ANÁLISE NUMÉRICA DA TROCA DE CALOR CONJUGADA EM PROBLEMAS DE INJEÇÃO DE POLÍMEROS

P. S. B. Zdanski

Departamento de Engenharia Mecânica Universidade do Estado de Santa Catarina 89223-100 - Joinville-SC – Brasil zdanski@Joinville.udesc.br

M. Vaz Jr.

Departamento de Engenharia Mecânica Universidade do Estado de Santa Catarina 89223-100 - Joinville-SC – Brasil M.Vaz@Joinville.udesc.br

G. R. Inácio*

Departamento de Engenharia Mecânica Universidade do Estado de Santa Catarina 89223-100 - Joinville-SC – Brasil g.renan@pop.com.br *Bolsista do programa PROBIC UDESC/CCT

Resumo. A crescente exigência na redução dos custos de produção, otimização de processos, desenvolvimento de tecnologias e melhoria contínua na qualidade dos produtos têm colaborado para incorporar a atividade de simulação numérica no cotidiano de grande parte das indústrias. No caso do processamento de polímeros pode-se citar CMOLD, MOLDFLOW e POLYFLOW como exemplos de simuladores comerciais de grande aceitação industrial. Por outro lado, sabe-se que grande parte dos 'pacotes' comerciais utiliza formulações simplificadas que nem sempre são capazes de capturar a física completa do escoamento. Dentro deste contexto, o presente trabalho analisa numericamente um problema de escoamento de polímero utilizando um programa de simulação desenvolvido pelos próprios autores onde uma formulação mais elaborada é adotada. A situação física estudada corresponde a um canal de injeção plano onde as paredes são resfriadas pelo sistema de refrigeração do molde. O modelo matemático para solução do problema do escoamento é composto pelas equações de quantidade de movimento, energia e continuidade. Para analisar a condução de calor nas paredes sólidas do canal/cavidade, a equação da difusão de calor para meios isotrópicos é adotada. A relação constitutiva conhecida como lei de Cross é utilizada para modelar o comportamento não-Newtoniano do polímero. Os resultados são apresentados para o polímero comercial Poliacetal POM-M90-44 e demonstram que o resfriamento das paredes do canal de injeção afeta diretamente o desenvolvimento das camadas limite hidrodinâmica e térmica no interior do duto.

Palavras-Chave: troca de calor conjugada, injeção de polímeros, simulação numérica

1. INTRODUÇÃO

A análise de problemas envolvendo o escoamento de polímeros tem aplicação imediata em processos industriais de fabricação por injeção. A previsão do comportamento do escoamento determinando grandezas como campo de pressão, taxa cisalhante, temperatura e velocidade são de fundamental importância para um melhor controle do processo. Neste contexto, a simulação numérica se tornou uma atividade importante e tem sido muito utilizada nas indústrias, especialmente através de simuladores comerciais $^{(1,2)}$.

No caso de injeção de polímeros, um marco no desenvolvimento de modelos computacionais foi o trabalho Hieber e Shen⁽³⁾, que propuseram a utilização da aproximação de Hele-Shaw. Este

modelo obteve grande aceitação, sendo traduzido pelo seu uso em programas comerciais de grande penetração como o MOLDFLOW⁽¹⁾ e C-MOLD⁽²⁾. Do ponto de vista acadêmico, desenvolvimentos a partir da aproximação de Hele-Shaw continuam a serem propostos, destacando as análises sobre aspectos reológicos⁽⁴⁾ e acoplamento termomecânico⁽⁵⁾. Além da aproximação de Hele-Shaw, outras formulações mais elaboradas têm sido utilizadas, destacando-se a abordagem de fluido Newtoniano generalizado e a viscoelástica. Como exemplos de metodologias numéricas utilizando o modelo Newtoniano generalizado citam-se os trabalhos de Bao⁽⁶⁾ e Vaz Jr. e Zdanski⁽⁷⁾, enquanto a abordagem viscoelástica é empregada nos esquemas propostos em Missirlis et al.⁽⁸⁾ e Tomé et al.⁽⁹⁾

