



INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CELAYA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“DETERMINACIÓN DE LA
DISTRIBUCIÓN DE BURBUJAS EN
ESPUMAS POLIMÉRICAS”**

POR:

RAFAEL GONZÁLEZ HUERTA

TESIS PRESENTADA AL DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE:

**MAESTRO EN CIENCIAS
EN INGENIERÍA QUÍMICA**

CELAYA, GTO., DICIEMBRE 2014

Capítulo 1	1
INTRODUCCIÓN	1
1.1 Introducción	2
1.1.1 Propiedades de los polímeros espumados	2
1.1.2 Proceso de fabricación de los polímeros espumados	3
1.1.3 Aplicaciones de los polímeros espumados	3
1.2 Definición del problema	4
1.3 Justificación	4
1.4 Objetivo general	5
1.5 Objetivos específicos	5
1.6 Hipótesis	5
Capítulo 2	6
FUNDAMENTOS TEÓRICOS	6
2.1 Espumas poliméricas	7
2.2 Agentes espumantes físicos y químicos	7
2.2.1 Descomposición del agente espumante químico (azodicarbonamida)	8
2.3 Inyección reacción en espumas poliméricas	10
2.3.1 Nucleación de las burbujas	10
2.3.2 Proceso de inyección-reacción	11
2.3.3 Espuma estructural	12
2.4 Características del proceso de moldeo de espumas por inyección-reacción.	13
2.5 Trabajos experimentales de inyección-reacción	14
2.6 Simulación de inyección de espumas poliméricas	16
2.6.1 Simulación del moldeo por inyección	16
2.6.2 Simulación del moldeo por inyección-reacción	16
2.6.3 Simulación de la distribución de burbujas en espumas poliméricas	17
2.7 Introducción a la simulación de fluidos en CFD	19
2.7.1 Teoría y ecuaciones de gobierno	19
2.7.2 Efectos viscoelásticos en el proceso de inyección	19
2.8 Flujos multifásicos-polidispersos	21
2.8.1 Modelo Euleriano-Euleriano	21
2.9 Balances de materia y momentum para cada fase	21

2.9.1 Ecuaciones de continuidad	22
2.9.2 Ecuaciones de momentum	22
2.10 Modelado del tamaño y distribución de las burbujas	22
2.11 Modelado de la coalescencia entre las burbujas	23
2.12 Modelado del rompimiento de las burbujas	24
2.13 Coeficiente de Tensión Superficial	24
2.14 Principios de Turbulencia	25
2.14.1 Modelo RNG $\kappa-\varepsilon$ (fase líquida)	26
2.15 Métodos numéricos del CFD	27
2.15.1 Discretización de las ecuaciones gobernantes	27
2.15.2 Funciones de forma	30
2.15.3 Elemento Hexaédrico:	31
2.15.3 Elemento Tetraédrico:	31
2.15.4 Término transitorio	32
2.15.5 Términos difusivos	33
2.15.6 Esquema de diferenciación upwind de primer orden	34
2.15.7 Esquema de valores especificados	35
2.15.8 Esquema de alta resolución	36
2.15.9 Acoplamiento presión-velocidad	36
2.16 Solución de las ecuaciones lineales	37
2.17 Método de Multimalla Algebraico	38
2.18 Procedimiento de normalización de residuales	39
2.19 Aplicación de CFD en polímeros	40
Capítulo 3	41
METODOLOGÍA	41
3.1 Simulación del Proceso de llenado	42
3.1.2 Generación de la geometría de la Placa de Polietileno de alta densidad (HDPE)	42
3.2 Mallado del volumen de control (Discretización de elementos)	43
3.3 Características de las mallas	43
3.3.1 Refinado de malla	43
3.4 Configuración del dominio: especificación de modelos, condiciones iniciales y de frontera (transitorio).	49

Capítulo 4	58
RESULTADOS	58
4.1 Análisis y discusión de resultados	59
4.2 Efectos de la Velocidad de llenado con respecto a la distribución de burbujas	61
4.3 Efectos de la Temperatura Presión con respecto a la distribución de burbujas	64
4.4 Efectos de la Presión con respecto a la distribución de burbujas	68
4.5 Distribución del polímero en el molde de inyección (HDPE)	70
4.6 Distribución de burbujas en el polímero inyectado.	72
Capítulo 5	63
CONCLUSIONES	63
Bibliografía.	65

Índice de Tablas

Tabla 2.1.	Descomposición de azodicarbonamida a temperatura de 163-169 °C.	9
Tabla 2.2.	Efecto de la temperatura del molde en la morfología de la espuma.	15
Tabla 2.3.	Efecto de variar la temperatura del molde en la morfología de la espuma.	15
Tabla 3.1.	Parámetros utilizados para detallar la malla en la placa de HDPE.	42
Tabla 3.2.	Especificación de propiedades de mezcla de gases provenientes de la descomposición de azodicarbonamida.	44
Tabla 3.3.	Detalles la geometría de malla utilizado en la placa de HDPE.	45
Tabla 3.4.	Especificación de propiedades de Polietileno de alta densidad (HDPE).	50
Tabla 3.5.	Especificación de propiedades de mezcla de gases provenientes de la descomposición de azodicarbonamida.	51
Tabla 3.6.	Especificación para el análisis en el estado transitorio.	52
Tabla 3.7.	Especificación para el análisis en el estado transitorio.	53
Tabla 3.8.	Especificación de la mezcla de gases por descomposición de azodicarbonamida como fluido polidisperso.	54
Tabla 3.9.	Especificaciones para la salida de gases al sistema.	55
Tabla 3.10.	Posición de las líneas de análisis con respecto al tiempo.	56
Tabla 3.11.	Especificaciones para la pared del molde de inyección.	56
Tabla 3.12.	Especificaciones para la pared del molde de inyección.	57

Índice de Figuras

Figura 2.1.	Crecimiento de un burbuja sobre un agente nucleante.	10
Figura 2.2.	Comportamiento de la densidad de la espuma de poliuretano con dos diferentes agentes espumantes.	17
Figura 2.3.	Densidad de celda en relación con la cantidad de agente espumante.	18
Figura 2.4.	Módulos de una malla para el elemento finito.	28
Figura 2.5.	Módulos de una malla para el elemento finito.	29
Figura 2.6.	Elemento hexaédrico de una malla.	31
Figura 2.7.	Elemento hexaédrico de una malla.	31
Figura 2.8.	Comportamiento de los gradientes espaciales para el esquema upwind de primer orden.	34
Figura 2.9.	Comportamiento de los gradientes espaciales para el esquema de valores especificados.	35
Figura 2.10.	Engrosamiento progresivo de la malla en el método multimalla.	39
Figura 3.1.	Geometría de las placas de polietileno de alta densidad en 3D creadas en el módulo Design Modeler de ANSYS-CFX.	42
Figura 3.2.	Subdivisiones de la geometría para refinamiento de la malla a) polímero y b) salida de aire.	45
Figura 3.3.	Visualización de la colocación de las líneas de análisis, longitud y profundidad.	46
Figura 3.4.	Perfil de Velocidad de llenado en la piel superior de la placa a diferente tiempo y posición.	46
Figura 3.5.	Perfil de Velocidad de llenado en la piel superior de la placa a diferente tiempo y posición	47
Figura 3.6.	Perfil de Velocidad de llenado en el núcleo de la placa a diferente tiempo y posición.	47
Figura 3.7.	Perfil de Velocidad de llenado en el núcleo de la placa a diferente tiempo y posición.	48
Figura 3.8.	Perfil de Velocidad de llenado en la piel inferior de la placa a diferente tiempo y posición.	49
Figura 4.1.	Posición de las líneas de análisis en el plano cartesiano con respecto al tiempo.	59
Figura 4.2.	Visualización de la colocación de las líneas de análisis, longitud y profundidad.	60

Figura 4.3.	Perfil de Velocidad de llenado en la piel superior ($Y = + 0.012 \text{ m}$).	61
Figura 4.4.	Perfil de Velocidad de llenado en el núcleo de la placa ($Y = 0 \text{ m}$).	62
Figura 4.5.	Perfil de Velocidad de llenado en la piel inferior de la placa ($Y = - 0.012 \text{ m}$).	63
Figura 4.6.	Perfil de Temperatura de llenado en la piel superior ($Y = +0.012 \text{ m}$).	65
Figura 4.7.	Perfil de Temperatura de llenado en el núcleo de la placa ($Y = - 0.12 \text{ m}$).	66
Figura 4.8.	Perfil de Temperatura de llenado en el núcleo ($Y = 0.0 \text{ m}$).	67
Figura 4.9.	Perfil de Presión de llenado en la piel superior de la placa ($Y = + 0.012 \text{ m}$).	68
Figura 4.10.	Perfil de Presión de llenado en la piel inferior de la placa ($Y = - 0.012 \text{ m}$).	69
Figura 4.11.	Perfil de Presión de llenado en el núcleo ($Y = 0.0 \text{ m}$).	70
Figura 4.12.	Perfil de Presión de llenado en la piel inferior de la placa a diferente tiempo y posición.	71
Figura 4.13.	Perfil de Presión de llenado en la piel inferior de la placa a diferente tiempo y posición.	72
Figura 4.14.	Perfil de burbujas en la piel superior, piel inferior y núcleo de la placa de HDPE al término de la inyección.	74

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

En el presente Capítulo se realizará una breve descripción de la importancia de los materiales poliméricos espumados y la afectación de las diferentes variables en las propiedades finales del material. Además se aborda una visión general del problema, la justificación y los objetivos, y cómo el uso de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) fue fundamental para el tratado del problema.

1.1 Introducción

En la actualidad, los materiales plásticos con propiedades específicas, bajo costo y procesos de elaboración rápidos son más importantes que nunca, esto se debe, en gran medida, a las diversas aplicaciones que ofrecen estos materiales. Uno de los procesos que ha tenido un alto rendimiento para este tipo de características es el proceso de moldeo por inyección, el cual ha consolidado su posición para la producción de piezas a base de diferentes tipos de polímeros, especialmente para aplicaciones de ingeniería de polímeros. Al mismo tiempo, los espumados poliméricos han recibido mucha atención debido a propiedades específicas como: baja densidad, alta capacidad de aislamiento y resistencia al impacto. Estos materiales fueron obtenidos por primera vez en 1920 con espumas de látex [1]. Las espumas de polietileno de alta y baja densidad son unas de las más usadas e importantes en el ámbito industrial, su comercialización inició alrededor de 1940 [4]. Estas espumas poliméricas pueden encontrarse, por ejemplo, en artículos deportivos, aparatos electrodomésticos, aplicaciones militares, transporte y artículos de ocio [2].

1.1.1 Propiedades de los polímeros espumados

Las propiedades de las espumas poliméricas se derivan directamente a consecuencia de su microestructura. Para comprender mejor estos materiales es necesario percibir a detalle esta microestructura que generalmente se engloba en propiedades térmicas y mecánicas. Un ejemplo claro es el HDPE con un valor de dureza superficial de 40 – 45 N/mm² y densidad de 0.952 g/cm³ que al compararlo con su homólogo espumado mantiene el mismo rango de dureza pero con un valor menor de densidad (0.350 – 0.600 g/cm³) [3]. Otra propiedad importante es su capacidad de aislamiento M. Saadatfar et. al. reportan que la conductividad térmica depende directamente de la cantidad y tamaño de burbujas distribuidas en la espuma polimérica obteniendo valores de $\lambda=0.45 - 0.52$ W/mK para el HDPE y $\lambda=0.18$ W/mK para la espuma de HDPE.

1.1.2 Proceso de fabricación de los polímeros espumados

Se han sugerido diversas técnicas de fabricación de este tipo de materiales, siendo el moldeo por inyección la más usada. En este proceso se añade un agente espumante (gas) al inicio, el cual genera burbujas que son inmersas en el polímero. La etapa de enfriamiento del proceso abarca dos terceras partes del ciclo de inyección, por consecuencia un enfriamiento eficiente reduce considerablemente los ciclos de inyección y los costos de operación [3]. La fabricación de estos plásticos espumosos involucra delicados fenómenos termodinámicos y de transporte donde variables como la presión de llenado, temperatura y velocidad de inyección influyen directamente en dos parámetros: la nucleación de la celda (burbuja) y su consecuente crecimiento, cruciales en la estructura final y calidad de la espuma [5], además muchas de las aplicaciones de estas espumas son determinadas por la estructura, tipo de celda, tamaño de celda, distribución del tamaño de celda y densidad de población de celda, añadido a esto, las estructuras espumosas son fuertemente dependientes de la condición del espumante, la estructura molecular del polímero, propiedades reológicas y los componentes del material [6].

1.1.3 Aplicaciones de los polímeros espumados

La manufactura de materiales celulares (por ejemplo, polímeros, espumas cerámicas o metálicas) representan una opción muy atractiva en la ingeniería de materiales pues cuentan con un amplia gama de aplicaciones que van desde estructuras ligeras en los envases, aislamiento y empaques para la protección contra impacto [3]. Las aplicaciones típicas incluyen sábanas de tacto suave para cuartos de mando, colchonetas aislantes, láminas espumadas horizontales entre paneles de acero. Y una amplia gama de productos industriales que van desde la reducción de densidad en maderas y cables plásticos hasta propiedades dieléctricas y de aislamiento acústico y térmico, acompañado de una reducción en el costo final ya que requiere menor cantidad de materia prima y los procesos de espumado no demandan presiones altas de inyección[5].

1.2 Definición del problema

En la producción de espumas poliméricas por el método de moldeo por inyección-reacción se presenta una distribución heterogénea de burbujas en la estructura del material, lo que provoca una variación en su morfología y afecta de manera negativa sus propiedades mecánicas. Pruebas mecánicas de impacto realizadas a placas de polietileno de alta densidad con un espesor de 2.5 mm muestran efectos negativos en las zonas donde la cantidad de burbujas es menor que las zonas donde hay mayor cantidad de burbujas[2].

1.3 Justificación

En las espumas poliméricas un gran número de propiedades físicas depende directamente de la cantidad de burbujas y su distribución en el material. Entre las propiedades más importantes están la dureza, la flexibilidad, la resistencia al impacto y la capacidad de aislamiento [7]. Por lo tanto, una distribución uniforme de burbujas en las espumas poliméricas es de suma importancia, pues de esta forma se garantiza que las propiedades sean homogéneas en todo el material inyectado. El mantener homogéneas las propiedades dentro del material inyectado ofrece ventajas en la reducción de costos, peso, procesamiento por baja viscosidad y una notable precisión en la forma de la pieza inyectada [8].

Debido a la complejidad del fenómeno de inyección-reacción, actualmente no hay manera de controlar la distribución de burbujas para mantener las propiedades homogéneas. Esto es posible con herramientas computacionales como la Dinámica Computacional de Fluidos (*CFD por sus siglas en ingles*). Así, su aplicación asegura un análisis de la distribución de burbujas y un perfil cualitativo de llenado, partiendo de datos experimentales como la concentración de agente espumante, temperaturas y presiones.

1.4 Objetivo general

Obtener el perfil de distribución de burbujas en una placa de polietileno de alta densidad (HDPE) mediante herramientas de simulación, tomando en cuenta condiciones iniciales experimentales.

1.5 Objetivos específicos

- ❖ Construir un volumen de control similar al experimental, considerando la inyección simultánea de polímero y gas con el fin de simular el comportamiento de un flujo multifásico.
- ❖ Obtener información sobre los perfiles de llenado y cómo afectan la distribución de burbujas.
- ❖ Obtener la relación entre temperatura, presión de llenado y velocidad de llenado del molde tomando en cuenta como constantes las variables de inyección (temperaturas del molde, husillo y polímero fundido a la entrada), para obtener una distribución del gas generador de burbujas en la placa de HDPE.

1.6 Hipótesis

Es posible determinar la distribución de burbujas en espumas poliméricas y el efecto de variables como temperatura, presión y velocidad de llenado mediante simulación CFD.

Capítulo 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

En el presente capítulo se exponen los conceptos generales sobre el moldeo por inyección-reacción utilizado para la fabricación de las espumas poliméricas, se mencionan las características de los tipos de agentes espumantes que se usan para la generación de burbujas en las espumas poliméricas. Además se hace una descripción del funcionamiento de la herramienta computacional CFD (*Computational Fluid Dynamics*) y del método numérico de solución para las ecuaciones gobernantes.

2.1 Espumas poliméricas

Recientemente el incremento en la necesidad de nuevos materiales poliméricos con características de alta capacidad de aislamiento, protección en el embalaje de objetos, bajo peso y diseño de piezas inyectables complejas, se ha enfocado en la fabricación de espumas poliméricas. Comparadas con su contraparte sólida las espumas poliméricas muestran ciertas ventajas en sus propiedades mecánicas, lo que se debe a la alta densidad y uniformidad en el tamaño de las burbujas inmersas en el material inyectado [9]. Estos materiales están generalmente integrados por tres capas, produciendo una estructura compuesta: dos capas sin espumar llamadas pieles y una capa denominada núcleo que se encuentra en medio de estas dos pieles[1] . En general la estructura celular es producida por la introducción de un agente espumante en la matriz polimérica, usando procesos tipo:

- **Batch** (mezclado interno): El polímero es sumergido en un fluido supercrítico (agente espumante) por un periodo de tiempo y rápidamente regresado a condiciones de medio ambiente, de tal forma que esto provoca un incremento en la solubilidad del gas y de la nucleación de las burbujas.
- **Continuo** (extrusión-inyección): El polímero es extruido haciéndose pasar por un cilindro con rodillo caliente y, previo a la inyección en el molde, se agrega el agente espumante [10].

Se pueden utilizar dos tipos de agentes espumantes para expandir un polímero y producir una espuma polimérica, estos son: agentes espumantes físicos y agentes espumantes químicos.

2.2 Agentes espumantes físicos y químicos

Los *agentes espumantes físicos* (PFA por sus siglas en inglés) proveen la expansión de un gas sometido a cambios en estado físico. Estos cambios implican la volatilización de un líquido o la liberación de un gas comprimido a la presión atmosférica después de incorporarse al polímero. Algunos ejemplos de los agentes espumantes físicos son nitrógeno, carbono, y algunos hidrocarburos de bajo peso molecular.

Los *agentes espumantes químicos* (CFA por sus siglas en inglés) son generalmente polvos proveedores de gas (o mezcla de gases) sometidos a una serie de reacciones químicas resultado de la descomposición térmica de las moléculas originales. La descomposición es generalmente inducida térmicamente, aunque en algunos casos se utilizan iniciadores químicos, tales como sales de metales de transición, alcoholes, aminas y ácidos orgánicos. Los CFA tienen dos ventajas importantes: son fáciles de introducir en la matriz polimérica y de procesar con equipo ordinario.

El más popular de los CFA es la azodicarbonamida (ACA) la cual es elegida por su alto rendimiento gaseoso (210-230 cm³ de gas por gramo de producto) y la capacidad de ajuste en la temperatura de descomposición lo que añade activadores como sales de metales de transición, polioles, urea, alcoholes, aminas y ácidos orgánicos[2].

2.2.1 Descomposición del agente espumante químico (azodicarbonamida)

La descomposición térmica de la azodicarbonamida (ACA) es un proceso exotérmico y función del tamaño de partícula, velocidad de calentamiento, concentración y tipo de activador, así como del grado de dispersión del agente espumante. Diversos estudios han reportado el calor de reacción usando diferentes modelos y mecanismos de reacción. Robledo-Ortiz et al. [2] reportaron curvas de descomposición del ACA en HDPE a diferentes temperaturas 180, 190, 200 y 210 °C, en un periodo de 25 min., observando que la descomposición del ACA ocurre entre los 163 y 169 °C. Además, ellos proponen la cinética de descomposición basada en el modelo de Kamal [2]:

$$\frac{d\alpha}{dt} = (k_1 + k_2\alpha^n)(1-\alpha)^m \quad (2.1)$$

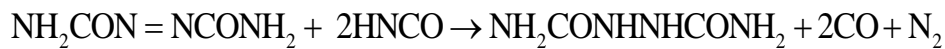
$$\alpha = \frac{P_t}{P_f} \quad (2.2)$$

donde

$$k_1 = A_1 \exp\left[\frac{-E_{a1}}{RT}\right] \quad (2.3)$$

$$k_2 = A_2 \exp\left[\frac{-E_{a2}}{RT}\right] \quad (2.4)$$

Así α es el avance de reacción para el ACA, t el tiempo, P_t y P_f son la presión dada en el tiempo y la presión máxima dada en el equilibrio respectivamente, n y m son constantes independientes de la temperatura. Los parámetros k_1 y k_2 son las constantes de velocidad las cuales están en función de la temperatura, A_1 y A_2 son las constantes de Arrhenius, E_{a1} y E_{a2} son las energías de activación, R la constante de los gases y T la temperatura de activación siguiendo la relación de Arrhenius utilizando los siguientes mecanismos de reacción:



De esta descomposición se obtiene una mezcla gaseosa de amoníaco (NH_3), monóxido de carbono (CO) y nitrógeno (N_2), además tres productos importantes: sólidos como el ácido ciánico (HNCO), urazol (NHCONHCONH) y la hidrazodicarbonamida ($\text{NH}_2\text{CONHNHCONH}_2$) los cuales funcionan como agentes nucleantes. La literatura reporta diversos grados de descomposición, por ejemplo Bhatti *et. al* [11] reportan para la descomposición de ACA las siguientes cantidades (% en peso): gases 32%; residuos sólidos 66%. Para los residuos sólidos: 27% de urazol, hidrazodicarbonamida 34% y ácido ciánico 5%. Exelby *et. al* [9] reporta el siguiente grado de descomposición (Tabla 2.1):

Tabla 2. 1. Descomposición de azodicarbonamida a temperatura de 163-169 °C.

Descomposición de azodicarbonamida (% en peso)			
Gas 32-34 %		Sólidos 66-68 %	
N_2	62%	Urazol	39%
CO	35%	Ácido ciánico	25%
NH_3	3%	Hidrazodicarbonamida	36%

En la Tabla 2.1 se observa que el grado de descomposición reportado en la literatura. La cantidad de sólidos remanentes proporciona una gran cantidad de agentes nucleantes, que favorecen la nucleación de burbujas, necesarias para este tipo de materiales.

2.3 Inyección reacción en espumas poliméricas

2.3.1 Nucleación de las burbujas

En la fabricación de espumas poliméricas una forma muy común de incrementar el número de burbujas en su estructura es la adición de algún agente externo (agente nucleante) a la matriz polimérica, la función de estos agentes nucleantes es soportar el crecimiento de las burbujas dentro del polímero. Comúnmente este tipo de agentes nucleantes pueden ser compuestos inorgánicos (por ejemplo, partículas de talco), compuestos orgánicos (por ejemplo, elastómeros), y nanopartículas (por ejemplo, las de arcilla y los nanotubos de carbono).

La nucleación de burbujas en una espuma polimérica es un proceso mediante el cual se adiciona algún agente externo o nucleante a la matriz polimérica, tal mejora se debe a la disminución de la barrera de energía libre para la nucleación, de esta manera se reduce la pérdida de gas disuelto con la presencia del agente nucleante. En la Figura 2.1 se muestra el efecto de una partícula de agente nucleante en el crecimiento de una burbuja, donde β representa el tamaño de la burbuja y θ_c es el ángulo de crecimiento de la misma[9].

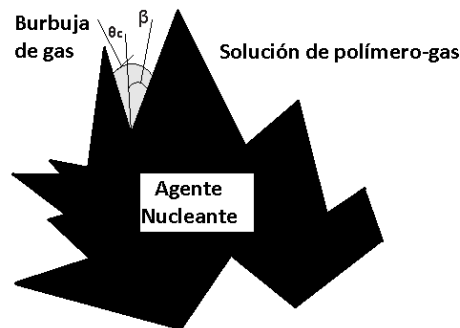


Figura 2.1. Crecimiento de un burbuja sobre un agente nucleante.

