

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO DE POLÍMEROS NO INTERIOR DE CANAIS PLANOS BIDIMENSIONAIS: EFEITOS DA REGIÃO DE ENTRADA TÉRMICA E HIDRODINÂMICA

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

Resumo. *A indústria de transformação de plástico tem apresentado um crescimento considerável nos últimos anos. Essas indústrias utilizam polímeros como matéria prima, em processos de fabricação por injeção e extrusão dentre outros. Num processo de injeção o polímero é forçado a escoar no interior de canais com o objetivo de preenchimento de um molde. Desta forma, a previsão do comportamento do escoamento determinando grandezas como o campo de pressão, temperatura e velocidade são de fundamental importância para um melhor controle do processo. Dentro deste contexto, simuladores comerciais têm sido desenvolvidos, muitos dos quais combinando modelos matemáticos simplificados e propriedades reológicas de polímeros comerciais. Apesar do aparente sucesso, tais aproximações não são capazes de capturar certos aspectos importantes do escoamento de polímeros como, por exemplo, a distribuição da tensão de cisalhamento em uma seção transversal de um canal ou cavidade. Contrastando com a aproximação de Hele-Shaw largamente utilizada nos programas comerciais, no presente trabalho é utilizado um modelo matemático mais elaborado capaz de capturar os efeitos da região de entrada. O modelo matemático compreende as equações de quantidade de movimento, uma equação de Poisson para a pressão e a equação da energia. As equações físicas são discretizadas em uma malha co-localizada, utilizando fórmulas centradas com segunda ordem de precisão espacial, em diferenças finitas. Os resultados são apresentados para o polímero comercial Poliacetal POM-M90-44 e demonstram que a camada limite hidrodinâmica cresce mais rapidamente que a camada limite térmica de forma que a razão entre os comprimentos de entrada térmico e hidrodinâmico podem assumir valores da ordem de 140.*

Palavras-Chave: *injeção de polímeros, camada limite, diferenças finitas.*

1. INTRODUÇÃO

A crescente exigência de qualidade pelos consumidores e a intensa competição industrial têm incentivado uma busca diligente pela melhoria dos processos de fabricação em praticamente todas as áreas. Em especial na área de processamento de polímeros, empresas e centros de pesquisa têm se dedicado a um estudo detalhado dos fenômenos envolvidos, não somente através de experimentos com máquinas e moldes instrumentados, mas também com auxílio de programas de

computador capazes de simular diversos tipos processos, tais como injeção, extrusão e sopro dentre outros^(1, 2). O estudo teórico de processos, a definição da reologia de polímeros e o modelamento numérico deram os primeiros passos nas décadas 60 e 70, pavimentando o caminho para o desenvolvimento de modelos mais realistas. Apesar da grande atenção recebida, a complexidade do escoamento, caracterizada pela interação entre o comportamento reológico do polímero e o acoplamento entre as leis de conservação da quantidade de movimento e da conservação da energia, ainda têm dificultado o pleno entendimento da dinâmica do processo.

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 aproxima um escoamento tridimensional por um escoamento entre duas placas planas, assumindo que a distância entre elas é muito menor que o comprimento característico do canal ou cavidade. Esta abordagem permite obter uma equação baseada em um campo de pressões bidimensional na superfície média (a pressão é constante na seção transversal), cujas condições de fronteira consistem na imposição da pressão ou vazão no canal de ataque e pressão nula na frente de enchimento. 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⁾, acoplamento termomecânico⁽⁵⁾ e análise de sensibilidade e otimização⁽⁶⁾.

A desvantagem do modelo original de Hele-Shaw está na avaliação da chamada *fluidiez*, representando uma medida integral do inverso da viscosidade na seção transversal, a qual é determinada a partir de uma descrição da viscosidade pela *lei potencial* combinada com o cálculo de uma taxa de deformação cisalhante única para o plano. Deste modo, esta abordagem apresenta dificuldades de descrever a viscosidade aparente de modo mais realista, uma vez que isso requer o conhecimento da distribuição da taxa de cisalhamento ponto-a-ponto e a utilização de modelos reológicos consistentes com o comportamento do polímero. Além disso, o modelo de Hele-Shaw é válido apenas para canais e cavidades de pequena espessura, o que impõe restrições à simulação de diversos produtos e componentes.