No que se refere ao estudo físico do problema conjugado (convectivo/difusivo), Luna et al. ⁽¹⁰⁾ apresentam solução analítica/numérica para a variação transiente da temperatura em um duto circular. Estes autores utilizam a solução analítica para o escoamento plenamente desenvolvido e descrito pela lei potencial, obtendo uma solução acoplada somente para o campo de temperaturas. Barletta e Zanchini ⁽¹¹⁾ também apresentam um trabalho nessa linha, onde é utilizada uma função matemática para descrever um fluxo de calor variável nas paredes do duto. Aspectos sobre o desenvolvimento da camada limite térmica são abordados como parte da análise física realizada por esses autores.

O presente trabalho visa contribuir nas discussões sobre o comportamento do escoamento de polímeros em processos de injeção considerando a condução de calor que ocorre nas paredes do canal/cavidade (problema conjugado). Os referidos autores estudaram o problema do escoamento no interior de canais planos em Zdanski e Vaz Jr. ^(12, 13), onde uma análise detalhada do problema convectivo é apresentada. Caracterizando uma seqüência, no presente trabalho, o efeito da refrigeração do molde foi incorporado, onde uma equação para difusão de calor nas paredes do canal é resolvida. A metodologia numérica para o problema convectivo foi originalmente proposta em Vaz Jr. e Zdanki ⁽⁷⁾, sendo que a adequação para o problema conjugado é apresentada neste trabalho. São discutidos resultados que mostram os perfis de temperatura em seções transversais, a distribuição de temperatura e o fluxo de calor ao longo das paredes do canal. As simulações são apresentadas para o polímero comercial Poliacetal POM-M90-44.

2. FORMULAÇÃO TEÓRICA

O escoamento em problemas de injeção de polímeros é dominado pela viscosidade cisalhante, sendo descrito através do modelo Newtoniano generalizado, onde se determina uma viscosidade aparente como função da temperatura e taxa de cisalhamento. O presente modelo numérico é baseado na solução acoplada das equações de Navier-Stokes para as velocidades, da equação da energia para a temperatura e de uma equação de Poisson para a pressão. Deste modo, para o problema convectivo, as equações para as velocidades e temperatura são

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta \left(T, \dot{\overline{\gamma}}\right) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right], \tag{1}$$

e

$$\frac{\partial \left(\rho c_{p}T\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho c_{p}u_{i}T\right)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(k_{f}\frac{\partial T}{\partial x_{i}}\right) + \eta \dot{\gamma}^{2}, \qquad (2)$$

onde ρ é a massa específica, k_f é a condutividade térmica do polímero, c_p é o calor específico. A equação para a pressão é obtida através da combinação da equação da conservação da massa, $\partial u_i / \partial x_i = 0$, e da equação para as velocidades (1), sendo descrita em Zdanski et al. ⁽¹⁴⁾.

As simulações apresentadas neste trabalho correspondem ao polímero comercial Poliacetal POM-M90-44, cuja viscosidade aparente é determinada pela relação constitutiva conhecida como lei de *Cross*,

$$\eta(\dot{\bar{\gamma}},T) = \frac{\eta_0(T)}{1 + \left[\lambda(T)\dot{\bar{\gamma}}\right]^{1-n(T)}},\tag{3}$$

onde η_0 é a viscosidade Newtoniana, *n* é o índice de comportamento e λ é um parâmetro material, cuja dependência da temperatura é aproximada através da lei de *Arrhenius*,

$$\eta_0(T) = a_1 \exp\left(\frac{a_2}{T}\right) \quad , \quad \lambda(T) = b_1 \exp\left(\frac{b_2}{T}\right) \quad e \quad n(T) = c_1 \exp\left(-\frac{c_2}{T}\right), \tag{4}$$

onde a_1 , a_2 , b_1 , b_2 , c_1 e c_2 são constantes materiais, conforme definidas na Tabela 1. Os valores das propriedades termofísicas para o Poliacetal são $\rho = 1143 kg/m^3$, $c_p = 2061 J/kgK$ e k = 0.31 W/mK.

