longo de um escoamento, como é verificado para os fluidos newtonianos. Na realidade, os polímeros apresentam uma série de efeitos que os caracterizam como fluidos não-newtonianos, como por exemplo: apresentam a viscosidade dependente da taxa de cisalhamento, a presença de tensões normais, elevada resistência à deformação alongacional originando alta viscosidade alongacional e efeitos de memória associados com a elasticidade do material. Devido a este último efeito são classificados como fluidos viscoelásticos [Bird, 1987].

Alguns fenômenos de escoamento não são detectados baseando-se exclusivamente no comportamento newtoniano ou puramente viscoso dos polímeros, porém, podem ser importantes em aplicações de processamento. Por exemplo, os efeitos viscoelásticos são responsáveis por escoamentos complexos,

tais como regiões de recirculação em algumas geometrias, onde fluidos newtonianos apresentam comportamento estável. Estes escoamentos podem ter grande influência sobre a qualidade do produto processado, pois materiais em recirculação ou movimento lento possuem uma história de escoamento diferente das outras regiões do fluido, gerando em consequência produtos finais não-homogêneos e de qualidade inaceitáveis.

A simulação numérica, deste modo, proporciona uma importante ferramenta na previsão dos efeitos viscoelásticos, que em geral apresentam caráter não-linear, principalmente em situações de geometrias complexas.

Na modelagem e simulação de operações de processamento de polímeros, a consideração do tipo de escoamento que possui efeito preponderante no processo é tão importante quanto o tipo de polímero que está sendo processado. Os escoamentos característicos no processamento de polímeros são os escoamentos de cisalhamento e elongacional. O movimento relativo das partículas materiais é muito diferente entre estes dois tipos de escoamentos, produzindo informações materiais diferentes.

As equações que descrevem o escoamento dos fluidos, ou seja, a conservação de movimento, massa e energia, variam com a posição e o tempo [Bird, 1987] e para fluidos incompressíveis são:

- Equação da Continuidade: $\nabla \cdot \bar{v} = 0$ (2.2.1)

- Equação do movimento: $\rho \frac{D\bar{v}}{Dt} = -[\nabla \cdot \bar{\pi}] + \rho \bar{g}$ (2.2.2)

- Equação da energia: $\rho \frac{DU}{Dt} = -(\nabla \cdot q) - (\bar{\pi} : \nabla \bar{v})$ (2.2.3)

em que: \bar{v} = vetor velocidade

ρ = massa específica

$$\bar{\pi} = p\bar{I} + \bar{\tau}$$

p = pressão

$\bar{\tau}$ = tensor de tensões viscosas

\bar{I} = tensor unitário

U = energia interna

q = calor trocado

O tensor de tensões está associado a viscosidade do fluido e, a definição física de viscosidade é que esta é uma propriedade que representa a resistência do fluido a sofrer deformações. Todas as equações que relacionam o tensor de tensões às variáveis de deformação são denominadas equações constitutivas.

Portanto, para analisar e resolver um problema de escoamento é necessária a solução conjunta das equações de conservação (incluindo-se a equação da energia para escoamentos não-isotérmicos) e equações constitutivas, sujeitas às condições de contorno apropriadas.

A relação do tensor de tensões com as deformações sofridas em um determinado escoamento podem ser simples como é verificada nos escoamentos puramente viscosos, por outro lado, existem fluidos que apresentam comportamentos viscoelásticos bastante complexos. Por isso, foram desenvolvidos diversos tipos de equações constitutivas que vão desde equações simples que descrevem apenas a variação da viscosidade com a taxa de cisalhamento, até equações diferenciais e integrais com elevados índices de complexidade que tentam abranger toda a faixa de características do fluido em seu escoamento.

Entretanto, a opção pelo uso de uma determinada equação constitutiva não pode ser baseada apenas no fato que a mesma é capaz de englobar todos os fenômenos possíveis que um fluido em seu escoamento poderia experimentar, ou seja, uma equação extremamente complexa que represente desde os

comportamentos mais simples aos mais sofisticados. Mesmo porque não existe atualmente, modelos que permitam previsões realísticas em todos os tipos de deformação de qualquer fluido polimérico em particular. Este é o grande contraste com a mecânica dos fluidos newtonianos, onde a descrição matemática do escoamento está bem estabelecida através das equações de Navier-Stokes. Portanto, deve-se optar por equações que concentrem sua representatividade no fenômeno de escoamento ao qual a análise tem o seu principal interesse. Pois usando as equações adequadamente, pode-se evitar gastos extraordinários de tempo e memória computacional e obter ótimos resultados no processo de simulação.

Três classes de modelos agrupam equações constitutivas com características semelhantes [Bird, 1987; Cheremisinoff, 1990; Polyflow User's Manual, 1993; Larson, 1988]:

- Modelos de Fluidos Newtonianos Generalizados;
- Modelos Viscoelásticos Diferenciais;
- Modelos Viscoelásticos Integrais.

2.2.1. - MODELOS DE FLUIDOS NEWTONIANOS GENERALIZADOS

Este modelo é resultante de uma modificação mínima da equação constitutiva de fluidos Newtonianos, incorporando a idéia da viscosidade dependente da taxa de cisalhamento, possibilitando a descrição de curvas de viscosidades não-Newtonianas. Contudo, não pode descrever efeitos de tensão normal ou efeitos elásticos dependentes do tempo.

Para o caso de escoamentos de fluidos incompressíveis tem-se:

$$\text{- Fluido Newtoniano: } \tau = -\mu \dot{\gamma} \quad (2.2.1.1)$$

em que, μ é uma constante para uma dada temperatura, pressão e composição.

- Fluido Newtoniano Generalizado: $\bar{\tau} = -\eta \dot{\gamma}$ (2.2.1.2)

em que η é uma função dos escalares invariantes do tensor taxa de deformação $\dot{\gamma}$.

Para polímeros fundidos, a forma da função $\eta(\dot{\gamma})$ pode ser representada por expressões empíricas ajustadas à dados experimentais. As mais usadas são:

- o modelo da Lei de potências:

$$\eta = m \left| \dot{\gamma} \right|^{n-1} \quad (2.2.1.3)$$

- modelo de Bird-Carreau:

$$\frac{\eta - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = \left\{ 1 + [\lambda \left| \dot{\gamma} \right|]^2 \right\}^{(n-1)/2} \quad (2.2.1.4)$$

em que: m = índice de consistência

n = índice da lei de potências

λ = tempo característico do material

η_0 , η_{∞} = viscosidade a taxa de cisalhamento nula e infinita, respectivamente.

As equações obtidas por este modelo representam de forma bastante satisfatória as relações de vazão (Q) versus queda de pressão (ΔP) aplicada em condutos uniformes retilíneos e também relações de torque versus velocidade angular em escoamentos tangenciais ou anular helicoidal.

O uso principal deste modelo é para o cálculo da vazão e perdas de carga em escoamentos de cisalhamento em estado permanente. No entanto, o modelo pode ser utilizado para solucionar outros tipos de problemas, desde que efeitos

elásticos não sejam importantes. A presença de efeitos elásticos limitam drasticamente o uso dos fluidos Newtonianos Generalizados.

Em algumas publicações, fluidos Newtonianos Generalizados são referidos como "fluidos puramente viscosos".

Em situações de escoamentos elongacional, que mudam rapidamente com o tempo e escoamentos com diversas componentes de velocidade não-nulas, o modelo de fluido Newtoniano Generalizado não deve ser usado, exceto, como um último recurso.

2.2.2 - MODELOS DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS DIFERENCIAIS

Este modelo fornece equações constitutivas mais gerais que podem ser aplicadas para escoamentos arbitrários; estas equações podem ser simplificadas para originar modelos mais simples e específicos, como por exemplo, o modelo Newtoniano Generalizado. Estes modelos descrevem no mínimo qualitativamente o comportamento material reológico de fluidos poliméricos e possibilitam a resolução de problemas de escoamentos poliméricos mais complexos.

Os modelos diferenciais usados correntemente em simulações numéricas são escritos na forma geral:

$$\bar{\tau} = \bar{\tau}_1 + \bar{\tau}_2 \quad (2.2.2.1)$$

em que: $\bar{\tau}$ é o tensor de tensões;

$\bar{\tau}_1$ é a contribuição viscoelástica;

$\bar{\tau}_2$ é a contribuição puramente viscosa.

A contribuição viscoelástica $\bar{\tau}_1$ é dada pela equação:

$$\bar{A}(\bar{\tau}_1, \lambda) \cdot \bar{\tau}_1 + \lambda(\dot{\gamma}, T) \frac{\delta \bar{\tau}_1}{\delta t} = \eta_1(\dot{\gamma}, T) \dot{\gamma} \quad (2.2.2.2)$$

e o valor da contribuição viscosa por:

$$\bar{\tau}_2 = \eta_2 \cdot \dot{\bar{\gamma}} \quad (2.2.2.3)$$

sendo, λ o tempo de relaxação e η o coeficiente de viscosidade, ambos podem ser funções da taxa de cisalhamento $\dot{\bar{\gamma}}$ e da temperatura T , se necessário; $\dot{\bar{\gamma}}$ é o tensor taxa de deformação. O símbolo A denota uma função dependente do tensor $\bar{\tau}_1$ e, para um tempo de relaxação nulo, A é igual ao tensor unitário \bar{I} , reduzindo-se à equação (2.2.1.2) para um fluido do tipo newtoniano generalizado.

O operador $\frac{\delta \bar{\tau}_1}{\delta t}$ é uma derivada em relação ao tempo definida como uma combinação linear de derivadas convectivas superior, $\bar{\tau}^{(1)}$ e inferior, $\bar{\tau}_{(1)}$:

$$\frac{\delta \bar{\tau}}{\delta t} = a \bar{\tau}^{(1)} + (1-a) \bar{\tau}_{(1)} \quad 0 \leq a \leq 1 \quad (2.2.2.4)$$

em que:

$$\bar{\tau}^{(1)} = \frac{D \bar{\tau}}{Dt} + \{ \bar{\tau} \cdot \nabla \bar{v}^{-T} + \nabla \bar{v} \cdot \bar{\tau} \} \quad (2.2.2.5)$$

$$\bar{\tau}_{(1)} = \frac{D \bar{\tau}}{Dt} - \{ \bar{\tau} \cdot \nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^{-T} \cdot \bar{\tau} \} \quad (2.2.2.6)$$

Em adição a viscoelasticidade, termos de inércia podem afetar o comportamento do escoamento. Para caracterizar a influência da inércia, usa-se o número de Reynolds, Re , definido como: $Re = (\rho v L) / \eta$ (2.2.2.7)

A combinação de ambos números de Reynolds e Weissenberg, We , produz o número de Mach, definidos como:

$$We = \lambda \frac{v}{H} \quad (2.2.2.8)$$

$$M = \sqrt{Re \cdot We} \quad (2.2.2.9)$$

Para escoamentos viscoelásticos caracterizados por um número M maior que 1, os campos desconhecidos (tensão e velocidade) são simultaneamente

controlados por forças viscoelásticas e inerciais. Isto usualmente aumenta o nível de não-linearidade, pois de um ponto de vista físico, a combinação de viscoelasticidade e inércia pode produzir fenômenos, não observados sobre outras circunstâncias. O inchamento de polímeros ou “die swell” é um exemplo típico, neste caso, o inchamento do fluido não ocorre imediatamente na saída da matriz, mas alguma distância posterior, como se o fluido não pudesse sentir imediatamente que está em uma região livre.

A estratégia de solução de tais problemas em elevados números M deve ser apropriadamente selecionada. Deve-se seguir alguma aproximação física. Em um experimento físico, a geometria é fixa e a taxa de escoamento aumentará de um baixo valor para um prescrito. Isto produz a um acréscimo simultâneo de viscoelasticidade e efeitos de inércia (de ambos números Re e We). Assim, deve-se tomar estes efeitos em consideração, já no início do cálculo.

A tabela a seguir apresenta as equações dos modelos.

Tabela 2.2.2.1 - Modelos viscoelásticos Diferenciais :

Maxwell convectivo superior	$\bar{\tau}_1 + \lambda \dot{\bar{\tau}}_1 = \eta_1 \dot{\bar{\gamma}}$
Oldroyd-B* e componente viscosa	$\bar{\tau}_1 + \lambda \dot{\bar{\tau}}_1 = \eta_1 \dot{\bar{\gamma}}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2 \dot{\bar{\gamma}}$
White-Metzner e componente viscosa	$\bar{\tau}_1 + \lambda(\dot{\bar{\gamma}}) \dot{\bar{\tau}}_1 = \eta_1(\dot{\bar{\gamma}}) \dot{\bar{\gamma}}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2(\dot{\bar{\gamma}}) \dot{\bar{\gamma}}$
Phan Thien-Tanner* e componente viscosa	$\exp\left[\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_1} \text{tr}(\bar{\tau}_1)\right] \bar{\tau}_1 + \lambda \left[\frac{\xi}{2} \bar{\tau}_1^{(1)} + \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \bar{\tau}_1^{(1)} \right] = \eta_1 \dot{\bar{\gamma}}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2(\dot{\bar{\gamma}}) \dot{\bar{\gamma}}$
Giesekus* e componente viscosa	$\left[\bar{I} + \frac{\alpha\lambda}{\eta_1} \bar{\tau}_1 \right] \cdot \bar{\tau}_1 + \lambda \dot{\bar{\tau}}_1 = \eta_1 \dot{\bar{\gamma}}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2(\dot{\bar{\gamma}}) \dot{\bar{\gamma}}$

* Nestas equações η_1 e η_2 são determinados do seguinte modo:

$$r = \frac{\eta_2}{\eta} \quad (\text{razão da viscosidade newtoniana pela viscosidade total})$$

$$\eta = \eta_1 + \eta_2$$

$$\text{logo:} \quad \eta_1 = \eta^*(1-r) \quad \text{e} \quad \eta_2 = r^* \eta$$

2.2.2.1 - Modelos de Maxwell Convectivo Superior e Oldroyd-B

As equações constitutivas viscoelásticas mais simples são as dos modelos de Maxwell (UCM) e Oldroyd-B. Ambos, exibem uma viscosidade constante e

uma primeira diferença de tensão normal quadrática. Eles devem ser selecionadas quando muito pouca informação é conhecida sobre o fluido, ou quando a predição qualitativa é suficiente. O modelo de Oldroyd-B é preferível ao Maxwell, pois a introdução de uma componente Newtoniana na equação constitutiva conduz a um melhor comportamento do esquema numérico.

O modelo de Maxwell prevê uma viscosidade constante (μ), um coeficiente de primeira diferença de tensão normal constante ($\nu_1 = 2\lambda\mu$) e um coeficiente de segunda diferença de tensão normal nulo ($\nu_2 = 0$). A viscosidade elongacional de um fluido de Maxwell torna-se infinita em um determinado valor da taxa elongacional ($\dot{\epsilon} = \frac{1}{2}\lambda$).

O comportamento previsto por estes dois modelos é totalmente irreal para materiais poliméricos. Os polímeros fundidos exibem viscosidade e coeficiente de primeira diferença de tensão normal dependentes da taxa de cisalhamento e um coeficiente de segunda diferença de tensão normal negativo, aproximadamente 10 a 30 % do coeficiente de primeira diferença de tensão normal.

2.2.2.2 - Modelo de White-Metzner

Muitos fluidos são caracterizados por pseudoplasticidade ou “shear-thinning” e primeira diferença de tensão normal não-quadrática. Utilizando-se o modelo de White-Metzner, é possível reproduzir tais aspectos viscosimétricos. Quando dados experimentais sobre a viscosidade de cisalhamento e a primeira diferença de tensão normal existem, os parâmetros materiais para o modelo podem ser facilmente obtidos pelo ajuste da curva. Primeiro, a viscosidade de cisalhamento é definida. A seguir, a função para o tempo de relaxação pode ser

selecionada sobre as bases da primeira diferença de tensão normal em escoamento de cisalhamento simples.

Entretanto, o modelo White-Metzner pode exibir um comportamento numérico estranho em elevadas taxas de cisalhamento e produzir oscilações na solução. Este comportamento encontra sua origem em propriedades intrínsecas do modelo.

2.2.2.3 - Modelo Phan Thien-Tanner e Giesekus-Leonov

Estes modelos são certamente os mais realísticos modelos viscoelásticos diferenciais. Em particular, eles exibem pseudoplasticidade e uma primeira diferença de tensão normal não-quadrática em elevadas taxas de cisalhamento. Estas propriedades são controladas pelos seus respectivos parâmetros materiais ε , ξ e α .

A adição da componente puramente viscosa ao tensor de tensões afeta a viscosidade do modelo, mas a primeira diferença de tensão normal permanece inalterada.

Apesar destas equações constitutivas apresentarem-se de forma simples, elas fornecem fracas aproximações para algumas propriedades materiais. A utilização de um destes modelos em um problema de escoamento específico depende das propriedades materiais que estão mais diretamente relacionadas ao escoamento, bem como o modelo descreve estas propriedades.

Predições mais realísticas são obtidas com um espectro de tempos de relaxação.

2.2.3 - MODELOS VISCOELÁSTICOS INTEGRAIS

O ponto contrastante deste modelo é que as tensões são formuladas em termos das funções de deslocamento, ao contrário dos outros modelos em que as tensões são descritas diretamente em termos da velocidade.

Seja uma partícula de fluido que tem a sua posição no momento t dada por $\bar{x}(t)$ e o movimento descrito pela relação vetorial:

$$\bar{x}(t') = \bar{\chi}(\bar{x}(t), t, t') \quad (2.2.3.1)$$

que fornece a posição da partícula $\bar{x}(t')$ em um tempo t' entre $-\infty$ e t . Pode-se então definir o gradiente de deformação relativa \bar{F}_t e o tensor de deformação Cauchy-Green \bar{C}_T como:

$$\bar{F}_t(t') = \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \bar{x}} \quad (2.2.3.2)$$

$$\bar{C}_T(t') = \bar{F}_t^T(t') \cdot \bar{F}_t(t') \quad (2.2.3.3)$$

Por estas definições, as deformações são medidas resultantes da configuração do fluido no tempo t . E o tensor de tensões extras viscoelásticas $\bar{\tau}$ da partícula fluida é representado por uma integral da história de deformação da partícula em relação ao tempo:

$$\bar{\tau}(t) = \int_{-\infty}^t m(t-t') \bar{S}_t(t') dt' \quad (2.2.3.4)$$

em que \bar{S}_t é um tensor dependente da deformação:

$$\bar{S}_t(t') = \phi_1(I_1, I_2) [\bar{C}_t^{-1}(t') - \bar{I}] + \phi_2(I_1, I_2) [\bar{C}_t(t') - \bar{I}], \quad (2.2.3.5)$$

em que

\bar{C}_t^{-1} (o inverso de \bar{C}_t) é o tensor deformação de Finger. Os escalares ϕ_1 e ϕ_2 são funções adimensionais dos invariantes $I_1 = \text{tr}(\bar{C}_t^{-1})$ e $I_2 = \text{tr}(\bar{C}_t)$. O fator $m(t-t')$

que aparece na equação (2.2.3.4) denota a função de memória dependente do tempo, e é expressa como uma soma de funções exponenciais envolvendo os tempos de relaxação λ_k e os coeficientes de viscosidade μ_k :

$$m(t-t') = \sum_{k=1}^n \frac{\mu_k}{\lambda_k^2} \exp\left[-\frac{(t-t')}{\lambda_k}\right] \quad (2.2.3.6)$$

Esta relação representa o enfraquecimento de memória, isto é, as deformações experimentadas pelo elemento de fluido em um passado recente contribuem mais para a corrente tensão no elemento que aquelas deformações que se realizaram em um passado distante.

O tensor de tensões totais, da mesma forma que no caso do modelo de fluidos diferenciais é dado por:

$$\bar{\tau} = \bar{\tau}_1 + \bar{\tau}_2 \quad (2.2.3.7)$$

A tabela a seguir apresenta as equações dos modelos.

Tabela 2.2.3.1 - Modelos Viscoelásticos Integrais:

Maxwell	$\tau_1 = \eta_{VE} \dot{\gamma}$ $\eta_{VE} = \frac{T_s(\dot{\gamma})}{\dot{\gamma}} \text{ onde, } T_s(\dot{\gamma}) \text{ é dado por uma eq. constit. em cisalham.}$ $\tau_2 = \eta_2 \dot{\gamma}$
Oldroyd-B	$\tau_1 = \int_0^{\infty} \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{\lambda_i^2} \exp(-s/\lambda_i) [C_i^{-1}(t-s) - I] ds$ $\tau_2 = \eta_2 \dot{\gamma}$
Doi-Edwards	$\tau_1 = \int_0^{\infty} \frac{96\eta}{\pi^4 \lambda^2} \sum_{k=0}^{\infty} \exp[-(-2k+1)s/\lambda] [\phi_1 C_i^{-1}(t-s) + \phi_2 C_i(t-s)] ds$ $\phi_1 = 5[I_1 + 2(I_2 + 3.25)^{0.5} - 1]^{-1}$ $\phi_2 = -\phi_1(I_2 + 3.25)^{-0.5}$ $\tau_2 = \eta_2 \dot{\gamma}$
K.B.K.Z*	$\tau_1 = \frac{1}{1-r} \int_0^{\infty} \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{\lambda_i^2} \exp(-s/\lambda_i) H(I_1, I_2) [C_i^{-1}(t-s) + r C_i(t-s)] ds$ $\tau_2 = \eta_2 \dot{\gamma}$

* H é uma função “amortecimento” [Bird, 1987]

r é um parâmetro escalar que controla a razão η_2/η_1 , $(\eta_2/\eta_1) = [\theta/(1-\theta)]$.

2.2.3.1 - Modelos de Maxwell e Oldroyd-B

Os modelos mais simples são os modelos de Oldroyd-B e Maxwell. Eles devem ser selecionados quando muito pouca informação é conhecida sobre o

fluido, ou quando uma predição qualitativa é suficiente. Como para os fluidos viscoelásticos diferenciais, o modelo Oldroyd-B deve ser preferido ao de Maxwell: a introdução da componente Newtoniana na eq. constitutiva conduz a um melhor comportamento do processo numérico. Obter resultados com um modelo de fluido Oldroyd-B ou Maxwell com uma técnica integral é muito difícil. Neste caso, a equivalente diferencial deve ser preferida. Em geral, é preferível usar modelos mais realísticos como os de Doi-Edwards e KBKZ.

2.2.3.2 - Modelo de Doi-Edwards

Este modelo tem uma infinidade de tempos de relaxação, determinados por dois parâmetros somente; o tempo de relaxação principal e a viscosidade à taxa de cisalhamento zero. Esta equação é caracterizada por pseudoplasticidade e uma primeira diferença de tensão normal não-quadrática em elevadas taxas de cisalhamento. Este modelo também prediz uma segunda diferença de tensão normal não-nula e uma viscosidade elongacional permanente infinita.

2.2.3.3 - Modelo KBKZ

Em adição ao espectro de relaxação o qual descreve o comportamento viscoelástico linear do material, a definição do modelo KBKZ requer a seleção de uma função de amortecimento, denominada na língua inglesa de “damping”, H , que descreve o enfraquecimento de memória do fluido devido aos vários eventos cinemáticos sofridos no passado, que pode ser constante (nenhum damping), do tipo Papanastasiou-Macosko (PSM) ou do tipo Wagner [Bird, 1987]. Estas funções têm a seguinte forma:

$$\text{- Tipo Wagner: } \exp(-\beta\sqrt{\alpha I_1 + (1-\alpha)I_2 - 3}) \quad (2.2.3.3.1)$$

$$\text{- Tipo PSM: } \alpha / [(\alpha - 3) + \beta I_1 + (1 - \beta)I_2] \quad (2.2.3.3.2)$$

Ambas funções PSM e Wagner envolvem dois parâmetros: α e β . O parâmetro β não tem efeito sobre a viscosidade de cisalhamento, nem sobre a primeira e segunda diferença de tensão normal. Mas este afeta a viscosidade elongacional. Um valor de β nulo diminui o ponto de máximo da curva de viscosidade elongacional.

O modelo KBKZ também necessita de uma componente puramente viscosa para o tensor de tensões, em ordem para evitar instabilidade no escoamento de cisalhamento simples em elevadas taxas de cisalhamento.

Em síntese, os modelos de Fluidos Newtonianos Generalizados são os modelos mais simples e descrevem basicamente escoamentos em cisalhamento permanente, não podendo ser usados para cálculo de escoamentos com presença de efeitos elásticos.

Os modelos viscoelásticos diferenciais e integrais são mais elaborados e conseguem representar satisfatoriamente propriedades materiais de polímeros em cisalhamento e em escoamento elongacional.

A opção por uma determinada equação constitutiva depende não somente do material mas também da aplicação particular, isto é, dos tipos de escoamentos preponderantes no processo analisado.

Desde que não exista limitação da capacidade potencial do equipamento computacional empregado, existem atualmente poucas restrições sobre a quantidade de detalhe que pode ser manuseada pelas equações constitutivas disponíveis.

Conforme Crochet e colaboradores, o problema de elevados números de Weissenberg (relação entre forças viscoelásticas e forças viscosas) o qual

restringia todos trabalhos anteriormente, atualmente não é mais fator de impedimento e os resultados de simulações numéricas são válidas para condições de importância prática onde escoamentos com estas características são observados.

Quaisquer discrepâncias entre teoria e experimentos, não devem mais serem atribuídas somente aos problemas de elevados números de Weissenberg, e atenção deve ser dada a outros problemas, tais como:

- i - A possibilidade de características de escoamento tridimensional ocorrerem em escoamentos aparentemente bidimensionais.
- ii - Uso inadequado das equações constitutivas para materiais muito complexos.
- iii - Tratamento numérico incorreto de escoamentos próximos aos denominados canais convergentes e também possivelmente o tratamento numérico incorreto de dificuldades constitutivas extras associadas com memória do fluido.

Outro aspecto de fundamental importância no processo de modelagem é a seleção apropriada das condições de contorno. Este ponto é ainda mais complexo para o caso de fluidos viscoelásticos, por duas razões principais [Cheremisinoff, 1990]:

- A memória do fluido requer que a história prévia do movimento do fluido seja especificada na análise dos problemas de escoamento, ao definir-se as condições de entrada. Entretanto, a história anterior pode ser tão complexa quanto o próprio problema de escoamento em estudo.
- A definição do comportamento do líquido polimérico próximo a fronteiras sólidas. Nas análises de escoamento newtonianos altamente viscosos, é geralmente apropriado assumir que o fluido adere à fronteira sólida (condição de não-deslizamento). Tal condição, contudo, não é sempre verdadeira em aplicações de processamento de polímeros. Na realidade, os fenômenos de

escoamento, não estão associados exclusivamente com o caráter não-newtoniano do fluido, mas também com os mecanismos de deslizamento sobre a fronteira sólida.

2.3 - TÉCNICAS NUMÉRICAS APLICADAS NA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE ESCOAMENTO

O Polyflow é um programa computacional projetado para simular operações de processamento envolvendo escoamentos viscosos e viscoelásticos, podendo estes escoamentos ser isotérmicos e não-isotérmicos, em estado permanente ou em regime transiente e ainda bidimensional e tridimensional.

O programa além de permitir a simulação de escoamentos nas operações com polímeros, também pode ser utilizado para estudos de fluxo de outros materiais, tais como alimentos, vidro fundido e também escoamentos de gases e vapores. O cálculo de tais escoamentos é caracterizado pela mecânica de fluidos não-newtonianos, lidando com uma grande variedade de modelos constitutivos [Polyflow User's Manual, 1993] para representação dos seus comportamento e, como estas representações são normalmente não-lineares, requer ampla utilização de estratégias numéricas. A característica não-linear das equações constitutivas soma-se os termos não-lineares de origem geométrica, no caso das interfaces móveis, em que a posição da interface é a priori desconhecida, fazendo parte da solução do problema.

O caráter não-linear de um problema pode ser avaliado através de números característicos que refletem tal comportamento, por exemplo, o n^0 . de Weissenberg nos escoamentos viscoelásticos, o n^0 . de Reynolds para os efeitos inerciais, o n^0 . de Peclet nos escoamentos não-isotérmicos, etc.

Em um problema não-linear, a solução não é única, mas apresenta um conjunto de soluções, podendo haver bifurcações e pontos limites difíceis de se contornar. Da mesma forma, a solução de um dado problema para um conjunto de parâmetros pode não ser obtida pela extrapolação linear de uma solução linear. A solução de um problema não-linear é cercada por um domínio de convergência, assim, a solução só poderá ser obtida se o “chute inicial” estiver contido neste domínio.

Uma técnica que permite a resolução de um problema não-linear é o método da evolução. Este método consiste em incrementar, passo a passo, o parâmetro responsável pela não-linearidade do problema, a partir de uma solução inicial conhecida. Por exemplo, a evolução de um parâmetro S : conhecida a solução para um valor S_{inicial} seleciona-se um incremento δS e o problema é resolvido para um novo valor $S + \delta S$. Caso o problema convirja, faz-se uma nova iteração usando um novo incremento $1,5 \delta S$, caso contrário, o incremento é reduzido para $0,5\delta S$ e assim, o procedimento vai se repetindo até atingir-se o valor S_{final} ou até que o incremento δS seja muito pequeno, indicando que o problema está divergindo.

A característica que torna o Polyflow especialmente importante em simulações de operações de processamento é sua capacidade de trabalhar com escoamentos de geometrias complexas e que apresentem deformações em suas superfícies, pois o programa está implementado com uma técnica denominada “remeshing” [Polyflow User’s Manual, 1993] que permite o estabelecimento de superfícies livres e de interfaces móveis entre materiais em escoamento.

A técnica de “remeshing” possibilita a realocação dos nós internos à malha de elementos finitos conforme os nós da superfície do contorno da malha sejam

deslocados, controlando as deformações da malha para evitar elementos de formas inaceitáveis. O resultado desta técnica é ilustrado através da figura 2.3.1.

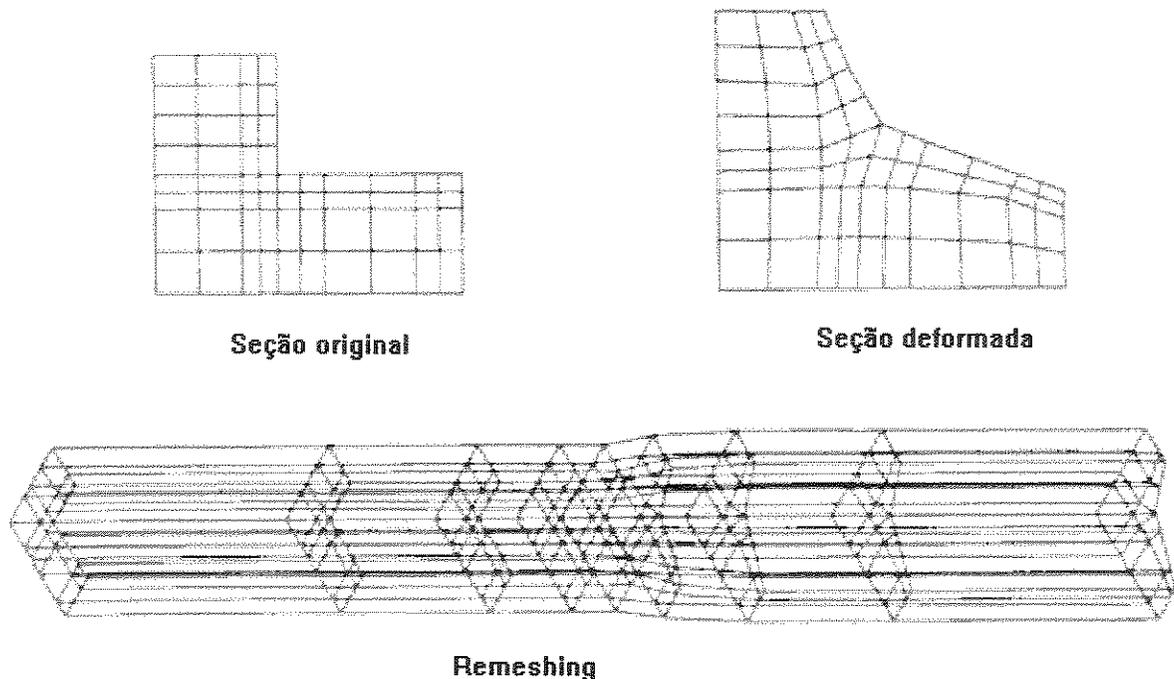


Fig. 2.3.1 - “Remeshing” tridimensional [Polyflow User’s Manual, 1993]

A correção da posição dos nós da fronteira móvel é realizada através da técnica de diretores, na qual a direção de deslocamento \bar{D}_i de cada nó é escolhida a priori, juntamente com a amplitude h , grau de liberdade geométrico, de deslocamento dos nós ao longo desta direção. Assim, $\delta \bar{x}_i = h \bar{D}_i$, e as condições de contorno que definem uma interface são:

- continuidade das tensões agindo na interface: $\bar{\sigma}_1 = \bar{\sigma}_2$
- continuidade do vetor velocidade na interface: $\bar{v}_1 = \bar{v}_2$

Entretanto, estas equações não garantem que não há fluxo de matéria através da interface, devendo-se acrescentar uma condição cinemática:

- $\bar{v} \cdot \bar{n} = 0$, para escoamentos em regime permanente
- $\left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial t} - \bar{v} \right) \cdot \bar{n} = 0$, para problemas transientes

em que \bar{v} é o vetor velocidade resultante da interface,

\bar{x} é o vetor posição,

\bar{n} é o vetor normal a interface.

O pacote computacional Polyflow, também possui um módulo denominado PM3, que permite o ajuste de parâmetros materiais de equações constitutivas.

O programa PM3 calcula as propriedades materiais para o modelo e condições selecionadas e permite a comparação com curvas de propriedades similares obtidas experimentalmente para os polímeros em estudo; assim variando-se os parâmetros da equação selecionada é possível ir ajustando seus valores até que as curvas teóricas expressem o comportamento experimental.

3 - MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 - MATERIAIS

No sistema de coextrusão em estudo são processados três tipos de polímeros poliéster lineares, Poli (Etileno Tereftalato), cujos os pontos de fusão ocorrem na faixa de 250 °C a 265 °C. Os polímeros PET foram fornecidos pela Rhodia-Ster Filmes, Unidade do Cabo - PE.

Ao longo deste trabalho, estes polímeros são referenciados como camadas A, B e C.

3.2 - MÉTODOS

A qualidade dos resultados previstos pela simulação numérica é função da escolha de modelos constitutivos para os polímeros, capazes de representar adequadamente o seu comportamento no tipo de escoamento existente e da medição precisa dos parâmetros destas equações constitutivas escolhidas.

Os polímeros apresentam outras propriedades reológicas além da viscosidade em cisalhamento, a qual é uma medida da resistência do polímero ao escoamento:

- . os polímeros tem a capacidade de gerar tensões normais, mesmo em escoamentos de cisalhamento puro, p. ex., como ocorre entre duas placas planas e paralelas;
- . polímeros com características semelhantes em cisalhamento podem se comportar de modo distinto em escoamentos elongacionais, p. ex., em canais

convergentes ou nos escoamentos de transição existentes nos pontos de entrada das camadas na caixa de coextrusão;

. os polímeros possuem características elásticas, isto é, na presença de deformações muito rápidas, há uma tendência de ocorrer uma recuperação elástica do estado inicial de deformações (os polímeros se comportam de modo semelhante a sólidos elásticos). Usualmente, refere-se a esta propriedade como a “memória do fluido”, isto é, o estado de tensões no polímero depende das condições anteriores a que foi submetido.

Deste modo, para caracterizar mais adequadamente o comportamento dos polímeros fundidos, medimos a viscosidade elongacional η_e e as propriedades em regime transiente, através dos módulos dinâmicos e de perda em regime oscilatório G' e G'' .

3.2.1 - MEDIDAS DAS VISCOSIDADES DE CISALHAMENTO E ELONGACIONAL

Os valores da viscosidade de cisalhamento foram medidos em um reômetro capilar Instron com diâmetro capilar igual a 0,03” e comprimento igual a 1”, portanto, com razão comprimento/diâmetro do capilar igual a 33,3 .

Antes de serem extrudadas no reômetro, as amostras foram secas em uma estufa a vácuo durante 8 horas numa temperatura de 150°C. E em seguida, foram extrudadas a 280 °C.

Foram ensaiadas 3 amostras de cada polímero e tomados os valores médios. O tempo entre o preenchimento do barril e a primeira medida foi de 7 minutos, a fim de estabilizar a temperatura em toda a massa de polímero. O

tempo de extrusão de cada barril não foi superior a 20 minutos para evitar problemas de degradação térmica do polímero.

Foram medidos 6 - 7 pontos numa faixa de taxa de cisalhamento entre 100 s^{-1} e 5000 s^{-1} . Esta faixa de medição cobriu suficientemente bem a região de pseudoplasticidade do poliéster, porém, não permitiu determinar com exatidão o patamar newtoniano.

Em todas as amostras foi realizada a correção de Rabinowitsch para a pseudoplasticidade dos polímeros. A correção de Bagley dos resultados não foi efetuada, tendo em vista a boa relação comprimento/diâmetro do capilar.

A viscosidade elongacional foi obtida via experimentos em fluxos de contração num reômetro com capilar de comprimento zero, conforme o método proposto por Binding, em 1988. Seguiu-se a mesma metodologia utilizada por Kiang e Cuculo para determinar os parâmetros que permitem calcular a viscosidade elongacional.

A análise de Binding pressupõe a hipótese de um modelo do tipo lei de potências para ambos os escoamentos de cisalhamento e elongacional, os quais são correlacionados à pressão aplicada na entrada do capilar, através das equações:

$$P_0 = \left(\frac{2K(1+t)^2}{3t^2(1+n)^2} \right) \frac{(Lt(3n+1)n^t I_{nt})^{1/(1+t)}}{K} (\dot{\gamma})_{R0}^{t(1+n)/(1+t)} (1 - \alpha^{3t(1+n)/(1+t)}) \quad (3.2.1.1)$$

$$e, \quad I_{nt} = \int_0^1 \text{abs} \left[2 - \frac{3n+1}{n} \Phi^{(1+1/n)} \right]^{t+1} \phi d\phi \quad (3.2.1.2)$$

em que: k e n são o índice de consistência e o índice de potências do modelo da viscosidade de cisalhamento, respectivamente e L e t são os índices de consistência e de potências do modelo da viscosidade elongacional, respectivamente. E α é razão de contração do escoamento, definida por:

$$\alpha = \frac{R_0}{R_1} \quad (3.2.1.3)$$

em que: R_0 é o raio do capilar e R_1 é o raio do reservatório do reômetro capilar.

Na análise de Binding, a perda de carga na entrada do capilar em função da taxa de cisalhamento segue uma lei exponencial. Ou seja, através de gráficos de $\log P_0$ versus $\log \dot{\gamma}$, verifica-se um comportamento linear:

$$P_0 \sim \dot{\gamma}^m \quad (3.2.1.4)$$

$$\text{em que: } m = \frac{t(1+n)}{1+t} \quad (3.2.1.5)$$

Portanto, medindo-se a perda de carga do escoamento na entrada do capilar e conhecido de antemão o comportamento do polímero em escoamentos de cisalhamento puro, obtém-se o índice de potências elongacional t como uma função do índice de potências em cisalhamento n , a partir da relação:

$$t = \frac{m}{(1+n-m)} \quad (3.2.1.6)$$

3.2.2 - MEDIDA DOS MÓDULOS DINÂMICOS

Esta caracterização reológica foi realizada através do reômetro ortogonal, Mini Max Dynamic Tester, modelo CS-183DY.

Este método foi desenvolvido para a medição de forças ortogonais em um polímero fundido, quando submetido a um cisalhamento em regime oscilatório [Maxwell, 1965 e 1968]. Por meio deste método medem-se as forças elásticas (F_x) e forças viscosas (F_y).

F_x é medida na direção do deslocamento dos eixos dos discos.

F_y é a força perpendicular a força elástica e tangencial ao cisalhamento circular. A componente de força F_y mede o arraste viscoso do escoamento. Em um sólido elástico ideal, F_y é zero.

As forças são analisadas em termos dos módulos dinâmicos.

O módulo elástico (G') é maior para pequenos tempos de deformação (ω maior) e diminui rapidamente a medida que o tempo de deformação aumenta. Assim, quando a deformação é rápida, o material pode armazenar energia elástica, mas, sob deformação lenta, a tensão elástica pode relaxar.

O princípio de funcionamento do reômetro ortogonal é ilustrado na figura 3.2.2.1.