En la bibliografía se reporta la teoría clásica de nucleación para la formación de burbujas en las espumas poliméricas [12], esto como un modelo muy certero para describir este fenómeno.

McClurg et. al. [13] reportan un criterio de nucleación de burbujas basado en un análisis termodinámico y cinético del crecimiento-nucleación y menciona que los agentes nucleantes ideales cuentan con cuatro características:

- La nucleación en agentes nucleantes ideales es relativamente favorable energética y cinéticamente para una nucleación homogénea.
- Los agentes nucleantes ideales conservan una geometría uniforme y propiedades en la superficie constantes.
- Se distribuyen fácilmente en la matriz polimérica.
- Los agentes nucleantes ideales son lo suficientemente abundantes, por lo que se considera un crecimiento homogéneo de las burbujas.

De esta manera podemos observar la importancia y el efecto que tienen los agentes nucleantes en el crecimiento de las burbujas en la matriz polimérica y por lo tanto en la estructura final de la espuma polimérica.

Existen diversos procesos de elaboración de las espumas poliméricas, siendo el más común el procesos de inyección-reacción, el cual involucra la disolución de un agente espumante químico, generalmente un polvo, en la matriz polimérica. Posteriormente este agente es inyectado en un molde con la geometría deseada.

2.3.2 Proceso de inyección-reacción

El proceso de inyección-reacción usualmente consiste en cuatro etapas:

- (1) La disolución del agente espumante dentro del polímero fundido a elevada presión.
- (2) La nucleación de las burbujas en una solución sobresaturada de agente espumante en el polímero fundido.
- (3) El crecimiento de las burbujas en el polímero fundido.
- (4) La estabilización de la estructura celular disminuyendo la temperatura por debajo del punto de fusión o de la temperatura de transición vítrea[14].

El fundamento de este moldeo es inyectar un polímero fundido en un molde cerrado y frío, donde se solidifica el producto. Una máquina de moldeo por inyección tiene dos secciones principales:

- **Unidad de inyección:** un extrusor de un solo tornillo de Arquímedes que gira con una distancia mínima entre la pared del barril o camisa. El barril tiene calentadores de cincho que lo rodean. La profundidad del canal del tornillo disminuye desde el

extremo de alimentación hasta el extremo de salida para favorecer la compresión del contenido. Los gránulos del polímero fundido se cargan en el extremo de alimentación y el polímero fundido salen por el otro extremo. El calentamiento se debe, en parte, a los calentadores del barril y a la disipación viscosa conforme el polímero se bombea a lo largo del tornillo. A diferencia de un sencillo extrusor de un solo tornillo, el tornillo de una máquina de inyección tiene un movimiento de vaivén para efectuar la inyección.

- **La unidad de cierre, o prensa, que aloja al molde:** La función de la unidad de cierre es mantener cerrado el molde con fuerza suficiente para resistir la presión de inyección. Ésta puede exceder los 140 MPa, y 200 MPa son necesarios para evitar fugas en la superficie de acoplamiento del molde. El cierre se efectúa mediante un mecanismo de presión mecánico o hidráulico.

2.3.3 Espuma estructural

Al perfeccionar el moldeo por inyección las aplicaciones se direccionaron hacia casos donde la rigidez es un requisito indispensable del producto. La manera de incrementar la rigidez de un componente es aumentar su grosor [15]. Para modelar secciones gruesas, sin hundimientos y formación de huecos, se usa la técnica de *moldeo de espuma estructural*. En esta técnica el material fundible es 'expandible' y contiene un gas disuelto que se descompone a la temperatura de fusión; el material expande para producir la espuma cuando deja la unidad de inyección presurizada y entra al molde. El proceso consiste en inyectar un poco de material fundido en el molde frío, es decir, que sea suficiente para llenarlo, quedando espacio en el cual se puede expandir la espuma. El proceso de fabricación de espumas estructurales depende del tipo de agente espumante usado (físico o químico). El proceso de fabricación utilizando un agente espumante físico consiste en inyectar a presión y disolver el gas en la matriz polimérica, o hacerlo previo a la entrada del polímero al molde de inyección [15]. El proceso de fabricación usando un agente espumante químico es conocido como *moldeo de espumas por inyección-reacción* (FRIM, por sus siglas en inglés) y relaciona una serie de fenómenos tales como mezclado,

reacción química, nucleación de burbujas, crecimiento de burbujas, así como transporte de calor, masa y momento. Cada uno de estos complicados fenómenos ha sido estudiado intensivamente, sin embargo es una tarea difícil el considerar todos estos simultáneamente. Por esta razón solo algunos estudios basados en FRIM han sido reportados [16].

2.4 Características del proceso de moldeo de espumas por inyección-reacción.

A continuación se describen las características que muestran las ventajas de utilizar el moldeo de espumas mostrando mejorías estructuralmente así como de producción (número de corridas o piezas inyectadas):

1. En cuanto se completa la inyección de la pequeña carga, se cierra la válvula de la unidad de inyección. Así, la presión del gas en expansión se convierte en la fuerza impulsora para llenar el molde (3 MPa).
2. La baja presión significa que pueden moldearse piezas de gran área proyectada al usar fuerzas bajas de cierre.
3. Es posible hacer moldes baratos de poco peso, que permiten corridas más cortas, aunque para corridas largas se prefieren los de acero que son más durables.
4. No se requiere presión de retención; el gas mantiene en movimiento el frente de fusión.
5. La expansión y la baja presión dan lugar a productos de baja orientación.
6. La presión del gas mantiene prensada suavemente la capa externa contra la superficie del molde. Esto evita la contracción y facilita el moldeo de secciones gruesas para obtener rigidez.

La espuma es autoformadora de una capa llamada 'piel'; conforme entra el molde y se pone en contacto con la superficie fría, las células de la espuma colapsan para formar la capa límite. La última capa del material queda aislada por la capa límite y mantiene su estructura celular [15].

Algunos parámetros como temperatura, presión y tiempo son de gran influencia para el espesor de las paredes y el núcleo [17], lo cual influye directamente en

propiedades mecánicas como flexión y resistencia al impacto [18]. Zhang *et al.* [19] encontraron que incluso paredes finas con 2-3% del espesor total de la muestra, tienen efectos importantes en las propiedades de flexión e impacto, por lo tanto el control de la morfología de piel-núcleo en el proceso de espumado es de suma importancia para obtener las especificaciones requeridas de fuerza y rigidez. El espesor de las paredes y del núcleo dependerá de variables como temperatura, presión, entre otras; y principalmente de la cantidad de agente espumante disuelto en el polímero.

2.5 Trabajos experimentales de inyección-reacción

Diversos trabajos experimentales sobre inyección-reacción han sido reportados en la literatura; para una placa de espuma polimérica, Zang *et al.* [4] analizaron la densidad y la morfología de las celdas (burbujas) con HDPE de diferente peso molecular (4 clases de HDPE), y encontraron que la formación de espuma disminuyó al aumentar el peso molecular y aumentó con el contenido de agente espumante. Observaron que el tamaño medio de celda era también una fuerte función del peso molecular y el contenido de agente espumante, concluyendo que al aumentar tanto el peso molecular y la cantidad del agente espumante el tamaño de la celda se ve disminuido, y la densidad de celdas también aumentó al incrementarse el peso molecular.

Tovar-Cisneros *et al.* [20] analizaron el efecto de la temperatura del molde en el espesor de las paredes con el fin de determinar la influencia de este parámetro en la morfología estructural y propiedades mecánicas (impacto y flexión) de las piezas moldeadas. En la Tabla 2.2 se muestra la relación del espesor de piel-núcleo, diámetro de burbuja y densidad de celda, donde e_s es el espesor superior, e_i es el espesor inferior, e_n es el espesor del núcleo, T_M la temperatura del molde, D el diámetro de celda y N_f la densidad de celdas por cm^3 .

Observaron que cuando la temperatura del molde es homogénea, esto es, las dos caras del molde a la misma temperatura se obtiene una estructura simétrica en la piel superior e inferior de la pieza cuyo espesor se incrementa cuando decrece la temperatura del molde, debido a que colapsa una mayor cantidad de burbujas motivado por el cambio

de temperatura. El diámetro de celda presenta un ligero incremento al disminuir la temperatura, y por lo tanto una disminución en la densidad de celda.

Tabla 2.2. Efecto de la temperatura del molde en la morfología de la espuma

$T_M(^{\circ}\text{C})$	e_s (%)	e_i (%)	e_n (%)	D (μm)	N_f (10^4 celdas/ cm^3)
80	14.0	13.8	72.2	30 \pm 7	85.4 \pm 4.4
70	21.4	21	57.6	45 \pm 8	58.2 \pm 5.3
60	27	26.7	46.3	61 \pm 9	21.7 \pm 3.2
50	30.6	31.3	38.1	88 \pm 15	14.4 \pm 0.7
40	32.7	32.7	34.7	94 \pm 16	8.8 \pm 1.1
30	34.8	33.8	31.5	101 \pm 20	8.7 \pm 1.6

Tabla 2.3. Efecto de variar la temperatura del molde en la morfología de la espuma

$T_M(^{\circ}\text{C})$	$\Delta T_M(^{\circ}\text{C})$	e_s (%)	e_i (%)	e_n (%)	D (μm)	N_f (10^4 celdas/ cm^3)
80	0	14.0	13.8	72.2	29 \pm 7	85.4 \pm 4.4
70	10	18.0	14.9	67.2	30 \pm 7	80.1 \pm 7.5
60	20	20.4	16.4	63.2	32 \pm 6	67.9 \pm 8.8
50	30	26.0	19.7	54.3	78 \pm 19	12.0 \pm 1.4
40	40	29.5	17.7	52.8	84 \pm 18	9.6 \pm 0.6
30	50	34.2	17.5	48.3	98 \pm 18	9.0 \pm 1.4

*Donde ΔT_M es la diferencia de temperatura entre las caras del molde de inyección.

Al variar la temperatura en la cara de los moldes observaron para los espesores superior e inferior una estructura asimétrica, en la Tabla 2.3 se muestra el porcentaje del espesor piel-núcleo donde se aprecia esta variación con respecto a los moldes a temperatura constante, se nota además que el diámetro de celda y densidad de celda mantuvieron una tendencia similar a la de los moldes con temperatura fija. En otro trabajo Gosselin y Rodrigue [21] proponen dos métodos para calcular la morfología de las celdas en espumas poliméricas, el primero considera una superficie exacta que contiene un número indeterminado de celdas, mientras que la segunda considera un número

exacto de celdas dispersas en una superficie de área indeterminada, con la finalidad de representar la morfología celular tridimensional.

2.6 Simulación de inyección de espumas poliméricas

2.6.1 Simulación del moldeo por inyección

La habilidad para fabricar moldes y controlar las máquinas de moldeo por inyección ha sido un verdadero reto. La falta de conocimiento sobre el diseño de moldes ha provocado que se produzcan piezas plásticas con deformación, encogimiento y exceso de aire atrapado. Actualmente estos problemas se pueden predecir y resolver durante la etapa de diseño del molde con ayuda de la *simulación de moldeo por inyección* (IMS por sus siglas en inglés). IMS juega un papel importante para determinar el diseño apropiado del molde y ayuda a determinar los parámetros óptimos de procesamiento. En la industria de manufactura convencional de polímeros, para la mayoría de los moldes fabricados, se tiende a ignorar la etapa de simulación, usándose directamente en línea y tratando de optimizar los parámetros de inyección por el método de prueba y error. Esto provoca que sea necesario dedicar bastante tiempo y el costo de los desperdicios es demasiado alto para lograr las condiciones óptimas de proceso, provocando una menor competitividad en el mercado.

IMS puede ser llevada a cabo por softwares comerciales como Moldflow[®], Polyflow[®], C-MOLD[™], Moldex-3D[®] y ANSYS[®]-CFX para generar los patrones de flujo, aire atrapado, fracción concentración, tiempo de llenado, puntos de soldadura, orientación de la superficie y otras propiedades más [22].

2.6.2 Simulación del moldeo por inyección-reacción

El modelado y la simulación numérica de espumas poliméricas es una difícil tarea, en primer plano se observa que la nucleación de microburbujas ocurre de forma heterogénea y con defectos, viéndose afectado también por impurezas o el tipo de agente nucleante usado. Hasta el momento no se cuenta con un modelo que describa

satisfactoriamente la nucleación de las burbujas en un polímero. En segundo plano, las espumas reales tienen una notable estructura aleatoria, con diversos tamaños de burbuja muy próximos unos con otros.

El moldeo por inyección-reacción (FRIM, por sus siglas en inglés) es una de las más populares y usadas en la producción de espumas poliméricas. El FRIM es un proceso que consta de muchos fenómenos, incluyendo mezcla de fases, reacción química, nucleación de burbujas, crecimiento de las burbujas, y transporte de calor, masa y momentum [16]. Cada uno de estos complejos fenómenos ha sido estudiado y es una tarea compleja considerarlos a todos simultáneamente. Dongjin Seo et al. [16] realizaron un análisis numérico basado en el FRIM para el polipropileno utilizando el método de volumen finito y observaron que la densidad de la espuma polimérica decrece con respecto al tiempo al aumentar la cantidad de agente espumante inmerso en la matriz polimérica, cómo se muestra en la Figura 2.2.

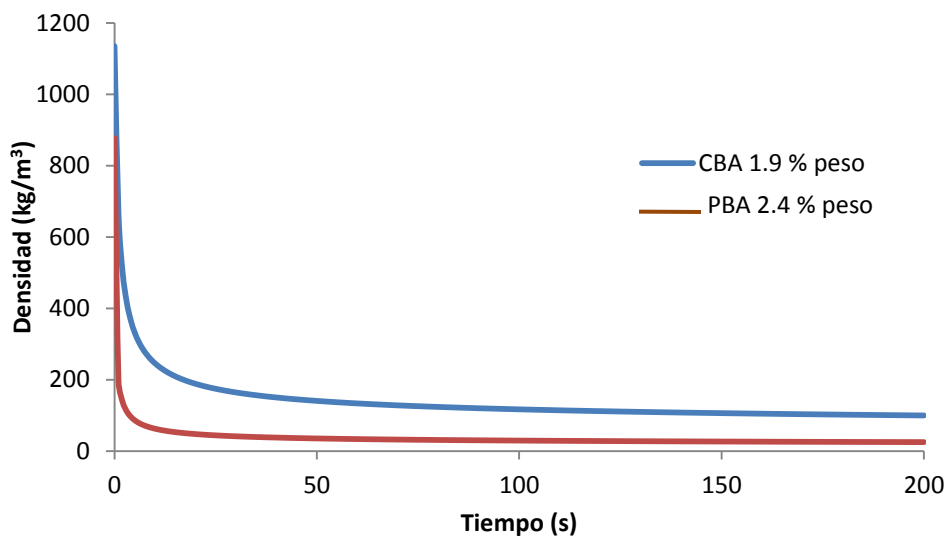


Figura 2.2. Comportamiento de la densidad de la espuma de poliuretano con dos diferentes agentes espumantes.

2.6.3 Simulación de la distribución de burbujas en espumas poliméricas

La distribución final de burbujas en las espumas poliméricas depende en gran medida de la tasa de nucleación y de la dinámica de crecimiento de las burbujas. Debido a la complejidad del fenómeno de nucleación y crecimiento de burbujas se cuenta con una

reducida bibliografía. Shafi *et. al* [7] reporta estudios sobre la distribución de burbujas en espumas poliméricas basados en la teoría clásica de nucleación.

Gabriel O. Alokú *et. al.* [14] realizaron un trabajo de simulación numérica para el proceso de inyección de una espuma polimérica de polietileno de baja densidad (LDPE, por sus siglas en inglés) utilizando el modelo viscoelástico simple (SVM, por sus siglas en inglés), usando como herramienta el simulador Polyflow[®], en la Figura 2.3 se observan los resultados numéricos y muestran que la densidad de espuma del LDPE disminuye de manera significativa con la aumento de la concentración del agente espumante.

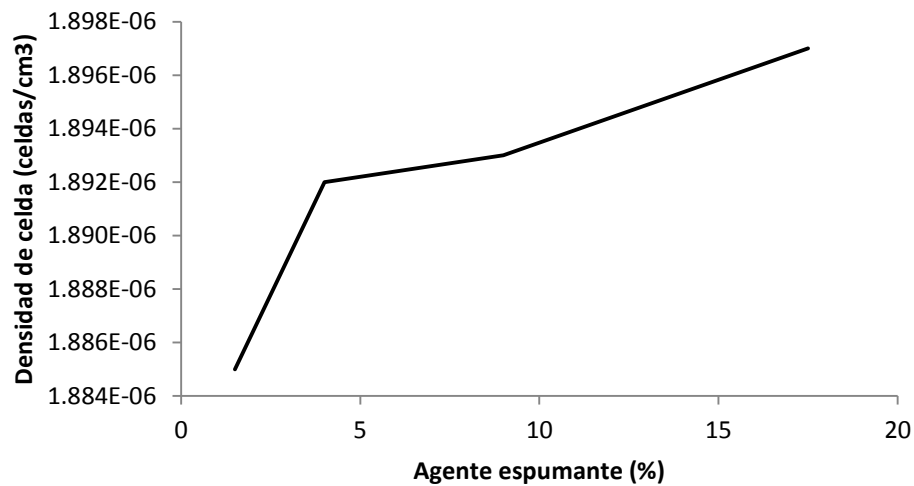


Figura 2.3. Densidad de celda en relación con la cantidad de agente espumante.

Leung, S.N., *et al.* [5] desarrollaron una investigación basada en la simulación numérica del fenómeno de crecimiento de burbujas en espumas poliméricas donde obtienen el perfil de crecimiento de las burbujas y comparan sus resultados con resultados experimentales, demostrando que los perfiles de crecimiento simulados para burbujas nucleadas a diferentes tiempos se pueden predecir con precisión.

2.7 Introducción a la simulación de fluidos en CFD

2.7.1 Teoría y ecuaciones de gobierno

Un fluido polimérico incomprensible puede ser modelado por las ecuaciones de conservación de masa y momento. Las ecuaciones de conservación de masa y momento pueden ser expresadas como:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.5)$$

y

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.6)$$

respectivamente, donde \mathbf{v} es la velocidad, ρ es la densidad del fluido, p es la presión, $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de esfuerzos y está dado por las ecuaciones constitutivas que describen los efectos viscoelásticos los cuales se describen a continuación.

2.7.2 Efectos viscoelásticos en el proceso de inyección

El entendimiento cuantitativo de la dinámica del crecimiento de las espumas en los fluidos poliméricos es de gran significado en un amplio rango de aplicaciones industriales. En el proceso de espumado-inyección está regido por dos mecanismos físicos: (1) la relajación del líquido polimérico originado por el retroceso y relajación de las estrechas cadenas poliméricas a medida que salen del usillo; y (2) el crecimiento de las burbujas implica balances simultáneos de masa, momento y transferencia de energía entre las burbujas y el medio ambiente. Con el fin de simular la mayor precisión del proceso de espumado, el modelo computacional debe tomar en cuenta estos dos mecanismos [14].

Se han desarrollado distintos modelos que estudian el efecto de irreversibilidad y velocidad de deformación en el proceso de inyección los cuales tienen muy buenas aproximaciones a los datos experimentales, los modelos más usados que describen los efectos viscoelásticos son:

- Modelo de ley de Potencia

$$\eta = m\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.7)$$

Donde m y n son constantes que caracterizan al fluido, $\dot{\gamma}$ la velocidad de deformación y $n-1$ es la pendiente de $\log \eta$ y $\log \dot{\gamma}$.

- Modelo de Bird-Carreau

$$\eta = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) (1 + \lambda^2 \dot{\gamma}^2)^{(n_i-1)/2} \quad (2.8)$$

Donde η_0 es la viscosidad cero de velocidad de corte, η_{∞} es la viscosidad infinita de velocidad de corte, λ es la relajación con el tiempo, n_i describe la pendiente en la región del modelo de ley de potencia y $\dot{\gamma}$ es la velocidad de deformación.

- Modelo viscoelástico simplificado (SVM):

El SVM es una extensión del modelo generalizado de Newton, en el que el tensor de esfuerzos esta dado por:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \psi \mu(\dot{\chi}) \dot{\chi} & \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma} & 0 \\ \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

donde $\dot{\chi}$ es una variable viscoelástica gobernada por una ecuación de transporte dependiente del tiempo λ , $\mu(\dot{\chi})$ es la viscosidad normal y ψ es un factor de peso.

- Modelo exponencial de Phan-Thien-Tanner (EPPT)

En el modelo EPPT el tensor de esfuerzo se divide en una parte viscosa σ_N y una parte viscoelástica σ_p :

$$\sigma = \sigma_N + \sigma_p \quad (2.10)$$

- Modelo de doble convección (DCPP)

El modelo DCPP calcula el tensor de esfuerzo viscoelástico σ_p basado en la orientación del tensor S y el escalar \wedge :

$$\sigma_p = \frac{G}{1-\xi} (3 \wedge^2 S - I) \quad (2.11)$$

donde G es el módulo de relajación, ξ es la diferencia entre la razón del segundo y el primer valor del estrés normal.

Para el presente trabajo se utilizó el modelo de la ley de la potencia debido a la factibilidad de disponer de los parámetros que gobiernan su comportamiento.

2.8 Flujos multifásicos-polidispersos

2.8.1 Modelo Euleriano-Euleriano

El enfoque Euleriano-Euleriano es la aproximación más general para resolver problemas que involucran flujos multifásicos. Este enfoque se basa en el principio de interpenetración continua, en el cual el comportamiento de cada fase es descrito mediante las ecuaciones de Navier-Stokes. Las fases comparten el mismo volumen y compenentran entre sí en el espacio, intercambiando masa, momentum y energía. Cada fase es descrita por medio de sus propiedades físicas, y por sus propios campos de velocidad, presión, concentración y temperatura.

Para sistemas continuo-dispersos, la velocidad de cada fase es calculada por medio de las ecuaciones de Navier-Stokes. La fase dispersa puede estar presente en forma de partículas rígidas, gotas o burbujas. Las fuerzas que actúan sobre la fase dispersa son modeladas utilizando correlaciones empíricas y son incluidas como términos de la transferencia en la interfaz [5].

El modelo Euleriano es el más complejo y el más general para resolver problemas de flujo multifásico. En este modelo, se resuelve un conjunto de ecuaciones de momentum y continuidad para cada fase. El acoplamiento entre las ecuaciones de momentum se logra mediante la presión y la implementación de términos de transferencia interfacial, dependiendo del tipo de fases presentes en el sistema [5], a continuación se muestran los balances correspondientes utilizados en el análisis.

2.9 Balances de materia y momentum para cada fase

2.9.1 Ecuaciones de continuidad

La ecuación de continuidad (conservación de masa) para la fase líquida es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l) = 0 \quad (2.12)$$

y para la fase gaseosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (2.13)$$

2.9.2 Ecuaciones de momentum

El balance de momentum para la fase líquida es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \vec{v}_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l \vec{v}_l) = \alpha_l \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_l \mu_{eff,l} \tau) + \alpha_l \rho_l \vec{g}_l + \vec{F}_l \quad (2.14)$$

mientras que para la fase gaseosa es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = \alpha_g \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_g \mu_{eff,g} \tau) + \alpha_g \rho_g \vec{g}_g + \vec{F}_g \quad (2.15)$$

donde los subíndices l y g se refieren a la fase líquida y gaseosa, respectivamente, ρ es la densidad, v es el vector de velocidad, α es la fracción volumétrica, g es la fuerza gravitacional, p es la presión y μ_{eff} es la viscosidad efectiva, la cual se calcula a partir de la viscosidad molecular μ , la viscosidad turbulenta μ_t y τ es el tensor de corte para fluidos no newtonianos. A las ecuaciones anteriores se debe considerar agregar el tensor de esfuerzos dependiendo del tipo de ecuación constitutiva que se pretenda utilizar.

