

## 4

# ANÁLISE NUMÉRICA

### 4.1

#### Objetivos

A análise numérica foi realizada para avaliar o comportamento do escoamento nas geometrias utilizadas no reômetro, e verificar a adequabilidade dos modelos de Maxwell, Oldroyd-B e Phan Thien-Tanner (PTT) para descrever o comportamento mecânico da matriz de polipropileno.

Realizou-se apenas a análise numérica para o polipropileno puro, pois os modelos constitutivos atuais não preveem a presença e o comportamento das fibras de vidro no escoamento.

A análise numérica deste tipo de escoamento é de fundamental importância para o conhecimento dos processos industriais de processamento de polímeros, pois é possível prever o escoamento e corrigir eventuais falhas no processamento dos polímeros.

### 4.2

#### Modelagem Matemática

#### 4.2.1

##### Equações Governantes

A solução numérica foi obtida a partir das eqs.[4-1] e [4-2] que descrevem as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento, respectivamente, e são dadas por:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (4-1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \eta_s \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (4-2)$$

onde  $\mathbf{v}$  é o vetor velocidade,  $\rho$  é a massa específica do polímero,  $\eta_s$  é a viscosidade do solvente (Newtoniana),  $p$  é a pressão e  $\boldsymbol{\tau}$  é a contribuição polimérica do tensor extra-tensão. O tensor extra-tensão é determinado a partir da equação constitutiva, que deve ser resolvida de forma acoplada.

Três diferentes equações constitutivas foram usadas para modelar o comportamento mecânico do polipropileno, os modelos de Maxwell, Oldroyd-B e Phan Thien-Tanner (PTT).

O modelo de Maxwell é dado pela eq.[4-3]:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta \mathbf{D}, \quad (4-3)$$

onde  $\lambda_1$  é o tempo de relaxação do fluido e  $\eta$  a viscosidade do polímero. A derivada convectada superior de  $\boldsymbol{\tau}$  é descrita pela eq.[4-4]:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (4-4)$$

e o tensor taxa de deformação  $\mathbf{D}$  é dado pela eq.[4-5]

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (4-5)$$

A viscosidade elongacional prevista pelo modelo de Maxwell é apresentada pela eq.[4-6], onde nota-se a existência de pontos singulares,

$$\eta_E = 3\eta_0 \frac{1}{(1 + \lambda_1 \dot{\epsilon})(1 - 2\lambda_1 \dot{\epsilon})}. \quad (4-6)$$

O modelo de Maxwell é o modelo viscoelástico mais simples, onde é necessário um menor número de parâmetros reológicas do material. No entanto é um modelo de difícil convergência, em especial para altos números de Deborah ( $De$ ), sendo  $De$  uma grandeza adimensional definida pela razão entre o tempo de relaxação ( $\lambda_1$ ) do fluido e um tempo característico do escoamento. A figura 4.1 apresenta a curva da viscosidade elongacional prevista pelo modelo de Maxwell. Observa-se que o comportamento é qualitativamente diferente dos obtidos para o polipropileno nessa faixa de  $\dot{\epsilon}$ .

A eq.[4-7] descreve a equação constitutiva do modelo de Oldroyd-B:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = -\eta_0(\gamma_{(1)} + \lambda_2 \gamma_{(2)}). \quad (4-7)$$

sendo  $\lambda_1$  o tempo de relaxação,  $\eta_0$  é a viscosidade cisalhante,  $\lambda_2$  o tempo de retardo e  $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$  é a derivada convectada superior. O modelo de Oldroyd-B apresenta uma convergência melhor em comparação com o

modelo de Maxwell apesar de ser necessária a avaliação de outros parâmetros numéricos.

A eq.[4-8] apresenta a viscosidade elongacional prevista pelo modelo de Oldroyd-B:

$$\eta_E = 3\eta_0 \frac{1 - \lambda_2 \dot{\epsilon} - 2\lambda_1 \lambda_2 \dot{\epsilon}^2}{1 - \lambda_1 \dot{\epsilon} - 2\lambda_1^2 \dot{\epsilon}^2}, \quad (4-8)$$

onde  $\lambda_2 = \lambda_1 \cdot \eta_p / \eta$ . A viscosidade elongacional prevista é apresentada na figura 4.2. Nota-se que um comportamento qualitativo similar é observado aos resultados experimentais, mas os valores não são representativos.

A equação constitutiva para o modelo PTT é dado por [4-9]:

$$\exp \left[ \frac{\epsilon \lambda}{\eta_1} (\tau_1) \right] \tau_1 + \lambda \left[ \left( 1 - \frac{\xi}{2} \right) \frac{\nabla}{\tau_1} + \frac{\xi}{2} \frac{\nabla}{\tau_1} \right] = 2\eta_1 \mathbf{D}, \quad (4-9)$$

onde  $\lambda$  é o tempo de relaxação do fluido,  $\epsilon$  e  $\xi$  são propriedades do material que controlam respectivamente a viscosidade cisalhante e a viscosidade elongacional.

O modelo PTT preve uma viscosidade elongacional descrita pela eq.[4-10]

$$\eta_E = \eta_0 \frac{1 + \xi(2 - \xi)\lambda^2 \dot{\lambda}_2}{(1 + \Gamma^2 \dot{\gamma}^2)^{(1-n)/2}} \quad (4-10)$$

Já o modelo de Phan-Thien Tanner (PTT) apresenta um comportamento diferente, onde após um certo valor da deformação elongacional a viscosidade elongacional cresce continuamente como pode ser observado na figura 4.3. Além disso, o aumento do tempo de reaxação do material proporciona um aumento significativo da viscosidade elongacional. Este modelo é mais fácil de obter a convergência do problema, no entanto mais parâmetros são necessários para modelar o fluido analisado.

