

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO DE POLÍMEROS EM UMA CONTRAÇÃO

Paulo S B Zdanski, zdanski@joinville.udesc.br¹
Miguel Vaz Júnior, M.Vaz@joinville.udesc.br¹
Allan P C Dias, Allan@yahoo.com.br¹

¹Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Campus Universitário Avelino Marcante, Bairro Bom Retiro, Cep.: 89230-100 – Joinville SC

Resumo: *A análise do escoamento de polímeros no interior de canais tem aplicação direta em processos industriais de fabricação por injeção e, também, tem despertado um grande interesse científico no contexto atual. Dentro deste escopo, o presente trabalho analisa numericamente o escoamento permanente de polímeros no interior de canais planos que apresentam uma contração súbita (redução brusca de seção). Esta geometria apresenta uma boa similaridade com um canal de ataque ('gate') tipo filme. Dentre os principais aspectos deste tipo de escoamento está o elevado atrito que provoca um aquecimento do polímero (efeito da dissipação viscosa) e, também, uma elevada perda de carga. Este trabalho apresenta uma análise numérica deste tipo de problema baseada em uma solução acoplada das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. O modelo de fluido Newtoniano generalizado é adotado, onde a viscosidade aparente do polímero é determinada como função da taxa cisalhante e temperatura através da lei de Cross. O regime de escoamento foi considerado laminar e incompressível. A discretização das equações do modelo matemático é efetuada utilizando a metodologia de diferenças finitas. Os principais resultados obtidos indicam que a razão de contração do canal tem influência em parâmetros importantes do escoamento tais como variação de pressão no canal e aquecimento do polímero devido ao atrito (dissipação viscosa).*

Palavras-chave: *Injeção de polímeros, Contração súbita, Simulação numérica*

1. INTRODUÇÃO

O escoamento de um polímero fundido em uma contração súbita é caracterizado por um elevado atrito. Este atrito tem como conseqüências imediatas um aumento na perda de carga (variação de pressão no canal) e um aquecimento devido ao efeito da dissipação viscosa. Este tipo de escoamento ocorre na prática no interior de um molde nas imediações de um canal de ataque ('gate'), onde o escoamento é estrangulado. Os principais objetivos de tal estrangulamento, conforme preconizados no meio industrial, são: (i) facilitar a separação da peça injetada sem danificá-la (aspecto visual) e, (ii) aquecer o polímero através do elevado atrito, de forma a se obter uma redução de viscosidade e conseqüente aumento na fluidez (melhor preenchimento da cavidade). O segundo aspecto é considerado neste trabalho, onde um código computacional de simulação foi desenvolvido para prever o comportamento do escoamento de um polímero em uma contração. A Figura (1) ilustra a geometria analisada com as principais dimensões.

A simulação numérica tem ocupado um espaço de destaque tanto no meio acadêmico científico quanto industrial. No caso de injeção de polímeros, um marco no desenvolvimento de modelos computacionais foi o trabalho de Hieber e Shen (1980), que propuseram a utilização da aproximação de Hele-Shaw. Este modelo obteve grande aceitação, sendo traduzido pelo seu uso em programas comerciais tais como Moldflow (1995) e C-Mold (1998). 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 (2003), Vaz Jr. e Zdanski (2007) e Zdanski e Vaz Jr. (2008), enquanto a abordagem viscoelástica é empregada nos esquemas propostos em Missirlis et al. (1998) e Tomé et al. (2002).

No que se refere à análise física deste tipo de problema, vários aspectos têm sido abordados e publicados na literatura recente. Pinho e colaboradores (2003) apresentam um estudo de perda de carga em escoamentos internos com contração súbita. Apenas aspectos hidrodinâmicos são abordados, sendo o escoamento considerado isotérmico. Wachs e colaboradores (2002) analisam o efeito da dissipação viscosa em contrações, onde são apresentadas comparações entre a solução isotérmica e não-isotérmica. Recentemente, Binding e colaboradores (2006) analisaram aspectos relacionados à variação de pressão no escoamento de polímeros no interior de canais com contração e expansão súbitas. Estes autores

consideram o escoamento como isotérmico, sendo uma limitação da análise apresentada. Ressalta-se ainda que todos os trabalhos acima citados analisam o problema para uma faixa do número de Reynolds elevada (na ordem de 10-50), típica de soluções poliméricas aquosas. Um número de Reynolds desta ordem geraria taxas cisalhantes extremamente elevadas, inaceitáveis num processo de injeção. Nos estudos realizados em Zdanski e Vaz jr. (2006a, 2006b) é mostrado que, utilizando uma dimensão característica típica para um canal de escoamento e considerando uma faixa de velocidades de injeção entre 1cm/s e 6cm/s, o número de Reynolds característico é da ordem de 10^{-4} - 10^{-3} . A similaridade para com esta faixa de Reynolds é importante para a aplicabilidade dos resultados.

