

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS COM FLUIDOS NÃO-NEWTONIANOS EM PROBLEMAS COM FRENTES LIVRES

João Flávio Vieira de Vasconcellos

LEMA - Laboratório de Experimentação e Simulação Numérica em
Transferência de Calor e Massa
Instituto Politécnico da UERJ
Cx. P. 97.282 - CEP 28.601- 970
Nova Friburgo - Rio de Janeiro - Brasil
web: <http://www.iprj.uerj.br/~jflavio>

Clovis Raimundo Maliska

SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em
Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Universidade Federal de Santa Catarina
Cx. P. 476 - CEP 88.040-900
Florianópolis - Santa Catarina - Brasil
web: <http://www.sinmec.ufsc.br>

***Resumo.** Este trabalho apresenta a formulação, que faz uso de equações diferenciais tridimensionais e transiente, e os resultados usados na simulação numérica do escoamento no interior de uma cavidade usada em um processo conhecido como injeção de plástico. A simulação do comportamento não-newtoniano do fluido é obtida usando-se um modelo de potência para a função viscosidade. A dificuldade associada à captura da frente do escoamento é solucionada através do uso de uma variante do método VOF. Resultados são comparados com os obtidos com um software de uso comercial.*

***Palavras-chave:** Volumes Finitos, Fronteira Livre, Fluidos Não-newtonianos, Enchimento de Moldes*

1. INTRODUÇÃO

Uma das formas mais difundidas de confecção de peças plásticas é através de um processo conhecido como injeção de plástico. Resumidamente, trata-se da injeção de um polímero, ou uma combinação de polímeros, em uma cavidade, o molde, que deverá determinar a forma final da peça injetada. A confecção deste molde, que é feito de matérias primas de alto custo, exige um processo de fabricação bastante refinado. Modelos computacionais têm sido desenvolvidos para entender o comportamento do escoamento no interior do molde para auxiliar o projetista na tarefa de projetar o molde com um mínimo de imprecisões, pois as tentativas-e-erros na fabricação do molde encarecem demasiadamente o custo do produto final.

A simulação do escoamento no interior do molde é uma tarefa bastante complexa, visto que, o problema é transiente e tridimensional, a geometria é complexa, o fluido de trabalho é não-newtoniano e ao menos uma das fronteiras do escoamento não é conhecida *a priori*. Aliás, um dos objetivos da simulação deste problema é o de determinar o movimento da fronteira do escoamento no interior da cavidade. As equações que governam o problema hidrodinâmico são as seguintes:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} (\vec{V}) = \vec{B} + \nabla \cdot (\underline{\sigma}) \quad (2)$$

onde ρ é a densidade, \vec{V} o vetor velocidade, \vec{B} representa as forças de campo por unidade de volume e $\underline{\sigma}$ o tensor tensão. É bem conhecida a influência da temperatura no comportamento das propriedades termofísicas dos plásticos, porém, neste trabalho, optou-se somente por apresentar situações isotérmicas. Como $\underline{\sigma}$ está diretamente ligado às propriedades do meio que se está analisando, é necessário especificar a relação entre a tensão e a deformação para o fluido não-newtoniano. Neste trabalho foi usado uma relação constitutiva adequada para uma classe de fluidos denominada fluidos newtonianos generalizados, dada por

$$\underline{\sigma} = -PI + \eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma} \quad (3)$$

onde P é a pressão, I o tensor identidade, $\eta(\dot{\gamma})$ a função viscosidade, $\dot{\gamma}$ a taxa de deformação e $\dot{\underline{\gamma}}$ o tensor taxa de deformação. Segundo Kennedy (1995) esta equação é particularmente indicada para o escoamento de polímeros em tubos ou entre placas, caso do presente estudo. Implicitamente, a Eq. (3) desconsidera os efeitos viscoelásticos, o que impossibilita a simulação de uma quantidade bastante grande de fluidos não-newtonianos com aplicações industriais. A grande vantagem em se adotar a Eq. (3) é que esta é bastante similar a usada na equação de conservação do movimento linear da equação de Navier-Stokes. Isto faz com que uma técnica numérica que funcione adequadamente na simulação da equação de Navier-Stokes possa ser facilmente adaptada para simular fluidos não-newtonianos generalizados.