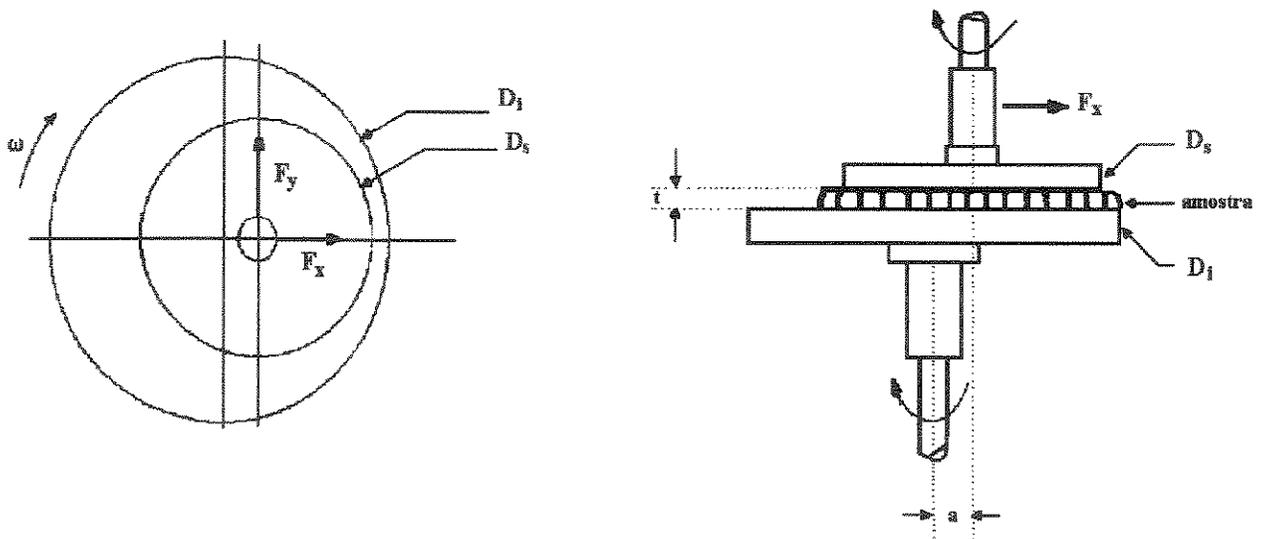


Fig. 3.2.2.1 Vistas superior e lateral dos discos do reômetro ortogonal [Maxwell, (1965)].

O polímero fundido é colocado entre dois discos paralelos, o inferior (D_i) de raio R e o superior (D_s) de raio r , ($R > r$). Os centros dos discos estão deslocados horizontalmente de uma distância a .

O disco D_i gira a uma velocidade angular ω , e impõe esta velocidade de rotação ao disco superior, que gira em torno do eixo superior (Es). Este eixo, é fixo a um sistema de elementos de medida de deformação elástica, que pode medir as forças na direção x e y . Através do conjunto de equações abaixo, podemos expressar os módulos dinâmicos em termos dos valores medidos para estas forças:

$$\tau_x = F_x / A \quad (3.2.2.1)$$

$$\tau_y = F_y / A \quad (3.2.2.2)$$

$$\psi = a / t \quad (3.2.2.3)$$

$$\gamma = 2\pi\psi \quad (3.2.2.4)$$

$$\dot{\gamma} = 2\pi\psi\omega \quad (3.2.2.5)$$

$$G' = \tau_x / \psi \quad (3.2.2.6)$$

$$G'' = \tau_y / \psi \quad (3.2.2.7)$$

O aparelho é chamado reômetro ortogonal porque as forças medidas estão posicionadas a 90° entre si.

3.2.2.1 - Procedimento experimental

A caracterização reológica foi realizada no reômetro ortogonal, de fabricação da Custom Scientific Instruments. O equipamento consiste de três módulos; uma câmara de aquecimento (Mini Max Temperature Chamber CS-183 OV); um motor responsável pelo acionamento mecânico da rotação do disco inferior, com velocidade ajustável de 1,8 a 180 rpm (Mini Max Driver CS-183 DR) e o módulo com os pratos paralelos e sistemas de medidas das forças exercidas no eixo que suporta o disco superior (Mini Max Dynamic Tester CS-183 DY).

A caracterização é feita através da seguinte sequência:

- estabilização da temperatura da câmara do Mini Max Dynamic Tester sem os pratos, por um período de 1 hora a 320 °C, para obter-se uma temperatura igual a 280 °C nos pratos onde está colocada a amostra (compensação das perdas térmicas do aparelho),
- colocação dos pratos nos eixos e estabilização por mais 30 minutos,
- colocação das amostras entre os pratos (1 minuto),
- fusão da amostra sem cisalhamento por 3 minutos,
- acionamento do motor, com a velocidade de medida.

As medidas foram realizadas com o eixo superior deslocado de 1,27 mm na direção x. A distância vertical entre os pratos foi de 1,04mm.

Antes de realizar as medidas dos módulos dinâmicos no reômetro ortogonal, os polímeros foram pesados e depois secados à vácuo, a temperatura de 150 °C, por um período de 8 horas. Após a secagem as amostras foram armazenadas num dessecador até o seu processamento.

Preparou-se corpos de prova das camadas A, B e C no formato de disco, através do Mini Max Molder, modelo CS183MMX, de fabricação da Custom Scientific Instruments. O funcionamento do equipamento é descrito detalhadamente na tese de mestrado de Cardoso, em 1994.

Os tempos de processamento das amostras foram de 1 minuto. Os processamentos foram realizados à 262 °C para a camada A e 260 °C para as camadas B e C.

O processamento seguiu as seguintes etapas:

- 1 - estabilização da temperatura da câmara de mistura e do pino cisalhante na temperatura de processamento da blenda.

- 2 - introdução da amostra no interior da câmara de mistura, (purgada com nitrogênio gasoso), seguido do abaixamento do pino.
- 3 - fusão em repouso por 20 segundos.
- 4 - cisalhamento axial e circular por 30 segundos.
- 5 - seguida da injeção, 10 segundos após cessado o cisalhamento.
- 6 - o molde com o material injetado era resfriado a temperatura ambiente sobre a bancada.

Após a moldagem, os corpos de provas foram mantidos em um dessecador até o momento da caracterização.

4 - APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

Realizou-se a simulação numérica do escoamento em regime permanente existente em uma caixa de coextrusão de uma planta industrial de produção de filmes de Poli (Etileno Tereftalato), com os seguintes objetivos:

- . estudar a influência da geometria da caixa de coextrusão (alargamentos e ângulos de entrada das camadas laterais) sobre a posição da interface;
- . analisar o efeito de encapsulamento de camadas na região interfacial;
- . estudar os escoamentos utilizando modelos viscoelásticos que permitem a previsão de efeitos relacionados à “elasticidade” do fluido.
- . verificar quanto o nível de representatividade dos fenômenos de escoamento é alterado quando o comportamento dos fluidos é descrito por um modelo viscoelástico.

As simulações numéricas foram realizadas com auxílio do pacote computacional “POLYFLOW”, instalado em uma estação de trabalho do tipo “SUN SPARCstation 5” com 80 Mbytes de memória RAM.

4.1 - GEOMETRIA DE ESCOAMENTO NA CAIXA DE COEXTRUSÃO

A figura 4.1.1.a ilustra a caixa de coextrusão em estudo (a perspectiva não está em escala).

No canal principal escoam o polímero B. Há duas janelas de entradas perpendiculares e simétricas por onde escoam o polímero A e uma janela de entrada perpendicular por onde escoam o polímero C. Deste modo, nesta caixa de coextrusão produzem-se estruturas do tipo ABAC.



Em cada ponto de entrada das camadas laterais (A ou C) há escoamentos em desenvolvimento bastante complexos e estas interfaces continuam a se desenvolver após todas as camadas estarem sobrepostas.

Realizou-se simulações em geometrias tridimensionais para o estudo dos fenômenos interfaciais que ocorrem dentro da caixa de coextrusão.

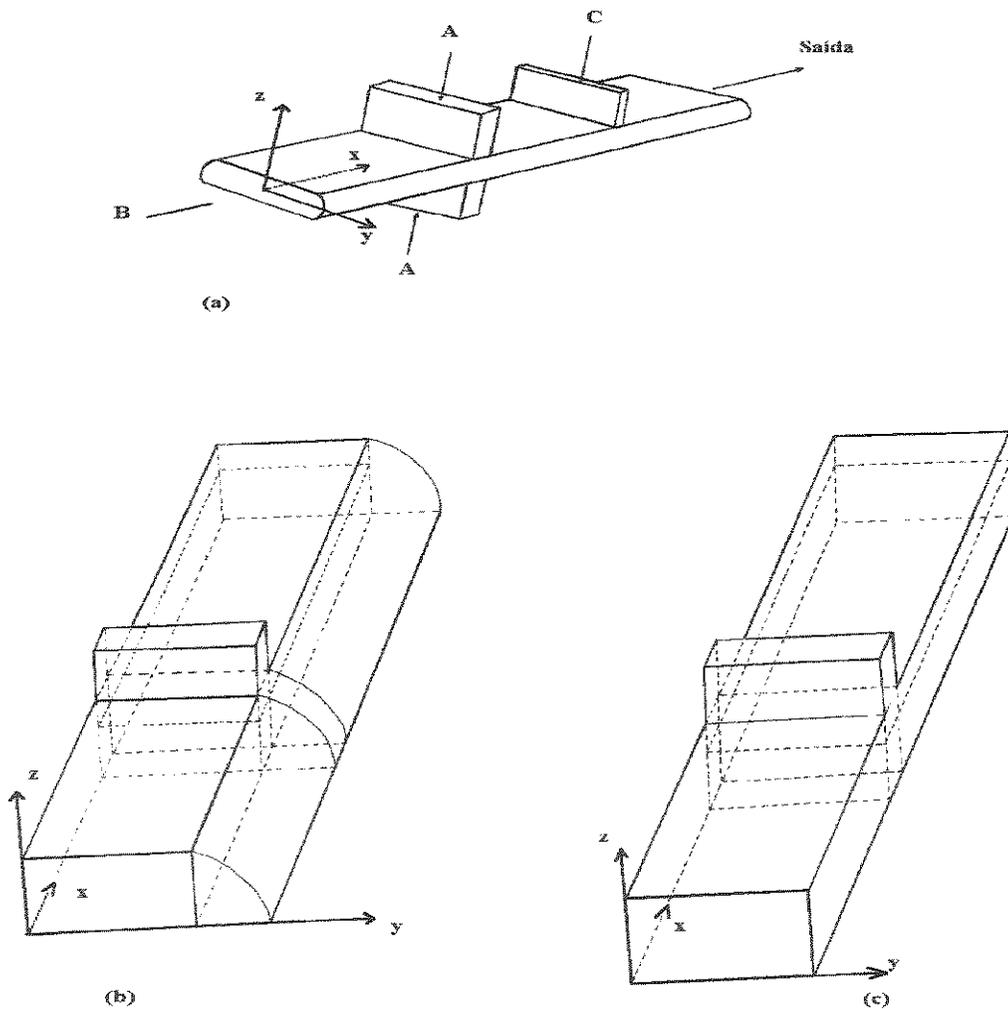


Fig. 4.1.1 - Aproximação tridimensional da caixa de coextrusão.

A resolução de um problema de coextrusão 3D, consome grandes quantidades de memória e tempo computacional, tornando-se impossível a simulação numérica utilizando uma geometria idêntica a geometria da figura

4.1.1.a. Para simplificar o problema, realizou-se algumas aproximações da geometria, preservando o máximo possível, a representatividade do modelo:

i. Inicialmente, considerou-se o problema de um fluxo principal correspondendo a camada B e entradas laterais simétricas da camada A.

ii. A seguir, analisou-se o comportamento do escoamento, considerando-se o problema assimétrico, em que a camada C entra lateralmente ao fluxo principal, gerado pela soma das vazões das camadas A e B, com propriedades materiais iguais às de B (pois esta camada constitui a maior parte do fluxo principal). Esta segunda aproximação está esquematizada na figura 4.1.1.b .

A geometria apresentada na figura 4.1.1.b, corresponde a cortes realizados na figura 4.1.1.a nos planos de simetria $z = 0$ e $y = 0$; assim, o domínio das camadas A e B está dividido em $\frac{1}{4}$ do original. Estes cortes foram realizados para simplificar o problema e diminuir os custos de memória e tempo de execução computacional, as vazões correspondentes foram reduzidas de modo análogo.

Entretanto, a geometria apresentada na figura 4.1.1.b, ainda se constitui em um problema relativamente complexo, devido ao arredondamento lateral do canal principal e ao fato da janela de entrada da camada A ser mais estreita que o canal principal por onde escoam as camadas B e C. Estas particularidades geométricas dificultam a construção da malha de elementos finitos, bem como o estabelecimento das técnicas de rearranjo da malha, pois introduzem um número maior de condições de contorno do tipo interfaces móveis entre as camadas.

Para contornar estas complexidades, a geometria da figura 4.1.1.b foi aproximada pela geometria ilustrada na figura 4.1.1.c, na qual o canal principal tem secção transversal retangular e a largura da janela de entrada da camada A é igual a largura do canal principal. Na simplificação, utilizou-se um canal retangular de área da secção transversal equivalente, tal qual descrita na dissertação de Witkoski, como a seguir:

i. camada B

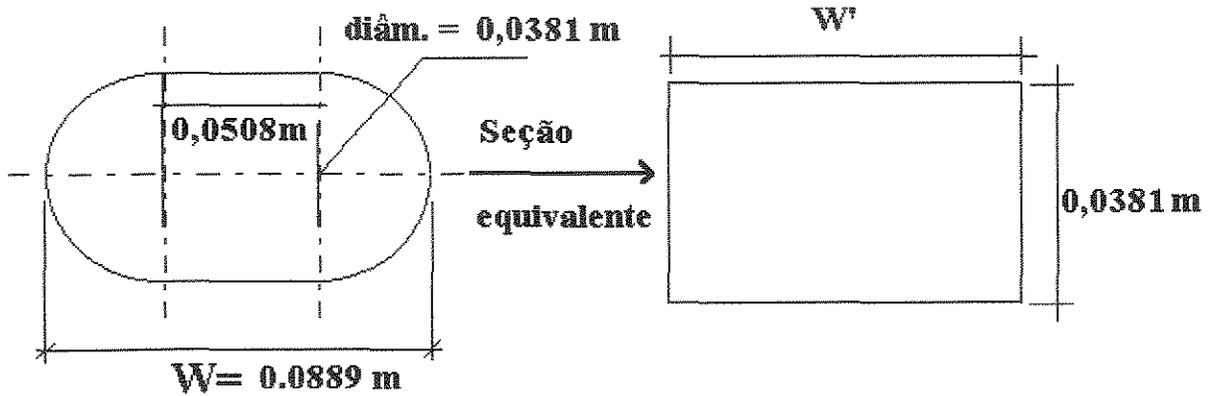


Fig. 4.1.2 - Seção do canal principal do “feedblock” e a aproximação retangular

$$W' \cong 0,0807 \text{ m}$$

$$q_B = 2,666 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$$

ii. Camadas A e C

Para as linhas A e C, deve-se compensar o fato da largura da janela de entrada (0,0508 m) ser menor que a largura do canal principal do feedblock (0,0889 m). Assim, reduziu-se proporcionalmente a espessura das fendas:

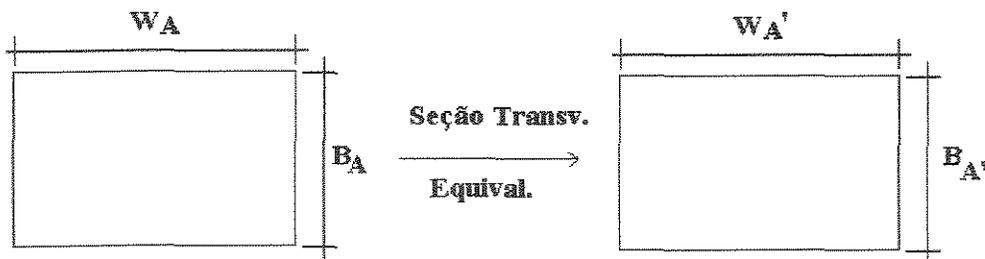


Fig. 4.1.3 - Seção transversal equivalente para as camadas A e C

$$\text{área} = W_A \cdot B_A = W_A' \cdot B_A',$$

em que $W_A = 0,0508 \text{ m}$, $B_A = 0,0032 \text{ m}$ e $W_A' = 0,0807 \text{ m}$.

Portanto, $B_A' = 0,002 \text{ m}$.

A janela de entrada da camada C, sofreu as mesmas correções.

A figura 4.1.4 apresenta a vista lateral da caixa de coextrusão (o desenho não está em escala).

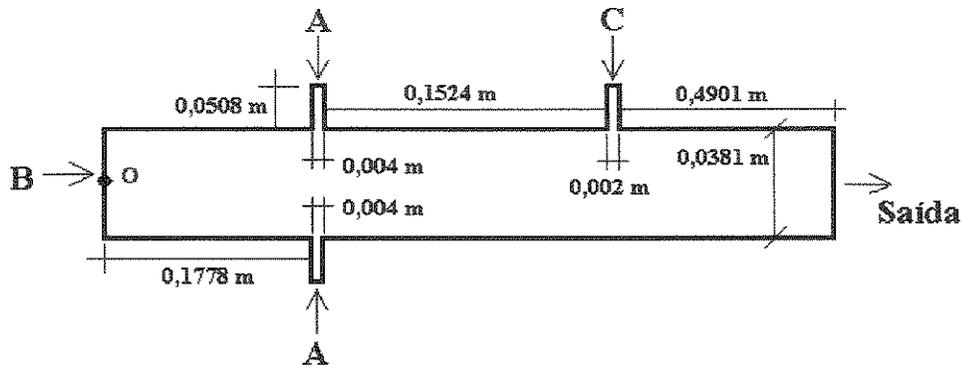


Fig. 4.1.4 - Vista lateral da caixa de coextrusão

4.2 - CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno que definem o comportamento dos fluidos ao longo das regiões de entrada, saída, plano de simetria, interfaces e paredes foram definidas como a seguir:

- Regiões de entrada dos fluidos

Nas seções de entrada dos fluidos assume-se que o escoamento é completamente desenvolvido, impondo-se velocidades constantes, através da vazão das correntes de polímeros.

- Região de saída

No sistema multicamada estudado, todas as correntes fluidas saem paralelamente através da mesma seção, supondo-se um escoamento

completamente desenvolvido. As condições de saída dos fluidos do domínio de escoamento são descritas por:

$$\bar{v}_s = 0$$

$$\bar{f}_n = 0$$

em que \bar{v}_s é a velocidade tangencial à fronteira e \bar{f}_n é a força na direção normal.

Esta condição é característica para fluidos newtonianos.

Para fluidos viscoelásticos a condição de saída é imposta por uma velocidade tangencial nula do fluido e, em substituição a força normal nula definida para os fluidos newtonianos, é imposto um perfil de velocidade normal completamente desenvolvido.

- Paredes:

Definiu-se que os fluidos não apresentam deslizamento ao longo das paredes do canal de escoamento, ou seja:

$$\bar{f}_n = 0$$

$$\bar{v}_s = 0$$

sendo \bar{f}_n e \bar{v}_s a força normal e velocidade tangencial do fluido. Entretanto, o programa Polyflow está implementado com uma condição de contorno que permite a definição de um escorregamento do fluido ao longo das paredes da seguinte forma:

$$\bar{f}_s = -F_{\text{escor}} \cdot \bar{v}_s \cdot |\bar{v}_s|^E$$

em que v_s é a velocidade tangencial e F_{escor} , E são coeficientes materiais.

Um deslizamento completo do fluido sobre a parede é obtido quando $F_{\text{escor}} = 0$. Quando o parâmetro E é nulo, obtém-se uma condição de contorno que

torna o problema linear, mas se o valor de E é menor que zero, a relação entre \bar{f}_s e \bar{v}_s torna-se não-linear, devendo o problema ser resolvido iterativamente.

- Planos de Simetria

São definidos pela imposição de valores nulos à força tangencial e à velocidade normal à superfície do plano de simetria:

$$\bar{v}_n = 0$$

$$\bar{f}_s = 0$$

- Interfaces Móveis:

São definidas impondo-se a continuidade das tensões normais e tangenciais, o mesmo ocorrendo para o vetor velocidade:

$$\bar{\sigma}_1 = \bar{\sigma}_2$$

$$\bar{v}_1 = \bar{v}_2$$

em que os índices 1 e 2, representam os fluidos que escoam adjacentes originando a interface.

Entretanto, as equações acima não garantem que não há fluxo de matéria através da interface. Assim, acrescenta-se a seguinte condição cinemática:

$$\bar{v}_n = 0, \text{ para escoamentos em regime permanente}$$

$$\left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial t} - \bar{v} \right) \cdot \bar{n} = 0, \text{ para problemas em regime transiente}$$

em que \bar{v} é o vetor velocidade resultante da interface. Estas condições são comumente chamadas de condições de imiscibilidade dos fluidos.

5 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta um número grande de figuras e tabelas de resultados obtidos das medições experimentais e simulações numéricas. Para facilitar a leitura do trabalho, as figuras e tabelas de resultados de cada um dos sub-capítulos 5.1, 5.2 e 5.3, foram separadas do texto e são apresentadas ao final dos mesmos.

As figuras contendo os resultados do trabalho são vinculadas ao capítulo correspondente pela numeração em algarismos arábicos e recebem uma numeração seqüencial em algarismos romanos.

As tabelas e figuras que servem como ilustrações do texto são apresentadas no próprio texto com uma numeração usando apenas algarismos arábicos.

O sistema de unidades utilizado é o sistema internacional.

5.1 - CARACTERÍSTICAS DAS CAMADAS DO ESCOAMENTO

5.1.1 - CARACTERIZAÇÃO REOLÓGICA

As camadas A, B e C foram caracterizadas utilizando os reômetros capilar e ortogonal, sendo obtidas as propriedades materiais: viscosidade de cisalhamento, viscosidade elongacional e os módulos de armazenamento G' e perda G'' .

Os valores obtidos dos módulos dinâmicos e viscosidade de cisalhamento são apresentados nas tabelas 5.1.1.I a 5.1.1.VI para as três camadas investigadas.

A tabela 5.1.1.VII mostra as equações da lei de Potências correlacionadas para a viscosidade elongacional através dos dados de cisalhamento e queda de pressão na entrada do capilar.

As viscosidades como uma função da taxa de cisalhamento para as camadas A, B e C são mostradas na figura 5.1.1.I. O Patamar newtoniano, como é observado pela curva exposta nesta figura, não ficou bem evidenciado, devido à carência de dados experimentais na faixa onde é observado tal comportamento. Contudo, a estimativa das viscosidades pode ser realizada através da extrapolação dos dados nesta região.

Os módulos dinâmicos para as camadas A, B e C são plotados em função da frequência nas figuras 5.1.1.II, 5.1.1.III e 5.1.1.IV, respectivamente.

A figura 5.1.1.V mostra o comportamento da viscosidade elongacional em função da taxa de elongação para as camadas A, B e C.

Comparando-se os resultados obtidos das caracterizações reológicas para as propriedades materiais medidas para as três camadas, observa-se que as camadas A e B possuem comportamento bastante semelhantes, sendo as propriedades de A um pouco mais acentuadas que as de B. Isto é decorrência do fato que a camada A na realidade é uma mistura de polímeros de PET virgem e com cargas minerais, enquanto a camada B é constituída de polímeros de PET virgem e reciclados. Já a camada C possui propriedades com valores mais elevadas que A e B, pois esta camada é formada de polímeros PET com cargas minerais e PET copolimerizado.

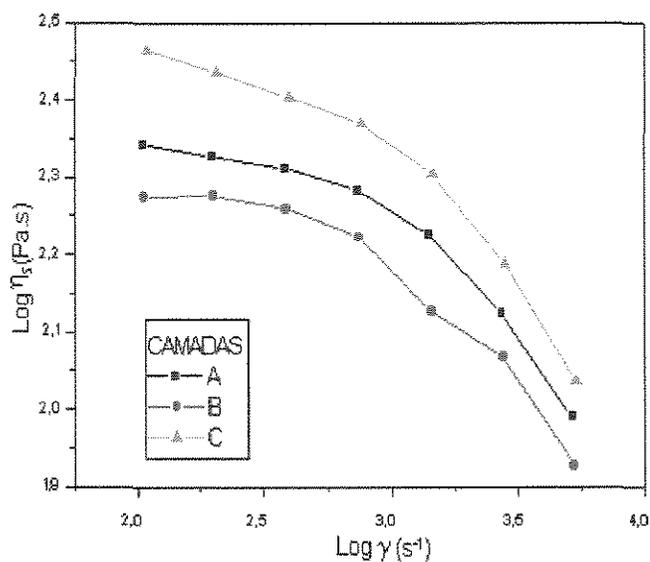


Figura 5.1.1.I - Dados experimentais de viscosidade de cisalhamento em função da taxa de cisalhamento para as camadas A, B e C à 280 °C.

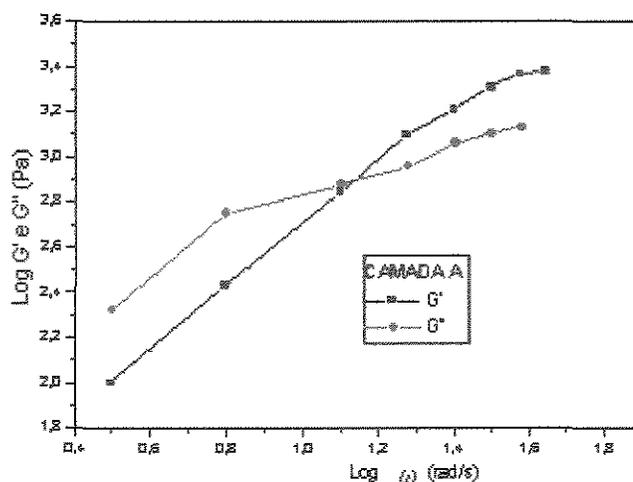


Figura 5.1.1.II - Dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda em função da frequência para a camada A à 280 °C.

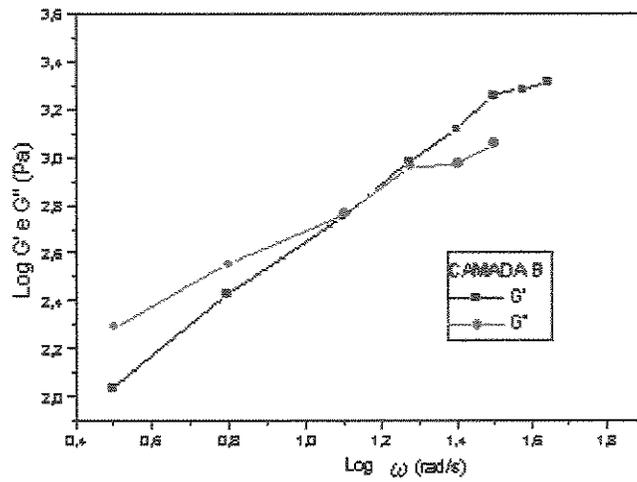


Figura 5.1.1.III - Dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda em função da frequência para a camada B à 280 °C.

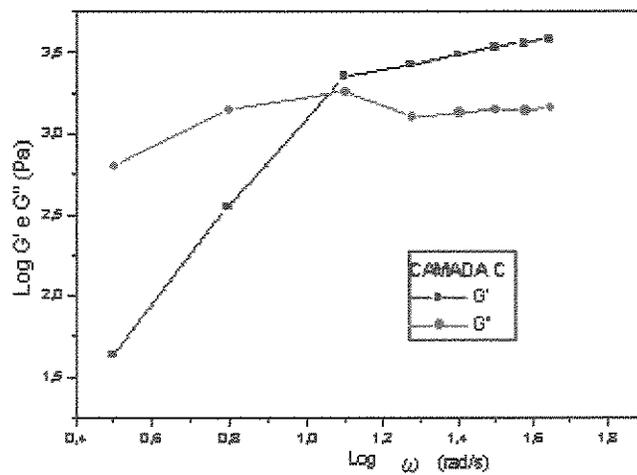


Figura 5.1.1.IV - Dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda em função da frequência para a camada C à 280 °C.

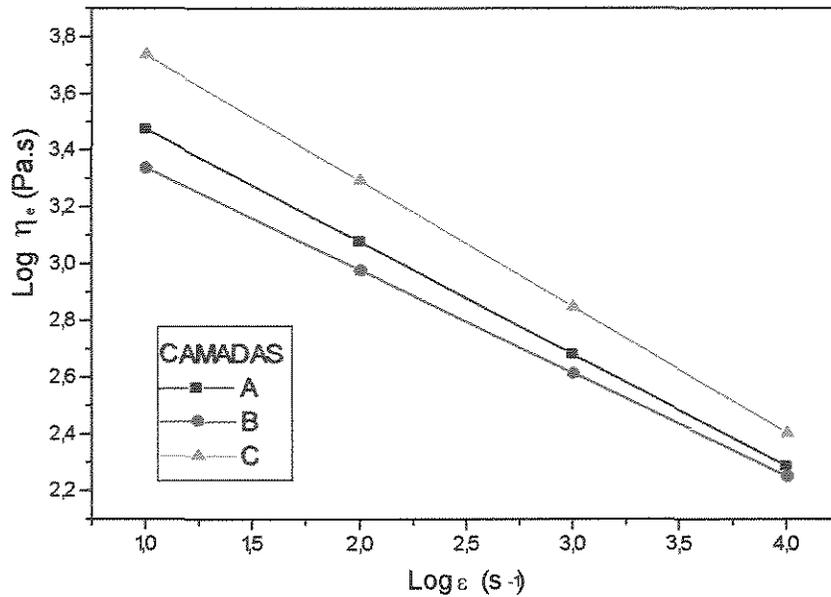


Figura 5.1.1.V - Dados experimentais de viscosidade alongação em função da taxa de alongação para as camadas A, B e C à 280 °C.

Tabela 5.1.1.I Valores experimentais de Módulos de armazenamento (G') e perda (G'') obtidos para a camada A ($T = 280$ °C)

ω (rad/s)	G' (Pa)	G'' (Pa)	$\log \omega$ (rad/s)	$\log G'$ (Pa)	$\log G''$ (Pa)
3,142	100,413	211,463	0,497	2,002	2,325
6,283	269,890	570,448	0,798	2,431	2,756
12,566	705,478	758,649	1,099	2,849	2,880
18,850	1256,681	912,191	1,275	3,099	2,960
25,133	1634,519	1158,696	1,400	3,213	3,064
31,416	2042,433	1272,287	1,497	3,310	3,105
37,699	2321,428	1354,957	1,576	3,366	3,132
43,982	2402,566	-	1,643	3,381	-

Tabela 5.1.1.II Valores experimentais de Módulos de armazenamento (G') e perda (G'') obtidos para a camada B ($T = 280$ °C)

ω (rad/s)	$\log \omega$ (rad/s)	G' (Pa)	G'' (Pa)	$\log G'$ (Pa)	$\log G''$ (Pa)
3,142	0,497	108,826	196,133	2,037	2,293
6,283	0,798	267,303	359,492	2,427	2,556
12,566	1,099	566,726	587,428	2,753	2,769
18,850	1,275	968,607	921,269	2,986	2,964
25,133	1,400	1313,246	947,192	3,118	2,976
31,416	1,497	1801,435	1153,864	3,256	3,062
37,699	1,576	1919,375	-	3,283	-
43,982	1,643	2060,797	-	3,314	-

Tabela 5.1.1.III Valores experimentais de Módulos de armazenamento (G') e perda (G'') obtidos para a camada C ($T = 280$ °C)

ω (rad/s)	$\log \omega$ (rad/s)	G' (Pa)	G'' (Pa)	$\log G'$ (Pa)	$\log G''$ (Pa)
3,142	0,497	43,430	637,951	1,638	2,805
6,283	0,798	354,290	1412,291	2,549	3,150
12,566	1,099	2257,342	1814,534	3,354	3,259
18,850	1,275	2656,409	1268,339	3,424	3,103
25,133	1,400	3079,381	1346,649	3,488	3,129
31,416	1,497	3390,806	1396,017	3,530	3,145
37,699	1,576	3577,043	1389,488	3,554	3,143
43,982	1,643	3763,272	1442,347	3,576	3,159

Tabela 5.1.1.IV - Valores de viscosidade medidos para a camada A (T = 280 °C)

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	η (Pa.s)
105	219,3
199	212,0
384	204,7
736	191,7
1410	167,7
2710	133,0
5201	97,4

Tabela 5.1.1.V - Valores de viscosidade medidos para a camada B (T = 280 °C)

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	η (Pa.s)
105	188,0
199	189,3
384	182,0
737	167,0
1411	134,1
2711	116,7
5204	84,8

Tabela 5.1.1.VI - Valores de viscosidade medidos para a camada C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)

$\dot{\gamma}$ (s^{-1})	η (Pa.s)
107	291,7
202	273,7
390	253,3
748	234,3
1433	201,3
2753	154,7
5284	108,7

Tabela 5.1.1.VII Equações da Lei de Potências para a viscosidade elongacional ajustadas para as camadas A, B e C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Camada	Lei de Potências
A	$\eta_e = 7388 \dot{\epsilon}^{-0.396}$
B	$\eta_e = 5039 \dot{\epsilon}^{-0.363}$
C	$\eta_e = 15174 \dot{\epsilon}^{-0.445}$

5.1.2 - AJUSTE DOS MODELOS CONSTITUTIVOS

Os parâmetros das equações constitutivas foram determinados utilizando-se o programa PM3, que constitui um módulo do programa Polyflow [Polyflow User's Manual, 1993], desenvolvido para estudo de escoamentos viscoelásticos. A tabela 5.1.2.I apresenta as equações constitutivas que foram ajustadas para as camadas A, B e C.

Nas figuras 5.1.2.I a 5.1.2.III são apresentados o ajuste do modelo de Bird-Carreau, que descreve o comportamento da viscosidade em função da taxa de cisalhamento para cada uma das três camadas. Os valores dos parâmetros ajustados constam na tabela 5.1.2.II.

O intuito desta etapa do trabalho é a determinação e o ajuste de parâmetros de equações constitutivas que melhor representem o comportamento do escoamento na operação de processamento multicamada. Assim, os dados experimentais disponíveis foram utilizados para a seleção da equação que represente o comportamento das camadas, tanto em cisalhamento como em escoamento elongacional, que são característicos na operação de coextrusão. As figuras 5.1.2.IV a 5.1.2.VI apresentam como esta seleção foi realizada, demonstrando o ajuste dos modelos para a camada C. A seleção da equação para as camadas A e B seguiram o mesmo critério. As tabelas 5.1.2.III a 5.1.2.V mostram os valores dos parâmetros ajustados para os vários modelos e suas respectivas camadas.

Pela análise das figuras anteriores, constata-se que os modelos de Maxwell e Oldroyd-B representam de forma aceitável, apenas os dados de módulos dinâmicos. Para a viscosidade de cisalhamento apresentam uma previsão de caráter newtoniano e não conseguem representar o comportamento elongacional

das camadas. O modelo de Giesekus, entretanto, apresenta previsões satisfatórias para os módulos dinâmicos e viscosidade de cisalhamento, mas, o comportamento da viscosidade elongacional previsto por este modelo é ruim.

Verifica-se que a equação de Phan Thien-Tanner é a única que consegue representar razoavelmente os dados das propriedades materiais disponíveis, dentre os modelos investigados, prevendo inclusive o comportamento elongacional das camadas.

Como dito anteriormente, os parâmetros das equações foram ajustados utilizando dados de módulos de armazenamento e perda, viscosidade de cisalhamento e viscosidade elongacional. Contudo, apesar de terem sido utilizados os mesmos polímeros de PET para a confecção das três camadas e temperaturas iguais na obtenção dos dados em todas caracterizações, observou-se que, os parâmetros ajustados para uma determinada equação constitutiva se modificam de acordo com a propriedade material que foi utilizada para fazer o ajuste. Isto é, para ajustar cada propriedade material seria necessário uma equação P.T.T. com parâmetros diferentes. Com o objetivo de demonstrar estas discrepâncias, os resultados obtidos serão apresentados na seguinte forma:

i - Ajuste da equação de Phan Thien-Tanner para cada propriedade material específica.

Desta forma, a equação PTT ajustada, pode ser usada para simular o comportamento da camada em situações do processo onde uma determinada característica, cisalhamento ou elongacional, seja a predominante.

ii - Curvas de módulos dinâmicos, viscosidade de cisalhamento e viscosidade elongacional obtidas através de um ajuste mesclado do comportamento das três propriedades materiais. Assim, tem-se uma equação de caráter mais genérico, em termos de representação das propriedades materiais.

Neste segundo item, procurou-se utilizar parâmetros médios, de modo a conservar a contribuição de todas as propriedades materiais ao modelo constitutivo resultante.

iii - Curvas obtidas através do ajuste mesclado das três propriedades materiais, entretanto, utilizando a viscosidade em cisalhamento como a propriedade principal no ajuste dos modelos.

As figuras 5.1.2.VII a 5.1.2.IX apresentam as curvas de G' e G'' obtidas experimentalmente e as preditas teoricamente pelos vários modelos para as três camadas. Os modelos estudados predizem o mesmo comportamento para G' e G'' . As figuras 5.1.2.X a 5.1.2.XII mostram as curvas de viscosidade de cisalhamento experimentais e teóricas; e, as figuras 5.1.2.XIII a 5.1.2.XV apresentam as viscosidades elongacionais experimentais e as preditas pelo modelo de Phan Thien-Tanner para as respectivas camadas A, B e C, como mencionado em (i). As tabelas 5.1.2.VI a 5.1.2.VIII apresentam os parâmetros do modelo ajustado para as respectivas camadas A, B e C.

É importante salientar que, devido às limitações tecnológicas dos equipamentos reométricos utilizados, não foi possível obter dados em amplas faixas de taxa de cisalhamento, elongação e frequências, nas quais o processo na realidade opera. Desta forma, a única possibilidade é extrapolar os dados experimentais para faixas mais elevadas, sendo a seleção de um determinado modelo de aspecto mais qualitativo.

As figuras de números 5.1.2.XVI a 5.1.2.XXIV apresentam as curvas para as três propriedades materiais obtidas através de caracterização experimental e as preditas teoricamente para as respectivas camadas A, B e C, através de um ajuste mesclado das propriedades, como descrito no item (ii). Os valores dos parâmetros do modelo ajustado são apresentados na tabela 5.1.2.IX.

Como é observado pela análise dos diagramas, procurou-se considerar a viscosidade elongacional como o efeito mais significativo entre as três propriedades medidas, apesar de tal consideração ocasionar uma certa perda de representação do modelo constitutivo para as outras duas propriedades, principalmente para o cisalhamento.

As figuras XXV a XXXIII apresentam o ajuste de propriedades materiais, quando considera-se a viscosidade obtida em cisalhamento como a propriedade principal no ajuste da equação PTT, item (iii). Observa-se que ao realizar esta consideração, o modelo perde representatividade para as outras propriedades (G' , G'' e viscosidade elongacional). Esta perda de representação é consequência do tempo de relaxação (λ) da equação constitutiva ser o parâmetro que dita o comportamento das propriedades materiais analisadas. Verificou-se que a viscosidade elongacional ao ser ajustada aos dados experimentais necessita de valores mais elevados para o tempo de relaxação que a viscosidade em cisalhamento. Este comportamento é observado, porque as características elongacionais dos polímeros são estabelecidas em grande parte pelas moléculas de cadeias mais longas, que em geral possuem tempos característicos mais elevados. As características em cisalhamento, por outro lado, são regidas por moléculas menores, que na realidade constituem uma média de tamanho de moléculas, que apresentam tempos característicos mais baixos.

O modelo PTT, não apresentou boa representação para os módulos dinâmicos, atribuindo-se esta deficiência a dois fatores:

- O modelo PTT não consegue representar adequadamente as propriedades medidas com apenas um módulo para o tempo de relaxação. Para contornar esta deficiência seriam necessários um conjunto de valores de tempo de relaxação, como é feito em modelos do tipo KBKZ.

- A caracterização reológica realizada no reômetro ortogonal para obtenção dos módulos dinâmicos apresentou-se inconsistente, ou seja, observou-se que os valores medidos são de grandeza mais elevadas que os fornecidos pela literatura [White e Yamane, 1995], como é mostrado na figura abaixo, onde são comparados os módulos de armazenamento.

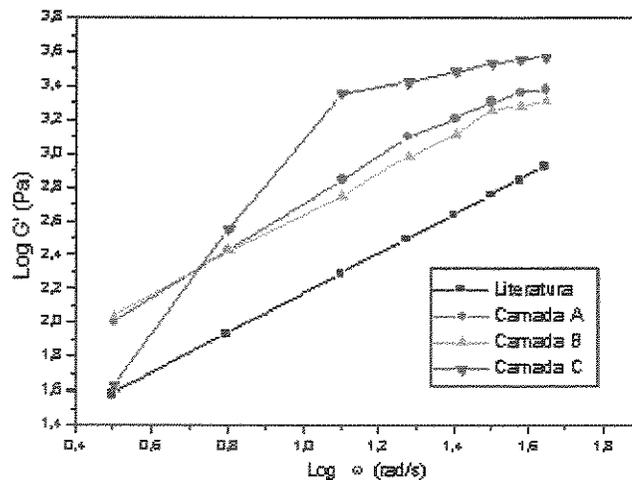


Fig. 5.1.2.1 - Comparação dos módulos de armazenamento obtidos através do reômetro ortogonal para as três camadas com dados da literatura para um polímero de PET.

