

Simulación Numérica de una Prueba de Reología Capilar para un Polímero PC+ABS

Numerical Simulation of a Capillary Rheometry Test for a PC +ABS Polymer

Simulação Numérica de um Teste de Reologia Capilar para um Polímero PC+ABS

Jorge Jurado Páramo^a
Héctor Plascencia Mora^b
Eduardo Aguilera Gómez^c

^a División de Ingenierías Campus Irapuato-Salamanca,
Universidad de Guanajuato, México,
jjurado@ugto.mx

^b División de Ingenierías Campus Irapuato-Salamanca,
Universidad de Guanajuato, México,
hpnte2017@gmail.com

^c División de Ingenierías Campus Irapuato-Salamanca,
Universidad de Guanajuato, México,
eag@ugto.mx

Resumen— El objetivo de este trabajo fue simular la prueba de reometría capilar en el módulo de Fluent® en la interfaz de ANSYS Workbench®. Se partió de una serie de datos de viscosidad obtenidos de una prueba de reometría capilar para un polímero PC+ABS. Estos datos fueron corregidos conforme al comportamiento no Newtoniano que presenta el polímero. Se hizo un ajuste de los datos al modelo de Cross mediante una aplicación Data Fitting de Autodesk®. Se generó el modelo numérico en función de los datos de la prueba: tipo y tamaño de geometría, temperatura y velocidad de avance del pistón del reómetro, en el software comercial ANSYS Fluent®. Estos datos se utilizaron para la creación de la geometría y la aplicación de condiciones de frontera del modelo numérico. Para la geometría se utilizó un caso axisimétrico al que se le generó la malla con concentración de elementos cerca de las paredes. Después de resolver se comparó el valor de presión obtenido en la simulación contra el valor reportado por la prueba física y se observó un coeficiente de correlación de 0.999 entre los dos grupos de datos.

Palabras clave— Modelo de material; Reometría capilar; Simulación; Viscosidad.

Abstract— The aim of this work was to simulate the capillary rheometry test in the Fluent module of the ANSYS Workbench® interface. It was used a series of viscosity data obtained from a capillary rheometry test for a PC + ABS polymer. These data were corrected according to the non-Newtonian behavior of the polymer. The viscosity data was fitted to the Cross model by the Autodesk® Data Fitting application. The test parameters as geometry, temperature, and the speed of the rheometer piston were used to generate the numerical model in ANSYS Fluent® software. For the numerical model, the geometry was generated, and the boundary conditions were defined. For the geometry, an axisymmetric model was defined. The mesh was generated with a concentration of elements near the walls. When the program finished solving the model, the solution was analyzed. It was compared the pressure value from simulation with the pressure value from the physical test, and a correlation coefficient of 0.999 was obtained.

Keywords— Capillary rheometry; Material model; Simulation; Viscosity.

Resumo — O objetivo deste trabalho foi simular o teste de reometria capilar no módulo Fluent da interface ANSYS Workbench®. Ele foi iniciado a partir de uma série de dados de viscosidade obtidos de um teste de reometria capilar para um polímero PC + ABS. Esses dados foram corrigidos de acordo com o comportamento não newtoniano do polímero. Os dados foram ajustados ao modelo Cross usando um aplicativo Autodesk® Data Fitting. O modelo numérico foi gerado com base nos dados de teste: tipo e tamanho da geometria, temperatura e velocidade de avanço do pistão do reômetro, no software comercial ANSYS Fluent®. Esses dados foram usados para a criação da geometria e aplicação das condições de contorno do modelo numérico. Para a geometria, foi utilizado um caso axissimétrico em que a malha foi gerada com uma concentração de elementos próximos às paredes. Após a resolução, o valor da pressão obtido na simulação foi comparado com o valor reportado pelo teste físico e foi observado um coeficiente de correlação de 0,999 entre os dois grupos de dados.

Palavras chave — Modelo de material; Reometria capilar; Simulação; Viscosidade.