Neste trabalho a função viscosidade, que por simplicidade denominou-se η_v , foi definida por (Kennedy, 1995)

$$\eta_v = \frac{\eta_o}{1 + \left(\frac{\eta_o}{K}\right) \dot{\gamma}^{1-n}} \quad (4)$$

onde η_o , K são constantes de proporcionalidade que dependem do fluido e n é o índice do escoamento.

Os mais difundidos códigos computacionais dedicados à simulação do escoamento no interior de uma cavidade de injeção de plástico não fazem uso das Eqs. (1), (2) e (3), que neste trabalho denominaremos de solução completa. Baseados no trabalho apresentado por Richardson (1972), que associou o escoamento no interior de moldes de espessura fina ao estudo desenvolvido por Hele-Shaw (1898), os pesquisadores que desenvolveram estes códigos fazem uso de uma formulação, que denominaremos neste trabalho de formulação simplificada. A formulação simplificada é desenvolvida considerando-se duas hipóteses: a primeira que as forças viscosas

predominam sobre as forças de inércia; e a segunda que uma das dimensões da peça é significativamente menor que as demais (geometria tipo casca). A primeira hipótese é bastante realista visto que os plásticos possuem alta viscosidade, mas a segunda hipótese não o é. É fácil imaginar peças plásticas que não preenchem este requisito. Diversos outros trabalhos podem ser encontrados na literatura que fazem uso desta formulação simplificada. Cita-se Hieber e Shen (1978) ou Kietzmann *et alii* (1998), entre outros.

A equação da formulação simplificada, para o problema hidrodinâmico é

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S \frac{\partial P}{\partial y} \right) = 0 \quad (5)$$

onde S é conhecido como fluidez, do inglês *fluidity*. Valores altos de S indicam que o fluido oferece baixa resistência ao movimento. S pode também ser definido como sendo o inverso da viscosidade. O uso da Eq. (5) facilita em muito o desenvolvimento de um código computacional para a simular o escoamento no interior dos moldes. No lugar de um conjunto de equações transientes e tridimensionais, acopladas entre si, tem-se uma única equação bidimensional para simular o problema hidrodinâmico.

A aplicação da Eq. (5) nas situações em que são válidas as hipóteses simplificativas que a geraram, notadamente geometrias tipo casca, produz bons resultados.

O propósito deste trabalho é o de realizar algumas comparações entre a formulação completa e simplificada. Através de comparações entre estes dois modelos pode-se determinar com uma maior precisão as situações em que a aplicação da formulação simplificada deve ser usada e nas que deve ser evitada.

Para fazer a comparação usou-se um código computacional, C-MOLD (1997), que é um dos mais populares programas de CAE para projetos de moldes de injeção. Os dados obtidos através da execução do programa C-MOLD (1997), representam o modelo simplificado neste trabalho. Os dados obtidos usando a formulação completa foram obtidos por um código computacional desenvolvido para o desenvolvimento da pesquisa que gerou este trabalho, e que será apresentada nas próximas seções.

2. SOLUÇÃO NUMÉRICA

Neste trabalho usou-se a metodologia proposta por Maliska (1995) para discretizar as equações do modelo completo. Normalmente uma metodologia baseada no uso de malhas regulares, como é o caso da maioria dos algoritmos baseados no método de volumes finitos, não é uma escolha adequada para esta situação. O uso de malhas estruturadas implica necessariamente em uma limitação geométrica que impede a aplicação do programa desenvolvido na simulação de geometrias reais. O uso de malhas não-estruturadas em conjunto com o método de volumes finitos, como descrito por Maliska (1995) e extensamente analisado por Vasconcellos (1999), faz com que a limitação geométrica deixe de existir. Desta forma, este método de volumes finitos substitui com vantagens o método de elementos finitos na simulação deste problema, pois como este último método não conserva a massa localmente, há a necessidade do uso conjunto de alguma metodologia que conserve a massa para que seja possível a determinação da posição da frente do escoamento. Para a maioria dos trabalhos analisados, a metodologia usada foi a de diferenças finitas. Com o uso do método de volumes finitos, tanto as equações do domínio como aquelas da captura de frente podem ser resolvidas integradas e com uma única metodologia.