2.10 Modelado del tamaño y distribución de las burbujas

En el presente trabajo se utilizó el modelo de *Distribución de múltiples tamaños* (*Multiple Size Group*, MUSIG por sus siglas en inglés) el cual fue desarrollado para manejar fluidos polidispersos con alta variación en el tamaño de partícula. El modelo consiste en dividir el intervalo de diámetros que pueden tener las burbujas en una serie de grupos o subintervalos, los cuales se asume que fluyen prácticamente con la misma velocidad. Uno

de los atributos de este modelo, es que considera que las partículas de diferente tamaño pueden interactuar entre sí por medio de los mecanismos de rompimiento y coalescencia, con base en un modelo de balance de población. El modelo de población determina la distribución de los tamaños de partícula en un fluido polidisperso. El balance de población para las burbujas en el modelo MUSIG puede expresarse como [5]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\overline{v_g} \cdot n_i] = B_B - D_B + B_C - D_C \quad (2.16)$$

donde $\overline{v_g}$ es la velocidad del gas, n_i representa la densidad de partículas del grupo de diámetro i (con una masa i, m_i) y B_B, D_B, B_C y D_C representan la natalidad ($B, birth$) y mortalidad ($D, death$) de las burbujas, los sub-índices indican rompimiento (B) y coalescencia (C).

2.11 Modelado de la coalescencia entre las burbujas

El modelo Prince y Branch es de los más utilizados para describir el proceso de natalidad y mortalidad de burbujas, el cual asume que la coalescencia entre dos burbujas ocurre en 3 pasos:

- Una burbuja de diámetro i choca con una burbuja de diámetro j , atrapando una pequeña cantidad de líquido entre ellas.
- La película de líquido se escurre hasta alcanzar un espesor crítico.
- La película de líquido se rompe y las burbujas se unen.

El proceso de coalescencia depende entonces de la tasa de colisión entre las dos burbujas Q_{ij} , la cual a su vez es el resultado de 3 mecanismos: la turbulencia Q_{ij}^T , el corte laminar Q_{ij}^{LS} y la flotación Q_{ij}^B . La tasa total de coalescencia entre dos burbujas puede expresarse como:

$$Q_{ij} = (Q_{ij}^T + Q_{ij}^{LS} + Q_{ij}^B) \phi_{ij} \quad (2.17)$$

Y además depende de la eficiencia de coalición de burbujas, esta eficiencia es función del tiempo requerido para la coalescencia t_{ij} y el tiempo de contacto τ_{ij} .

$$\varphi_{ij} = e^{-t_{ij}/\tau_{ij}} \quad (2.18)$$

2.12 Modelado del rompimiento de las burbujas

Basados en la teoría de turbulencia isotrópica y de probabilidad Luo y Svendsen [16] desarrollaron un modelo teórico para la predicción del rompimiento de gotas y burbujas en suspensiones turbulentas. Para tal modelo ellos encontraron que la tasa de rompimiento de las burbujas de diámetro i que originan burbujas de diámetro j es descrita con la siguiente expresión:

$$g(m_i, m_j) = 0.923 F_B (1 - \alpha_g) \left(\frac{\varepsilon_c}{d_j^2} \right) \int_{\xi_{\min}}^1 \frac{(1 + \xi)^2}{\xi^{11/3}} e^{-\chi} d\xi \quad (2.19)$$

donde F_B es un parámetro de calibración del modelo, d_j es el diámetro de las burbujas, ξ es el tamaño adimensional de los remolinos, considerando turbulencia isotrópica, χ es la energía crítica adimensional para el rompimiento.

2.13 Coeficiente de Tensión Superficial

En la inyección de polímeros espumosos la tensión superficial es uno de los parámetros fisicoquímicos más importantes en la ingeniería de polímeros, este es el principal factor para determinar la nucleación y crecimiento de las burbujas en la espuma. En los polímeros, generalmente al incrementarse la temperatura y presión, la tensión superficial decrece mostrando un incremento en la nucleación generando burbujas más pequeñas y uniformes.

H. Wei *et al.* [22] reportan una correlación obtenida de manera experimental mediante el método de Axisymmetric Drop Shape Analysis-Profile (ADSA-P) para el cálculo de la tensión superficial entre el polietileno de alta densidad (HDPE) y el nitrógeno (N_2).

$$\gamma = 31.7534 - 0.04611T - 0.00165P \quad (2.20)$$

donde esta γ no debe confundirse con las de los modelos de esfuerzo.

Tomando en cuenta las siguientes restricciones:

$$\begin{aligned} 125 \text{ }^{\circ}\text{C} < T < 190 \text{ }^{\circ}\text{C} \\ 500 \text{ psi (3445 kPa)} < P < 1500 \text{ psi (10, 335 kPa)} \end{aligned} \quad (2.21)$$

donde la tensión superficial del HDPE en Nitrógeno está dada en mJm^{-2} , la temperatura T en $^{\circ}\text{C}$ y la presión en psi. Posterior al análisis de formación de burbujas debe realizarse el análisis de turbulencia en el volumen de control.

2.14 Principios de Turbulencia

La turbulencia consiste en fluctuaciones en el campo de flujo en tiempo y espacio. Se trata de un proceso complejo, sobre todo porque es tridimensional, inestable y se compone de muchas escalas. Puede tener un efecto significativo en las características del flujo. La turbulencia se produce cuando las fuerzas de inercia en el fluido se vuelven significativas en comparación con las fuerzas viscosas, y se caracteriza por un alto número de Reynolds. En principio, las ecuaciones de Navier-Stokes describen tanto el flujo laminar y turbulento sin la necesidad de información adicional. Sin embargo, los flujos turbulentos con números de Reynolds realistas abarcan una amplia gama de longitud de escalas y de tiempos turbulentos, normalmente implican escalas de longitud mucho menor que el más pequeño volumen finito de la malla que se puede utilizar en un análisis numérico.

La Simulación Numérica Directa (DNS) de estos flujos requeriría una potencia de cálculo que actualmente demanda una gran cantidad de recursos computacionales. Para agilizar el cálculo de los efectos de la turbulencia que se predijo, una gran cantidad de investigaciones se ha concentrado en métodos CFD que hacen uso de modelos de turbulencia. Diversos modelos de turbulencia se han desarrollado específicamente para dar cuenta de los efectos de la turbulencia sin recurrir a una prohibitivamente malla fina y simulación numérica directa.

Cuando se desea modelar la turbulencia en un flujo no homogéneo en el que existen una fase continua y una fase dispersa, se puede utilizar un modelo dependiente de la fase, en el cual, la turbulencia de cada fase se aproxima con un modelo diferente. En el modelo dependiente de la fase, los modelos disponibles para la fase dispersa están limitados a los modelos algebraicos, como el laminar o el llamado “cero ecuaciones”,

debido a que otros modelos no se consideran apropiados. Por otra parte, los modelos de dos ecuaciones, como el *SST* o el $\kappa-\varepsilon$, son útiles para aproximar la turbulencia en la fase continua. El acoplamiento de dos modelos de turbulencia diferentes permite ajustar la viscosidad de la fase dispersa en forma proporcional a la viscosidad de remolino de la fase continua [5].

2.14.1 Modelo RNG $\kappa-\varepsilon$ (fase líquida)

Los modelos de turbulencia de dos ecuaciones son ampliamente utilizados en las simulaciones CFD, debido que ofrecen un buen compromiso entre esfuerzo numérico y precisión computacional, además de ser mucho más sofisticados que los modelos de cero ecuaciones. En estos modelos, tanto la escala de velocidad turbulenta como la escala de longitud turbulenta se resuelven por medio de ecuaciones de transporte independientes (de ahí que se conozcan como modelos de dos ecuaciones) [22]. Uno de los más prominentes modelos de turbulencia de dos ecuaciones es el modelo RNG $\kappa-\varepsilon$, el cual, además de ser estable, numéricamente robusto, y tener un régimen bien establecido de su capacidad de predicción, es considerado el modelo estándar para simulaciones CFD a nivel industrial [5].

En el modelo de turbulencia $\kappa-\varepsilon$, la escala de velocidad de turbulencia es calculada a partir de la energía cinética de turbulencia (κ), la cual es provista por la solución de su ecuación de transporte. Por su parte, la escala de longitud de turbulencia es estimada a partir de la energía cinética de turbulencia y de la tasa de disipación de la misma (ε), la cual es provista por la solución de su ecuación de transporte.

Las ecuaciones de transporte para κ y para ε en este modelo son las siguientes [5]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \kappa_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l \kappa_l) = \nabla \cdot \left[\alpha_l \left(\left(\mu + \frac{\mu_{tl}}{\sigma_k} \right) \nabla \kappa_l \right) \right] + \alpha_l (P_l - \rho_l \varepsilon_l) \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \varepsilon_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l \varepsilon_l) = \nabla \cdot \left[\alpha_l \left(\left(\mu + \frac{\mu_{tl}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \kappa_{\varepsilon-l} \right) \right] + \alpha_l \frac{\varepsilon_l}{\kappa_l} (C_{\varepsilon 1} P_l - C_{\varepsilon 2} \rho_l \varepsilon_l) \quad (2.23)$$

donde los subíndices l y g se refieren a la fase líquida y gaseosa, respectivamente ρ , es la densidad, \vec{v} es el vector de velocidad, α es la fracción volumétrica μ_{ll} es la viscosidad turbulenta de la fase líquida, κ_{g-l} es la disipación y P_l es la producción de turbulencia debida a esfuerzos viscosos.

2.15 Métodos numéricos del CFD

2.15.1 Discretización de las ecuaciones gobernantes

Para sistemas complejos fuera de la idealidad se requiere de métodos robustos de solución, con la finalidad de resolver las ecuaciones involucradas en los fenómenos complejos a tratar. El método de volumen finito es utilizado para discretizar y resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales parciales presentes en los fenómenos de dinámica de fluidos, éste método es usado por ANSYS en el apartado de CFX software mediante el cual se abordó el presente trabajo. En este método el volumen de control es discretizado y seccionando mediante una malla tridimensional, con la finalidad de generar volúmenes finitos que contendrán las ecuaciones de momentum, calor y masa. En este método cada variable y propiedad del fluido es almacenada en un los vértices de la malla llamados *nodos*.

En la Figura 2.4 se muestra la superficie de una malla donde el área sombreada representa el volumen de control y se genera en torno de cada nodo utilizando el concepto de la *media dual* (definida por las líneas que unen la parte central de los límites y de los elementos que rodean el nodo).

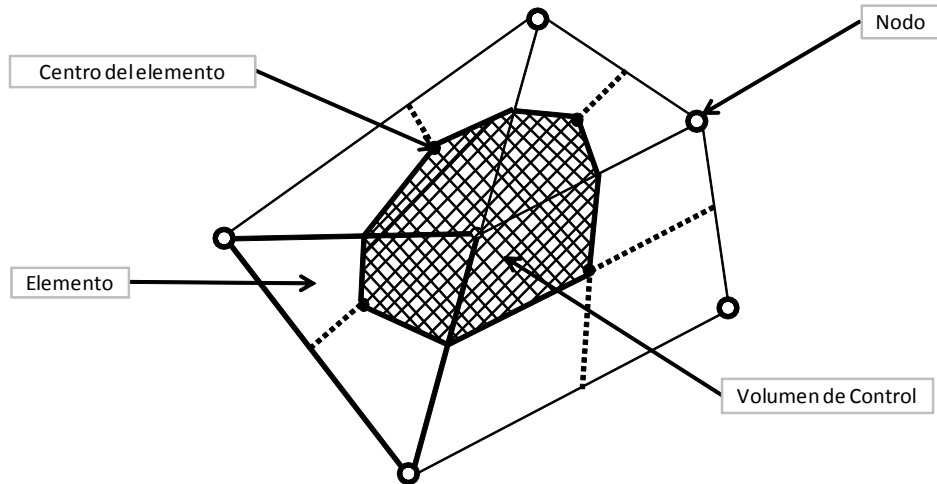
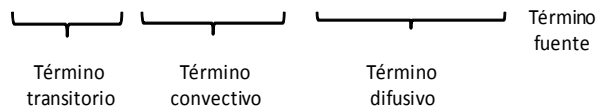


Figura 2.4. Módulos de una malla para el elemento finito [5].

Las ecuaciones que gobiernan el flujo a través de este volumen de control se describen mediante la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) \right] + S_\phi \quad (2.24)$$



donde ϕ es una variable dependiente, Γ_ϕ es un coeficiente de difusión para ϕ , y S_ϕ es un término fuente. El término convectivo en la ecuación 2.24 representa el flux de la variable ϕ en convección por el flujo. El término difusivo representa el movimiento aleatorio de las moléculas debido a los gradientes en la densidad o número de moléculas.

El término de fuente describe la producción o destrucción de ϕ , el cual puede también ser usado para modelar cualquier término que no pueda ser representado por los términos de convección o difusión y cada una de las ecuaciones diferenciales parciales se integran para cada volumen de control.

Para el método del volumen finito, las ecuaciones diferenciales parciales de flujo, representadas por la ecuación (2.24), se integran sobre cada volumen de control. En la

Figura 2.5 se muestra un esquema de los volúmenes de control utilizados en el método del volumen finito.

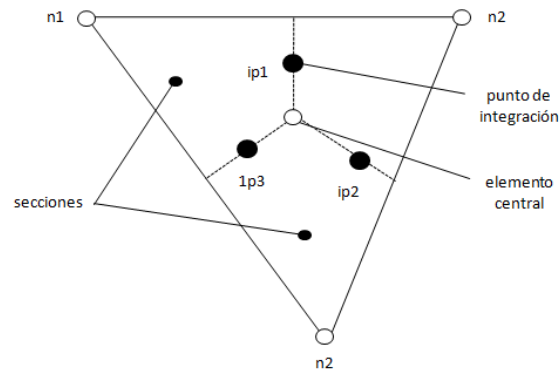


Figura 2.5. Discretización de elementos en el volumen de control.

Las integrales de volumen se discretizan dentro de cada sector de elemento y acumularán al volumen de control a la que pertenece el sector. Integrales de superficie se discretizan en los puntos de integración (IPN *por sus siglas en inglés*) situado en el centro de cada segmento de superficie dentro de un elemento y luego distribuidos a los volúmenes de control adyacentes. Debido a que las integrales de superficie son iguales y opuestas para volúmenes de control adyacentes a los puntos de integración, las integrales de superficie se garantiza que sean localmente conservadoras.

La integración de la Ecuación 2.24 sobre un volumen de control proporciona la siguiente ecuación:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i \phi) dV - \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) \right] dV = \int_V S_\phi dV \quad (2.25)$$

Se puede observar que las integrales de volumen para los términos de convección y de difusión en la Ecuación 2.25 incluyen operadores de divergencia y de gradiente. Es por ello que para simplificar estos términos, estas integrales de volumen pueden convertirse en integrales de superficie aplicando el Teorema de la Divergencia de Gauss, con lo cual se obtiene:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV + \int_S \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i \phi) n_i dV - \int_S \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) \right] n_i dV = \int_V S_\phi dV \quad (2.26)$$

donde n_i es el componente cartesiano del vector normal a la superficie exterior. Esta ecuación contiene cuatro términos que necesitan ser discretizados: un término transitorio, un término de difusión, un término de convección, y un término fuente. Las ecuaciones de momentum (ecuaciones 2.12 y 2.13) también contienen un término de presión, el cual no satisface la forma general de una ecuación de transporte (ecuación 2.24). A continuación se presenta una descripción del procedimiento de discretización para estos cinco términos, la cual por simplicidad se presenta considerando dos dimensiones. Cabe mencionar que esta descripción puede extenderse a tres dimensiones por analogía.

2.15.2 Funciones de forma

La resolución de la Ecuación (2.25), requiere de la evaluación de las variables o sus gradientes en los puntos de integración (en adelante denotados por ip). ANSYS - CFX lleva a cabo esto aproximando la solución de las incógnitas en todo el volumen de control mediante funciones de forma, las cuales interpolan el valor de las variables en cualquier punto del volumen de control a partir de las soluciones conocidas en los puntos nodales. Dado un elemento con n número de nodos, la solución de una variable ϕ en cualquier punto de dicho elemento puede ser aproximadamente la siguiente expresión.

$$\phi = \sum_{i=1}^n N_i \phi_i \quad (2.27)$$

donde N_i es la función de forma para el nodo i , mientras que ϕ_i es el valor de ϕ en dicho nodo. La sumatoria en la expresión se realiza sobre todos los nodos de un elemento.

Las funciones de forma poseen las siguientes propiedades:

$$\sum_{i=1}^n N_i = 1 \quad (2.28)$$

$$\text{En el nodo } i, N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

A continuación se describen las funciones de forma para el caso de los elementos usados para estructurar la malla de dominio computacional, en el presente trabajo se

utilizaron dos de los cuatro tipos de elementos que maneja el software ANSYS - CFX, los elementos se describen abajo.

2.15. 3 Elemento Hexaédrico:

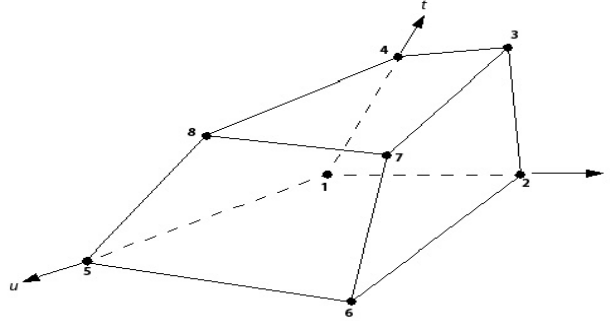


Figura 2.6. Elemento hexaédrico de una malla.

$$N_1(s, t, u) = (1-s)(1-t)(1-u) \quad (2.29)$$

$$N_2(s, t, u) = s(1-t)(1-u) \quad (2.30)$$

$$N_3(s, t, u) = st(1-u) \quad (2.31)$$

$$N_4(s, t, u) = (1-s)(1-t)u \quad (2.32)$$

$$N_5(s, t, u) = (1-s)(1-t)u \quad (2.33)$$

$$N_6(s, t, u) = s(1-t)u \quad (2.34)$$

$$N_7(s, t, u) = stu \quad (2.35)$$

$$N_8(s, t, u) = (1-s)tu \quad (2.36)$$

2.15.3 Elemento Tetraédrico:

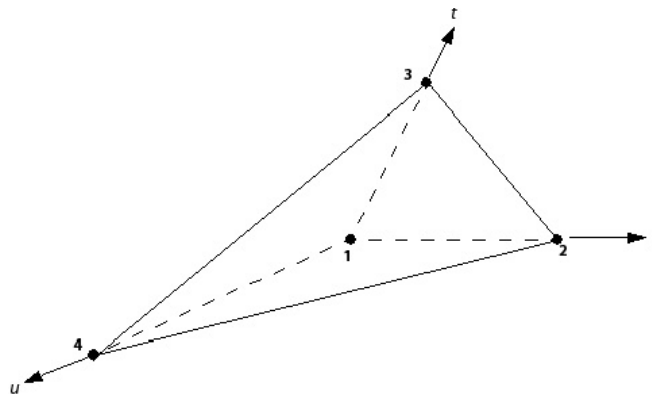


Figura 2.7. Elemento tetraédrico de una malla.

las funciones de forma para los nodos 1,2 3 y 4 son, respectivamente:

$$N_1(s, t, u) = 1 - s - t - u \quad (2.37)$$

$$N_2(s, t, u) = s \quad (2.38)$$

$$N_3(s, t, u) = t \quad (2.39)$$

$$N_4(s, t, u) = u \quad (2.40)$$

2.15. 4 Término transitorio

El término transitorio en la forma integral de la ecuación general de transporte (ecuación 3.13) en el n -ésimo paso de tiempo está dado por la siguiente aproximación para un flujo incompresible.

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \phi dV \approx V \rho \frac{\phi^{n+\frac{1}{2}} - \phi^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \quad (2.41)$$

en el cual los superíndices $n - \frac{1}{2}$ los $n + \frac{1}{2}$ indican los valores de comienzo indican los valores al comienzo y al final del paso de tiempo, respectivamente, y donde Δt es el tamaño del paso del tiempo. Estos valores pueden obtenerse ya sea por medio del esquema de primer orden de Euler hacia atrás, o por medio del esquema de segundo orden de Euler hacia atrás. Si se utiliza el primero de estos esquemas, los valores de $n - \frac{1}{2}$ y $n + \frac{1}{2}$ son aproximados utilizando los valores de la solución del tiempo previo y del tiempo actual, respectivamente, es decir ϕ^{n-1} y ϕ^n . Por lo tanto se tiene:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \phi dV = V \rho \frac{\phi^n - \phi^{n-1}}{\Delta t} \quad (2.42)$$

Por otra parte, el esquema de segundo orden de Euler hacia atrás, el cual es más preciso, pero computacionalmente más costoso, aproxima los valores al principio y al final del paso de tiempo n utilizando los valores de solución previos en dos niveles, es decir ϕ^{n-1} y ϕ^n . Por lo tanto se tiene:

$$\phi^{n-\frac{1}{2}} = \phi^{n-1} + \frac{1}{2}(\phi^{n-1} - \phi^{n-2}) \quad (2.43)$$

$$\phi^{n+\frac{1}{2}} = \phi^n + \frac{1}{2}(\phi^n - \phi^{n-1}) \quad (2.44)$$

Debido a que la variable debe ser almacenada para un paso de tiempo extra, este esquema requiere más memoria computacional que el esquema de primer orden de Euler hacia atrás.

2.15.5 Términos difusivos

Mediante la aplicación del método estándar del elemento finito, las funciones de forma son utilizadas para evaluar las derivadas espaciales para todos los términos difusivos. Por ejemplo, la siguiente expresión es utilizada para evaluar la derivada de la variable ϕ con respecto a la dirección x en el punto de integración ip :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ip} = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ip} \phi_i \quad (2.45)$$

donde la sumatoria se realiza sobre todas las funciones de forma presentes en el elemento.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial z} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \\ \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial s} \\ \frac{\partial N}{\partial t} \\ \frac{\partial N}{\partial u} \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

La ecuación 3.35 corresponde a la matriz jacobiana de transformación, la cual permite expresar las derivadas cartesianas de las funciones de forma en términos de sus derivadas locales.

El método para especificar los valores en las caras en términos de los valores de los nodos adyacentes es llamado esquema de advección.

En este esquema, el valor en las caras de una variable es calculado en un punto de integración, esto es ϕ_{ip} , a partir del valor de la variable del nodo adyacente en la dirección normal al flujo (*upwind*), ϕ_{up} y del gradiente de la variable ϕ .

Esto puede expresarse como sigue:

$$\phi_p = \phi_p + \beta \nabla \phi \Delta \vec{r} \quad (2.47)$$

donde β es un factor de combinación y $\Delta \vec{r}$ es el vector que conecta el punto de integración con el nodo vecino. La determinación de los valores de β y $\nabla \phi$ arroja diferentes esquemas que se describen a continuación.

2.15. 6 Esquema de diferenciación upwind de primer orden

El primero de ellos se produce cuando $\beta = 0$. En este caso, el valor de la variable en un punto de integración es igual al valor registrado en el nodo adyacente. Este esquema, a pesar de ser altamente robusto, introduce errores de discretización al término difusivo [5] los cuales tienden a generar pendientes en los escalones de gradientes espaciales, como se muestra en la Figura 3.4.

