

Análise Numérica das Propriedades Reológicas dos Polímeros Fundidos em Expansões Repentinhas

Numerical Analysis of the Rheological Properties of Polymers Melted in Sudden Expansions

Jaqueline Fontana^{*a}; Diego Alves de Miranda^a; Vanderlei da Silva^b; Anderson de Carvalho Fernandes^b; Angelo Reck Neto^b; Cristiane Luiza Salazar Garcia^b

^aUniversidade da Região de Joinville. SC, Brasil.

^bFaculdade Senai Joinville. SC, Brasil

*E-mail: jaquelinefontana@yahoo.com.br

Resumo

O estudo de simulação numérica sobre reologia de polímeros fundidos vem evoluindo de acordo com o aperfeiçoamento dos softwares e hardwares. Analisar o comportamento reológico destes polímeros é de suma importância principalmente no setor automobilístico, que procura sempre substituir os materiais mais pesados por materiais mais leves. O presente trabalho tem como objetivo analisar numericamente o comportamento das variáveis temperatura, velocidade, queda de pressão e viscosidade do Polióxido de Metileno, tratado no problema como um fluido não-Newtoniano e incompressível, durante um processo de expansão abrupta, caso processo bem comum na transformação de injeção de termoplásticos. Para obtenção dos resultados desejados foi realizada uma simulação numérica tendo como embasamento teórico as equações de Navier-Stokes para continuidade, momento e energia e o modelo de viscosidade de Cross – WLF considerando o estado estacionário. O método de volumes finitos foi utilizado para a discretização das equações de governo e o método de adimensionalização foi definido para comparar as curvas dos perfis de temperatura, velocidade e viscosidade obtidos e comparando com outros autores. As simulações demonstraram-se satisfatórias e o modelo de viscosidade conseguiu ser validado.

Palavras-chave: Fluido não-Newtoniano. Injeção de Plásticos. Simulação Numérica.

Abstract

The study of numerical simulation on fused polymer rheology has been evolving in line with the improvement of software and hardware. Analyzing the rheological behavior of these polymers is of paramount importance especially in the automotive sector, which always seeks to replace heavier materials with lighter materials. The present work aims to numerically analyze the behavior of the variables temperature, speed, pressure drop and viscosity of Methylene Polyoxide, treated in the problem as a non-Newtonian and incompressible fluid, during an abrupt expansion process, a very common process in injection processing of thermoplastics. In order to obtain the desired results, a numerical simulation was performed with the theoretical basis of the Navier-Stokes equations for continuity, momentum and energy and the Cross - WLF viscosity model considering the steady state. The finite volume method was used to discretize the government equations and the dimensioning method was defined to compare the curves of the temperature, speed and viscosity profiles obtained and comparing with other authors. The simulations proved to be satisfactory and the viscosity model was able to be validated.

Keywords: Non-Newtonian Fluid. Plastic Injection. Numerical Simulation.

1 Introdução

A simulação numérica é muito utilizada em pesquisas de engenharia, pois permite que testes e análises sejam realizados sem a necessidade de um protótipo ou corpo de prova, reduzindo assim os custos do estudo. Diversos estudos semelhantes abordando a simulação do processo de injeção plástica já foram realizados. Podemos citar como exemplo alguns trabalhos, como o de Hassan et al. (2008) que abordou a dissipação viscosa no processo de injeção através de uma simulação utilizando como materiais o poliestireno e o polipropileno, os autores obtiveram gráficos demonstrando a quantidade de calor adicionada ao polímero devido à dissipação viscosa em diferentes partes do canal. Outro trabalho focado na simulação do preenchimento de molde é o de Zhou, et al. (2016), nele os autores estudaram os efeitos do

peso molecular e tamanho da cavidade no processo de nano-injeção e seus resultados demonstraram que de fato há uma dependência entre o peso molecular e o tamanho da cavidade na qualidade da etapa de preenchimento do molde.

Já o trabalho de Zhuang et al. (2016) estuda as tensões induzidas pelo fluxo durante o preenchimento de molde com um fluido viscoelástico, em seu trabalho os autores concluíram que os fatores que mais influenciam as alterações de tensão são a temperatura de fusão e a velocidade de injeção. Guerrier et al. (2016) realizam um comparativo entre os resultados obtidos para preenchimento de molde através da simulação numérica e através da efetiva realização do preenchimento em um molde de vidro, como resultados os autores obtiveram os desvios de tempo entre o processo real e o simulado comparando a frente de escoamento.