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 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 em um canal plano com contração súbita, com ênfase no efeito da razão de contração. São apresentados resultados que mostram os perfis de temperatura em diferentes seções transversais e a variação da pressão ao longo do canal. As simulações são apresentadas para o polímero comercial Poliacetal POM-M90-44.

2. FORMULAÇÃO TEÓRICA

2.1 Equações de Governo e Reologia de Polímeros

O escoamento de polímeros fundidos em problemas de injeção é dominado pela viscosidade cisalhante, podendo ser descrito através do modelo de fluido Newtoniano generalizado. Nesta abordagem, a viscosidade aparente do polímero é determinada 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, as equações para as velocidades e temperatura são dadas por

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

$$\text{e}$$

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

onde ρ é a massa específica, k a condutividade térmica do polímero, c_p o calor específico, η a viscosidade aparente e $\dot{\gamma}$ a taxa cisalhante equivalente,

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2}. \quad (3)$$

A equação de Poisson para a pressão é obtida através da combinação da equação da conservação da massa,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4)$$

e da equação para as velocidades (Eq. (1)), sendo descrita em Zdanski e Vaz Jr. (2007).

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,

$$\eta = \frac{\eta_0(T)}{1 + \left[\lambda(T) \dot{\gamma} \right]^{-n(T)}} \quad (5)$$

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,

$$\eta_0(T) = a_1 \exp\left(\frac{a_2}{T}\right), \quad \lambda(T) = b_1 \exp\left(\frac{b_2}{T}\right), \quad n(T) = c_1 \exp\left(-\frac{c_2}{T}\right). \quad (6)$$

As propriedades termofísicas do Poliacetal são $\rho=1143\text{kg/m}^3$, $c_p=2061\text{J/kgK}$ e $k=0,31\text{W/mK}$.

2.2 Metodologia Numérica

O modelo numérico utilizado neste trabalho foi recentemente apresentado em Vaz Jr. e Zdanski (2007). As equações de governo 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. Para o controle das oscilações numéricas são adicionados termos de dissipação artificial, os quais apresentam 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 implícito, onde é percorrido um “falso” transiente objetivando a solução em regime permanente. Esta metodologia numérica foi validada e aplicada para o estudo de escoamentos em canais planos (Zdanski e Vaz Jr., 2006a, 2006b) e em expansões súbitas (Vaz Jr. e Zdanski, 2007).

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A geometria de um canal plano com contração súbita está representada na Fig. (1). As condições de contorno utilizadas nas simulações foram as seguintes: não-eskorregamento (velocidade nula) nas paredes sólidas; perfis uniformes de velocidade (vazão prescrita) e temperatura na seção de entrada; derivadas nulas (fluxo zero por difusão) para a velocidade e temperatura na seção de saída; derivadas da pressão nas fronteiras do domínio foram obtidas diretamente das equações de quantidade de movimento para as direções x e y , respectivamente. A espessura do canal a montante da seção de expansão foi assumido $H=8\text{mm}$, enquanto que a espessura a jusante variou entre $h=2\text{mm}$ e 4mm . A malha computacional utilizada é não-uniforme, com concentração de pontos na região próxima à seção de contração. As simulações foram realizadas para duas velocidades de entrada ($u_e=6\text{cm/s}$ e 10cm/s) e para duas razões de contração diferentes ($H/h = 4/1$ e $2/1$). Para a temperatura do polímero foi assumido um perfil uniforme na entrada, $T_e = 453.0\text{K}$. As paredes do canal foram mantidas na mesma temperatura da entrada, $T_p = T_e = 453.0\text{K}$. Desta forma, qualquer alteração nas temperaturas no interior do escoamento é devido ao efeito da dissipação viscosa (transformação da energia mecânica em calor devido à ação da viscosidade).

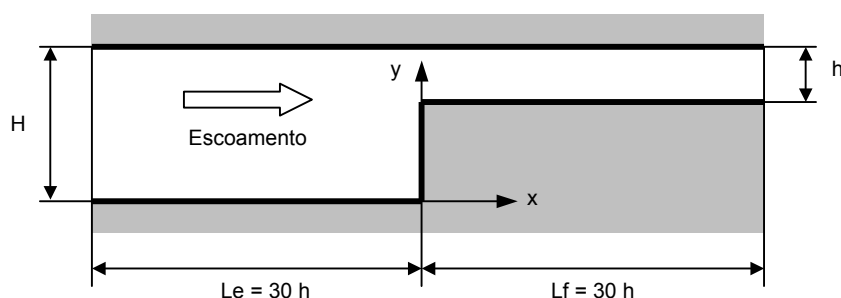


Figura 1. Representação esquemática da geometria analisada.