As deficiências desta caracterização são atribuídas ao fato que o reômetro ortogonal utilizado não possuía uma saída eletrônica dos dados, sendo os resultados impressos em registradores que estão amplamente sujeito a falhas, podendo causar erros nos resultados obtidos. Os desvios dos módulos dinâmicos em relação aos dados da literatura também são devido ao fato que a caracterização apresentada no artigo foi realizada a 285 °C, enquanto que as nossas medidas foram realizadas a 280 °C. Além disso, os polímeros caracterizados neste trabalho, apesar de serem polímeros de PET, não são

polímeros virgens, constituindo em misturas de polímeros reciclados e com cargas minerais.

Em face destas discrepâncias encontradas nas medidas dos módulos dinâmicos, optou-se por considerar apenas os dados de viscosidade elongacional e de cisalhamento no ajuste do modelo PTT que será utilizado na simulação da caixa de coextrusão. A tabela 5.1.2.X, apresenta os valores dos parâmetros ajustados. O comportamento do escoamento dentro do “feedblock” analisado, na realidade possui o caráter em cisalhamento mais pronunciado, assim, no estudo dos casos viscoelásticos, utilizar-se-á o modelo PTT “mesclado” ajustado, priorizando os dados de viscosidade de cisalhamento.

Tabela 5.1.2.I Equações constitutivas ajustadas para as camadas A, B e C

Maxwell convectivo superior	$\bar{\tau}_1 + \lambda \bar{\tau}_{1(t)} = \eta_1 \dot{\gamma}$
Oldroyd-B* e componente viscosa	$\bar{\tau}_1 + \lambda \bar{\tau}_{1(t)} = \eta_1 \dot{\gamma}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2 (\dot{\gamma}) \dot{\gamma}$
Phan Thien-Tanner* e componente viscosa	$\exp\left[\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_1} \text{tr}(\bar{\tau}_1)\right] \bar{\tau}_1 + \lambda \left[\frac{\xi}{2} \bar{\tau}_1^{(1)} + \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \bar{\tau}_{1(t)}\right] = \eta_1 \dot{\gamma}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2 (\dot{\gamma}) \dot{\gamma}$
Giesekus* e componente viscosa	$\left[\bar{I} + \frac{\alpha\lambda}{\eta_1} \bar{\tau}_1\right] \cdot \bar{\tau}_1 + \lambda \bar{\tau}_{1(t)} = \eta_1 \dot{\gamma}$ $\bar{\tau}_2 = \eta_2 (\dot{\gamma}) \dot{\gamma}$

* Nestas equações η_1 e η_2 são determinados do seguinte modo:

$$r = \frac{\eta_2}{\eta} \text{ (razão da viscosidade newtoniana pela viscosidade total)}$$

$$\eta = \eta_1 + \eta_2$$

$$\text{logo: } \eta_1 = \eta^*(1-r) \quad \text{e} \quad \eta_2 = r^* \eta$$

Tabela 5.1.2.II - Parâmetros ajustados para o modelo Bird-Carreau (T=280 °C)

Parâmetros	Camada A	Camada B	Camada C
η_0 (Pa.s)	225	195	310
λ (s)	0,005	0,008	0,003
n	0,804	0,799	0,762

Tabela 5.1.2.III - Parâmetros dos modelos viscoelásticos diferenciais ajustados para a camada A ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Parâmetros	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ϵ	ξ	α	τ
Maxwell	225	0,1	-	-	-	-
Oldroyd-B	225	0,1	-	-	-	0,6
Giesekus	225	0,1	-	-	0,001	0,1
Phan Thien-Tanner	225	0,1	0,02	0,02	-	0,6

Tabela 5.1.2.IV - Parâmetros dos modelos viscoelásticos diferenciais ajustados para a camada B ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Parâmetros	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ϵ	ξ	α	τ
Maxwell	195	0,1	-	-	-	-
Oldroyd-B	195	0,1	-	-	-	0,4
Giesekus	195	0,1	-	-	0,001	0,01
Phan Thien-Tanner	195	0,1	0,05	0,02	-	0,4

Tabela 5.1.2.V - Parâmetros dos modelos viscoelásticos diferenciais ajustados para a camada C ($T = 280\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Parâmetros	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ϵ	ξ	α	τ
Maxwell	325	0,1	-	-	-	-
Oldroyd-B	325	0,1	-	-	-	0,6
Giesekus	325	0,1	-	-	0,001	0,07
Phan Thien-Tanner	325	0,1	0,025	0,02	-	0,6

Tabela 5.1.2.VI - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada propriedade material específica da camada A ($T = 280^{\circ}\text{C}$)

Propriedade material	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ϵ	ξ	r
Módulos (G' e G'')	150	0,06	0,02	0,08	0,6
Visc. Cisalhamento	225	0,005	0,02	0,008	0,1
Visc. Elongacional	225	0,2	0,02	0,02	0,6

Tabela 5.1.2.VII - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada propriedade material específica da camada B ($T = 280^{\circ}\text{C}$)

Propriedade material	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ϵ	ξ	r
Módulos (G' e G'')	150	0,08	0,02	0,08	0,5
Visc. Cisalhamento	195	0,008	0,006	0,0001	0,1
Visc. Elongacional	195	0,24	0,05	0,02	0,2

Tabela 5.1.2.VIII - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada propriedade material específica da camada C ($T = 280^{\circ}\text{C}$)

Propriedade material	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ϵ	ξ	r
Módulos (G' e G'')	250	0,06	0,02	0,1	0,8
Visc. Cisalhamento	320	0,003	0,06	0,0008	0,1
Visc. Elongacional	325	0,28	0,03	0,02	0,2

Tabela 5.1.2.IX - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada camada considerando a contribuição conjunta dos dados das três propriedades materiais, priorizando a viscosidade elongacional ($T = 280 \text{ }^{\circ}\text{C}$)

Camada	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ε	ξ	r
A	225	0,1	0,02	0,02	0,6
B	195	0,1	0,05	0,02	0,4
C	325	0,1	0,025	0,02	0,6

Tabela 5.1.2.X - Parâmetros do modelo de Phan Thien-Tanner ajustados para cada camada considerando a contribuição conjunta dos dados das três propriedades materiais, priorizando a viscosidade em cisalhamento ($T = 280 \text{ }^{\circ}\text{C}$)

Camada	η_0 (Pa.s)	λ (s)	ε	ξ	r
A	225	0,003	0,06	0,008	0,1
B	195	0,006	0,04	0,0001	0,28
C	320	0,008	0,04	0,0008	0,1

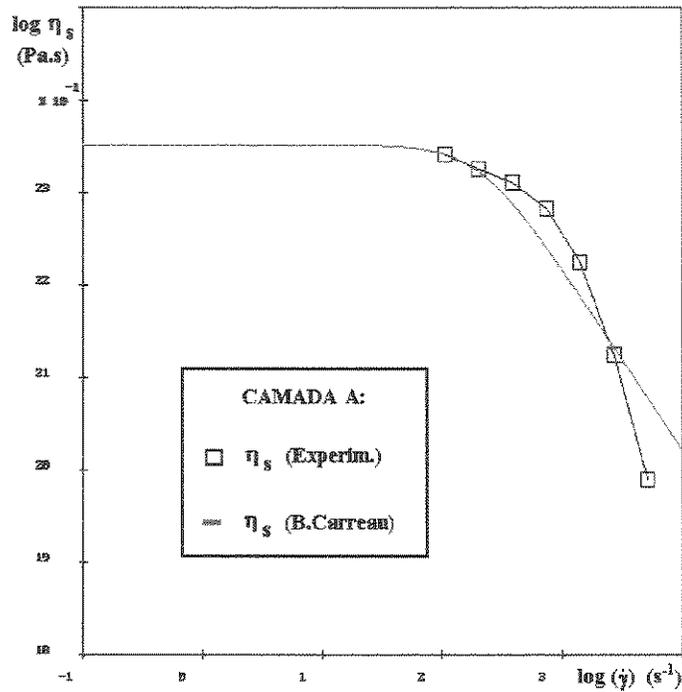


Fig. 5.1.2.I Ajuste do modelo Bird-Carreau através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A.

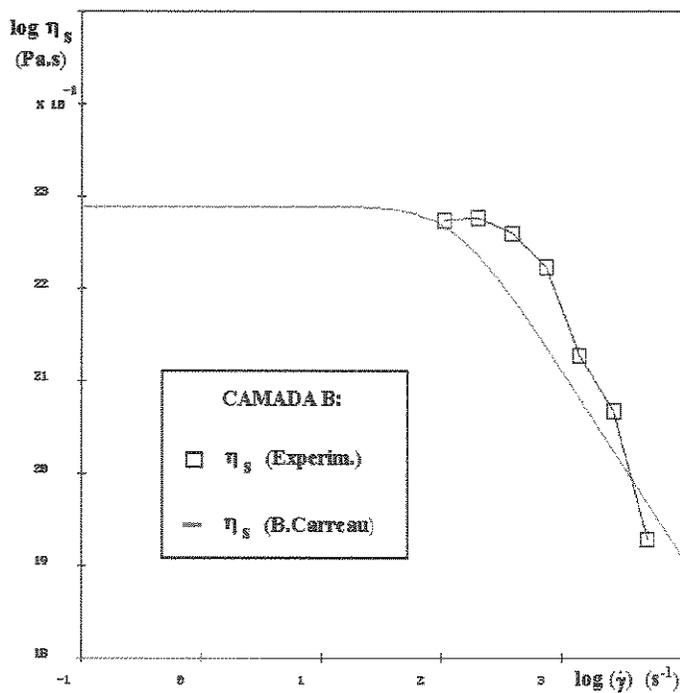


Fig. 5.1.2.II Ajuste do modelo de Bird-Carreau através de dados experimentais de viscosidade em cisalhamento para a camada B.

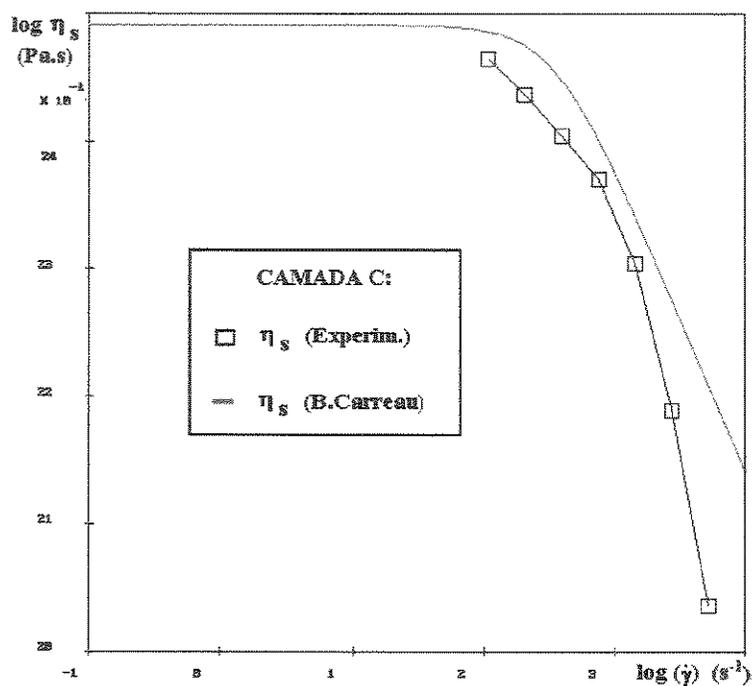


Fig. 5.1.2.III Ajuste do modelo de Bird-Carreau através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada C.

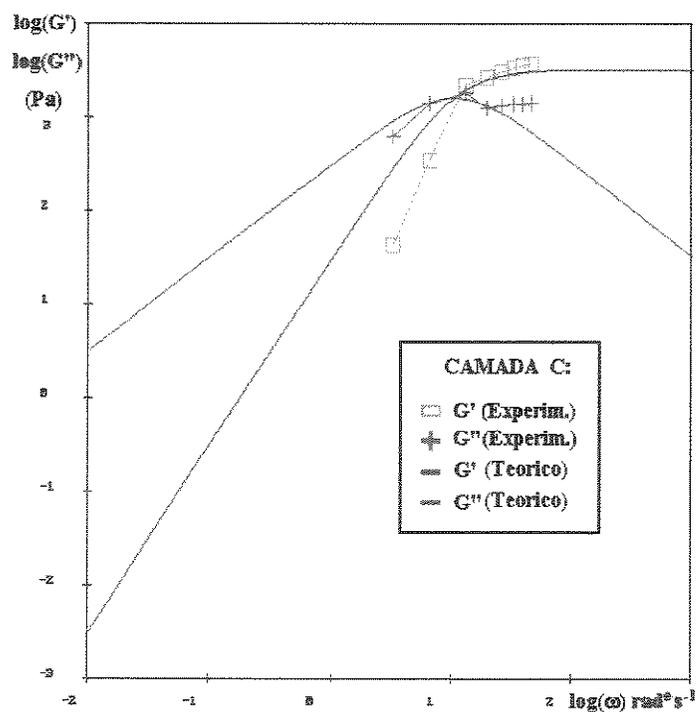


Fig.5.1.2.IV Ajuste proporcionado aos modelos viscoelásticos diferenciais (Maxwell, Oldroyd-B, Giesekus e Phan Thien-Tanner) através de dados experimentais dos módulos de armazenamento e perda.

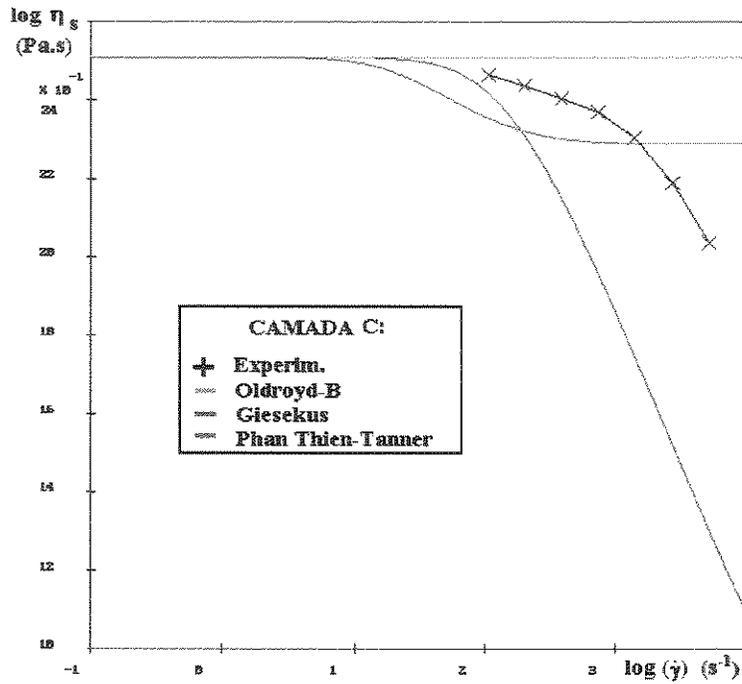


Fig. 5.1.2.V Ajuste proporcionado aos modelos viscoelásticos diferenciais através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento.

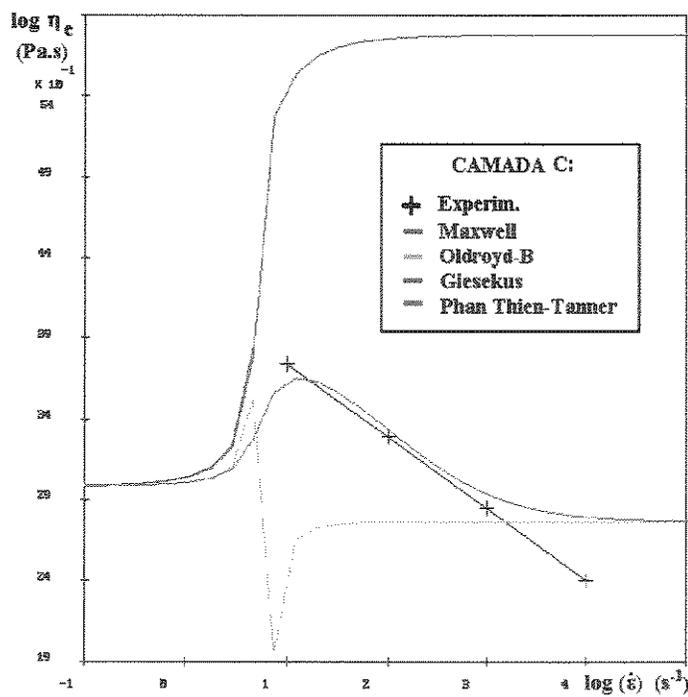


Fig. 5.1.2.VI Ajuste proporcionado aos modelos viscoelásticos diferenciais através de dados experimentais de viscosidade elongacional.

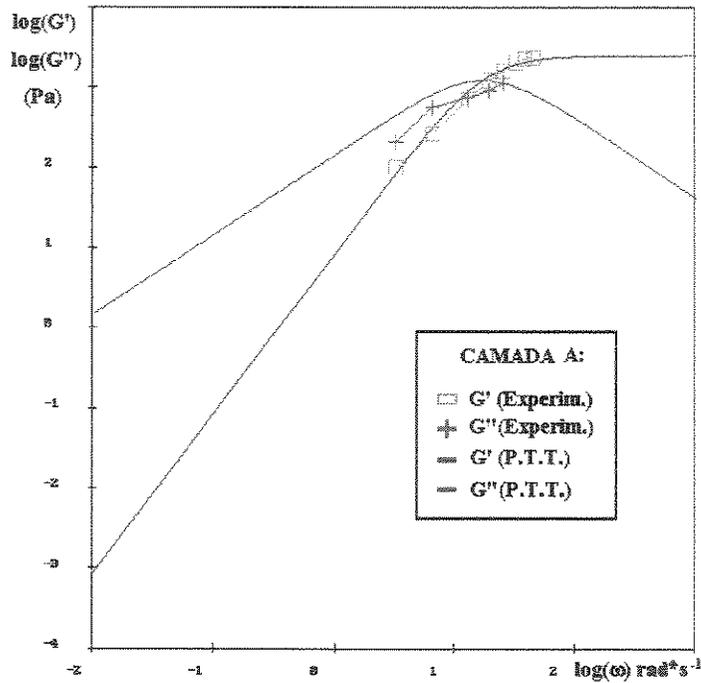


Fig. 5.1.2. VII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada A.

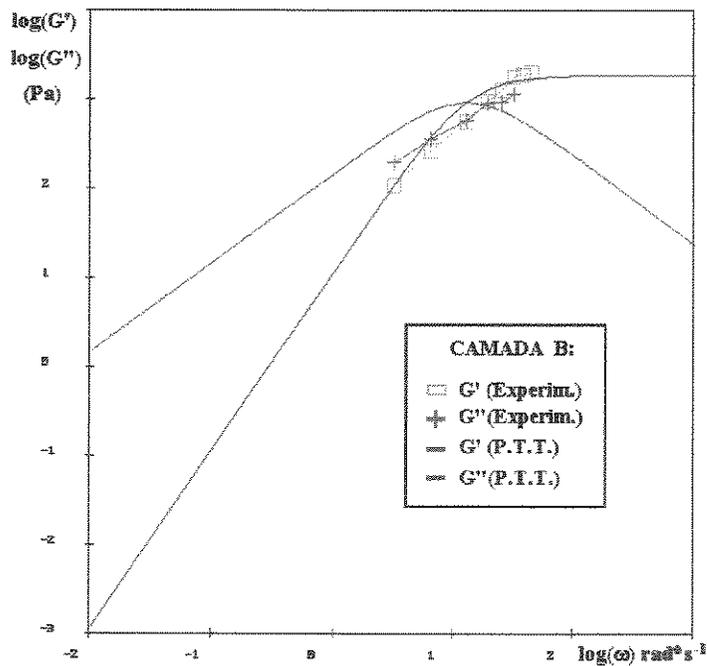


Fig. 5.1.2. VIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada B.

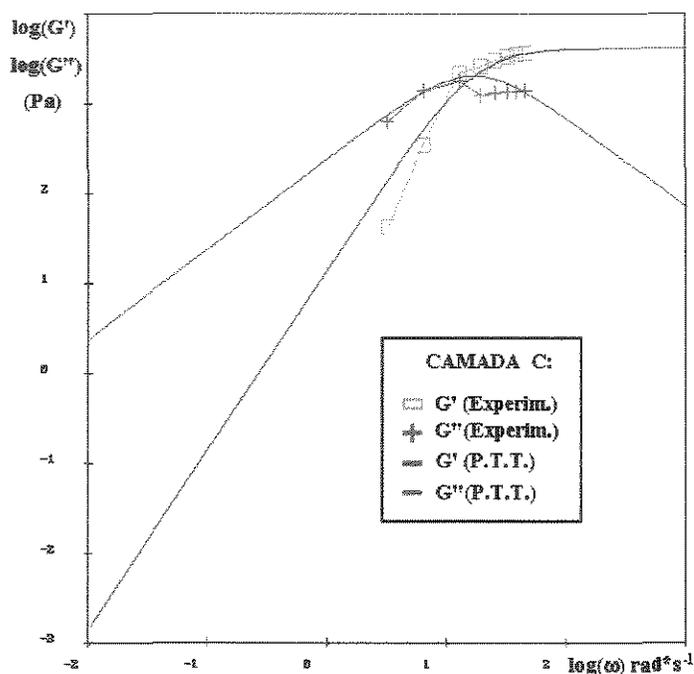


Fig. 5.1.2.IX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de módulos de armazenamento e perda para a camada C.

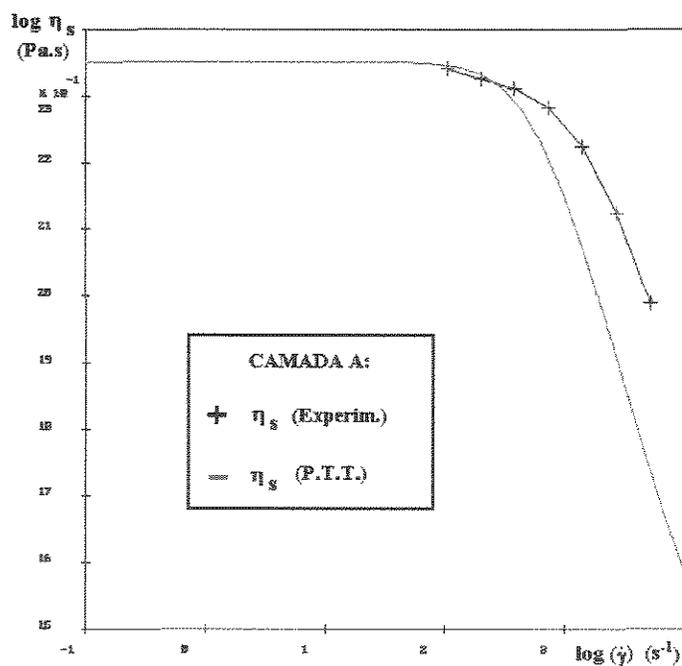


Fig. 5.1.2.X Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A.

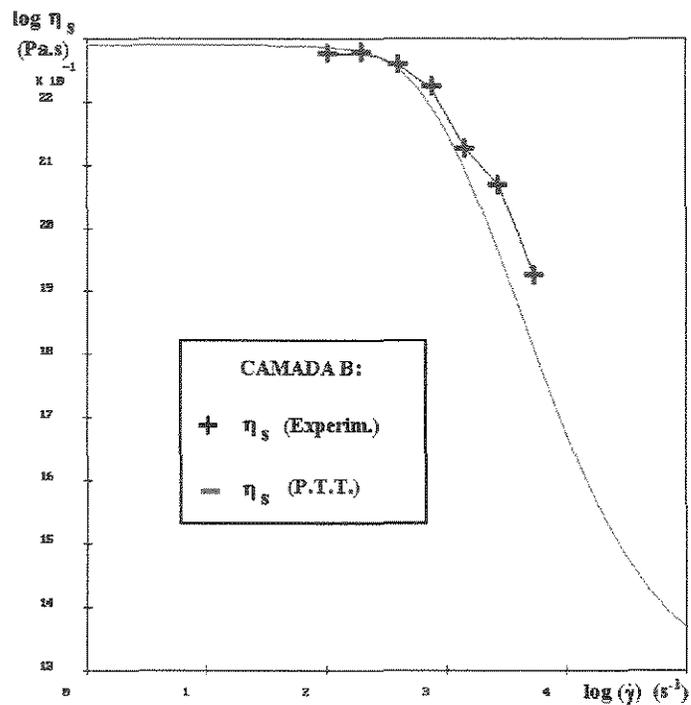


Fig. 5.1.2.XI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada B.

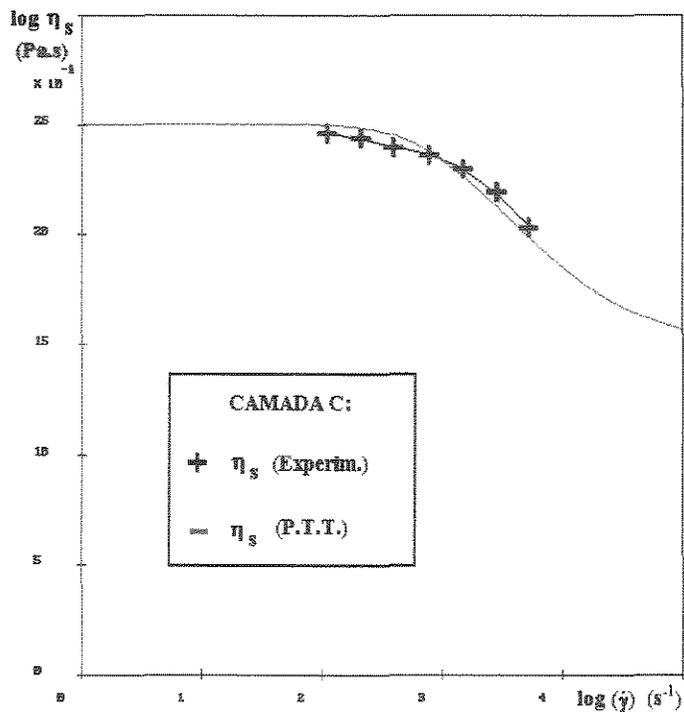


Fig. 5.1.2.XII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada C.

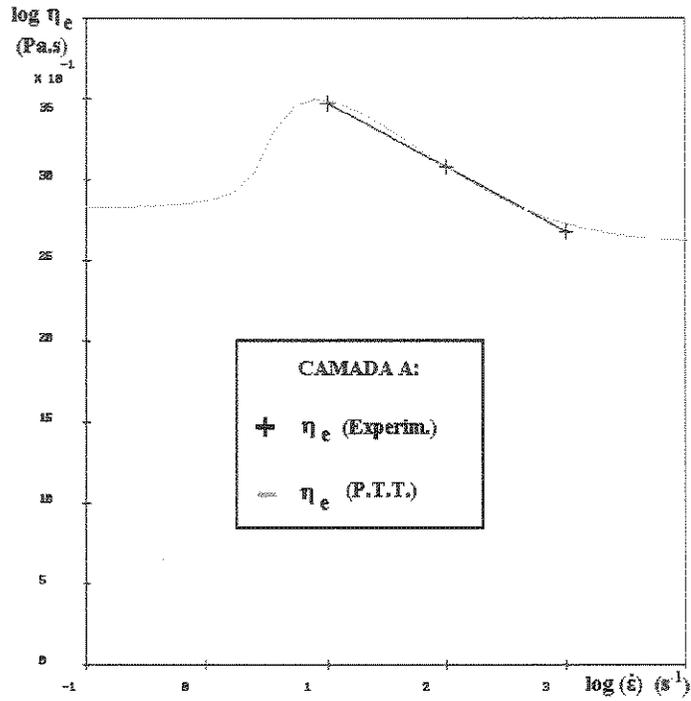


Fig. 5.1.2.XIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada A.

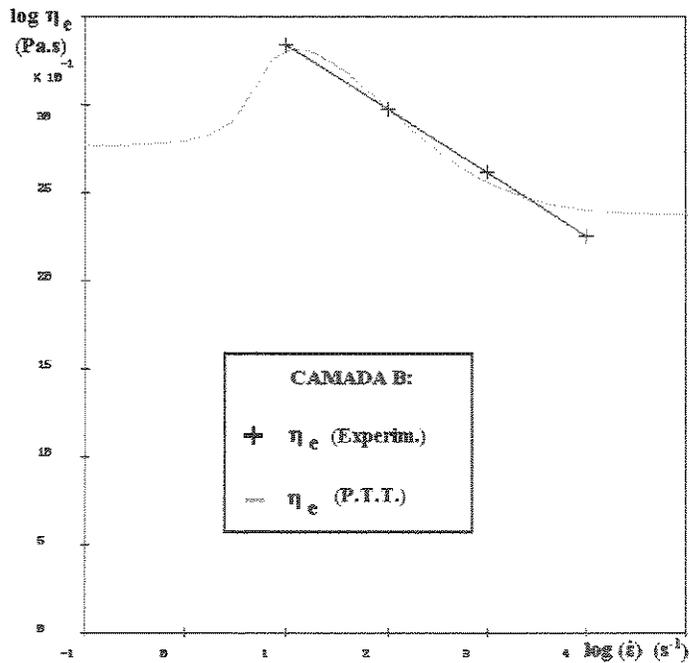


Fig. 5.1.2.XIV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada B.

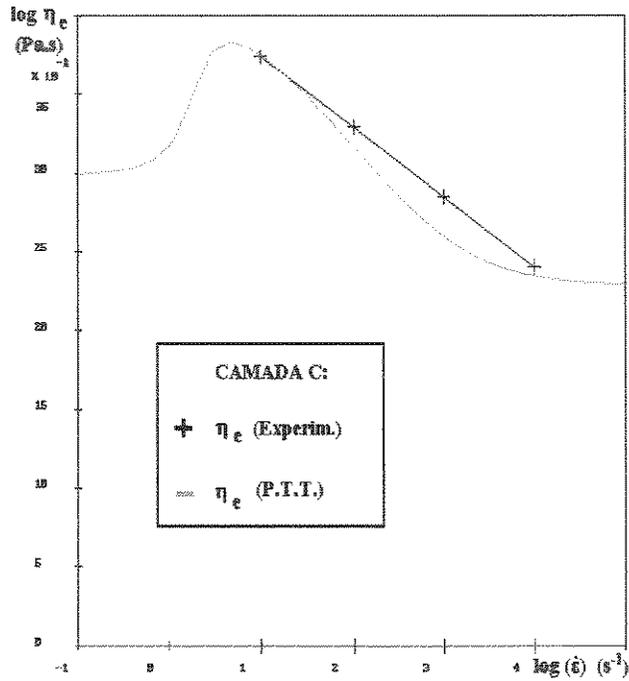


Fig. 5.1.2.XV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner através de dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada C.

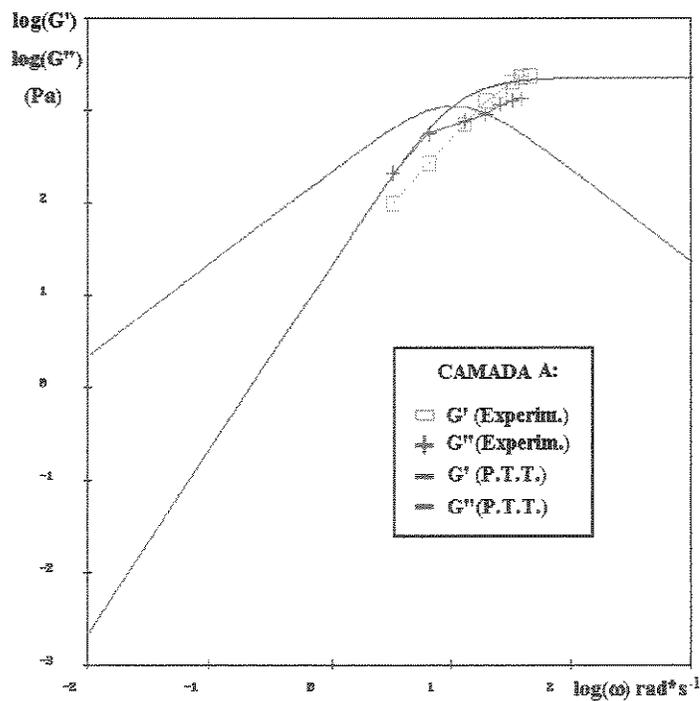


Fig. 5.1.2.XVI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazen. e perda para a camada A, priorizando η_e .

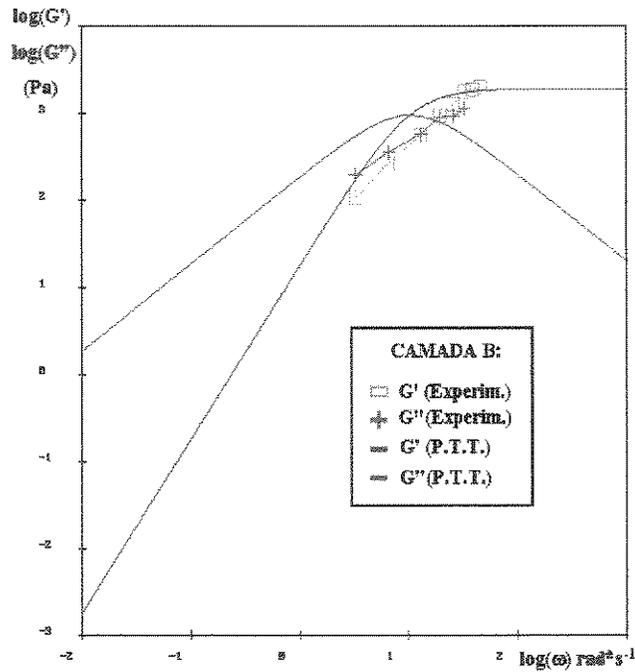


Fig. 5.1.2.XVII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazen. e perda para a camada B, priorizando η_e .

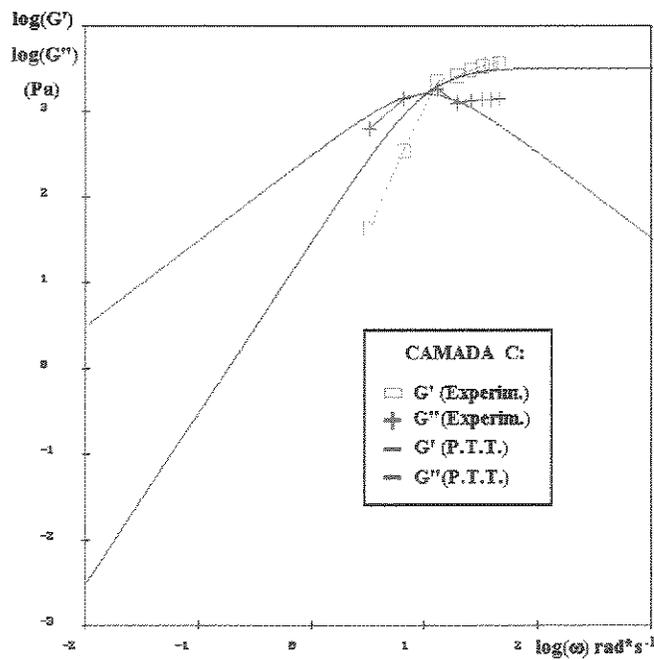


Fig 5.1.2.XVIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de módulos de armazen. e perda para a camada C, priorizando η_e .

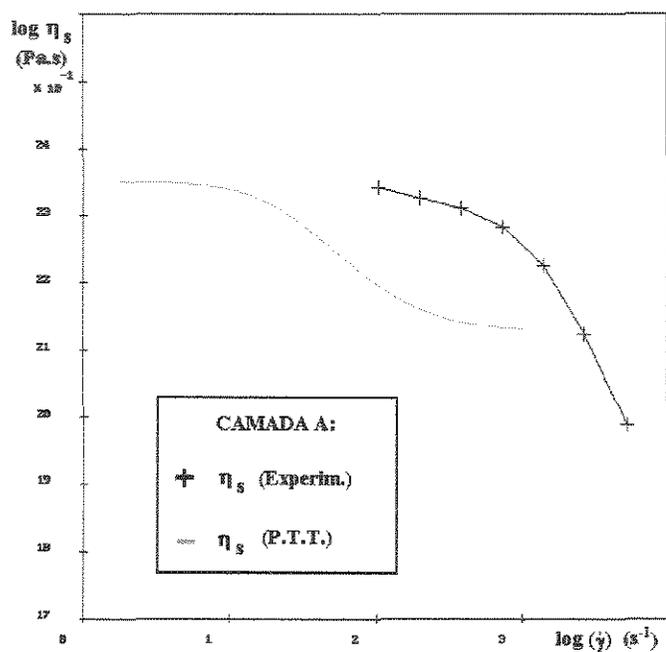


Fig. 5.1.2.XIX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada A, priorizando η_e .

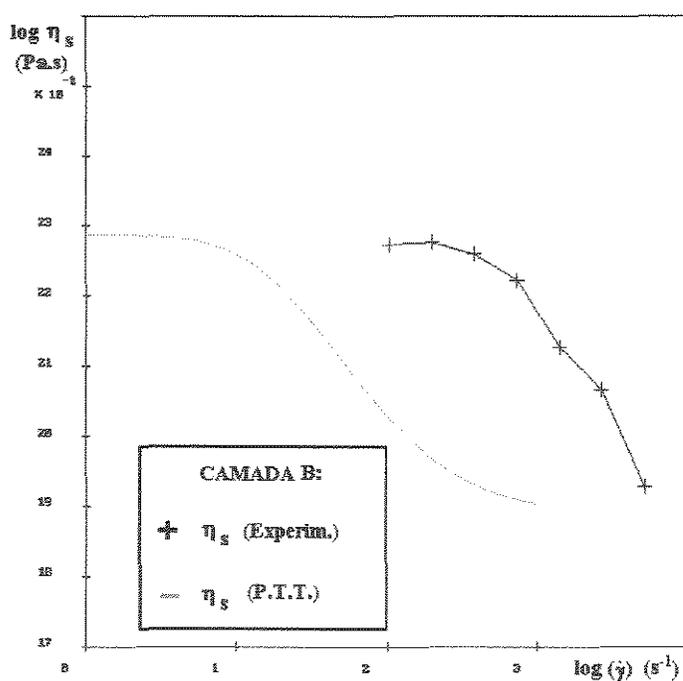


Fig. 5.1.2.XX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada B, priorizando η_e .

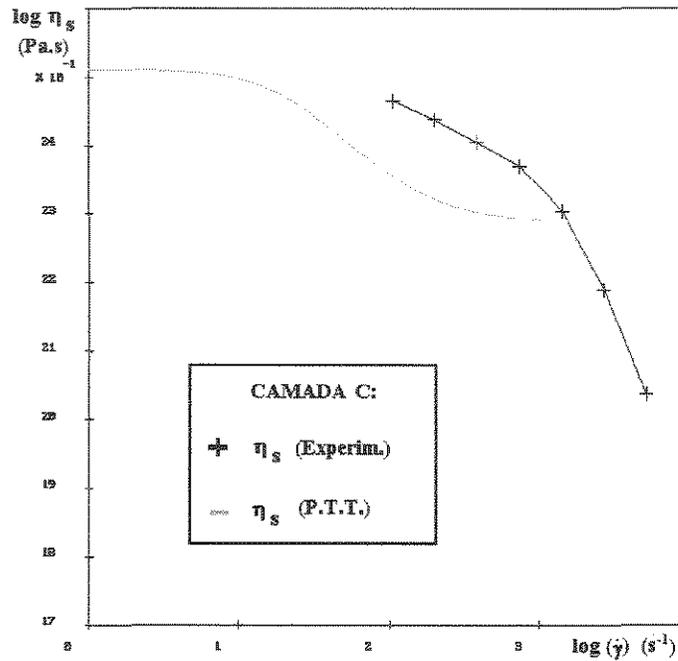


Fig. 5.1.2.XXI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade de cisalhamento para a camada C, priorizando η_e .