As características e objetivos específicos dos estudos

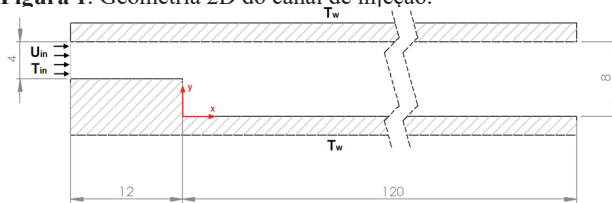
de simulação numérica da injeção plástica diferem entre si, porém o objetivo geral de qualquer um deles é o entendimento, análise e aperfeiçoamento deste processo de fabricação altamente utilizado nas indústrias. Neste contexto, o presente trabalho realizou uma simulação numérica da etapa de preenchimento do molde via expansão abrupta durante um processo de injeção plástica. O software escolhido para esta simulação foi o Ansys Fluent, as equações de governo são baseadas nas equações de Navier-Stokes para continuidade, momento e energia e o modelo de viscosidade utilizado é o de Cross – WLF, cujos dados termofísicos foram retirados dos estudos realizados por Tutar e Karakus (2013).

2 Material e Métodos

2.1 Condições de Contorno

Como neste estudo o problema selecionado foi a simulação do processo de injeção em uma expansão abrupta do Polióxido de Metileno (POM), tratado como fluido Não-Newtoniano incompressível, não isotérmico e em regime estacionário, dentro de um canal de injeção. As dimensões e temperaturas aplicadas para o canal foram padronizadas por Zdanski e Vaz Jr. (2009) conforme a Figura 1, diferenciando o modelo reológico de viscosidade que é adicionado a dependência da pressão, o qual serão confrontados os resultados para uma validação.

Figura 1. Geometria 2D do canal de injeção.



Fonte: Dados da pesquisa.

Na Figura 1 pode-se observar a geometria do canal de injeção, na entrada $h = 4$ mm e $H = 8$ mm, L_u é 12 mm e L_d com o valor de 120 mm. Para os valores de temperatura, representados pela letra T , temos T_w como a temperatura das paredes com um valor de 453 K e T_{in} representando a temperatura de entrada de 473 K. A simulação será realizada em ambiente 2D, sendo assim, no sistema de coordenadas cartesianas aparecem apenas os eixos x e y , sendo x para o comprimento e y para a altura. Na Figura 1 também está representado o local de entrada do fluxo do fluido, através da sequência de flechas horizontais na parte esquerda. A velocidade de entrada, U_{in} , foi assumida como constante em 0,06 m/s. A ferramenta utilizada na execução da simulação numérica foi o Ansys Fluent.

2.2 Desenho da Geometria e Refino da Malha

As primeiras fases da simulação realizadas dentro do software Ansys foram o desenho do canal de injeção (Figura 1) e a criação e refino de uma malha de simulação estruturada onde $\Delta x = \Delta y$. Esta malha de simulação foi refinada até que

Δx e Δy estivessem com 0,25 milímetros. Ao finalizar este processo a malha, apresentada na Figura 2, possuía 16689 nós e 16128 elementos.

Figura 2 - Vista ampliada da malha de simulação utilizada.



Fonte: Dados da pesquisa.

Na Figura 2 observa-se que quanto maior o refino da mesma mais precisa será nossa simulação. De acordo com Miranda (2018), a malha estruturada confronta bem os resultados obtidos em injeção de polímeros. Com esta etapa finalizada é possível prosseguir para os ajustes das configurações de simulação.

2.3 Configurações e Execução da Simulação

As informações inseridas no software foram um fluido em estado estacionário, e as propriedades termofísicas aplicadas para o fluido Polióxido de Metileno estão presentes no Quadro 1 na coluna “Valor C – WLF”.

Quadro 1 - Propriedades utilizadas para a simulação do Polióxido de Metileno (POM).

Propriedade	Cross - WLF	Cross	Modif. Arrhenius	Unidades
Densidade	1149.27	1143.90	1198.00	Kg/m ³
Calor Específico	2495.76	2420.00	3182.00	J/Kg.K
Condutividade Térmica	0.291	0.310	0.125	W/m.K

Fonte: Dados da pesquisa.