$\eta(T)$	$\lambda(T)$	n(T)
$a_1 = 0.022603$	$b_1 = 1.6425E-6$	$c_1 = 1.3574$
$a_2 = 5003.01$	$b_2 = 3901.0$	$c_2 = 653.73$

Tabela 1. Constantes materiais para o POM-M90-44⁽¹⁵⁾

Para a solução do problema de condução de calor nas paredes sólidas do canal/cavidade é adotada uma formulação unidimensional,

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(k_s \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 , \qquad (5)$$

onde k_s é a condutividade térmica do sólido, sendo que os gradientes de temperatura (na parede) na direção do escoamento são desprezados. Esta hipótese de análise é razoável visto que existe uma grande diferença de temperatura entre o polímero que está sendo injetado e o fluido utilizado para refrigerar o molde.

3. METODOLOGIA NUMÉRICA

O esquema numérico adotado para solução do problema de convecção foi recentemente proposto por Vaz Jr. e Zdanski ⁽⁷⁾. No referido método, as equações de governo, que compõe o modelo matemático do problema físico a ser analisado, são discretizadas utilizando a técnica de diferenças finitas em uma malha co-localizada. Os termos convectivos e difusivos (nas equações físicas) são discretizados por fórmulas centradas com segunda ordem de precisão espacial. O avanço no tempo é realizado pelo esquema de Euler implícito, onde é percorrido um falso transiente com o objetivo de uma solução final em regime estacionário. Para maiores detalhes sobre esta metodologia, a referência (7) deve ser consultada.

Em relação ao problema de condução de calor nas paredes do canal/cavidade, a metodologia empregada neste trabalho consiste em obter uma equação para a determinação da temperatura na interface parede/polímero garantindo a continuidade do fluxo de calor,

$$q_{f} = -k_{f} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = \frac{T_{\infty} - T_{y=0}}{\left(\frac{I \cdot 0}{h_{\infty}} + \frac{e}{k_{s}} \right)} = q_{s}$$

$$\tag{6}$$

onde *e* é a espessura da parede, h_{∞} e T_{∞} são o coeficiente de convecção e a temperatura associados ao fluido que refrigera o molde (ver Fig. (1)). O fluxo de calor na parede sólida q_s (lado direito da Eq. (6)) foi obtido pela solução analítica do problema de condução de calor unidimensional no sólido considerando condutividade térmica constante. Discretizando a Eq. (6), o resultado final é dado por

$$T_{y=0} = \frac{a_p T_{\infty} + a_n T_n}{a_p + a_n}$$
(7)

onde

$$a_{p} = \frac{1.0}{\left(\frac{e}{k_{s}} + 1.0/h_{\infty}\right)}, \ a_{n} = \frac{1.0}{\left(\frac{\Delta y}{k_{f}}\right)}.$$
(8)

Nas expressões anteriores, T_n é a temperatura do fluido no ponto adjacente à parede e Δy é o espaçamento entre dois pontos consecutivos na malha computacional.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos obtidos na simulação do escoamento do Poliacetal POM-M90-44 em canais planos bidimensionais, conforme ilustrado na Figura 1. As condições de contorno utilizadas nas simulações foram as seguintes: não-escorregamento (velocidade nula) nas paredes sólidas; perfis uniformes de velocidade (vazão prescrita) e temperatura na seção de entrada; derivada normal à parede nula para a pressão; variação linear para a pressão nas seções de entrada e saída do domínio; derivadas nulas (fluxo zero por difusão) para a velocidade e temperatura na seção de saída; na interface sólido/fluido a condição de fluxo de calor contínuo é aplicada, resultando em uma expressão para a determinação da temperatura (Eq. (7)). A malha computacional utilizada é uniforme com 41 pontos na seção transversal e 1501 pontos ao longo do comprimento do duto. As simulações foram realizadas para dois coeficientes distintos de troca de calor por convecção, i.e, $h_{\infty} = 500 W/m^2 K$ e $800 W/m^2 K$ (estes valores são típicos para um sistema de refrigeração utilizando água). Para a temperatura do fluido refrigerante foi assumido um valor médio, T_{∞} =363K. A temperatura de entrada do polímero foi fixada em 423K para todos os casos analisados. As paredes do molde são de aço carbono (condutividade térmica $k_s = 44W/mK$) com espessura e=40mm. A espessura do canal de escoamento foi considerada h=4mm. O número de Reynolds das simulações é da ordem de 10⁻⁴, caracterizando velocidades baixas típicas de processos de injeção de polímeros.