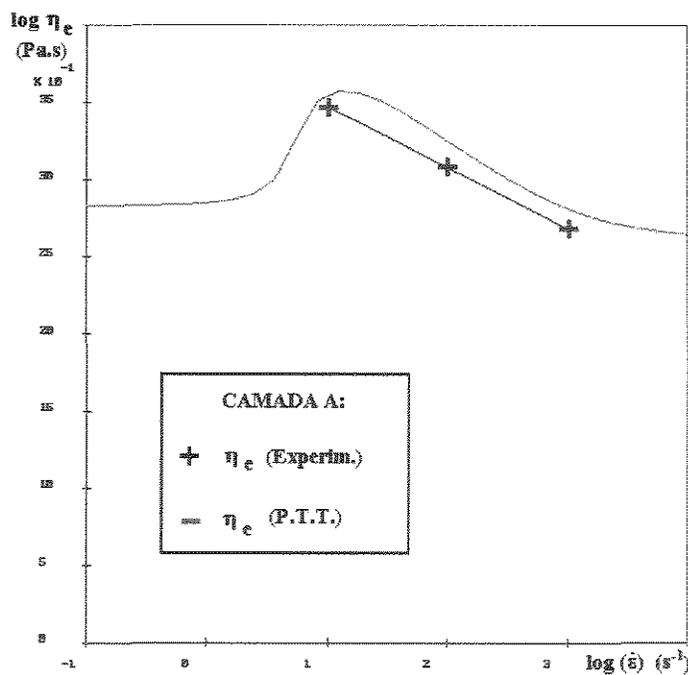


Fig. 5.1.2.XXII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada A, priorizando η_e .

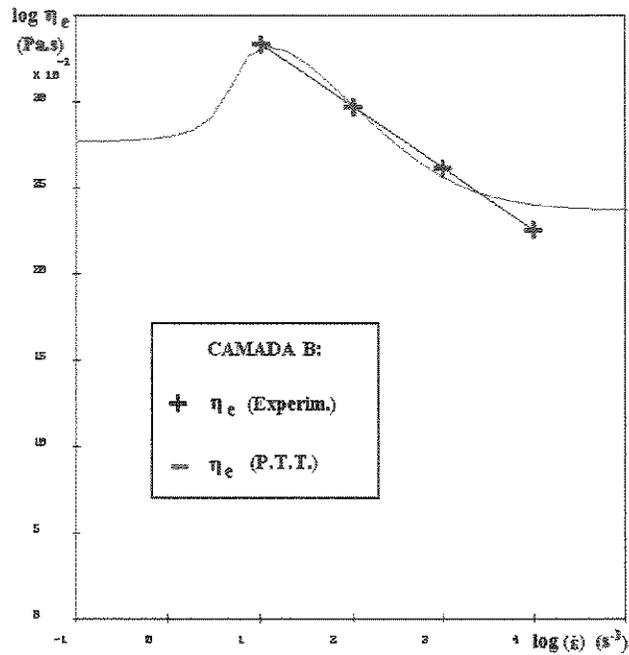


Fig 5.1.2.XXIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para a camada B, priorizando η_e .

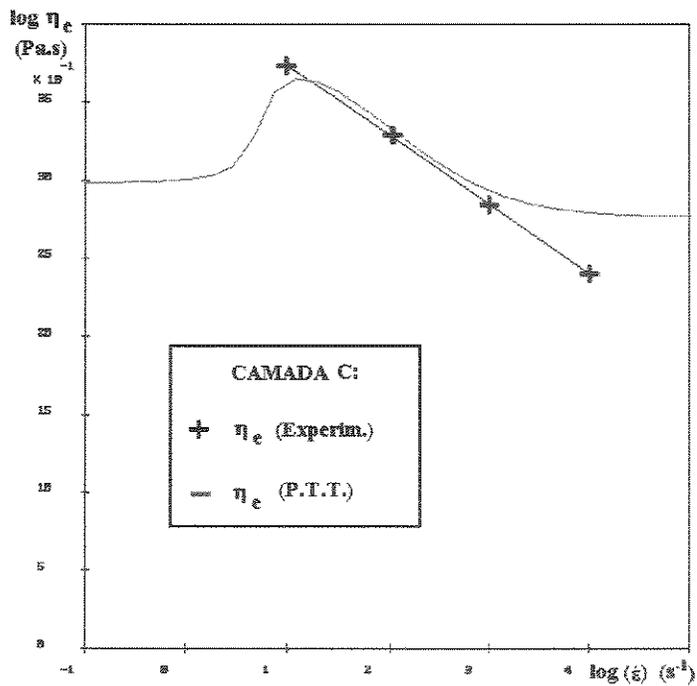


Fig 5.1.2.XXIV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados experimentais de viscosidade elongacional para camada C, priorizando η_e .

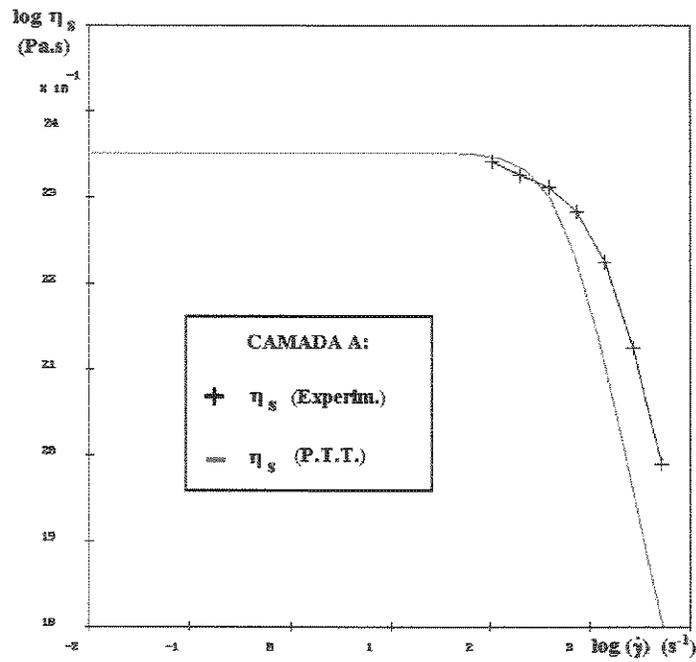


Fig. 5.1.2.XXV Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de viscosidade de cisalhamento para a camada A, priorizando η_s .

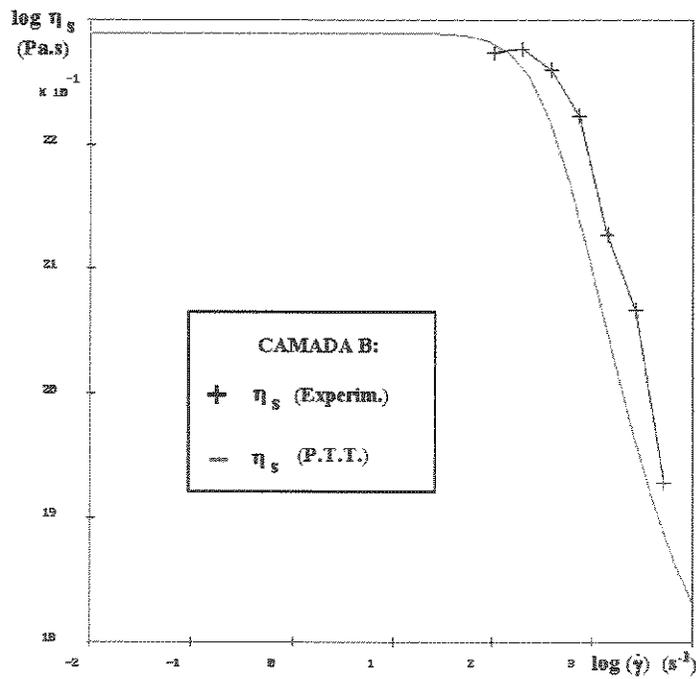


Fig. 5.1.2.XXVI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de viscosidade de cisalhamento para a camada B, priorizando η_s .

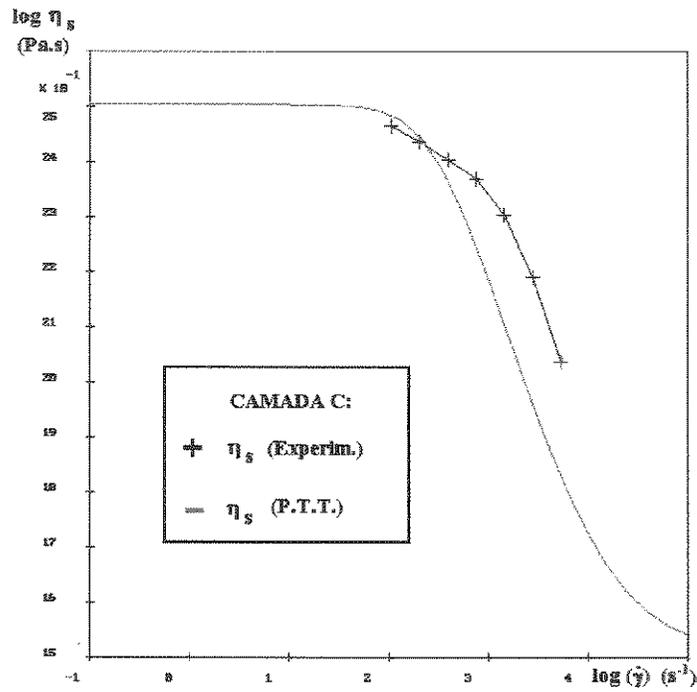


Fig. 5.1.2.XXVII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de viscosidade de cisalhamento para a camada C, priorizando η_s .

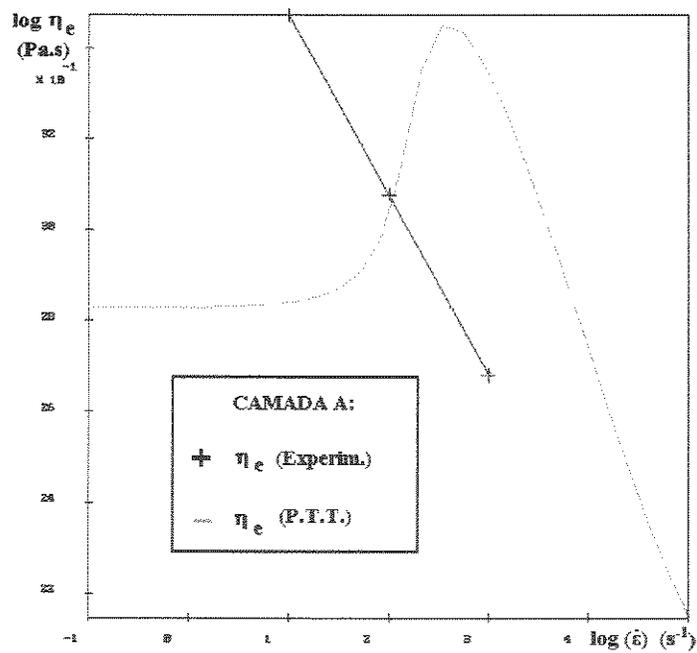


Fig. 5.1.2.XXVIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de viscosidade elongacional para a camada A, priorizando η_s .

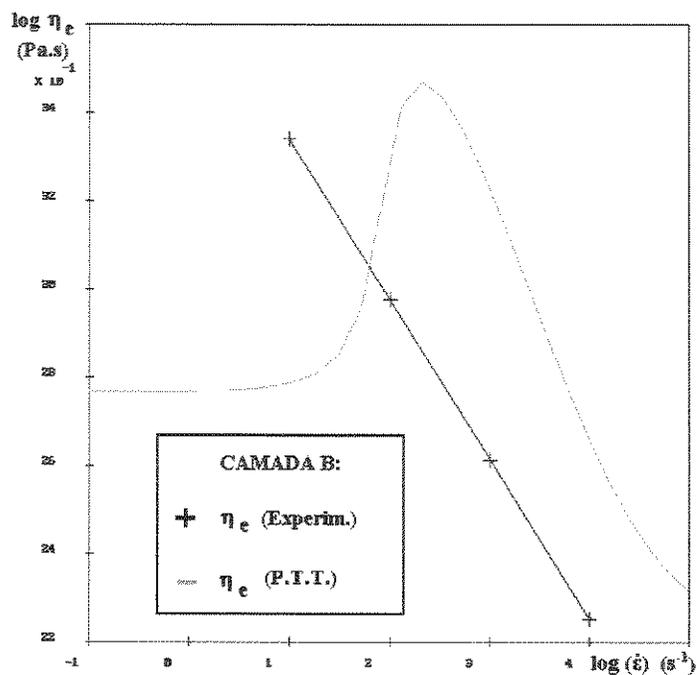


Fig. 5.1.2.XXIX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de viscosidade elongacional para a camada B, priorizando η_s .

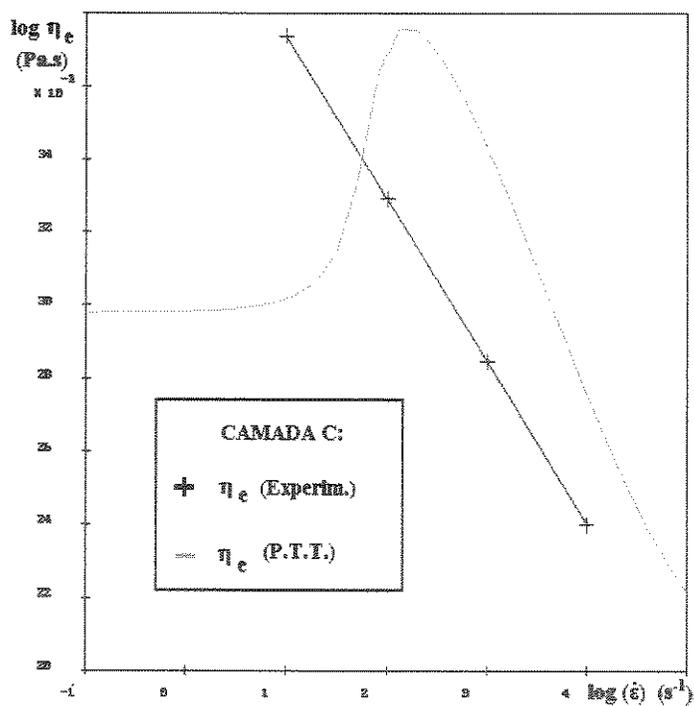


Fig. 5.1.2.XXX Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de viscosidade elongacional para a camada C, priorizando η_s .

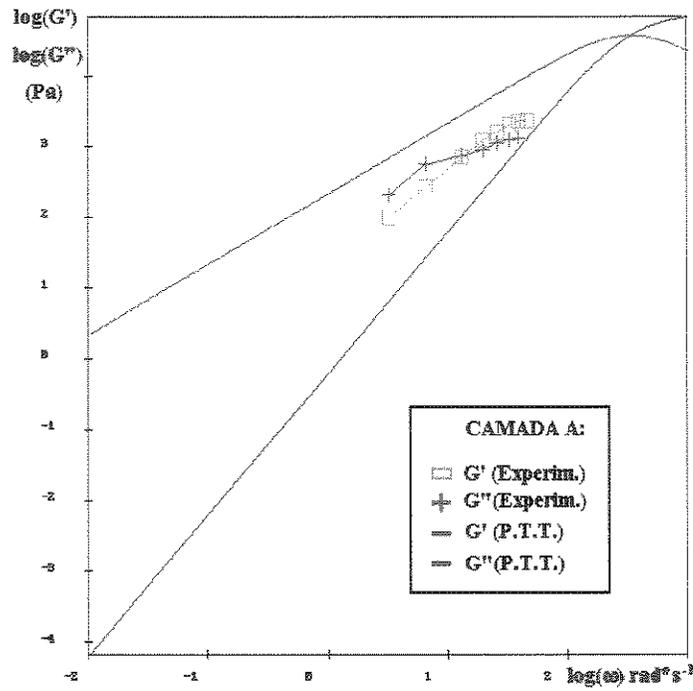


Fig. 5.1.2.XXXI Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de módulos de armazenamento e perda para a camada A, priorizando η_s .

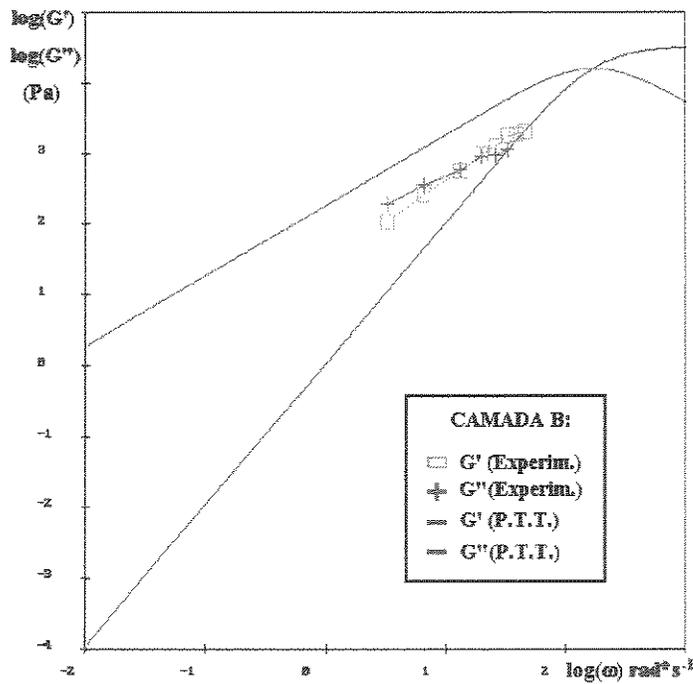


Fig. 5.1.2.XXXII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de módulos de armazenamento e perda para a camada B, priorizando η_s .

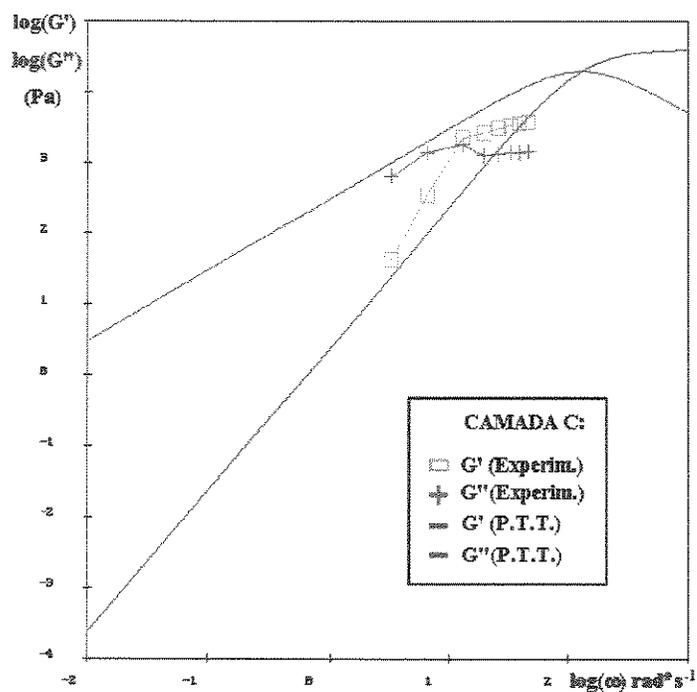


Fig. 5.1.2.XXXIII Ajuste do modelo de Phan Thien-Tanner (“mesclado”) aos dados de módulos de armazenamento e perda para a camada C, priorizando η_s .

5.2 - SIMULAÇÕES VISCOLÁSTICAS EM 2-D

Estes estudos objetivaram melhorar o caráter preditivo das simulações para identificar a posição da interface das camadas, bem como verificar a tendência do sistema multicamada a apresentar instabilidades interfaciais. Um estudo completo de simulações de fluxos newtonianos em geometrias bidimensionais da caixa de coextrusão, analisando variações na geometria, ângulos de entrada, diferentes vazões e viscosidades é apresentado na dissertação de Witkoski.

A geometria do problema bidimensional, pode ser considerada como se realizasse um corte junto ao plano de simetria x-z da geometria tridimensional apresentada na figura 4.1.1.c.

Inicialmente, na definição do problema a ser simulado, considerou-se ambas camadas do sistema como sendo viscoelásticas do tipo PTT, com os respectivos parâmetros ajustados no item 5.1.2. Entretanto, o caráter viscoelástico das camadas, adicionado à presença de interface móvel, tornam o problema altamente não-linear, de tal forma que não apresenta convergência numérica para a resolução do problema. Assim, simplificou-se o problema, considerando-se, apenas o comportamento da camada principal do “feedblock” como sendo viscoelástico. Esta aproximação, não implica em grandes danos aos resultados da simulação, porque na realidade, a quase totalidade do canal do “feedblock” após a confluência das camadas é ocupado pela camada que escoar no canal principal, ou seja, pela camada B.

Simulou-se dois casos bidimensionais, definidos como a seguir:

- Caso A:

- camadas B e C.

- Ângulo do canal de entrada da camada C à 30° e com alargamento da seção.
- $\rho_B = 1240 \text{ Kg/m}^3$ e $\rho_C = 1110 \text{ Kg/m}^3$
- vazão volumétrica de B por unidade de largura = $4,357\text{E-}3 \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$; vazão volumétrica de C por unidade de largura = $1,612\text{E-}3 \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$.
- Considerou-se o problema isotérmico e foram desprezados os efeitos de gravidade e inércia dos fluidos.
- Modelos viscoelásticos para as camadas B e C com os parâmetros ajustados conforme o item 5.1.2.

- Caso B :

Simulou-se as mesmas condições do caso A para as camadas B e C, porém com o ângulo do canal de entrada da camada C igual à 90° e sem alargamento da seção.

É importante ressaltar, que nas simulações realizadas para os casos viscoelásticos investigamos somente os sistema de camadas B e C, porque este conjunto é o responsável pela maior diferença de propriedades reológicas, pois conforme os resultados da caracterização, A e B possuem comportamento semelhantes.

As figuras 5.2.I e 5.2.II mostram as malhas de elementos finitos utilizadas no cálculo dos fluidos viscoelástico e newtoniano, respectivamente, para a geometria em que a camada C entra lateralmente à 30° . A figura 5.2.III apresenta a malha de elementos finitos utilizada no cálculo do fluxo, no qual a camada C entra lateralmente à 90° , tendo o seu comportamento representado por um modelo viscoelástico.

As figuras 5.2.IV a 5.2.VI mostram a posição da linha de corrente na região próxima a interface entre as camadas B e C. Observa-se que na entrada a 30° o deslocamento da interface é menor que no caso em que a entrada da camada C é a 90° .

Comparou-se os resultados da simulação com ângulo de entrada da camada C à 30° , utilizando primeiramente um modelo newtoniano para a viscosidade da camada B e a seguir resolveu-se novamente este problema usando o modelo PTT ajustado para esta camada. Pelo exame das figuras 5.2.VII a 5.2.XVIII, que apresentam as variáveis de escoamento, observa-se um comportamento semelhante em ambas previsões, com um pequeno acréscimo nos picos de máximo e mínimo nas curvas das propriedades analisadas. Este resultado decorre do fato que o sistema que analisamos, não apresenta grandes contribuições de efeitos elásticos, o que é comprovado pelo baixo número de Weissenberg ($We = 0,012$). Além disso, pelos resultados obtidos da caracterização reológica verifica-se que a diferença das propriedades entre as camadas não é muito acentuada. Em sistemas onde a diferença de elasticidade dos polímeros é elevada, certamente haverá grandes variações entre as previsões proporcionadas pelo modelo newtoniano e modelos viscoelásticos.

Uma característica interessante, observada nos resultados das simulações viscoelásticas, figuras 5.2.VII, 5.2.IX, 5.2.X, 5.2.XII, 5.2.XIII, 5.2.XV, 5.2.XVI e 5.2.XVIII é a presença de oscilações nos resultados das variáveis analisadas, após atingir o pico característico da aceleração do fluido na confluência das camadas. Estas oscilações tendem a aumentar com a aproximação da seção de saída dos fluidos do canal de escoamento. Como é observado pelas figuras de velocidades na direção x e taxas de cisalhamento ao longo do canal de escoamento, a condição de contorno de saída “outflow”, que é a condição padrão

especificada para regiões de saída pelo Polyflow, não é adequada. Esta condição, na realidade, é satisfatória quando trabalha-se com fluidos newtonianos com um perfil de velocidade completamente desenvolvido. Entretanto, os fluidos viscoelásticos possuem componentes normais não-nulas para o tensor de tensões, as quais são geradas com o cisalhamento do fluido ao longo das paredes do canal de escoamento.

Os fluidos viscoelásticos, também possuem “memória” que considera sua história de deformação, assim, se o fluxo na saída é afetado pelo que aconteceu com o fluido durante o escoamento, a condição de contorno na saída deve levar em consideração estes fatores. No caso do Polyflow, para fluidos viscoelásticos a condição de saída é imposta por uma velocidade tangencial nula do fluido e, em substituição a força normal nula como ocorre no caso de fluidos newtonianos, é imposto um perfil de velocidade normal completamente desenvolvido. Mas esta condição como é observado em nossos resultados ainda não é uma condição ideal. As figuras 5.2.XX e 5.2.XXI do perfil de velocidade v_x para os casos viscoelásticos mostram claramente o comportamento anômalo observado pelo fluido na seção de saída. Tal comportamento, entretanto, não é observado para o caso newtoniano representado na figura 5.2.XIX.

Uma outra forma de definição da condição “outflow” que o Polyflow nos permite é a imposição de valores para a força normal e para a velocidade tangencial. Contudo, para obter esses valores, seria necessário a simulação de escoamentos em canais com razão L/H (comprimento-altura) suficientemente elevadas para que obtenha-se um escoamento completamente desenvolvido e, por conseguinte as condições na saída da caixa de coextrusão.

Na realidade, não há atualmente nenhuma teoria que estabeleça as condições de contorno que devem ser impostas em fluxos viscoelásticos.

Pela legenda das velocidades v_x , apresentado nas figuras 5.2.XIX a 5.2.XXI, nota-se valores negativos para estas grandezas. Tais valores negativos são indicativos que pode existir recirculação e até mesmo pontos de estagnação de polímeros ao longo do “feedblock”. Com objetivo de verificar se tais fenômenos são observados nos problemas simulados, realizou-se detalhamentos dos perfis de velocidades ou “zoom” das regiões onde se dá a confluência das camadas (figuras 5.2.XXII a XXIV) e na região de saída dos fluidos (figuras 5.2.XXV a 5.2.XXVII). Pela análise dessas figuras, constata-se que as velocidades negativas observadas para o caso em que a camada C entra à 30° e tem seu comportamento representado pelo modelo viscoelástico PTT é devido exclusivamente a deficiência na definição da condição de contorno para a saída dos fluidos, não havendo recirculações de fluido como fica evidenciado pela figura 5.2.XXIII. Entretanto, no caso em que a camada C entra à 90° e é representada pelo modelo PTT, observa-se que além das velocidades negativas devido à condição de saída dos fluidos, também existe a recirculação, como é verificado pela figura 5.XXIV. Tais observações estão em concordância com o que é relatado no trabalho de Witkoski, em que geometrias com ângulos de confluência das camadas à 90° dão origem a ciclos no escoamento dos fluidos.

Apesar das oscilações na resposta das variáveis de escoamento, como discutido anteriormente, tornarem-se críticas próximo a seção de saída dos fluidos, o interesse da análise deste trabalho é no ponto de confluência das camadas.

Ao comparar os resultados das simulações do caso à 30° com o caso à 90° , sendo em ambos os casos o comportamento do fluido B representado pelo modelo PTT, chega-se a constatações análogas às previstas pelas simulações dos casos newtonianos realizados por Witkoski, que investigou a influência da

geometria da caixa de coextrusão sobre os efeitos de instabilidades interfaciais. Com a camada C entrando à 30° , figura 5.2.VII, o gradiente de alongação D_{zz} apresenta um pico positivo bastante elevado, demonstrando que na interface o fluido B sofre uma aceleração na direção do escoamento. Por outro lado, com a entrada à 90° , figura 5.2.IX, a tensão D_{zz} apresenta inicialmente um pico negativo alto, ou seja, os fluidos são desacelerados.

Estes resultados também mantêm coerência com os que foram obtidos na literatura [Su & Khomami, 1992; Khomami & Wilson, 1995], pois segundo os trabalhos destes pesquisadores a aceleração dos fluidos na direção do escoamento, criam campos de tensões crescentes na direção do fluxo, sendo assim necessário a execução de maiores forças na interface para criar uma instabilidade. No caso à 90° , onde o fluxo compressivo é elevado, ocorre um efeito inverso gerando um sistema mais susceptível a desestabilização, que permite a amplificação da perturbação sofrida originalmente.

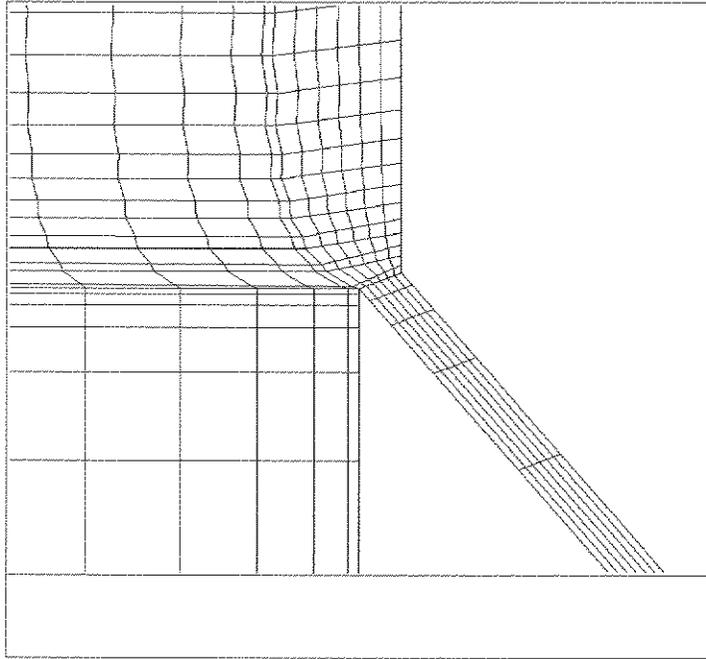


Fig. 5.2.I - Malha de elem. finitos em torno da entrada C à 30° (Viscoelástico).

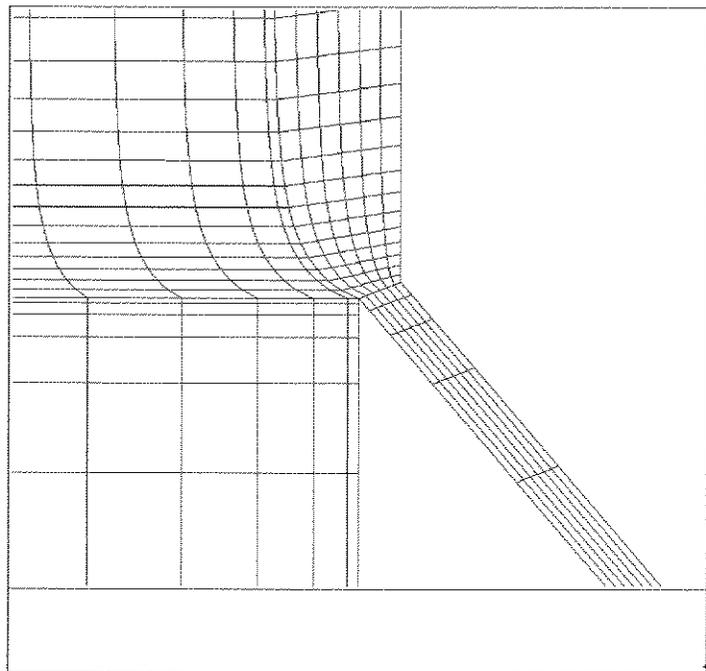


Fig. 5.2.II - Malha de elem. finitos em torno da entrada C à 30° (Newtoniano)

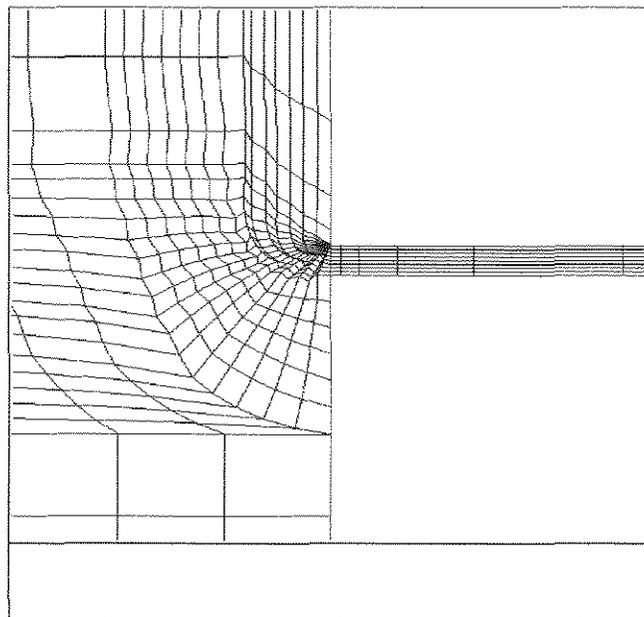


Fig. 5.2.III - Malha de elem. finitos em torno da entrada C à 90° (Viscoelástico)

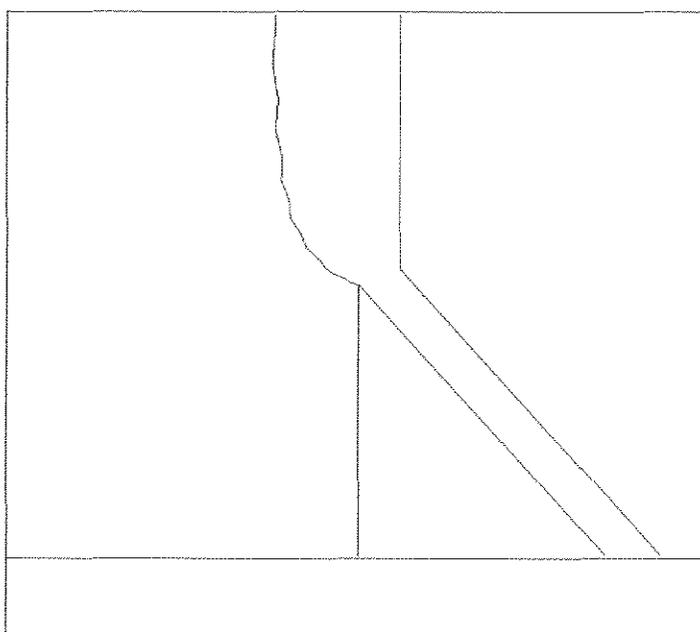


Fig. 5.2.IV - Linha de corrente (L.C.) na interface BC com a entrada C à 30° (Viscoelástico)

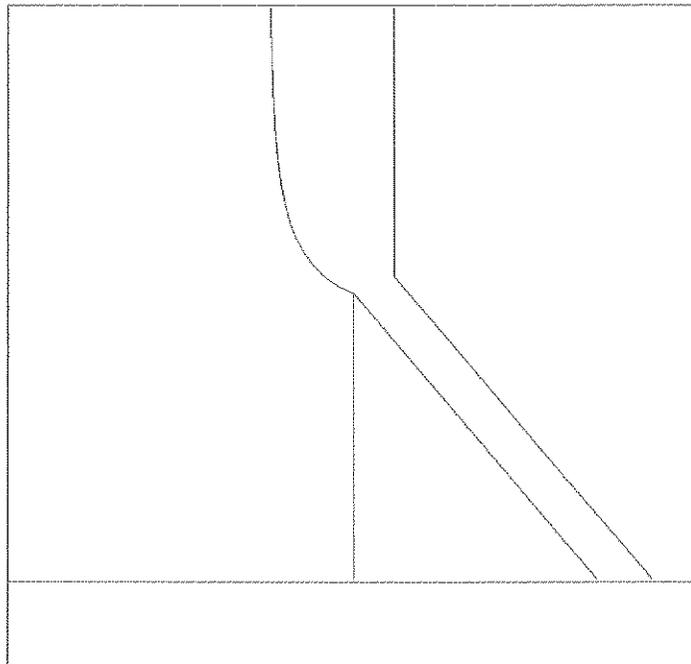


Fig. 5.2.V - Linha de corrente (L.C.) na interface BC com a entr. C à 30° (Newt.)

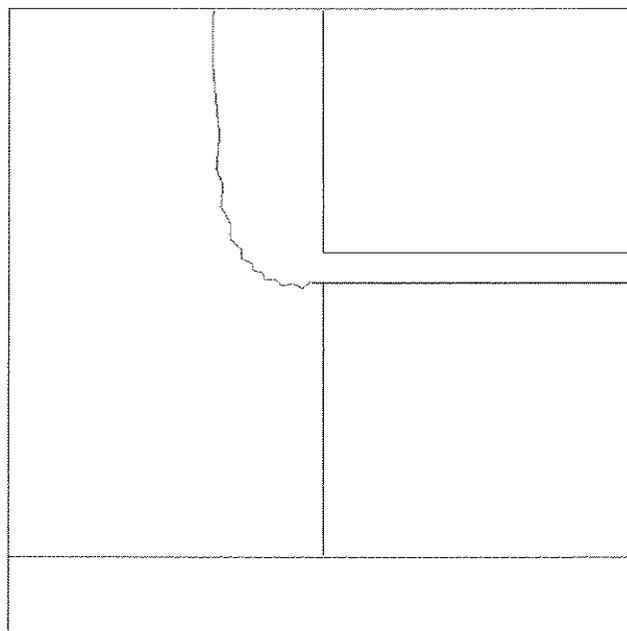


Fig. 5.2.VI - Linha de corrente na interface BC com a entr. C à 90° (Visc.)

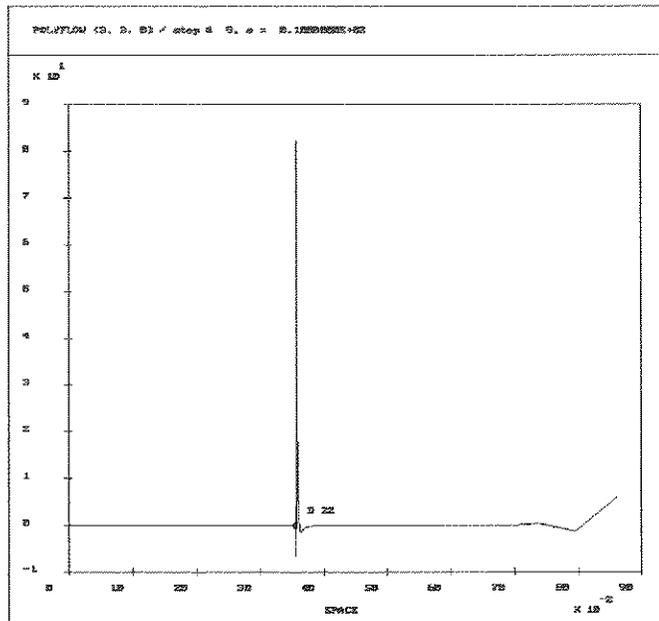


Fig. 5.2.VII - Comp. elong. de $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com a entr. C à 30° (Viscoelástico).

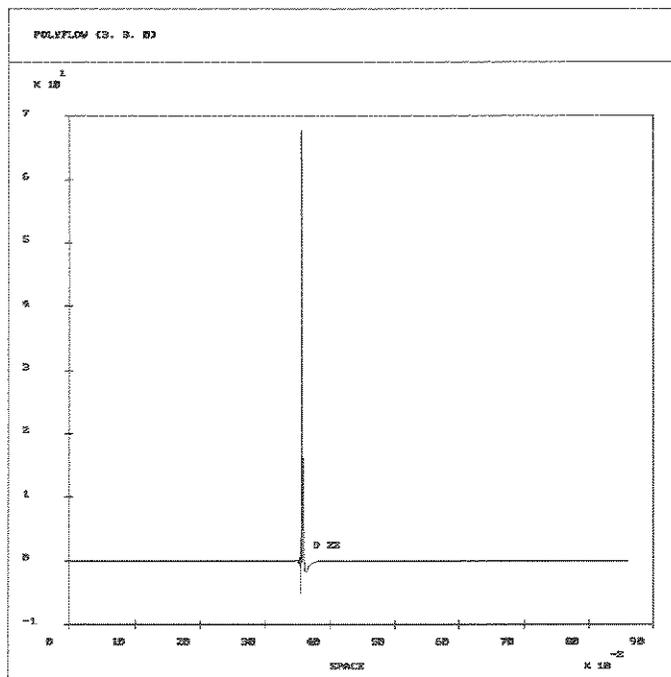


Fig 5.2.VIII - Comp. elong. de $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. C à 30° (Newtoniano).

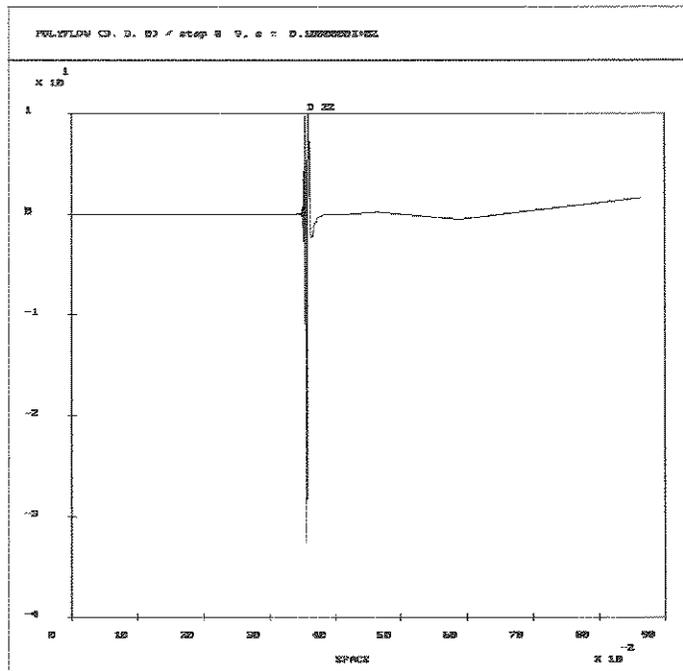


Fig. 5.2.IX - Compon. elong. de $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. C à 90° (Viscoelástico).

