



UNIVERSIDAD  
DE MÁLAGA



Máster Universitario  
en Simulación Numérica  
en Ciencia e Ingeniería  
con COMSOL Multiphysics

# TRABAJO FIN DE MÁSTER

## ANÁLISIS DE FLUJO DE FLUIDOS NO NEWTONIANOS EN CABEZALES DE IMPRESIÓN 3D

MÁSTER UNIVERSITARIO en  
SIMULACIÓN NUMÉRICA EN CIENCIA E INGENIERÍA  
CON COMSOL MULTIPHYSICS

Autor: Roberto Hernández Aguirresarobe

Tutor: Ricardo Torres Camara

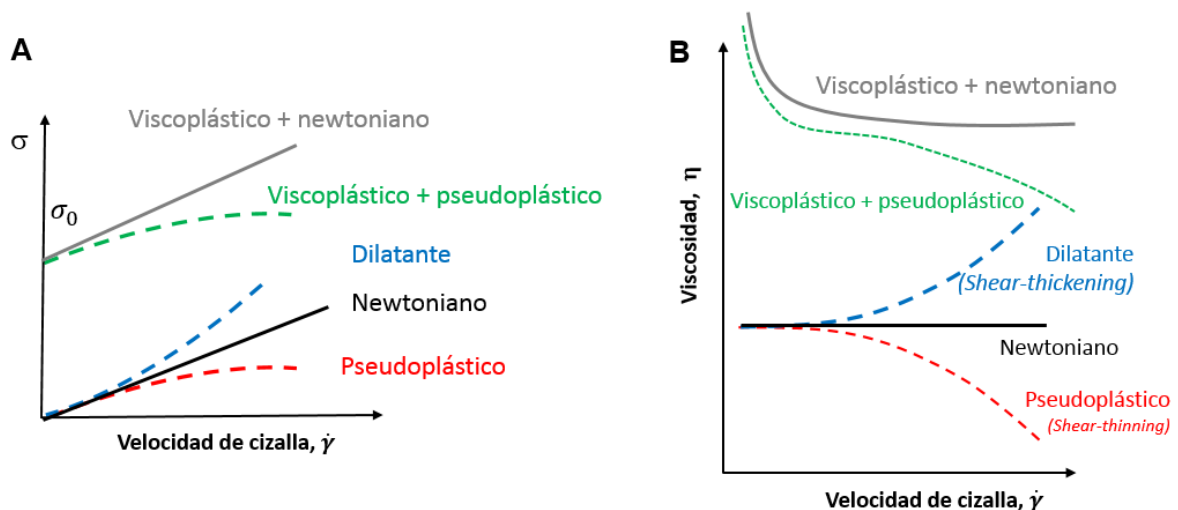
JULIO de 2020

## 1. Descripción General

Este trabajo pretende utilizar las herramientas de COMSOL Multiphysics para el estudio de flujos de materiales no newtonianos a través de cabezales de impresión 3D. En el mismo se discuten las configuraciones generales que presenta COMSOL para el estudio de este tipo de materiales. Además, se presenta la resolución del flujo a través de una boquilla de impresión 3D por extrusión directa con materiales pseudoplásticos y geometría cónica. Del mismo modo, se discuten las posibilidades y limitaciones del modelo planteado.

## 2. Fundamento Teórico

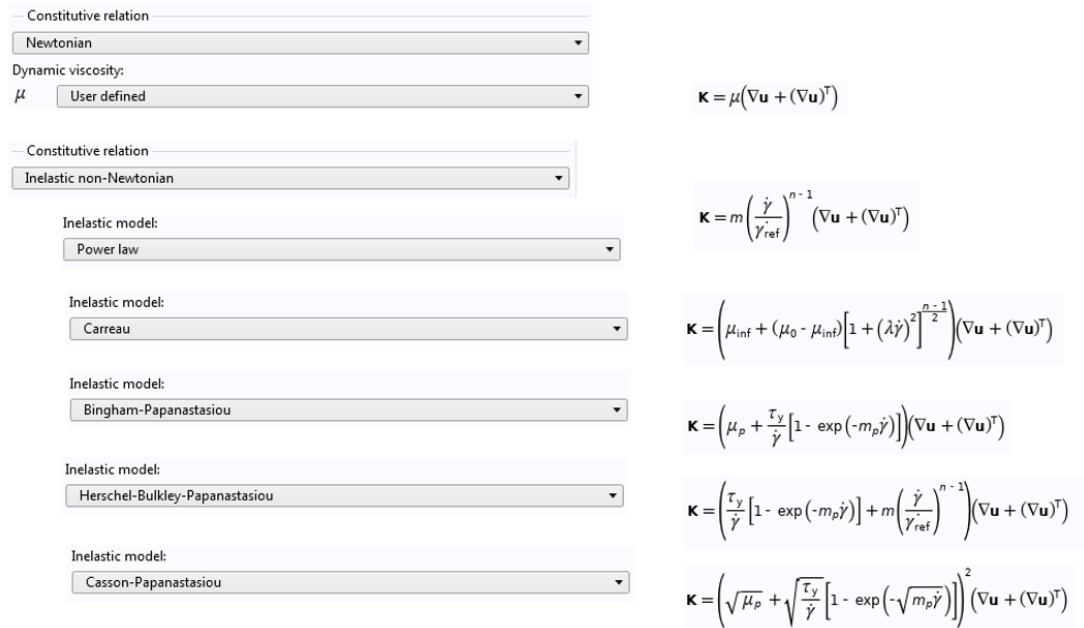
El flujo de materiales poliméricos está altamente influenciado las características moleculares y la dinámica a nivel molecular. Como consecuencia de ello, la dependencia del esfuerzo con la velocidad de deformación no es lineal y por lo tanto la viscosidad del material no permanece constante en el seno del fluido. Así, se pueden describir diferentes comportamientos en formulaciones poliméricas, como los que se recogen en la Figura 1.