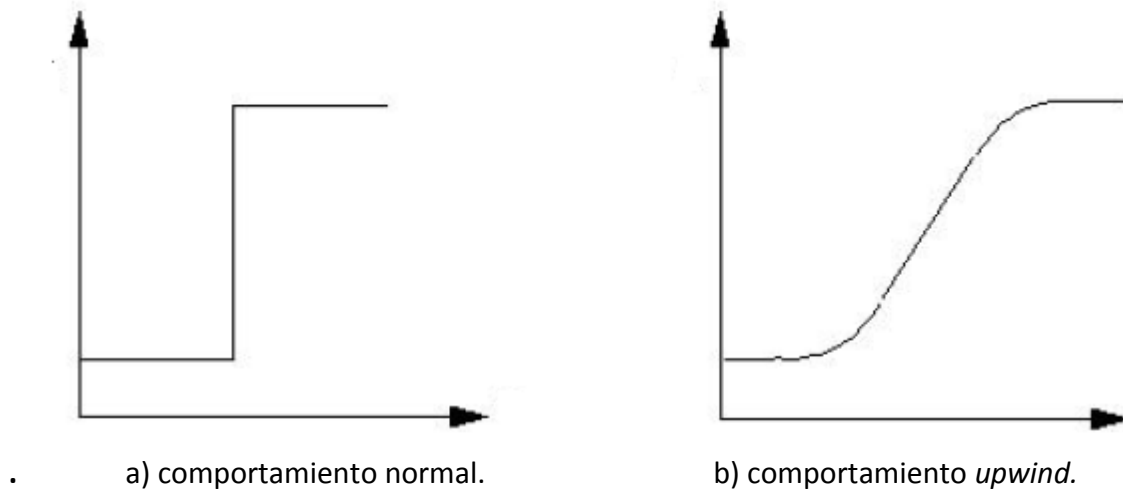


Figura 2.8. Comportamiento de los gradientes espaciales para el esquema upwind de primer orden.

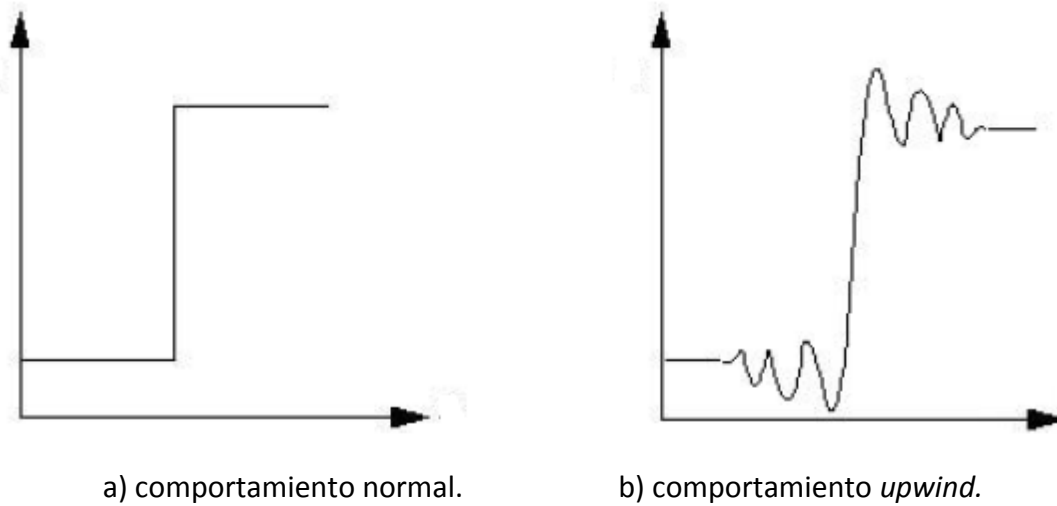


Figura 2.9. Comportamiento de los gradientes espaciales para el esquema de valores especificados.

2.15.7 Esquema de valores especificados

Si como valor inicial se toma entre β entre 0 y 1, y además se elige un valor de $\nabla\phi$ con una magnitud igual al promedio de los gradientes del nodo adyacente, se logra reducir los errores de discretización asociados al esquema *upwind* de primer orden. El término $\beta \nabla\phi\Delta\vec{r}$, llamado término de corrección advectiva, puede visualizarse como una corrección anti-difusiva aplicada al esquema *upwind*. Si se elige un valor de $\beta=1$, generalmente se tiene una precisión de segundo orden, y la discretización resultante reproduce más adecuadamente los escalones de gradientes espaciales que el esquema *upwind* [5].

Sin embargo, este esquema puede introducir errores de discretización que tienden a provocar oscilaciones, no asociadas al comportamiento físico del problema, en regiones que existe una rápida variación en la solución (Figura 2.8).

2.15.8 Esquema de alta resolución

El esquema de alta resolución evalúa un valor de β para cada nodo por medio de un procedimiento no lineal [5]. El flujo advectivo es evaluado utilizando los valores de β y $\nabla\phi$ del nodo adyacente. El procedimiento para evaluar β requiere que primero sean calculados un valor mínimo para ϕ , ϕ_{\min} , y un valor máximo para ϕ , ϕ_{\max} , en cada nodo, utilizando para ello un método de trazado de tres puntos (*stencil*), de los cuales 2 de ellos están ubicados uno en cada nodo adyacente, y el restante está ubicado en el nodo mismo. Posteriormente, para cada punto de integración que rodea al nodo, la Ecuación (3.92) se resuelve para asegurar que β no presente un valor menor que ϕ_{\min} o mayor que ϕ_{\max} . El valor nodal de β corresponde al mínimo valor obtenido al comparar los valores estimados para los puntos de integración adyacentes al nodo en el cual es β evaluado, y que no excede el valor de 1.

2.15.9 Acoplamiento presión-velocidad

ANSYS - CFX utiliza un diseño de malla “no escalonada” (todas las variables son definidas en el mismo punto de la malla), de tal manera que los volúmenes de control son idénticos para todas las ecuaciones de transporte. Sin embargo, como es discutido por Patankar (1980), este tipo de diseños conllevan a un desacoplamiento del campo de presión. Rhie y Chow (1982) propusieron una discretización alternativa para los flujos másicos, con el fin de prevenir el desacoplamiento, y esta discretización fue modificada por Majumdar (1988), que logró remover la dependencia de la solución en estado estacionario con el tamaño del paso de tiempo. Una estrategia similar es utilizada por ANSYS - CFX. Aplicando una ecuación tipo momentum a cada punto de integración, se obtiene una expresión del siguiente tipo para la velocidad advectiva en cada punto de integración:

$$\mathbf{v}_{i,ip} = \bar{\mathbf{v}}_{i,ip} + f_{ip} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|_{ip} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \Big|_{ip} \right) - c_{ip} f_{ip} \left(\mathbf{v}_{i,ip}^0 - \bar{\mathbf{v}}_{i,ip}^0 \right) \quad (2.48)$$

$$f_{ip} = \frac{d_{ip}}{1 - c_{ip} d_{ip}} \quad (2.49)$$

$$d_{ip} = -\frac{V}{A} \quad (2.50)$$

$$c_{ip} = -\frac{\rho}{\Delta t} \quad (2.51)$$

donde A es la aproximación al coeficiente central de la ecuación de momentum, excluyendo el término transitorio, las barras superiores en los términos de velocidad y presión indican el promedio de los valores en el vértice adyacente al punto de integración, mientras que el superíndice 0 indica los valores al paso de tiempo previo.

2.16 Solución de las ecuaciones lineales

ANSYS - CFX utiliza una técnica de factorización ILU multimalla para resolver el sistema discreto de ecuaciones linealizadas. Este es un proceso de solución mediante el cual la solución exacta de las ecuaciones es aproximada en el transcurso de varias iteraciones. El sistema linealizado de ecuaciones discretas puede expresarse de la siguiente forma matricial:

$$[A] [\varphi] = [b] \quad (2.52)$$

donde $[A]$ es la matriz de coeficientes, $[\varphi]$ es el vector solución y $[b]$ es el llamado "llamado término del lado derecho".

La ecuación 3.41 puede resolverse en forma iterativa comenzando con una solución aproximada, φ^n , la cual será mejorada por una corrección, φ' , para llegar a una mejor solución, φ^{n+1} , esto es:

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \varphi' \quad (2.60)$$

donde φ' es la solución de:

$$A\varphi' = r^n \quad (2.61)$$

con r^n , el residual, el cual es obtenido como sigue:

$$r^n = b - A\varphi^n \quad (2.61)$$

La aplicación repetida de este algoritmo proporcionará una solución para la precisión deseada.

2.17 Método de Multimalla Algebraico

Los resolvedores basados en la factorización ILU tienden rápidamente a reducir su desempeño conforme el número de elementos de la malla computacional se incrementa. El desempeño también tiende a disminuir rápidamente si existen grandes relaciones de aspecto en los elementos existentes.

El comportamiento de la convergencia en muchas técnicas de inversión de matrices puede mejorarse considerablemente mediante la aplicación de las técnicas “multimalla”.

El proceso multimalla implica realizar iteraciones primarias en una malla fina e iteraciones posteriores en una malla virtualmente cada vez más gruesa. Los resultados son entonces transferidos desde la malla más gruesa hacia la malla fina original.

El método de Multimalla Algebraico forma un sistema de ecuaciones discretas para una malla gruesa mediante la suma de las ecuaciones de la malla fina. Esto resulta en el engrosamiento virtual del espaciamiento de la malla durante el transcurso de las iteraciones, y en un nuevo refinamiento de la malla que permite obtener una solución exacta. Esta técnica mejora significativamente la velocidad de convergencia [5]. El método de Multimalla Algebraico es computacionalmente menos costoso que otros métodos multimalla debido a que la discretización de las ecuaciones no lineales se lleva a cabo solamente una vez para la malla más fina. ANSYS - CFX implementa una particularidad del método Algebraico Multimalla llamada Corrección Aditiva. Esta aproximación es perfecta para su implementación en el resolvedor del software (CFX - Solver), debido a que toma ventaja del hecho de que las ecuaciones discretas permiten representar el balance de las cantidades conservadas sobre un volumen de control. Las ecuaciones de la malla gruesa pueden originarse a partir de la unión de los volúmenes de control originales para crear volúmenes de control más grandes, como se muestra en la

Figura 2.10. A pesar de que en la Figura 2.10 se muestran las mallas gruesas unidas con una forma regular, en general su forma puede llegar a ser muy irregular. Por lo tanto, las ecuaciones de la malla gruesa imponen requerimientos conservativos sobre un mayor volumen y de este modo permiten reducir el error [5].

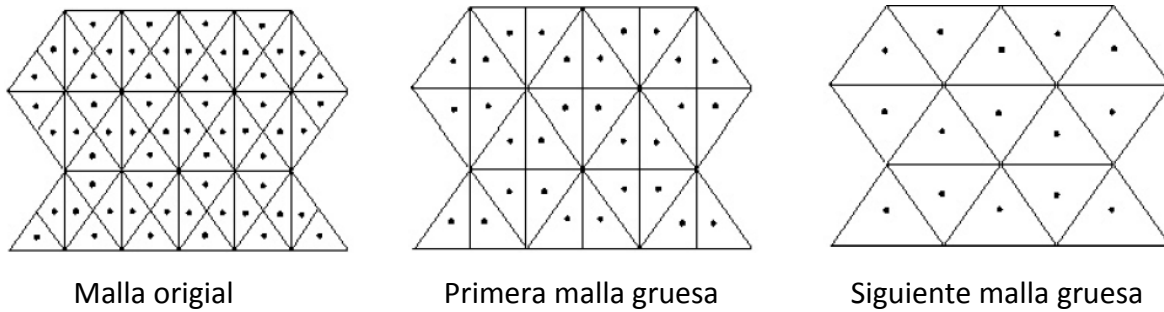


Figura 2.10 Engrosamiento progresivo de la malla en el método multimalla.

2.18 Procedimiento de normalización de residuales

Como se describió anteriormente, el residual $[r]$ es expresado como el imbalance en el sistema linealizado de ecuaciones discretas. Una vez calculados los residuales, estos son normalizados con el propósito de monitorear los valores de la solución y para obtener un criterio de convergencia [5]. Para cada solución de la variable, el residual normalizado está dado en su forma general por:

$$\left[\frac{r_\phi}{a_p \Delta\phi} \right] \quad (2.62)$$

donde r_ϕ es el residual del volumen de control, a_p es el coeficiente representativo del volumen de control y $\Delta\phi$ es el intervalo representativo de la variable de dominio. El cálculo de a_p y $\Delta\phi$ no es simple y no será presentado en este trabajo.

2.19 Aplicación de CFD en polímeros

La Dinámica Computacional de Fluidos está basada en la simulación para el análisis de sistemas que involucran el flujo de fluidos, transferencia de calor y en ocasiones se asocia el fenómeno de reacción química, y en especial el desarrollo de modelos que permitan representar y entender los flujos multifásicos en estado transitorio. Además el aumento en la capacidad de los recursos computacionales ha provocado un especial enfoque hacia el CFD, debido a su fácil adaptación a diversos campos de investigación, el cual tiene ventajas como:

- Tiene la habilidad para representar sistemas donde experimentalmente es difícil su control.
- Cuando el rango de datos experimentales se ve limitado debido a las características del equipo o a la técnica usada, el CFD puede proveer un rango de datos mucho más amplio que el que se tendría de forma experimental.
- Las interacciones físicas complejas en los fluidos pueden ser modeladas simultáneamente.

El procedimiento para un análisis en CFD es el siguiente:

- En el volumen de control se genera una malla de puntos en la cual se almacenan las variables a calcular por el CFD.
- Posteriormente se alimentan las condiciones de frontera para evaluar las variables a calcular.
- Proporcionar las propiedades del fluido, tales como viscosidad, conductividad térmica etc.
- Seleccionar los modelos los cuales definirán el flujo, turbulencia, transferencia de calor y masa, además de los sistemas multifásicos.
- Introducir las condiciones iniciales para proveer un cálculo inicial dependiendo si se trata de estado estacionario o transitorio.
- Especificar los parámetros de convergencia en la solución, para tener un control en la solución numérica del proceso.

Capítulo 3

METODOLOGÍA

En el Capítulo 3 se describe la metodología usada para resolver las ecuaciones de gobierno que el simulador ANSYS - CFX contiene, detallándose la generación de la geometría, la discretización de sus elementos, las condiciones iniciales, de frontera y los parámetros utilizados. Por otra parte se presentan los modelos utilizados para representar flujos multifásicos - polidispersos y el modelado de turbulencia. Incluidos en esta sección se describen los balances de materia, momentum y ecuaciones de gobierno para cada fase, se describe además el modelo usado para el cálculo de la distribución de burbujas. El caso de estudio tomado en cuenta es en estado transitorio considerando flujos continuos de agente espumante (gas) y polímero (HDPE).

3.1 Simulación del Proceso de llenado

3.1.2 Generación de la geometría de la Placa de Polietileno de alta densidad (HDPE)

El volumen de control utilizado en el presente trabajo consiste en una réplica en dimensiones de un par de placas de polietileno de alta densidad obtenidas en el grupo de investigación de la Facultad de Química de la Universidad de Guadalajara bajo la dirección del Dr. Rubén González Núñez las cuales fueron fabricadas en una inyectora de plásticos marca ACME bajo el principio de moldeo por inyección-reacción descrito con anterioridad, en la Figura 3.1 se muestra la geometría del molde usado.

Las dimensiones de la pieza inyectada son:

Tabla 3.1. Parámetros utilizados para detallar la malla en la placa de HDPE.

Geometría	Alto (mm)	Largo (mm)	Ancho (mm)	Diámetro (mm)
Canaleta de llenado (1era sección)	90.00	-	-	8.00
Canaleta de llenado (2da sección) *	-	50.00	-	8.00
Placa de HDPE	2.49	80.00	40.00	-
Salida de aire	0.01	-	-	-

*Tramo en L / media canaleta

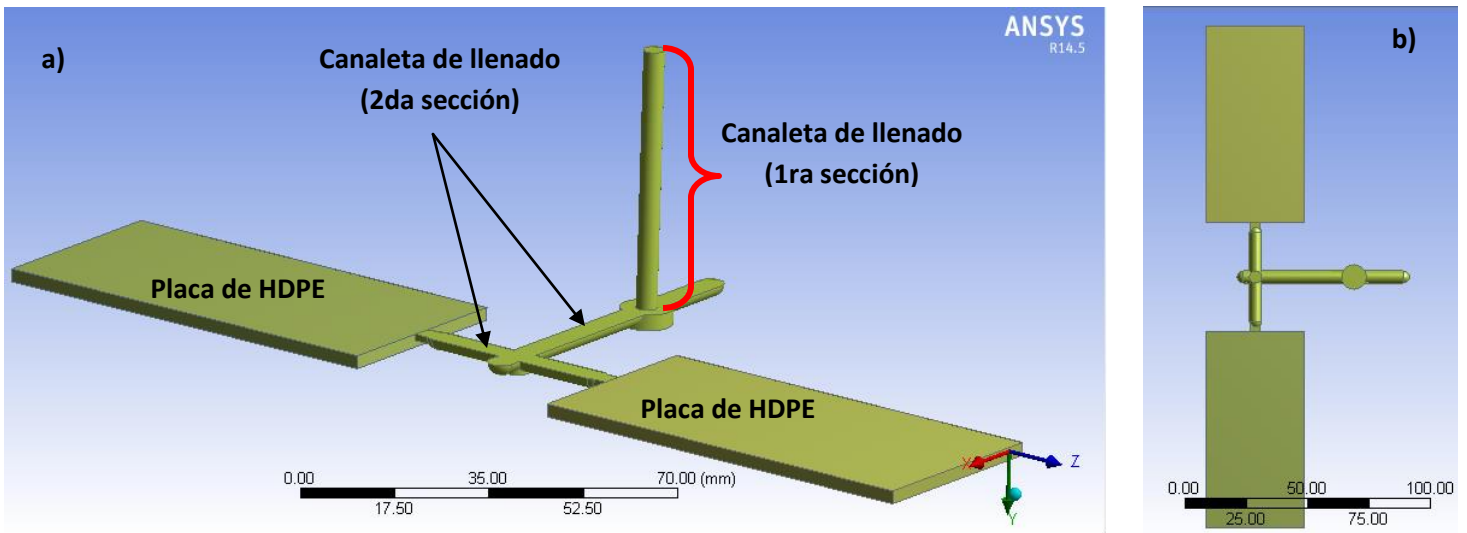


Figura 3.1. Geometría de las placas de polietileno de alta densidad en 3D.

3.2 Mallado del volumen de control (Discretización de elementos)

Posterior a la configuración de la geometría se procede a discretizarla mediante subdivisiones que depende del nivel de precisión deseado con base en las zonas críticas a analizar, el objetivo de lo anterior es separa las zonas mediante volúmenes de control más pequeños con la finalidad de tener un mayor control de la cantidad de elementos en cada zona y de esta manera asignar la mayor cantidad de elementos posible a la placa de HDPE.

La subdivisión de la geometría (volumen de control) contiene elementos que pueden ser de dos tipos: hexaédricos y tetraédricos; siendo estos últimos los que presentan un mayor nivel de precisión debido a la naturaleza de su geometría y que por lo tanto requieren de un mayor recurso computacional. Con la finalidad de optimizar los recursos computacionales se utilizó la configuración de malla hexaédrica para las canaletas de llenado de las placas en el molde de inyección, en las placas de HDPE se utilizó una configuración tetraédrica con una mayor cantidad de elementos y para las zonas de contacto entre el molde de inyección y el polímero fundido, el intervalo entre nodo y nodo se utilizó un refinamiento de malla con elementos tetraédricos con la finalidad de representar una mayor exactitud de los fenómenos de turbulencia y transferencia de calor en estas zonas (molde-polímero), el *refinado de malla* tiene la ventaja de poder editar las mallas de los volúmenes de control una mayor precisión en las zonas de mayor interés del análisis y utilizar los diferentes elementos (tetraédricos y hexaédrico) disponibles.

3.3 Características de las mallas

3.3.1 Refinado de malla

Como se menciona anteriormente es de crucial importancia la selección de los elementos adecuados para la simulación ya que de esto dependerá el tiempo de computo y la precisión deseada para el análisis, el simulador de CFD ANSYS - CFX inicialmente proporciona una malla por defecto la cual está constituida por elementos hexaédricos la cual se puede editar en su apartado de *detalles de malla* permitiendo así realizar el refinamiento de la malla de acuerdo a las necesidades propias del análisis.

Para el apartado de *detalles de malla* se debe realizar sobre las siguientes bases:

- Inflaciones
- Número de bordes o divisiones
- Espesor de las divisiones
- Tendencia

En la sección de refinamiento de malla se deben especificar los valores de distribución entre cada elemento, esto se puede editar en el apartado de inflación, en el cual se determinan la altura de las capas en las que se subdivide el volumen de control. En la Tabla 3.2 se muestran los valores utilizados para seccionar las placas analizadas, los valores fueron seleccionados con la intención equilibrar los recursos computacionales considerando un valor razonable de número de elementos.

Tabla 3.2. Parámetros utilizados para detallar la malla en la placa de HDPE.

Opción	Parámetro	Especificación
Inflaciones	Relación de transición (dist. Horizontal)	0.77
	Rango de crecimiento	1.2
	Número de capas (dist. Vertical)	5
Número de bordes o divisiones	Aplicadas a la arista individual Placa HDPE	10
Número de bordes o divisiones	Aplicadas a la arista individual Salida de aire	5
Espesor de las divisiones	Suave	Si
	Robusto	-
Tendencia	Creciente	-
	Decreciente	-
	Homogénea	Si

Posterior a la especificación de inflación sobre la malla se debe establecer el número de bordes o divisiones contenidas en la sección seleccionada, comúnmente se elige una cantidad razonable de divisiones para lograr tener la mayor precisión pero tomando en cuenta el gasto computacional que compete. Para este trabajo se seleccionó un valor de 5 y 10 divisiones para la placa de HDPE y para la salida de aire en la parte inferior respectivamente. En el espesor de divisiones entre los elementos se considero la opción de “suave” debido a que ofrecía una mejor distribución de los elementos y

finalmente se optó por una tendencia de espesores homogénea para asegurar el tamaño de los elementos en toda la placa.

En la Figura 3.2 se muestran las divisiones colocadas en la superficie de la placa del polímero inyectado (a) con la finalidad de robustecer los cálculos de transferencia de calor y efectos de turbulencia de la misma manera se puede apreciar las divisiones en las salidas de aire en la parte inferiores de la placa de HDPE (b).

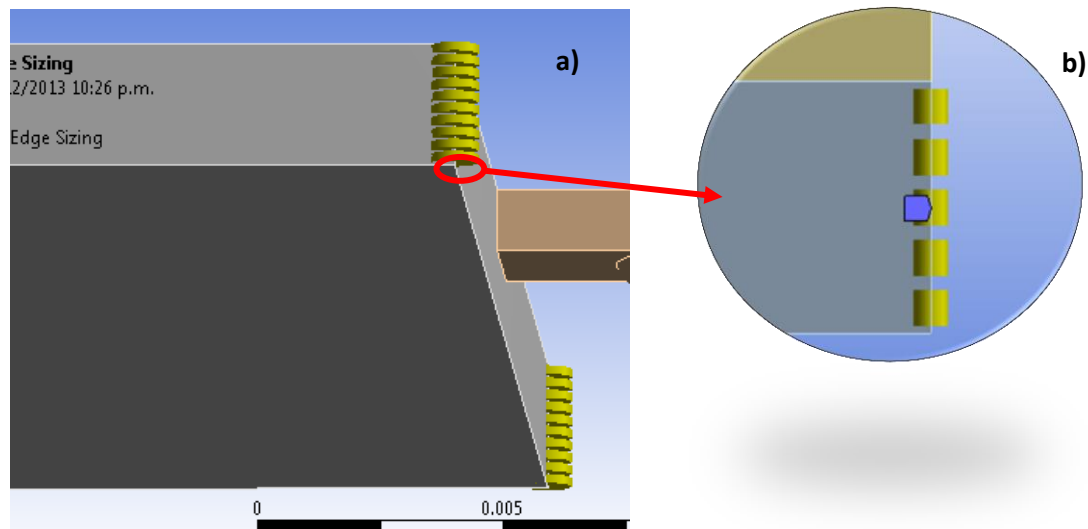


Figura 3.2. Subdivisiones de la geometría para refinamiento de la malla a) polímero y b) salida de aire.