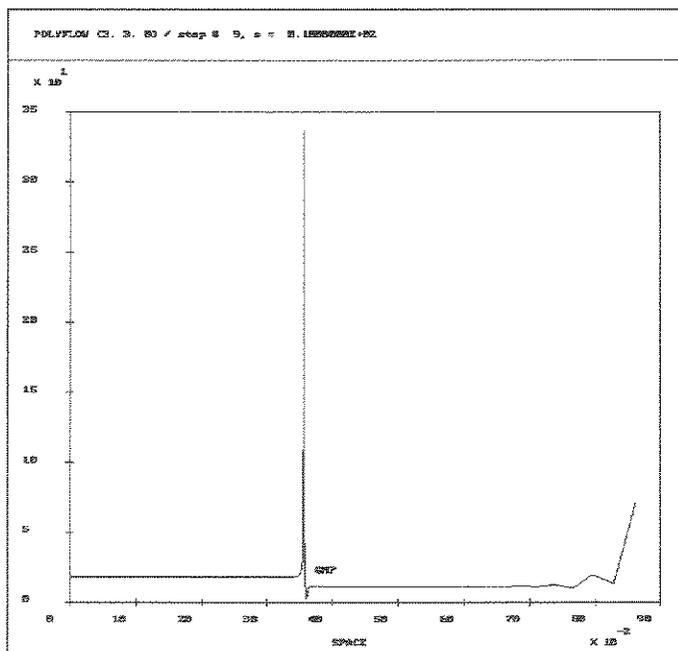


Fig. 5.2.X - Taxa de cisalh. $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. à 30° (Visc.)

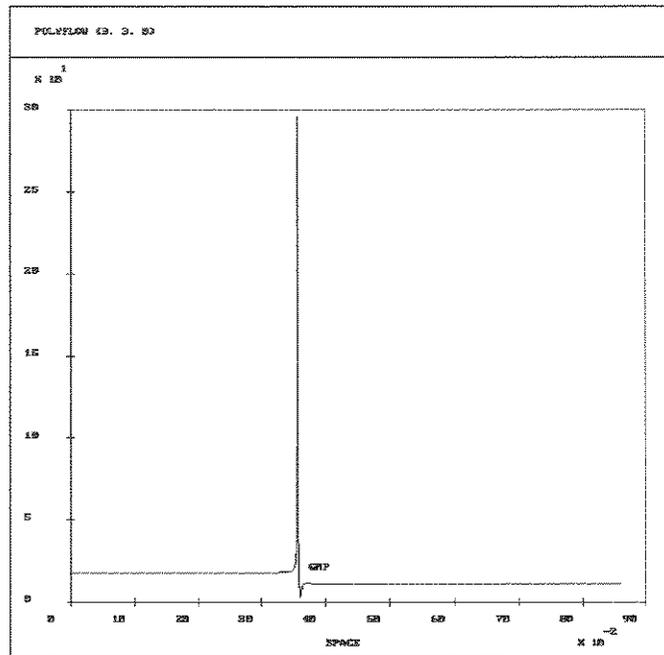


Fig. 5.2.XI - Taxa de cisalh. $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entr. à 30° (Newtoniano).

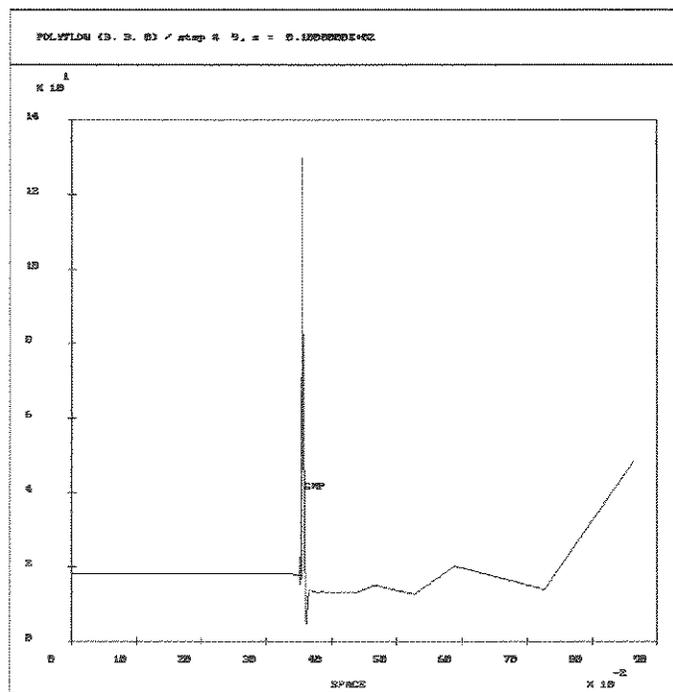


Fig. 5.2.XII - Taxa de cisalh. $\dot{\gamma}$ na L.C. da interface BC com entrada à 90° (Viscoelástico).

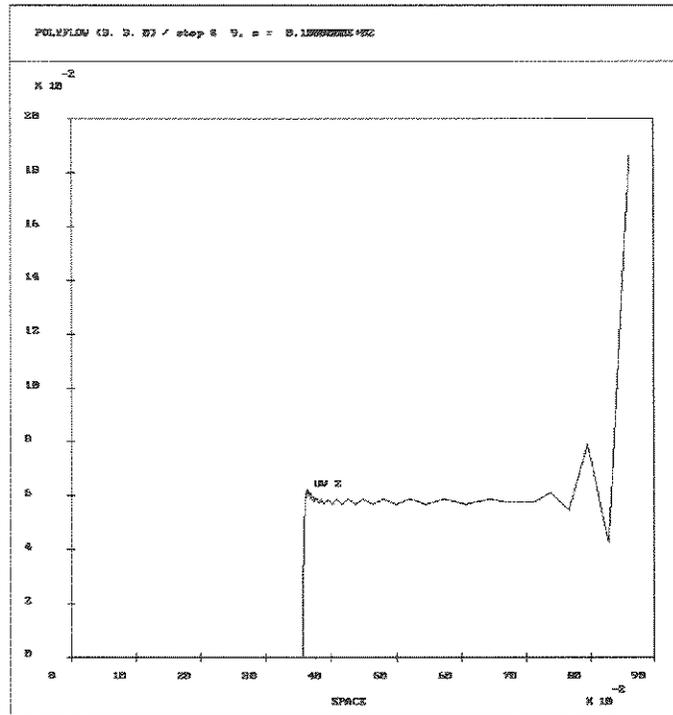


Fig. 5.2.XIII - Veloc. v_z na linha de corrente da interface BC com entr. C à 30° (Viscoelástico).

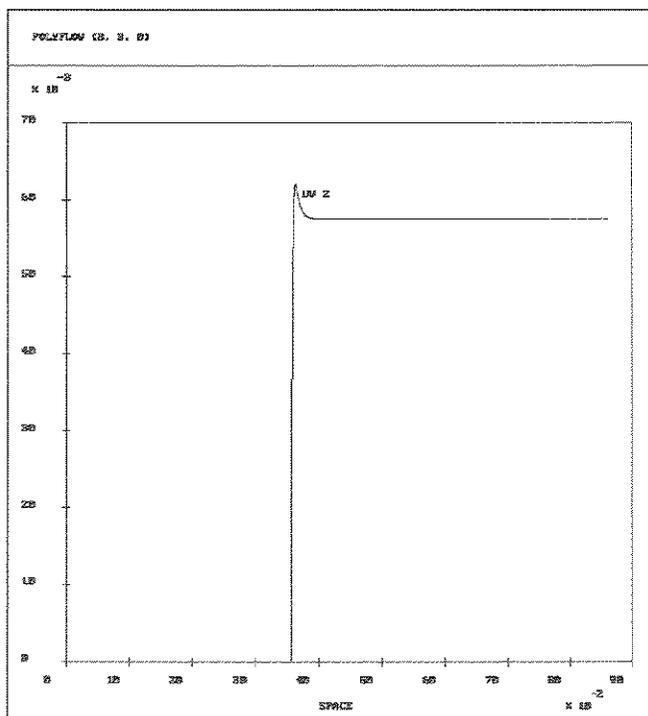


Fig. 5.2.XIV - Veloc. v_z na linha de corrente da interface BC com entr. C à 30° (Newtoniano).

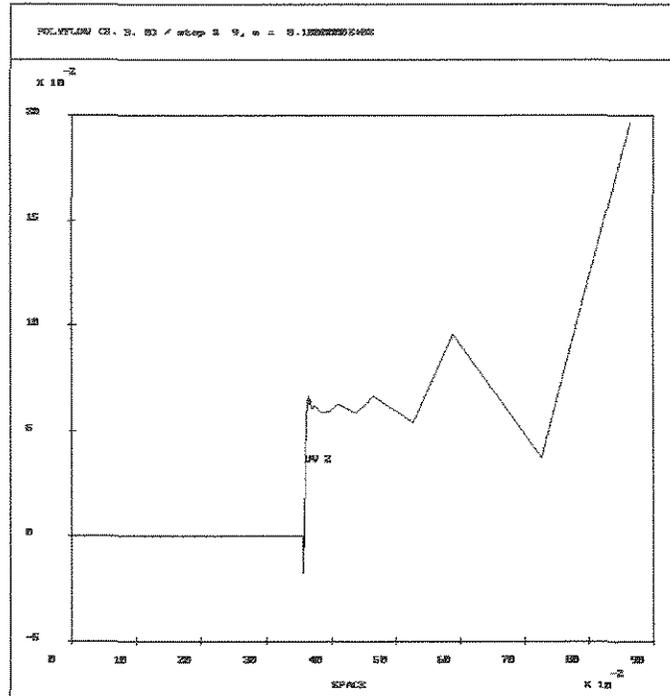


Fig. 5.2.XV - Veloc. v_z na linha de corrente da interface BC com entr. C à 90° (Viscoelástico).

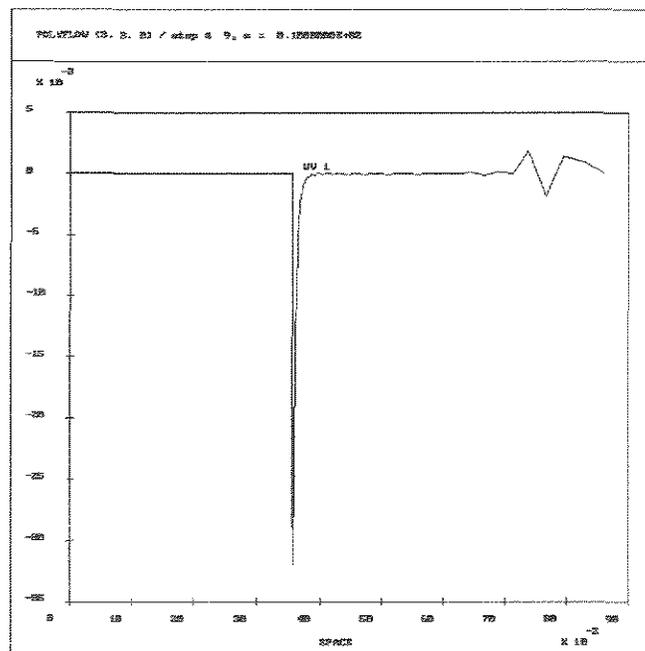


Fig. 5.2.XVI - Veloc. v_x na linha de corrente da interface BC com entr. C à 30° (Viscoelástico).

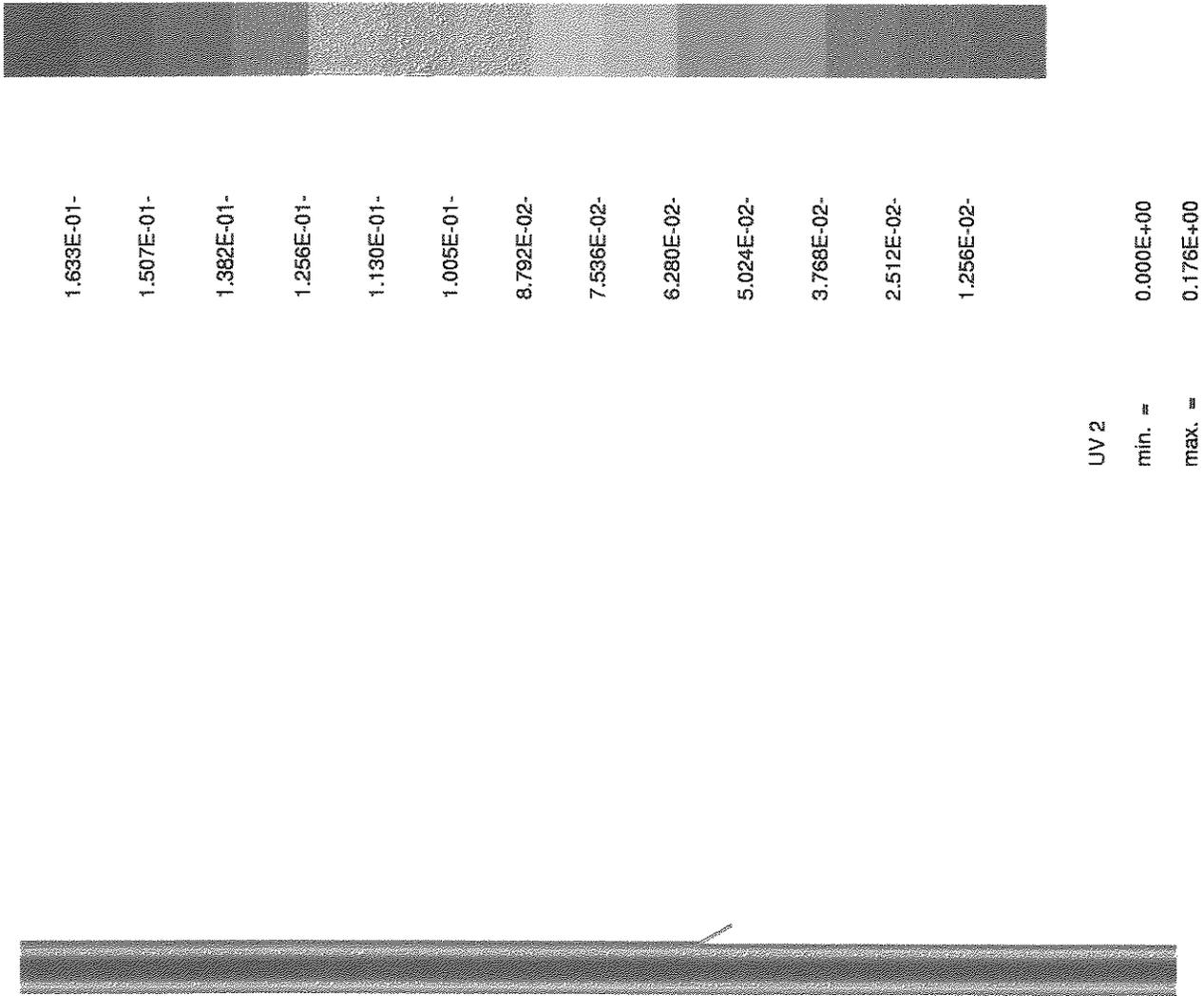
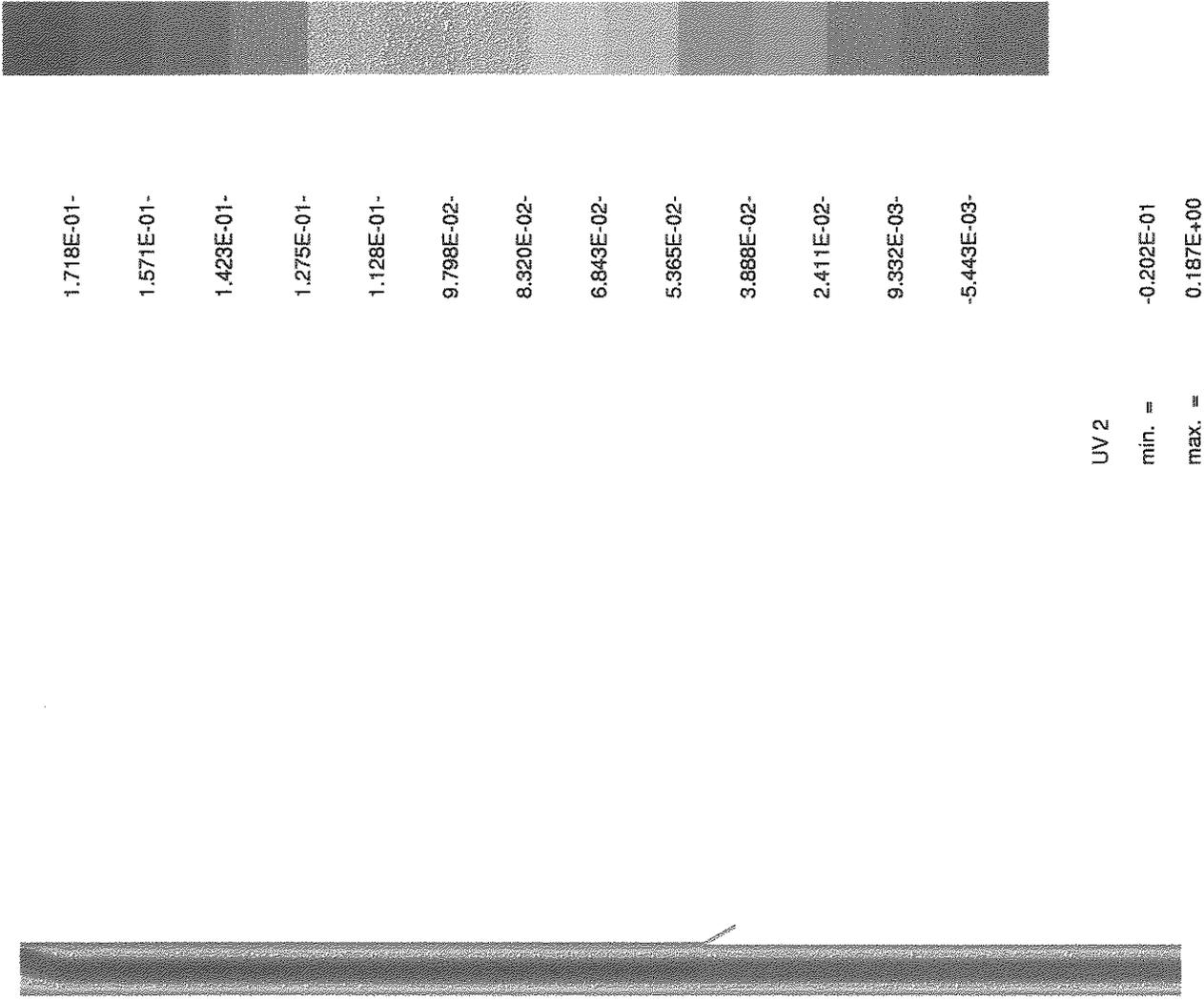


Fig. 5.2.XIX - Perfil de velocidade v_x para entr. à 30^0 (Newtoniano)

POLYFLOW (3.3.0)



UV 2

min. = -0.202E-01

max. = 0.187E+00

POLYFLOW (3. 3. 0) / step # 9, s = 0.1000000E+02

Fig. 5.2.XX - Perfil de velocidade v_x para entr. à 30^0 (Viscoelástico)

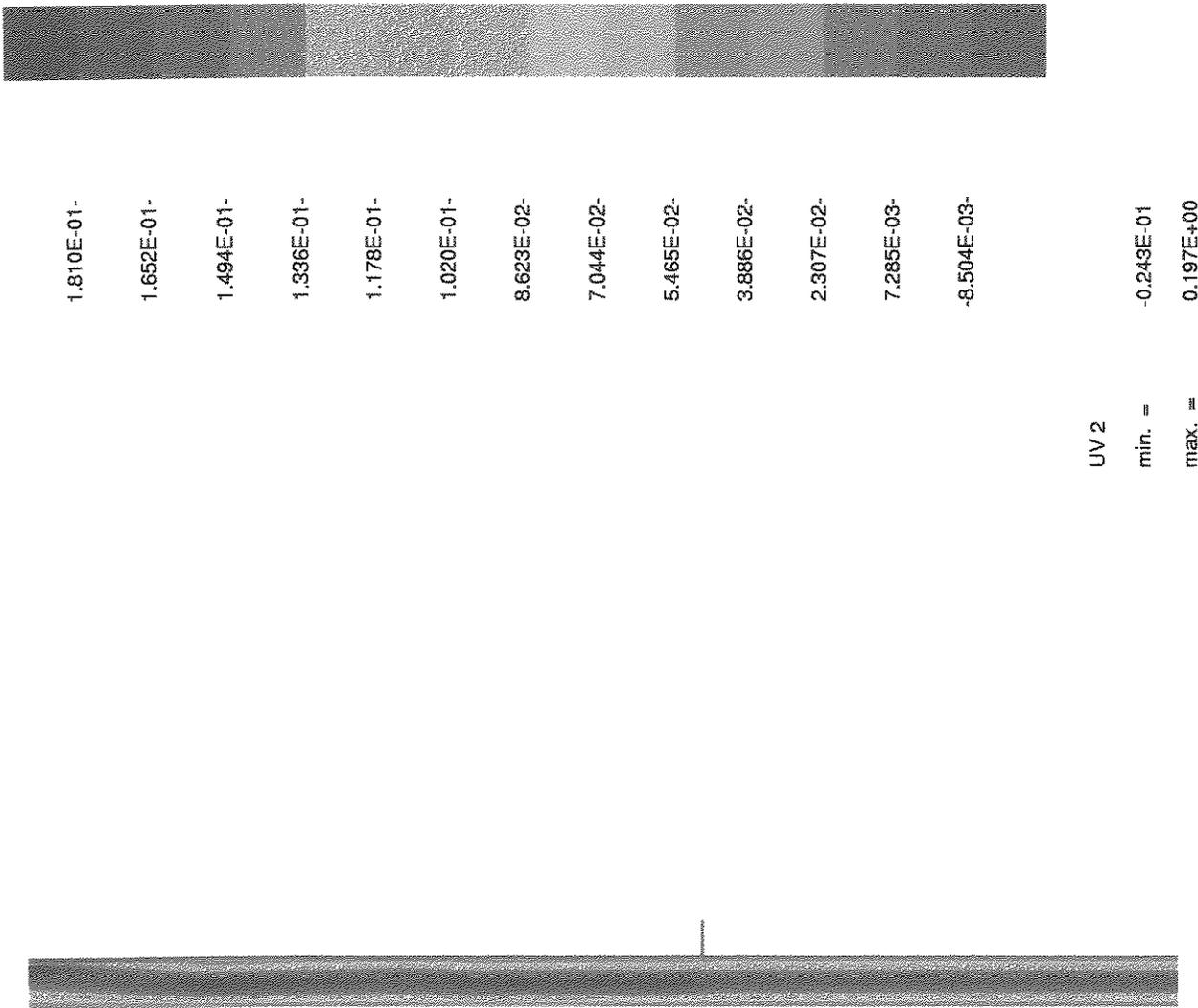
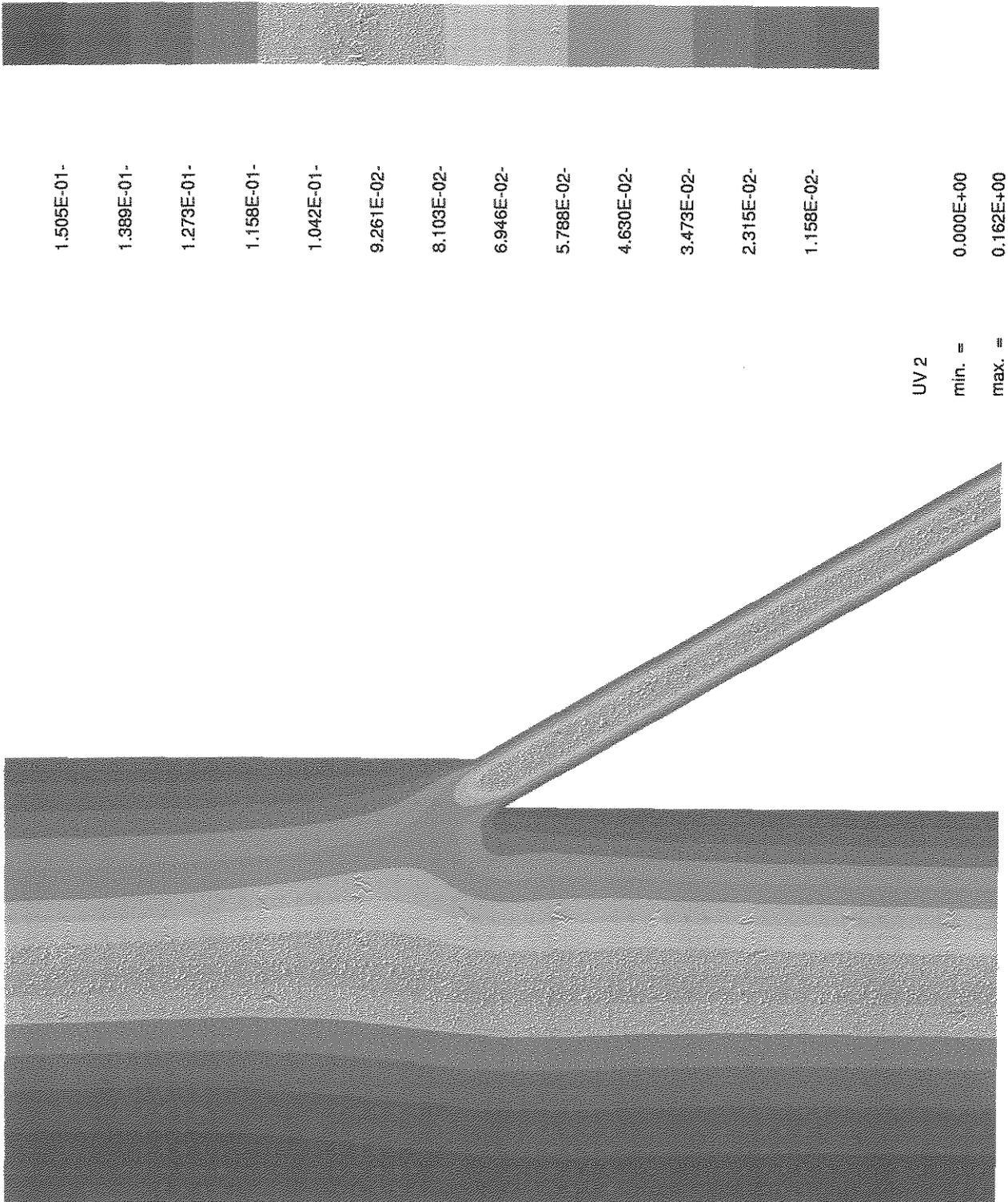


Fig. 5.2.XXI - Perfil de velocidade v_x para entr. à 90^0 (Viscoelástico).

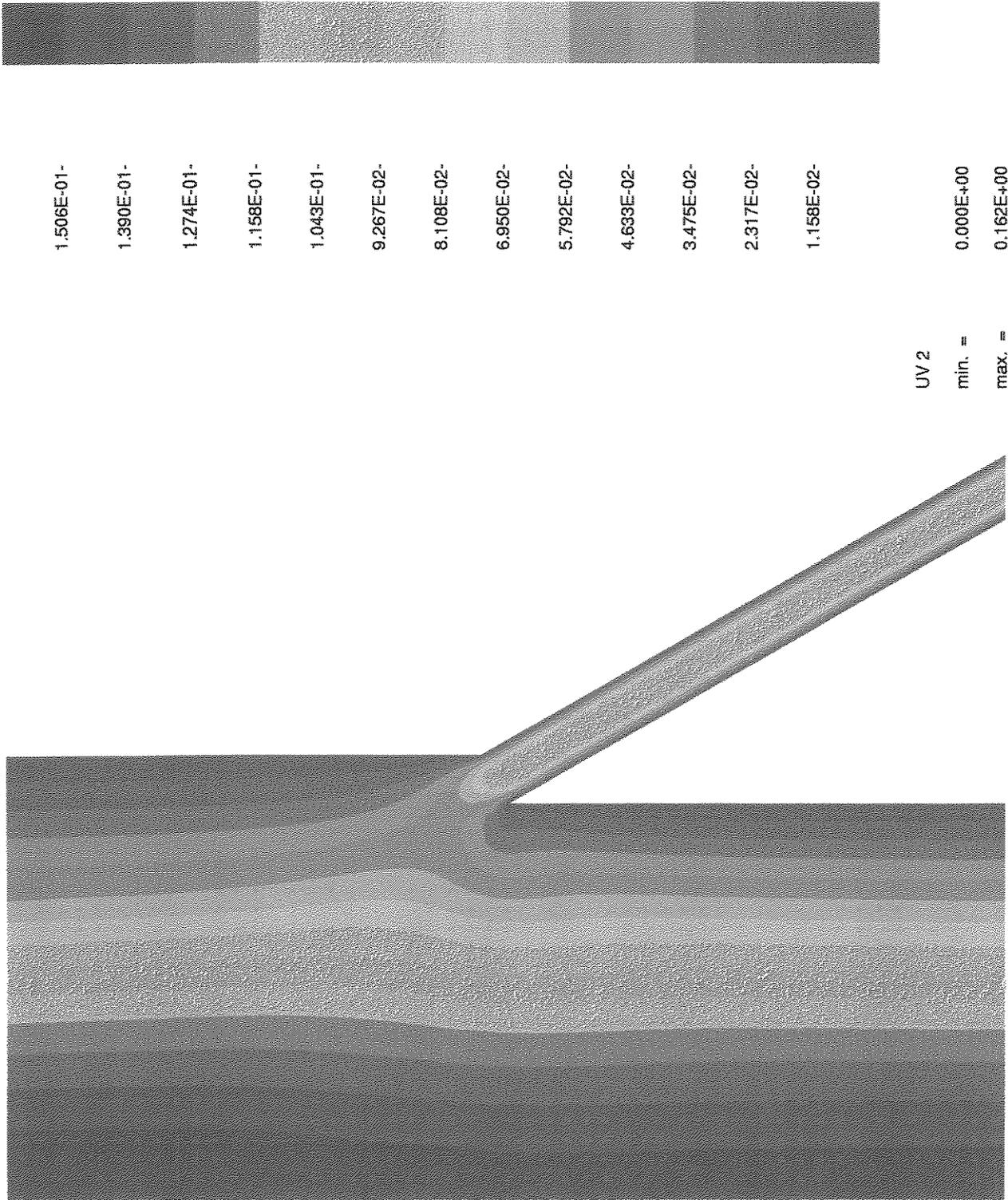
POLYFLOW (3. 3. 0) / step # 8, s = 0.1000000E+02

Fig. 5.2.XXII - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de confluência das camadas para entr. C à 30° (Newtoniano).



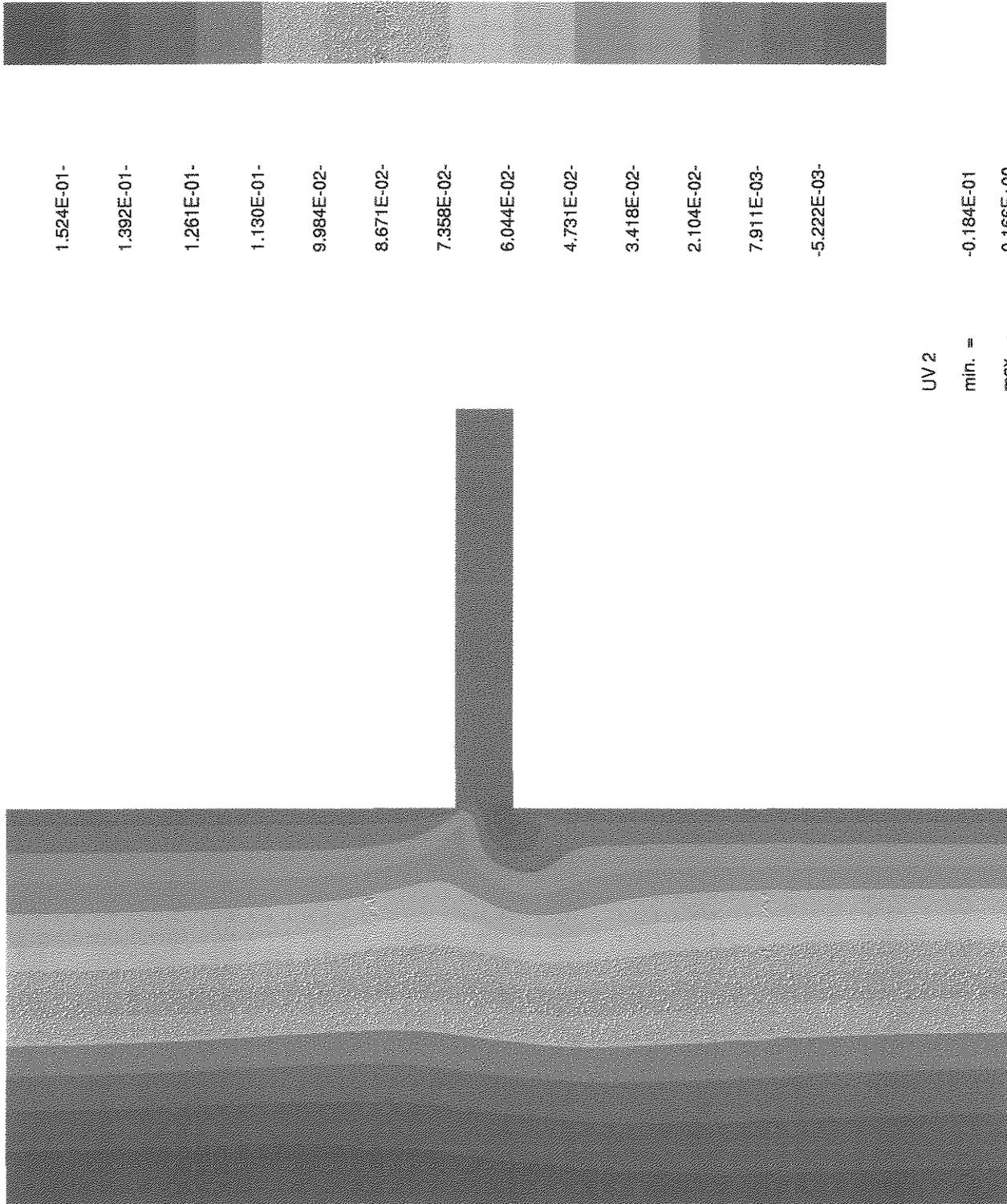
POLYFLOW (3.3.0)

Fig. 5.2.XXIII - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de confluência das camadas para entr. C à 30° (Viscoelástico).



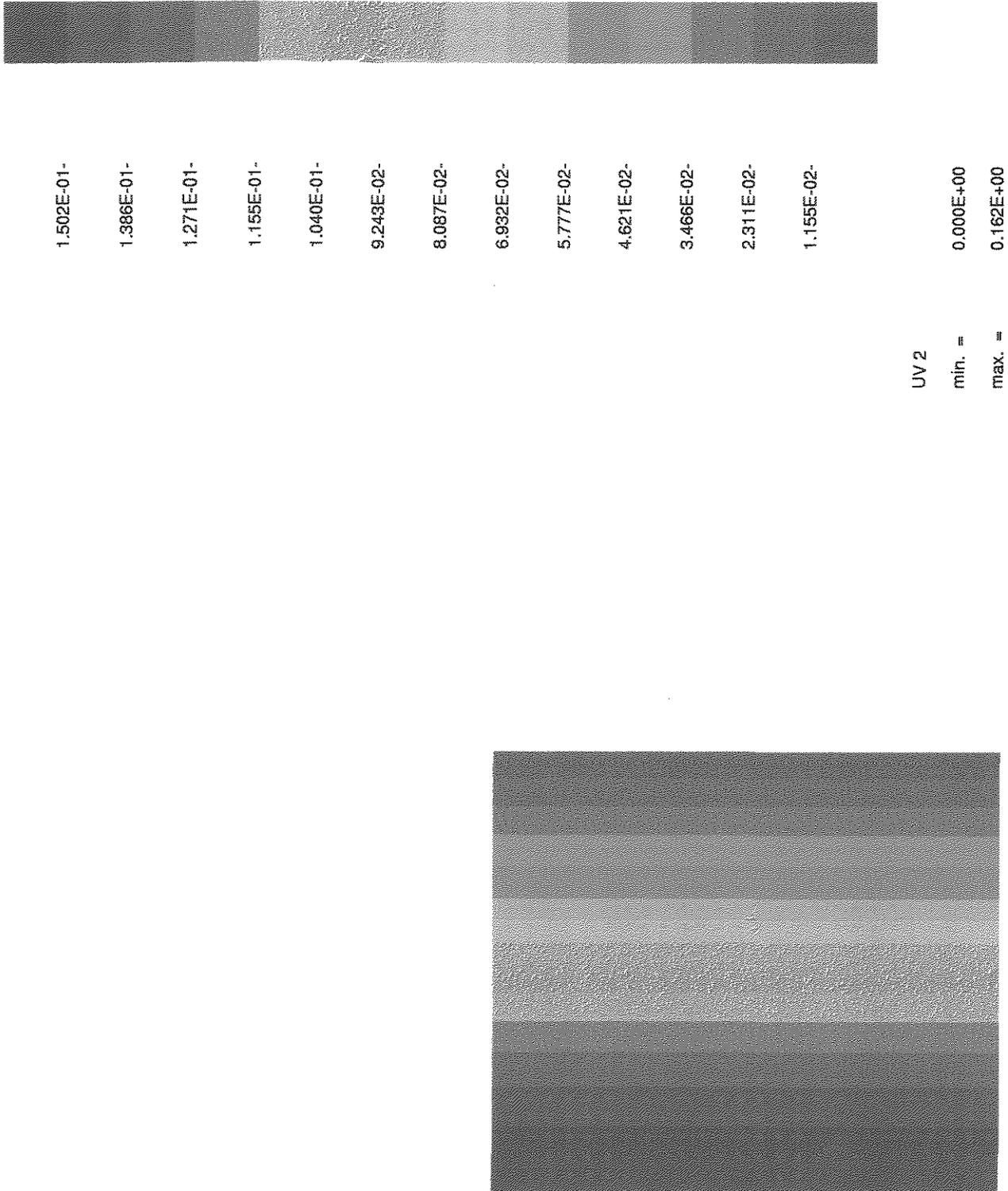
POLYFLOW (3. 3. 0) / step # 9, s = 0.1000000E+02

Fig. 5.2.XXIV - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de confluência das camadas para entr. C à 90° (Viscoelástico).



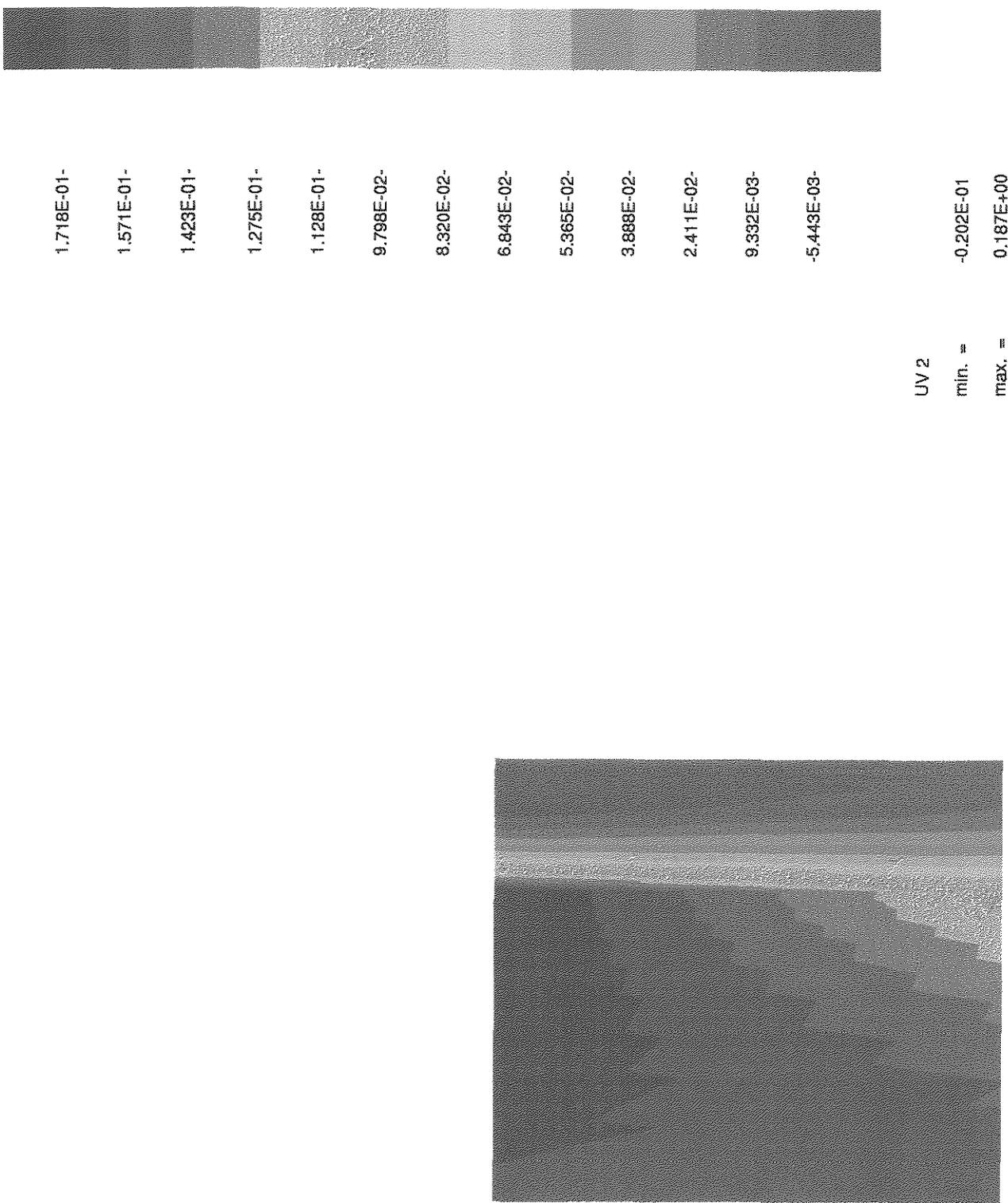
POLYFLOW (3. 3. 0) / step # 8, s = 0.1000000E+02

Fig. 5.2.XXV - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de saída das camadas para entr. de C à 30° (Newtoniano).