Este trabalho visa contribuir nas discussões sobre o comportamento de polímeros em processos de injeção. Para tanto é discutida a simulação numérica do escoamento em canais e cavidades utilizando um modelo computacional baseado na solução acoplada das equações de Navier-Stokes para a velocidade e equação da energia para a temperatura. No estudo são analisados os resultados do escoamento entre duas placas planas, com ênfase no desenvolvimento das camadas limite hidrodinâmica e térmica. São apresentados resultados que mostram os perfis de temperatura e velocidade na seção transversal e ao longo do canal. As simulações são apresentadas para o polímero comercial Poliacetal POM-M90-44.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O escoamento em problemas de injeção de polímeros é dominado pela viscosidade cisalhante, sendo descrito através do modelo Newtoniano generalizado, $\tau_{ij} = \eta(I_2, T) 2d_{ij} = \eta(I_2, T) \dot{\gamma}_{ij}$, onde τ_{ij} é o tensor tensão cisalhante, η é a viscosidade aparente, d_{ij} é o tensor taxa de deformação cisalhante, T é a temperatura e $I_2 = \dot{\gamma}^2$ é o segundo invariante de d_{ij} e corresponde à taxa de deformação cisalhante equivalente. Contrastando com a aproximação clássica de Hele-Shaw, 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. É interessante ressaltar que a equação da energia considera a geração de calor devido à dissipação do atrito viscoso. Deste modo, as equações para as velocidades e temperatura são

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

e

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c_p u_i T)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \eta \dot{\gamma}^2, \quad (2)$$

onde ρ é a massa específica, k é a condutividade térmica, 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 na referência [7].

As equações (1) e (2) são complementadas através do modelo reológico definido através da viscosidade $\eta = \eta(\dot{\gamma}, T)$. O Poliacetal POM-M90-44, a exemplo de muitos tipos de polímeros, reflete o comportamento de um fluido Newtoniano para baixos valores de $\dot{\gamma}$ e da lei potencial para altos valores de $\dot{\gamma}$. Além disso, um aumento da temperatura causa a diminuição da viscosidade aparente. Neste trabalho, o Poliacetal POM-M90-44 é descrito pela lei de *Cross*⁽⁸⁾,

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

onde η_0 é a viscosidade Newtoniana ($\dot{\gamma} \rightarrow 0$), n é o índice de comportamento ($\dot{\gamma} \rightarrow \infty$) e λ é um parâmetro material, cuja dependência da temperatura é aproximada através da lei de *Arrhenius*,

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

onde a_1 , a_2 , b_1 , b_2 , c_1 e c_2 são constantes materiais, conforme definidas na Tabela 1.

Tabela 1. Constantes materiais para o POM-M90-44⁽⁹⁾

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

3. MODELO NUMÉRICO

O modelo numérico utilizado neste trabalho foi recentemente proposto por Zdanski⁽¹⁰⁾. 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. É de conhecimento que a utilização de uma discretização centrada para os termos de convecção, em conjunto com o uso da malha co-localizada, podem conduzir a uma solução com um campo de pressão oscilatório, conseqüência do problema conhecido como desacoplamento par-ímpar⁽¹¹⁾. Para o controle desse problema são adicionados termos de dissipação artificial^(10,12), os quais têm também o benefício extra de controlar eventuais instabilidades não-lineares. A ordem de grandeza desses termos pode ser monitorada externamente pelo usuário, de forma a se obter uma solução final convergida com níveis baixos de dissipação artificial. Para o avanço no tempo é utilizado o esquema de Euler explícito, onde é percorrido um “falso” transiente. Maiores detalhes sobre a metodologia numérica utilizada são apresentadas nas referências [7] e [10].

4. EXEMPLOS

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; temperatura prescrita nas paredes; 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. As soluções foram obtidas para uma malha cartesiana com 41 pontos na seção transversal e 1501 pontos ao longo do comprimento.

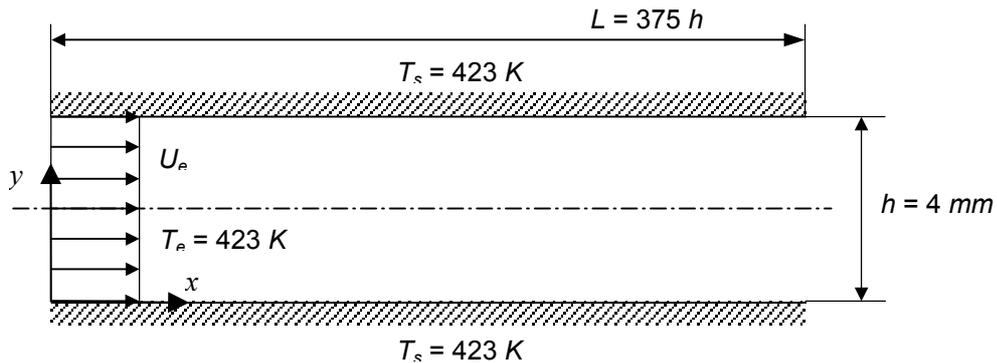


Figura 1. Geometria de análise.