Os valores utilizados por Zdanski e Vaz Jr., (2009) serão confrontados, tais valores são representados pelas colunas “Valor C”, para o modelo de Cross, e “Valor A” para o modelo de lei de potências modificado por Arrhenius. Neste estudo considera-se que o polímero é um fluido não-Newtoniano. Sendo assim, equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia são respectivamente representadas pelas Equações 1, 2 e 3. Para estas equações, u é a velocidade, ρ para a massa específica, T para temperatura, η para viscosidade aparente, p para pressão, t para tempo, cp para calor específico, k para condutividade, e γ para a taxa de cisalhamento que está definida na Equação 4.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta(T, \dot{\gamma}) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho cpT)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho cu_i T)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \eta(T, \dot{\gamma}) \dot{\gamma}^2 \quad (3)$$

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2} \quad (4)$$

Onde u e v são os deslocamentos nas direções x e y .

Como a viscosidade deste estudo é variável, necessita-se de um modelo de viscosidade para realização da simulação, o modelo escolhido foi o de Cross – WLF, este modelo é uma versão mais completa do modelo original de Cross, pois leva em consideração a pressão além da viscosidade inicial, taxa de cisalhamento e da temperatura. Este modelo está apresentado na Equação 5 e sua a fórmula para cálculo da viscosidade inicial seria a Equação 6.

$$\eta(\dot{\gamma}, T, p) = \frac{\eta_0(T, p)}{1 + \left(\frac{\dot{\gamma} \cdot \eta_0(T, p)}{\tau}\right)^{(1-n)}} \quad (5)$$

$$\eta_0(T, p) = D_1 * \exp\left(\frac{-A_1 * (T - D_2 - (D_3 * T))}{A_2 + (T - D_2)}\right) \quad (6)$$

Nestas equações existem constantes cujos valores foram obtidos através do trabalho de Tutar e Karakus (2013) e são apresentados no Quadro 2.

Quadro 2 - Valores das constantes para POM no modelo de Cross – WLF.

Constante	Valor	Unidade
n	0.2315	
τ	215800	Pa
D1	3.87×10^{14}	Pa.s
D2	223.15	°C
D3	0	°C/Pa
A1	32.82	°C/Pa
A2	51.6	°C

Fonte: Dados da pesquisa.

Conforme anteriormente comentado, nossos resultados foram validados através da comparação com o trabalho de Zdanski e Vaz Jr. (2009) que utilizam modelos reológicos que dependem apenas da temperatura do polímero e da taxa de cisalhamento no escoamento. Sendo assim, para entender os cálculos destes outros modelos de viscosidade utilizados pelos autores, recomenda-se que os leitores realizem a leitura deste outro estudo.

As equações de massa, quantidade de movimento e energia são interpretadas automaticamente pelo software de simulação escolhido, no Ansys o novo modelo de viscosidade implementado foi programado em linguagem C, utilizando o software Dev C++, e importado para o ambiente de simulação do software. Sua validação foi realizada através do comparativo entre as curvas de velocidade e temperatura obtidas. Após essa importação, configurou-se o número de interações como 1000 e em seguida o software realizou os cálculos que finalizariam nossa simulação.

2.4 Adimensionalização dos Parâmetros Físicos

Para obter uma representação padronizada dos resultados, foram inseridas três linhas adimensionalizadas no eixo x representadas pelas Equações 7, 8 e 9.

$$\frac{x}{h} = 0,1 \quad (7)$$

$$\frac{x}{h} = 1,0 \quad (8)$$

$$\frac{x}{h} = 5,0 \quad (9)$$

Nestas expressões h é a altura de entrada. Em seguida foram inseridas as expressões de adimensionalização de outras propriedades que estão apresentadas nas equações a seguir, sendo a da temperatura a Equação 10, a da velocidade a Equação 11 e a do eixo y a Equação 12.