**Figura 1** Curvas de flujo (esfuerzo vs. Velocidad de cizalla) (A) y curvas de viscosidad (Viscosidad vs. Velocidad de cizalla) (B) para diferentes materiales no newtonianos.

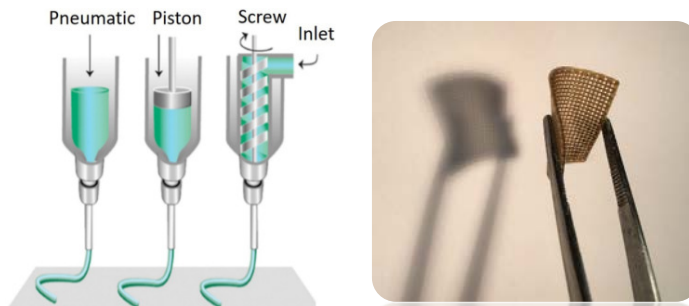
Estos comportamientos no lineales de la viscosidad afectan directamente a todos los parámetros del flujo de estos materiales, como puedan ser el perfil de velocidad del fluido, la velocidad de cizalla generada, etc. Además, el comportamiento es al mismo tiempo dependiente de la temperatura.

Los resolvedores del módulo de dinámica de fluidos de COMSOL Multiphysics incorporan la posibilidad de implementar este tipo de materiales en los modelos. Para ello, utiliza ecuaciones reológicas clásicas utilizadas en la descripción de este tipo de materiales (Figura 2).



**Figura 2** Diferentes configuraciones del módulo de flujo laminar de COMSOL que incorpora materiales tanto newtonianos como no newtonianos.

Así, el estudio permite variar entre materiales newtonianos (por defecto), materiales pseudoplásticos (modelos de ley de potencias y modelo de Carreau), materiales viscoplásticos newtonianos (modelo de Bingham) o materiales viscoplásticos pseudoplásticos (modelos de Henschel-Bulkley y modelo de Casson).[1,2] Esto aumenta mucho las posibilidades de modelizar procesos de fabricación donde se vean implicados flujos de polímeros, como es el caso de la impresión 3D. Los procesos de fabricación aditiva, también conocidos como de impresión 3D, son un conjunto de tecnologías de fabricación con diferentes características cuyo factor común es que las piezas tridimensionales se constituyen capa a capa. [3,4] Entre las diferentes tecnologías, una de las más utilizadas son aquellas que utilizan la extrusión de polímeros como base del proceso de fabricación. Existen diferentes tipos, tal y como se muestra en la Figura 3.