A topologia do escoamento na região da contração pode ser observada na Fig. (2), onde são apresentadas as linhas de corrente. Esta figura corresponde ao caso simulado para um canal com razão de contração ($H/h = 2/1$) e $u_e = 6\text{cm/s}$. Percebe-se claramente uma pequena região de recirculação nas proximidades da seção de contração. Este vórtice está extremamente confinado no canto inferior devido à elevada viscosidade do polímero. Esta configuração de escoamento está qualitativamente de acordo aos resultados apresentados por Bao (2003), para escoamentos isotérmicos. Convém destacar que a seção de contração foi considerada como a origem do sistema coordenado, ou seja, $x/h=0$.

Nas Figs. (3) - (4) são apresentados os perfis de temperatura nas regiões a montante e a jusante da seção de expansão, respectivamente. Estes resultados correspondem a um canal com razão de contração $H/h = 2/1$ onde $u_e = 6\text{cm/s}$, $T_e = T_p = 453.0$. A coordenada y/h corresponde à altura adimensional do canal, sendo a posição $y/h=0$ na parede inferior e $y/h=2$ na parede superior. O principal aspecto a ser observado na Fig. (3) está relacionado ao efeito da dissipação viscosa. Partindo da parede inferior ($y/h=0$), em uma seção transversal relativamente distante da contração, observa-se um aumento rápido de temperaturas (devido ao elevado gradiente de velocidade) de gradientes semelhantes tanto na parede inferior quanto na parede superior. Entretanto, à medida que a seção transversal estiver localizada mais próxima da seção de contração (x/h crescente) o ponto de máximo se desloca em direção ao centro do canal. Este deslocamento do ponto de máximo é devido à grande deflexão das linhas de corrente na região da quina ($x/h=0$ e $y/h=1$ - ver Fig. (2)), ou seja, a região onde ocorre a máxima taxa cisalhante é deslocada da parede inferior para a região da quina. Por outro lado, uma vez que o canal de entrada é relativamente curto, a temperatura da região central do escoamento se mantém praticamente no mesmo valor da entrada. Nesta região as taxas de cisalhamento são baixas e o efeito da dissipação viscosa é pequeno; adicionalmente, o efeito da difusão de calor transversal ainda não é sentido.

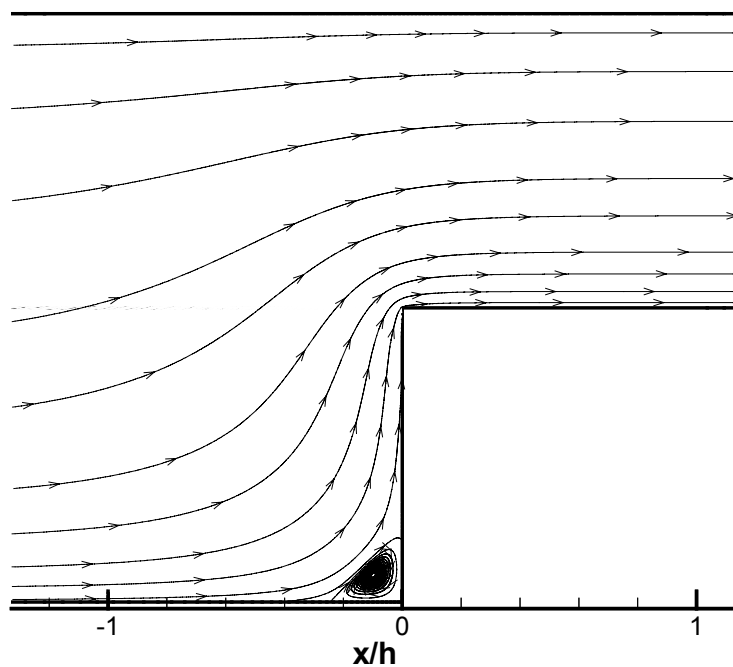


Figura 2. Linhas de corrente na região da contração.