4.1 Verificação do modelo

O primeiro caso estudado corresponde à verificação da metodologia numérica utilizada. A solução obtida para o escoamento plenamente desenvolvido entre duas placas planas (canal bidimensional) é comparada com os resultados de Vaz Jr e Gaertner⁽¹³⁾ (ver figura 2). A curva de verificação apresentada corresponde à vazão em função do número de Reynolds, sendo esse parâmetro definido em termos da viscosidade aparente média numa seção transversal onde o

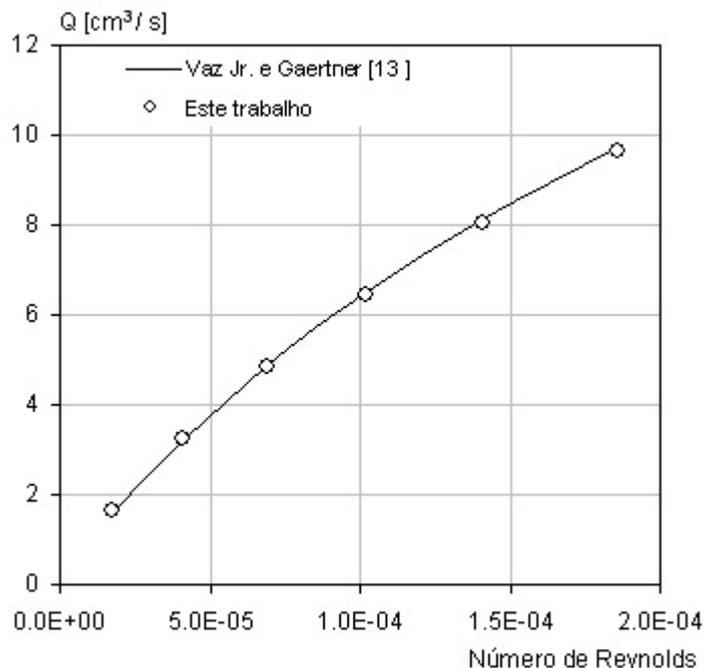


Figura 2. Verificação: vazão em volume vs. Número de Reynolds.

escoamento já está completamente desenvolvido, $Re = \rho U_e h / \bar{\eta}$. Dessa forma, foram simulados seis casos com vazões diferentes para um canal de altura $h = 4 \text{ mm}$ e largura $w = 40 \text{ mm}$, onde é especificada uma temperatura uniforme, $T_s = T_e = 423 \text{ K}$, como condição de contorno nas paredes e na seção de entrada. Observa-se uma boa concordância entre as duas soluções numéricas, sendo o erro máximo em torno de 1,8 %. É importante destacar que, no código numérico utilizado neste trabalho a vazão é especificada como condição de contorno, enquanto que na solução apresentada por Vaz Jr e Gaertner⁽¹³⁾ resolve-se apenas as equações para escoamento plenamente desenvolvido com gradiente de pressão conhecido.

4.1 Região de entrada

Nas figuras 3, 4 e 5 são apresentados os resultados numéricos relativos ao estudo das regiões de entrada térmica e hidrodinâmica. As simulações foram realizadas para o mesmo canal considerado no caso da verificação, sendo prescritas as mesmas condições de contorno para a temperatura. A análise foi focada no estudo do efeito da variação da velocidade (vazão) na entrada sobre o desenvolvimento das camadas limite. Foram analisados cinco casos com velocidades diferentes, a saber, $U_e = 1,0 \text{ cm/s}$; $2,0 \text{ cm/s}$; $2,5 \text{ cm/s}$; $3,0 \text{ cm/s}$ e $3,6 \text{ cm/s}$.