**Figura 3** Diferentes tipos de tecnologías de impresión 3D de extrusión directa de polímeros.

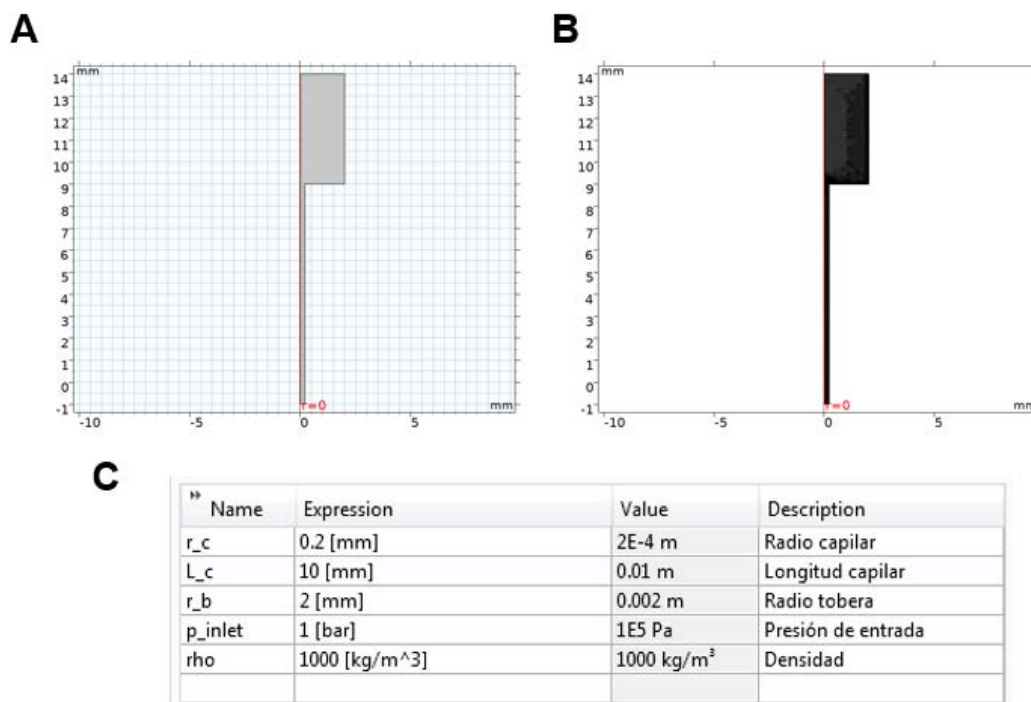
Aunque estos procesos de fabricación están implementándose cada vez más, aún están lejos de poder competir con medios tradicionales de fabricación. Esto se debe a que el proceso está en muchos casos poco definido y el desarrollo de materiales y aplicaciones se basa en la mayoría de los casos en el ensayo-error. En este sentido, herramientas de simulación como COMSOL

Multiphysics pueden ser de gran ayuda para comprender estos procesos, que implican materiales no newtonianos en entornos no isoterms.

En este sentido el objetivo de este trabajo es comprender el comportamiento de un fluido no newtoniano a través de un cabezal de impresión 3D mediante el módulo de dinámica de fluidos (CFD) de COMSOL. Para ello, se establece una metodología dividida en dos partes. En primer lugar, se pretende analizar el comportamiento de diferentes materiales en un capilar, ya que corresponden a condiciones descritas, de forma que se pueda comprender el funcionamiento de los resolvidores. En segundo lugar, se pretende utilizar este mismo módulo para describir una configuración de impresora 3D real con materiales específicos.

### 3. Estudios de flujo de materiales no newtonianos a través de un capilar

Como primer paso del trabajo, se realizaron estudios del flujo a través de un capilar con materiales de diferente naturaleza: newtonianos, pseudoplásticos y viscoplásticos. Para ello se utilizó una geometría como la que se muestra en la Figura 4 A. En ella se recoge un capilar (sección estrecha) con una tobera (sección ancha) en la que se va a simular el flujo mediante la aplicación de una presión en la parte superior. La geometría es una geometría simple con simetría axisimétrica, por lo que se escogió esta configuración en el módulo de COMSOL. Para el mallado de la geometría (Figura 4B) se utilizó una configuración por defecto de la malla, controlada por el módulo CFD, y con un tamaño de elemento normal. Los parámetros utilizados para la generación del modelo se recogen en la tabla de la Figura 4 C. Adicionalmente se definió una línea de trabajo en la parte inferior del capilar para poder analizar los resultados.



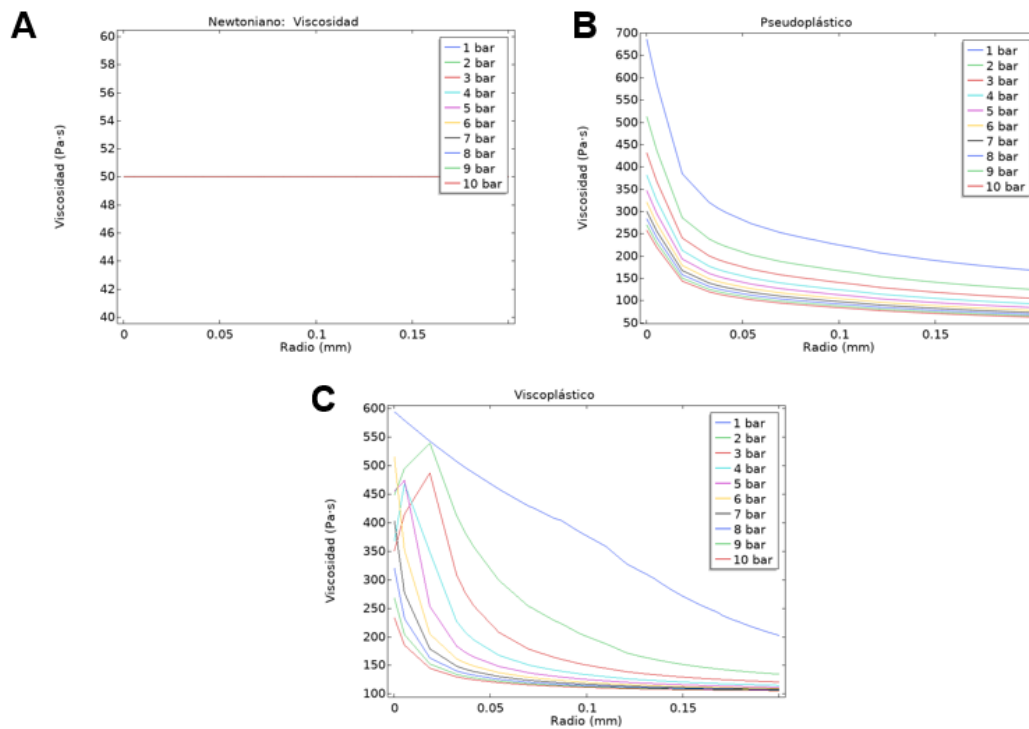
**Figura 4** Geometría de capilar utilizada para el análisis del flujo (A), mallado utilizado para la resolución (B) y listado de parámetros para la resolución del problema (C).