As figuras [4.1, 4.2 e 4.3] mostram que os modelos não descrevem claramente o comportamento da viscosidade elongacional do material. Considerando o modelo de Maxwell e Oldroyd-B, a provável explicação para este fato seria que tais modelos baseiam-se em uma viscosidade cisalhante constante (independente da taxa de deformação), e segundo os dados experimentais obtidos não é este o comportamento da viscosidade cisalhante do fluido. A partir desses resultados resolveu-se utilizar esses mesmos modelos de uma forma híbrida, ou seja, como os modelos consideravam uma viscosidade constante, variou-se a vazão de entrada e conseqüentemente o valor da viscosidade do modelo. Uma opção seria utilizar o modelo de White-Metzner, que é semelhante ao Oldroyd-B mas considera uma

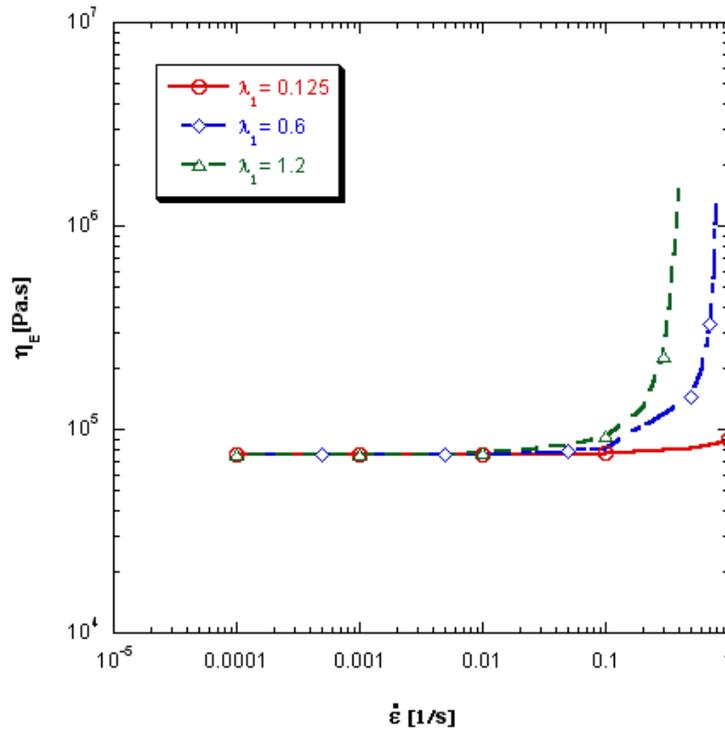


Figura 4.1: Viscosidade elongacional prevista pelo modelo de Maxwell.

viscosidade dependente da taxa de cisalhamento, no entanto não foi possível realizar esses testes devido a problemas de convergência causado pelos altos valores de número de De que foram trabalhados.

#### 4.2.2 Geometrias

Nas simulações foram consideradas duas geometrias diferentes, uma referente ao capilar axissimétrico cônico convergente e a outra referente ao capilar semi-hiperbólico, com Hencky strain igual a 7. A malha para as duas geometrias é apresentada na figura 4.4. Considerando  $L$  o comprimento do capilar,  $R_i$  o raio na entrada e  $R_o$  o raio na saída tem-se que para o capilar com geometria de entrada cônica,  $L = 20$  mm,  $R_i = 10$  mm e  $R_o = 0,5$  mm. Para a segunda geometria referente ao *Hencky strain* igual a 7, tem-se  $L = 25$  mm,  $R_i = 10$  mm e  $R_o = 0,61$  mm.

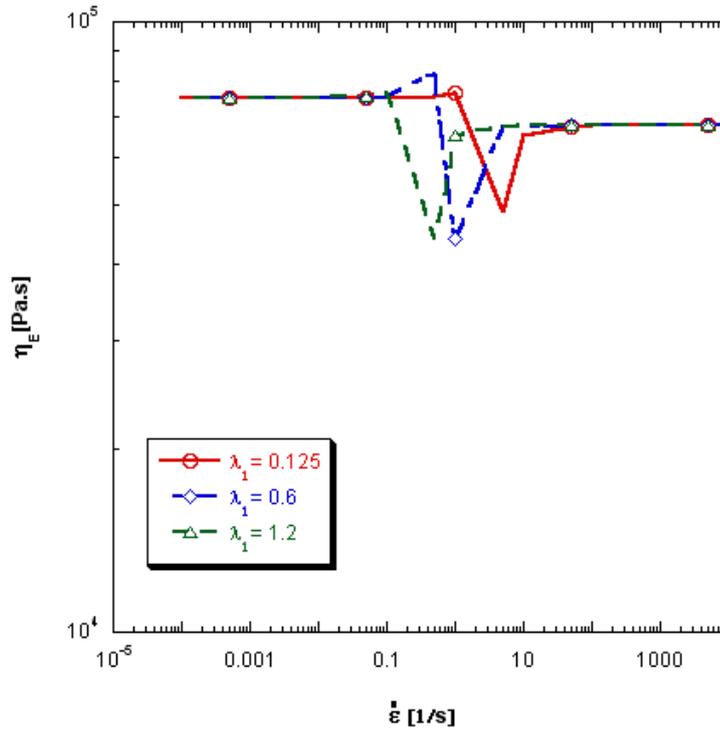


Figura 4.2: Viscosidade elongacional prevista pelo modelo de Oldroyd-B.

### 4.3 Condições de Contorno

No programa comercial Polyflow as condições de contorno padrão em cada seção do domínio são velocidade normal e tangencial nulas, com exceção para o eixo de simetria, quando o problema é axissimétrico.

As condições de velocidade normal e tangencial permitem a imposição de velocidade normal e tangencial em cada região do domínio computacional analisado, sendo  $v_n$  a componente normal e  $v_s$  a componente tangencial da velocidade. Em modelos 3D, a velocidade tangencial não é um escalar e sim um vetor com duas componentes.

A condição de simetria é equivalente a imposição de velocidade normal e tensão tangencial nula. Em escoamentos axissimétricos o eixo de simetria é automaticamente definido na posição  $r = 0$  pelo pré-processador Polydata e imposta a condição de simetria nesse contorno.

