

MÉTODOS ESPECTRAIS APLICADOS AO FILME DE FUNDIDO DE UM PROCESSO DE EXTRUSÃO DE POLÍMEROS

Sílvio M.A. Gama^{1*}, Célio B.P. Fernandes² e Gaspar L. Cunha²

1: CMUP: Centro de Matemática da Universidade do Porto
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto
Rua do Campo Alegre, 687, 4169 - 007 Porto, Portugal
e-mail: smgama@fc.up.pt, web: <http://www.fc.up.pt/cmup>

2: IPC: Instituto de Polímeros e Compósitos
Escola de Engenharia da Universidade do Minho
Universidade do Minho
Campus de Azurém, 4800-058 Guimarães, Portugal
e-mail: cbpf,agc@dep.uminho.pt web: <http://ipc.uminho.pt>

Palavras chave: Métodos pseudo-espectrais, polinómios de Chebyshev, processos de extrusão de polímeros

Resumo. *De entre os processos de transformação de polímeros destaca-se a moldação por extrusão. A moldação por extrusão consiste em criar uma forma para um determinado material (por exemplo, um polímero), forçando-o a passar por um canal.*

Este trabalho incide, inicialmente, na descrição do processo de plasticização em extrusão, tendo em vista a sua modelação matemática. Em particular, apresentamos o modelo matemático para os fenómenos físicos que ocorrem dentro da extrusora na zona de atraso.

Usamos o método pseudo-espectral, baseado nos polinómios de Chebyshev, tendo em vista à sua aplicação na resolução das equações às derivadas parciais que modelam o filme de fundido na zona de atraso de um processo de plasticização por extrusão. Posteriormente, apresentam-se os resultados numéricos obtidos pela aplicação do método anteriormente referido.

1 Introdução

O objectivo deste trabalho é usar o método pseudo-espectral, baseado em séries de Chebyshev truncadas, para integrar numericamente o sistema de equações às derivadas parciais (EDPs) que modelam o filme de fundido associado à zona de atraso de um processo de plasticização por extrusão. Este sistema de EDPs, que deve ser integrado, por razões comerciais e industriais, o mais rápido possível, tem sido integrado usando o método das diferenças finitas (Gaspar-Cunha, 2000).

O método das diferenças finitas requer, neste caso, a resolução de um sistema de equações lineares pelo método de Gauss o que implica um volume de operações bastante superior ao de algumas transformadas de Fourier rápidas utilizadas pelos métodos (pseudo) espectrais. O método espectral mais utilizado para determinar a solução de um problema que envolva um sistema de EDPs é o método de Fourier. O método de Fourier é apropriado para problemas periódicos, enquanto que o método de Chebyshev é apropriado para problemas não-periódicos. Os métodos espectrais têm três formulações diferentes: Galerkin, tau e colocação. Estas três formulações partem da representação da solução em expansão em série (truncada) numa dada base de funções. No método de Galerkin e no método tau (modificação do método de Galerkin) consideram-se como incógnitas os coeficientes dessa expansão, enquanto que no método de colocação as incógnitas são, geralmente, valores da solução em pontos específicos. Neste trabalho iremos usar a formulação do método de tau e de colocação baseado em polinómios de Chebyshev para integrar numericamente o sistema de EDPs que modelam o filme de fundido associado à zona de atraso de um processo de plasticização por extrusão.

Este trabalho encontra-se organizado da seguinte forma. A Secção 2 identifica e descreve as fases do processo de extrusão de polímeros, terminando com a apresentação das EDPs que modelam o filme de fundido associado à zona de atraso de um processo de plasticização por extrusão. Na Secção 3 discutimos os resultados. Apresentamos as conclusões deste trabalho na Secção 4.

2 Plasticização em Extrusoras Monofuso

O processo de extrusão consiste em criar uma forma para um dado material, forçando-o a passar num canal. A máquina mais utilizada no processo de extrusão é a que possui um parafuso de Arquimedes, uma vez que é capaz de fornecer quantidades de material fundido de uma forma contínua. Embora existam extrusoras com dois ou mais parafusos, as extrusoras monofuso são as mais utilizadas. A Figura 1 mostra alguns componentes de uma extrusora monofuso.

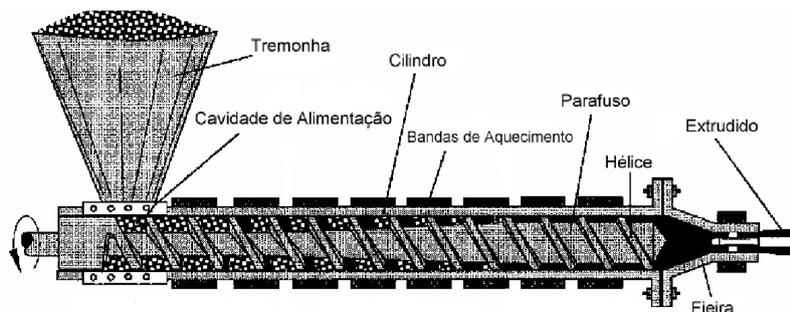


Figura 1: Diagrama de uma extrusora monofuso.

Uma extrusora monofuso consiste num cilindro onde roda um parafuso de Arquimedes. Um parafuso de extrusão convencional (Figura 2) é constituído por três zonas: (i) a zona

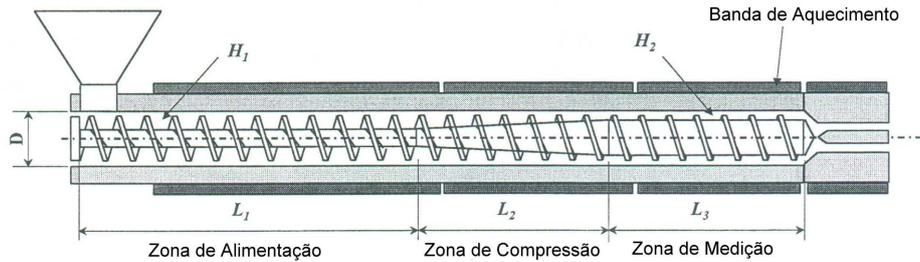


Figura 2: Distinção da profundidade do canal nas várias zonas de uma extrusora monofuso.

de alimentação, onde a profundidade do canal é H_1 , (ii) a zona de compressão, onde a profundidade do canal diminui ao longo do eixo, e (iii) a zona de medição, onde a profundidade do canal é H_2 , com $H_2 < H_1$.