Para simular los diferentes fluidos se utilizaron valores arbitrarios para los diferentes modelos, que se recogen en la Tabla 1.

**Tabla 1** Valores de parámetros de modelo para los casos newtoniano, pseudoplástico y viscoplástico.

Modelo	Parámetro	
<i>Newtonian</i>	Viscosidad	$\mu_0$ : 50 Pa·s
<i>Carreau</i>	Viscosidad newtoniana	$\mu_0$ : 1100 Pa·s
	Viscosidad terminal	$\mu_{inf}$ : 0
	Tiempo de relajación	$\lambda$ : 90 s
	Índice de pseudoplasticidad	$n$ : 0.7
<i>Bingham</i>	Viscosidad plástica	$\mu_p$ : 100 Pa·s
	Esfuerzo umbral	$\tau$ : 500 Pa
	Parámetro de modelo 1s	$m_p$ : 1s

Los resultados de viscosidad en el extremo del capilar para diferentes presiones en función de la posición en el radio del capilar se muestran en la Figura 5.



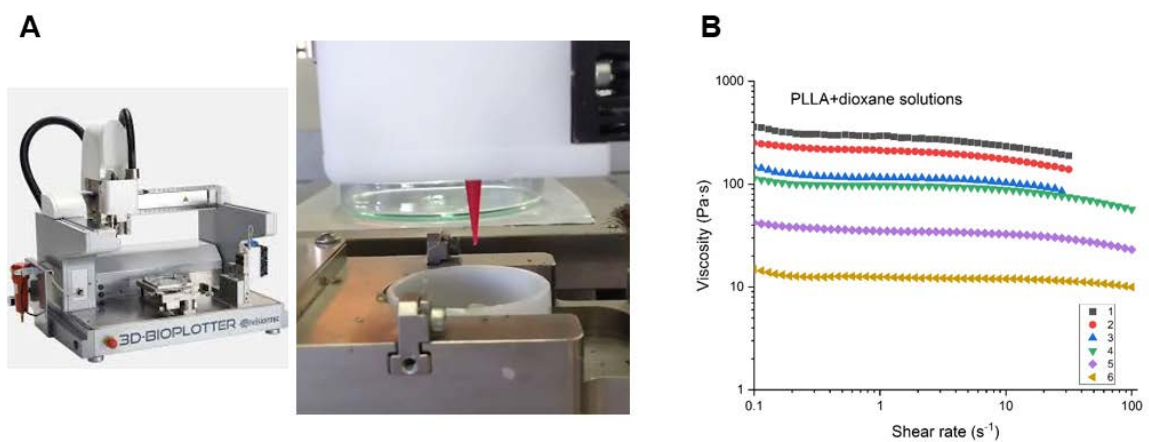
**Figura 5** Valores de viscosidad para los posición de la línea de corte para los siguientes casos: Material newtoniano (A), Material pseudoplástico modelizado por el método de Carreau (B) y Material viscoplástico modelizado por el método de Bingham (C).

Los resultados muestran un comportamiento esperado, con una viscosidad constante en el caso newtoniano, una viscosidad creciente hacia el centro del capilar para el caso pseudoplástico (debido al aumento de la velocidad de cizalla) y una tendencia a infinito para el material

viscoplástico. Los modelos permiten también determinar los perfiles de velocidad y la velocidad de cizalla en todos los casos (Resultados no mostrados).