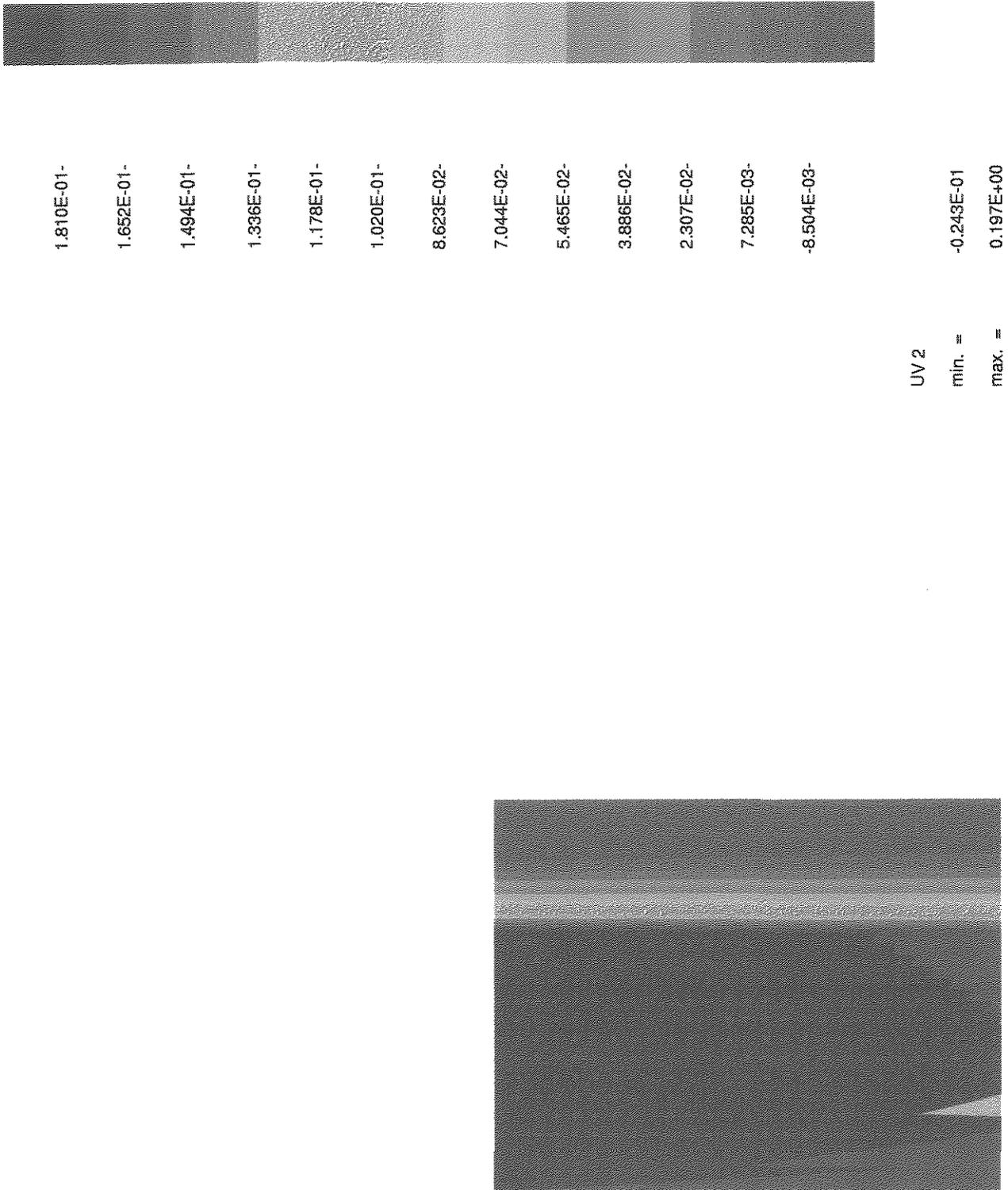
POLYFLOW (3. 3. 0)

Fig. 5.2.XXVI - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de saída das camadas para entr. de C à 30° (Viscoelástico).



POLYFLOW (3. 3. 0) / step # 9, s = 0.1000000E+02

Fig. 5.2.XXVII - Detalhe do perfil de veloc. v_x na região de saída das camadas para entr. de C à 90° (Viscoelástico).



POLYFLOW (3. 3. 0) / step # 8, s = 0.1000000E+02

5.3 - SIMULAÇÃO DA CAIXA DE COEXTRUSÃO EM 3-D

A seguir são apresentados alguns estudos de casos, onde demonstra-se como a geometria da caixa de coextrusão influencia a velocidade de escoamento das camadas, principalmente no que se refere a região onde os fluidos se encontram.

Simulou-se o escoamento das camadas A, B e C referenciadas anteriormente. Nestes estudos o comportamento das camadas é aproximado como sendo do tipo newtoniano, com as viscosidades das camadas $\eta_A = 225$ Pa.s, $\eta_B = 195$ Pa.s e $\eta_C = 325$ Pa.s, as densidades de A e B são iguais a 1240 Kg/m³ e a densidade de C é 1110 Kg/m³. As vazões volumétricas para as camadas são $Q_A = 2,128E-5$ m³/s, $Q_B = 6,664E-5$ m³/s e $Q_C = 6,606E-6$ m³/s. Serão desprezados efeitos de inércia e gravidade.

As geometrias dos casos estudados distinguem-se do seguinte modo:

- caso 1a - Confluência da camada A com a camada B à 90° .
- caso 1b - Confluência da camada A com a camada B à 90° , entretanto, com um alargamento da seção após a junção das camadas. O alargamento foi calculado proporcionalmente ao aumento de vazão no encontro das camadas, ou seja, calculou-se o aumento da área de escoamento de B, necessário para manter a sua velocidade inalterada com aumento de sua vazão de um valor igual a Q_A . O alargamento corresponde a 16% em relação ao caso 1a.
- caso 1c - Confluência da camada A com a camada B à 30° e alargamento da seção de escoamento após a junção das camadas como no caso 1b.
- caso 2a - Confluência da camada C com as camadas A+B, (utilizando para este caso a viscosidade de B) à 90° e alargamento da seção calculado como no caso 1b.

- caso 2b - Confluência da camada C com as camadas A+B à 30° e alargamento da seção de escoamento, similar ao caso 1c.

As figuras 5.3.I, 5.3.II, 5.3.III, 5.3.IV.a e 5.3.IV.b apresentam a malha de elementos finitos dos casos estudados.

Os perfis de velocidade de escoamentos são apresentados nas figuras 5.3.V a 5.3.IX para os respectivos casos. Através destes perfis pode-se verificar como a velocidade de escoamento sofre aceleração na região de confluência e observa-se também o rearranjo das camadas. As figuras referenciadas como (a) e (b) mostram o perfil de velocidade para as camadas A, B e C em cada caso, demonstrando como a região interfacial é deformada. Através destes escoamentos é possível verificar as zonas onde ocorrem encapsulamentos de camadas e também possibilita observar os efeitos de parede, onde uma fina camada de fluido tende a permanecer em repouso.

Comparando-se os casos 1a, 1b e 1c verifica-se claramente que entre eles a geometria que apresenta menor aceleração na região de junção das camadas é o caso 1c, com entrada a 30° com alargamento. Entre os casos 2a e 2b observa-se que o caso 2b, onde tem-se alargamento da geometria e ângulo de entrada da camada C de 30° , a aceleração dos fluidos é menos intensa. Estes resultados estão em acordo com os obtidos por Witkoski em geometria bidimensional.

As figuras 5.3.X, 5.3.XI e 5.3.XII apresentam as linhas de corrente ao longo do escoamento da camada B, demonstrando em detalhes a deformação da interface entre os fluidos. Verifica-se que o caso mais crítico de deformação da interface é encontrado no caso onde a entrada da camada lateral se dá a 90° e sem alargamento da região de escoamento. O módulo de visualização de resultados do Polyflow, denominado CFView [CFView User's Manual, 1993] permite a obtenção dos valores da velocidade de escoamento ponto a ponto ao longo da

linha de corrente. Esta capacidade é interessante quando estuda-se os efeitos de instabilidades em escoamentos multicamadas, pois pode-se através destes dados quantificar o gradiente de velocidade na região interfacial e utilizar estes valores na determinação de condições críticas da operação de processamento, tais como vazão, diferença de viscosidade entre as camadas, geometrias etc.

As simulações em 3D foram realizadas com o objetivo de aumentar o conhecimento e o estabelecimento de condições críticas para o surgimento do encapsulamento. O encapsulamento como discutido anteriormente é gerado na interface das camadas coextrudadas. Porém, até o momento conhece-se pouco ou quase nada sobre modelos matemáticos que regem tal fenômeno e na literatura dispõe-se apenas de trabalhos experimentais que comprovam o surgimento deste efeito. Uma vez que o Polyflow está implementado com técnicas que permitem o estabelecimento de interfaces móveis, técnicas de rearranjo de malhas, condição de deslizamento dos fluidos nas paredes etc, utilizou-se este programa para estudar-se o encapsulamento.

As figuras 5.3.XIII a 5.3.XVII apresentam cortes ao longo da seção transversal das camadas A e C, após a execução das simulações e a conseqüente deformação da interface entre os fluidos. Entretanto o encapsulamento observado nestes cortes, não condizem com as observações práticas e com as informações citadas na literatura. Os cortes demonstram que a camada B está sendo encapsulada pela camada A em todos os três casos estudados para o sistema AB e também demonstram que a camada C encapsula a camada B. Estes resultados não são coerentes com as observações práticas, onde o efeito é inverso, ou seja o polímero menos viscoso tende a encapsular o polímero mais viscoso.

Os resultados obtidos de encapsulamento, nos obrigaram à realização de alguns testes para verificar a previsão do Polyflow para este fenômeno e

estabelecer de forma definitiva se o programa prevê ou não o processo de encapsulamento de camadas.

Os testes que são apresentados a seguir foram realizados em uma geometria tridimensional retangular com as camadas A' e B' entrando paralelamente, deste modo exclui-se a possibilidade de haver o encapsulamento geométrico de camadas [Dooley e Hilton, 1993; White e col., 1985].

A figura 5.3.XVIII mostra a malha de elementos finitos utilizada nas simulações. Foram simulados os seguintes casos:

- caso 3a - Fluidos A' e B' com as mesmas vazões e viscosidades iguais a 195 Pa.s.
- caso 3b - Fluidos A' e B' com as mesmas vazões e viscosidade A' = 195 Pa.s e viscosidade de B' = 270 Pa.s.
- caso 3c - Fluidos A' e B' com as mesmas vazões. A viscosidade A' = 195 Pa.s e viscosidade evolutiva para a camada B', ou seja, a viscosidade foi acrescida passo a passo de 270 a 2700 Pa.s.

As figuras 5.3.XIX, 5.3.XX e 5.3.XXI apresentam os perfis de velocidade para os três casos estudados.

As figuras 5.3.XXII, 5.3.XXIII e 5.3.XXIV mostram os cortes na seção transversal dos escoamentos, indicando o encapsulamento da camada A' pela camada B', como resultado do aumento da viscosidade da camada B' (caso 3c). Através destes resultados, torna-se conclusivo que o programa Polyflow não é capaz de realizar previsões do fenômeno de encapsulamento.

Portanto, as incoerências observadas para o encapsulamento nos casos de simulação da caixa de coextrusão, podem ser explicados como sendo o resultado de uma singularidade numérica do programa, existente na região de intersecção da interface móvel com a parede. Ao estabelecer a condição de contorno como

parede, automaticamente estabelece-se valores nulos para as velocidades normais e tangenciais para todos os nós localizados na fronteira parede. Com estes valores torna-se impossível o deslizamento dos fluidos em contato com a parede, pois os nós localizados neste contorno não se movimentarão, e assim não permitirão o rearranjo da malha. Tentou-se utilizar um artifício de imposição de um deslizamento dos fluidos ao longo da parede, através da condição de contorno “Slip”. Entretanto, os resultados obtidos não foram satisfatórios, pois para a imposição de deslizamentos que possibilitem a movimentação dos nós ao longo da parede são necessários valores elevados de deslizamento, o que tornam a condição sobre a parede irreal.

O fenômeno de encapsulamento, foi estudado por Karagiannis e col. Em seu trabalho, simularam o escoamento paralelo de dois fluidos imiscíveis em um canal retangular simples com razão $L/W = 2$, em regime permanente. Eles obtiveram resultados em que verificaram o encapsulamento do fluido mais viscoso pelo fluido menos viscoso ao longo do escoamento. Entretanto, a solução obtida é pré-determinada pela condição imposta de minimização da perda de carga, onde a camada menos viscosa deve estar em contato com a parede. A malha de elementos finitos construída por estes pesquisadores, induz fortemente a solução final aproximada para a posição da interface, após o encapsulamento. Nas geometrias que são encontradas em operações reais de coextrusão, a confluência das camadas não são paralelas, mas em ângulo, assim, o problema torna-se complexo e extremamente difícil de ser simulado, pois não se pode prever de forma precisa a posição da interface resultante. Além disto, não se pode impor a condição de encapsulamento total, mas deve-se estudar a evolução do encapsulamento ao longo do escoamento.

Em contatos realizados com a equipe técnica da POLYFLOW, soube-se que o programa atualmente, não possui a capacidade de simular de forma realística o processo de encapsulamento de camadas, em função da deficiência dos modelos atuais em descrever o fenômeno de encapsulamento. No presente momento, não existe um modelo matemático que permita resolver as singularidades existentes na posição da intersecção da interface móvel com as paredes do canal de escoamento.

Como as simulações em 3-D apresentaram-se inconsistentes devido à inexistência de uma condição de contorno que consiga representar de forma realística o comportamento dos polímeros em contato com as paredes do “feedblock”, não foram realizadas as simulações considerando o comportamento viscoelástico dos polímeros em geometrias 3-D.

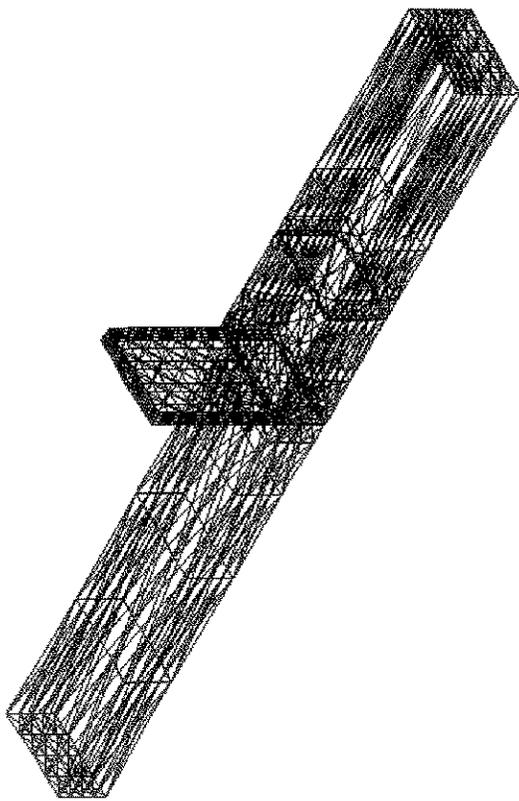


Figura 5.3.11 - Malha de elem. finitos para o caso (1b)

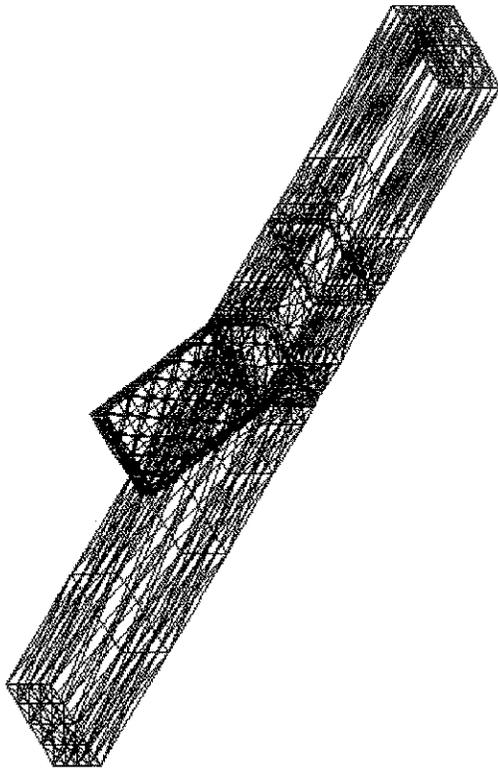


Figura 5.3.111 - Malha de elem. finitos para o caso (1c)

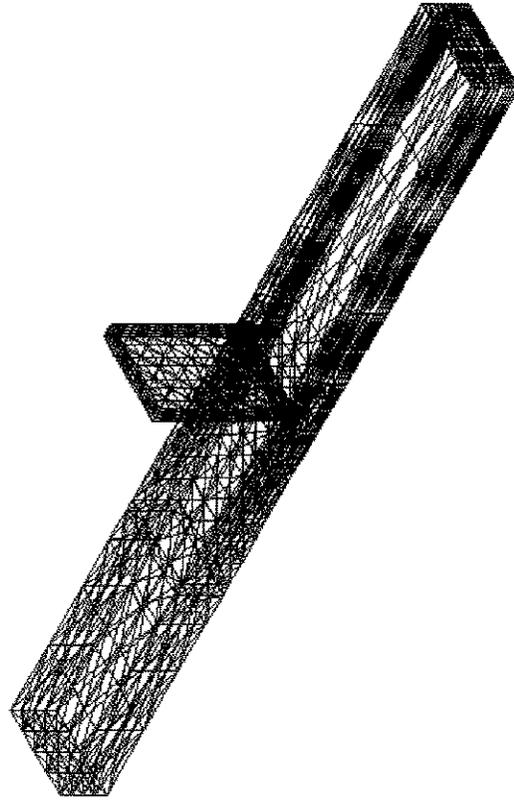


Figura 5.3.1 - Malha de elem. finitos para o caso (1a)

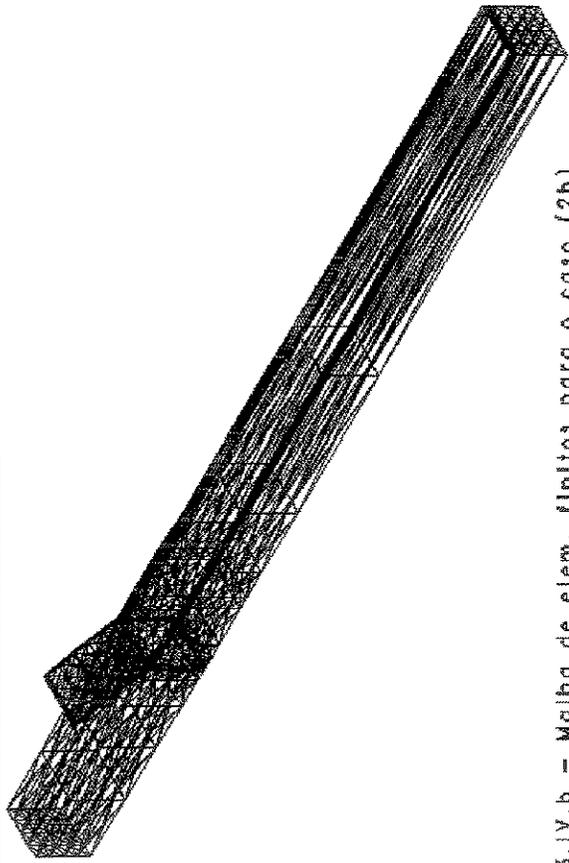


Figura 5.3.1V.b - Malha de elem. finitos para o caso (2b)

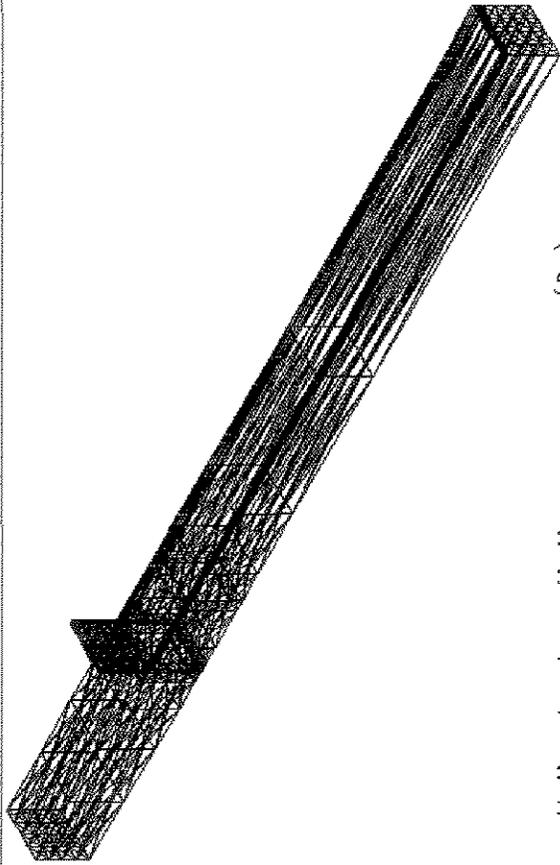
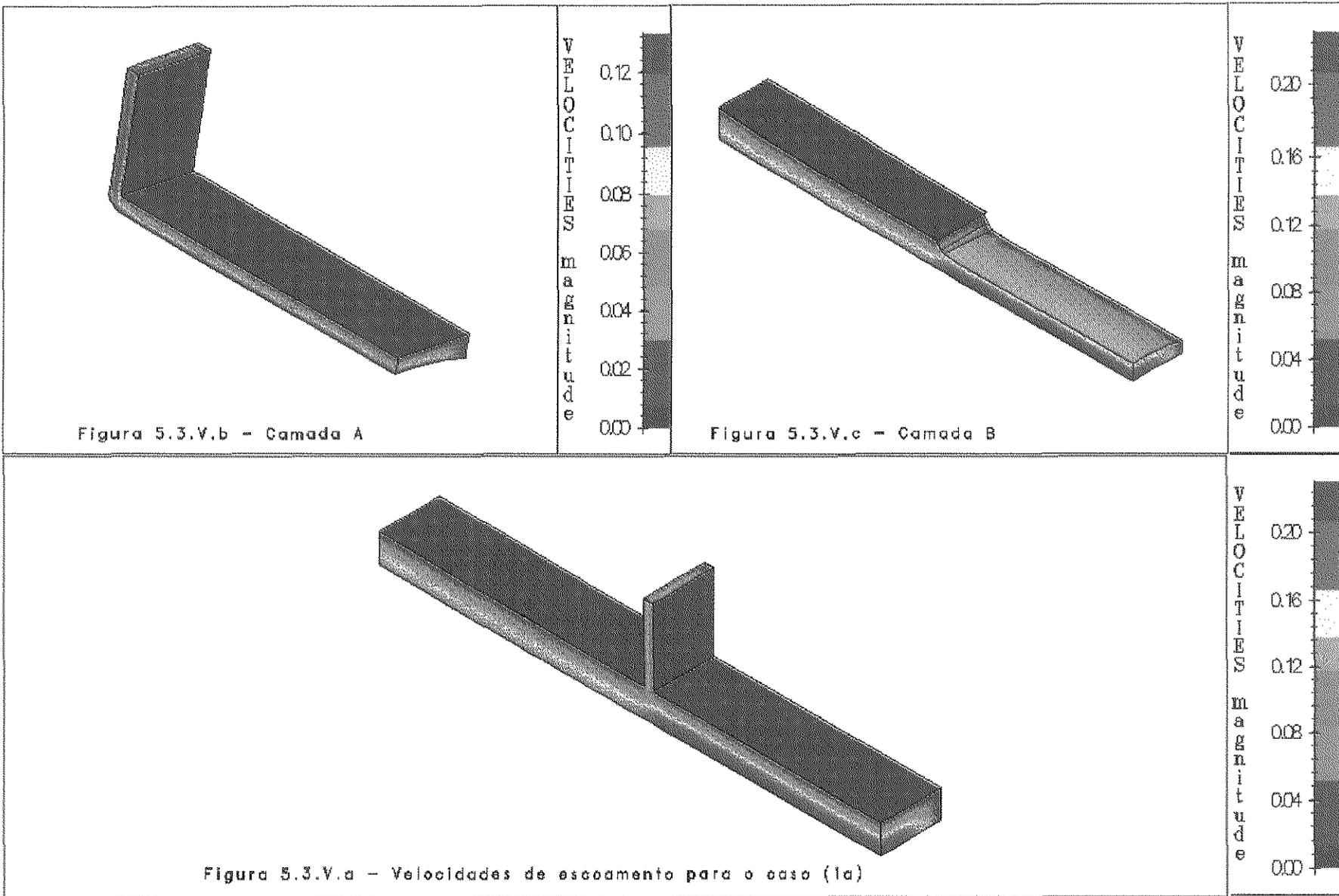
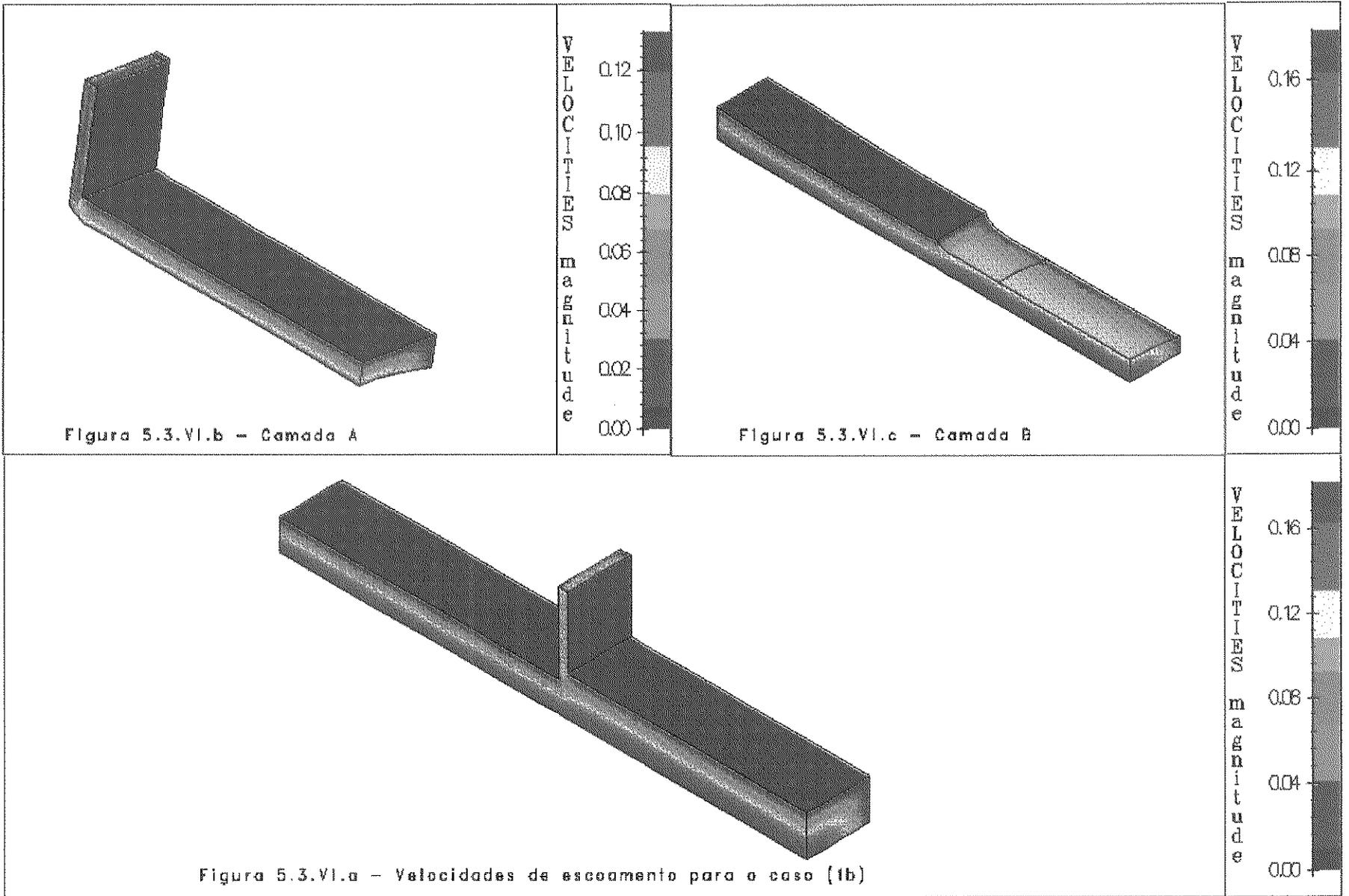
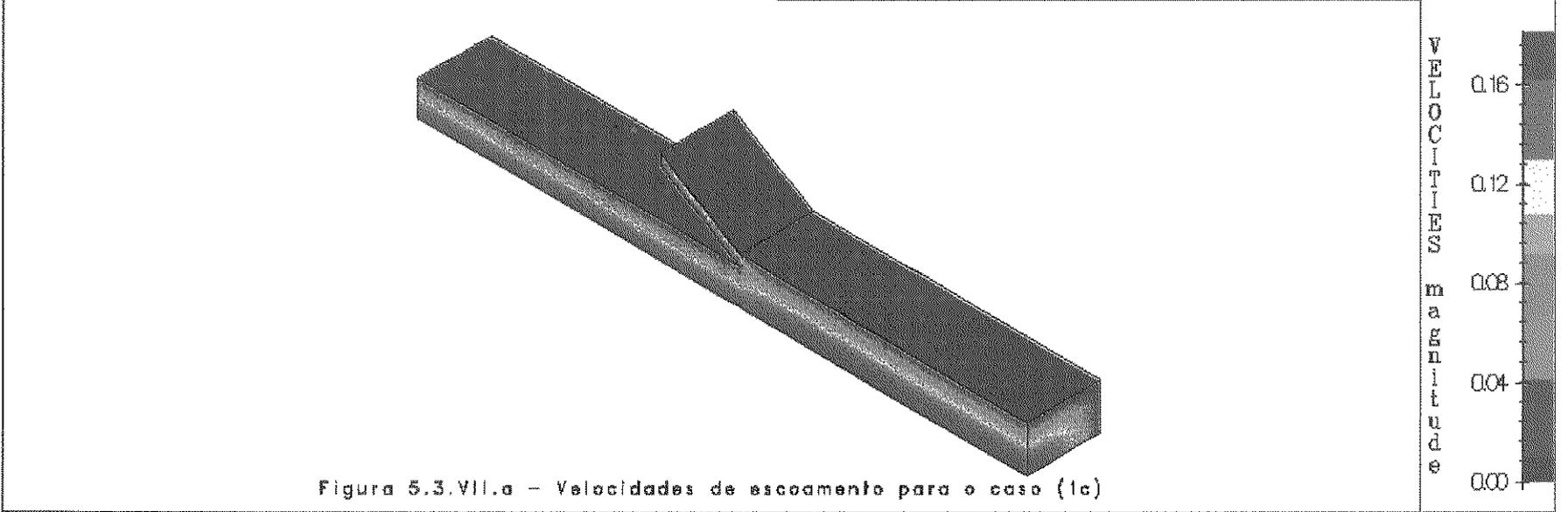
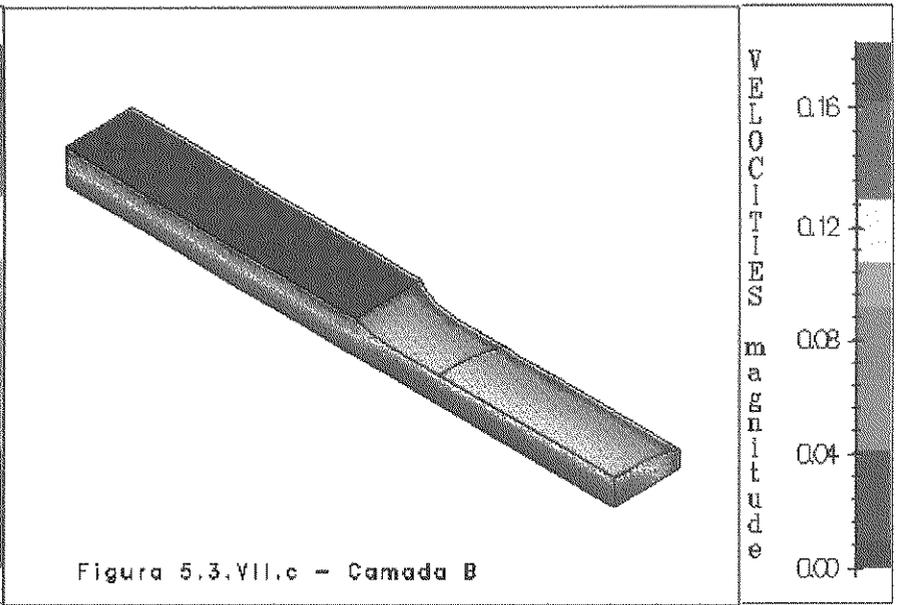
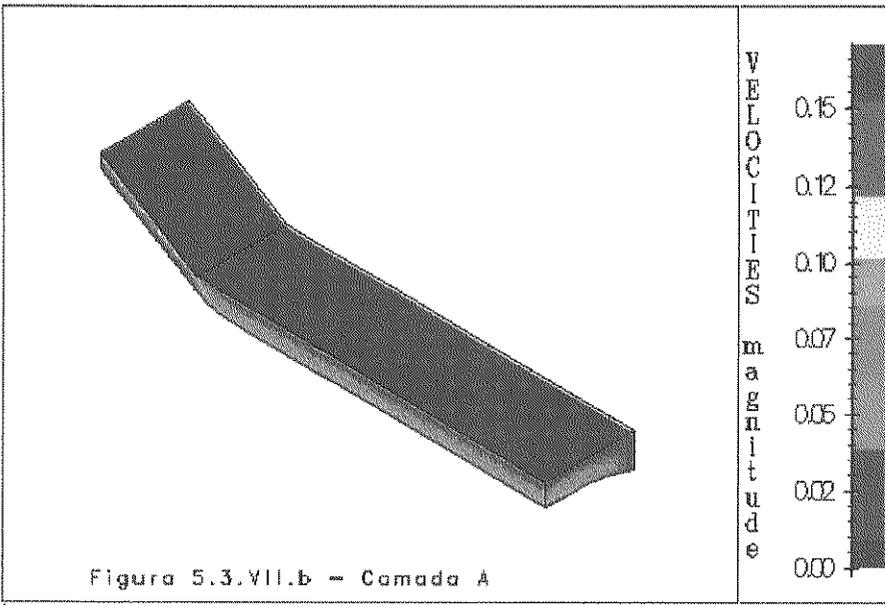


Figura 5.3.1V.a - Malha de elem. finitos para o caso (2a)







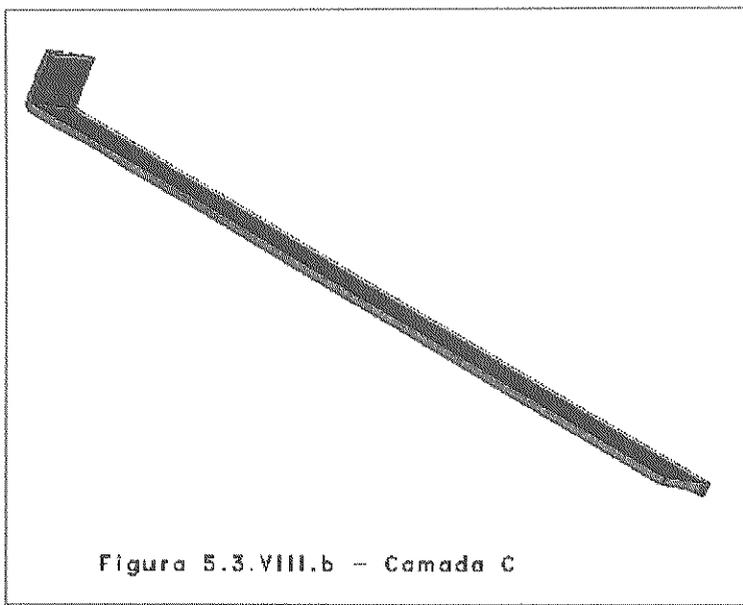


Figura 5.3.VIII.b – Camada C

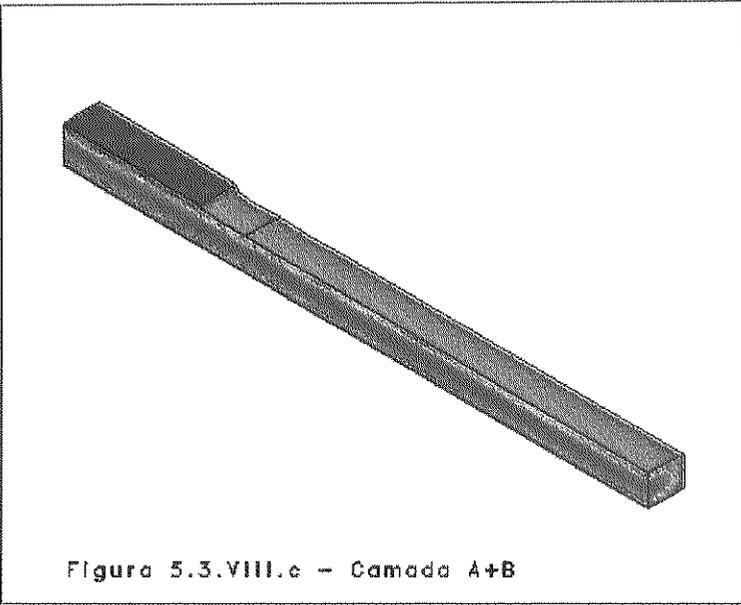
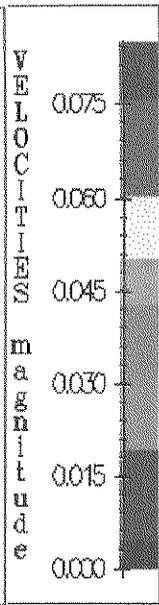