Na extrusão monofuso o material sólido é colocado na tremonha e é transportado até ao canal do parafuso por acção da gravidade. Nas primeiras espiras do parafuso o material sólido é transportado para a zona aquecida do cilindro, por acção do movimento de rotação do parafuso, onde funde. Finalmente, na zona de medição é gerada a pressão necessária para que o polímero atravesse a feira que lhe confere a forma final.

2.1 Zonas funcionais

O processo de plasticização em extrusão começa com a introdução de polímero na tremonha. De seguida, este é fundido e homogeneizado e, por último, é obrigado a passar na feira. Os fenómenos físicos que ocorrem dentro da extrusora são complexos e incluem o transporte de sólidos, a fusão do polímero e o transporte de polímero fundido. O trabalho teórico e experimental realizado nas últimas décadas (Tadmor e Klein, 1970); Elbirli *et al.*, 1980; Han *et al.*, 1996), permitiu verificar que o funcionamento da extrusão implica a existência de quatro zonas funcionais identificadas na Figura 3, a saber, a zona de transporte de sólidos, a zona de atraso, a zona de fusão e a zona da bombagem do fundido.

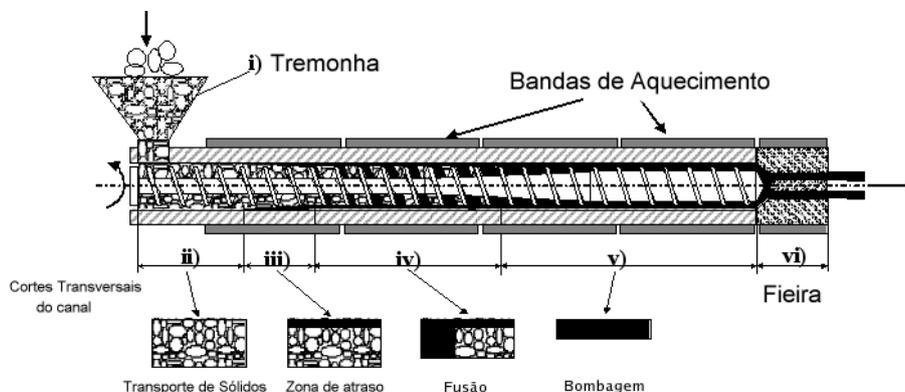


Figura 3: Fenómenos físicos que ocorrem dentro de uma extrusora.

A zona de transporte de sólidos estende-se desde a tremonha até ao local do parafuso onde ocorre a fusão da primeira partícula de polímero. A pressão na parte inferior da tremonha é, geralmente, considerada como uma condição inicial nos cálculos efectuados para a zona de transporte de sólidos no parafuso. Esta zona é caracterizada pela geração de pressão, pelo consumo de potência e pelo perfil de temperatura (Broyer e Tadmor, 1972; Tadmor e Broyer, 1972). O mecanismo de fusão não se inicia imediatamente a seguir ao fim da zona de transporte de sólidos. Antes de ele se iniciar, ocorre transporte de sólidos que estão parcialmente cobertos por um filme de material fundido. A esta fase chama-se zona de atraso, iniciando-se quando o material na interface funde (por condução de calor, ou por dissipação de energia mecânica) e estende-se até ao início da formação do poço de fundido. A zona de fusão é um poço de material fundido. A bombagem do fundido ocorre depois de se completar a fusão do polímero. Nesta zona ocorre a mistura do material fundido e gera-se a pressão necessária para forçar o polímero a passar na feira. Esta é a zona mais estudada uma vez que ela permite prever as variáveis mais importantes do processo: gradiente da pressão, consumo de potência, perfil de temperaturas, distribuição do tempo de residência e grau de mistura.

A modelação do processo de plasticização consiste na descrição dos fenómenos de transferência de calor e de fluxo de massa (através das equações de balanço de massa, momentum e energia) em cada zona funcional. Para efeitos de modelação, as zonas funcionais estão sequencialmente ligadas pelas condições fronteira, isto é, os resultados obtidos numa zona são os dados iniciais utilizados na zona seguinte.

Os modelos matemáticos que descrevam de uma forma coerente cada zona funcional, tendo em conta as respectivas condições fronteira, podem ser detalhadamente explicados, por exemplo, em Gaspar-Cunha (2000) ou em Fernandes (2007). Na Secção 2.2 apresentaremos uma breve descrição do modelo matemático do filme de fundido associado à zona de atraso, que é a zona funcional que aqui estudamos.

2.2 Modelo matemático do filme de fundido

Escrevemos aqui as EDPs que modelam o filme de fundido e que constituem o objecto de estudo deste trabalho. Começamos por deduzir as equações de momentum a partir da equação de Navier-Stokes assumindo que o fluido é incompressível e que as forças gravitacionais e de inércia são desprezáveis. A equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis escreve-se:

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla P + \nabla \cdot (\eta \nabla \mathbf{v}), \quad (1)$$

onde $\mathbf{v} = (V_x(x, y, z), V_y(x, y, z), V_z(x, y, z))$ é o campo de velocidades incompressível (isto é, $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$), ∇P é o gradiente da pressão $P(x, y, z)$ e $\eta(x, y, z)$ é a viscosidade do fluido. Assumimos $V_y(x, y, z) = 0$, e que o processo é estacionário, isto é, $\partial_t \mathbf{v} = 0$. Assumimos também que o escoamento do filme de fundido ocorre apenas nas direcções transversal e

longitudinal do canal, isto é, $\partial V_x/\partial x = 0$ e $\partial V_z/\partial z = 0$. Logo, o termo convectivo $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}$ é nulo e, portanto, a equação (1) reduz-se a $\nabla P = \nabla \cdot (\eta \nabla \mathbf{v})$. Como $V_y(x, y, z) = 0$, $\partial V_x/\partial x = \partial V_z/\partial z = 0$ e o fluxo de fundido está totalmente desenvolvido na direcção z (isto é, $\partial V_x/\partial z = \partial V_z/\partial x = 0$), então conclui-se que

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial V_x}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial P}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial V_z}{\partial y} \right). \end{cases} \quad (2)$$