#### 4. Modelización de un cabezal de impresión 3D

En este trabajo se ha escogido la modelización del cabezal más sencillo de impresión 3D. Se trata de un cabezal para impresión de disoluciones que se utiliza a temperatura ambiente, por lo que el modelo no recoge la posibilidad de transferencia de calor. La especificación de la geometría se ha realizado atendiendo a la configuración de la impresora 3D Bioplotter (Envisiontech), tal y como se muestra en la figura Figura 6 A. Además se han utilizado resultados experimentales de disoluciones de poli-L-(ácido láctico) (PLLA) en dioxano (Figura 6 B), para poder comparar el comportamiento predicho por el modelo con el comportamiento real del material.



**Figura 6** Configuración experimental que se pretende simular en el modelo (A) y curvas de viscosidad de los materiales analizados (B).

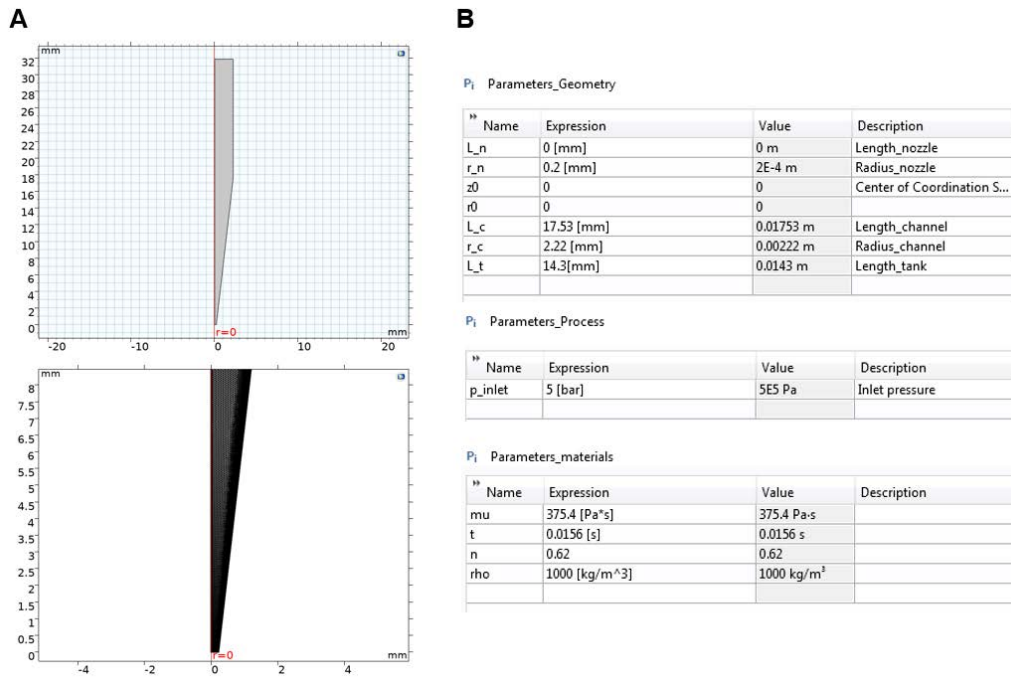
Para poder aplicar los modelos, los resultados experimentales se ajustaron a un modelo de Carreau y los parámetros así obtenidos se muestran en la Tabla 2.

**Tabla 2** Parámetros de ajuste al modelo de Carreau para los diferentes materiales

Material	$\mu_0$ (Pa·s)	$\lambda$ (s)	n
1	375	$1.56 \cdot 10^{-2}$	0.62
2	249	$1.29 \cdot 10^{-2}$	0.62
3	145	$1.01 \cdot 10^{-2}$	0.62
4	103	$5.5 \cdot 10^{-3}$	0.62
5	40	$1.35 \cdot 10^{-3}$	0.62
6	15	$1.57 \cdot 10^{-4}$	0.62