Na condição de deslizamento na parede, uma velocidade normal nula é imposta simultaneamente com uma das três relações implementadas que relacionam força cisalhante e velocidade tangencial relativa. Assim o cálculo para a força cisalhante pode ser descrita pela regra generalizada de Navier

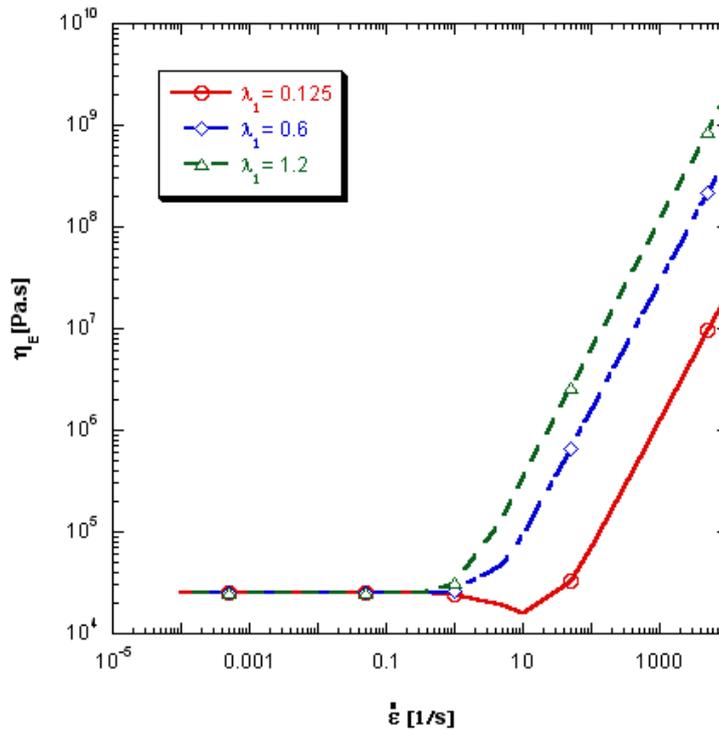


Figura 4.3: Viscosidade elongacional prevista pelo modelo PTT.

descrita pela eq.[4-11]:

$$f_s = F_{slip}(v_s - v_{wall}), v_s - v_{wall} < y_c/F_{slip} \quad (4-11)$$

onde  $F_{slip}$  e  $e_{slip}$  são parâmetros do material,  $v_s$  é a velocidade tangencial do fluido e  $v_{wall}$  é a velocidade tangencial na parede, que por padrão assume-se ser nula.

As condições de contorno impostas na simulação numérica foram, vazão na entrada, simetria ao longo da linha de centro, escoamento completamente desenvolvido na saída e condição de não deslizamento na parede. Para a geometria semi-hiperbólica foi feita uma simulação utilizando a condição de parede com deslizamento.

#### 4.4

##### Programa Polyflow

Foi utilizado o pacote comercial Polyflow (Ansys, Inc) para a solução das equações governantes. O programa de dinâmica dos fluidos computacional (CFD) Polyflow utiliza o método dos elementos finitos (FEM) como método de discretização espacial e foi desenvolvido

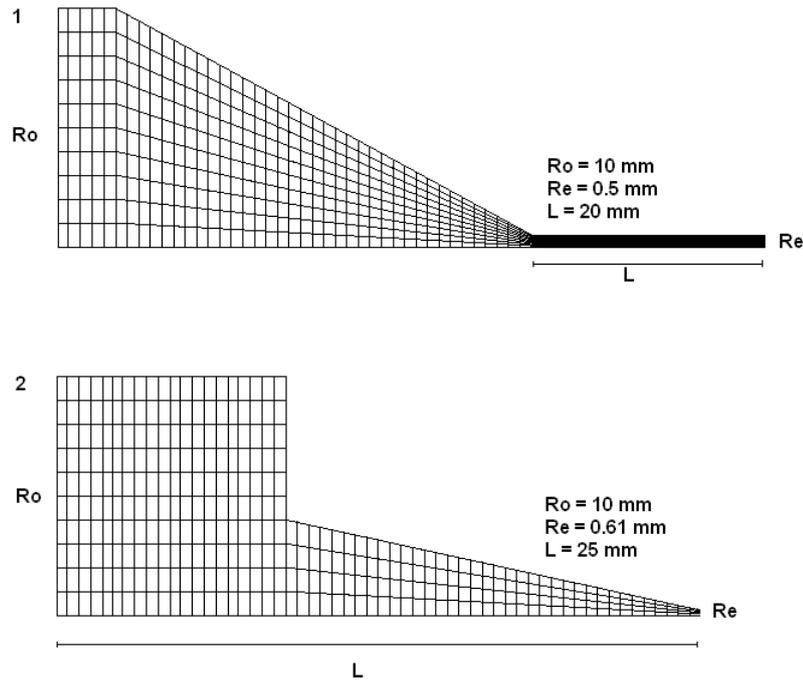


Figura 4.4: Domínio computacional da geometria cônica convergente e da geometria hiperbólica.

especialmente para a simulação de problemas envolvendo escoamentos viscosos e viscoelásticos, que abrangem uma série de processos industriais. A solução das equações governantes é obtida utilizando o esquema de *Newton-Raphson* onde é resolvida um sistema de equações acoplados, onde a tensão, velocidade e pressão são computados simultaneamente.

O esquema de evolução no tempo é uma importante ferramenta na solução de problemas não lineares, em especial escoamento em viscoelásticos. No caso de escoamentos viscoelásticos, o tempo de relaxação ( $\lambda$ ) é o parâmetro utilizado na evolução do tempo ou então a vazão volumétrica. No presente trabalho optou-se por utilizar o tempo de relaxação como parâmetro de evolução. Assim  $\lambda$ , o parâmetro responsável pela não linearidade, vale  $xS$  sendo  $S$  o parâmetro de evolução, que varia de 0 a 1. A solução inicial é  $xS = 0$  e  $S$  é incrementado por  $S' = S + \Delta S$ . Com isso um novo problema problema é criado com o parâmetro  $xS'$ . Caso a convergência tenha sido obtida, o procedimento continua usando um incremento de  $\Delta S_{next} = 1,5\Delta S$ . Se o problema divergir, retorna-se à solução anterior e o valor do incremento diminui para  $\Delta S_{next} = 0,5\Delta S$ . Cada passo possui um limite para o qual  $\Delta S$  pode ser incrementado.

No programa existem várias opções de função evolução, sendo que quanto mais sofisticada a função, mais parâmetros são necessários para

a sua utilização. Com o objetivo de simplificar os cálculos optou-se por utilizar uma função de evolução linear, e assim tem-se que  $f(S) = S$ . Para a solução da função de evolução, o programa dispõe de diferentes métodos de integração, entre eles o Euler implícito e os métodos de Galerkin e Crank-Nicolson. Nas simulações realizadas, utilizou-se Euler implícito como método de integração da função de evolução.