En la Figura 3.2 a) y b) se observa que los elementos tetraédricos son más pequeños en las paredes o zonas de contacto con el molde de inyección, esto se hizo con la finalidad de representar lo más real posible los efectos de la pared en el polímero.

De acuerdo a de los parámetros utilizados en la Tabal XX se obtuvo el número final de nodos, elementos y tipo de dominio:

Tabla 3.3. Detalles la geometría de malla utilizado en la placa de HDPE.

Geometría	Elementos	Dominio	Nodos
Canaleta de llenado (1era sección)	1633	Tetraédrico	2304
Canaleta de llenado (2da sección)	2524	Tetraédrico	2424
Placa de HDPE	11354	Hexaédrico	13858
Salida de aire	14235	Hexaédrico	17760
Total	29746	-	36346

donde los nodos son cada punto en el que se resuelven las ecuaciones de materia, energía y momentum, cada valor es almacenado y subsecuentemente se toma como valor inicial del elemento adyacente, para elementos geoméricamente estables, esto es, geometría similar la inflación se mantiene uniforme, cuando existe un cambio en la configuración de la malla varía de acuerdo al elemento y cantidad de los mismos.

Cada geometría está interconectada mediante una extrusión o proyección de la sección de que une a la geometría contigua con otra, con lo cual se asegura la continuidad y conectividad entre los nodos de cada elemento en todo el volumen de control. Las proyecciones se pueden observar a continuación en las Figuras XX.

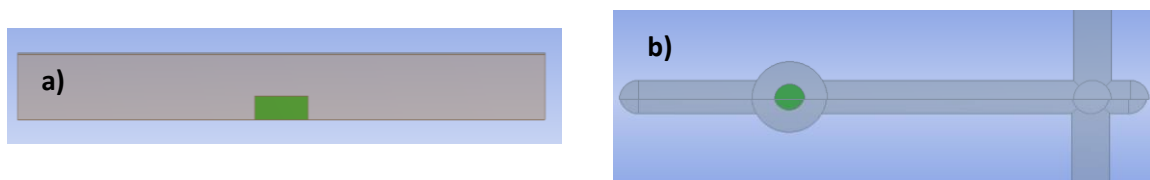


Figura 3.3. a) Proyección de canaleta de llenado (2da sección) en placa de HDPE y b) proyección de canaleta de llenado (1ra sección) sobre de llenado (2da sección).

Al concluir con las especificaciones y refinamiento de malla se da paso a la última etapa procediendo a generar la malla, en la Figura XX se muestra la malla final utilizada en el presente trabajo.

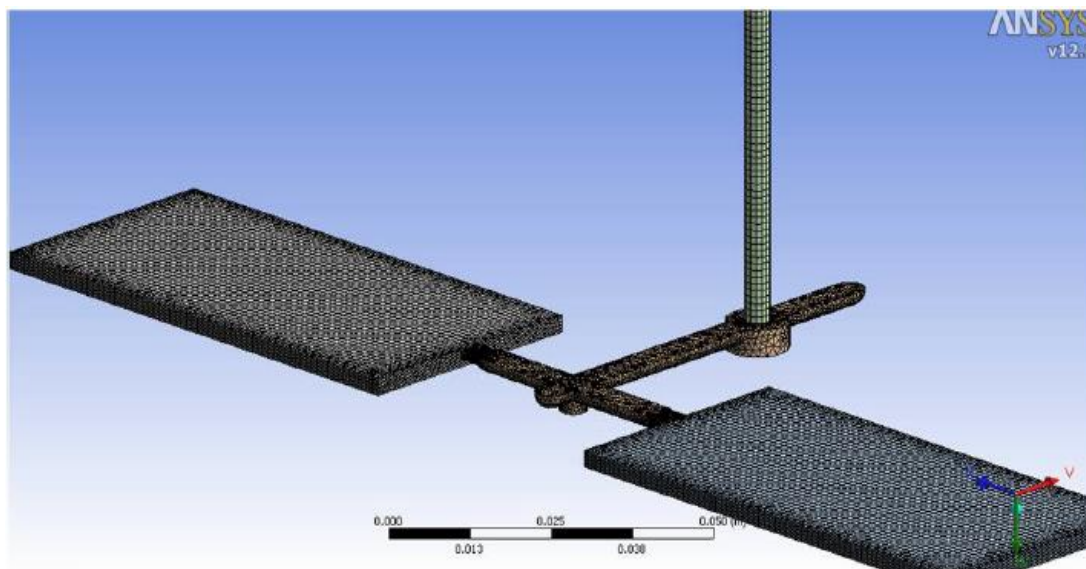


Figura 3.4. Malla del volumen del control de la placa de HDPE.

Como se observa en la Figura 3.4 la discretización del volumen de control en elementos tetraédricos se distribuye en las placas de polietileno de alta densidad y como se mencionó con anterioridad en las zonas contacto con el molde de inyección.

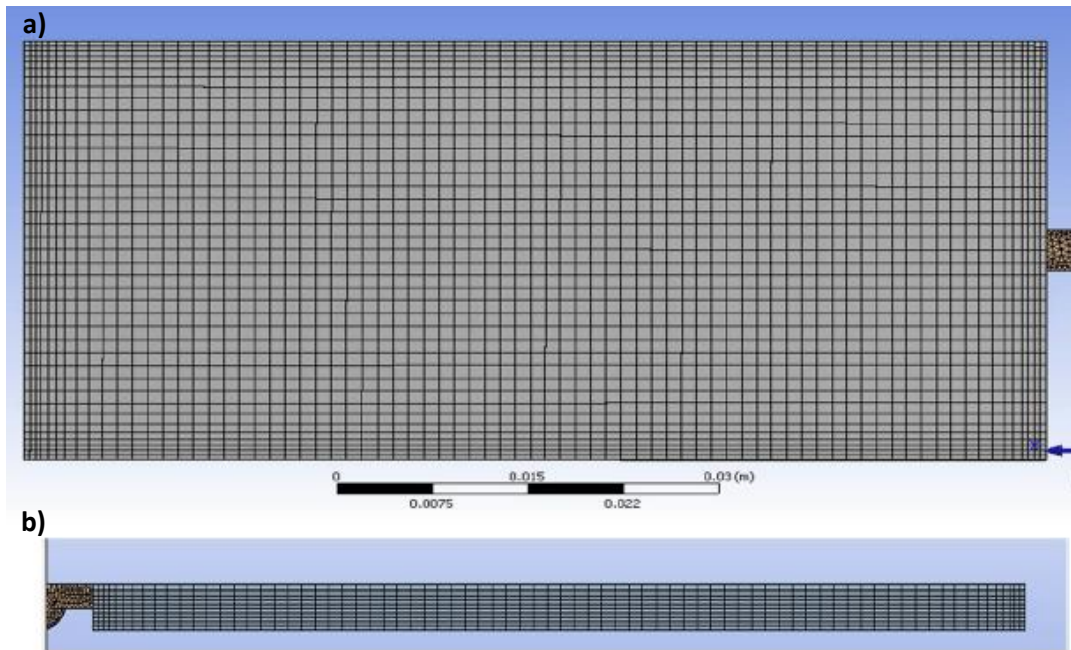


Figura 3.5. a) Distribución de la malla en a cara superior del molde y b) cara lateral.

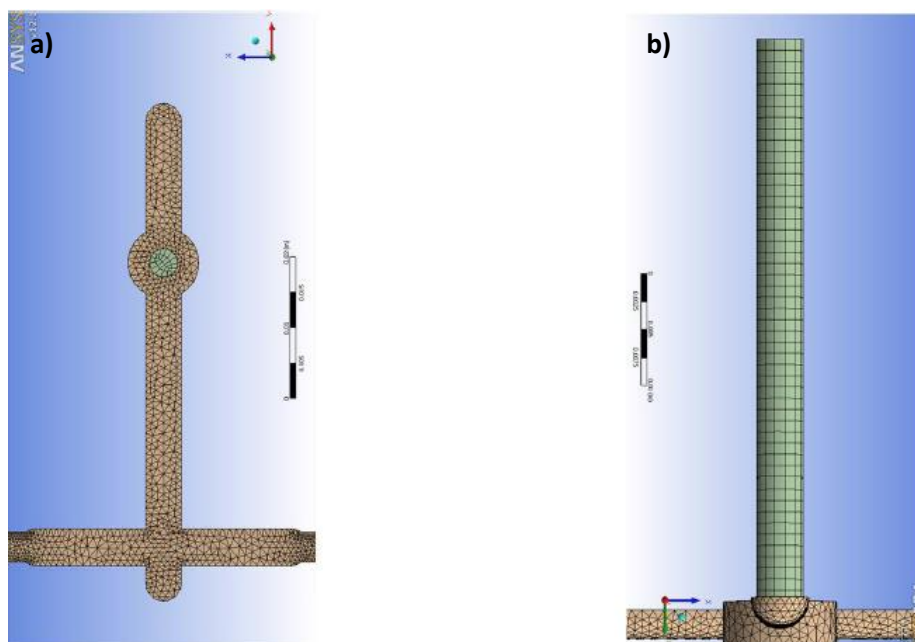


Figura 3.6. a) Elementos hexaédricos y b) elementos tetraédricos.

Con la finalidad de disminuir los tiempos de simulación se optó por resolver solo la mitad de las ecuaciones en los volúmenes de control, es decir, solo se utilizó una de las placas de la geometría inicial y se consideró simetría en la solución de las ecuaciones de momento, calor y masa. En la Figura 3.7 se muestra la geometría analizada.

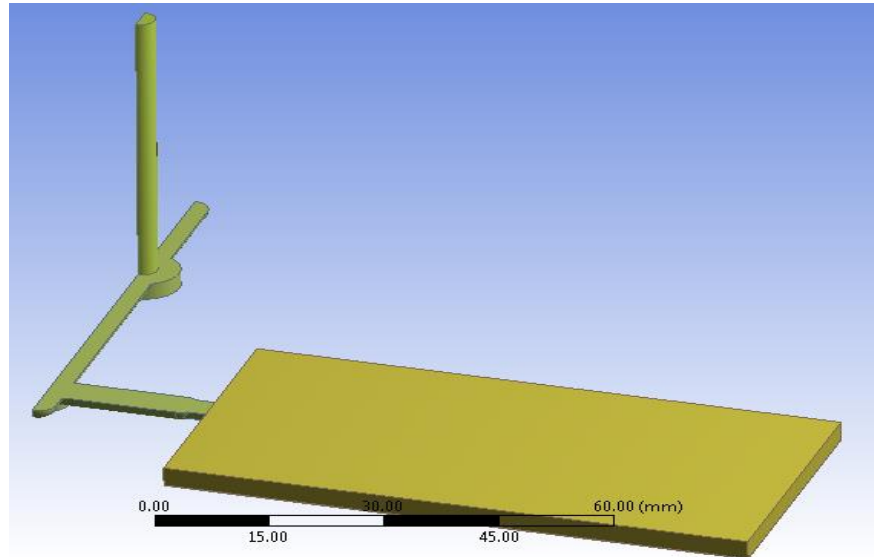


Figura 3.7. Geometría de la placa de polietileno de alta densidad en 3D.

En la siguiente sección se definirán tanto las condiciones iniciales y de frontera así como la configuración de cada una de las secciones del volumen de control, se incluyen los valores experimentales del tamaño de burbujas como una referencia de partida para el efecto de la temperatura velocidad de llenada y presión que tiene sobre la distribución de burbujas en la espuma polimérica.

3.4 Configuración del dominio: especificación de modelos, condiciones iniciales y de frontera (transitorio).

En la Figura 3.8 se muestran físicamente las condiciones frontera para el volumen de control, esto es, entradas y salidas de los fluidos además de la dirección de los mismos, a las cuales se debe alimentar cada uno de los parámetros y variables correspondientes, se puede observar que la alimentación de polímero y mezcla de gases se inyecta en la parte superior de la canaleta de llenado y realiza su recorrido hasta llegar a la placa donde posteriormente desplaza el aire que está inicialmente ocupando ese mismo espacio en el molde, como se puede apreciar el aire es desplazado por la sección de 1mm de espesor colocada en la base de la placa y de esta manera el polímero y mezcla de gases inyectados dan inicio al llenado del molde, teniendo en cuenta el corte simétrico utilizado para optimizar los recursos computacionales. En el transcurso de este capítulo se hará una descripción detallada de la configuración del volumen de control así como la justificación de los datos experimentales usados.

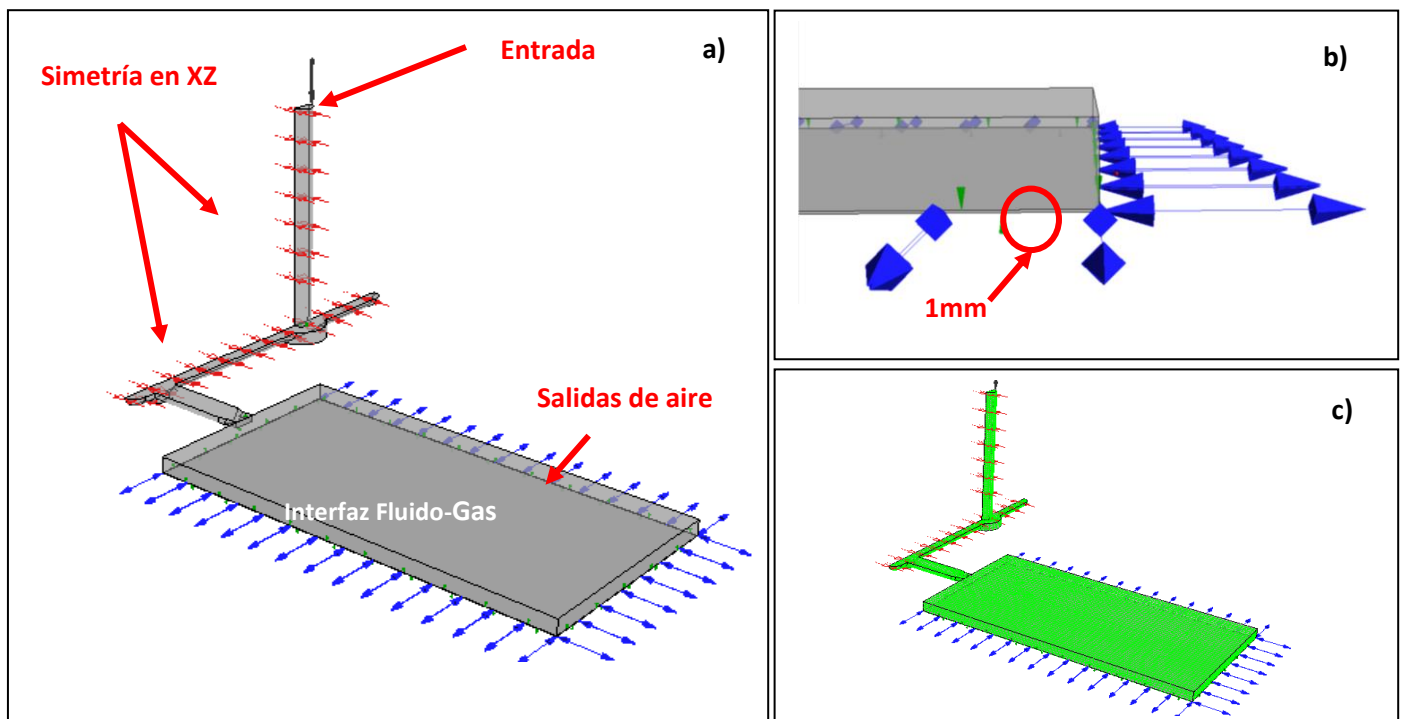


Figura 3.8. a) Especificación de entradas, salidas y simetrías en el volumen de control. b) salida de aire de espesor igual 1 mm. c) nodos de la malla del volumen de control.

En esta sección se presentan las especificaciones para el modelo utilizado en estado transitorio, ANSYS - CFX cuenta con una interesante base de datos sobre materiales y sustancias a condiciones normales de temperatura y presión, además de secciones para mezclas de compuestos especificando sus propiedades física y químicas, y sobre todo la definición del modelo viscoelástico representativo del polímero. En las Tablas 3.4 y 3.5 se definen las especificaciones para el polietileno de alta densidad y la mezcla de gases generada por la descomposición de azocarbonamida.

Cada una de estas propiedades se introduce directamente en los valores de configuración del volumen de control, para el HDPE en la Tabla 3.4 se muestran el valor de las especificaciones físico-químicas, termodinámicas así como sus propiedades de transporte reportados en la literatura, para este caso de estudio se muestran las constantes las cuales se alimentan al modelo de ley de potencias (Ostwald de Waele) usadas para describir los efectos viscoelásticos en el polímero [15], el rango en el parámetro de corte de cizalla es establecido como valor predeterminado por el propio software.

Tabla 3.4. Especificación de propiedades de Polietileno de alta densidad (HDPE).

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Propiedades	Propiedades Físicas — Masa Molar — Densidad Propiedades Termodinámicas — Capacidad Calorífica Propiedades de Transporte — Modelo Viscoso — Viscosidad — Min. Corte de cizalla — Máx. Corte de cizalla — Constante de Tiempo — Índice de Ley de Potencia Conductividad Térmica	25000 g/mol 961 kg/m ³ 1800 J/kg·K Modelo No Newtoniano Ostwald de Waele 17.8 Pa s 0.001 s ⁻¹ 1000 s ⁻¹ 0.22 0.44 1.73 W/ m·K

En la Tabla 3.5 se muestran las especificaciones para la descomposición de la azodicarbonamida considerada en la generación de gases para el espumado [2], se muestran el porcentaje de descomposición de cada uno de los gases que actúan como fluido disperso que aporta las burbujas necesarias para formar la espuma polimérica, tal fluido al ser una mezcla de gases se considera como fluido polidiserso y previamente en la configuración se debe generar una mezcla con la aportación de de fracción masas de cada uno de los gases involucrados a las condiciones de temperatura y presión a las que ingresa al molde de inyección.

En la literatura se reporta una variedad de proporciones de fracción masa de los diferentes gases involucrados en el fenómeno de descomposición, para el presente trabajo se toma como referencia los datos experimentales reportados por Rodrigue et. al. En la Tabla 3.5 se aprecian las especificaciones para la descomposición de la azodicarbonamida [2].

Tabla 3.5. Especificación de propiedades de mezcla de gases provenientes de la descomposición de azodicarbonamida.

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Propiedades	Estado Termodinámico	Gas
		Materiales	Fracción % en masa
		—CO Gas ideal	0.15
		—CO ₂ Gas ideal	0.08
		—N ₂ Gas ideal	0.56
		—NH ₃ Gas ideal	0.21

Después de definir las propiedades termodinámicas, de transporte para el HDPE y la mezcla de gases se procede a definir las condiciones iniciales y propiedades en el volumen de control.

Tabla 3.6. Especificación para el análisis en el estado transitorio.

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Propiedades	Duración de la simulación —Tiempo global	15 s
		Tamaño de paso	0.001 s
		Tiempo inicial	0 s

Como se mencionó con anterioridad es de suma importancia la optimizar los recursos computacionales disponibles, mediante prueba y error se probaron diferentes valores de tamaño de paso, encontrándose que el valor de tamaño de paso para en el cual la simulación convergía fue de 0.001s.

A continuación en la Tabla 3.7 se definen todas las especificaciones involucradas con el fenómeno de inyección-reacción presente en el volumen e control, tal volumen se considera polidisperso, esto es, se definen burbujas de diferentes tamaños tomados de los valores promedio experimentales.

Las variables en el análisis transitorio que se muestran en la Tabla 3.4, son valores iniciales a un tiempo $t = 0$. Se define en la configuración a los tres fluidos involucrados en el fenómeno de inyección, en este caso, polietileno de alta densidad (HDPE), la mezcla de gases generadora de burbujas y el aire del ambiente que será desplazado del molde por el propio polímero y mezcla de gases. Tomando en cuenta que la mezcla de se considera como en un fluido continuo (HDPE) así mismo el aire se considera fluido continuo. Al inicio se considera que todo el espacio en el volumen de control es ocupado por el aire que será desplazado posteriormente por la mezcla de gases generadora de burbujas (fluido polidisperso) y el polímero (HDPE, fluido continuo) con una presión de referencia a 1 atm. Para los flujos multifasicos (como en éste caso) la diferencia de densidades entre fluidos genera una fuerza de flotación la cual debe tomar como densidad de referencia al fluido continuo ser orientada a sus respectivas coordenadas, para el caso de estudio se considero la densidad del aire a 25° C y 1 atm de presión en dirección del eje Y.

Tabla 3.7. Especificación para el análisis en el estado transitorio.

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Propiedades	Características Básicas — Tipo de Dominio Fluidos a Definir — Aire a 25 °C Morfología — Mezcla de gases Morfología — HDPE Morfología — Presión de referencia	Dominio Fluido Fluido Continuo Polidisperso Fluido Continuo 1 atm
		Foliación Gravedad en dirección X Gravedad en dirección Y Gravedad en dirección Z Densidad de referencia	0 m/s ² 9.81 m/s ² 0 m/s ² 1.185 kg/m ³
	Modelado del fluido	Transferencia de calor Temperatura Turbulencia	Energía Térmica 180 °C Dependiente con el fluido
	Modelado específico	— Aire a 25 °C Turbulencia — Mezcla de gases Turbulencia — HDPE Turbulencia — Tensión superficial	Laminar κ-épsilon κ-épsilon 31.7534[mJ/m ²]-0.04611[mJ/ m ² · K]-Temp-0.00165[mJ/ m ² psi]-Press

La temperatura a la cual ingresan los fluidos continuos y polidispersos es de 180° C, la turbulencia es un parámetro clave en la velocidad de llenado del material y es de suma importancia seleccionar un modelo adecuado para las características del fluido, para el

polímero y la mezcla de gases se tomo en cuenta el modelo de turbulencia $\kappa-\varepsilon$, el cual se describió con anterioridad, al aire se le considero como fluido laminar.

En el presente trabajo se tomo en cuenta para la tensión superficial el modelo HDPE-Nitrógeno propuesto por H.Weii *et al.* el cual considera a la tensión superficial dependiente de la temperatura y presión del sistema (ec. 2.10).

Tabla 3.8. Especificación de la mezcla de gases por descomposición de azodicarbonamida como fluido polidisperso.