Devido às condições e simplificações apresentadas, em cada passo de *tempo* Δz o cálculo dos perfis de velocidade, temperatura e pressão é efectuado no plano yz . A espessura δ_C do filme de fundido é variável ao longo da zona de atraso, isto é, tem-se $y = f(z)$, para uma certa função $f(\cdot)$. A viscosidade do fundido, η , é dada pela lei de potência:

$$\eta(y, z) = k_0 \exp[-a(T(y, z) - T_0)] \dot{\gamma}^{n-1}(y, z), \quad (3)$$

com k_0 , a , T_0 e n constantes obtidas a partir de dados experimentais. A taxa de corte, $\dot{\gamma}$, é determinada por:

$$\dot{\gamma}(y, z) = \left[\left(\frac{\partial V_x(y, z)}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z(y, z)}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (4)$$

A equação da temperatura é:

$$\rho_m c_p V_z(y, z) \frac{\partial T(y, z)}{\partial z} = k_m \frac{\partial^2 T(y, z)}{\partial y^2} + \eta(y, z) \dot{\gamma}^2(y, z), \quad (5)$$

onde ρ_m é a densidade do fundido, c_p é o calor específico do fundido e k_m é a condutividade térmica do fundido. As equações de continuidade são:

$$\begin{cases} \int_0^{\delta_C} V_x(y, z) dy = 0, \\ \int_0^{\delta_C} V_z(y, z) dy = \frac{\dot{m}_{fz}}{W}, \end{cases} \quad (6)$$

onde δ_C é a espessura do filme de fundido e \dot{m}_{fz} é o débito do material fundido no filme, resultado de um balanço de massa entre o bloco de sólidos e este filme (Fernandes, 2007).

As condições fronteira são:

$$\begin{cases} V_x(y = 0, z) = 0, \\ V_x(y = \delta_C, z) = -V_{bx}, \end{cases} \quad \begin{cases} V_z(y = 0, z) = V_{sz}, \\ V_z(y = \delta_C, z) = V_{bz}, \end{cases} \quad \begin{cases} T(y = 0, z) = T_m, \\ T(y = \delta_C, z) = T_b. \end{cases} \quad (7)$$

Para podermos propagar o perfil de temperatura e das velocidades é necessário impôr condições iniciais para as velocidades e para a temperatura e ter em conta a compatibilidade

Variável	Descrição	Valor	Unidade
W	Largura do canal	0.04	m
δ_C	Altura do filme de fundido	0.0015	m
\dot{m}_{fz}	Débito do material fundido no filme	0.00003	m^3/s
T_m	Temperatura de fusão do polímero	119.6	$^{\circ}C$
T_b	Temperatura do cilindro	190	$^{\circ}C$
V_{bx}	Componente x da velocidade do cilindro	0.034304	m/s
V_{bz}	Componente z da velocidade do cilindro	0.10777	m/s
V_{sz}	Velocidade do polímero sólido	0.029569	m/s

Tabela 1: Variáveis operatórias e geométricas para os perfis iniciais das velocidades e temperatura.

com as equações de continuidade (6) e condições fronteira (7). Em consequência, não é possível utilizar perfis lineares para as condições iniciais das velocidades, uma vez que não respeitam simultaneamente as condições fronteira e as equações de continuidade. Utilizaremos, assim, perfis quadráticos para as condições iniciais das velocidades e um perfil linear para a condição inicial da temperatura. Após alguns cálculos analíticos, conclui-se que podemos considerar como condições iniciais das velocidades os perfis:

$$V_x(y, 0) = -\frac{3V_{bx}}{\delta_C^2} y^2 + \frac{2V_{bx}}{\delta_C} y, \quad (8)$$

e,

$$V_z(y, 0) = \left(\frac{3V_{bz}}{\delta_C^2} + \frac{3V_{sz}}{\delta_C^2} - \frac{6}{\delta_C^3} \frac{\dot{m}_{fz}}{W} \right) y^2 + \left(-\frac{2V_{bz}}{\delta_C} - \frac{4V_{sz}}{\delta_C} + \frac{6}{\delta_C^2} \frac{\dot{m}_{fz}}{W} \right) y + V_{sz}. \quad (9)$$

A condição inicial de temperatura é:

$$T(y, 0) = \left(\frac{T_b - T_m}{\delta_C} \right) y + T_m. \quad (10)$$

Em (8)–(10) tem-se $y \in [0, \delta_C]$. Os valores utilizados para as variáveis operatórias e geométricas deste processo de extrusão foram os seguintes:

3 Aplicação do método espectral baseado nos polinómios de Chebyshev ao processo de extrusão de polímeros

O objectivo desta secção é realizar experiências numéricas, utilizando o método espectral baseado em polinómios de Chebyshev, que permitam resolver o sistema de EDPs que descrevem o filme de fundido associado à zona de atraso de um processo de plasticização por extrusão. O leitor interessado poderá estudar (ou rever) as técnicas numéricas aqui utilizadas em Peyret (2002).

3.1 Mudança de variável nas equações do espaço físico

Para aplicarmos o método espectral baseado nos polinómios de Chebyshev é necessário que o domínio das funções que utilizámos seja o intervalo $[-1, 1]$. Na Secção 2.2 vimos que

para uma cota z fixa os perfis de velocidades e de temperatura só dependem da variável y e o gradiente de pressão é constante. Desta forma, temos que efectuar uma mudança de variável que, para cada $z \in [0, L]$, faça corresponder à variável $y \in [0, f(z)]$ a variável $\xi \in [-1, 1]$. Assim, basta considerar $\xi = -1 + 2y/f(z)$, e $z = z$. Consequentemente,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{2}{f(z)}, \\ \frac{\partial z}{\partial y} = 0, \end{array} \right. \quad \text{e} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \xi}{\partial z} = -\frac{2f'(z)}{[f(z)]^2}y, \\ \frac{\partial z}{\partial z} = 1. \end{array} \right.$$

Portanto, sendo $u(y, z)$ uma função de domínio $[0, f(z)] \times [0, L]$, tem-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du}{dy} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial y} = \frac{2}{f(z)} \frac{\partial u}{\partial \xi}, \\ \frac{du}{dz} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial z} = -\frac{2f'(z)}{[f(z)]^2}y \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\partial u}{\partial z}, \end{array} \right.$$

e

$$\frac{d^2u}{dy^2} = \frac{d}{dy} \left(\frac{2}{f(z)} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{2}{f(z)} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{2}{f(z)} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \frac{\partial z}{\partial y} = \left(\frac{2}{f(z)} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}.$$

A equação de temperatura (5) escreve-se nas variáveis ξ e z do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \rho_m c_p V_z(\xi, z) \left(-\frac{f'(z)}{f(z)}(\xi + 1) \frac{\partial T(\xi, z)}{\partial \xi} + \frac{\partial T(\xi, z)}{\partial z} \right) = \\ = k_m \left(\frac{2}{f(z)} \right)^2 \frac{\partial^2 T(\xi, z)}{\partial \xi^2} + \eta(\xi, z) \dot{\gamma}^2(\xi, z). \end{aligned}$$

Como não é conhecida uma expressão analítica que descreva a espessura do filme de fundido em função da cota z do canal, iremos considerar que a espessura do filme de fundido é constante ao longo da zona de atraso, ou seja, que $f(z) = \delta_C$, para todo $z \in [0, L]$, como mostra a Figura 4.