As equações consideradas neste trabalho são:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (6)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}u) \right] = \nabla \cdot [\eta_v \nabla u] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta_v \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\eta_v \frac{\partial v}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\eta_v \frac{\partial w}{\partial x} \right] - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (7)$$

$$\rho \left[\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}v) \right] = \nabla \cdot [\eta_v \nabla v] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta_v \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\eta_v \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\eta_v \frac{\partial w}{\partial y} \right] - \frac{\partial P}{\partial y} \quad (8)$$

$$\rho \left[\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}w) \right] = \nabla \cdot [\eta_v \nabla w] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta_v \frac{\partial u}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\eta_v \frac{\partial v}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\eta_v \frac{\partial w}{\partial z} \right] - \frac{\partial P}{\partial z} \quad (9)$$

onde u , v e w são as componentes do vetor velocidade.

As Eqs. (6), (7), (8) e (9) são integradas em um volume finito, formado por um diagrama de Voronoi, como o representado na Fig. 1.

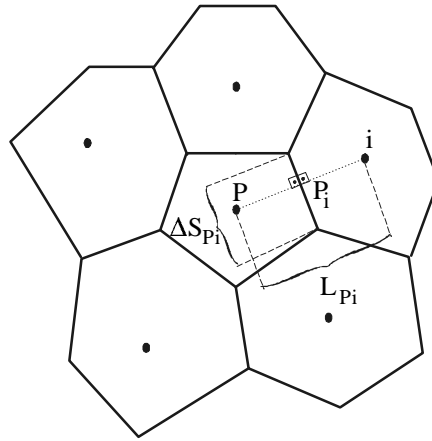


Figura 1 - Volume típico usado na integração das equações diferenciais

A descrição do método de volumes finitos em malhas não-esturadas, especificamente malhas de Voronoi, foi apresentada por Maliska (1995) e os resultados da aplicação da metodologia podem ser encontrados em Vasconcellos e Maliska (1998) ou Vasconcellos (1999). Nestes trabalhos são detalhados a formulação e alguns aspectos da sua implementação. Desta forma, por questão de espaço, não serão apresentadas as equações discretizadas utilizadas para a obtenção dos resultados que serão apresentados neste trabalho.

3. MÉTODOS DE CAPTURA DA FRENTE DO ESCOAMENTO

Uma das dificuldades da simulação do problema do enchimento da cavidade deve-se ao fato de que pelo menos uma das fronteiras do escoamento varia com o tempo e não é conhecida *a priori*. Este tipo de problema, classificado como problema de fronteira livre, pode ser encontrado em outros processos físicos, e, por esta razão, diversos pesquisadores vêm se dedicando ao estudo e desenvolvimento de algoritmos para simular estas situações (Floryan e Rasmussen, 1989). Entre as opções, foi escolhido o método proposto por Swaminathan e Voller (1994) que faz uso de uma equação extra que permite identificar qual região do domínio contém líquido e qual contém gás em um determinado instante de tempo. A equação apresentada no trabalho de Swaminathan e Voller (1994), é uma correção da equação originalmente proposta por Hirt e Nichols (1981), e pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_L F] + \nabla \cdot (\rho_L G \vec{V}) = 0 \quad (10)$$

onde ρ_L é a densidade do líquido, \vec{V} o vetor velocidade e F a fração do volume com líquido. $F = 0$ indica um volume vazio de líquido e $F = 1$, um volume cheio. Os volumes contendo F diferentes de 0 ou 1 são justamente aqueles por onde a fronteira livre passa, em um determinado espaço de tempo. G é um limitador de fluxo que obedece as seguintes condições:

$$\begin{aligned} \text{se } F < 1 \text{ então } G &= 0 \\ \text{se } F = 1 \text{ então } 0 < G &\leq 1 \end{aligned} \quad (11)$$