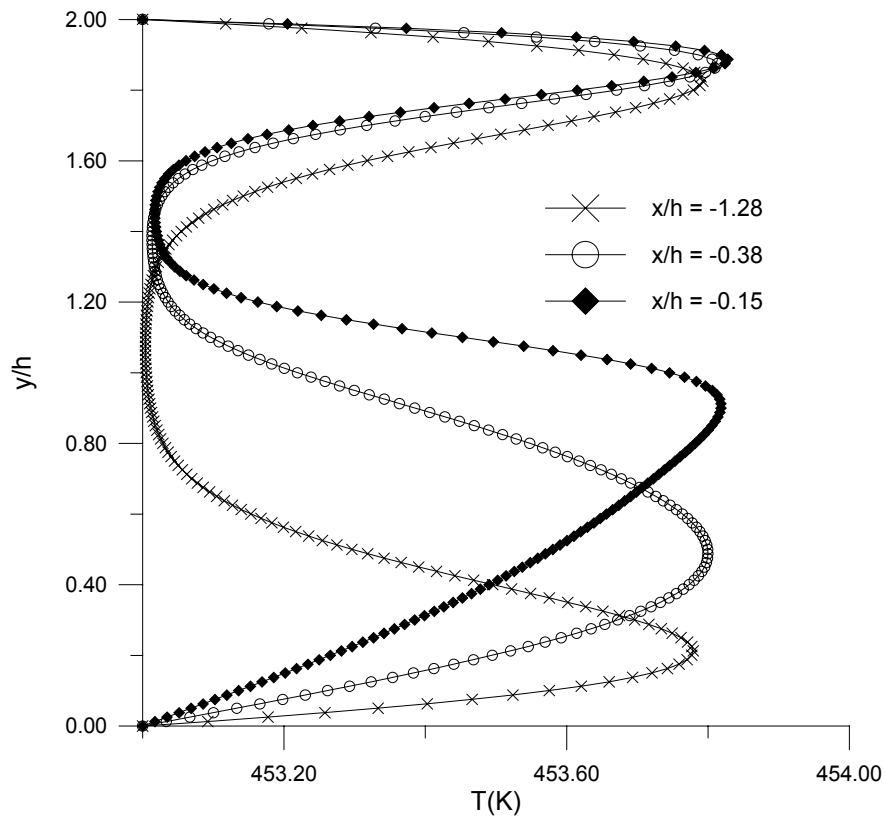


Figura 3. Perfis de temperatura na região a montante da seção de contração (razão de contração 2:1).

Com relação aos perfis de temperatura na região à jusante da seção de expansão (ver Fig. (4)), o comportamento exibido é similar ao de um canal plano. Ocorre um máximo nas regiões próxima à parede inferior ($y/h = 1$) e superior ($y/h = 2$), seguindo um decréscimo em direção à região central ($y/h = 1.5$). Neste tipo de escoamento, o aquecimento da região central ocorre devido ao fenômeno da difusão de calor. Assim sendo, se o canal for longo o suficiente, uma parte da energia gerada devido ao atrito próximo às paredes será conduzida em direção ao centro provocando o aquecimento do polímero na região central. Estes aspectos foram extensivamente estudados nos trabalhos de Zdanski e Vaz Jr. (2006a, 2006b). Um último aspecto importante a ser observado está relacionado à quantificação do aquecimento devido aos efeitos da dissipação viscosa. Percebe-se claramente que, para a geometria e condições simuladas, o máximo incremento de temperatura foi de 0.8K. Esta informação tem interesse a nível tecnológico, uma vez que na indústria se crê que uma contração (canal de ataque) provoca um aquecimento do polímero devido ao atrito, vindo a facilitar o preenchimento do molde. Entretanto, para o caso analisado, este aquecimento é praticamente desprezível.