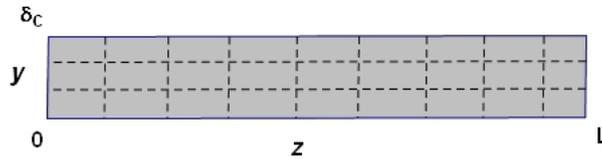


Figura 4: Espessura constante do filme de fundido no plano yz .

Assim, a mudança de variável que faz corresponder à variável y a variável ξ é dada por:

$$\xi = \frac{2}{\delta_C} y - 1, \quad (11)$$

e, consequentemente, $d\xi/dy = 2/\delta_C$. Portanto, sendo $u(y, z)$ uma função de domínio $[0, \delta_C] \times [0, L]$, tem-se $\frac{du}{dy} = \frac{2}{\delta_C} \frac{\partial u}{\partial \xi}$, e $\frac{d^2u}{dy^2} = \left(\frac{2}{\delta_C} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}$. Assim, as equações (2) a (10) serão

reformuladas de acordo com esta mudança de variável. Nas novas variáveis, as equações de momentum (2) ficam

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial x} = \left(\frac{2}{\delta_C}\right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\eta(\xi, z) \frac{\partial V_x(\xi, z)}{\partial \xi} \right), \\ \frac{\partial P}{\partial z} = \left(\frac{2}{\delta_C}\right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\eta(\xi, z) \frac{\partial V_z(\xi, z)}{\partial \xi} \right). \end{cases} \quad (12)$$

Por outro lado, o cálculo da viscosidade obtém-se de

$$\eta(\xi, z) = k_0 \exp[-a(T(\xi, z) - T_0)] \dot{\gamma}^{n-1}(\xi, z), \quad (13)$$

onde a taxa de corte dada pela fórmula (4) é substituída por

$$\dot{\gamma}(\xi, z) = \frac{2}{\delta_C} \left[\left(\frac{\partial V_x(\xi, z)}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z(\xi, z)}{\partial \xi} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

Aplicando a mudança de variável (11) à equação de temperatura (5), obtém-se

$$\rho_m c_p V_z(\xi, z) \frac{\partial T(\xi, z)}{\partial z} = k_m \left(\frac{2}{\delta_C} \right)^2 \frac{\partial^2 T(\xi, z)}{\partial \xi^2} + \eta(\xi, z) \dot{\gamma}^2(\xi, z). \quad (15)$$

Quanto às equações de continuidade (6), usando (11), obtém-se

$$\begin{cases} \int_{-1}^1 V_x(\xi, z) d\xi = 0, \\ \int_{-1}^1 V_z(\xi, z) d\xi = \frac{2\dot{m}_{fz}}{\delta_C W}. \end{cases} \quad (16)$$

As condições fronteira (7) são substituídas por

$$\begin{cases} V_x(\xi = -1, z) = 0, \\ V_x(\xi = 1, z) = -V_{bx}, \end{cases} \quad \begin{cases} V_z(\xi = -1, z) = V_{sz}, \\ V_z(\xi = 1, z) = V_{bz}, \end{cases} \quad \begin{cases} T(\xi = -1, z) = T_m, \\ T(\xi = 1, z) = T_b. \end{cases} \quad (17)$$

Do mesmo modo, de (8) e (9), obtemos

$$V_x(\xi, 0) = -\frac{3}{4}V_{bx}(\xi + 1)^2 + V_{bx}(\xi + 1), \quad (18)$$

e

$$V_z(\xi, 0) = \left(\frac{3}{4}V_{bz} + \frac{3}{4}V_{sz} - \frac{3}{2\delta_C} \frac{\dot{m}_{fz}}{W} \right) (\xi + 1)^2 - \left(V_{bz} + 2V_{sz} - \frac{3}{\delta_C} \frac{\dot{m}_{fz}}{W} \right) (\xi + 1) + V_{sz}. \quad (19)$$

A condição inicial de temperatura (10) é substituída por

$$T(\xi, 0) = \left(\frac{T_b - T_m}{2} \right) (\xi + 1) + T_m. \quad (20)$$

As explorações numéricas, apresentadas a seguir, utilizam como variáveis operatórias e geométricas os valores da Tabela 1 na página 6 e da Tabela 2.

Variável	Descrição	Valor	Unidade
L	Comprimento do canal	0.1	m
Δz	Incremento	0.001	m
ρ_m	Densidade do fundido	930	kg/m^3
c_p	Calor específico do fundido	2000	$J/kg^\circ C$
k_m	Condutividade térmica do fundido	0.15	$W/m^\circ C$
k_0	Constante da lei de potência	29940	Pa/s^n
a	Constante da lei de potência	0.00681	$1/^\circ C$
T_0	Constante da lei de potência	190	$^\circ C$
n	Constante da lei de potência	0.345	—

Tabela 2: Variáveis operatórias e geométricas para as explorações numéricas.

3.2 Exploração numérica I

A primeira exploração numérica deste trabalho consiste em aplicar o método tau para propagar o perfil de temperatura de $T(y, 0)$ para $T(y, \Delta z)$. Neste sentido, aplicando o esquema explícito do método de Euler à equação de temperatura (5), obtemos:

$$\rho_m c_p V_z(y, 0) \frac{T(y, \Delta z) - T(y, 0)}{\Delta z} = k_m \frac{\partial^2 T(y, 0)}{\partial y^2} + \eta(y, 0) \dot{\gamma}^2(y, 0).$$

Donde,

$$T(y, \Delta z) = T(y, 0) + \Delta z \left(k_m \frac{\partial^2 T(y, 0)}{\partial y^2} + \eta(y, 0) \dot{\gamma}^2(y, 0) \right) / (\rho_m c_p V_z(y, 0)). \quad (21)$$

Em termos da variável ξ , a fórmula (21) é substituída por:

$$T(\xi, \Delta z) = T(\xi, 0) + \Delta z \left(\frac{4k_m}{\delta_C^2} \frac{\partial^2 T(\xi, 0)}{\partial \xi^2} + \eta(\xi, 0) \dot{\gamma}^2(\xi, 0) \right) / (\rho_m c_p V_z(\xi, 0)). \quad (22)$$

As condições fronteira das velocidades e temperatura são dadas por (17) e as condições iniciais por (18)–(20).