De posse dos valores de F e G , pode-se calcular, por exemplo, os valores das densidades no pontos geradores do diagrama de Voronoi, ρ_p , ou em cada uma das faces deste volume, ρ_i , usando as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \rho_p &= (1 - F_p) \rho_{gas} + F_p \rho_{liq} \\ \rho_i &= (1 - G_p) \rho_{gas} + G_p \rho_{liq} \end{aligned} \quad (12)$$

onde ρ_{liq} é a densidade do líquido e ρ_{gas} a densidade do gás. O detalhamento desta metodologia pode ser encontrado em Vasconcellos (1999) e Maliska e Vasconcellos (2000) e, por questão de espaço, não serão rerepresentados aqui.

Alguns dos métodos usados para a captura de frentes de escoamentos têm uma limitação bastante significativa. Como são métodos explícitos, existe um valor máximo para o passo de tempo. Acima de um determinado valor ocorre a divergência da solução. Este valor será tanto menor quanto mais refinada for a malha. Esta restrição é conhecida como condição de Courant. A grande virtude no uso do método de Swaminathan e Voller (1994) é que, por ser um método implícito, ele não está sujeito à condição de Courant, ou seja, pode-se obter soluções com passos de tempo que não respeitem a condição de Courant.

5. APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

Todas as simulações realizadas para este trabalho foram feitas para a geometria apresentada na Fig. 2, uma cavidade radial, cujo raio interno mede 50 mm e o raio externo mede 200 mm. Duas foram as espessuras selecionadas: fina (10 mm) e espessa (20 mm). Ao se escolher cavidades com tais espessuras, esperava-se encontrar diferenças significativas entre os resultados obtidos com formulação simplificada e a formulação completa para a cavidade espessa e resultados semelhantes para a cavidade fina.

A velocidade de entrada do fluido junto ao anel interno foi considerada constante e igual a 0,38 m/s. Os resultados que serão apresentados a seguir referem-se a simulação da injeção de Hostacom M2 n02. As constantes usadas, que caracterizam este material, foram obtidas da biblioteca do código C-MOLD (1997). Este material apresenta a característica de possuir uma viscosidade pouco dependente da temperatura. Esta é uma característica importante, pois o problema térmico não foi incorporado nesta presente simulação. A viscosidade do material obedece à Eq. (4), e as constantes que tornam esta função específica para o material escolhido são:

$$\eta_o = D_l e^{\left(\frac{-A_1(T-T_s)}{A_2+(T-T_s)} \right)} \quad (13)$$

com $D_l = 2,2 \times 10^{14}$ Pa s, $A_1 = 18,592$ K, $A_2 = 51,6$ K, $T_s = 263,15$ K, $T = 430,00$ K. As constantes da Eq. (4) são as seguintes: $K = 412,86$ Pa, $n = 0,29473$.