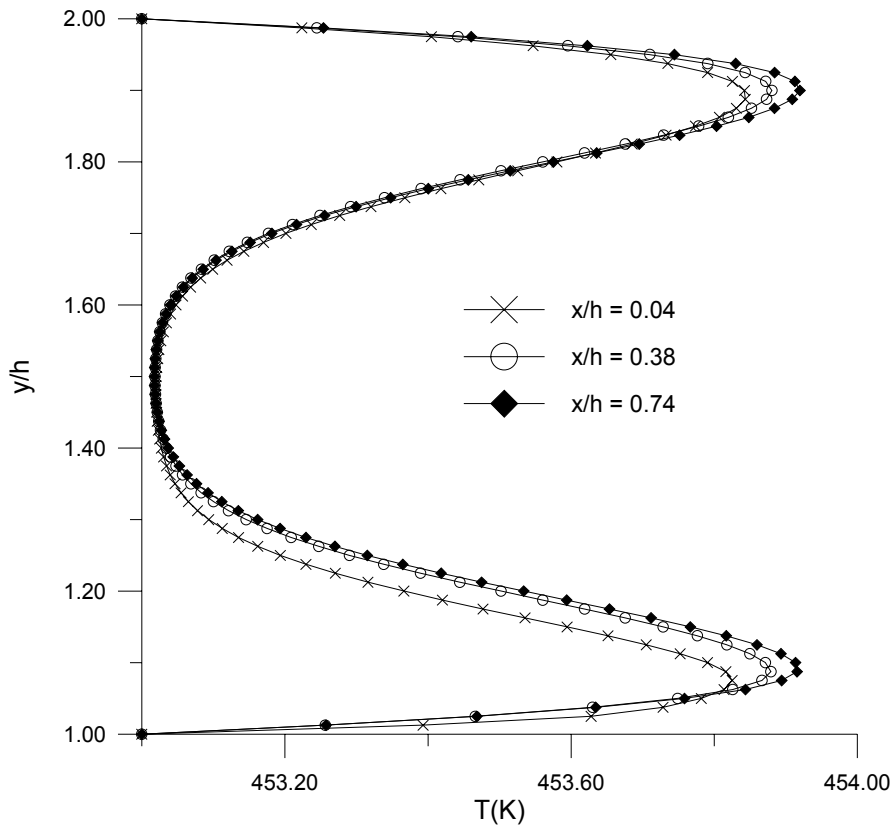


Figura 4. Perfis de temperatura na região a jusante da seção de contração (razão de contração 2:1).

Nas Figs. (5) e (6) são apresentados os perfis de temperatura para um canal com razão de contração ($H/h = 4/1$). Foram mantidas as mesmas condições de contorno na entrada e paredes do caso anterior ($u_e = 6\text{cm/s}$, $T_e = T_p = 453.0\text{K}$). O objetivo foi promover uma comparação direta com os resultados apresentados para uma razão de contração 2:1. O principal aspecto a ser observado é a similaridade entre as curvas para as duas razões de contração estudadas. O máximo incremento de temperatura observado devido ao efeito da dissipação viscosa ficou em torno de 0.8K. Ao se comparar este resultado com aquele apresentado nas Figs. (3) e (4), fica evidente que o parâmetro (H/h) tem pouca influência no aquecimento do polímero na região da contração (para a faixa de parâmetros simulados). Convém salientar que na Fig. (6) a posição $y/h = 1.5$ corresponde à parede inferior do canal a jusante da seção de contração.

Com o objetivo de analisar o efeito da dissipação viscosa para velocidades de entrada mais elevadas, foi simulado um caso para a razão de contração ($H/h = 2:1$) onde $u_e = 10\text{cm/s}$ sendo $T_e = T_p = 453.0\text{K}$. Os perfis de temperatura para este caso são representados na Fig. (7). Para fins comparativos, os resultados para $u_e = 6\text{cm/s}$ também são apresentados. Percebe-se claramente que, para uma velocidade de processo mais elevada, o efeito do atrito no aquecimento do polímero se torna mais relevante. Observa-se um aumento máximo de 3.0K na região próxima à quina da contração ($x/h = -0.18$).

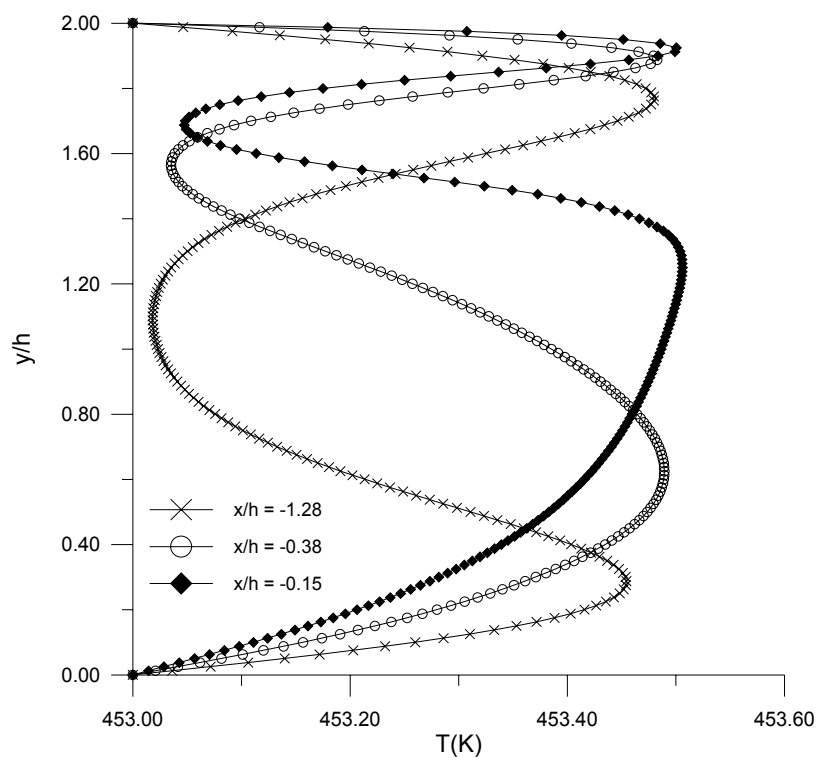


Figura 5. Perfis de temperatura na região a montante da seção de contração (razão de contração 4:1).