Na figura 3(a) são apresentadas as distribuições de velocidade e temperatura na linha de centro do canal para o caso onde $U_e = 3,6 \text{ cm/s}$. Um aspecto importante que pode ser observado no gráfico está relacionado com os comprimentos das regiões de entrada térmica e hidrodinâmica. Percebe-se, claramente, que a camada limite hidrodinâmica cresce rapidamente, de forma que para um comprimento em torno de $2,5 h$ a partir da seção de entrada, poder-se-ia admitir um perfil de velocidades completamente desenvolvido. Por outro lado, o crescimento da camada limite térmica ocorre lentamente sendo que, para o caso analisado, seria necessário um comprimento maior que $350 h$ para se admitir um perfil de temperaturas plenamente desenvolvido.

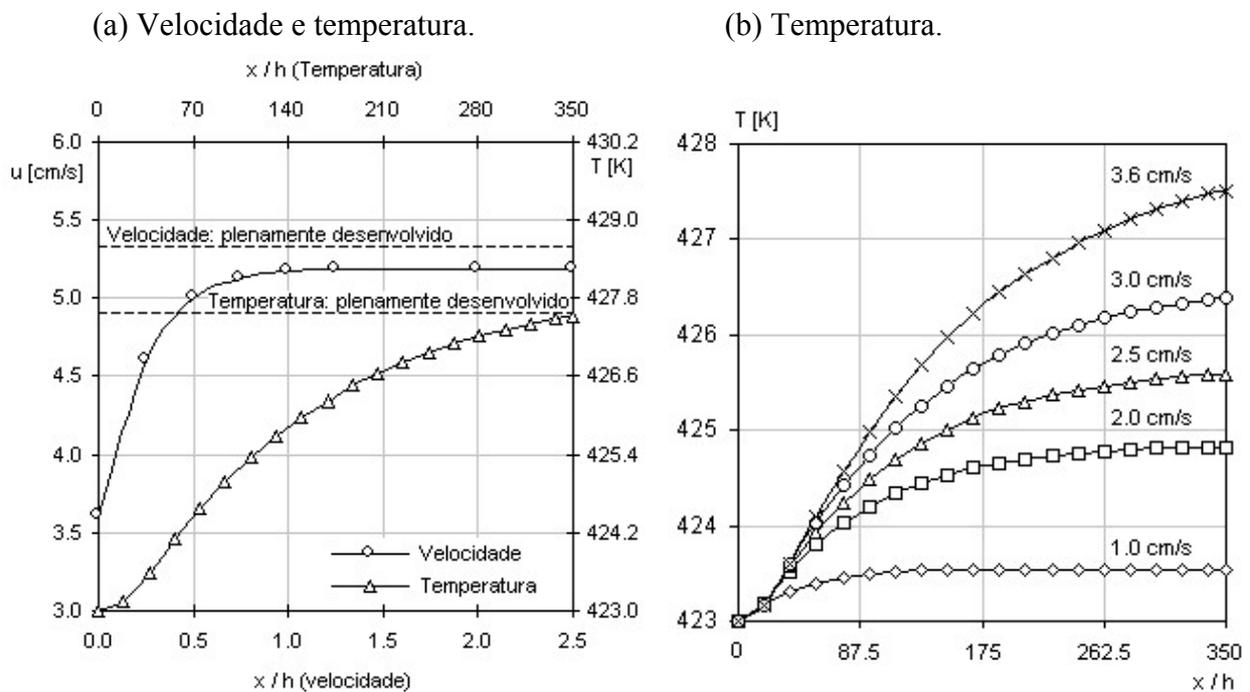


Figura 3. Desenvolvimento da camada limite: velocidade e temperatura no centro do canal.

As distribuições de temperatura na linha de centro do canal para todas as velocidades analisadas estão representadas na figura 3(b). O primeiro aspecto que pode ser observado é o maior aquecimento do polímero à medida que a velocidade aumenta. Esse resultado é consequência direta do aumento no atrito viscoso que ocorre quando se têm maiores vazões. Uma outra conclusão

importante está relacionada com o comprimento de entrada térmico, sendo que o mesmo aumenta com o acréscimo da vazão. Por outro lado, para todos os casos simulados, a velocidade na linha de centro do canal apresenta um comportamento similar ao descrito na figura 3(a).