## 4.5

### Teste de malha

Um teste de sensibilidade de malha foi realizado para a geometria cônica. Foram testadas três malhas diferentes, uma primeira grosseira com 685 elementos quadrangulares, uma intermediária com 2760 elementos quadrangulares e uma última mais refinada com 6180 elementos quadrangulares. A diferença entre os resultados obtidos entre a malha intermediária e a malha refinada é inferior a 2%, como pode ser observado na figura 4.4 que apresenta o perfil de velocidade ao longo da linha de centro para cada uma das diferentes malhas.

O teste de malha foi realizado considerando uma vazão de  $0,589 \cdot 10^{-8} m^3/s$  que corresponde a uma taxa de deformação cisalhante de  $60 s^{-1}$ . O modelo constitutivo utilizado foi o de Oldroyd-B. Os parâmetros utilizados foram: tempo de relaxação ( $\lambda$ ) igual a 0,125 s, razão entre viscosidade do polímero e a viscosidade da solução ( $\beta$ ) igual a 0,9 e a viscosidade cisalhante ( $\eta_0$ ) igual a 25000 Pa.s. O tempo de relaxação de  $\lambda_1 = 0,125$  s foi determinado a partir dos testes transientes das funções materiais  $G'$  e  $G''$ , e corresponde ao maior tempo de relaxação do fluido, obtidos experimentalmente para a matriz de polipropileno em [11]. O modelo de interpolação utilizado foi um modelo quadrático para velocidade, pressão e tensão, e o método de integração usado foi o Euler implícito.

A figura 4.5 apresenta as curvas referentes as malhas M1, M2 e M3 (malhas grosseira, intermediária e refinada respectivamente), para a velocidade do escoamento na linha de centro do capilar. Para facilitar o entendimento, os dados foram adimensionalizados. Assim a coordenada  $x$  foi adimensionalizada com o raio de saída do capilar ( $R_0$ ) e o campo de velocidade com a velocidade na saída do escoamento. Observa-se que a velocidade no início do escoamento é relativamente baixa, ocorrendo um aumento da mesma na região da contração e sendo máxima na saída do escoamento. Além disso, traçou se o perfil de velocidades na posição  $y$  igual

a 0,015 m, sendo esta uma região no capilar próxima a saída. A figura 4.6 apresenta as curvas obtidas.

A figura 4.7 apresenta a pressão adimensional, dada por  $C = \frac{\Delta P}{2\tau_w}$ , onde  $\Delta P = P - P_0$  é a queda de pressão, sendo  $P_0$  uma pressão de referência, e  $\tau_w$  é a tensão cisalhante na parede do capilar. Além disso, fez-se curvas da primeira diferença de tensões normais ( $\tau_{11} - \tau_{22}$ ) ao longo de  $x$  para duas coordenadas de  $y$ , a primeira anterior a contração em  $y$  igual a 0,041 m e a segunda próxima a saída do capilar em  $y$  igual a 0,015 m. A figura 4.8 apresenta a diferença de tensões normais para a posição  $y$  igual a 0,041 m. Observa-se que a tensão é mínima no centro do capilar e nula na parede. A figura 4.9 apresenta a primeira diferença de tensões normais para a posição  $y$  igual a 0,015 m.

Finalmente, a malha 2 foi escolhida por apresentar resultados muito próximos da malha refinada, e observando-se que a malha 1 apresenta diferenças maiores em algumas regiões.

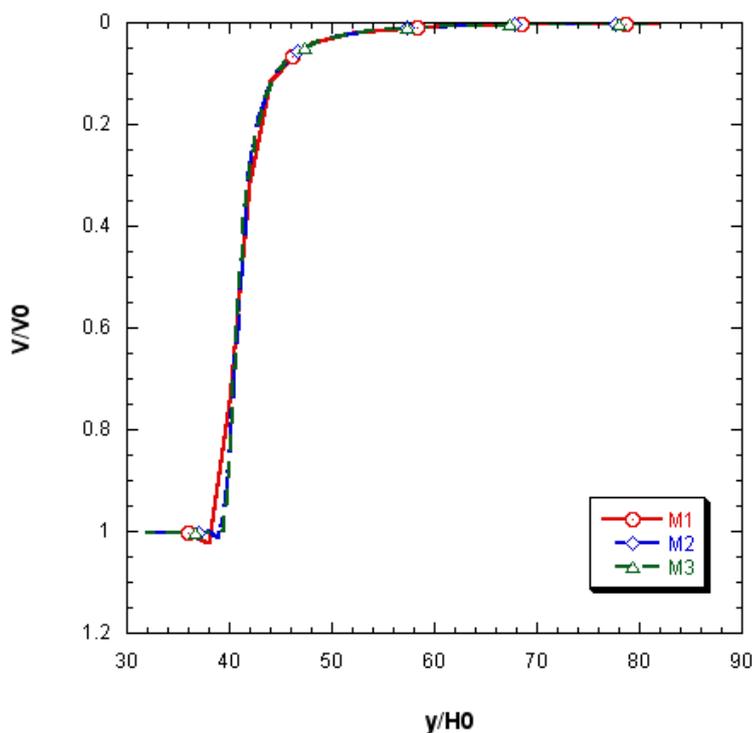


Figura 4.5: Teste de malhas.

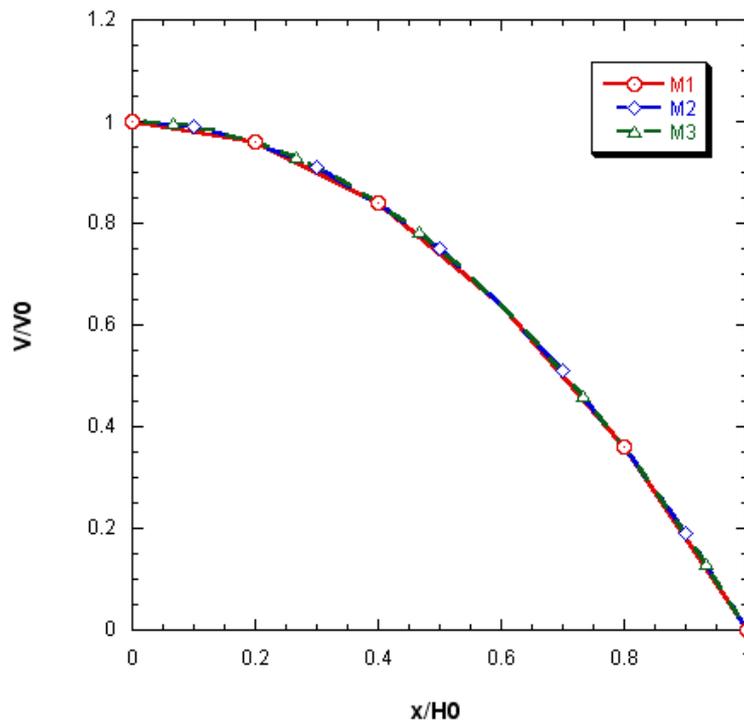


Figura 4.6: Perfil de velocidade na posição  $y = 0,015$  m.