3.2.1 Aplicação do método de tau

Consideremos as seguintes aproximações, por polinómios de Chebyshev (Peyret, 2002), para a temperatura $T(\xi, z)$, isto é, $T_N(\xi, z) = \sum_{k=0}^N \hat{t}_k(z) T_k(\xi)$, e para as velocidades $V_x(\xi, z)$

k	0	1	$2 \leq k \leq 8$
$\hat{t}_k(0)$	154, 8	35, 2	0

Tabela 3: Coeficientes de Chebyshev da temperatura inicial.

e $V_z(\xi, z)$, a saber, $(V_x)_N(\xi, z) = \sum_{k=0}^N (\widehat{V_x})_k(z) T_k(\xi)$, e $(V_z)_N(\xi, z) = \sum_{k=0}^N (\widehat{V_z})_k(z) T_k(\xi)$.

Definam-se $J(\xi, z) \equiv \partial^2 T(\xi, z) / \partial \xi^2 / V_z(\xi, z)$, e $K(\xi, z) \equiv \eta(\xi, z) \dot{\gamma}^2(\xi, z) / V_z(\xi, z)$. Consideremos, agora, as aproximações $J_N(\xi, z) = \sum_{k=0}^N \widehat{J}_k(z) T_k(\xi)$, e $K_N(\xi, z) = \sum_{k=0}^N \widehat{K}_k(z) T_k(\xi)$, onde $\widehat{J}_k(z)$ e $\widehat{K}_k(z)$ são os coeficientes de Chebyshev das funções $J(\cdot, z)$ e $K(\cdot, z)$, respectivamente. Por aplicação do método de tau à equação (22), obtemos:

$$\hat{t}_k(\Delta z) = \hat{t}_k(0) + \frac{\Delta z}{\rho_m c_p} \left(\frac{4k_m}{\delta_C^2} \widehat{J}_k(0) + \widehat{K}_k(0) \right), \quad k = 0, \dots, N-2, \quad (23)$$

complementada com as condições fronteira:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=0}^N (-1)^k (\widehat{V_x})_k(z) = 0, \\ \sum_{k=0}^N (\widehat{V_x})_k(z) = -V_{bx}, \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=0}^N (-1)^k (\widehat{V_z})_k(z) = V_{sz}, \\ \sum_{k=0}^N (\widehat{V_z})_k(z) = V_{bz}, \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=0}^N (-1)^k \hat{t}_k(z) = T_m, \\ \sum_{k=0}^N \hat{t}_k(z) = T_b, \end{array} \right.$$

e as condições iniciais:

$$\left\{ \begin{array}{l} (V_x)_N(\xi, 0) = \sum_{k=0}^N (\widehat{V_x})_k(0) T_k(\xi) = -\frac{3}{4} V_{bx} (\xi + 1)^2 + V_{bx} (\xi + 1), \\ (V_z)_N(\xi, 0) = \sum_{k=0}^N (\widehat{V_z})_k(0) T_k(\xi) = \left(\frac{3}{4} V_{bz} + \frac{3}{4} V_{sz} - \frac{3}{2\delta_C} \frac{\dot{m}_{fz}}{W} \right) (\xi + 1)^2 \\ \quad - \left(V_{bz} + 2V_{sz} - \frac{3}{\delta_C} \frac{\dot{m}_{fz}}{W} \right) (\xi + 1) + V_{sz}, \\ T_N(\xi, 0) = \sum_{k=0}^N \hat{t}_k(0) T_k(\xi) = T_m + \left(\frac{T_b - T_m}{2} \right) (\xi + 1). \end{array} \right.$$

As equações de continuidade (16) tomam a forma (Fernandes, 2007):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_k \frac{1}{1-k^2} (\widehat{V_x})_k(z) = 0, \quad \text{para } k = 0, 2, 4, \dots, \\ \sum_k \frac{1}{1-k^2} (\widehat{V_z})_k(z) = \frac{\dot{m}_{fz}}{\delta_C W}, \quad \text{para } k = 0, 2, 4, \dots \end{array} \right.$$

3.2.2 Resultados numéricos I

Analisemos o que se passa com a evolução da temperatura de $z = 0$ até $z = \Delta z$. Consideremos a resolução $N = 8$. Os valores dos coeficientes de Chebyshev do perfil inicial de temperatura são os apresentados na Tabela 3.

Os valores (em módulo) dos coeficientes de Chebyshev do perfil de temperatura em Δz são os indicados na Tabela 4.

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$ \hat{t}_k(\Delta z) $	157.27	32.32	3.95	2.33	2.60	1.87	2.03	7.08	11.05

Tabela 4: Coeficientes de Chebyshev da temperatura em Δz .

Da análise do gráfico anterior podemos concluir que existe um erro associado aos dois últimos valores dos coeficientes de Chebyshev, uma vez que estes deveriam ser praticamente nulos. Esse facto deve-se à substituição das duas últimas equações de Galerkin pelas condições fronteira. No caso de um problema de valores iniciais, o método de Galerkin já não sofre deste problema (ver, por exemplo, Gama *et al.*, 2001). Em consequência deste facto, na próxima secção iremos aplicar o método da colocação para efectuar a integração numérica do sistema das EDPs que modelam o filme de fundido.

3.3 Exploração numérica II

A segunda exploração numérica deste trabalho consiste na aplicação do método da colocação para determinar o perfil de temperatura do filme de fundido ao longo de todo o canal, considerando-se que os perfis de velocidades são iguais em todos os instantes de *tempo* z . Nesta secção aplicaremos a técnica do método da colocação (Peyret, 2002), que considera os pontos da grelha como incógnitas, à equação (22) para obtermos o perfil de temperatura do filme de fundido ao longo do canal.