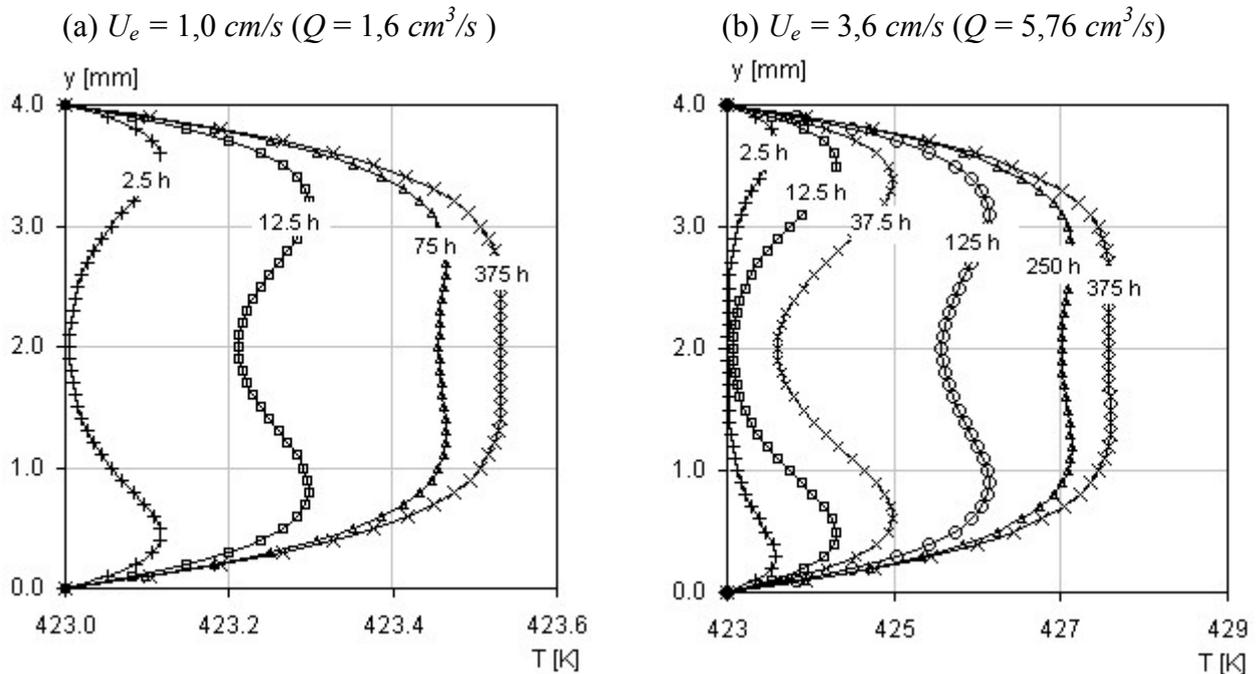


Figura 4. Distribuição de temperatura ao longo do canal.

Os perfis de temperatura na região de entrada térmica, para os casos onde $U_e = 1,0 \text{ cm/s}$ e $U_e = 3,6 \text{ cm/s}$, são apresentados na figura 4. Esses resultados demonstram alguns aspectos interessantes relacionados ao desenvolvimento da camada limite. Um detalhe importante que se observa na região próxima à entrada do canal, ilustrado pelas curvas para $x = 2,5 \text{ h}$ e $12,5 \text{ h}$, é que o aquecimento está concentrado nas proximidades da parede, onde a taxa de deformação, $\dot{\gamma}$, é elevada. Verifica-se também que, na maior parte da seção transversal do canal nessa região, o polímero se mantém praticamente à mesma temperatura da entrada. Baseado nessa verificação conclui-se que, para velocidades inferiores a $3,6 \text{ cm/s}$ e para um canal com comprimento até em torno de 10 h , a temperatura em qualquer seção transversal pode ser considerada constante e igual ao valor da entrada. Analisando os perfis de temperatura para o restante das seções observa-se um aumento no aquecimento à medida que a massa polimérica escoava. Finalmente, quando se atinge uma posição onde toda a energia térmica gerada devido ao atrito viscoso for transferida por condução através das paredes do duto, obtém-se a condição de camada limite térmica plenamente desenvolvida (regime de equilíbrio).