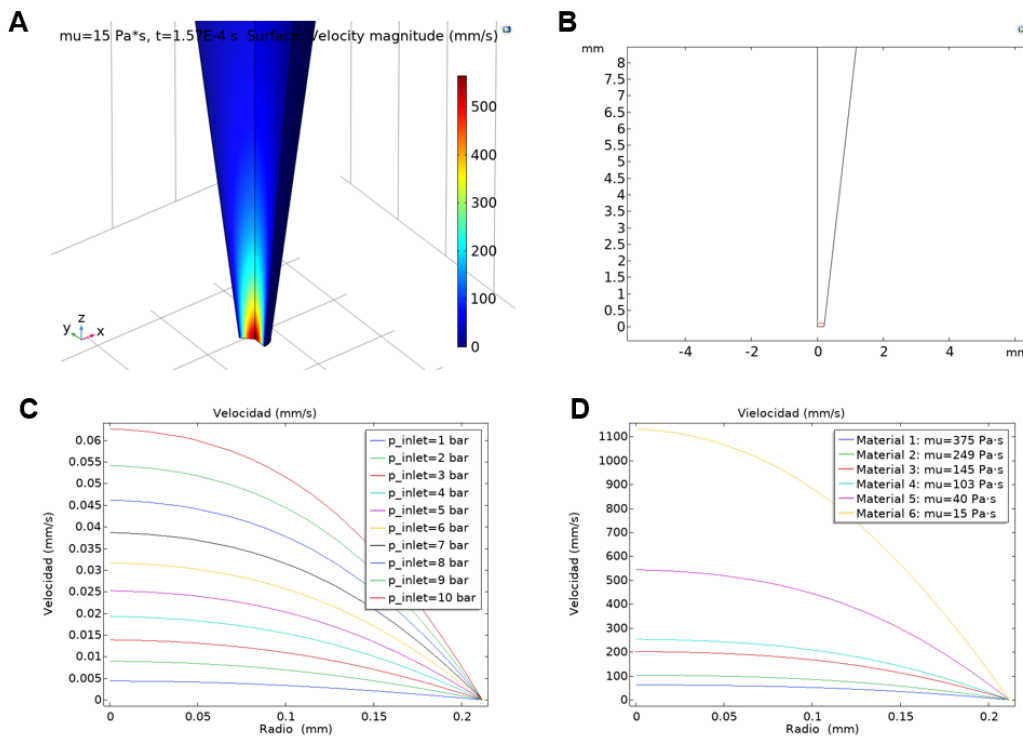
\* Se ha utilizado un valor promedio constante de n para todos los materiales.

Con estos datos, se utilizó realizó un modelo que permitiera describir el comportamiento de los diferentes materiales a diferentes materiales presiones de impresión. Para ello se diseñó una geometría axisimétrica en la que se aplicaba una presión de entrada desde la parte superior (Figura 7 A). En este caso, el mallado utilizado es un mallado extrafino controlado por el módulo CFD (Figura 7 B). Los parámetros del modelo se han subdividido en parámetros geométricos, parámetros de proceso y parámetros de material (Figura 7 C).



**Figura 7** Geometría (superior) y mallado (A) y parámetros de geometría, proceso y materiales (B) utilizados en la resolución del problema

El estudio planteado consiste un barrido paramétrico de los diferentes materiales a diferentes presiones de entrada. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 8.



**Figura 8** Resolución tridimensional del campo de velocidad (A), definición de la línea de corte utilizada para el análisis de resultados (B) y perfiles de velocidad en función de la presión de entrada (C) y del material utilizado (C).

Como se puede observar en la Figura 8 A, el perfil de velocidad del fluido se mantiene constante hasta alcanzar las proximidades de la salida del cabezal, donde el material se acelera hasta encontrar la salida. Para analizar este comportamiento, se utilizó una línea de corte en la salida del capilar (Figura 8 B) y se estudió la influencia de la presión de entrada y del material en la velocidad de salida. Los resultados obtenidos (Figura 8 C y D) siguen las tendencias esperadas: a mayor presión y/o menor viscosidad del material, mayor es la velocidad de salida. En esa misma línea de corte se analizó la velocidad de salida promedio en cada caso como una medida comparable con la velocidad real de salida. Los resultados se muestran en la Tabla 3.

**Tabla 3** Valores de velocidad media de salida del capilar para diferentes materiales y presiones de entrada.

Presión (Bar)	Velocidad de salida (mm/s)					
	Material 1	Material 2	Material 3	Material 4	Material 5	Material 6
1	2.1015	3.1951	5.5919	7.7367	19.579	51.611
2	4.4024	6.8155	12.291	16.55	40.47	103.61
3	6.9954	11.01	20.325	26.798	63.43	156.36
4	9.9022	15.788	29.641	38.499	88.733	210.17
5	13.119	21.127	40.165	51.588	116.42	265.3
6	16.634	27.004	51.82	66.006	146.47	321.95
7	20.439	33.389	64.554	81.681	178.79	380.27
8	24.519	40.262	78.302	98.56	213.33	440.41
9	28.867	47.609	93.026	116.61	250.03	502.4
10	33.472	55.403	108.69	135.76	288.8	566.3