## 4.6 Resultados

As figuras 4.10, 4.11 e 4.12 apresentam os campos de velocidade, pressão e da primeira diferença de tensões normais para os modelos viscoelásticos de Maxwell, Oldroyd-B e PTT respectivamente. Nesses casos utilizou-se o parâmetro  $\eta_0$  igual a um valor constante (25000 Pa.s). No entanto ao utilizar esse valor constante os resultados obtidos não são satisfatórios porque a viscosidade cisalhante do fluido apresenta um comportamento *Power Law*. Os casos apresentados correspondem a vazão de  $2,95 \times 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$  para o modelo de Maxwell, que é o valor máximo que se obteve a convergência, já para os modelos de Oldroyd-B e PTT esse valor foi de  $9,33 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$  e  $9,82 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$  respectivamente. Para o campo de velocidades, observa-se que há um aumento da velocidade na região convergente do escoamento. O campo de pressão tem seu valor máximo na região que precede o canal convergente. Esse valor da queda de pressão não foi satisfatório ao compará-lo com os valores de queda de pressão medidos pelo reômetro. A causa para esse problema é a utilização da viscosidade  $\eta_0$  igual a constante. será mostrado a seguir que quando considera-se essa viscosidade variável os valores de queda de pressão são satisfatórios. O

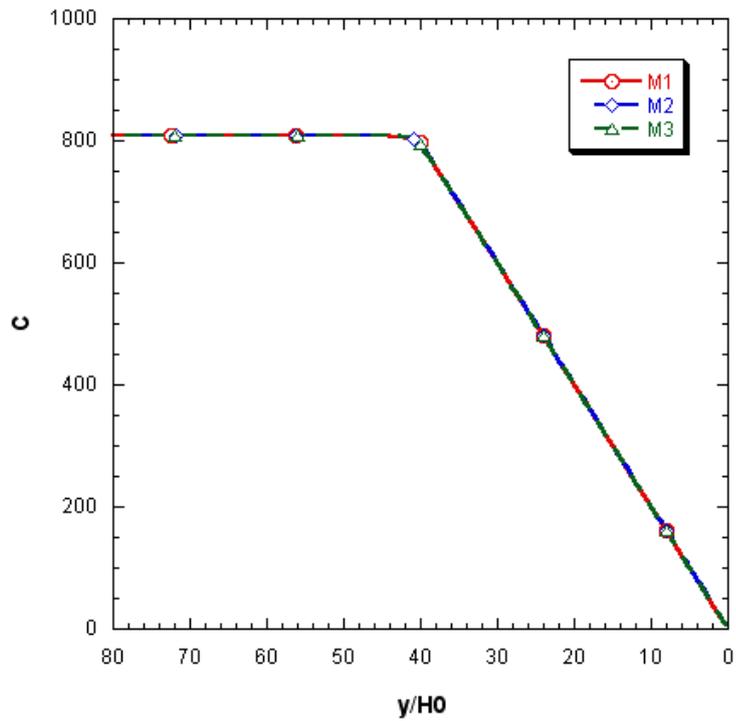


Figura 4.7: Pressão adimensional na linha de centro.

campo de diferença de tensões normis tem seu valor máximo na região central do escoamento e há uma diferença considerável ao comparar os resultados obtidos para os diferentes modelos.

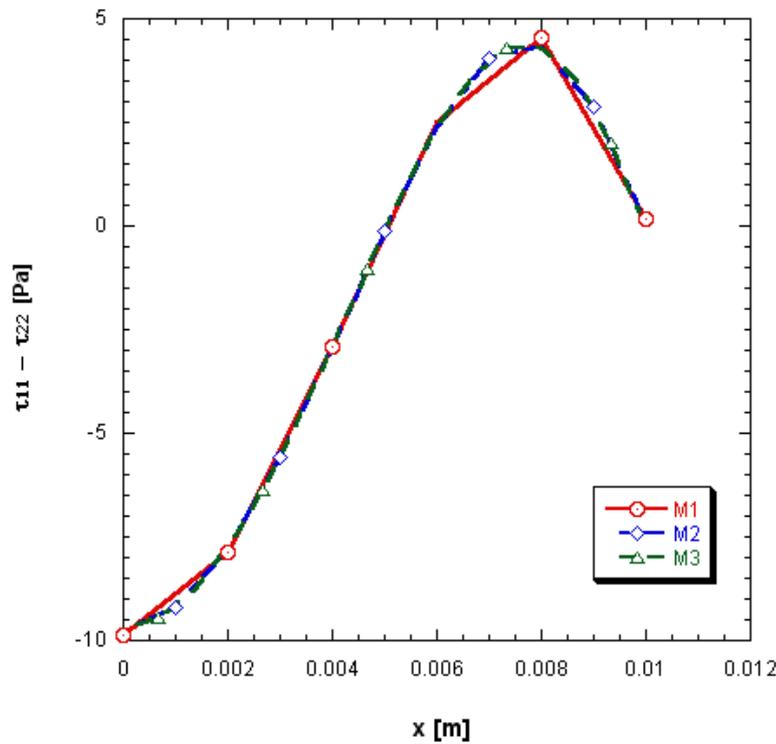


Figura 4.8:  $\tau_{11} - \tau_{22}$  na posição  $y = 0,041$  m.