$$\theta = \frac{T - T_w}{T_{in} - T_w} \quad (10)$$

$$\vec{u} = \frac{u}{u_{in}} \quad (11)$$

$$\vec{y} = \frac{y}{h} \quad (12)$$

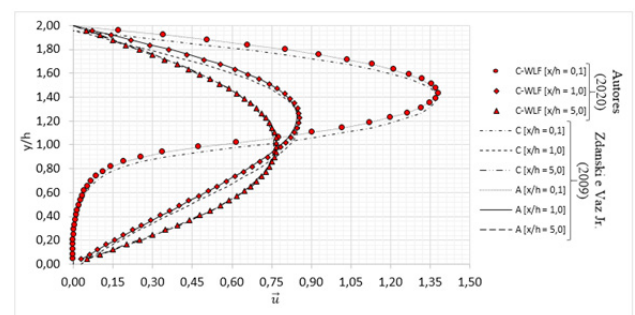
Para estas equações T é a temperatura em determinado ponto, T_w é a temperatura das paredes com um valor de 453 K, T_{in} é a temperatura inicial do fluido com um valor de 473 K, u a velocidade, u_{in} é a velocidade inicial (ou velocidade de entrada) de 0,06 metros por segundo, y seria o valor de deslocamento e de cada ponto.

3 Resultados e Discussão

3.1 Validação do Modelo de Viscosidade

A validação do nosso modelo de viscosidade foi obtida através da comparação dos perfis de velocidade e temperatura com as curvas de Zdanski e Vaz Jr. (2009) que utilizaram modelos de viscosidade que dependiam apenas da temperatura e da taxa de cisalhamento. Os perfis de velocidade da Figura 3 foram gerados com aplicação das Equações 7, 8, 9, 11 e 12. Na Figura 3 fica claro que os três modelos de viscosidade possuem velocidades quase iguais, isso se deve ao fato da velocidade de entrada (u_{in}) utilizada para as três simulações ser a mesma no valor de 0,06 m/s. É interessante notar também que nas curvas iniciais ($x/h = 0,1$) a velocidade é maior, pois como o material ainda está no início de sua solidificação os valores de sua viscosidade são mais altos do que os das curvas subsequentes.

Figura 3 - Perfis de velocidade obtidos pelos modelos de viscosidade de Cross, relação de Arrhenius corrigida e Cross – WLF.



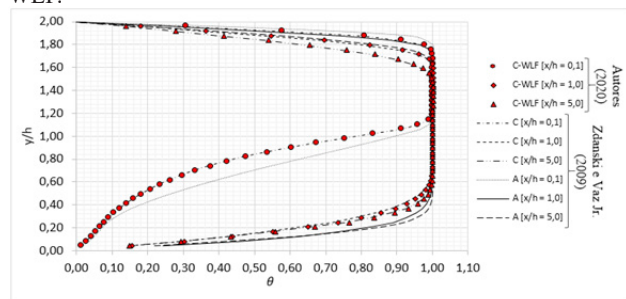
Fonte: Dados da pesquisa.

A seguir, os perfis de temperatura do processo representados na Figura 4 foram calculados utilizando as Equações 7, 8, 9, 10 e 12.

No caso da temperatura de simulação deste estudo, foram exatamente iguais aos de Cross, isso ocorre pelo modelo de viscosidade Cross – WLF ser baseado no modelo de

Cross. Nestes perfis a velocidade do polímero é menor nas extremidades pois é onde o processo de solidificação se inicia devido à troca de calor do material com as paredes do canal.

Figura 4 - Perfis de temperatura obtidos pelos modelos de viscosidade de Cross, relação de Arrhenius corrigida e Cross – WLF.



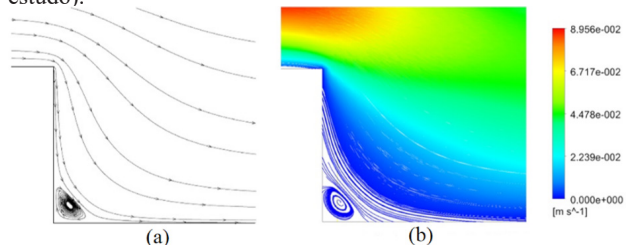
Fonte: Dados da pesquisa.

Observando as Figuras 3 e 4 e comparando a similaridade dos resultados de nosso modelo com os de Cross e Arrhenius podemos considerar o modelo de Cross – WLF foi validado.