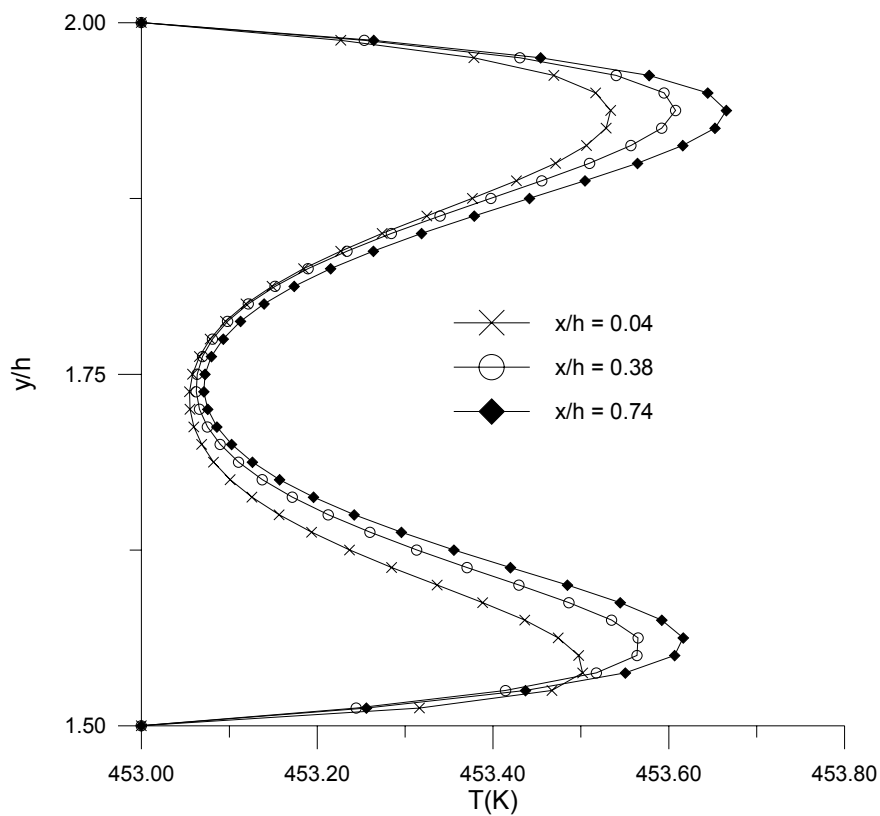


Figura 6. Perfis de temperatura na região a jusante da seção de contração (razão de contração 4:1).

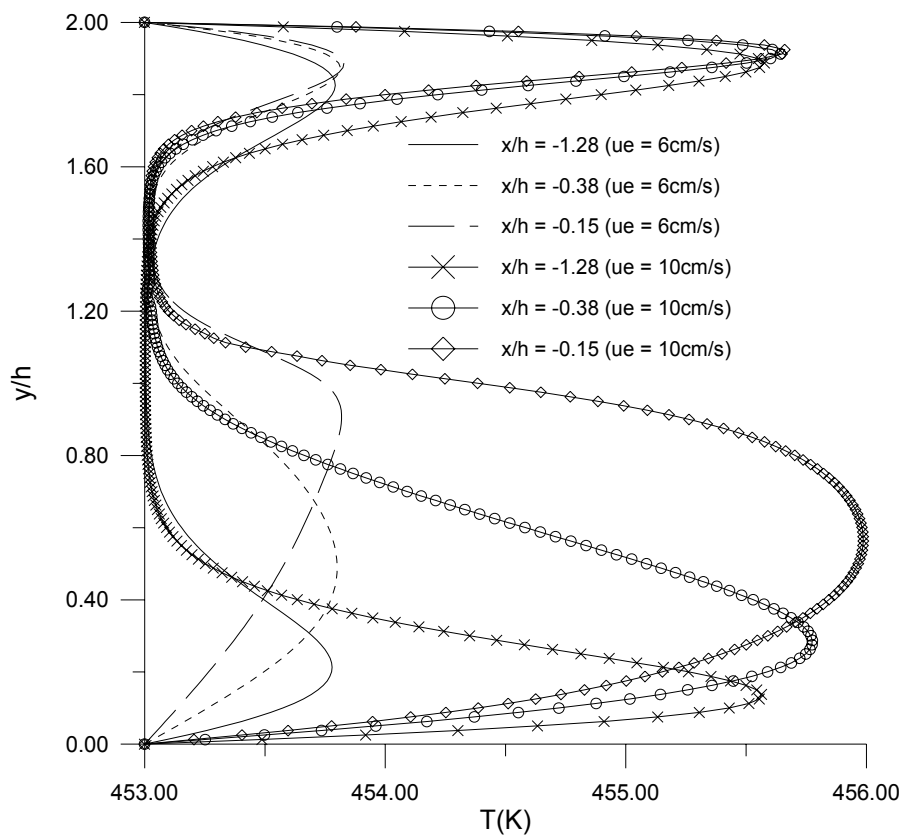


Figura 7. Perfis de temperatura na região a jusante da seção de contração (razão de contração 2:1).