Figura 5.3.VIII.e – Camada A+B

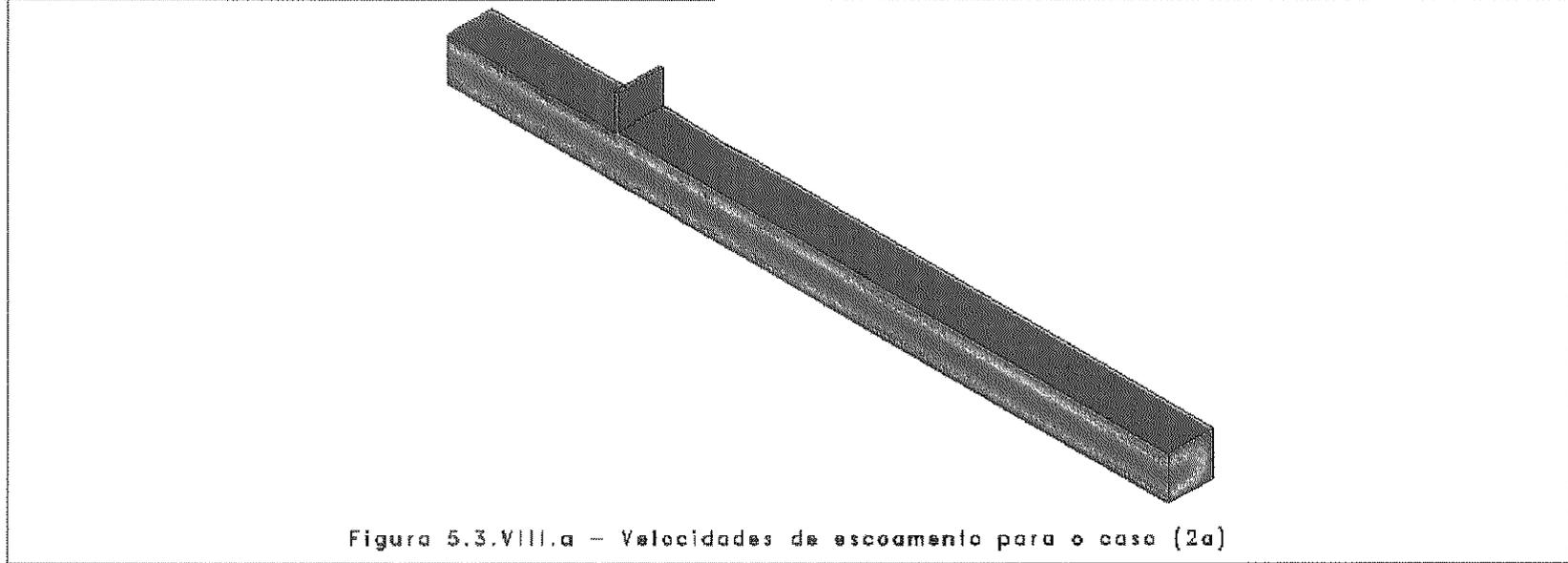
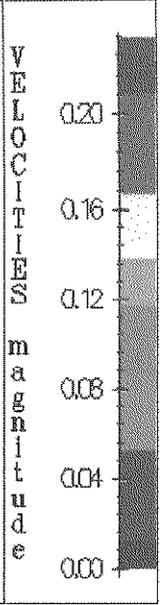
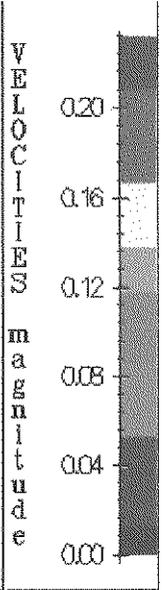
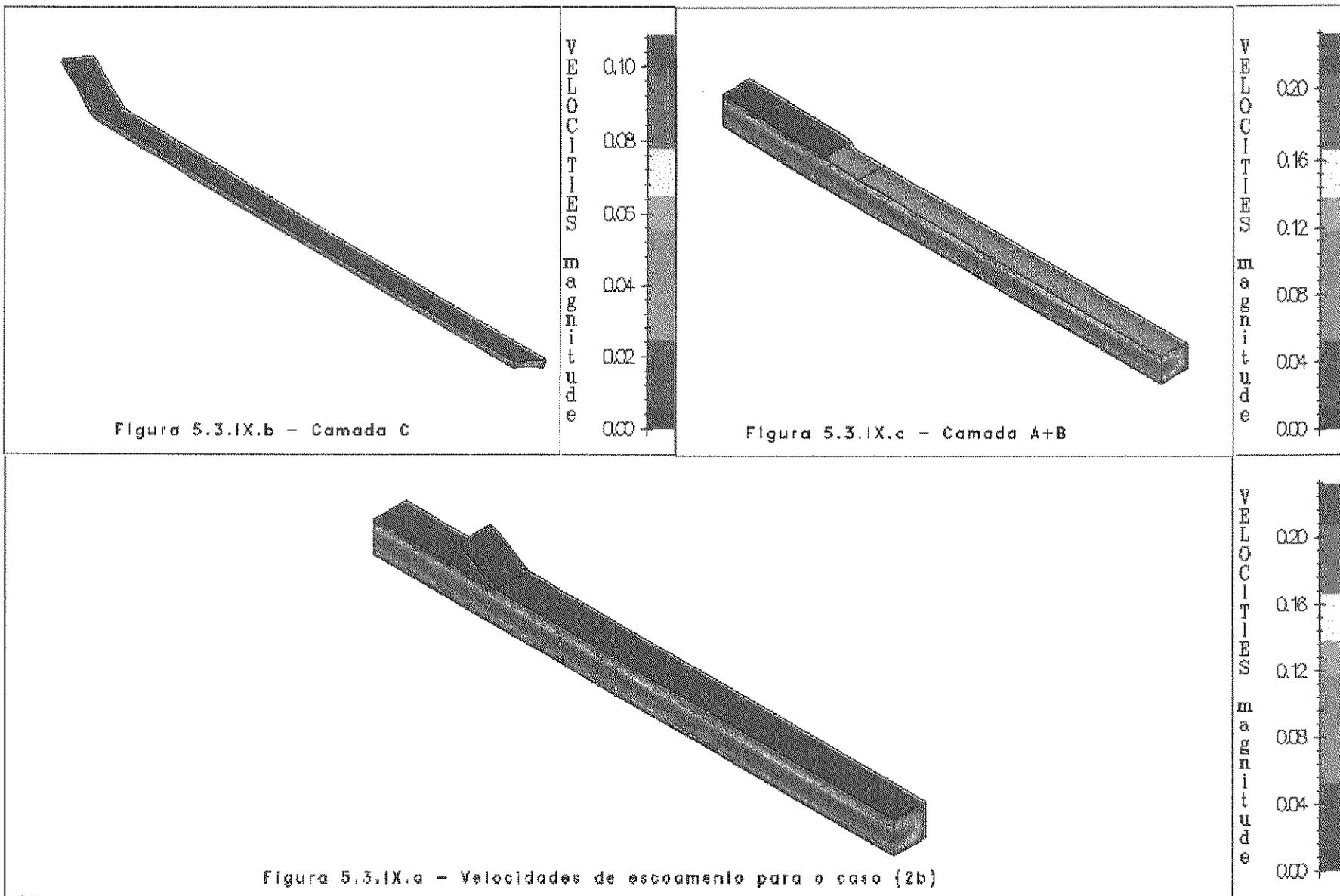
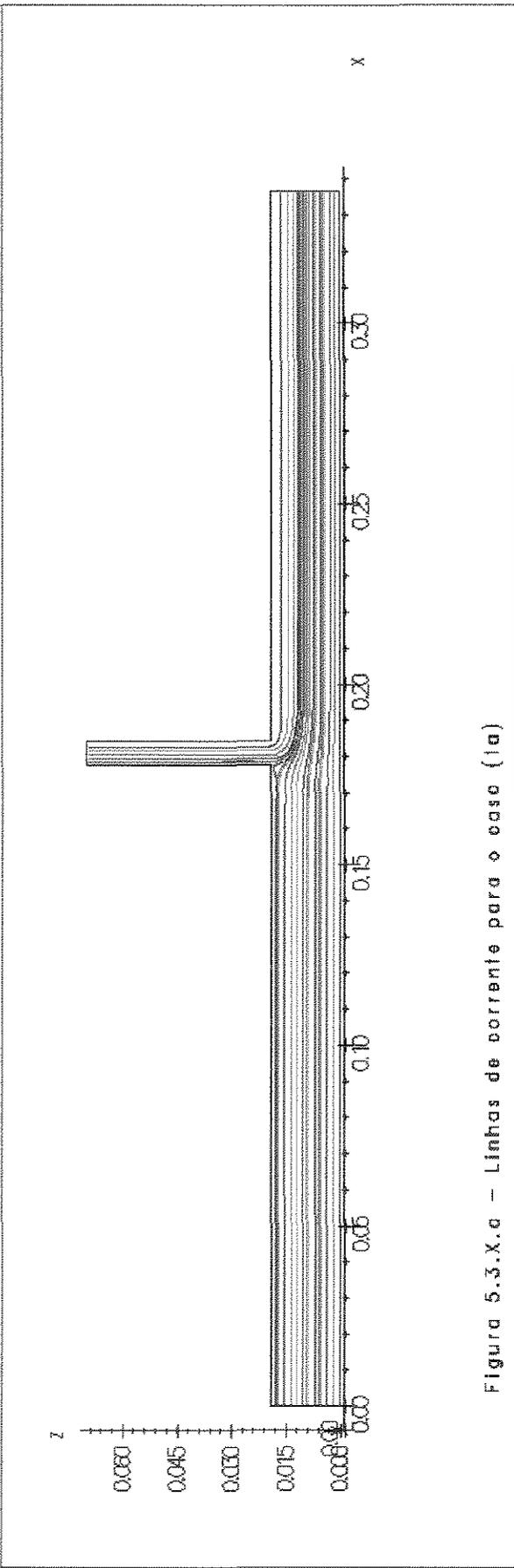
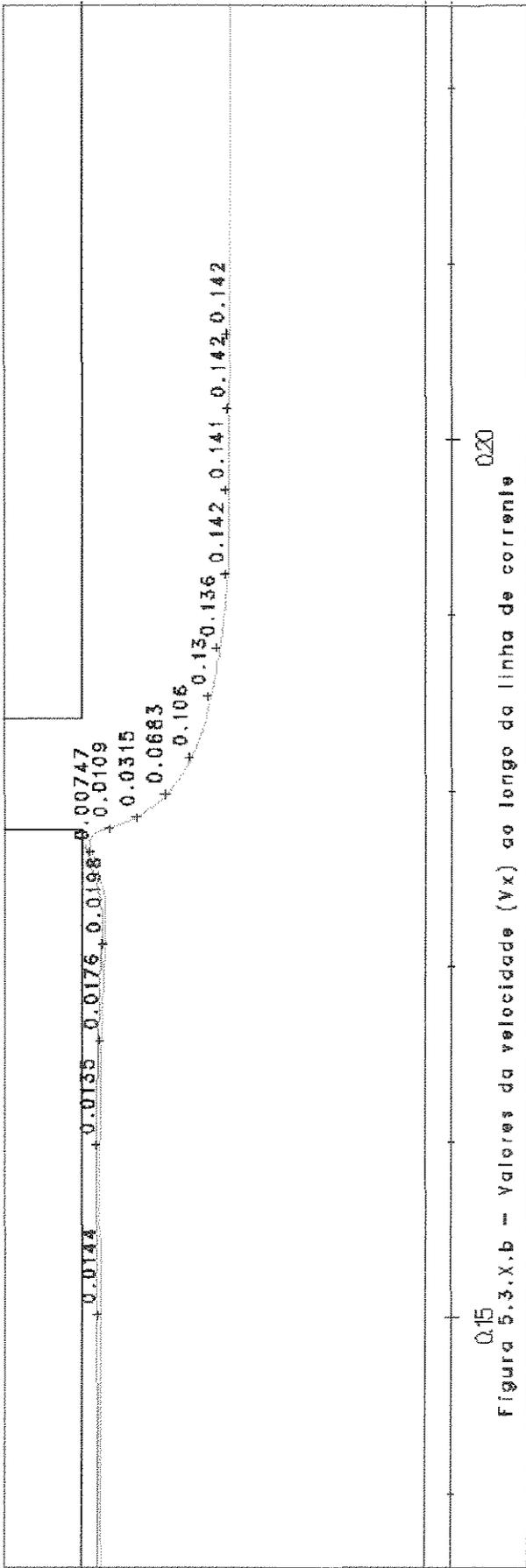


Figura 5.3.VIII.a – Velocidades de escoamento para o caso (2a)







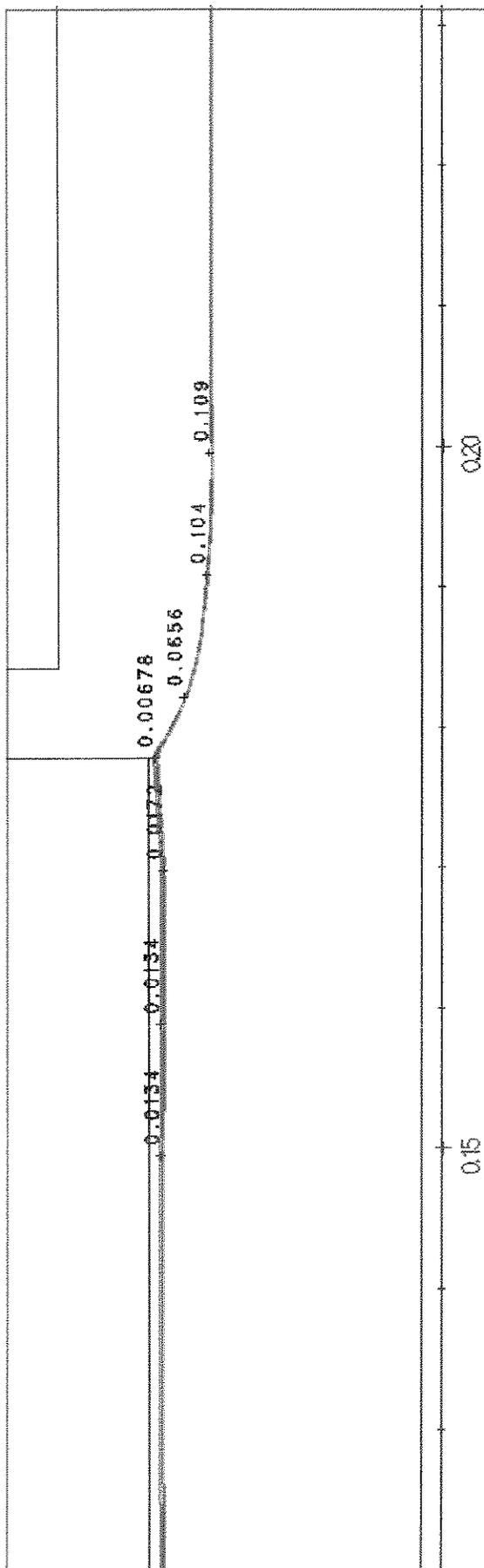


Figura 5.3.XI.b - Valores da velocidade (V_x) ao longo da linha de corrente

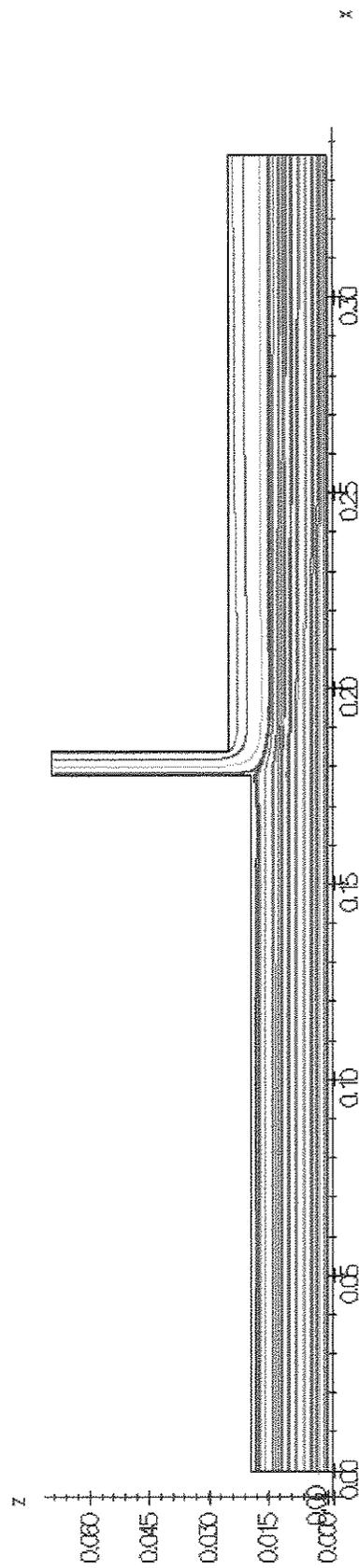


Figura 5.3.XI.a - Linhas de corrente para o caso (1b)

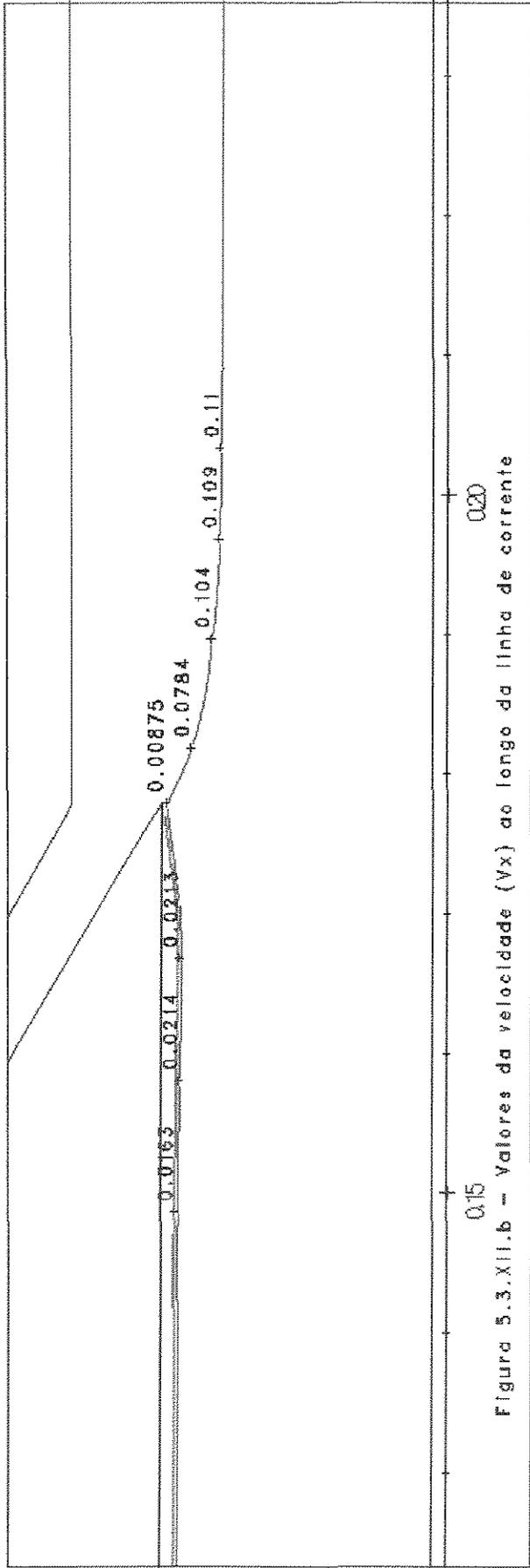


Figura 5.3.XII.b - Valores da velocidade (V_x) ao longo da linha de corrente

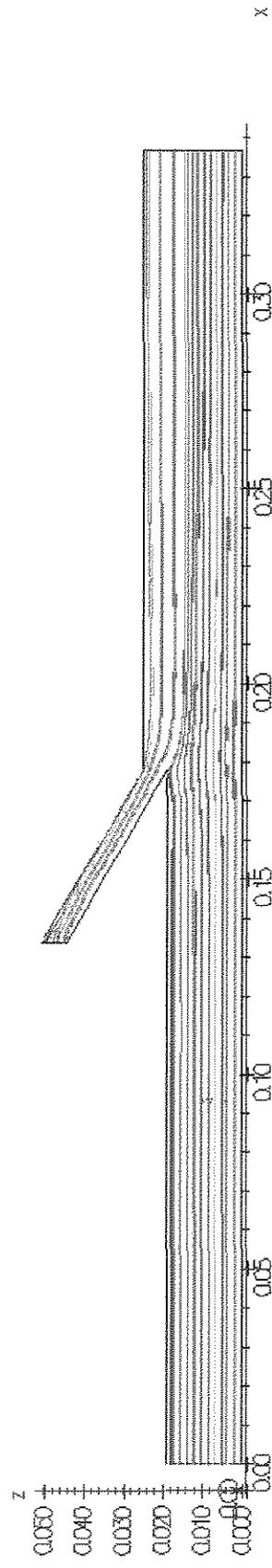
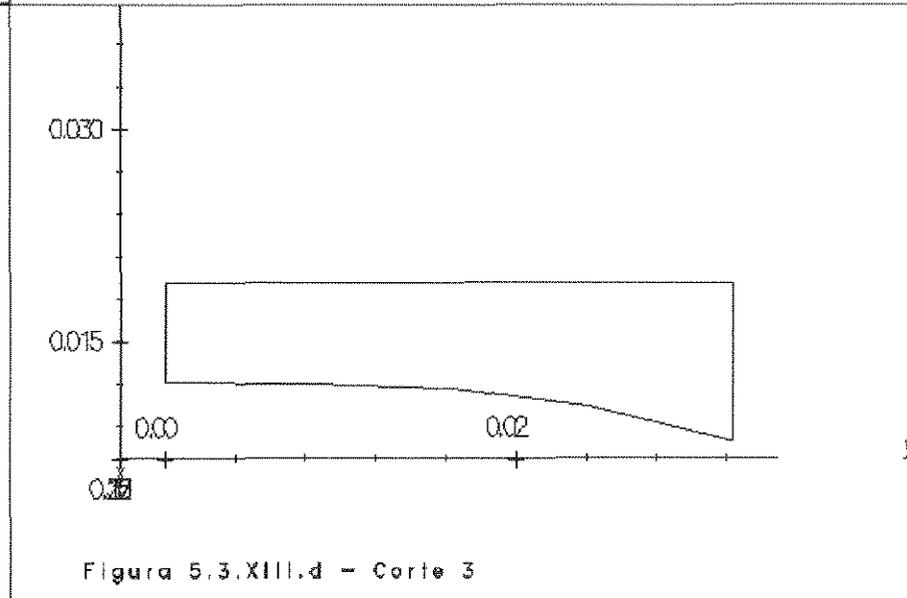
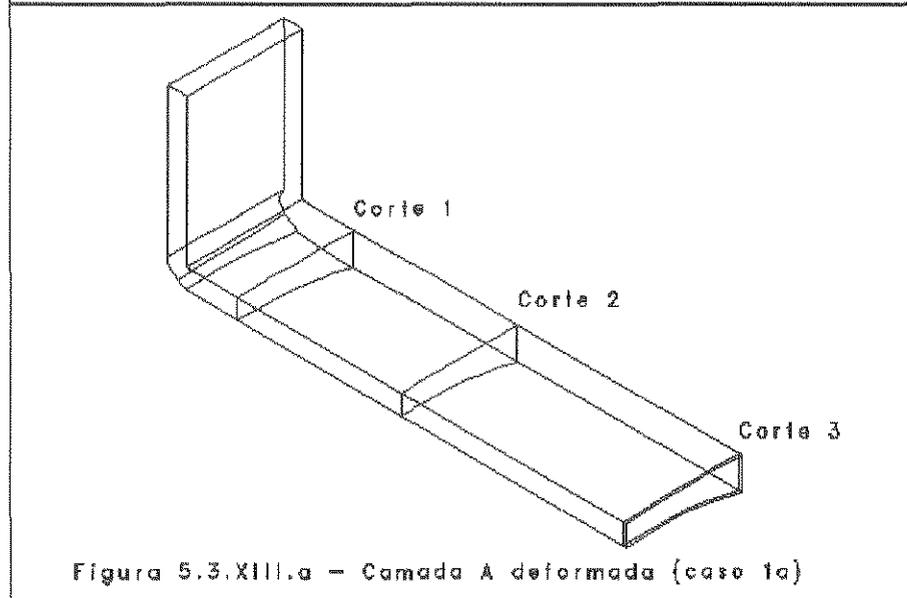
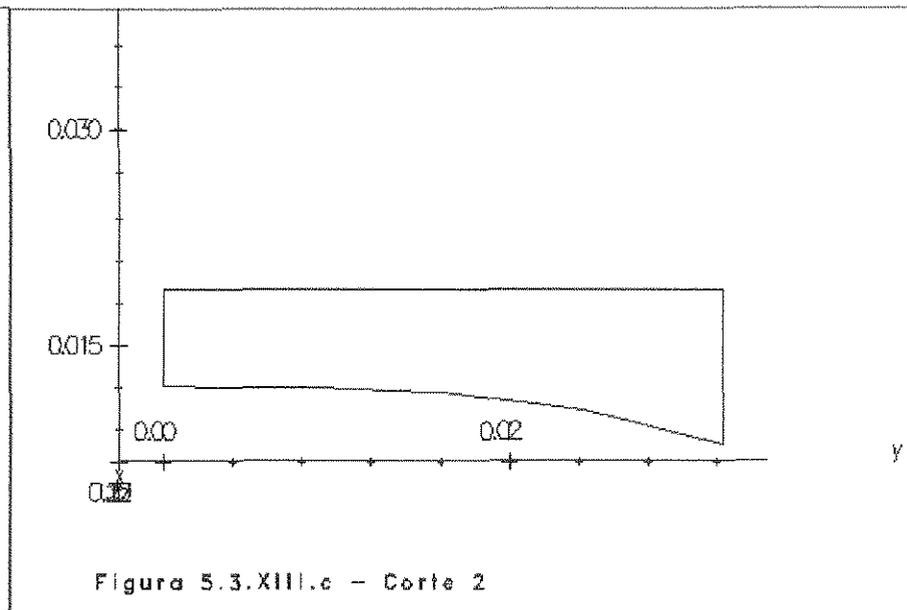
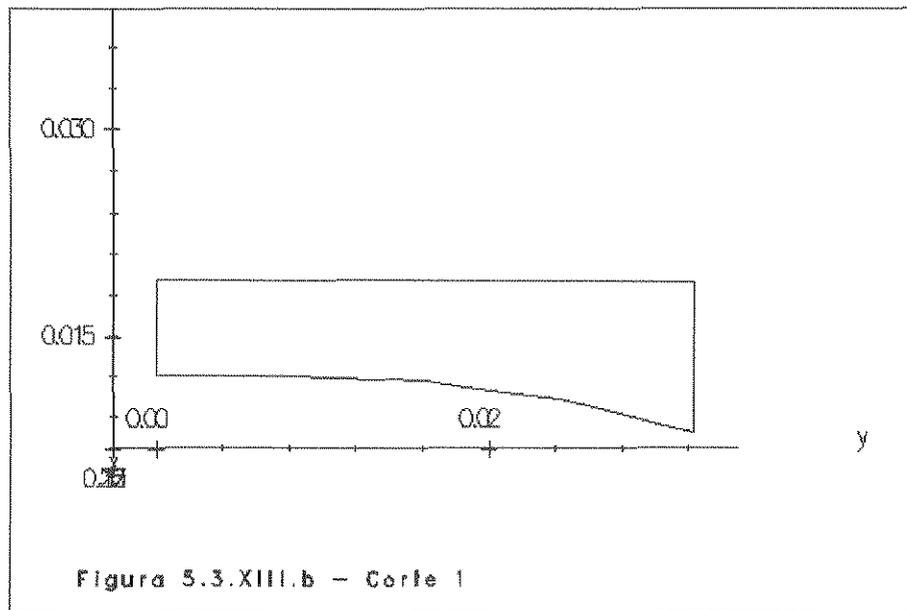
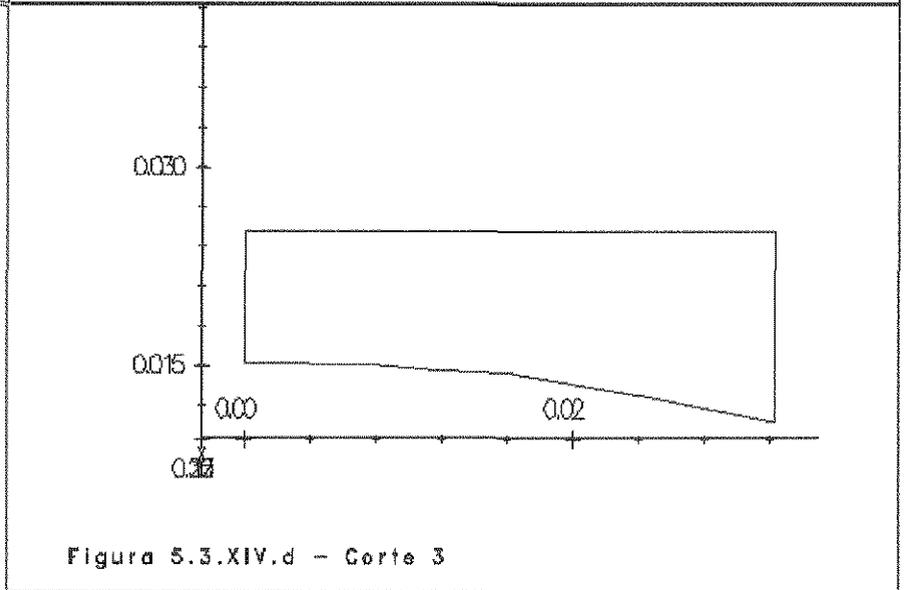
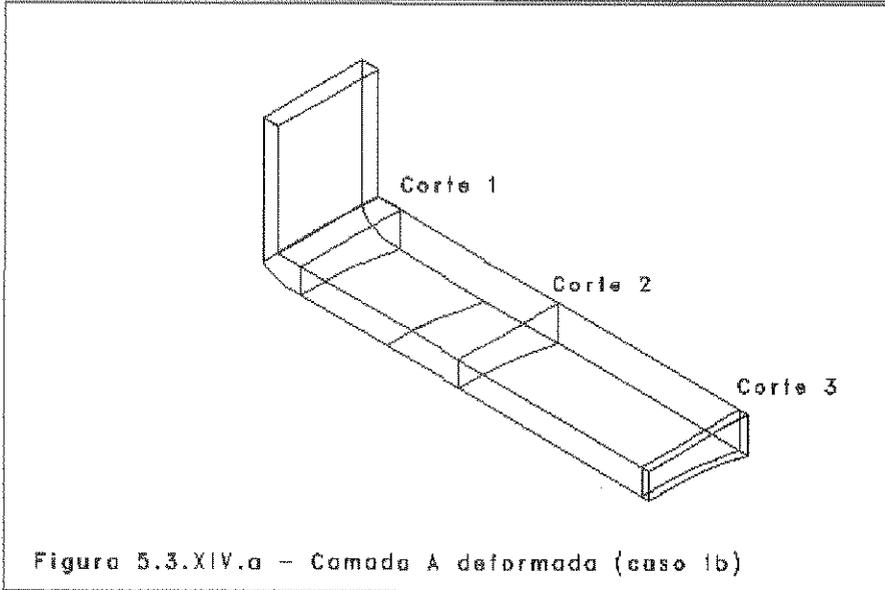
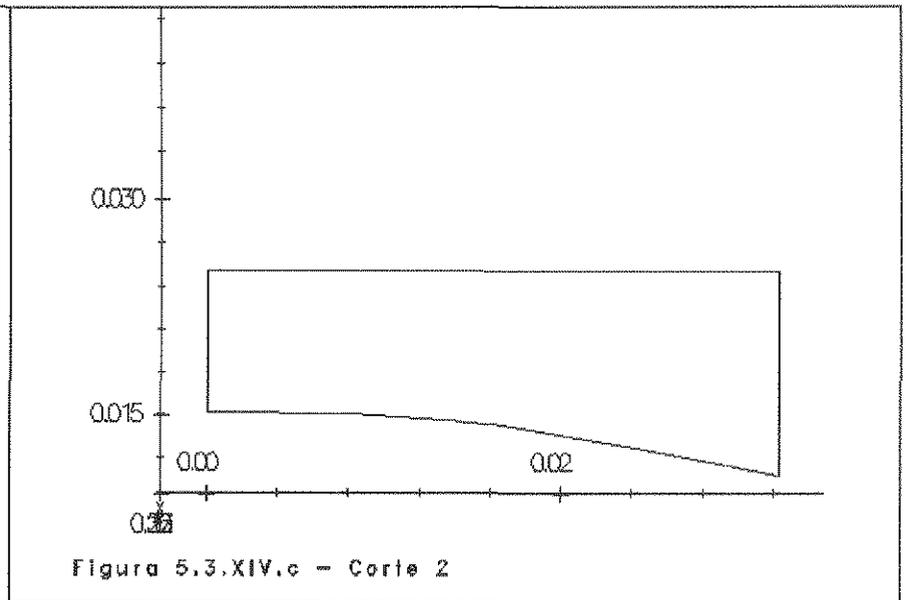
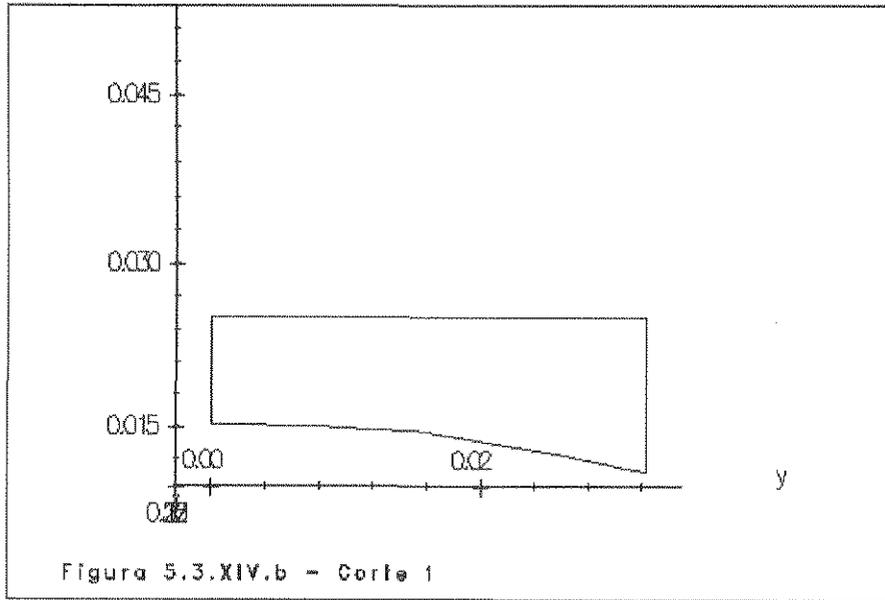
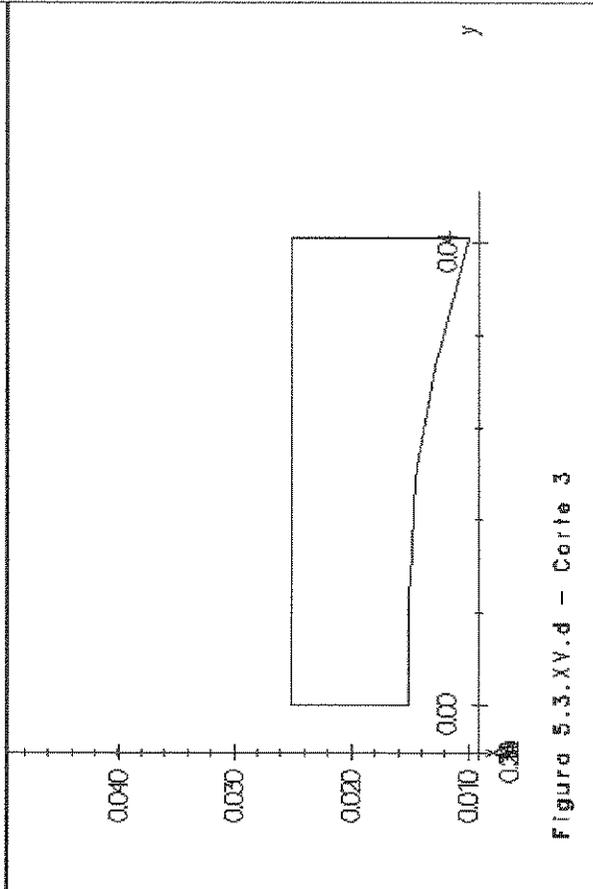
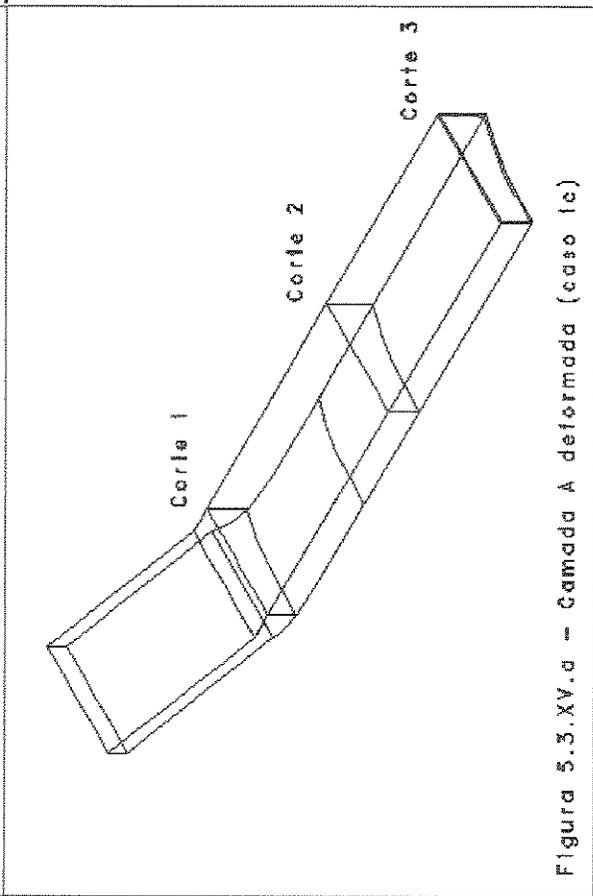
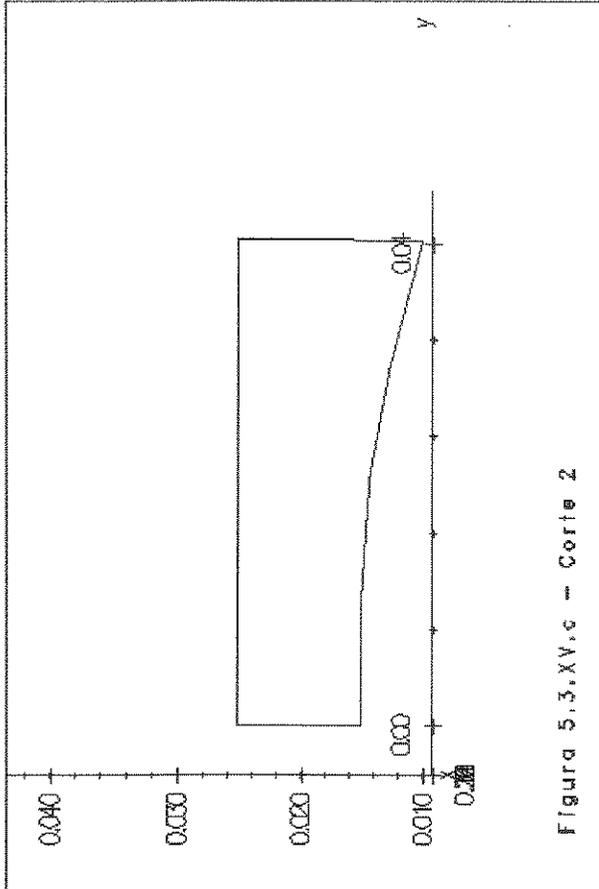
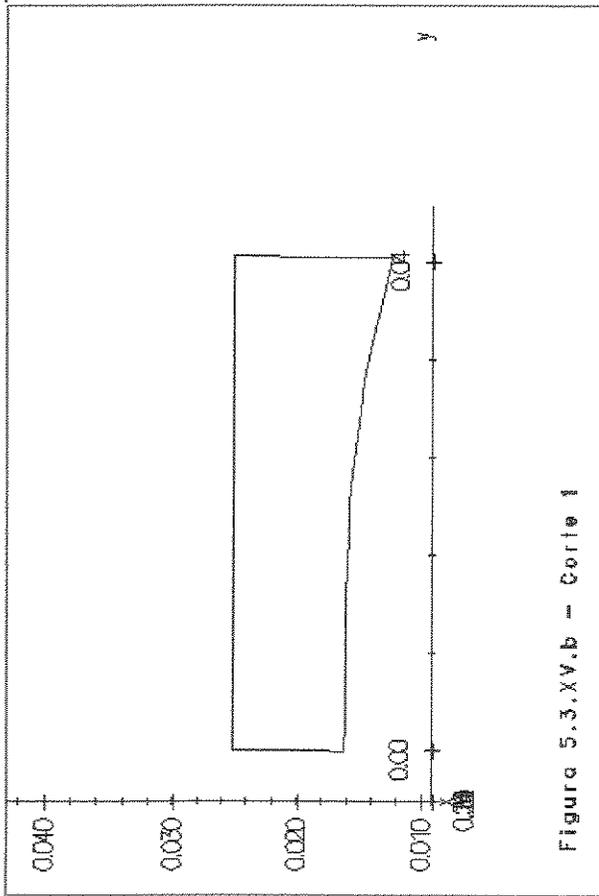


Figura 5.3.XII.a - Velocidades de escoamento para o caso (to)