3.2 Resultados da Expansão Abrupta com o Modelo de Cross – WLF

Como resultados das simulações obtivemos os perfis de velocidade e temperatura apresentados, além da viscosidade e pressão que serão apresentadas nesta seção. A partir dos perfis resultantes conseguiu-se uma melhor compreensão do processo de injeção plástica analisado. Um ponto importante que se pode salientar é a formação de um pequeno vórtice no fluxo do fluido no canto inferior do canal de injeção, este mesmo comportamento já foi observado na simulação de Zdanski e Vaz Jr. (2009) utilizando o modelo de viscosidade da relação de Arrhenius corrigida, como apresentado no comparativo da Figura 5.

Figura 5 - Linhas de corrente obtidos pelos modelos de (a) Arrhenius (Zdanski e Vaz Jr., 2009). (b) Cross – WLF (Presente estudo).

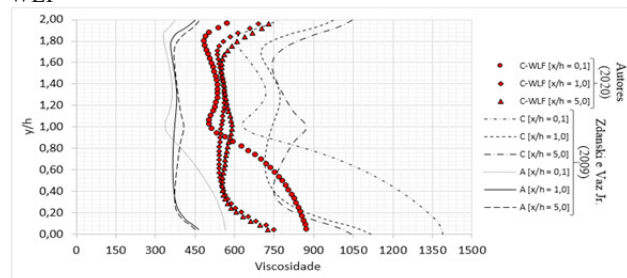


Fonte: Dados da pesquisa.

A partir das linhas de corrente gerada na Figura 5, observa-se o vórtice gerado pelo não deslocamento do material, tal comportamento ocorre devido à uma alta viscosidade do material aquecido. Esse acúmulo de material é indesejado pois pode acarretar problemas ao produto final, como descolamentos, bolhas e até mesmo o entupimento do molde devido à rápida solidificação daquela região. No perfil de temperatura (Figura 4), a influência do vórtice está presente nos resultados, pois ele é o responsável pelo aumento significativo de velocidade observado na parte inferior das

curvas próximas ao início do canal de injeção, representadas por $x/h = 0,1$. Nos perfis de viscosidade deste estudo, presentes na Figura 6, pode-se observar o aumento de viscosidade que ocasionou a formação do vórtice, nas curvas onde $x/h = 0,1$ têm-se o aumento da viscosidade próximo à parede inferior para os três modelos, neste ponto encontra-se a formação do vórtice apresentado na Figura 5.

Figura 6 - Perfis de viscosidade obtidos pelos modelos de viscosidade de Cross, relação de Arrhenius corrigida e Cross – WLF

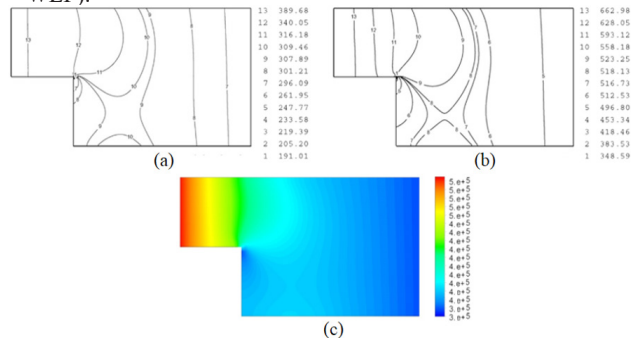


Fonte: Dados da pesquisa.

Na Figura 6 nota-se também que a presente simulação obteve um resultado intermediário entre os dois modelos de viscosidade de Cross e Arrhenius e apresenta valores de viscosidade variando entre 486 Pa.s e 878 Pa.s para os três perfis extraídos pelo modelo de Cross – WLF. Nas extremidades de todas as curvas há um leve aumento da viscosidade devido às baixas velocidades relacionadas ao resfriamento pela proximidade com as paredes do canal, esta variação de velocidade é observada nos perfis presentes na Figura 3.

O último fator de análise é um comparativo entre as distribuições de pressão obtidas pelos três modelos de viscosidade, tal comparativo está presente na Figura 7.

Figura 7 - Distribuições queda de pressão obtidas pelos modelos de viscosidade de Arrhenius (A), Cross (C), e Cross – WLF (C – WLF).



Fonte: Dados da pesquisa.

Nos modelos de Cross (C) e Arrhenius (A), retirados do trabalho de Zdanski e Vaz Jr (2009), a escala de pressão está quantificada em kPa, enquanto neste estudo o modelo de Cross-Carreau – WLF (C – WLF) a escala está representada em Pa.