3.3.1 Aplicação do método da colocação

Consideremos o problema constituído pela equação diferencial (22), pelas condições fronteira (17) e condições iniciais (18)–(20). Consideremos ainda os pontos de colocação $\xi_i = \cos(\pi i/N)$, $i = 0, \dots, N$. Nestes pontos obtemos:

$$T_N(\xi_i, \Delta z) = T_N(\xi_i, 0) + \Delta z \left(\frac{4k_m}{\delta_C^2} \frac{\partial^2 T_N(\xi_i, 0)}{\partial \xi^2} + \eta(\xi_i, 0) \dot{\gamma}^2(\xi_i, 0) \right) / (\rho_m c_p V_z(\xi_i, 0)), \quad (24)$$

com $i = 1, \dots, N - 1$. As condições fronteira são

$$\begin{cases} T_N(\xi_N, \Delta z) = T_m, \\ T_N(\xi_0, \Delta z) = T_b. \end{cases}$$

Ou equivalentemente, a equação (24) escreve-se

$$T_N(\xi_i, \Delta z) = T_N(\xi_i, 0) + \Delta z \left(\frac{4k_m}{\delta_C^2} \sum_{j=0}^N d_{i,j}^{(2)} T_N(\xi_j, 0) + \eta(\xi_i, 0) \dot{\gamma}^2(\xi_i, 0) \right) / (\rho_m c_p V_z(\xi_i, 0)),$$

$$i = 1, \dots, N - 1,$$

onde os coeficientes $d_{i,j}^{(2)}$ são definidos (Peyret, 2002) pela segunda derivada $\partial^2 T_N(\xi_i, 0)/\partial \xi^2$, isto é,

$$\frac{\partial^2 T_N(\xi_i, 0)}{\partial \xi^2} = \sum_{l=0}^N d_{k,l}^{(2)} u_N(x_l), \quad k = 0, \dots, N.$$

Os resultados numéricos para os perfis de temperatura ao longo do canal são apresentados na secção seguinte.

3.3.2 Resultados numéricos II

Os resultados numéricos obtidos permitiram construir os seguintes gráficos que caracterizam a evolução da temperatura.

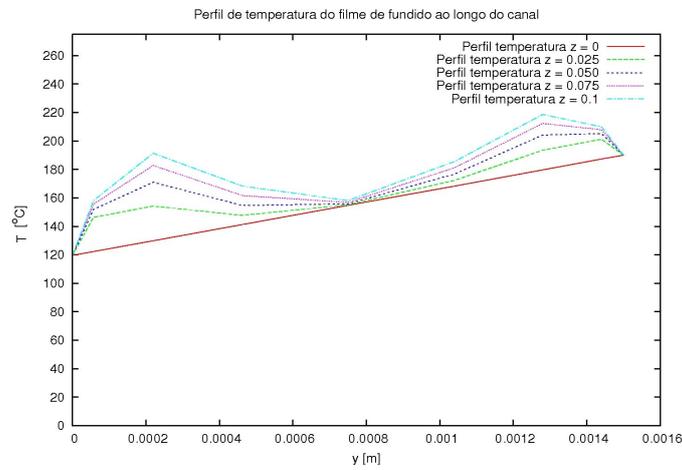


Figura 5: Evolução da temperatura em cotas distintas do canal com o método de Euler.

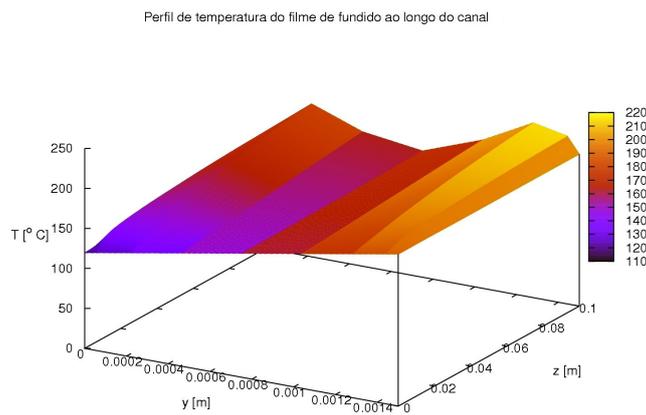


Figura 6: Evolução da temperatura numa perspectiva tridimensional com o método de Euler.

Os resultados representados graficamente nas Figuras 5 e 6 foram obtidos utilizando o esquema explícito do método de Euler. Implementamos também o método de Runge Kutta de 4ª ordem (RK4), obtendo-se os gráficos apresentados nas Figuras 7 e 8.

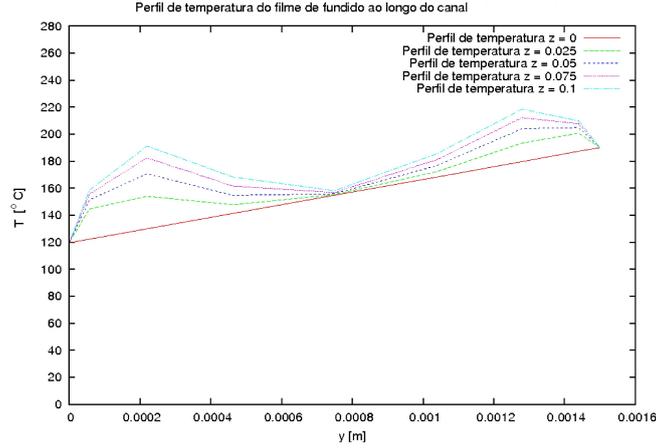


Figura 7: Evolução da temperatura em cotas distintas do canal pelo método de RK4.

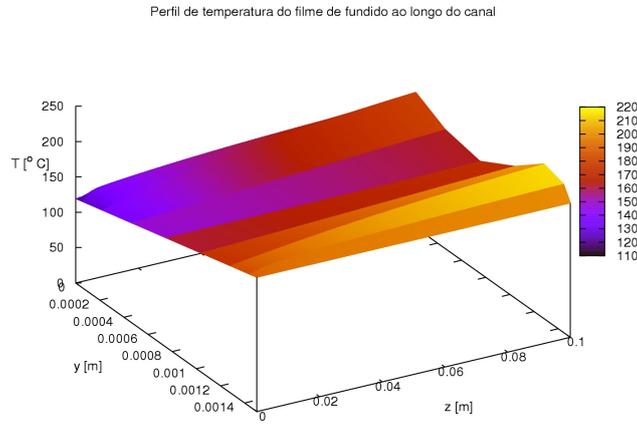


Figura 8: Evolução da temperatura numa perspectiva tridimensional pelo método de RK4.

3.4 Exploração numérica III

A última exploração numérica deste trabalho consiste na aplicação do método da colocação para determinar os perfis de temperatura e de velocidades do filme de fundido ao longo de todo o canal.