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Fluido Polidisperso	Fluido Polidisperso 1	MUSIG Homogéneo
		— Distribución de tamaño de grupo	
		Tamaño de grupo	Diámetro igual
		— Número de grupos	5
		Diámetro mínimo	0.01 mm
		Diámetro máximo	0.1 mm
		Densidad de referencia	1 kg/m ³
		— Modelo de Rompimiento	Lou and Svensen
		— Coeficiente de rompimiento	1.0
		— Modelo de Coalescencia	Prince and Blanch
		Espesor inicial de película	1.0 E-4
		Espesor final de película	1.0 E-8
		— Coeficiente de coalescencia y flotabilidad	1.0
		— Coeficiente de turbulencia	1.0

En el capítulo anterior se describieron los modelos de generación de burbujas basados en la formación y coalescencia, por tal motivo se define mediante la opción de fluido polidisperso utilizando el modelo MUSIG el cual se basa en la distribución de tamaño de grupo, tomando como bases los datos experimentales reportados por Rodrigue *et. al.* [2]. En la Tabla 3.9 se hace referencia a las fracciones de tamaño de partícula que para este caso y basado en los datos experimentales se consideraron cinco grupos a los que se asignaron fracciones de entre 0.1 a 0.3.

Tabla 3.9. Especificaciones para la entrada de gases al sistema

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Frontera de entrada	Masa y momentum — Bulk Mass Flow Rate Dirección del Flujo Turbulencia Tempertura	si $t < 1$ seg. igresa flujo de 0.001 kg/s, si $t < 5$ seg. igresa flujo de 0.004 kg/s, a un tiempo mayor de 5 seg. ingresa flujo de 0.006 kg/s Normal a la Frontera Intensidad 5 % 280 °C
	Fluidos	HDPE — Fracción volumétrica Aire a 25 °C — Fracción volumétrica Mezcla de gases — Fracción de tamaño de partícula Grupo 1 Grupo 2 Grupo 3 Grupo 4 Grupo 5	0.95 0 0.5 0.2 0.3 0.1 0.2 0.2

Uno de los parámetros de mayor influencia en el proceso de inyección es la velocidad de llenado, comúnmente el proceso de inyección se lleva a cabo en varias etapas en las cuales se incrementa el flujo másico dependiendo del avance del fluido (para este caso fluidos) en el molde de inyección y el tiempo necesario formar la pieza inyectada, con base en datos experimentales tomados de pruebas realizadas en el grupo de investigación del Dr. Rubén González Núñez, para este caso se consideraron tres etapas donde para cada tiempo se asignó un valor de flujo másico hasta completar la inyección de material correctamente esto es, para la primera presión de llenado y presión de sostenimiento (2 etapas), en la Tabla 3.6 se muestran el rango de flujo respectivamente como se indica a continuación: 0.001 kg/s en $0s < t < 1s$, al superar esta primera etapa el flujo se incrementa a 0.004 kg/s en $1s < t < 5s$ y nuevamente se incrementa el flujo a 0.006 kg/s en un flujo $5s < t$ hasta completar la carga de material inyectado en $t = 15s$.

Tabla 3.10. Especificaciones para la salida de gases al sistema

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Detalles en la frontera	— Régimen del flujo Masa y Momentum Presión Relativa — Dirección del flujo Turbulencia Transferencia de calor	Subsónico Opening Pres and Dirn 0 atm Normal en la Frontera Intensidad = 5 % 298 K

Tabla 3.11. Especificaciones para la pared del molde de inyección

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Detalles de Frontera	Masa y Momentum Rugosidad de Pared Transferencia de Calor	Dependencia con el fluido Pared Lisa 30 °C
	Fluidos	Aire a 25 °C HDPE Mezcla de Gases	Libre deslizamiento Libre deslizamiento Libre deslizamiento

Una vez definidas las condiciones para las entradas y salidas de los fluidos, se deben especificar las condiciones en la pared para la placa de HDPE. En este caso las consideraciones generales son: tratar a la pared como una pared lisa, establecer para polímero mezcla de gases y aire se establece una condición de libre deslizamiento.

Finalmente la última etapa es obtener bajo las condiciones iniciales, de frontera y parámetros de los fluidos las variables de salida necesarias para realizar el análisis de cómo es que afectan la distribución de burbujas en la espuma polimérica, estas variables de salida son:

- Velocidad de llenado (Velocidad con la que se llena el molde de inyección)
- Presión de llenado (Presión de llenado del molde de inyección)
- Temperatura de llenado (Temperatura de llenado del molde de inyección)

Tabla 3.12. Especificaciones para la pared del molde de inyección

Análisis	Opción	Parámetro	Especificación
Transitorio			
	Características básicas	Esquema de solución Esquema transitorio Tamaño de paso inicial — Máx. No. de Courant — Mín. No. de Courant	Alta resolución Euleriano de segundo orden (hacia atrás) 5 10
	Control de Convergencia	— Número máximo de ciclos — Número mínimo de ciclos	1 3
	Criterio de convergencia	— Tipo de residual — Residual objetivo	RMS 1.00E-04

Capítulo 4

RESULTADOS

En el Capítulo 4 se exponen y discuten los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas y se comparan con los resultados experimentales reportados, se realiza un análisis de los resultados obtenidos: perfiles de llenado, temperatura y presión. Además se muestran las condiciones de llenado de la pieza moldeada.

4.1 Análisis y discusión de resultados

Para el caso de estudio en estado transitorio se realizó el análisis del efecto de la velocidad, temperatura y presión de llenado en la distribución de burbujas en el proceso de inyección, realizando análisis a diferentes tiempos en cada una de las tres capas de la espuma polimérica, tomando en cuenta que la cantidad de recursos computacionales será mayor mientras más precisión se desee.

Para el análisis en estado transitorio se considera a los efectos de nucleación como nulos y solamente interviene la formación y ruptura de burbujas (muerte y nacimiento) descritas por las ecuaciones MUSIG (ec. 2.16).

En el análisis se consideraron 5 secciones a lo largo del volumen de control (placa de HDPE) colocados a diferentes longitudes y tiempos con la finalidad de la influencia de las variables de velocidad, temperatura presión y el efecto sobre la fracción másica de la mezcla de gases:

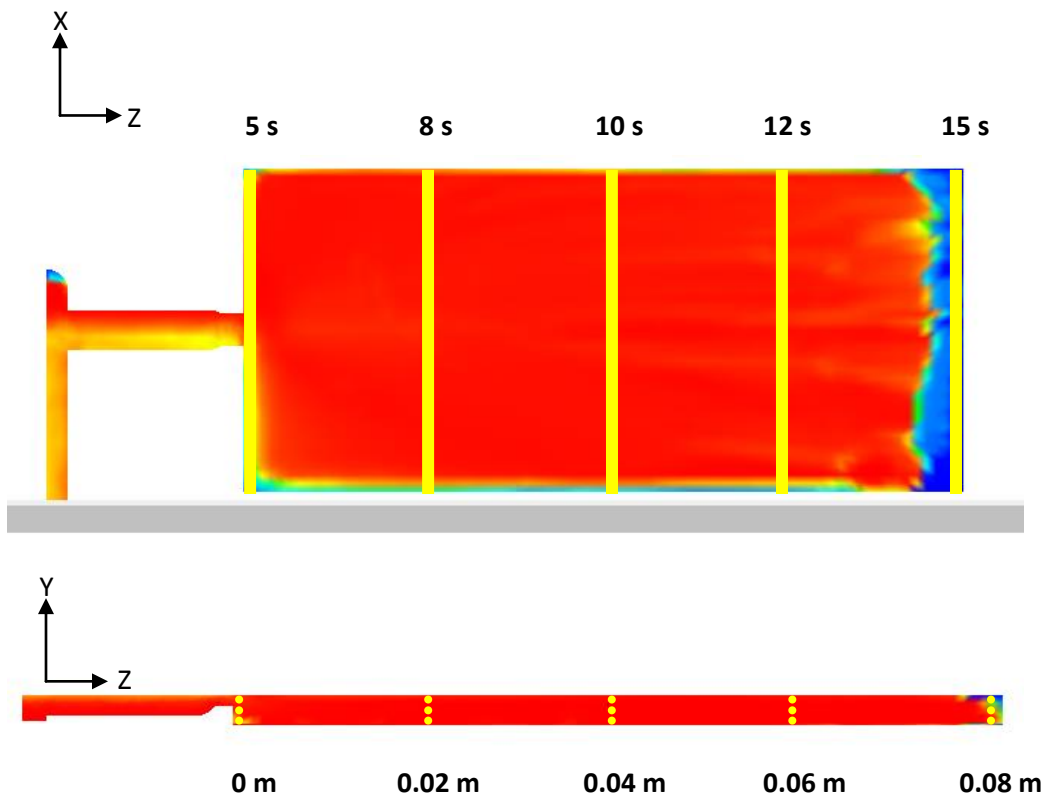


Figura 4.1. Posición de las líneas de análisis en el plano cartesiano con respecto al tiempo.

Las líneas de color amarillo se colocan en cinco posiciones con la finalidad de registrar en la mayor medida posible los efectos de velocidad, temperatura y presión de llenado, una característica importante de estas líneas es que se puede definir la cantidad de puntos que la integran, esto es de suma importancia pues dependiendo de la precisión que se desee será el número de estos, para el presente trabajo se definió con 1000 puntos para conformar cada una de las cinco líneas, con una longitud de 4 cm y espaciamiento de profundidad de 12.5 mm arriba y abajo con respecto al centro.

Cada línea de la figura 4.1 representa 3 líneas colocadas de tal manera que abarque las tres secciones (piel superior, núcleo y piel inferior) colocadas a lo largo del eje Y, todo esto con la finalidad de tener cinco líneas en cada una de las tres secciones y construir los perfiles con base en cinco posiciones en el tiempo.

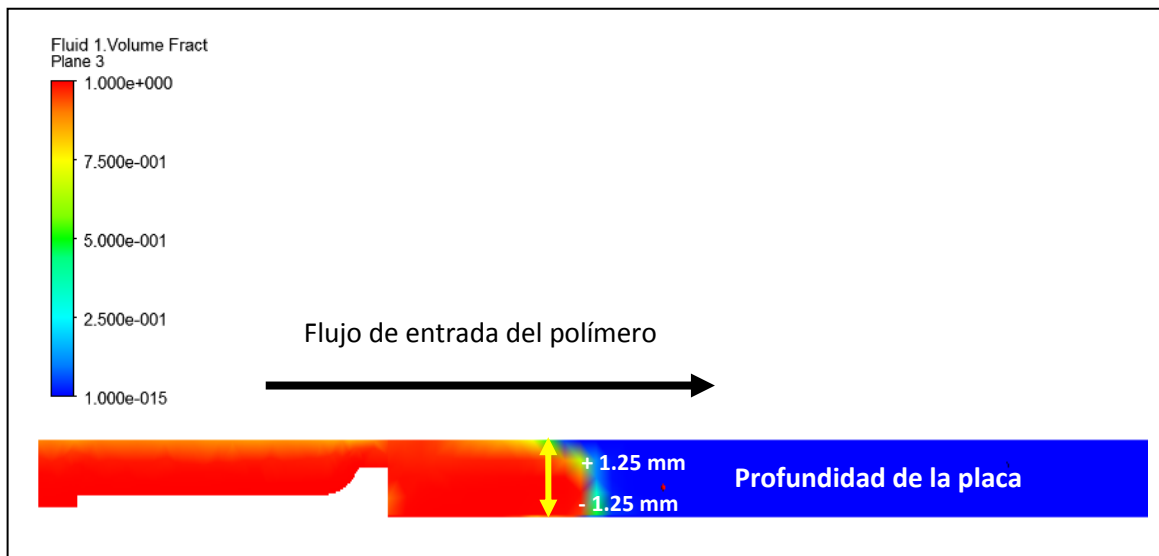


Figura 4.2. Visualización de la colocación de las líneas de análisis, longitud y profundidad.

Como primera etapa del análisis se verá el efecto de la velocidad de llenado en la distribución de burbujas en el volumen de control, posteriormente se realizará el análisis del efecto de la presión en la distribución de burbujas para terminar el análisis con el efecto que ejerce la temperatura con la distribución de burbujas en la placa de HDPE.

4.2 Efectos de la Velocidad de llenado con respecto a la distribución de burbujas

Partiendo de las condiciones iniciales de velocidad descritas con anterioridad:

Y recordando que cuando $t < 1$ seg. ingresa flujo de 0.001 kg/s, si $t < 5$ seg. ingresa flujo de 0.004 kg/s, a un tiempo mayor de 5 seg. ingresa flujo de 0.006 kg/s.

El efecto de la velocidad de llenado sobre la distribución de burbujas se analizó en 5 posiciones diferentes a lo largo de la placa de polietileno de alta densidad (HDPE) y en tres posiciones con respecto al espesor: piel superior, piel inferior y núcleo de la placa que se muestran en la Figura 4.2, para el perfil de velocidad de llenado en la piel superior ($Y = 0.022$ m) de la placa en $t = 5, 8, 19, 12$ y 15 s y $Z = 0, 0.02, 0.04, 0.06$ y 0.08 m respectivamente.

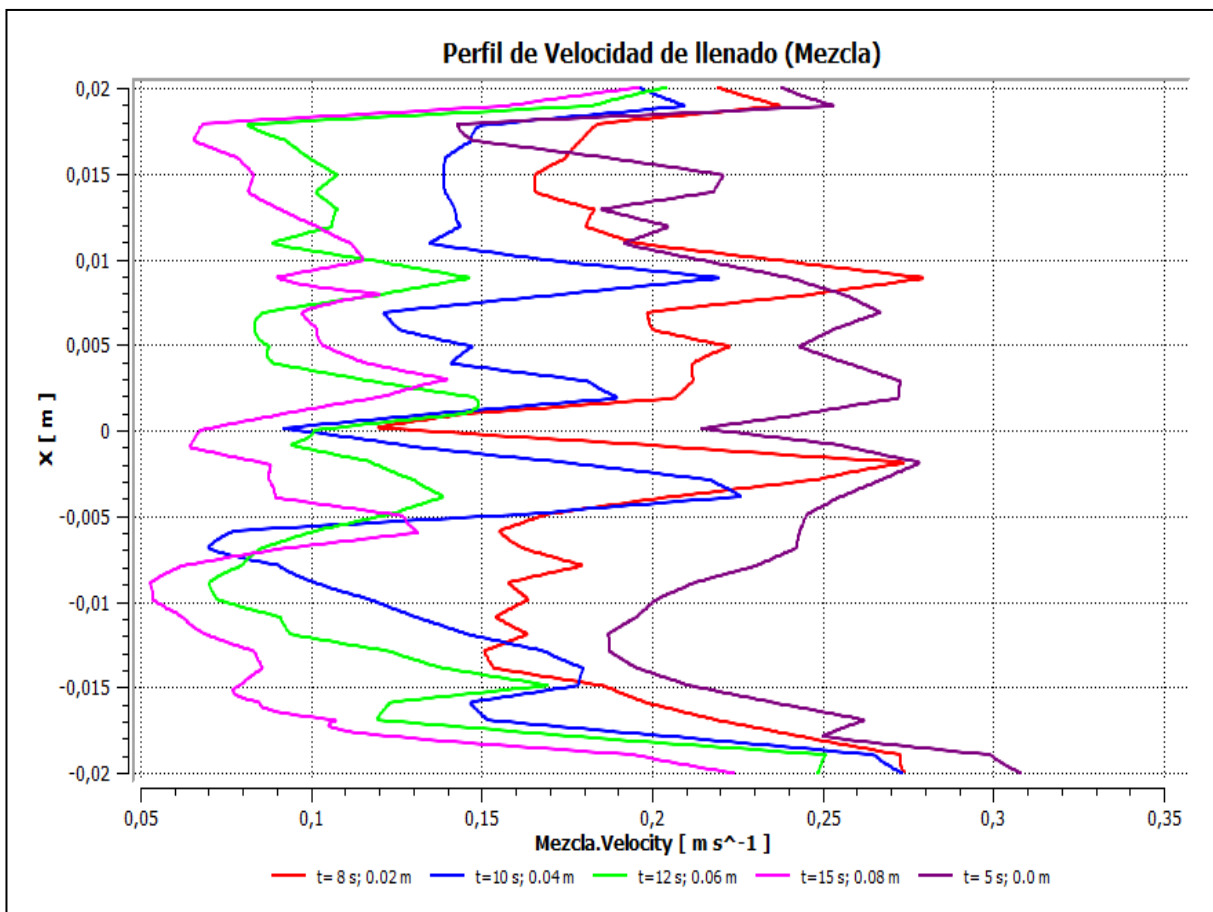


Figura 4.3. Perfil de Velocidad de llenado en la piel superior ($Y = + 0.012$ m).

Con respecto a la fracción de mezcla de gases del núcleo en el llenado del molde se puede observar en la Figura 4.5 que la velocidad se incrementa en las paredes del molde a medida que este se llena así como en el centro, la mayor cantidad de burbujas se encuentra en las secciones mencionadas, en la parte central se puede hacer referencia a los perfiles teóricos de llenado los cuales concuerdan con tal comportamiento, no así para las zonas cercanas a las paredes, a la entrada de la placa la fracción es superior y va disminuyendo a lo largo de la placa, una de las posibles causas es el potencial enfriamiento del polímero a lo largo de la trayectoria de la placa lo que justifica los incrementos en el flujo inyectado. Se debe tomar en cuenta que una velocidad de llenado correcta asegura la distribución homogénea del material en el molde de inyección, tal variable se relaciona directamente con la temperatura y la presión pues al tener valores bajos de velocidad el material puede solidificar antes de que haya cubierto el molde y generando una pieza defectuosa.

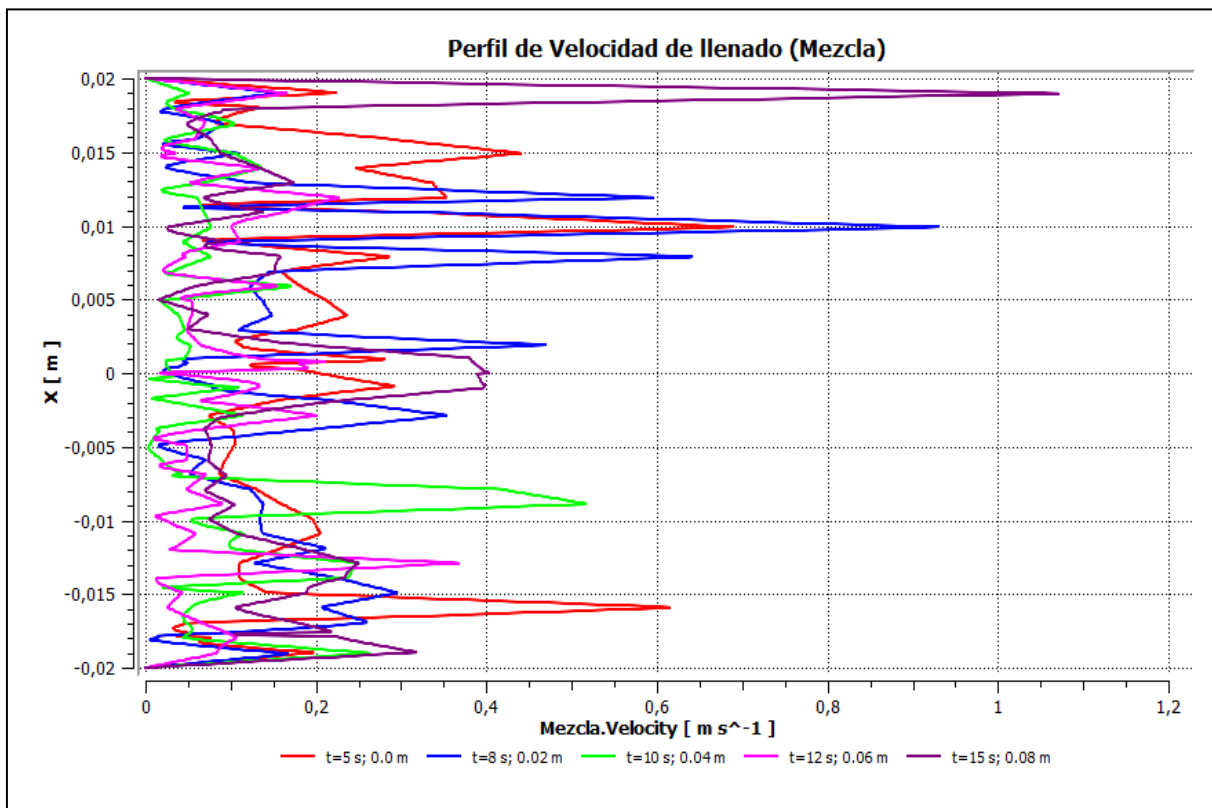


Figura 4.4. Perfil de Velocidad de llenado en el núcleo de la placa (Y = 0 m).

En este caso para la fracción de la mezcla de gases en la sección inferior ($Y = -0.012$ m) se puede apreciar que la velocidad es superior en las paredes del molde con respecto al centro de la placa y se vuelve más homogénea conforme avanza, para describir este comportamiento se debe tomar en cuenta el modelo de turbulencia usado (**RNG κ - ϵ**) el cual considera cero turbulencia en las paredes y el refinamiento en la malla que se hizo al volumen de control. Para el núcleo la fracción de masa de la mezcla el efecto más notorio se puede observar a la entrada del polímero en un $t = 12$ s y 0.06 m donde la fracción se desplaza con mayor rapidez en la zona central lo cual corresponde al perfil teórico de llenado, así pues, la fracción masa avanza conforme lo hace el polímero y avanza acorde al flujo manifestando un comportamiento homogéneo al llegar a un tiempo en $t = 15$ s y 0.08 m donde el molde está casi lleno. En $t = 12$ s ya han transcurrido las tres etapas de inyección por lo que la fracción masa de gases se incrementa en el polímero y se esté acumulando en su mayoría al centro de la placa.

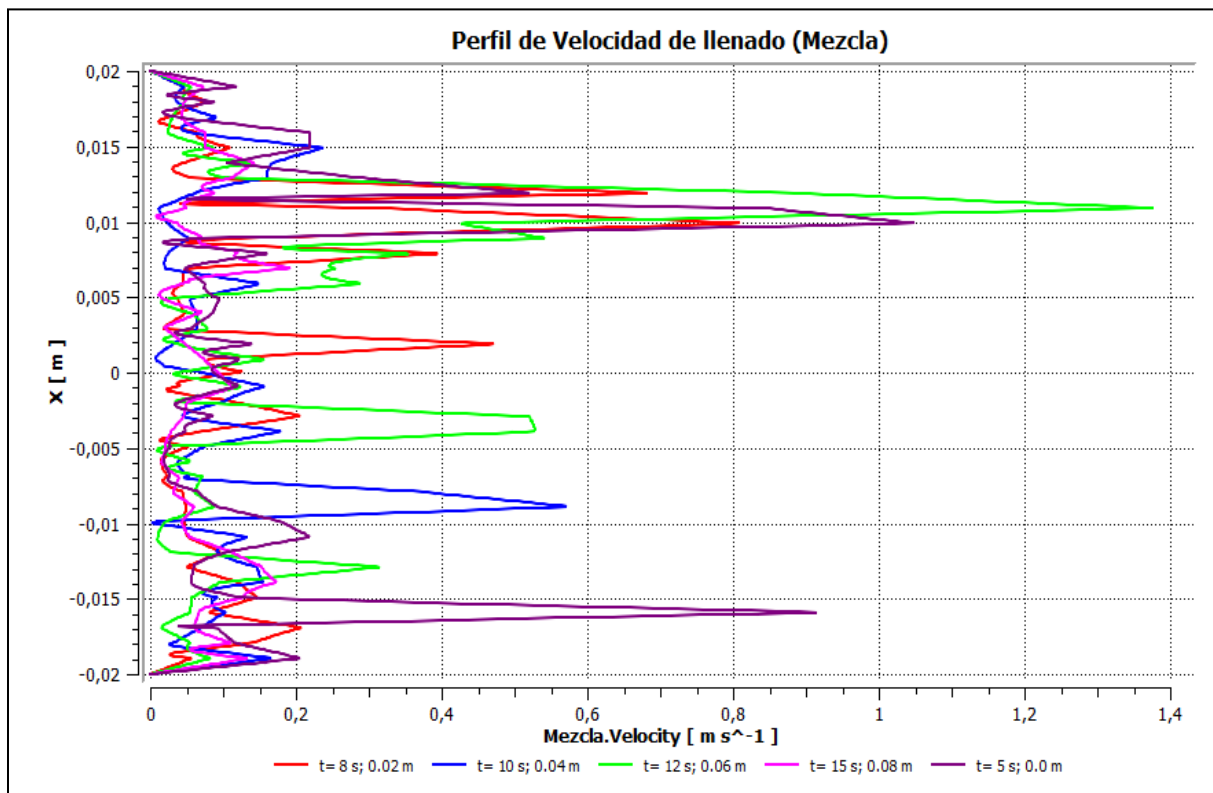


Figura 4.5. Perfil de Velocidad de Llenado en la piel inferior de la placa ($Y = -0.012$ m).