Na última análise realizada compararam-se os perfis de temperatura, para diferentes velocidades, nas seções transversais do canal posicionadas em $x = 2,5 \text{ h}$, $12,5 \text{ h}$, 150 h e 350 h , conforme representado na figura 5. Os mesmos aspectos discutidos na análise da figura 4 são pertinentes nesse caso. Porém, um detalhe interessante, não evidenciado anteriormente, pode ser observado na figura 5(b) que mostra a distribuição de temperaturas na posição $x = 12,5 \text{ h}$. Com um comportamento oposto às demais regiões, entre as posições $x = 4,5 \text{ h}$ e $x = 18,5 \text{ h}$, a temperatura no centro do canal é maior para o caso de menor velocidade, conforme pode ser visto de forma bastante clara para $U_e = 1,0 \text{ cm/s}$. A explicação para este fato está relacionada com a ordem de grandeza dos termos que representam os diferentes processos físicos de transferência de energia. Nesta região, para vazões menores, a transferência de calor por condução é comparativamente maior que a convecção na direção do escoamento. Isto faz com que a energia gerada próximo às paredes pela dissipação do atrito viscoso seja transferida preferencialmente em direção às paredes e ao centro causando um maior aquecimento desta região.

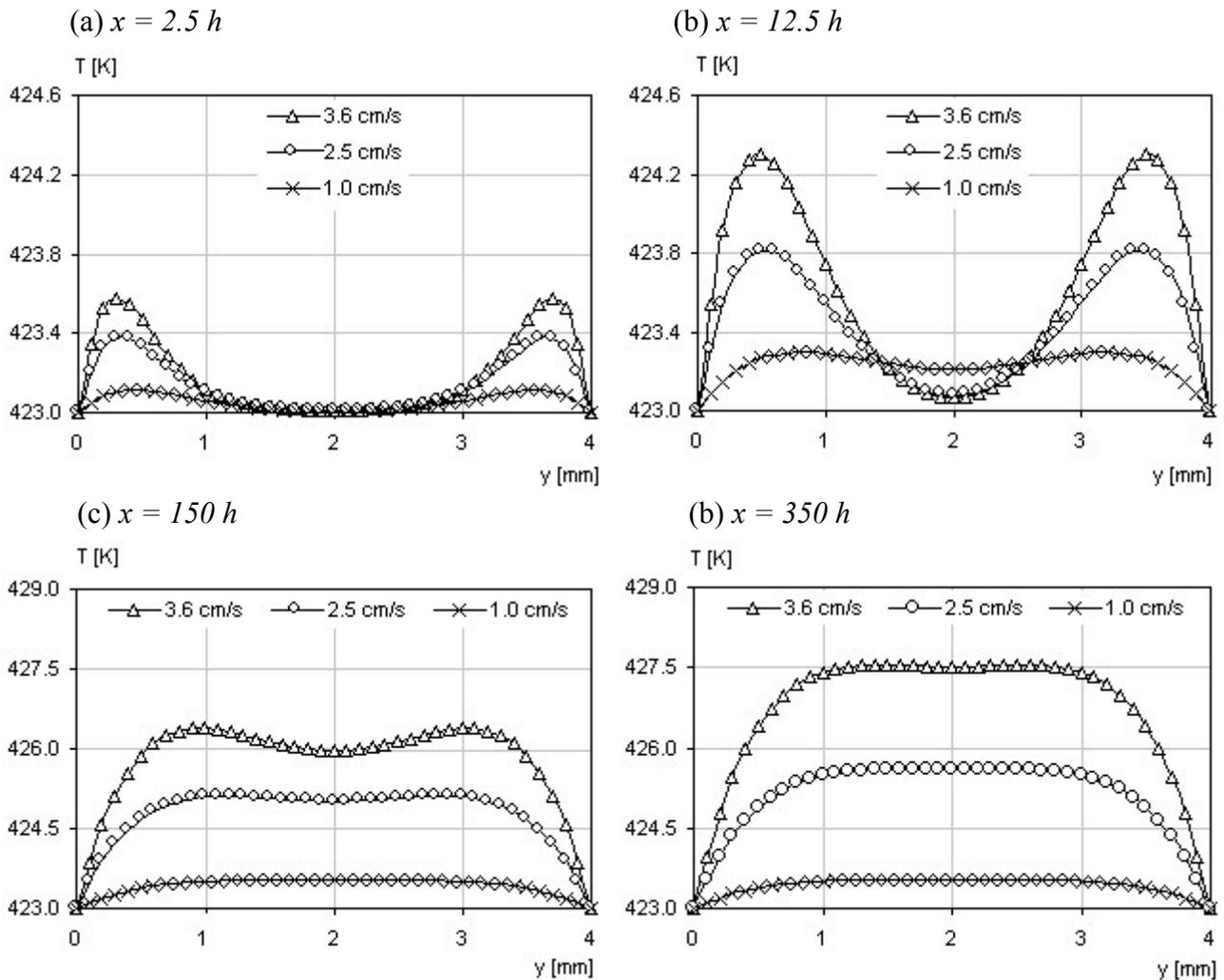


Figura 5. Distribuição de temperatura na seção transversal.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentado um estudo numérico do escoamento do Poliacetal POM-M90-44 no interior de canais planos. O método numérico utilizado, originalmente testado para fluidos newtonianos, se mostrou robusto na análise de problemas envolvendo escoamento de fluidos não-newtonianos. Em relação à física do escoamento do Poliacetal POM-M90-44, uma conclusão importante está relacionada à taxa de crescimento das camadas limite térmica e hidrodinâmica. Os resultados demonstraram que a camada limite hidrodinâmica cresce rapidamente, enquanto que a camada limite térmica apresenta um crescimento muito lento. Este comportamento permite que, para canais curtos ($x < 10 h$) e vazões inferiores a $5,8 \text{ cm}^3/\text{s}$, as temperaturas na seção transversal possam ser aproximadas com precisão aceitável pela temperatura de entrada, enquanto que a distribuição de velocidades aproxima àquela de escoamento plenamente desenvolvido.

6. 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 injection-moulding 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] HOLM, E.J.; LANGTANGEN, H.P. A unified finite element model for the injection moulding process. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.178, p.413-429, 1999.
- [7] ZDANSKI, P.S.B. **Desenvolvimento de um método numérico para cálculo de escoamentos incompressíveis: aplicação na análise da troca de calor em cavidades rasas**. 2003. 127 f. Tese (Doutorado em Ciências) - Engenharia Aeronáutica e Mecânica Área de Aerodinâmica, Propulsão e Energia, Instituto Tecnológico da Aeronáutica, São José dos Campos, 2003.