I. INTRODUCCION

En la industria de la inyección de plástico continuamente se desarrollan nuevos materiales como las mezclas de policarbonato con acrilonitrilo butadieno estireno (PC+ABS) que combinan las propiedades de ambos componentes para su aplicación en la industria automotriz.

En condiciones de proceso estos materiales presentan una viscosidad muy alta y por lo tanto se utilizan técnicas especiales de reometría para evaluar los valores de esta propiedad bajo distintas condiciones de flujo. Los datos de viscosidad que se obtienen de estas pruebas se utilizan para ajustar modelos matemáticos de material que sirven para alimentar modelos de simulación que reproducen el comportamiento del flujo de material.

En algunos estudios se analizan nuevas configuraciones de reómetro capilar adaptados a un equipo de inyección para la evaluación experimental de la viscosidad de diferentes polímeros [1] y [2].

[3] Estudiaron la reología del ABS con diferentes porcentajes de PC y ajustaron el modelo de Cross-WLF a los datos. En algunos casos se analiza la reología del material cuando se mezcla con un porcentaje de material reciclado para diferentes grados de reprocesamiento y se ajusta al modelo de material para posteriores simulaciones [4].

También se han realizado análisis sobre mezclas de diferentes polímeros como en el caso donde Aid et al. [5] simulan la mezcla de dos polímeros para verificar que tan homogénea es la mezcla. En otro estudio Peydró et al. [6] estudian la reología del poliestireno de desperdicio mezclándolo con diferentes materiales para recuperar ciertas propiedades; los datos de viscosidad son ajustados al modelo de material.

En algunos casos se obtienen los datos experimentales de viscosidad para la simulación. Rusdi et al. [7] simulan el llenado de un molde tridimensional con polipropileno. Vingaard et al. [8] simulan el efecto de sobremoldeo en la inyección para verificar el sellado de una ranura. [9] evalúan el modelo de Cross mediante una simulación de llenado de una geometría tridimensional para estudiar la reología del ABS en una escala intermedia.

Conforme a lo anterior, para representar adecuadamente el comportamiento de un polímero, es necesario que para cada simulación del proceso de inyección se utilicen modelos de material ajustados a datos experimentales.

En este trabajo se presenta el ajuste de datos de viscosidad experimentales al modelo de material de Cross-WLF, se simula la prueba de reometría capilar mediante el módulo de ANSYS Fluent® y se comparan los resultados numéricos con los experimentales.

II. DESARROLLO DEL ARTÍCULO

Para hacer simulaciones se requiere la caracterización del material PC+ABS (mezcla con 70%PC, 30%ABS) y el tratamiento de los datos para alimentar el programa de análisis numérico.

Se inició con los datos experimentales del material obtenidos mediante un reómetro capilar marca INSTRON Mod. 4467 en el Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA), de acuerdo con la norma ASTM D-3835, utilizando las siguientes condiciones: Temperatura de barril y capilar de 250°C, diámetro del barril de 9.52 mm, dado capilar con un L/D=30.0 y diámetro de 1.0 mm.

El CIQA reportó datos de viscosidad y de la razón de cortante (shear rate) calculados a partir de la velocidad de avance del pistón, la fuerza del pistón y de las características geométricas del dispositivo. Los datos de razón de cortante se recalcularon con la corrección de Weissenberg Rabinowitsch que tiene en cuenta el hecho de que la razón de cortante tiene un valor mayor para materiales que presentan comportamiento no-Newtoniano.

En la Fig. 1, se muestra como varía la viscosidad del material utilizado para el análisis.