As figuras 4.13, 4.14 e 4.15 apresentam os campos de velocidade, pressão e da primeira diferença de tensões normais para os modelos viscoelásticos de Maxwell, Oldroyd-B e PTT respectivamente. Nesses casos utilizou-se o parâmetro  $\eta_0$  igual a um valor variável de acordo com a taxa de deformação e a vazão. Para os modelos de Maxwell o valor máximo de vazão que se conseguiu obter convergência foi de  $2,95 \times 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$ , que corresponde a um valor de taxa de deformação cisalhante de  $30 \text{ s}^{-1}$  e um número de Deborah (que é a razão entre  $\lambda/t$ ) de 3,75. Para o modelo de Oldroyd-B este  $De=11,9$  ( $9,33 \times 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$ , que corresponde a um valor de taxa de cisalhamento de  $95 \text{ s}^{-1}$ ). O modelo PTT foi o que melhor obteve-se a convergência e para um maior  $De$ , igual a 12,5 que corresponde a  $9,82 \times 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$ , que corresponde a um valor de taxa de deformação cisalhante de  $100 \text{ s}^{-1}$ . Observa-se que o campo de velocidades é igual ao campo de velocidades ao considerar a viscosidade constante. Nesses casos obteve-se um campo de pressão com valores mais próximos dos valores medidos pelo reômetro. Na primeira diferença de tensões normais, o valor máximo encontra-se no centro do escoamento.

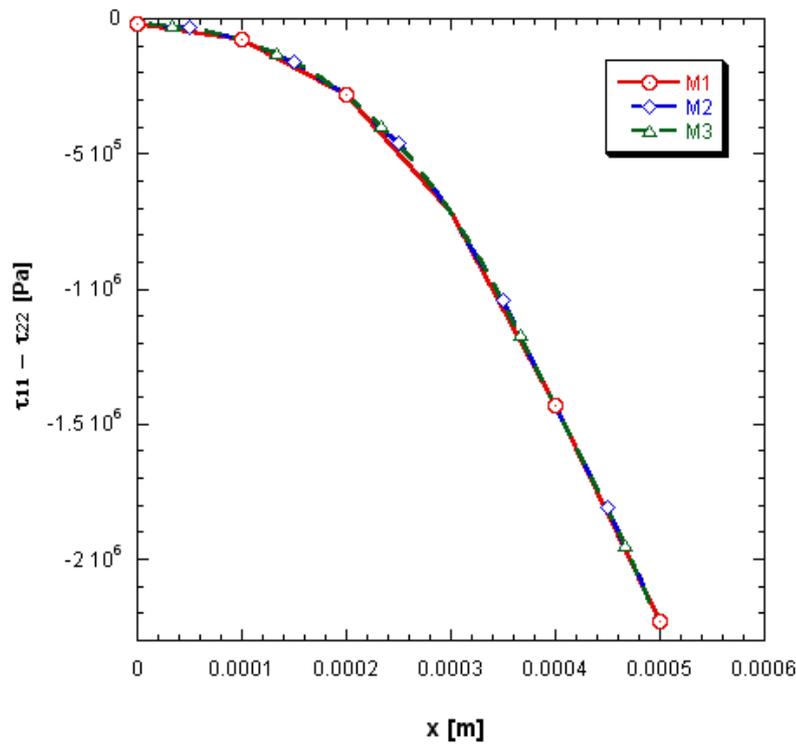


Figura 4.9:  $\tau_{11} - \tau_{22}$  na posição  $y = 0,015$  m.

Os campos de velocidade, pressão e primeira diferença de tensões normais para a geometria semi-hiperbólica (strain 7) é apresentado na figura 4.16. Nota-se que a velocidade do escoamento é nula em praticamente todo o escoamento. A pressão é mínima na saída do escoamento e a primeira diferença de tensões normais diminui próximo a saída do capilar. Para a geometria semi-hiperbólica utilizando a condição de deslizamento na parede tem-se um comportamento similar ao comportamento utilizando a condição de não deslizamento na parede, como é apresentado na figura 4.17.

Os casos utilizando a geometria semi-hiperbólica foram os mais difíceis de obter-se a convergência, em especial o caso utilizando a condição de deslizamento na parede. O tempo de CPU requerido nesses casos foi de 3517 s. Todos os outros casos simulados o tempo foi relativamente inferior, ficando próximo de 1000 s.

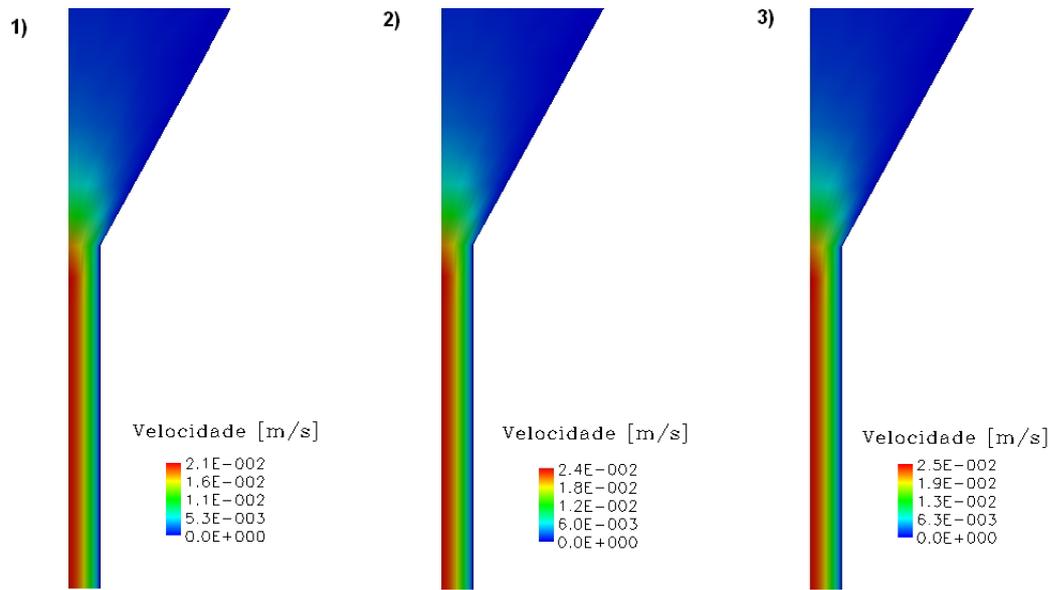


Figura 4.10: Campo de velocidade.