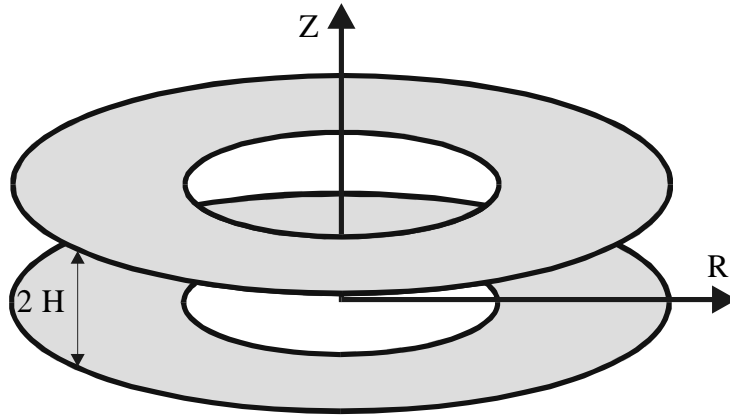


Figura 2 - Geometria da cavidade radial

A taxa de deformação usada na Eq. (4) no modelo simplificado é dada por

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2} \quad (14)$$

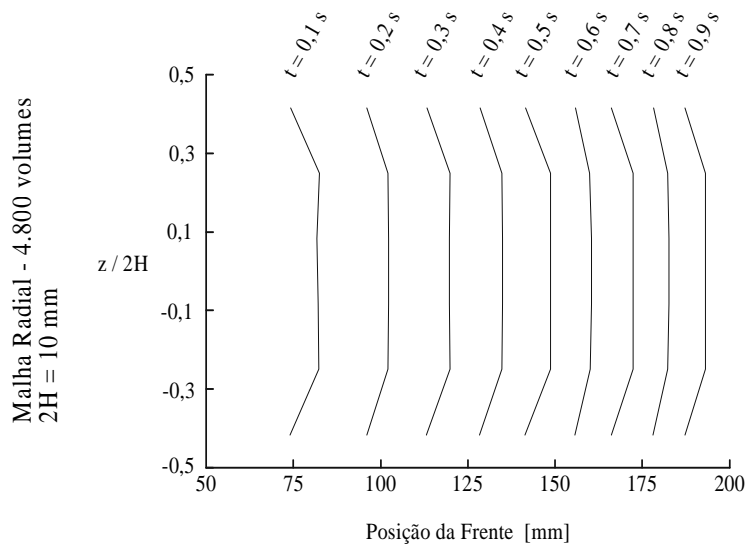


Figura 3 - Posição da frente em vários intervalos de tempo - cavidade radial fina

Os primeiros resultados da simulação são apresentados nas Figs. 3 e 4. Estas figuras mostram a posição e a forma da frente na direção z em vários tempos distintos. O sistema de coordena-

nadas adotado é apresentado na Fig. 2. O perfil reto que se obtém usando a formulação simplificada, não mais é observado quando se usa a formulação completa, visto que, necessariamente o fluido deve captar a presença das paredes no desenvolvimento do padrão do escoamento.

Um perfil levemente mais parabólico da frente é observado quando se simula a cavidade radial espessa e este era o comportamento esperado inicialmente.

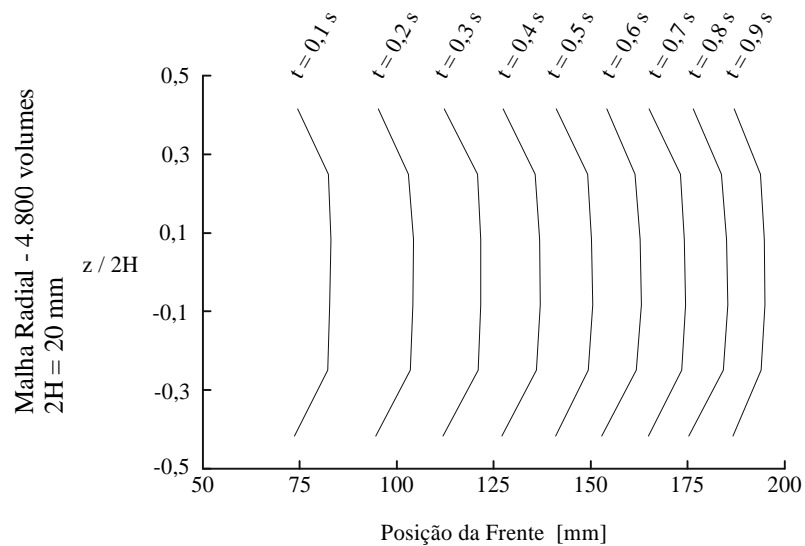


Figura 4 - Posição da frente em vários intervalos de tempo - cavidade radial espessa

Com o uso do modelo completo pode-se observar o comportamento da velocidade w , na direção z . A formulação simplificada considera este componente da velocidade muito inferior aos demais e o desconsidera. Por esta razão, o efeito físico conhecido como escoamento em chafariz, do inglês *fountain flow*, que está relacionado com a velocidade w , só pode ser observado na formulação completa.