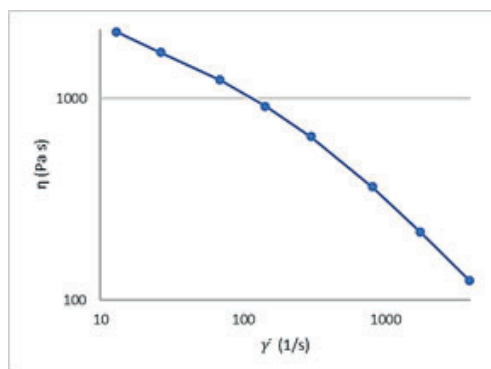


Fig. 1. Datos corregidos de viscosidad contra razón de cortante.
Fuente: Autor

A) Ecuaciones gobernantes y modelo de material

La simulación numérica se basa en ecuaciones que representan matemáticamente el comportamiento físico de fenómenos como el flujo del polímero. Para el caso del movimiento de un fluido a través de un ducto con cambio de sección se puede describir el fenómeno con las ecuaciones gobernantes de conservación de masa, momento y energía. Estas ecuaciones son resueltas por el módulo de ANSYS Fluent®, normalmente usando coordenadas espaciales cartesianas y componentes de velocidad.

La ecuación (1) corresponde a la forma simplificada de la ecuación de la conservación de la masa, al considerar el fluido como incompresible.

$$(\nabla \cdot \mathbf{v})=0 \tag{1}$$

Donde ρ es la densidad del fluido (kg/m^3) y v es el vector de velocidad (m/s).

La ecuación de momento también se reduce al considerar estado estacionario y al no incluir las fuerzas externas, como se muestra en (2).

$$0 = -[\nabla \cdot \rho v v] - \nabla p - [\nabla \cdot \tau] \quad (2)$$

Donde, p es la presión estática (Pa) y τ es el tensor de esfuerzo viscoso. La ecuación de la energía no se presenta debido a que el sistema se analiza como isotérmico [10].

Los datos que se obtienen de las pruebas se ajustan al modelo matemático de Cross-WLF que predice un valor de viscosidad dependiente de la razón de corte y de la temperatura, como se muestra en (3, 4)

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\tau^*}\right)^{1-n}} \quad (3)$$

$$\eta_0 = D_1 \exp\left[-\frac{A_1(T - T^*)}{A_2 + (T - T^*)}\right] \quad (4)$$

Donde η es la viscosidad de la masa fundida (Pa s), η_0 es la viscosidad de corte cero, τ^* es el esfuerzo de transición, n es el índice de la ley de potencias, T es la temperatura (K), $T^* = D_2 + D_3 p$ es la temperatura de transición vítrea, $A_2 = A_3 + D_3 p$, p es la presión (Pa) y A_1 , A_3 , D_1 , D_2 y D_3 son coeficientes de ajuste [11].

B) Simulación de prueba capilar

La prueba de reometría capilar consta de un barril con un pistón a la entrada y conectado a un orificio capilar en el extremo contrario. El pistón desplaza el material fundido contenido en el barril a través de todo el capilar.

La geometría se generó en el módulo Design modeler en función de las indicaciones del reporte de reometría: barril para pistón que dirige el flujo hacia capilar de 1 mm de diámetro y 30 mm de longitud con la forma mostrada en la Fig. 2.

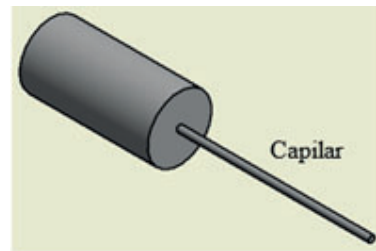


Fig. 2. Forma simplificada de la cavidad del reómetro. Fuente: Autor

Para hacer la simulación se creó un plano para generar un modelo axisimétrico que representa la geometría cilíndrica con cambio de sección transversal, como se observa en la Fig. 3

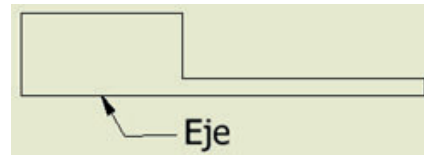


Fig. 3. Geometría para modelo axisimétrico. Fuente: Autor

Para la geometría de la Fig. 3 se generó un mallado en el módulo Meshing con refinamiento cerca de las paredes y en el capilar para el cálculo más preciso de la variación de la razón de cortante en función de la velocidad de flujo, buscando una configuración estructurada (Fig. 4). Este tipo de mallado facilita la convergencia en la solución del modelo.