3.4.1 Aplicação do método de colocação

No que diz respeito ao cálculo da temperatura em cada passo de *tempo* Δz este é efectuado da mesma forma que o descrito na Secção 3.3.1. Por outro lado, o cálculo dos perfis de velocidades em cada Δz são efectuados considerando conjuntamente as equações de momentum e de incompressibilidade. Por exemplo, o cálculo do perfil de velocidade V_x é efectuado utilizando as equações $\int_{-1}^1 V_x(\xi, z) d\xi = 0$, e

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \left(\frac{2}{\delta_C} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\eta(\xi, z) \frac{\partial V_x(\xi, z)}{\partial \xi} \right).$$

Aplicando o método da colocação a estas duas equações é possível formar um sistema de equações que nos permite determinar o valor de $\partial P/\partial x$ e os valores de V_x nos pontos de colocação $\xi_i = \cos(\pi i/N)$, $i = 0, \dots, N$. De facto, a aplicação do método da colocação à equação de momentum para cada passo de *tempo* Δz , resulta em:

$$\left(\frac{\delta_C}{2}\right)^2 \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial \eta(\xi_i, \Delta z)}{\partial \xi} \sum_{j=0}^N d_{i,j}^{(1)} V_x(\xi_j, \Delta z) + \eta(\xi_i, \Delta z) \sum_{j=0}^N d_{i,j}^{(2)} V_x(\xi_j, \Delta z), \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (25)$$

Por outro lado, fazendo a aproximação da regra dos trapézios para o integral presente na equação de incompressibilidade obtemos:

$$\sum_{i=0}^{N-1} V_x(\xi_i, \Delta z) (\xi_i - \xi_{i+1}) = 0. \quad (26)$$

Combinando (25) e (26) obtemos um sistema de N equações para determinar N incógnitas, a saber $V_x(\xi_i, \Delta z)$, $i = 1, \dots, N-1$ e $\partial P/\partial x$.

De forma análoga, utilizando as segundas equações de (12) e (16) obtém-se outro sistema que permite determinar o perfil de velocidades V_z e $\partial P/\partial z$.

3.4.2 Resultados numéricos III

Os resultados numéricos obtidos permitiram construir os gráficos que caracterizam a evolução da temperatura e dos perfis de velocidades V_x e V_z (ver Figuras 9, 10 e 11, respectivamente).

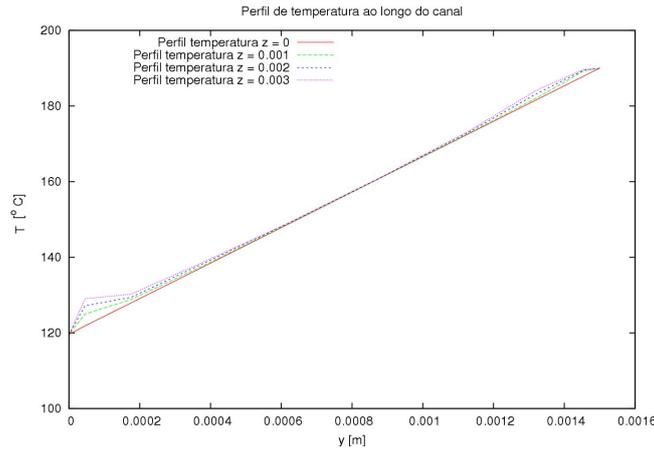


Figura 9: Evolução da temperatura em cotas distintas do canal com o método de Euler.

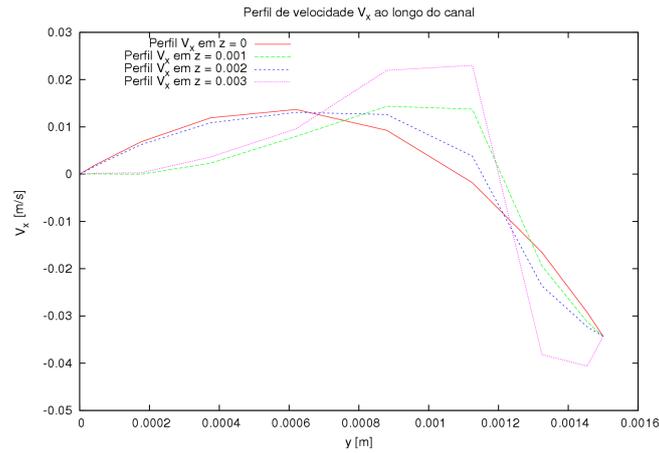


Figura 10: Evolução da componente V_x da velocidade em cotas distintas do canal com o método de Euler.

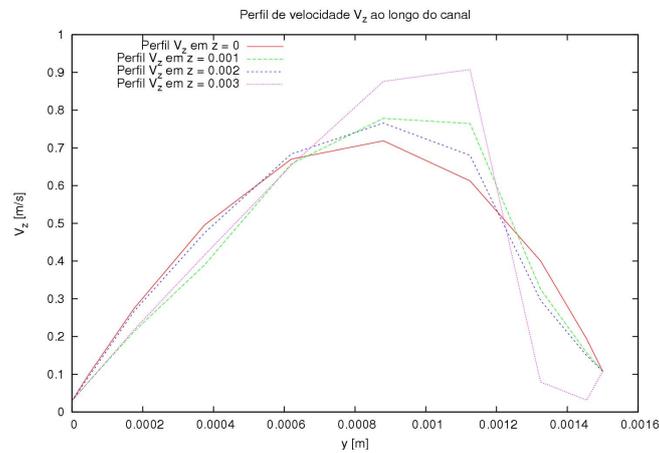


Figura 11: Evolução da componente V_z da velocidade em cotas distintas do canal com o método de Euler.

Implementou-se também para este caso o método de Runge Kutta de 4ª ordem (RK4), obtendo-se os gráficos das Figuras 12, 13 e 14, respectivamente.