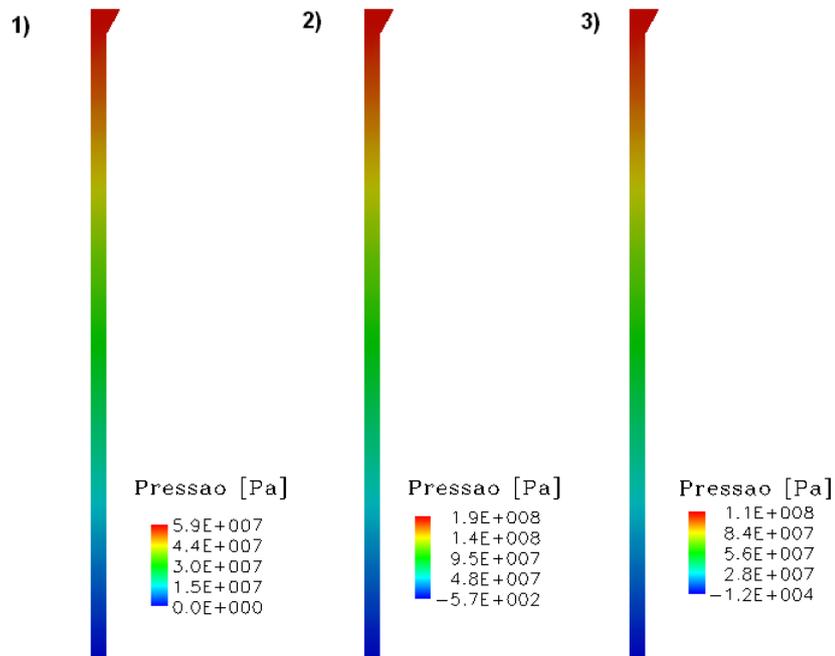


Figura 4.11: Campo de pressão.

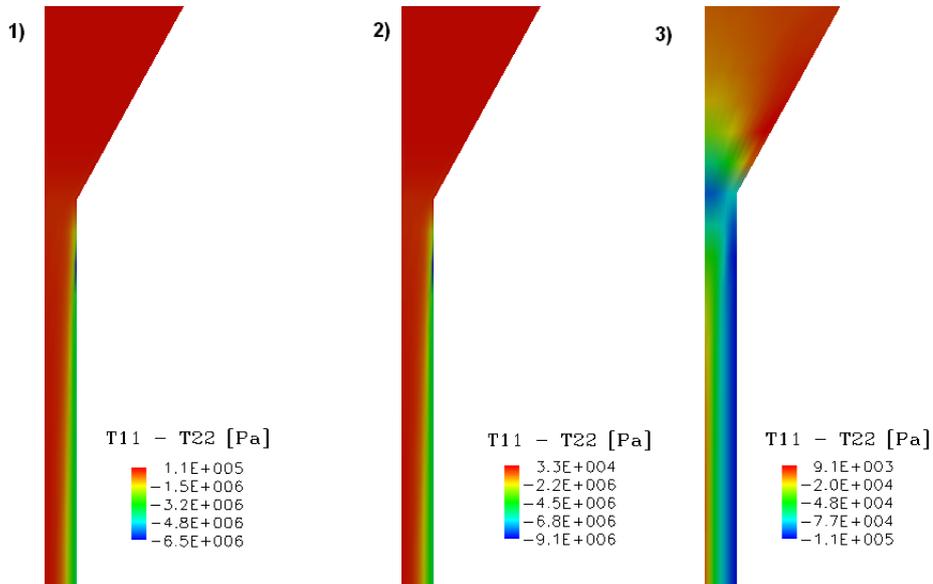


Figura 4.12: Diferença de tensões normais.

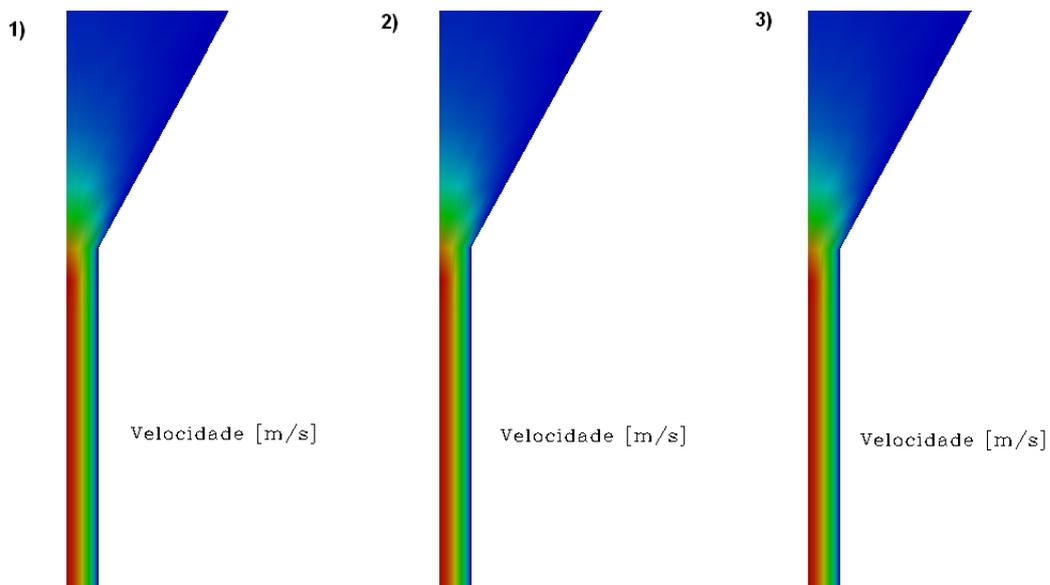


Figura 4.13: Campo de velocidade.