Fig. 4. Mallado de la geometría.

Fuente: Autor

En la Fig. 5 se muestra una ampliación de la malla para mostrar la distribución de tamaño de elementos en la zona de cambio de sección transversal y cerca de las paredes.

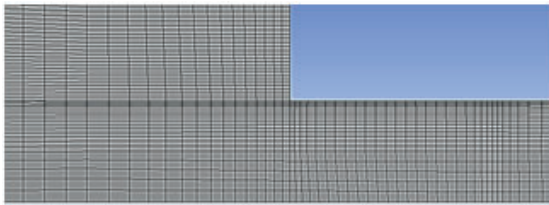


Fig. 5. Vista ampliada del mallado

Fuente: Autor

Se definieron las condiciones de frontera en el mismo módulo de mallado para diferentes zonas de la malla de acuerdo con la prueba real, como se muestra en la Figura 6.

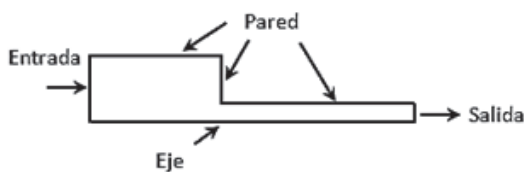


Fig. 6. Definición de condiciones de frontera.

Fuente: Autor

En algunas condiciones de frontera se asignaron valores a variables como flujo de entrada, presión a la salida, entre otros, como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Valores asignados a las condiciones de frontera.

Zona	Variable	Valor
Entrada	Velocidad	0.003333[m/s] o 200[mm/min]
Salida	Presión MPa	0
Pared	Deslizamiento	Sin deslizamiento

Fuente: Autor

De los valores asignados en la Tabla 1, la velocidad a la entrada mostrada corresponde al caso más crítico de las pruebas, el valor de presión a la salida indica que no se considera una contrapresión a la salida y en el caso de la pared el fluido no se desliza sobre esta.

Para la configuración general del modelo se considera que en las pruebas de reometría se aplicó un flujo constante de material a temperatura constante, por lo tanto, en el módulo de Fluent para este modelo se seleccionó flujo en estado estacionario a temperatura constante. El flujo se definió como laminar por el tamaño de la geometría, la baja velocidad y la alta viscosidad; Reynolds de 0.004 (5). No se consideró el efecto de la gravedad.

$$Re = \frac{\text{Fuerzas inerciales}}{\text{Fuerzas viscosas}} = \frac{V_{\text{prom}}}{\nu} = \frac{D}{\mu} \rho V_{\text{prom}} D \quad (5)$$

Donde ρ es la densidad (kg/m^3), V_{prom} es la velocidad de flujo promedio (m/s), D es la longitud característica de la geometría (m) y μ es la viscosidad dinámica ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) [12].

Los datos de viscosidad de la Fig. 1 se ajustaron al modelo de Cross-WLF que predice un valor de viscosidad que es dependiente de la razón de cortante y de la temperatura para un fluido no Newtoniano, presentado en (3, 4), con el programa de Autodesk Moldflow Data Fitting®. Para el que se obtuvieron las constantes que se encuentran en la Tabla 2.

Tabla 2. Valores de constantes de modelo de Cross-WLF ajustado

Datos obtenidos a 523.15 K (250°C)		
Constante	valor	unidades
n	0.2955	---
Tau	144456	Pa
D1	2850.18	Pa-s
T*	417.15	K
A1	5.13E-06	---
A2	51.6	K

Fuente: autor

En la Fig. 7 se presenta una comparación de los datos de viscosidad calculados con el modelo ajustado contra los datos experimentales corregidos.