A análise da pressão é importante dentro da injeção plástica pois, segundo Miranda e Nogueira (2019) pressões de

injeção apropriadas influenciam na qualidade do produto e na energia gasta pelo processo. A presente simulação novamente apresenta um resultado intermediário entre os valores dos outros modelos, isto se deve ao fato de que os parâmetros que mais influenciam a alteração da pressão são a temperatura e viscosidade do material e nossos perfis para estas propriedades já apresentaram valores menores, ou similares no caso da temperatura, do que os do modelo de Cross e maiores do que o de Arrhenius.

4 Conclusão

O processo de injeção em uma expansão abrupta do Polióxido de Metileno fundido foi analisado através de uma simulação numérica realizada com o auxílio do software Ansys. As equações de governo utilizadas foram baseadas nas Equações de Navier-Stokes e a implementação de um novo modelo de viscosidade (Cross – WLF) foi executada. Quando comparados os resultados presentes no trabalho e de outros autores, representou-se uma grande vantagem no quesito de validação de resultados, pois através de uma análise de similaridade entre os trabalhos pôde-se garantir a veracidade dos resultados das simulações, alcançando assim o objetivo proposto para este trabalho.

Quanto à análise dos perfis do processo de injeção plástica, um resultado importante que pode ser destacado é a grande influência da viscosidade e temperatura do material no processo, pois altas viscosidades e temperaturas podem gerar vórtices dentro do canal de injeção, como foi o caso no problema simulado, tais vórtices podem gerar diversos problemas de qualidade dentro das peças produzidas. Outra grande influência destas propriedades aparece na pressão de trabalho, pois quanto menores forem os valores de viscosidade e temperatura maior a dificuldade no preenchimento completo do molde, o que irá requerer uma elevada pressão de injeção para que o material consiga se expandir totalmente antes que sua solidificação se inicie.

Referências

- GUERRIER, P.; TOSELLO, G.; HATTEL, J.H. Flow visualization and simulation of the filling process during injection molding. *CIRP J. Manufacturing Scie. Technol.*, v.16, p.12-20, 2017.
- HASSAN, H. et al. Effect of cooling channels position on the shrinkage of plastic material during injection molding. In: *CONGRÈS FRANÇAIS DE MÉCANIQUE*, 6p, Marseille, France, Aug. 2009.
- MIRANDA, D.A. Influence of Mesh Geometry and Mesh Refinement on Mathematical Models of Thermoplastic Injection Simulation Tools. *IOSR J. Mechanical Civil Eng.*, v15, p.38-44. 2018.
- MIRANDA, D.A.; NOGUEIRA, A.L. Influência dos parâmetros de processo e da presença de saídas de gases na eficiência de moldes de injeção de peças em poliestireno cristal. In: *CONGRESSO BRASILEIRO DE POLÍMEROS – CBPOL*, Águas de Lindoia. 2017.
- MIRANDA, D.A.; NOGUEIRA, A.L. Simulation of an Injection Process Using a CAE Tool: assessment of operational conditions and mold design on the process efficiency. *Materials Res.*, v.22, n.2, p.1-16, 2019.
- MORAIS JR., S.R.; MIRANDA, D.A. Numerical analysis of the physical properties of the flow of molten polymers in grooved profiles. *Open Access Library J.*, v.6, e5179, 2019.
- SACCHELLI, C. M. et al. Simulação computacional da injeção de termoplásticos: comparação de ferramentas tipo CAE; In: *CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA DE FABRICAÇÃO*. Joinville, 2017.
- TUTAR, M.; KARAKUS, A. Computational modeling of the effects of viscous dissipation on polymer melt flow behavior during injection molding process in plane channels. *J. Manufacturing Scie. Eng.*, v.135, p.1-17, 2013.
- ZDANSKI, P.S.B.; VAZ JR., M. “Non-isothermal Polymer melt flow in sudden expansions. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v.161, p.42-47, 2009.
- ZHOU, M.; JIANG, B.; WENG, C. Molecular dynamics study on polymer filling into nano-cavity by injection molding. *Computational Materials Scie.*, v.120, p.36-42, 2016.
- ZHUANG, X. et al. New approach to develop a 3D non-isothermal computational framework for injection molding process based on level set method. *Chinese J. Chem. Eng.*, v.24, n.7, p.832-842, 2016.