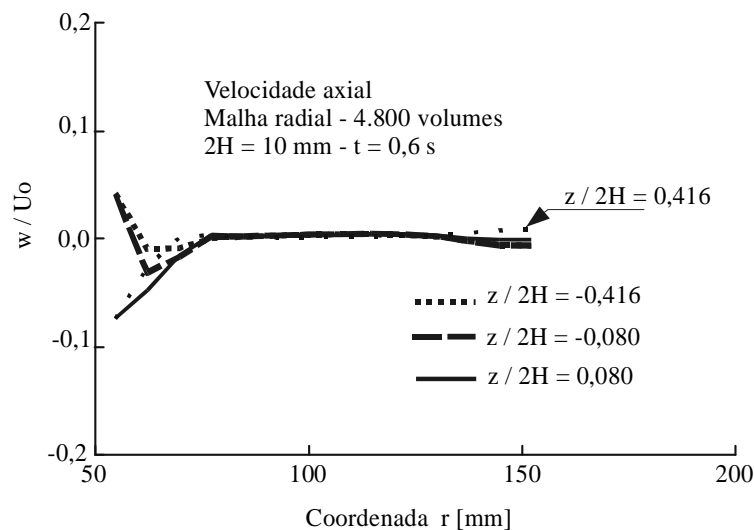


Figura 5 - Velocidade axial para diversas alturas - cavidade fina

Nas Figs. 5 e 6 são apresentados o comportamento de w/U_o , onde U_o é a velocidade radial na região de entrada do escoamento para vários valores de z distintos. Observa-se na Fig. 5, que

somente na região próxima à entrada, o componente da velocidade w tem uma pequena influência no comportamento do escoamento. Nas demais regiões este componente praticamente não existe. Este comportamento é o esperado e é o que é modelado usando a formulação simplificada.

Os sinais da influência do escoamento em chafariz já começam a ser notados, como visto na Fig. 6, pois na frente do escoamento, a velocidade w passa a ser mais significativa. É de se esperar que em espessuras ainda maiores este efeito seja ainda mais pronunciado, dando claros sinais de que a formulação simplificada falhará em tais situações.