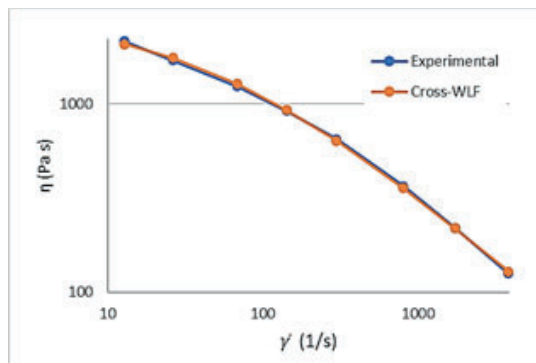


Fig. 7. Comparación de modelo de material contra datos experimentales.

Fuente: Autor

Se seleccionó el modelo de viscosidad Cross en el módulo Fluent en la definición del valor de la "viscosidad" del material a inyectar, para el que corresponde (6) con temperatura constante (H(T)=1).

$$\eta = H(T) \frac{\eta_0}{1+(\lambda\dot{\gamma})^{1-n}} \quad (6)$$

Donde, λ es el tiempo natural (inversa de la velocidad de cortante en la cual el fluido cambia de comportamiento Newtoniano a Ley de potencias). Este modelo de viscosidad es comúnmente usado para describir el comportamiento de la viscosidad a una baja velocidad de cortante [13].

Se asignaron los valores de las constantes del modelo de Cross para temperatura constante como se muestra en la Fig. 8 y se agrega el valor de densidad (1023.9 kg/m³) para definir el material completamente.

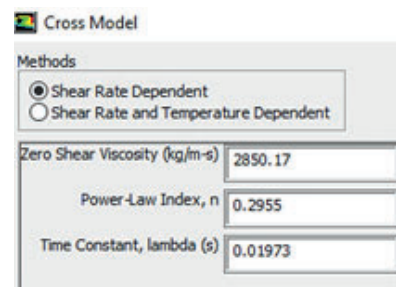


Fig. 8. Asignación de parámetros de modelo de viscosidad en Fluent.

Fuente: Autor

Se utilizó el método de solución SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations), con valores de residuales de 2e-5 y se ejecutó la simulación hasta alcanzar el valor de residuales (convergencia).

Se analizó la sensibilidad de la malla refinando la malla y comparando el valor de presión a la entrada para diferentes tamaños de elementos, resultando los valores indicados en la Tabla 3.

Tabla 3. Análisis de sensibilidad de malla.

No. de elementos	Presión a la entrada, MPa
5644	58.75
11163	59.25
14441	59.35
17530	59.38

Fuente: Autor

Después se ejecutó el modelo para distintas velocidades y se compararon los valores de presión en la entrada del cilindro del modelo numérico contra los datos experimentales como se muestra en la Fig. 9, donde se puede apreciar la coincidencia de valores experimentales con los del modelo numérico.

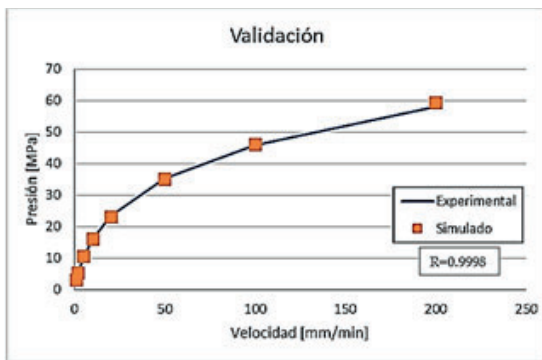


Fig. 9. Comparación de presión a la entrada de barril.

Fuente: Autor

III. DISCUSIÓN

En la Fig. 9 se puede observar la cercanía que tienen los datos obtenidos de la simulación en comparación con los datos obtenidos de la medición experimental, esto nos indica que el modelo numérico representa adecuadamente el comportamiento real del material en la prueba de reometría capilar, y podemos decir que el modelo numérico queda validado experimentalmente.