Figura 1. Ilustração da geometria de análise.

Nas Figuras 2 e 3 são apresentados os perfis de temperatura (em função de x/h), na região de entrada térmica, para as duas situações de resfriamento analisadas. A velocidade especificada como condição de contorno na entrada vale $u_e=3cm/s$. Percebe-se, claramente, que até em torno de x/h=300 a temperatura no centro do canal se mantém praticamente no mesmo valor da entrada para os dois casos simulados. A transferência de calor do polímero para as paredes do canal ocorre de forma lenta devido à baixa condutividade térmica do fluido. Desta forma, a grande diferença entre a temperatura do polímero na entrada do canal e a temperatura do fluido refrigerante (60K) impõem a necessidade de um canal extremamente longo para que a condição de equilíbrio seja atingida. Neste ponto convém salientar que o regime de equilíbrio (perfil plenamente desenvolvido) é atingido quando toda energia térmica gerada devido ao atrito viscoso for transferida para o sistema de refrigeração do molde. Em função dos resultados anteriores e considerando que o comprimento do canal simulado neste trabalho foi L=300h, pode-se concluir que num problema prático de injeção o regime de equilíbrio dificilmente será atingido. Por outro lado, para o trecho de canal analisado e durante a fase de injeção, o efeito do resfriamento é sentido somente na região próxima às paredes (ver Figs. 2 e 3), onde para o caso do maior coeficiente de troca ($h_{\infty} = 800Wm^2 K$) a temperatura do polímero é menor.



Figura 2. Perfis de temperatura para posições x/h ($u_e=3cm/s$, $h_{\infty}=500W/m^2K$).



Figura 3. Perfis de temperatura para posições x/h ($u_e=3cm/s$, $h_{\infty}=800W/m^2K$).

Na figura 4 é apresentada a distribuição de temperatura ao longo das paredes do canal (interface sólido/fluido) para duas velocidades analisadas. O primeiro aspecto a ser observado é o aumento da temperatura na parede ao longo do canal. Este comportamento está relacionado ao efeito da dissipação viscosa (geração de calor no escoamento), visto que, na ausência de geração de energia térmica no interior do escoamento, a temperatura da parede diminui ao longo do duto até atingir a temperatura do fluido arrefecedor, (T_{∞}) . Porém, para o comprimento de duto simulado, o calor gerado devido ao atrito viscoso é maior do que aquele removido pelo sistema de refrigeração, tendo como efeito líquido o aquecimento das paredes. Observa-se, também, que para a velocidade $u_e=3cm/s$ a temperatura nas paredes é maior, conseqüência direta do maior atrito viscoso.



Figura 4. Temperatura na interface parede/fluido para duas velocidades ($h_{\infty}=500W/m^2K$).



Figura 5. Fluxo de calor na interface parede/fluido para duas velocidades ($h_{\infty}=500W/m^2K$).

Resultados para o fluxo de calor através das paredes do canal são apresentados na Figura 5. Observa-se que o fluxo de calor apresenta a mesma tendência crescente da curva de distribuição de temperatura ao longo da parede (resultado óbvio). Neste ponto convém salientar que esta tendência não é infinita, visto que o fluxo de calor está intimamente relacionado à temperatura da interface sólido/fluido. Uma vez que esta temperatura comece a reduzir, o fluxo de calor irá decrescer até atingir um valor constante correspondente ao regime de equilíbrio. Sumarizando as discussões sobre os resultados das Figuras 4 e 5 têm-se: (i) a temperatura na parede do canal apresenta valores crescentes (no trecho de duto simulado) em virtude da taxa de geração de energia térmica no escoamento ser maior do que o calor removido pelo sistema de refrigeração; entretanto a tendência crescente não é infinita visto que para um duto muito longo o regime de equilíbrio seria atingido; (ii) o fluxo de calor ao longo das paredes segue a mesma tendência observada para a distribuição de temperaturas. Convém salientar que a solução correspondente ao regime de equilíbrio (plenamente desenvolvido), para os casos simulados, foi obtida com uma formulação unidimensional utilizando um código distinto ⁽¹⁶⁾.