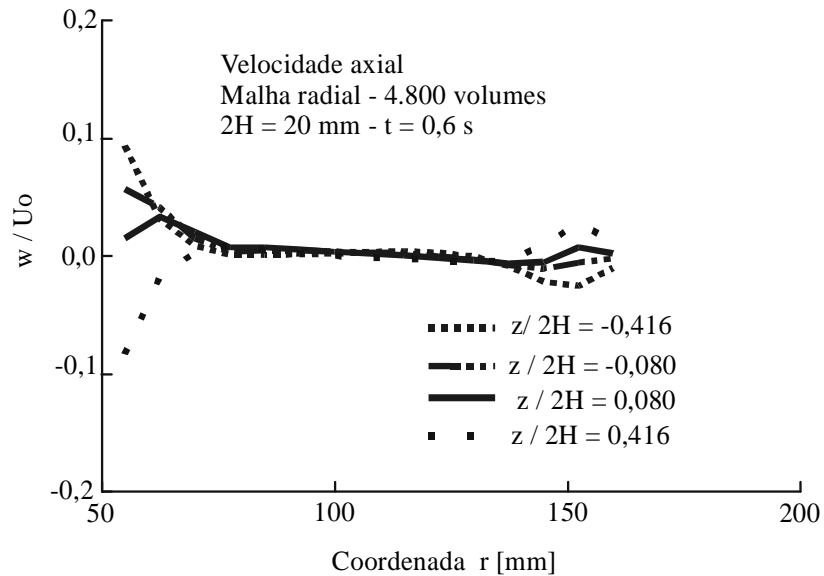


Figura 6 - Velocidade axial para diversas alturas - cavidade espessa

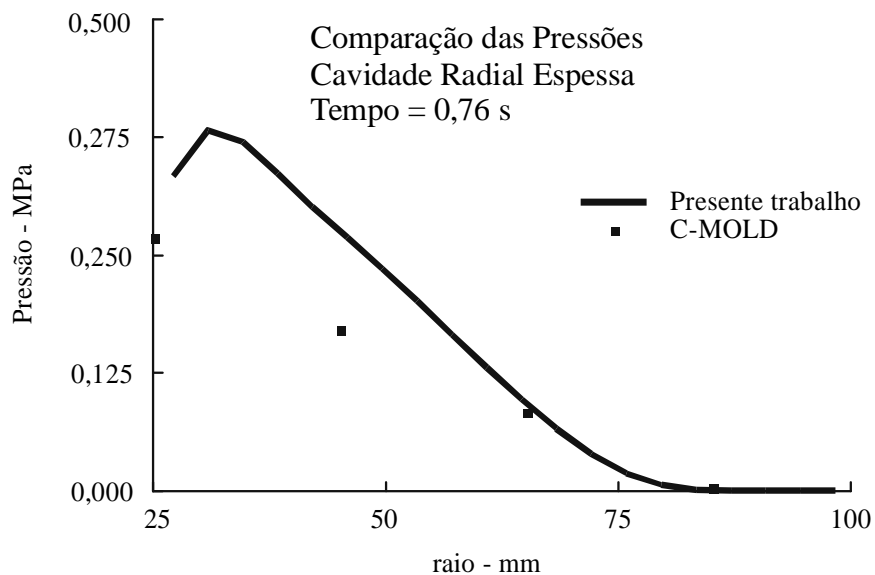


Figura 7 - Comparação entre a pressão obtida por duas formulações - cavidade radial espessa

Os resultados apresentados até o momento foram obtidos usando modelo completo descrito

no início do trabalho. Nas Figs. 7 e 8 são realizadas comparações entre os campos de pressão obtidos usando a formulação completa e a simplificada. Na Fig. 7 é apresentada a pressão para a cavidade radial espessa no tempo de 0,76 s. A comparação é apenas razoável. Aparentemente o modelo simplificado demonstra que a pressão tem um comportamento linear e a do modelo completo não se comporta desta maneira. Um refinamento da malha do modelo simplificado não captou tal efeito. Eventualmente, pode estar associado à algum efeito que ocorre na região de entrada.

Na Fig. 8 é observado a mesma situação apresentada na Fig. 7, porém a geometria usada é a cavidade radial fina. Há uma sensível melhoria na concordância entre as duas formulações, o que era efetivamente esperado. Novamente a formulação simplificada fornece um comportamento linear para a pressão, enquanto na formulação completa o comportamento é não-linear.

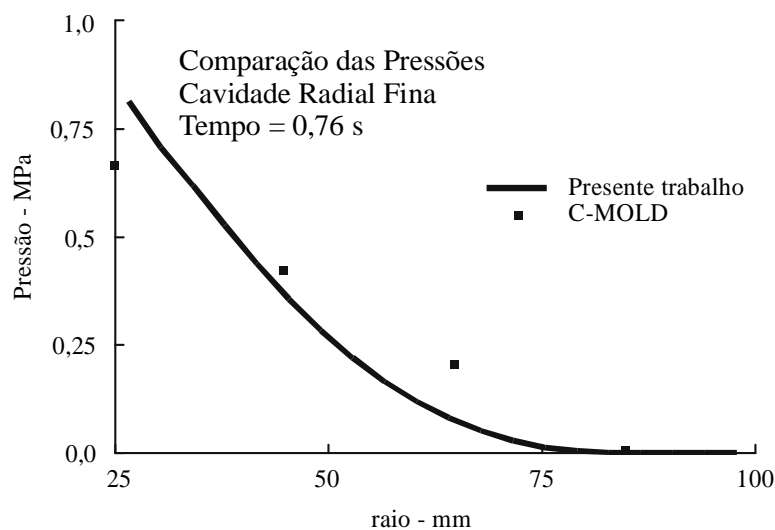


Figura 8 - Comparação entre a pressão obtida pelas duas formulações - cavidade radial fina