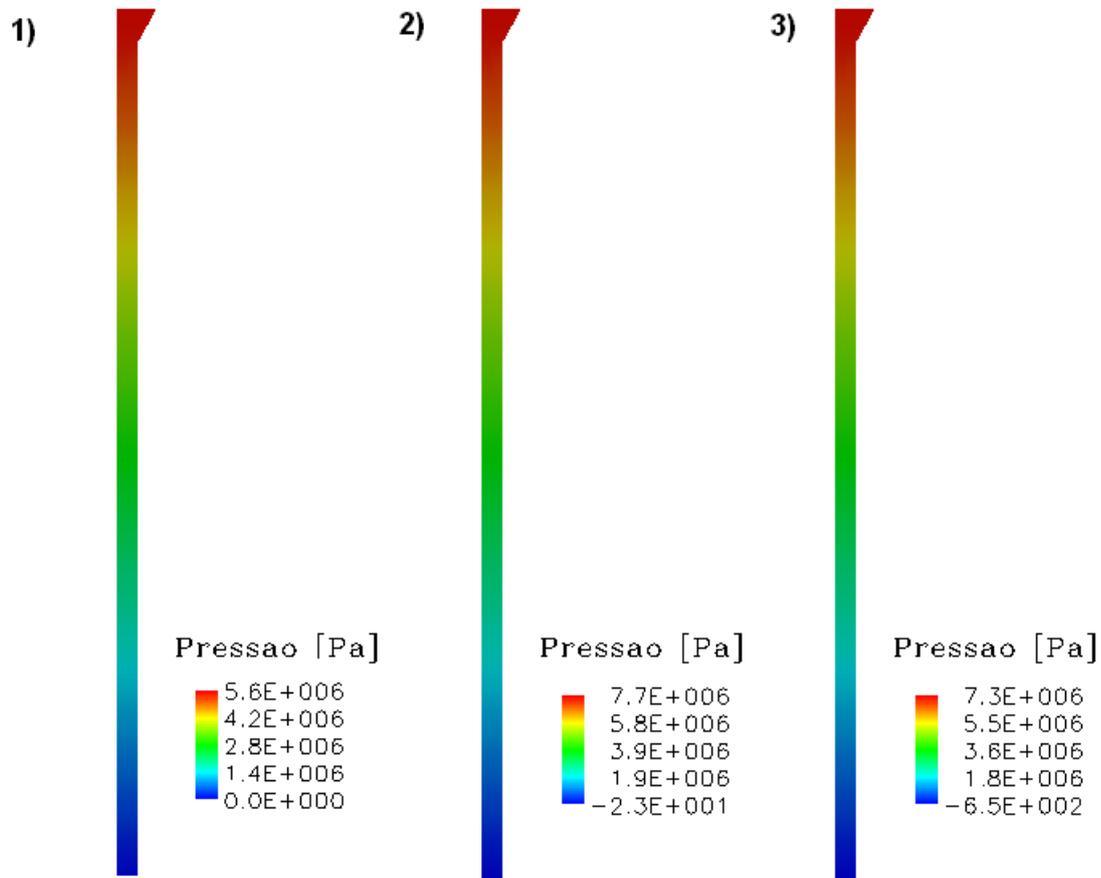


Figura 4.14: Campo de pressão.

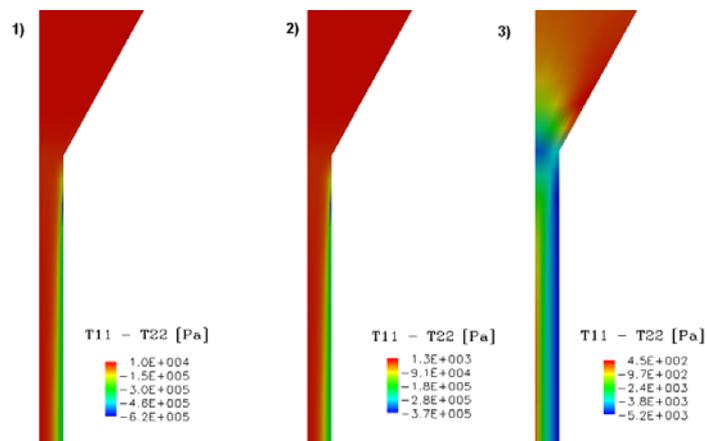


Figura 4.15: Diferença de tensões normais.

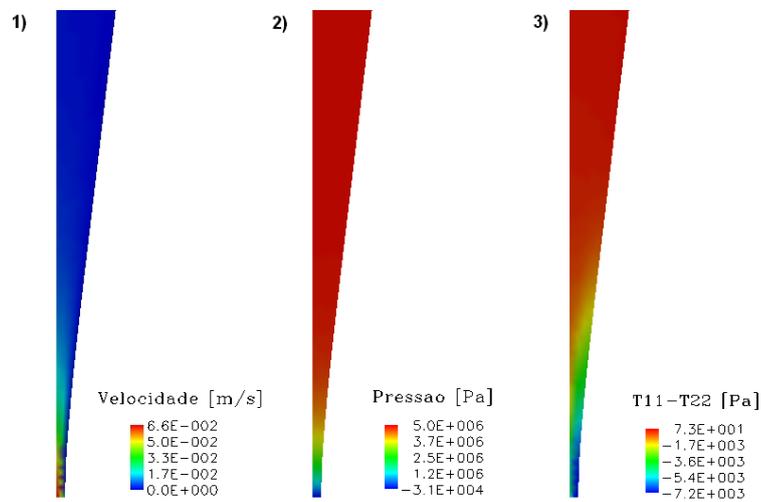


Figura 4.16: Campos de velocidade, pressão e primeira diferença de tensões para a geometria semi-hiperbólica.

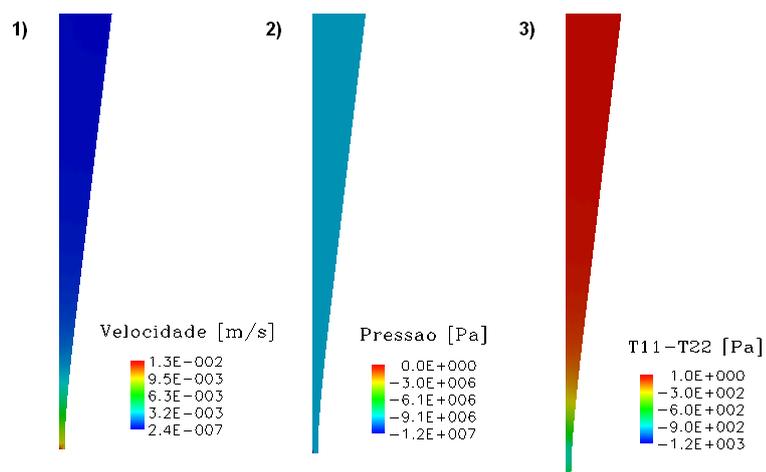


Figura 4.17: Campos de velocidade, pressão e primeira diferença de tensões para a geometria semi-hiperbólica considerando a condição de deslizamento na parede.