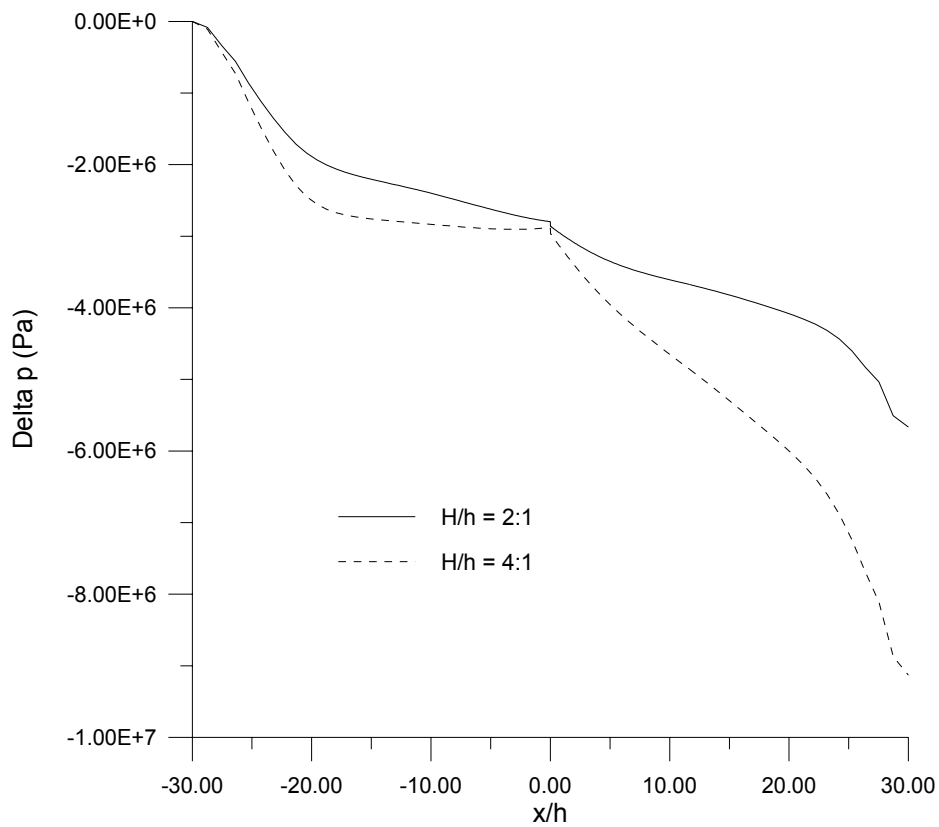


Figura 8. Distribuição de pressão média ao longo do comprimento do canal ($ue = 6\text{cm/s}$).

A Fig. (8) apresenta a variação de pressão ao longo do comprimento do canal para as duas razões de contração simuladas. As condições de contorno utilizadas foram $u_e = 6\text{cm/s}$ e $T_e = T_p = 453.0\text{K}$. Os valores apresentados no gráfico representam as diferenças entre a pressão média em uma dada seção x/h e a pressão na entrada do canal. Contrastando com as distribuições de temperaturas analisadas nas Figs. (3) - (6), a variação de pressão é afetada drasticamente pela variação da razão de contração do canal. A queda global de pressão no canal (diferença entre as pressões médias na saída e entrada) variou entre 5,6 MPa ($H/h = 2:1$) e 9,1 MPa ($H/h = 4:1$). Ou seja, o aumento da contração de uma razão 2:1 para uma razão 4:1 causou um aumento na queda de pressão de 62,5%.

4. OBSERVAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES

Este trabalho apresenta soluções para o escoamento de polímero em canais com contrações súbitas assimétricas. O modelo numérico utilizado é baseado na solução totalmente acoplada das equações da conservação da massa, conservação da energia e de Navies-Stokes generalizada. A reologia do polímero é descrita segundo a lei de Cross onde efeitos da temperatura são também incluídos. A geometria simulada corresponde a uma primeira aproximação para um canal de ataque ('gate') junto ao molde. Este canal geralmente apresenta pequenas espessuras que, no contexto industrial, se propõe possibilitar um aquecimento adicional devido ao atrito viscoso e a facilitar a separação do componente injetado. Este trabalho apresenta uma primeira avaliação do efeito da contração súbita no aquecimento causado pela dissipação viscosa e na queda de pressão. No primeiro caso, foi verificado que, para a geometria e parâmetros do escoamento utilizados, o efeito do aquecimento do polímero é muito pequeno, apesar da alta taxa de deformação cisalhante que ocorre junto à seção de contração. Neste sentido, verificou-se algum aumento de temperatura próximo às paredes sem, entretanto, impor virtualmente qualquer efeito significativo na região central de escoamento. Por outro lado, a diminuição da espessura do canal do ataque (ou seja, o aumento da razão de contração) é recomendada por questões estéticas ao facilitar a separação do componente. Entretanto, os resultados da simulação mostram que o aumento da contração causa um grande aumento na queda de pressão no canal. Esta queda de pressão implica em um aumento da pressão de injeção que, por sua vez, acarreta custos adicionais no aumento da potência empregada na injeção e no fechamento do molde.

5. AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi parcialmente apoiado pelo CCT/UEDESC através do projeto 1061/2008. O co-autor Allan P.C. Dias reconhece o apoio financeiro provido pelo programa PROBIC/UEDESC.

6. REFERÊNCIAS

- Bao, W., 2003, "An economical finite element approximation of generalized Newtonian flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 191, pp. 3637-3648.
- Binding, D.M., Phillips, P.M., Phillips, T.N., 2006, "Contraction/expansion flows: The pressure drop and related issues", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 137, 31-38.
- C-Mold, 1998, "Design Guide. A Resource for Plastic Engineers", Advanced CAE Technology Inc., Ithaca.
- Hieber, C.A., Shen, S.F., 1980, "A finite-element / finite-difference simulation of the injection-moulding filling process", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 7, pp.1-32, 1980.
- Missirlis, K.A., Assimacopoulos, D., Mitsoulis E., 1998, "A finite volume approach in the simulation of viscoelastic expansion flows", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 78, pp. 91-118.
- Moldflow, 1995, "Material Testing Overview", Moldflow Corporation, Wayland.
- Pinho, F.T., Oliveira, P.J., Miranda, J.P., 2003, "Pressure losses in the laminar flow of shear-thinning power-law fluids across a sudden axisymmetric expansion", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 24, pp. 747-761.
- Tomé, M.F., Mangiavacchi, N., Cuminato, J.A., Castelo, A., McKee, S., 2002, "A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol.106, pp.61-106.
- Vaz Jr., M., Zdanski, P.S.B., 2007, "A fully implicit finite difference scheme for velocity and temperature coupled solutions of polymer melt flow", *Communications in Numerical Methods in Engineering*, Vol. 23, pp. 285-294.
- Wachs, A., Clermont J.-R., Khalifeh, A., 2002, "Computations of non-isothermal viscous and viscoelastic flows in abrupt contractions using a finite volume method", *Engineering Computations*, Vol. 19, pp. 874-901.
- Zdanski, P.S.B., Vaz Jr., M., 2006, "Polymer melt flow in plane channels: effects of the viscous dissipation and axial heat conduction", *Numerical Heat Transfer Part A: Applications*, Vol. 49, pp. 159-174.
- Zdanski, P.S.B., Vaz Jr., M., 2006, "Polymer melt flow in plane channels: hydrodynamic and thermal boundary layers", *Journal of Materials Processing Technology*, Vol. 179, pp. 207-211.
- Zdanski, P.S.B., Vaz Jr., M., Inácio, G.R., 2008, "A finite volume approach to simulation of polymer melt flow in channels Finite volume approach", *Engineering Computations*, Vol. 25, pp. 233-250.

7. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.

NUMERICAL SIMULATION OF POLYMER MELT FLOW IN SUDDEN CONTRACTIONS

Paulo S B Zdanski, zdanski@joinville.udesc.br¹
Miguel Vaz Júnior, M.Vaz@joinville.udesc.br¹
Allan P C Dias, Allan@yahoo.com.br¹

Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Campus Universitário Avelino Marcante, Bairro Bom Retiro, Cep.: 89230-100 – Joinville SC¹

***Abstract:** Analysis of polymer melt flow in channels presents a direct application to industrial manufacturing processes, such as injection moulding; in addition, such problems have attracted considerable attention from the scientific community in the last years. Within this context, the present work is focused on the analysis of steady state polymer melt flow in plane channels with sudden contractions (abrupt cross-section reduction). This geometry is a first approximation to typical gates in injection moulding. Amongst the main aspects, this class of flows presents high viscosity with potential for significant viscous heating and high pressure loss. This work presents a computational analysis of this problem based on a coupled solution of the mass, momentum and energy conservation equations. The generalised Newtonian approach is used in the simulations in conjunction with a temperature-dependent constitutive relation based on the Cross equation. The flow regime is laminar and incompressible. The finite difference method is used to discretise the governing equations. The results indicate that the contraction ratio affects important flow parameters such as pressure variations inside the channel and, to a lesser extent, viscous heating.*

***Keywords:** Injection moulding, Sudden contraction, Numerical simulation*