Por otro lado para la mezcla de gases es difícil de visualizar un patrón en cada una de las tres secciones, como una de las posibles causas se puede considerar que el gas que está entrando debido a la reacción está saliendo por las aberturas de salida que se colocaron en la parte inferior de la placa aunado a esto podemos añadir los efectos de nacimiento y muerte de burbujas.

Podemos observar en la Figura 4.2 la velocidad de la mezcla de gas es más homogénea en su trayectoria, no así pudiendo observarse esto en las Figuras 4.3 y 4.4 pudiendo ser ocasionado por la ranura de salida del molde. Como efecto de la velocidad con respecto a la velocidad de llenado del molde de inyección se puede resaltar que la mayor cantidad de burbujas se encuentran en la parte superior y el núcleo.

4.3 Efectos de la Temperatura Presión con respecto a la distribución de burbujas

Sobre el efecto de la temperatura en el llenado del molde de inyección se pueden considerar los siguientes puntos:

- Se puede considerar que la reacción de descomposición se llevo a cabo en su totalidad de ACA a la mezcla gases mencionada con anterioridad debido a que la temperatura de entrada esta alrededor de los 450 K como se aprecia en las Figuras 4.8 a 4.13 (temperatura de descomposición ACA = 468 K).
- El polímero no solidifica antes de finalizar la inyección manteniendo su temperatura por arriba de punto de fusión del HDPE (383 K), esto quiere decir que continúa su trayectoria sobre el molde hasta llenarlo.

En la Figura 4.6 referida a la piel superior en $Y = +0.012$ m se aprecia que la temperatura en las paredes es menor que en el centro, esto se debe a que el polímero entra en contacto con el molde el cual tiene una temperatura de 30°C, este efecto se observa claramente en la caída de temperatura a la que entre el molde donde el $\Delta T = 53$ en $t = 5s$ y finalmente a $t = 15s$ es de $\Delta T = 113$ en su punto más alto las zonas más cercanas al molde solidifican favoreciendo la formación de la capa completamente sólida, ruptura de las burbujas en su mayor cantidad.

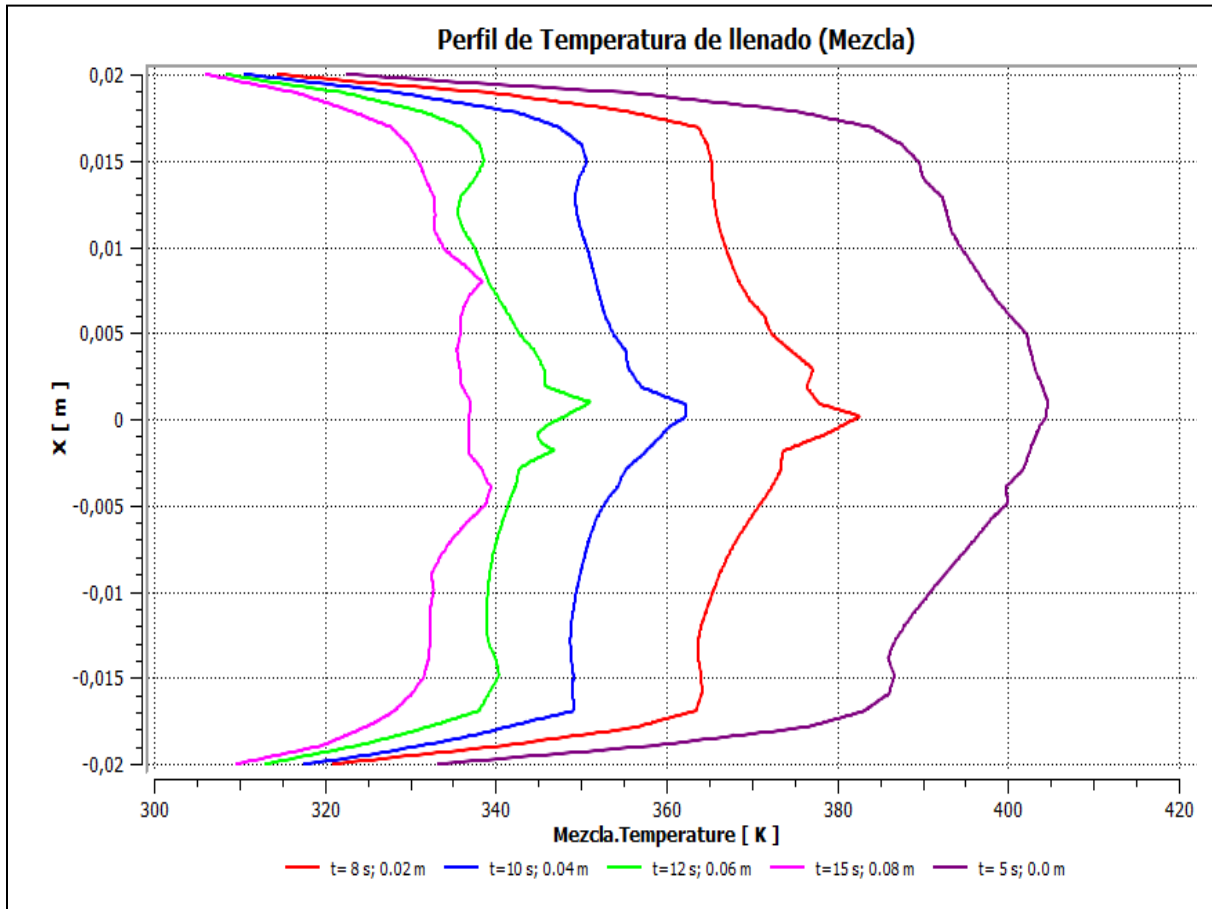


Figura 4.6. Perfil de Temperatura de llenado en la piel superior ($Y = +0.012 \text{ m}$).

- La temperatura del polímero y de la mezcla de gases es muy similar, descartando así cualquier efecto de la temperatura del polímero sobre la mezcla de gases.

También se puede observar que la temperatura aumenta conforme a la profundidad de la placa, descendiendo en el siguiente orden: piel superior-núcleo-piel inferior. Realizando un análisis de este efecto se puede decir:

- Zona fría = solidificación rápida del polímero, por lo tanto menor cantidad de burbujas
- Zona caliente = Solidificación lenta del polímero, mayor probabilidad de crecimiento de burbujas.

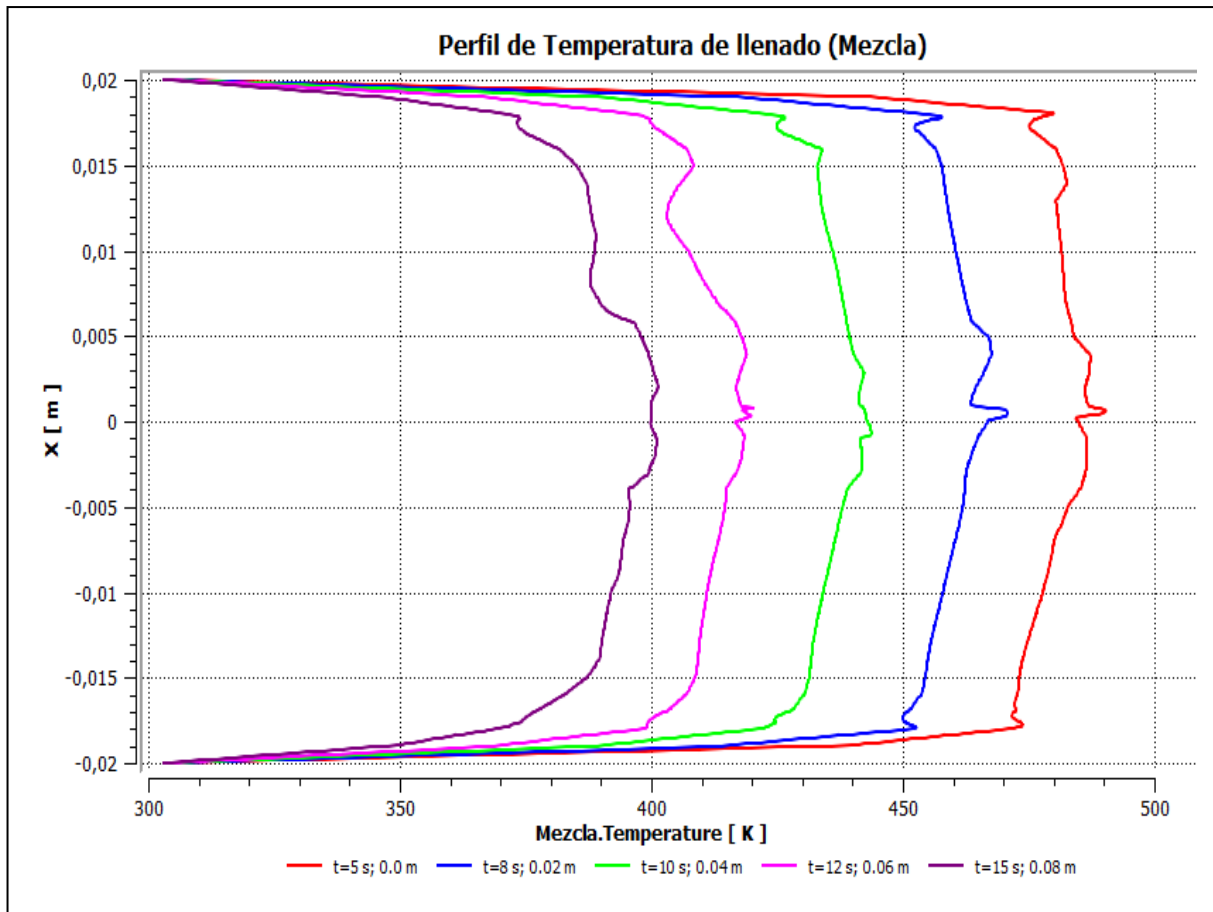


Figura 4.7. Perfil de Temperatura de llenado en el núcleo de la placa ($Y = - 0.12$ m).

En la figura 4.7 se puede apreciar un ligero incremento en el valor de la temperatura de la fracción de la mezcla de gases, en las paredes el perfil de temperatura es muy similar al los valores centrales lo que hace suponer que la salida de gas colocada en la parte inferior de la placa aunada a la temperatura de 30° C de la placa influye en el enfriamiento del polímero afectando de manera negativa la fracción de masa de los gases inmersos en el polímero.

Los moldes de inyección cuentan con enfriamiento base de un serpentín interno por el cual circula de agua, experimentalmente las temperaturas del molde son variables y los perfiles pueden cambiar conforme la velocidad de inyección y la temperatura del agua, para el presente caso de estudio este valor de temperatura del molde se mantuvo constante a 30° C. Finalmente en la Figura 4.8 se puede observar un efecto similar de la

temperatura en el núcleo de la placa con las otras dos secciones, conservando un perfil de temperatura para la fracción de gases ligeramente parabólico.

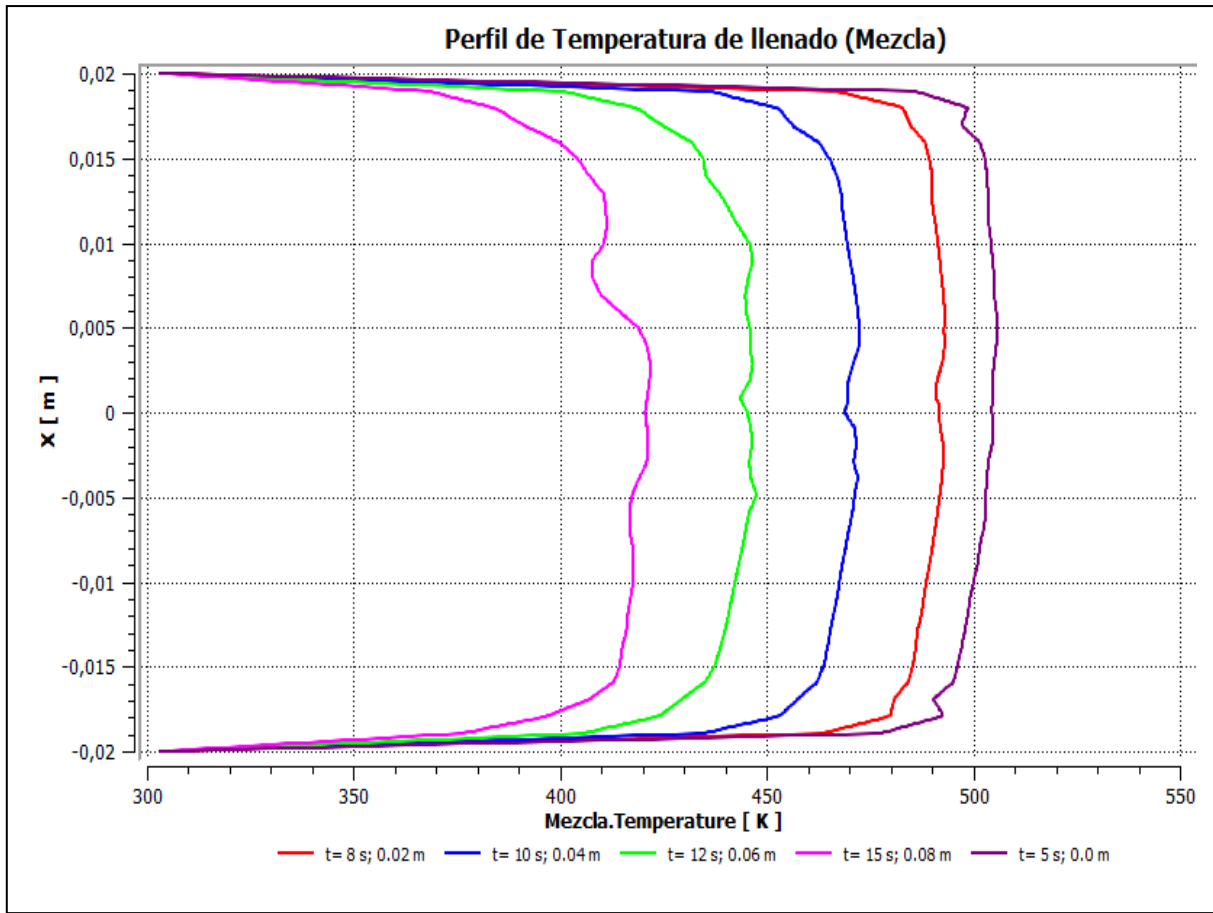


Figura 4.8. Perfil de Temperatura de llenado en el núcleo (Y = 0.0 m).

Como se mencionó anteriormente otra de las variables críticas en el proceso de inyección efecto de suma importancia es la presión de llenado, pues si esta no llega al valor adecuado la probabilidad de que se tenga una pieza incompleta aumenta, caso contrario si la presión es demasiada el molde puede abrirse ocasionando daño en la estructura física de la máquina de inyección.

4.4 Efectos de la Presión con respecto a la distribución de burbujas

Como se mencionó con anterioridad uno de los efectos más importantes en la inyección de espumas poliméricas es la presión de llenado, la literatura menciona que para la inyección-reacción los valores de presión oscilan entre los 3 a 4 MPa [15]. Para el presente trabajo se observa que el valor máximo a la entrada del molde en $t=5$ s está alrededor de los 2 MPa siendo este un valor muy cercano a los valores experimentales reportados.

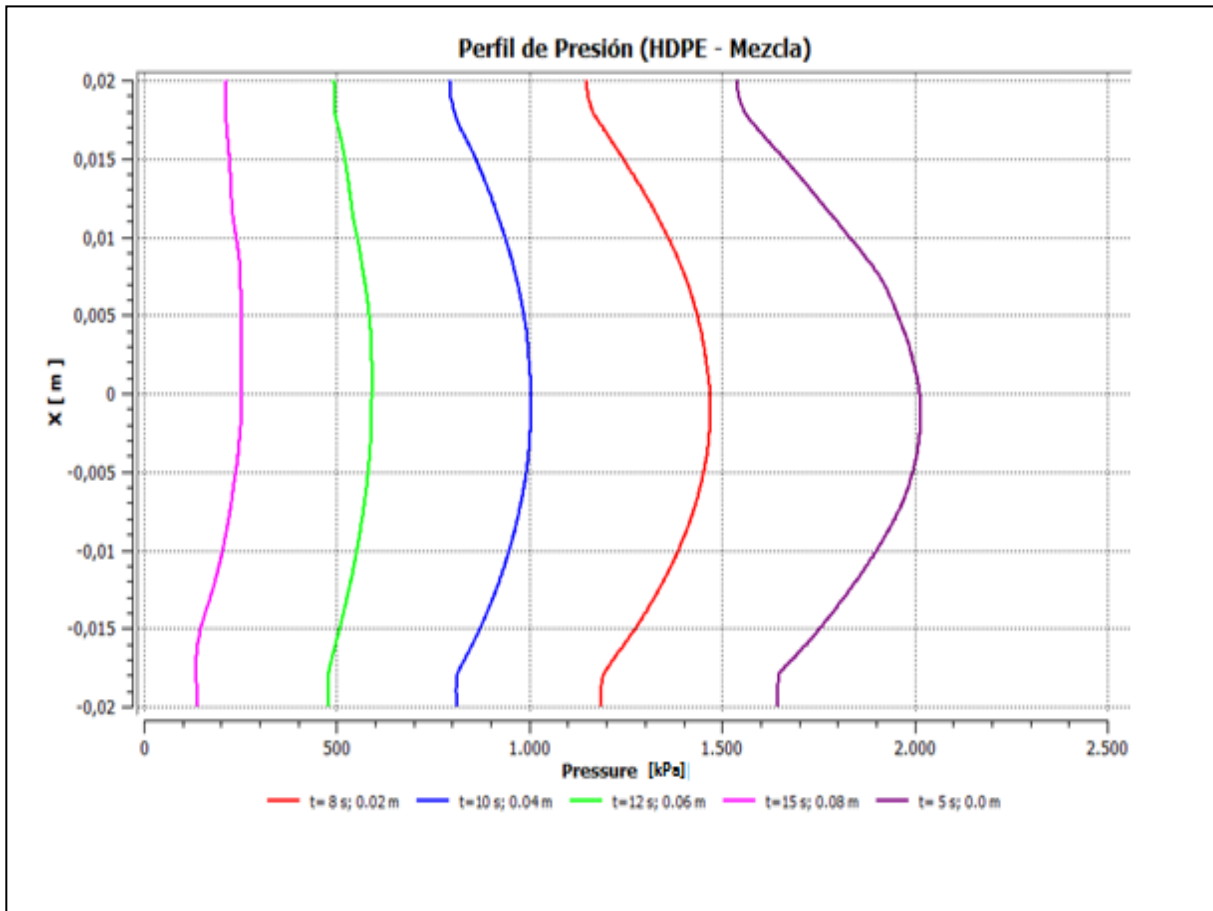


Figura 4.9. Perfil de Presión de llenado en la piel superior de la placa ($Y = +0.012$ m)

Otra consideración importante en los perfiles de llenado es la homogeneidad en cada una de las tres secciones de la placa (piel superior, piel inferior y núcleo) favoreciendo así el llenado por completo de la sección del molde. Se puede notar también que al avanzar la mezcla gas-polímero el perfil de presión no se observan variaciones

bruscas, tomando como referencia a la velocidad de llenado se observa un patrón de distribución de la mezcla uniforme tal vez en gran medida al dominio que ejerce el polímero sobre la mezcla de gases. Por último podemos concluir el efecto positivo en la distribución de burbujas a lo largo de la placa a consecuencia de una adecuada presión de llenado.

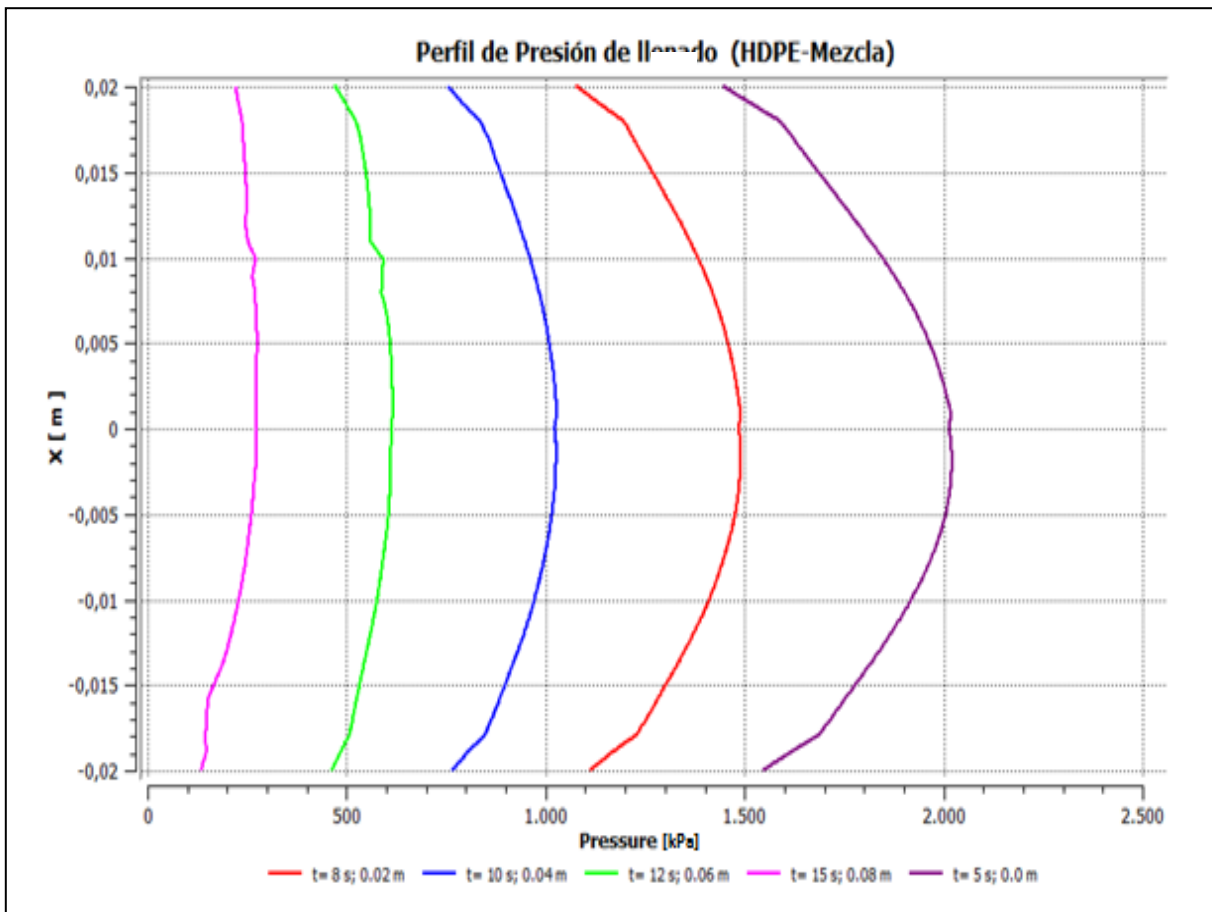


Figura 4.10. Perfil de Presión de Llenado en la piel inferior de la placa ($Y = -0.012$ m).