Figura 6. Temperatura na interface parede/fluido para $u_e=3cm/s$.

Na figura 6 é apresentada a distribuição de temperaturas nas paredes para as duas situações de resfriamento analisadas. Percebe-se que a temperatura na parede do duto (interface sólido/fluido) é maior para o caso de menor coeficiente de troca de calor. Por outro lado, a diferença entre as duas temperaturas se mantém praticamente constante no trecho analisado, i.e., $\Delta T \cong 5.0K$. Neste ponto, um aspecto interessante pode ser observado ao comparar-se os resultados da Figura 6 com os perfis de temperatura das Figuras 2 e 3. A seguinte conclusão pode ser extraída: para o trecho de duto analisado (L=300h), os efeitos da variação do coeficiente de convecção do sistema de refrigeração se restringiram as imediações das paredes dos dutos (ver Figura 6), uma vez que a temperatura na região central do canal se mantém praticamente inalterada (ver Figuras 2 e 3). O principal fator que contribui para este comportamento é a baixa condutividade térmica do polímero, ou seja, possui uma ordem de grandeza de um isolante térmico.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho é apresentada uma análise numérica do problema de transferência de calor conjugada convecção/condução no escoamento de polímeros em canais. O código computacional utilizado nas simulações se mostrou robusto para o tratamento das não-linearidades inerentes ao problema. A análise física efetuada permitiu as seguintes conclusões: (i) em função da baixa condutividade térmica do polímero e nas condições simuladas, o regime de equilíbrio dificilmente seria atingido em um problema pratico de injeção; esta conclusão pode ser sustentada através da análise dos perfís de temperatura (Figuras 2 e 3), onde em um trecho longo de duto (L=300h) o valor da temperatura no centro do canal se mantém inalterado em relação à entrada. Em uma situação prática, um canal de injeção dificilmente teria um comprimento maior do que L=300h; (ii) o efeito do sistema de refrigeração do molde durante a fase de injeção está restrito a região próxima às paredes do canal; a análise das Figuras 2, 3 e 6 permite claramente esta constatação de grande interesse prático.

6. AGRADECIMENTOS

O acadêmico Gleison Renan Inácio agradece à UDESC/CCT pela bolsa concedida através do programa PROBIC.

7. REFERÊNCIAS

[1] MOLDFLOW. Material Testing Overview. Moldflow Corporation, Wayland, 1995.

[2] C-MOLD. **Design Guide. A Resource for Plastic Engineers**. Advanced CAE Technology Inc., Ithaca, 1998.

[3] HIEBER, C.A.; SHEN, S.F. A finite-element / finite-difference simulation of the injectionmoulding filling process. Journal of Non-newtonian Fluid Mechanics, v.7, p.1-32, 1980.

[4] BIKAS, A.; PANTELELIS, N.; KANARACHOS, A. Computational tools for the optimal design of the injection moulding process, **Journal of Materials Processing Technology**, v. 122, p. 112–126, 2002.

[5] VERHOYEN, O.; DUPRET, F. A simplified method for introducing the Cross viscosity law in the numerical simulation of Hele Shaw flow. **Journal of Non-newtonian Fluid**, v.74, p.25-46, 1998.

[6] BAO, W. An economical finite element approximation of generalized Newtonian flows, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.191, p.3637-3648, 2003.

[7] VAZ Jr., M.; ZDANSKI, P.S.B. A fully implicit finite difference scheme for velocity and temperature coupled solutions of polymer melt flow, **Communications in Numerical Methods in Engineering**, (in press), DOI: 10.1002/cnm.902, 2006.