6. CONCLUSÕES

O trabalho apresentou alguns resultados baseados na simulação em volumes finitos usando malhas não-estruturadas da formulação completa em um problema de injeção de moldes com fluido não-newtoniano. Este tipo de formulação pode ser um instrumento para a pesquisa e análise de problemas envolvendo injeção de moldes em que a geometria não mais se enquadra no tipo casca.

A comparação dos resultados obtidos usando a formulação simplificada com os obtidos usando a formulação completa é bastante razoável. Outras simulações, desta vez incluindo o problema térmico, deverão ser realizadas para qualificar o algoritmo implementado.

Agradecimentos

O primeiro autor agradece ao CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo auxílio financeiro prestado para a realização desta pesquisa.

REFERÊNCIAS

- C-MOLD, 1997, C-MOLD Design Guide - A resource for plastic engineers, Advanced CAE Technology Inc., EUA.
- Floryan, J. M., e Rasmussen, H., 1989, Numerical methods for viscous flows with moving boundaries, Applied Mechanical Review, vol 42, n. 12, pp. 323-339.
- Hele-Shaw, H. S., 1898, The flow of water, Nature, vol. 58, n. 34.
- Hieber, C. A. e Shen, S. F., 1979, Flow analysis of the non-isothermal two-dimensional filling process in injection molding, Israel Journal of Technology, vol. 16, pp. 248-254.
- Hirt, C. W. e Nichols, B. D., 1981, Volume of fluid (VOF) method for dynamics of free boundaries, Journal of Computational Physics, vol. 39, pp. 201-225.
- Kennedy, Peter, 1995, Flow analysis of injection molds, Hanser/Gardner Publications.
- Kietzmann, C. V. L, Van der Walt, J. P. e Morsi, Y. S., 1998, A free-front tracking algorithm for a control-volume-based hele-shaw method, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 41, pp. 253-269.
- Maliska, C. R., 1995, Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional, Livros Técnicos e Científicos Editora.
- Maliska, C. R e Vasconcellos, J. F. V., 2000, An unstructured finite volume procedure for simulating flows with moving fronts, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., vol. 182, pp. 401-420.
- Swaminathan, C. R. e Voller, V. R., 1994, A time-implicit algorithm, Applied Mathematical Modelling, vol. 18. pp. 101-108.
- Richardson, S. , 1972, Hele-Shaw flows with a free boundary produced by the injection of fluid into a narrow channel, Journal of Fluid Mechanics, vol. 56, Parte 4, pp. 609-618.
- Vasconcellos, J. F. V., 1999, Um método de volumes finitos usando malhas não-estruturadas para o estudo de escoamentos com frentes livres, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Brasil.
- Vasconcellos, J. F. V. e Maliska, C. R., 1998, Solução numérica de escoamentos incompressíveis usando malhas de Voronoi, Anais do VII Encontro Nacional de Ciências Térmicas, Rio de Janeiro.

AN FINITE VOLUME PROCEDURE FOR SIMULATING NON-NEWTONIAN FLUID FLOWS WITH MOVING FRONTS

Abstract. *This paper presents a transient three-dimensional model for simulating the injection mold flow inside a cavity. The non-newtonian behavior is represented by a power-law equation and the difficulty associated with the determination of the moving front is solved using the VOF method. Results are compared with commercial software designed for the simulation of plastic injection flows.*

Key-words: *Finite Volume Method, Moving Fronts, Non-newtonian Fluid, Mold Filling*