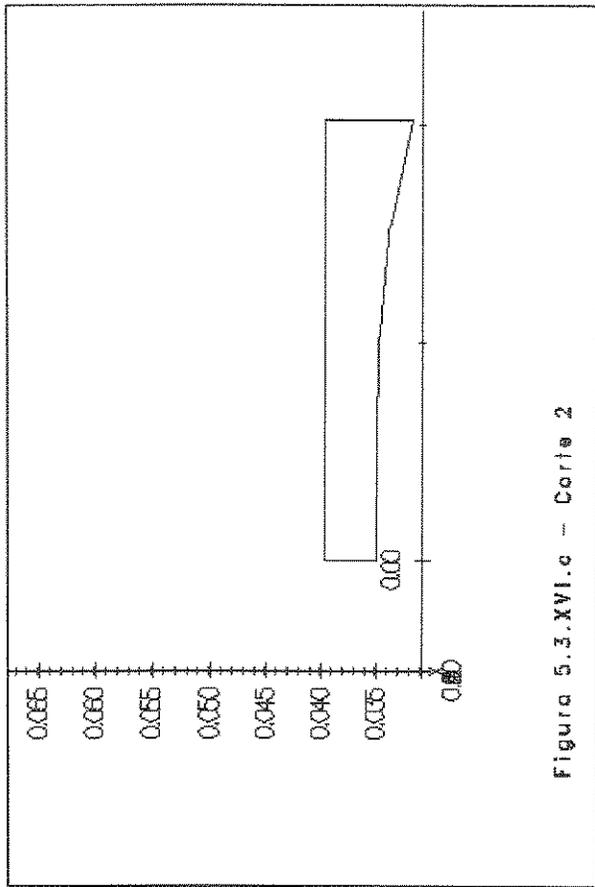


Figura 5.3.XVI.b - Corte 1

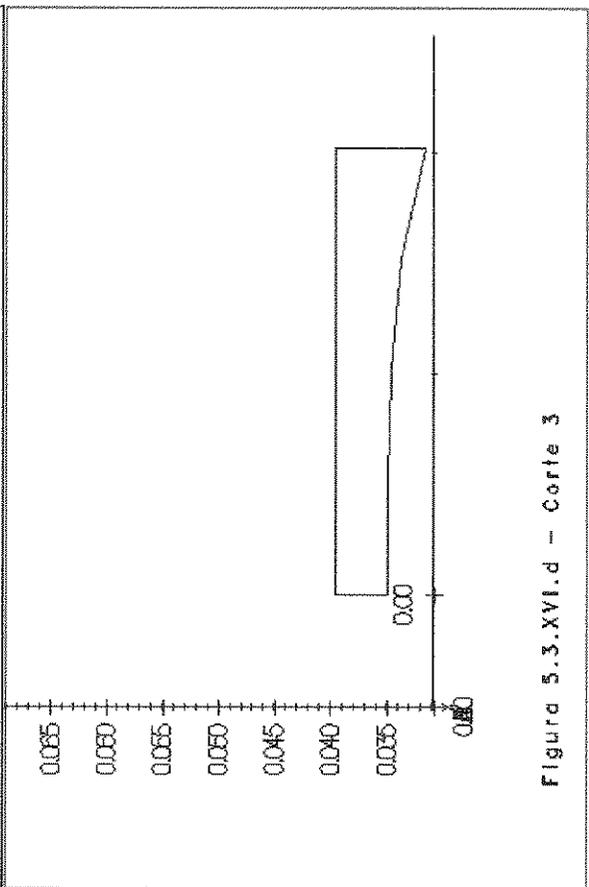


Figura 5.3.XVI.c - Corte 2

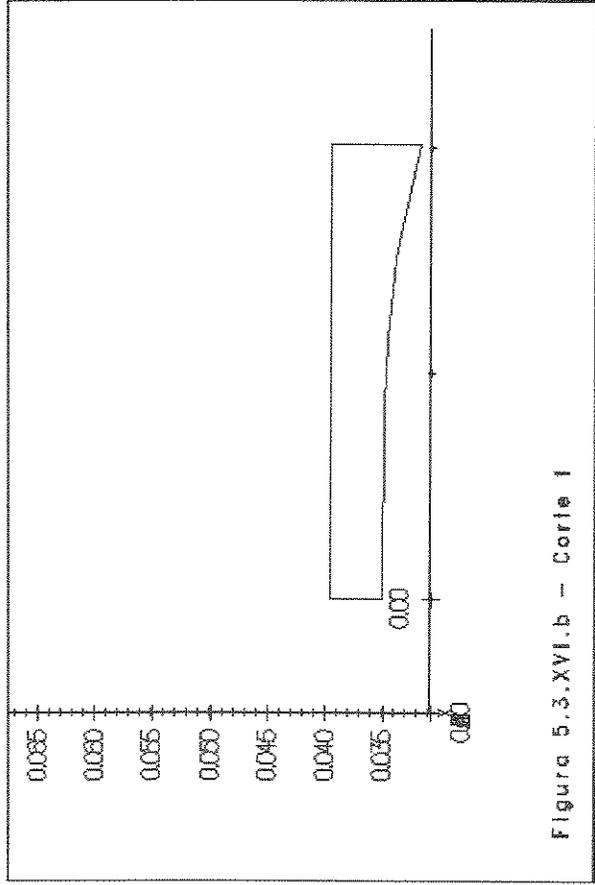


Figura 5.3.XVI.d - Camada C deformada (caso 2d)

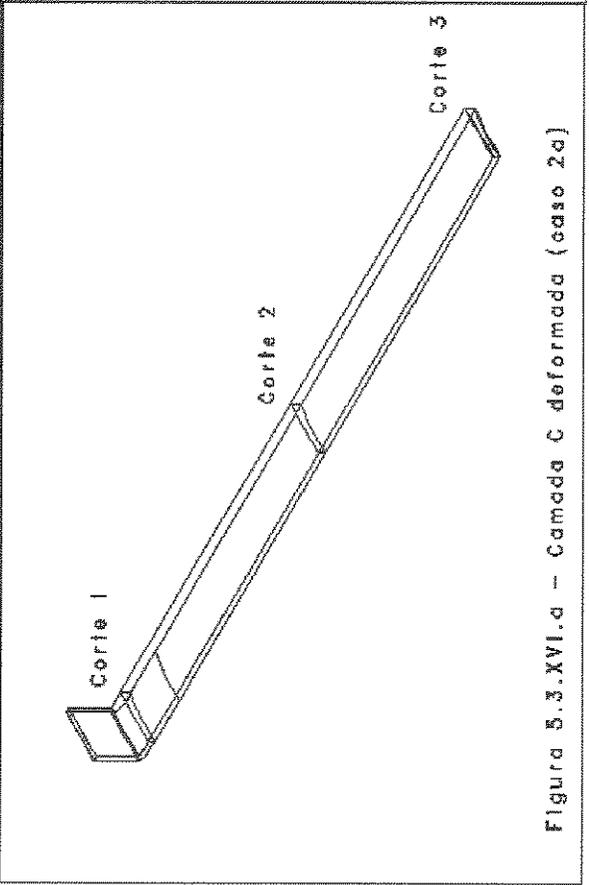


Figura 5.3.XVI.d - Corte 3

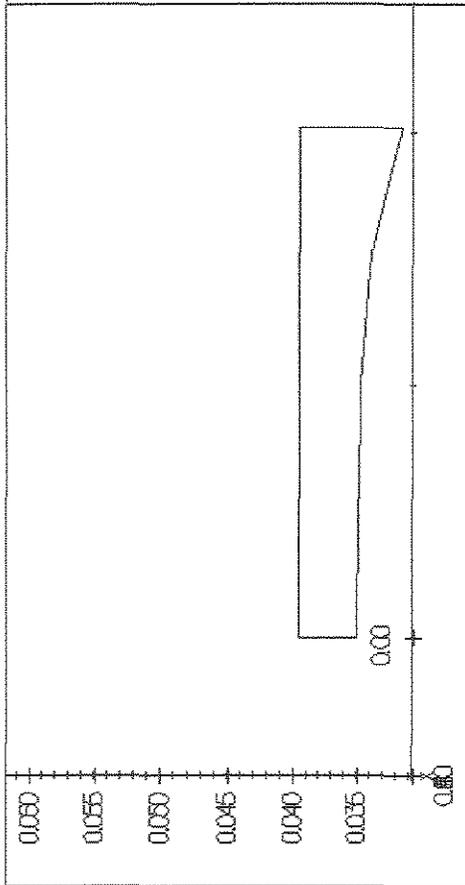


Figura 5.3.XVII.b - Corte 1

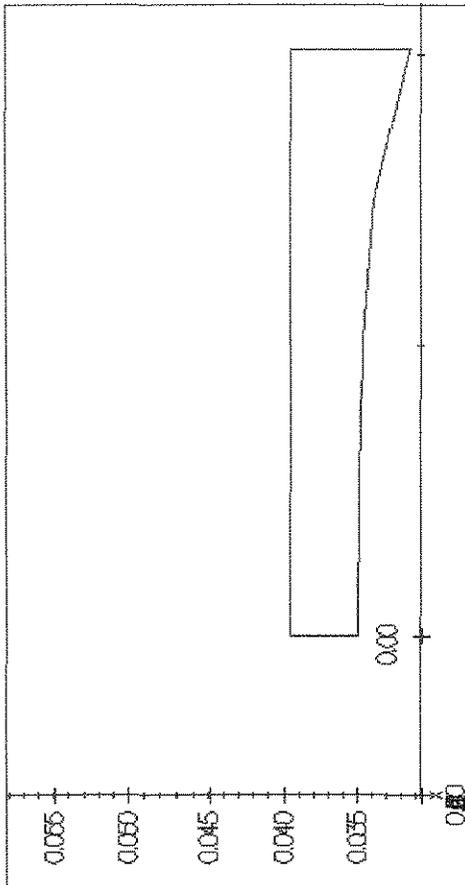


Figura 5.3.XVII.c - Corte 2

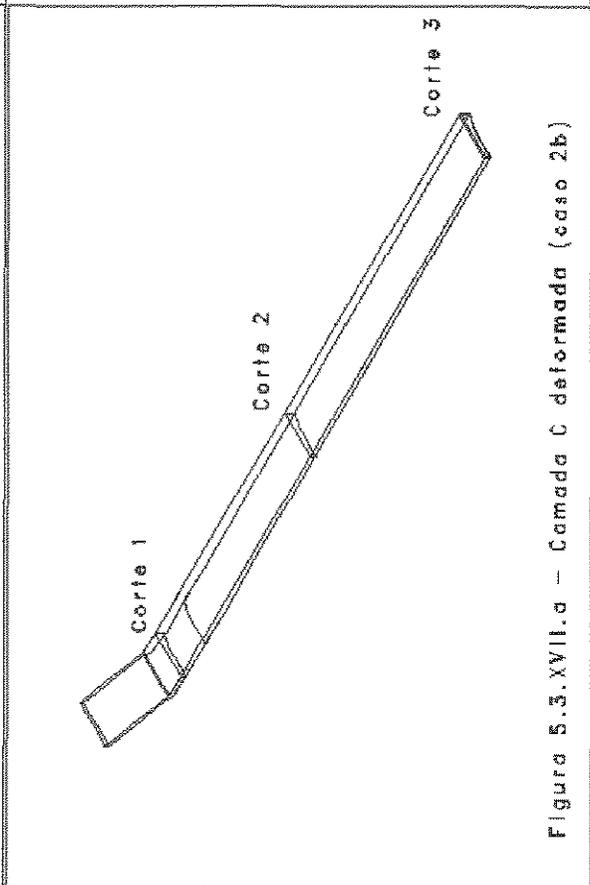


Figura 5.3.XVII.a - Camada C deformada (caso 2b)

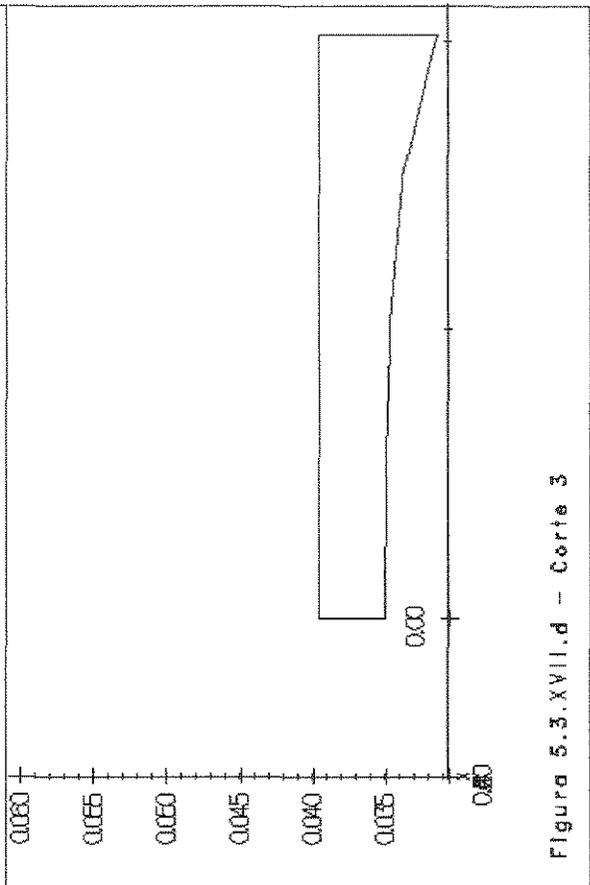


Figura 5.3.XVII.d - Corte 3

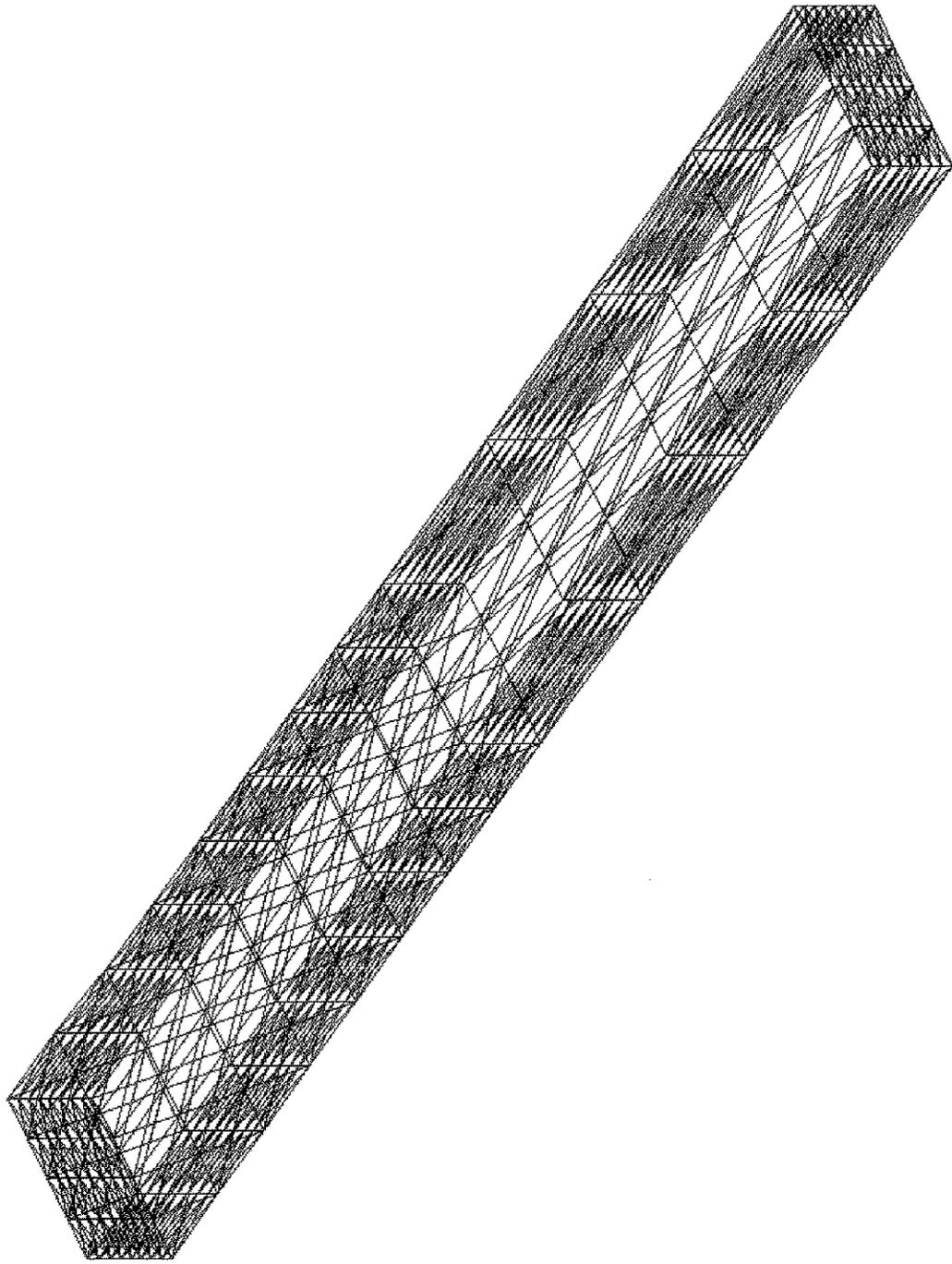
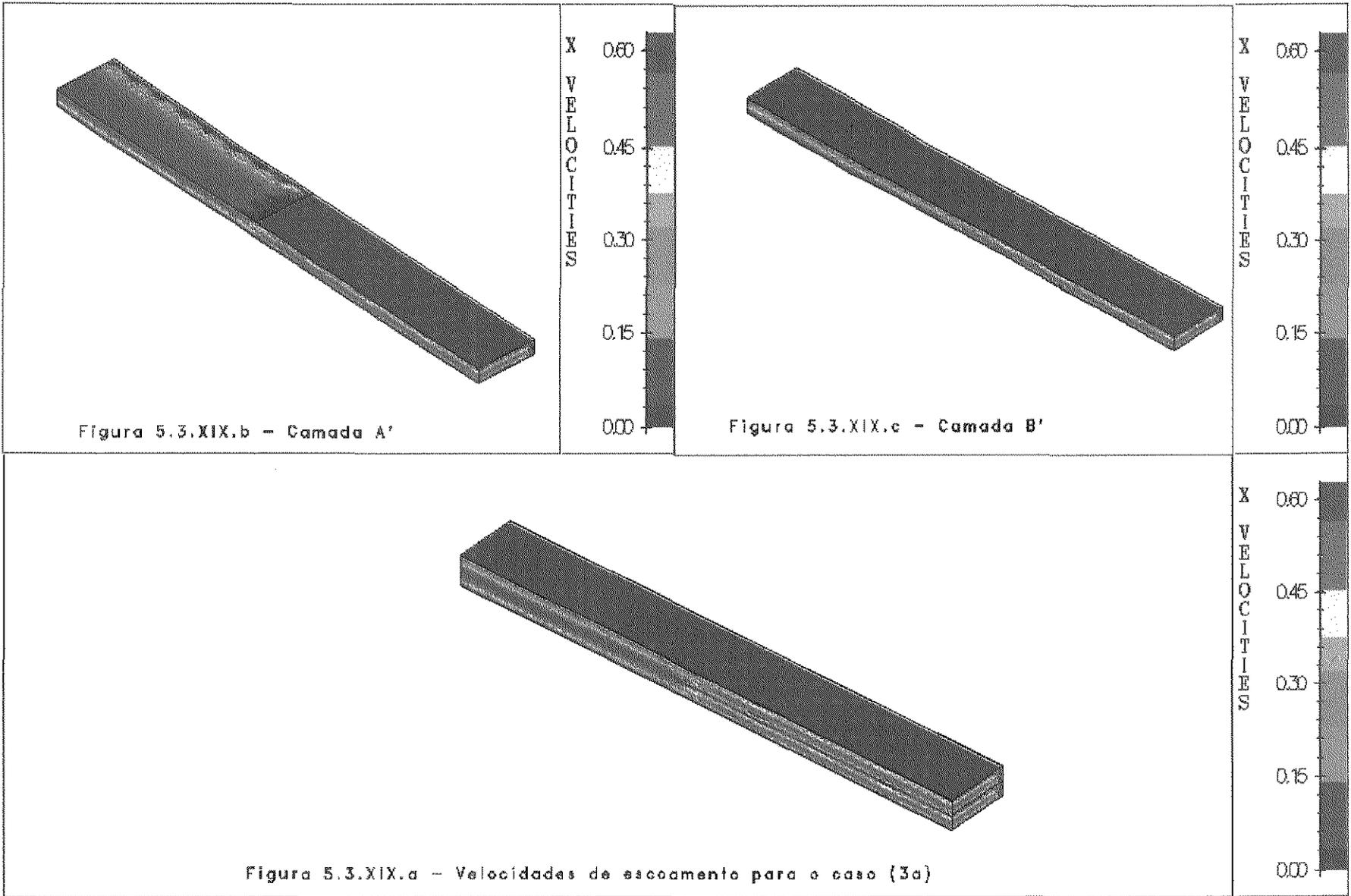
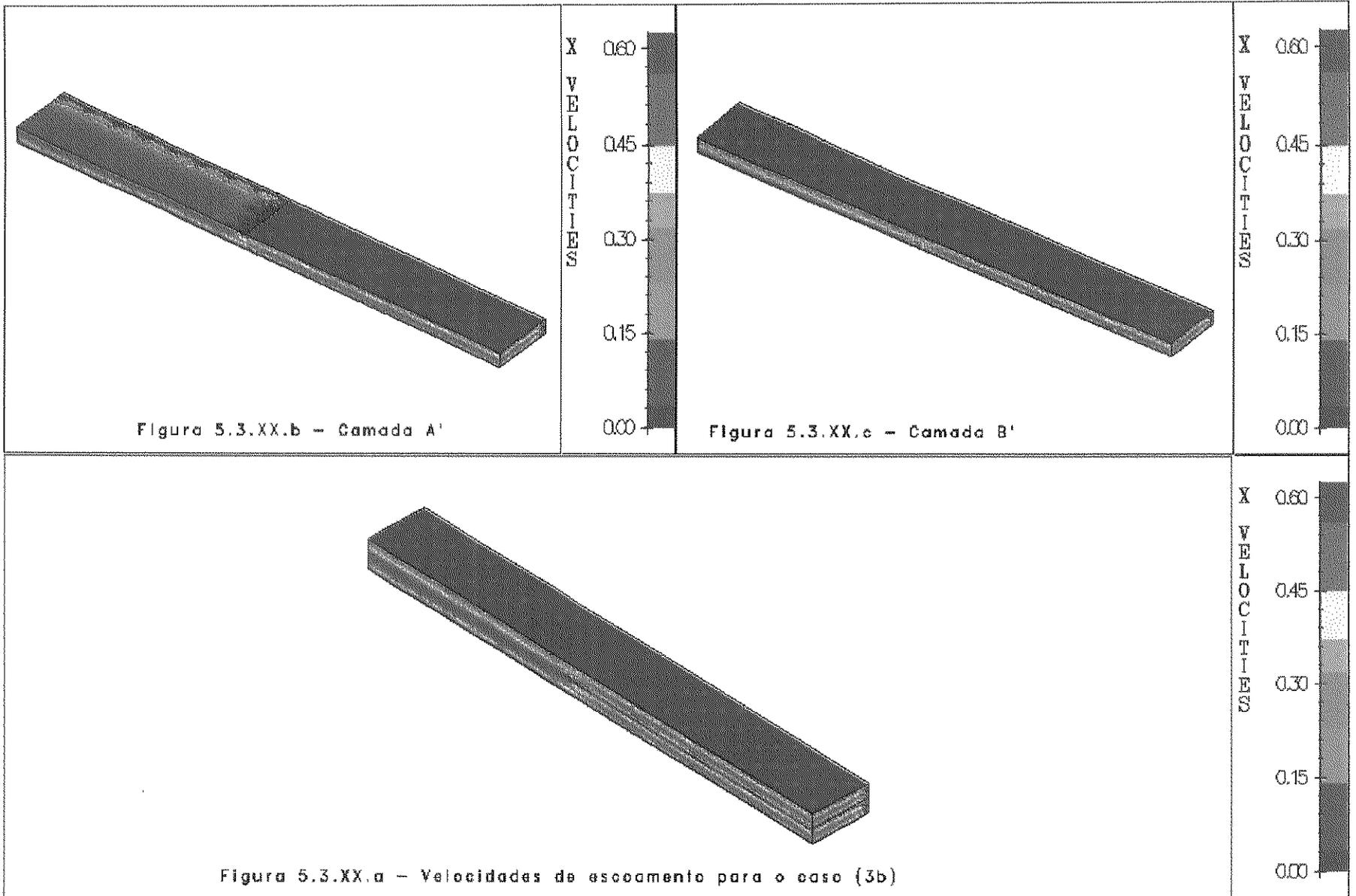


Figura 5.3.XVIII - Malha de elem. finitos para os casos 3a, 3b e 3c





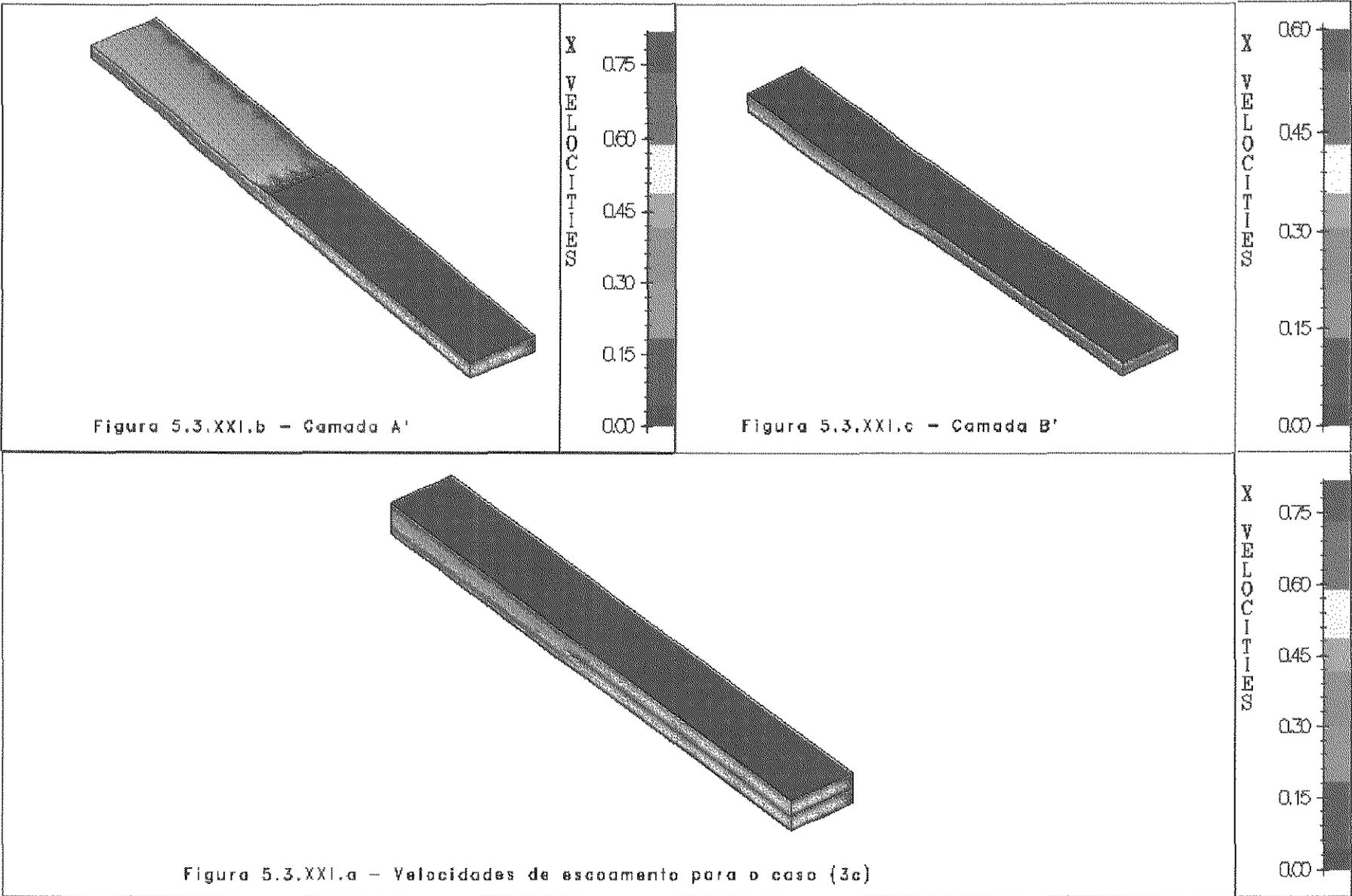




Figura 5.3.XXII.b – Corfe 1



Figura 5.3.XXII.c – Corfe 2

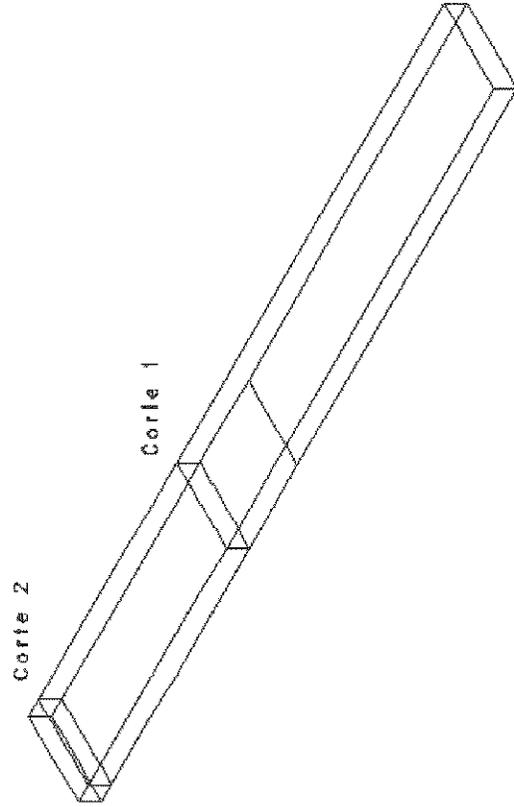


Figura 5.3.XXII.a – Camada B' deformada (caso 3a)



Figura 5.3.XXIII.b – Corte 1



Figura 5.3.XXIII.c – Corte 2

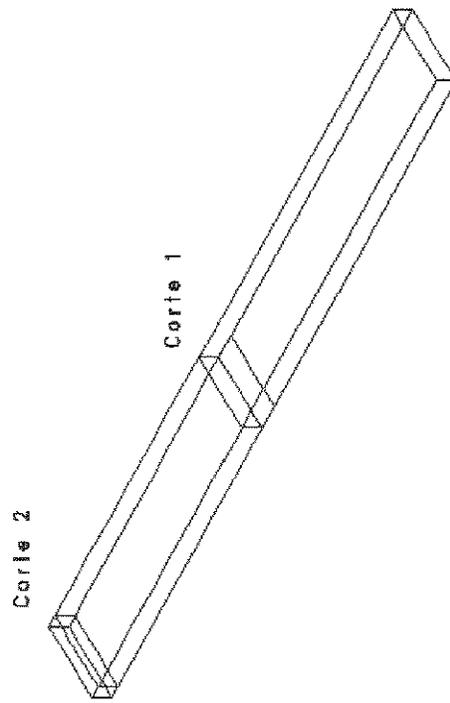


Figura 5.3.XXIII.a – Camada B' deformada (caso 3b)



Figura 5.3.XXIV.c - Corte 2



Figura 5.3.XXIV.b - Corte 1

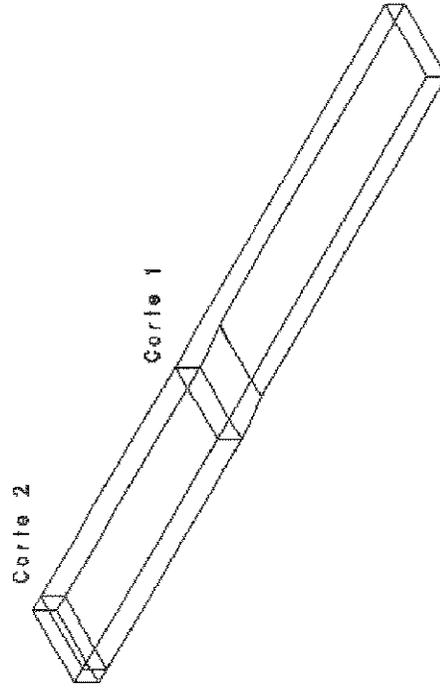


Figura 5.3.XXIV. a - Camada B' deformada (caso 3c)

6 - CONCLUSÕES

- Realizou-se a caracterização de três camadas poliméricas à base de poli(etileno tereftalato), que possibilitou a seleção e o ajuste de modelos constitutivos representativos do comportamento em escoamento destas camadas.
- O modelo Phan Thien-Tanner é o que melhor representa o comportamento das camadas investigadas, no entanto, os parâmetros ajustados variam ao considerar o escoamento como sendo tipicamente de cisalhamento ou elongacional.
- O sistema multicamadas simulado, apresenta baixo número de Weissenberg, indicando a pequena importância dos efeitos de elasticidade para este sistema. Além disso, as camadas A, B e C são constituídas basicamente do mesmo tipo de polímero de PET, assim, a diferença de elasticidade entre as camadas é muito pequena. Em função disso, os resultados de simulação viscoelástica obtidos neste trabalho são semelhantes aos casos newtonianos analisados por Witkoski.
- As simulações tridimensionais efetuadas demonstram como os perfis de velocidade de escoamento das camadas são influenciados por ângulos de entrada laterais e alargamentos da região de confluência das camadas. Geometrias com ângulos de entradas menores, bem como com alargamentos apresentam menores deformações da região interfacial, gerando em consequência sistemas com menor tendência às instabilidades.
- O programa Polyflow apesar de conseguir simular casos tridimensionais e problemas com interfaces móveis, não é capaz de prever o fenômeno de

encapsulamento observado nos casos de escoamento multicamada tridimensional, quando se tem diferenças de viscosidades de camadas. A deficiência do programa é resultante da ausência de um modelo que consiga representar de forma realística a região de contato da interface móvel com a parede do canal de escoamento.

- Mesmo em face do pequeno caráter viscoelástico do sistema estudado, pode-se observar que o programa computacional utilizado, também apresenta deficiências no sentido de definir-se uma condição realística para a saída da caixa de coextrusão após a confluência das camadas.

- A previsão dos fenômenos de escoamento dos sistemas de coextrusão via simulação numérica é uma área que não está completamente dominada, devido à complexidade do problema matemático envolvido e às deficiências dos modelos constitutivos viscoelásticos em fornecer previsões razoáveis para uma grande conjunto de propriedades materiais de polímeros. Contudo, mesmo frente às limitações atuais, a simulação numérica ainda constitui-se em uma ferramenta de fundamental importância na identificação e controle de variáveis relevantes ao perfeito funcionamento do processo.

7 - SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

- As simulações em 3-D não forneceram resultados bem correlacionados com a prática para o problema de encapsulamento das camadas. Para se avançar nas simulações numéricas tridimensionais da coextrusão, é necessário trabalhar-se primeiramente no desenvolvimento de modelos adequados para a previsão da posição da interface nas porções dos fluidos em contato com as paredes.
- O nível de representatividade das simulações numéricas está intimamente ligado aos modelos constitutivos ajustados a dados experimentais para as camadas em estudo. Com objetivo de tornar-se mais realísticos os resultados das simulações é necessário uma caracterização reológica completa, incluindo-se medidas de primeira diferença de tensão normal, N_1 e medidas mais precisas de G' e G'' . As medidas de G' e G'' através do reômetro ortogonal existente no DTP/FEQ UNICAMP, aumentariam amplamente sua exatidão com a alteração do sistema de aquisição dos resultados para uma saída eletrônica através de uma placa tipo AD (analógico-digital). Atualmente a saída faz-se por registradores tipo “pena”, que estão fortemente sujeitos a erros.
- Ajuste de modelos constitutivos, que levam em consideração o espectro de tempos de relaxação dos polímeros, como por exemplo o modelo KBKZ, permitindo o estudo conjunto das propriedades materiais em escoamentos de cisalhamento e elongacional. E a seguir, utilização destes modelos nas simulações dos escoamentos multicamadas.

- Estudos em geometria tridimensional, considerando o comportamento viscoelástico dos polímeros, para o escoamento multicamadas nas feiras, pois sabe-se que os fenômenos de escoamento observados nestas influenciam consideravelmente a qualidade dos produtos obtidos no processo de coextrusão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BINDING, D. M. - *An Approximate analysis for contraction and converging flows* - Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, **27**, 173-189, (1988).
- BIRD, R. B. et al. - *Dynamics of Polymeric Liquids* - John Wiley & Sons, New York, USA, 2^a ed., **1**, (1987).
- CARDOSO, G. - *Modificação da Poliamida 6,6 através de aditivos macromoleculares* - Tese de Mestrado, FEQ / UNICAMP, Campinas - SP, (Novembro / 1994).
- CFView User's Manual - Polyflow S/A, Bélgica, (Setembro / 1993).
- CHEREMISINOFF, N.P. - *Polymer Flow Engineering* - Encyclopedia of Fluid Mechanics, Gulf Publishing Co., **9**, 649-704, Houston, USA, (1990).
- CROCHET, M.J. et al. - *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow* - Rheology Series 1, Elsevier Sc. Publ., Amsterdã, (1984).
- DOOLEY, J. e HILTON, B.T. - *Coextrusion layer rearrangement in different geometric channels* - 51st ANTEC, 3354-3355, (1993).
- FINCH, C.R. - *Updated Overview of the coming to life of Coextrusion* - Coextrusion Seminar, Welex Incorporated, (Outubro / 1989).
- GREEN, A.E. e RIVLIN, R.S. Quart. Appl. Math., **14**, (1956).
- HAN, C. D. - *Rheology in polymer processing* - Academic Press, New York, p. 130, (1976).
- HAN, C.D. e SHETTY, R., - *Studies on multilayer film coextrusion II - Interfacial instability in flat film coextrusion* - Polymer Engineering and Science, February, **18** (3), 180-186, (1978).
- KARAGIANNIS, A. et al. - *Interface Determination in Multilayer Extrusion* - 45th ANTEC, **33**, 106-107, (1987).

- KHOMAMI, B. e WILSON, G.M. - *An Experimental Investigation of Interfacial Instability in superposed flow of viscoelastic fluids in converging/diverging channel geometry* - J. Non-Newtonian Fluid Mech., **58**, 47-65, (1995).
- KIANG, C.T. e CUCULO, J.A., - *Influence of Polymer Characteristics and Melt-Spinning Conditions on the Production of Fine Denier Poly(Ethylene Terephthalate) Fibers. Part I. Rheological Characterization of PET Polymer Melt* - Journal of Applied Polymer Science, **46**, 55-65, (1992).
- LARSON, R.G. - *Constitutive Equations for Polymer melts and Solutions* - Butterworths Series in Chemical Engineering, USA, (1988).
- MAXWELL, B. - *Studies of a Polymer Melt in an Orthogonal Rheometer* - Transactions of The Society of Rheology, **9** (4), 44-52, (1965).
- MAXWELL, B. - *The Dynamic Behavior and Stress Relaxation of Polymer Melts* - Polymer Engineering and Science, **8** (4), 252-258, (Outubro / 1968).
- PARK, H.C. - *Encyclopedia of Polymer Science and Engineering* - John Wiley & Sons Inc., USA, **7**, p. 95, (1987).
- PERDIKOULIAS, J. et al. - *A study of coextrusion flows in polymer processing* - 49th ANTEC, Conference Proceedings Brookfield, 2461-2464, (1991).
- Polyflow User's Manual - Polyflow S/A, Bélgica, (Novembro / 1993).
- SCHRENK, W.J., BRADLEY, N.L. e ALFREY JR., T. - *Interfacial flow instability in multilayer coextrusion* - Polymer Engineering and Science, **18** (8), 620-623, (junho / 1978).
- SOUTHERN, J.H. e BALLMAN, R.L., - *Additional observations on stratified bicomponent flow of polymer melts in a tube* - Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition, **13**, 863-869, (1975).
- SU, Y. e KHOMAMI, B. - *Interfacial Stability of multilayer viscoelastic fluids in slit and converging channel die geometries* - J. Rheol., **36** (2), 357-387, (fevereiro / 1992).
- WERNER, E. e JANOSHA, S. - *Encyclopedia of Polymer Science and Engineering* - John Wiley & Sons Inc., USA, **12**, p. 95, (1987).

- WHITE, J.L. e YAMANE, H. - *A Collaborative Study of the Rheological Properties and Unstable melt spinning Characteristics of Linear and Branched Polyethylene Terephthalates* - Pure & Appl. Chem., **57** (10), 1441-1452, (1985).
- WILSON, G.M., - *Interfacial Instability in multilayer extrusion processes* - Extrusion Dies, Incorporated, USA, p. 1 a 5.
- WITKOSKI, N.A.; - *Modelagem e Simulação de um Escoamento Multicamadas no Processo de Fabricação de Filmes Planos de Poli(Etileno Tereftalato)* - Tese de Mestrado, FEQ / UNICAMP, Campinas - SP, (Maio / 1996).