Como se puede apreciar en cada una de las cinco secciones analizadas la presión se comporta muy similar en las zonas de contacto con el molde de inyección, lo que se refleja en un perfil de presión parabólico de llenado tal como lo reporta la literatura, de esta manera podemos concretar una presión homogénea en cada una de las tres secciones de la placa (piel – núcleo – piel) durante el proceso de inyección mostradas en las Figuras 4.9,4.10 y 4.11.

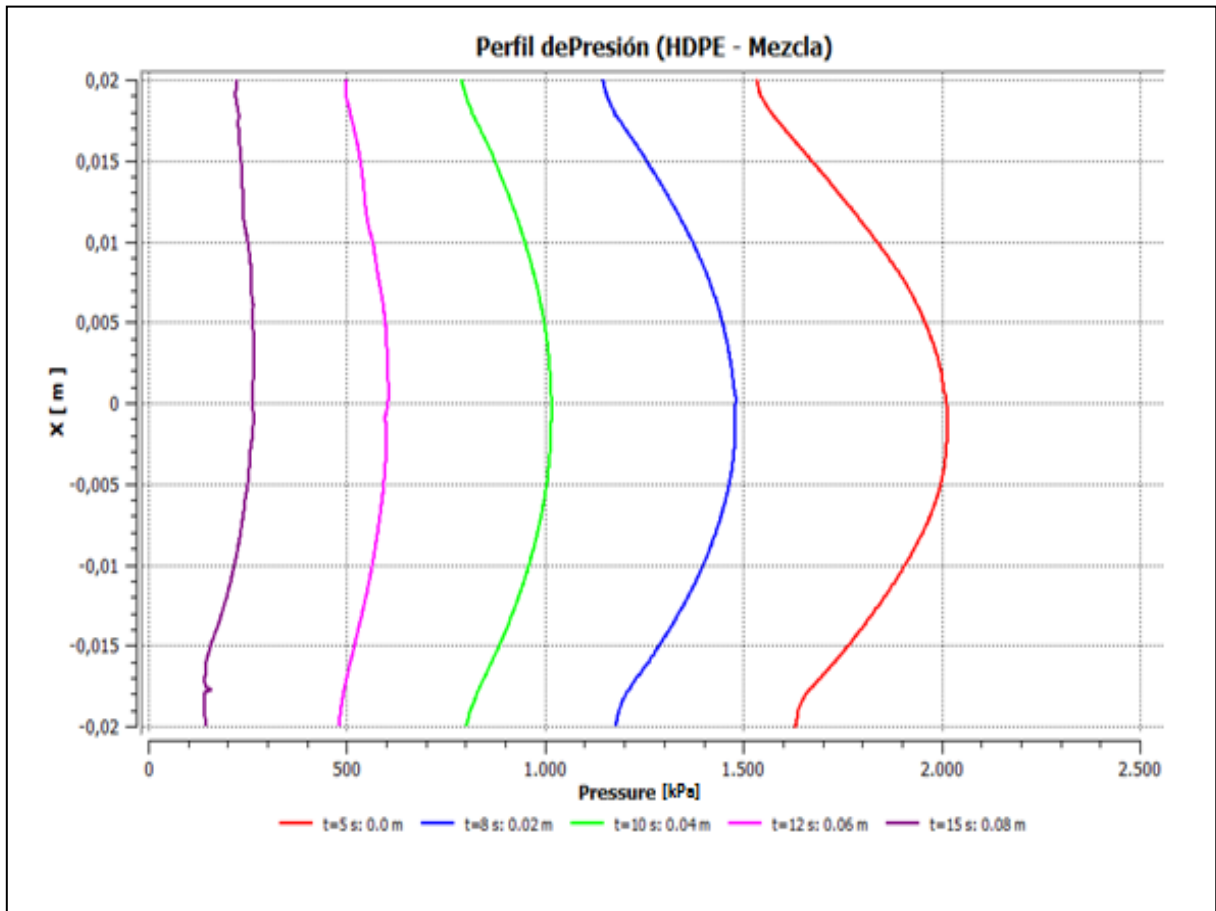


Figura 4.11. Perfil de Presión de llenado en el núcleo ($Y = 0.0$ m).

4. 5 Distribución del polímero en el molde de inyección (HDPE)

La parte central del presente trabajo se encuentra en obtener la distribución de burbujas en la espuma polimérica, identificando los efectos de la velocidad de llenado, temperatura y presión considerando los efectos viscoelásticos así como la turbulencia y tensión superficial gas-polímero en el llenado del molde. En las Figuras 4.12 a 4.14 se representa el llenado del molde de inyección en el cual se aprecia un perfil de llenado parabólico característico de este tipo de moldes.

Para la Figura 4.12 a) en un $t = 5$ s se observa la mezcla gas-polímero saliendo del canal de llenado con una fracción promedio de gas polímero de 10-90 % respectivamente. En la Figura 4.12 b) se aprecia de manera más detallada el perfil parabólico en el llenado

del molde, notando que el polímero se abre paso en mayormente por el centro y con menor velocidad en cuanto se acerca a las paredes, cabe resaltar que el gráfico del perfil de velocidad (Figuras 4.3 a 4.5) reafirma este comportamiento.

Conforme la mezcla gas-polímero avanza se observa una turbulencia mayor posiblemente debido a los efectos de nacimiento y muerte de burbujas a lo largo del llenado del molde, uno de los efectos a resaltar es la cantidad de gas que permanece inmersa en el polímero, pues de este dependerá la cantidad de burbujas que se tengan al momento de solidificar.

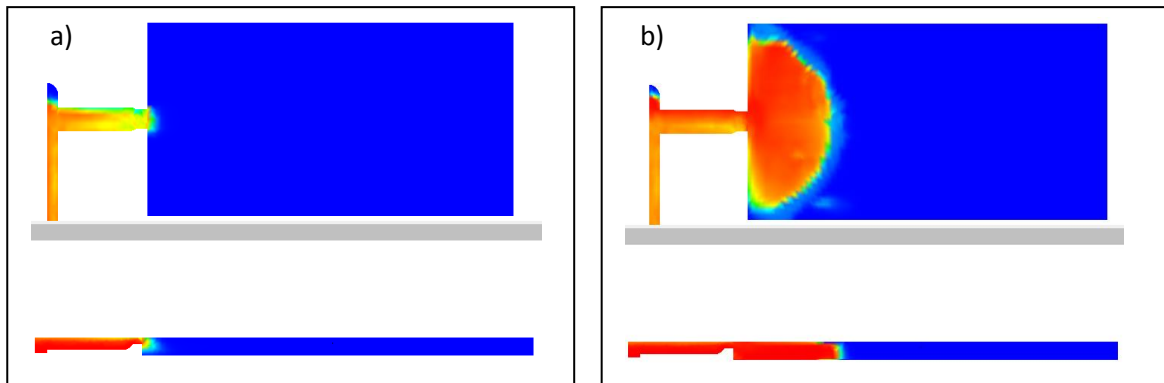


Figura 4.12. Perfil de Presión de llenado en la piel inferior de la placa a diferente tiempo y posición.

Para finalizar el análisis de llenado del molde de inyección se puede apreciar que algunas zonas quedan sin ser cubiertas por parte del polímero, esto significa que una cantidad de gas se queda atrapada y no permite llenarse con el polímero, una posible causa es la ubicación de la salida que se le da al polímero.

Este tipo de situaciones se presentó en las pruebas experimentales de ahí la motivación de este trabajo. Como dato adicional se observa en las Figura 4.13 a) y 4.13 b) la fase final de llenado del molde y como esta alcanza su máximo en $t = 15$ s.

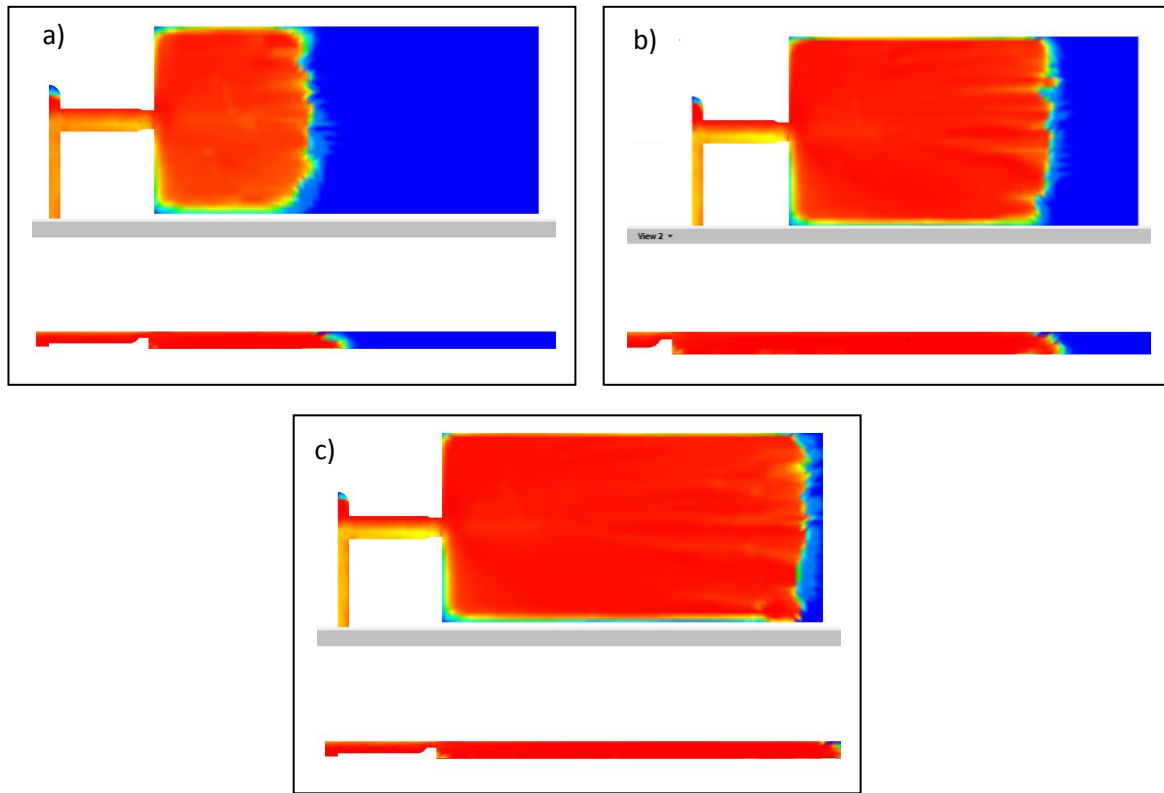


Figura 4.13. Perfil de Presión de llenado en la piel inferior de la placa a diferente tiempo y posición.

Para finalizar el análisis de la distribución de burbujas en la espuma polimérica se considera una vista lateral de la placa donde se identifica cada una de sus tres secciones (piel superior, piel inferior y núcleo).

4.6 Distribución de burbujas en el polímero inyectado.

Después de revisar los diversos efectos físicos que afectan directamente la distribución de burbujas en la espuma polimérica se procedió a cuantificar la distribución de los cinco grupos de burbujas sugeridos en la configuración de tal manera que se promedió en cinco posiciones diferentes de cada una de las tres secciones (superior-inferior-núcleo), esto es, para la sección en $Y = + 0.012$ m (piel superior) en las posiciones $Z = 0.0, 0.02, 0.04, 0.06,$ y 0.08 m se promediaron las cinco posiciones para cada tamaño de burbuja, de la misma manera se procedió a realizar el promedio en el núcleo en $Y = 0.0$ m y en sección en $Y = - 0.012$ m (piel inferior).

En la Figura 4.14 se puede apreciar la distribución de burbujas promediada por sección, en la cual se observa que la mayor cantidad de burbujas se encuentra contenida en el centro siendo 0.03 y 0.1 mm los diámetros de burbujas con mayor presencia. En la sección inferior (piel inferior) se observa una menor cantidad de burbujas, tal efecto puede asociarse a la ruptura debido al cambio de temperatura drástico entre la mezcla gas-polímero en la cara del molde. El mismo efecto se observa en la sección superior donde la cantidad de burbujas cuantitativamente es menor a la del núcleo.

Se puede finalizar aseverando que los resultados obtenidos de la distribución son cualitativamente representativos con respecto a los resultados experimentales, una de las limitantes para poder comprar de una forma rigurosa la distribución de burbujas es debido a que en la parte experimental se toma en cuenta secciones completas con cintos de tamaños y se maneja un tamaño promedio, pero para la finalidad de este trabajo se observa que la mayoría de las burbujas se encuentran presentes en el centro de la placa de polietileno de alta densidad.

Finalmente con estos valores en la distribución se puede realizar el comparativo con los datos experimentales, la bibliografía reporta los valores de diámetro promedio en una sección de la placa, enfocándose principalmente en el núcleo, para el presente caso se compara solo esa sección el cual se muestra en la siguiente tabla.

Diámetro de burbujas (mm)	% de Burbujas Experimental	% de Burbujas Simulado
0.01	18	10
0.03	25	35
0.05	23	19
0.07	32	8
0.10	16	28

Como se puede observar los valores experimentales son similares a los calculados a partir de la simulación para los diámetros entre 0.01 y 0.05 mm, no así para los diámetros entre 0.07 y 0.10 mm ya que en los valores simulados se comportan inversamente.

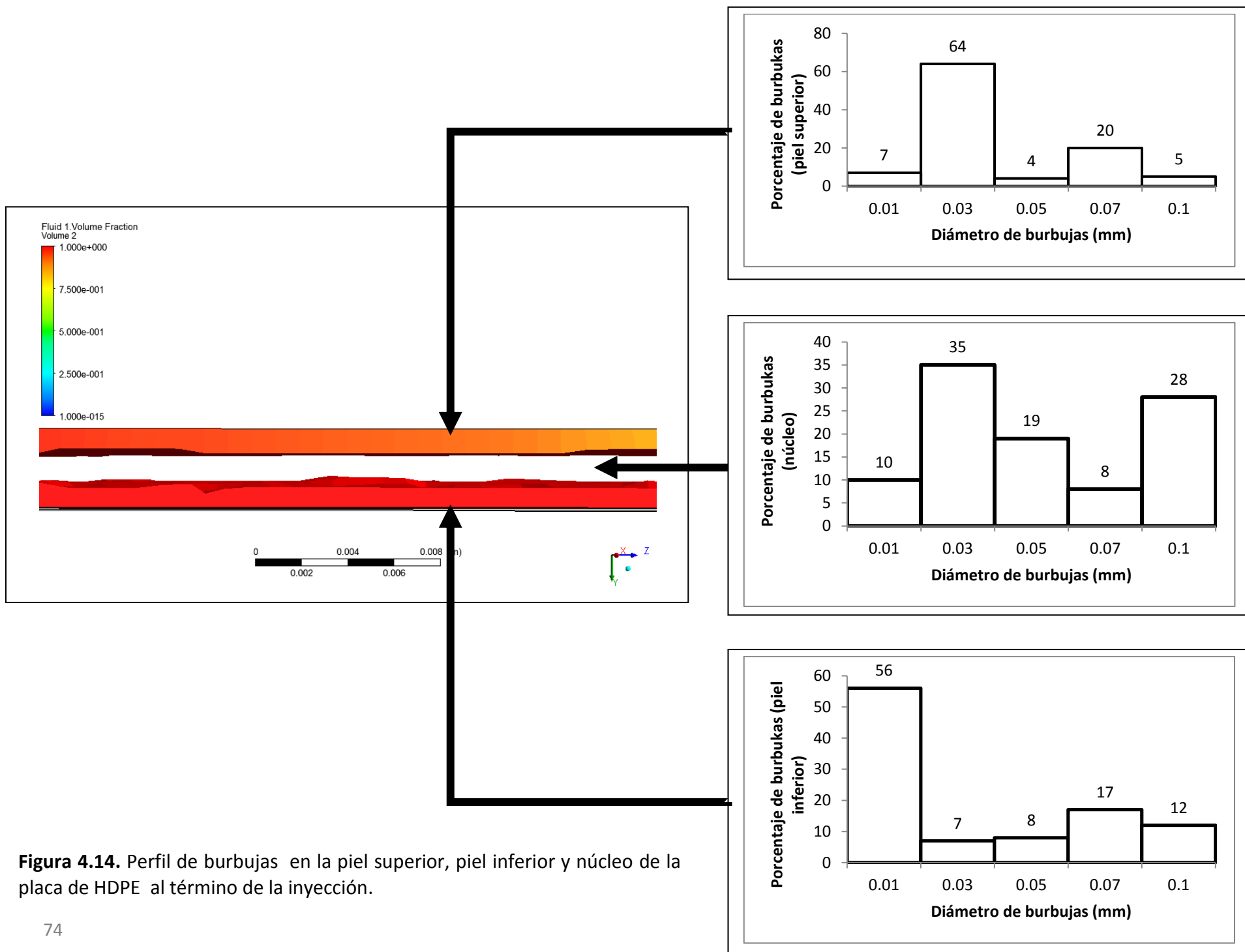


Figura 4.14. Perfil de burbujas en la piel superior, piel inferior y núcleo de la placa de HDPE al término de la inyección.

Capítulo 5

CONCLUSIONES

En el Capítulo 5 se presentan las conclusiones y recomendaciones propuestas en este trabajo de investigación, las cuales pueden ser tomadas en cuenta para trabajos posteriores.

Como primer análisis para culminar el presente trabajo cabe resaltar la adecuada elección del modelo viscoelástico con el que se pretende representar el fenómeno, también de los parámetros adecuados tales como efectos de turbulencia y de tensión superficial si se consideran varias fases. En el presente trabajo se tomaron en cuenta modelos no tan complejos debido a la disponibilidad de los parámetros y a los recursos computacionales. A primera instancia se debe resaltar el trabajo de crear una geometría lo más real posible a la parte experimental con la finalidad de representar el fenómeno lo mejor posible. Como manera de ahorrar recurso computacional se considero solo refinar las secciones de interés, en este caso la placa y si contacto directo con el molde de inyección destacando que se propuso una sección de simetría la cual ayudo a disminuir el tiempo de convergencia de las ecuaciones de masa, momentum y energía presentes.

Para el análisis de los resultados obtenidos por el CFD (*Computer Dynamics Fluid*) se tomaron en cuenta tres variables representativas: velocidad, temperatura y presión de llenado, con la finalidad de observar el efecto de estas en la distribución de burbujas y el llenado del molde de inyección.

Para la velocidad del polímero en la laca se observa un comportamiento tipo parabólico, no así para la mezcla de gases pudiendo ser la causa las ranuras colocadas para la salida de aire presente antes de la inyección o debido al efecto de rompimiento coalescencia. Otro punto importante es que la presión de llenado corresponde en cierta medida a los valores que se esperan experimentalmente (3 a 4 MPa) asegurando de esta manera el llenado de la placa sin salirse de las fronteras del molde. Por último se destaca el análisis cuantitativo de la distribución de las burbujas en las tres zonas de interés (piel superior-piel inferior-núcleo) para de esta manera poder decir que la simulación representa de una manera aceptable la base experimental de la que se partió.

Como recomendación final para futuros trabajos cabe destacar la inclusión de una fuente generadora de gas la cual proporcione directamente la cantidad de gas en función de la cantidad de ACA que este reaccionando debido al incremento en la temperatura.

Bibliografía.

1. Jean-Francois, B. and R. Denis, *The effect of skin thickness on the mechanical properties of structural foams*. Cellular polymers, 2004. **23**(4): p. 193-210.
2. Robledo-Ortiz, J.R., et al., *Non-isothermal decomposition kinetics of azodicarbonamide in high density polyethylene using a capillary rheometer*. Polymer Testing, 2008. **27**(6): p. 730-735.
3. Shia-Chung, C., et al., *Effect of cavity surface coating on mold temperature variation and the quality of injection molded parts*. International communications in heat and mass transfer, 2009. **36**(10): p. 1030-1035.
4. Zhang, Y., D. Rodrigue, and A. Ait-Kadi, *High-density polyethylene foams. I. Polymer and foam characterization*. Journal of Applied Polymer Science, 2003. **90**(8): p. 2111-2119.
5. Leung, S.N., et al., *Computer Simulation of Bubble-Growth Phenomena in Foaming*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2006. **45**(23): p. 7823-7831.
6. Liao, R., W. Yu, and C. Zhou, *Rheological control in foaming polymeric materials: I. Amorphous polymers*. Polymer, 2010. **51**(2): p. 568-580.
7. Shafi, M.A., K. Joshi, and R.W. Flumerfelt, *Bubble size distributions in freely expanded polymer foams*. Chemical Engineering Science, 1997. **52**(4): p. 635-644.
8. Lee, J., et al., *A novel method for improving the surface quality of microcellular injection molded parts*. Polymer, 2011. **52**(6): p. 1436-1446.
9. Leung, S.N., et al., *Mechanism of extensional stress-induced cell formation in polymeric foaming processes with the presence of nucleating agents*. The Journal of Supercritical Fluids, 2012. **63**(0): p. 187-198.
10. Anderson; Jere R. (Newburyport, M.O.K.T.B., MA), *Polyethylene foams and methods of their production, patent 6376059*. April 23, 2002.
11. Bhatti, A.S., et al., *The effects of additives on the thermal decomposition of azodicarbonamide*. Thermochemica Acta, 1984. **76**(3): p. 273-286.
12. Shukla, S. and K.W. Koelling, *Classical Nucleation Theory Applied to Homogeneous Bubble Nucleation in the Continuous Microcellular Foaming of the Polystyrene-CO₂ System*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2009. **48**(16): p. 7603-7615.
13. McClurg, R.B., *Design criteria for ideal foam nucleating agents*. Chemical Engineering Science, 2004. **59**(24): p. 5779-5786.

14. Alok, G.O. and X.-F. Yuan, *Numerical simulation of polymer foaming process in extrusion flow*. Chemical Engineering Science, 2010. **65**(12): p. 3749-3761.
15. Jones, M.-. *Procesamiento de plásticos, inyección, moldeo, hule y PVC*. 1993: p. 200-205.
16. Seo, D. and J.R. Youn, *Numerical analysis on reaction injection molding of polyurethane foam by using a finite volume method*. Polymer, 2005. **46**(17): p. 6482-6493.
17. Shah, V., *Handbook of Plastics Testing Technology*. 1998.
18. Throne, J.L., *Thermoplastic Foams*. 1996: p. 465.
19. Zhang, Y., D. Rodrigue, and A. Ait-Kadi, *High density polyethylene foams. IV. Flexural and tensile moduli of structural foams*. Journal of Applied Polymer Science, 2003. **90**(8): p. 2139-2149.
20. Tovar-Cisneros, C., R. González-Núñez, and D. Rodrigue, *Effect of Mold Temperature on Morphology and Mechanical Properties of Injection Molded HDPE Structural Foams*. Journal of Cellular Plastics, 2008. **44**(3): p. 223-237.
21. Gosselin, R. and D. Rodrigue, *Cell morphology analysis of high density polymer foams*. Polymer Testing, 2005. **24**(8): p. 1027-1035.
22. Sin, L.T., et al., *Computer aided injection moulding process analysis of polyvinyl alcohol-starch green biodegradable polymer compound*. Journal of Manufacturing Processes, 2012. **14**(1): p. 8-19.