## 5. Posibilidades y limitaciones del modelo

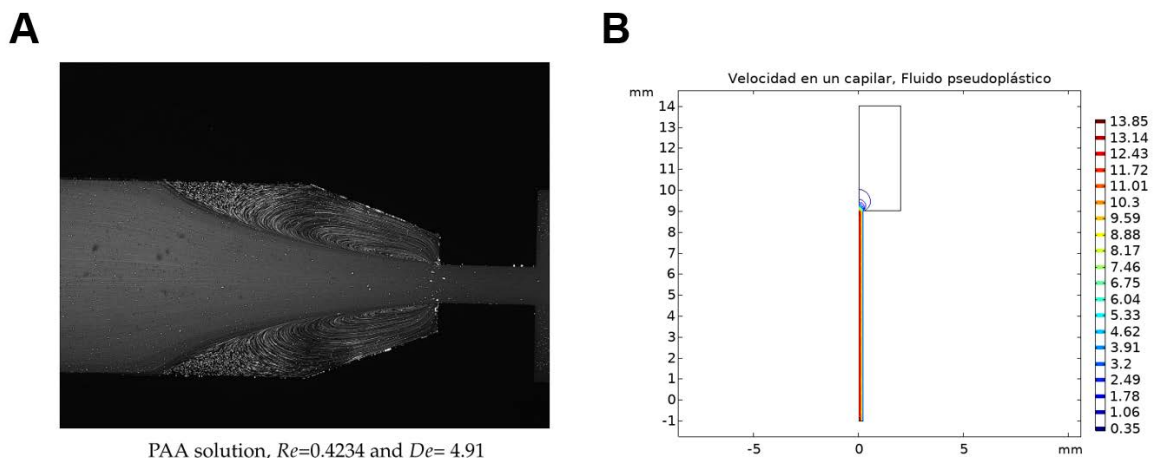
El modelo desarrollado pretende describir el comportamiento de flujo de diferentes materiales pseudoplásticos a través de un cabezal de impresión de disolución. El modelo posibilita estudiar la influencia de diferentes parámetros en el proceso de impresión 3D, como pueden ser la presión de entrada, variables de material, etc. Además, es un modelo con un coste computacional relativamente bajo, lo que puede permitir el desarrollo de una APP que permita in situ establecer los parámetros óptimos de impresión de un determinado material, evitando el ensayo-error. Sin embargo, es necesario validar el modelo antes de su puesta en funcionamiento. Los resultados experimentales muestran que únicamente los materiales 3 y 4 son adecuados para impresión 3D. Los materiales 1 y 2 sufren de problemas de atascos a la salida de la boquilla, mientras que los materiales 5 y 6 son excesivamente fluidos para generar una estructura tridimensional (Este aspecto no se pretende modelizar mediante esta simulación). Además, las velocidades de impresión son significativamente menores que las predichas por el modelo (en torno a un 30%). Si bien los resultados experimentales no son aún definitivos, sí que ponen de manifiesto la necesidad de estudiar a fondo el resolvedor del flujo no newtoniano.

Entre los parámetros a tener en cuenta es importante examinar la calidad de los datos experimentales en relación a los resultados de la simulación. En este caso, las simulaciones predicen valores de velocidad de cizalla hasta  $10000 \text{ s}^{-1}$ . Sin embargo, los valores de viscosidad



están medidos en un rango de velocidades de cizalla mucho menor (hasta  $100 \text{ s}^{-1}$ ). Por lo tanto, la mayoría de los datos de viscosidad (y por lo tanto de velocidad) están calculados por extrapolación. Este hecho es particularmente relevante en el modelo de Carreau utilizado, ya que no se ha incluido un valor de viscosidad infinita y los valores extrapolados de viscosidad continúan reduciéndose indefinidamente con la velocidad de cizalla.

Además, uno de los aspectos a tener en cuenta es la naturaleza viscoelástica de estos materiales. Los polímeros, debido a su dinámica molecular, son materiales intrínsecamente viscoelásticos y, de hecho, la pseudoplasticidad que muestran es una consecuencia de esta naturaleza. Sin embargo, los efectos viscoelásticos no se recogen de manera simple en el resolvidor de COMSOL. El programa evalúa el cambio de viscosidad aplicando las ecuaciones descritas en la Figura 2, pero sin atender a los dinámica molecular que lo genera y que puede influir en el propio flujo. Como ejemplo, una de las características del flujo de materiales viscoelásticos es la aparición de vórtices de flujo a la entrada de los capilares, como se muestra en la Figura 9 A. [5] Estos vórtices modifican el campo de velocidades a los que se ve sometido el fluido produciéndose no solo esfuerzos en cizalla sino también esfuerzos de elongación en el material. Sin embargo, si nos fijamos en las simulaciones realizadas, estos aspectos viscoelásticos no se recogen directamente (Figura 9 B). Es cierto que COMSOL permite incluir ciertos aspectos viscoelásticos en el flujo de materiales, pero su implementación no es trivial y es necesario ir al código para analizarlos en profundidad.



**Figura 9** Micrografías de flujo de materiales viscoelásticos en un microcanal (A) Adaptado de Galindo-Rosales *et al.* *Materials*, **2019**,12, 2839. [5] Simulación de flujo de un fluido pseudoplástico en un capilar (B).