IV. CONCLUSIONES

Para la simulación presentada solo se contó con datos de viscosidad evaluados a una temperatura, por lo tanto, el modelo de material ajustado solo es válido cuando no hay variación de temperatura

Para realizar una simulación más completa se requiere que el modelo de material se ajuste con datos experimentales de diferentes temperaturas. Sin embargo, hay que tener en cuenta que para definir la viscosidad en función de la temperatura se requiere usar una función definida por el usuario.

El análisis de sensibilidad de malla revela la gran cantidad de volúmenes necesarios para la simulación, por lo tanto, si se analiza una geometría tridimensional el tiempo de cálculo se incrementará exponencialmente.

Los datos experimentales de viscosidad se pueden complementar con la inclusión de un segundo capilar para poder aplicar la corrección de Bagley sobre el esfuerzo cortante.

VIII. AGRADECIMIENTOS

Se agradece a la empresa PEMSA por el financiamiento de las pruebas experimentales de reología capilar

IX. REFERENCIAS

- [1] Aid, S., Eddhahak, A., Khelladi, S., Ortega, Z., Chaabani, S., Tcharkhtchi, A. (2019). On the miscibility of PVDF/PMMA polymer blends: Thermodynamics, experimental and numerical investigations. *Polymer Testing*, 73, 222-231.
- [2] ANSYS Inc. (2013). *Fluent User's Guide: Viscosity for Non-Newtonian Fluids, Cross model*. Canonsburg, PA, USA.
- [3] AUTODESK. (2015). Help: Cross-WLF viscosity model. Recuperado el 10 de 06 de 2020, de AUTODESK Simulation Moldflow Insight 360: <http://help.autodesk.com/view/MFIWS/2015/ENU/?guid=GUID-7BC3A8F0-8B41-4FCB-BDF1-F1159E4DD175>
- [4] Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2006). *Fenómenos de Transporte* (2da ed.). Nueva York: Limusa Wiley.
- [5] Cengel, Y. A., & Cimbala, J. M. (2006). *Mecánica de Fluidos: Fundamentos y Aplicaciones*. México, D.F. Mc Graw Hill.
- [6] Fernandez, A., Muniesa, M., Javierre, C. (2014). In-line rheological testing of thermoplastics and a monitored device for an injection moulding machine: Application to raw and recycled polypropylene. *Polymer Testing*, 33, 107-115
- [7] Gou, G., Xie, P., Yang, W., & Ding, Y. (2011). Online measurement of rheological properties of polypropylene based on an injection molding machine to simulate the injection-molding process. *Polymer Testing*, 30, 826-832.
- [8] Khor, C.Y., Ariff, Z.M., Che Ani, F., Abdul Mujeebu, M., Abdullah, M.K., Abdullah, M.Z., Joseph, M.A. (2010). Three-dimensional numerical and experimental investigations on polymer rheology in meso-scale injection molding. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37(2), 131-139.
- [9] Peydro, M.A., Juárez Varón, D., Crespo Amorós, J.E., Parres, F. (2011a). Study of rheological behavior of reprocessing polyamide 6. *Annals of The University of Oradea*, 10(20), 421-425.
- [10] Peydró, M.A., Parres, F., Crespo, J.E. and Juárez, D. (2011b), Study of rheological behavior during the recovery process of high impact polystyrene using cross - WLF model. *J. Appl. Polym. Sci.*, 120, 2400-2410.
- [11] Reig, M.J., Segui, V.J., & Zamanillo, J.D. (2005). Rheological Behavior Modeling of Recycled ABS/PC Blends Applied to Injection Molding Process, *Journal of Polymer Engineering*, 25(5), 435-457.

- [12] Rusdi, M.S., Abdullah, M.Z., Mahmud, A.S., Khor, C. Y., Abdul Aziz, M. S., Ariff, Z. M., Abdullah, M. K. (2016). Numerical Investigation on the Effect of Pressure and Temperature on the Melt Filling During Injection Molding Process. Arab J Sci Eng. 41, 1907–1919.
- [13] Vingaard, M. & deClaville Christiansen, J. (2012). Sealing of polymer microstructures by over-moulding. Int J Adv Manuf Technol, 61, 161–170.