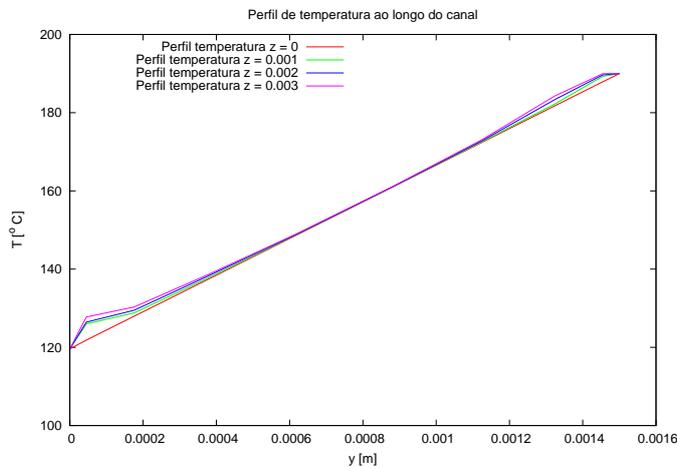


Figura 12: Evolução da temperatura em cotas distintas do canal com o método de RK4.

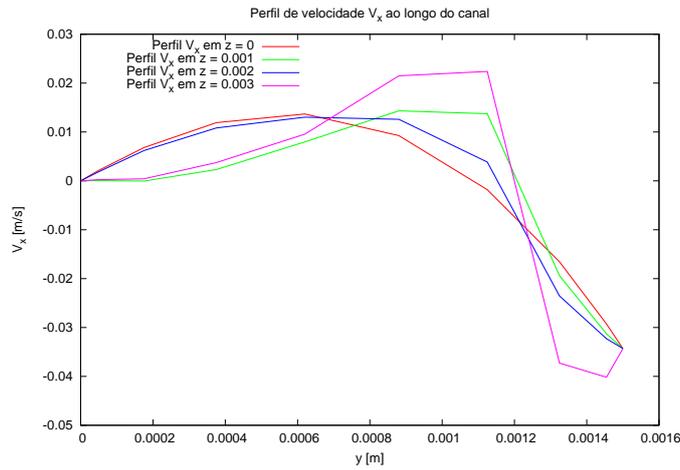


Figura 13: Evolução da componente V_x da velocidade em cotas distintas do canal com o método de RK4.

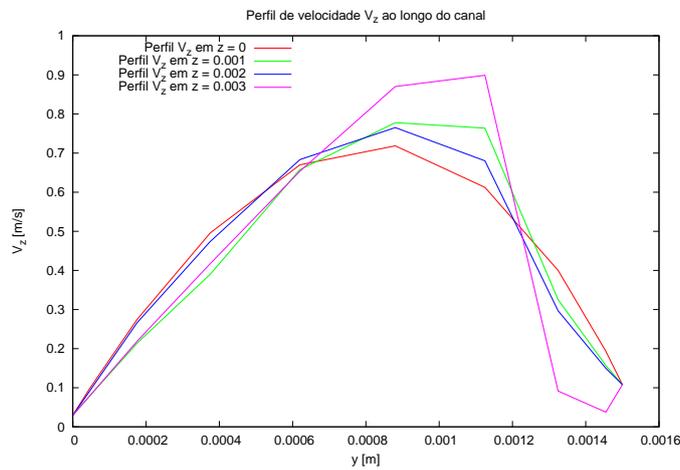


Figura 14: Evolução da componente V_z da velocidade em cotas distintas do canal com o método de RK4.

Em todos estes gráficos apenas estão representados três passos de *tempo*, uma vez que a partir desse instante os resultados obtidos começam a ter diferenças significativas em relação aos resultados obtidos nos primeiros instantes. Este facto parece estar de acordo com o caso em que as equações são resolvidas pelo método das diferenças finitas (Gaspar-Cunha, 2000), já que os resultados obtidos por este método para o filme de fundido da zona de atraso apenas contemplam uma iteração devido à rapidez da passagem da zona de atraso para a zona de fusão. Esta passagem implica uma mudança nas equações de continuidade que modelam o filme de fundido devido aos fluxos de massa, e consequentemente, seria necessário implementar esse novo modelo para obtermos os resultados que caracterizam os perfis de temperatura e velocidades do filme de fundido na zona de fusão.

4 Conclusão

Neste trabalho implementamos as técnicas de tau e de colocação baseadas em polinómios de Chebyshev para integrar numericamente o sistema de EDPs que modelam o filme de fundido associado à zona de atraso de um processo de plasticização por extrusão.

A aplicação da técnica de tau revelou insuficiências na propagação do perfil de temperatura inicial do filme de fundido para o *instante* seguinte, uma vez que a imposição das condições fronteira afectaram os valores dos dois últimos coeficientes de Chebyshev da expansão em série truncada para aproximar a temperatura. Desta forma, implementou-se a técnica de colocação considerando como incógnitas os valores da solução nos pontos de colocação. Neste caso, conseguiu-se obter resultados para os perfis de temperatura e de velocidades, utilizando os métodos de Euler (esquema explícito) e de Runge-Kutta de 4^a ordem para efectuar o passo de *tempo*.

REFERÊNCIAS

- [1] Broyer, E. & Tadmor, Z. 1972 Solids conveying in screw extruders - Part I: a modified isothermal model. *Polym. Eng. Sci.* **12**, pp. 12–24.
- [2] Elbirli, B., Lindt, J.T., Gottgetreu, S.R. & Baba, S.M. 1984 Mathematical modelling of melting of polymers in a single-screw extruder. *Polym. Eng. Sci.* **24**, pp. 988–999.
- [3] Fernandes, C. 2007 Exploração numérica de métodos espectrais aplicados ao filme de fundido de um processo de extrusão de polímeros. Tese de Mestrado. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.
- [4] Gama, S.M., Kraenkel, R.A. & Manna, M.A. 2001 Short-waves instabilities in the Benjamin-Bona-Mahoney-Perigrine equation: theory and numerics. *Inverse Problems* **17(4)**, pp. 864–870.
- [5] Gaspar-Cunha, A. 2000 *Modelling and Optimisation of Single Screw Extrusion*, Ph. D. Thesis, University of Minho, Braga, Portugal.
- [6] Han, C.D., Lee, K.Y. & Wheeler, N.C. 1996 Plasticating single-screw extrusion of amorphous polymers: development of a mathematical model and comparison with experiment. *Polym. Eng. Sci.* **36**, pp. 1360–1376.
- [7] Peyret, R. 2002 *Spectral Methods for Incompressible Viscous Flow*. Applied Mathematical Sciences, Volume 148. Springer-Verlag, New York.
- [8] Tadmor, Z. & Broyer, E. 1972 Solids conveying in screw extruders - Part II: non isothermal model. *Polym. Eng. Sci.* **12**, pp. 378–386.
- [9] Tadmor, Z. & Klein, I. 1970 *Engineering Principles of Plasticating Extrusion*. Van Nostrand Reinhold, New York.