- [8] AGASSANT, J.-F.; AVENAS, P.; SERGENT, J.-F., VERGENES, B.; VINCENT, M. **La Mise en Forme des Matières Plastiques**. Paris: TecDoc, 1996.
- [9] 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.
- [10] ZDANSKI, P.S.B.; ORTEGA, M.A; FICO JR, N.G.C.R. Numerical Simulation of the Incompressible Navier-Stokes Equations, **Numerical Heat Transfer part B – Fundamentals**, (aceito para publicação), 2004.
- [11] PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere, New York, 1980.
- [12] JAMESON, A.; MAVRIPLIS, D. Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on a Regular Triangular Mesh. **AIAA Journal**, v. 24, n. 4 p. 611-618, 1986.
- [13] VAZ Jr., M.; GAERTNER, E.L. **Simulação Numérica do Escoamento de Polímeros em Canais**. DAPE 114/2002, UDESC/CCT, Joinville, 2002.

NUMERICAL SIMULATION OF POLYMER MELT FLOW IN 2D PLANE CHANNELS: EFFECTS OF THE HYDRODYNAMIC AND THERMAL ENTRANCE LENGTH

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

***Abstract.** The transforming industry has shown a considerable growth in the last years. Most of such industries have used polymeric materials in a wide range of process, amongst which injection and extrusion. In injection moulding, a polymer under high pressure is forced to flow through channels with the objective of filling the mould cavity. Therefore, prediction of the flow behaviour and computation of quantities such as the pressure, temperature and velocity fields are of fundamental importance to enhance the process quality control. In this context, commercial simulators have been developed, some of which combining simplified mathematical models and rheological properties of commercial polymers. Despite the apparent success, these approximations are not able to capture important aspects of the polymer melt flow, such as the shear stress distribution in the channel or cavity cross-section. In contrast to the widely used Hele-Shaw approximation, the present work adopts a more elaborate mathematical formulation capable of capturing the effects of the entrance length. The mathematical model comprises the momentum and the energy conservation equations and a Poisson equation for pressure. The physical equations are discretized using finite differences based on a co-localised mesh and second-order spatial accuracy formulae. Solutions for the commercial polymer Polyacetal POM-M90-44 are presented, which demonstrate that the hydrodynamic boundary layer grows much more quickly than its thermal counterpart, so that the ratio between thermal and hydrodynamic entrance length can reach values as high as 140 for the conditions simulated.*

***Keywords.** Injection moulding, boundary layer, finite differences.*