[8] MISSIRLIS, K.A.; ASSIMACOPOULOS, D.; MITSOULIS, E. A finite volume approach in the simulation of viscoelatic expansion flows, **Journal of non-Newtonian Fluid Mechanics**, v.78, p.91-118, 1998.

[9] TOMÉ, M.F.; MANGIAVACCHI, N.; CUMINATO, J.A.; CASTELO, A.; McKEE, S. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows. Journal of non-Newtonian Fluid Mechanics, v.106, p.61-106, 2002.

[10] LUNA, N.; MENDEZ, F.; MAR, E. Transient analysis of the conjugated heat transfer in circular ducts with a power-law fluid. **Journal of non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 111, p. 69-85, 2003.

[11] BARLETTA, A.; ZANCHINI, E. Thermal entrance region for laminar forced convection in a circular tube with a power-law wall heat flux. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 39, p. 1265-1272, 1996.

[12] ZDANSKI, P.S.B.; VAZ Jr., M. Polymer melt flow in plane channels: effects of viscous dissipation and axial heat conduction, **Numerical Heat Transfer Part a** – **Applications**, v.49, p.159-174, 2006.

[13] ZDANSKI, P.S.B.; VAZ Jr., M. Polymer melt flow in plane channels: hidrodynamic and thermal boundary layers, **Journal of Materials Processing Technology**, v.179, p.207-211, 2006.

[14] ZDANSKI, P.S.B.; ORTEGA, M.A.; FICO Jr., N.G.C. Numerical simulation of the incompressible Navier-Stokes equations, **Numerical Heat Transfer Part b – Fundamentals**, v.46, p.549-579, 2004.

[15] PEDRO BOM, R.; HERRMANN, M.H.; SOARES HOAYS, H. Análise reológica via simulador de fluxo. In: CONGRESSO EM CIÊNCIA DE MATERIAIS DA REGIÃO SUL, 1., 2000, Joinville. **Anais...** Joinville: PGCEM, 2000. pp. 948-957.

[16] VAZ Jr., M.; GAERTNER, E.L. Simulação Numérica do Escoamento de Polímeros em Canais. DAPE 114/2002, UDESC/CCT, Joinville, 2002.

NUMERICAL ANALYSIS OF THE CONJUGATED HEAT TRANSFER IN POLYMER MELT FLOW

P. S. B. Zdanski

Departamento de Engenharia Mecânica Universidade do Estado de Santa Catarina 89223-100 - Joinville-SC – Brasil dem2psbz@Joinville.udesc.br

M. Vaz Jr.

Departamento de Engenharia Mecânica Universidade do Estado de Santa Catarina 89223-100 - Joinville-SC – Brasil M.Vaz@Joinville.udesc.br

G. R. Inácio*

Departamento de Engenharia Mecânica Universidade do Estado de Santa Catarina 89223-100 - Joinville-SC – Brasil g.renan@pop.com.br *Bolsista do programa PROBIC UDESC/CCT

Abstract. The diligent efforts on reducing manufacturing costs of products, processes optimisation and devising new technologies are prompted the numerical simulation in industrial activities. In mould design problems, CMOLD, MOLDFLOW and POLYFLOW are examples of commercial packages widely employed. Otherwise, the commercial software's adopt simplified mathematical descriptions precluding a deeper physical understanding of the phenomenon. Therefore, aiming at better discuss physical aspects of an injection problem, this work adopts a more elaborate mathematical model comprising the full set of momentum, continuity and energy equations. The problem under discussion in this work corresponds to an injection plane channel subjected to a non-Newtonian flow described by the Cross constitutive relation. At the same time, the channel walls diffuse heat towards the cooling system. This coupled problem is known in literature as conjugated heat transfer. The results are presented for a commercial polymer POM-M90-44 and shows that temperature profiles and heat flux through the wall are very sensitive to cooling system parameters.

Keywords. Conjugated heat transfer, polymer injection, numerical analysis.