## 6. Conclusiones

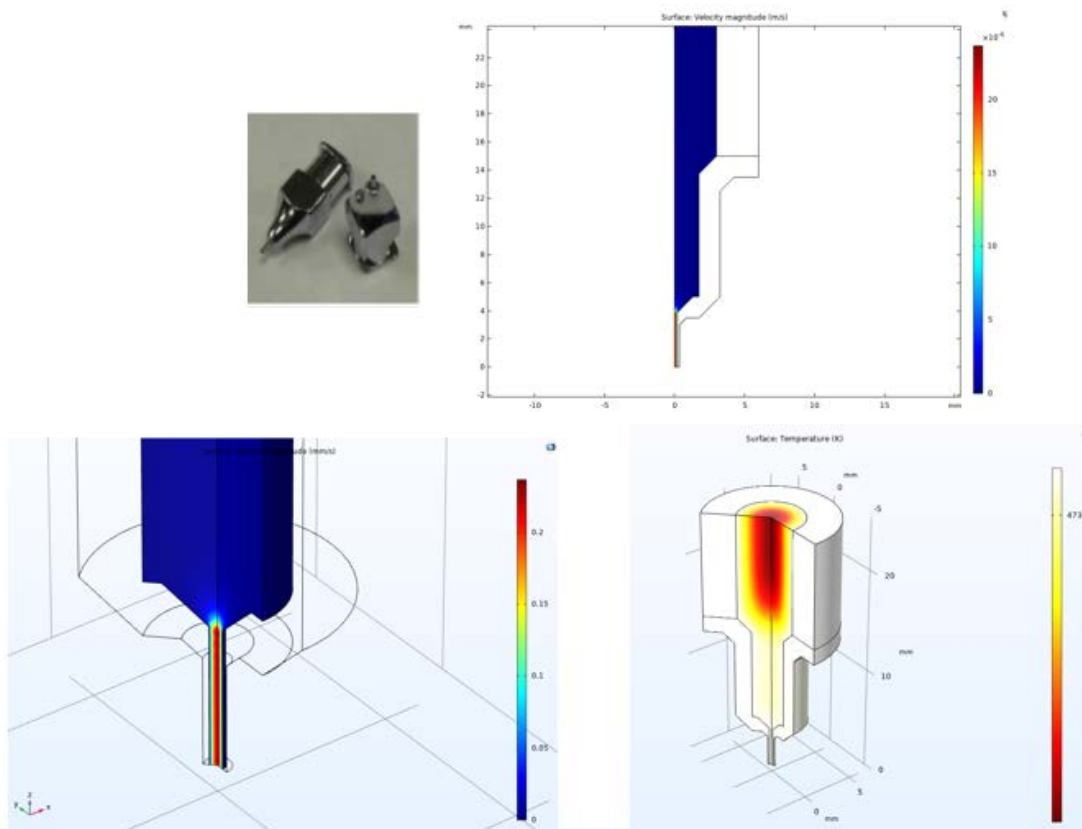
Este trabajo supone la primera aproximación al modelado de flujos de materiales viscoelásticos con aplicaciones en impresión 3D. Como conclusión general del trabajo se puede exponer que la simulación COMSOL puede utilizarse como una herramienta muy útil para predecir el comportamiento de materiales pseudoplásticos en cabezales de impresión, evitando así el ensayo y error. Sin embargo, es necesario validar experimentalmente los resultados de la simulación, ya que el programa realiza una serie de simplificaciones que puede alterar la calidad de los resultados. Uno de los problemas más interesantes es el de la modelización de los efectos

viscoelásticos a la entrada de los capilares, que pueden alterar no solo el perfil de velocidades, sino también el comportamiento general del polímero en impresión 3D.

Además siempre es necesario validar la calidad de los valores de entrada experimentales, y que no se produzcan extrapolaciones, ya que la calidad de la simulación depende directamente de ellos.

## 7. Trabajo futuro: Aplicaciones en impresión 3D de materiales conductores

Uno de los trabajos propuestos a futuro dentro del entorno de COMSOL Multiphysics es la utilización de modelos que predigan el flujo de materiales que contengan nanotubos de carbono. La incorporación de este tipo de cargas puede producir materiales conductores flexibles. Actualmente existe una gran controversia de resultados de conductividad de este tipo de sistemas. Sin embargo, parece claro que el cizallado y el alineamiento de las partículas influye negativamente en la capacidad de estos materiales para conducir la electricidad. El modelo que se plantea es estudiar los efectos de cizallado y capa límite una posible solución para conseguir producir experimentalmente materiales conductores por impresión 3D. El modelo planteado utiliza una geometría más compleja a la presentada en este TFM e incorpora un acoplamiento multifísico de flujo y transferencia de calor (Figura 10).



**Figura 10** Resultados preliminares de modelización de flujo de nanocompuestos a través de una boquilla con intercambio de calor.



## 8. Referencias

- [1] J.D. Ferry, *Viscoelastic Properties of Polymers*, 3rd ed., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, New York, NY, 1980.
- [2] R.B. Bird, R.C. Armstrong, O. Hassager, C.F. Curtiss, *Dynamics of polymeric liquids*, 1st ed., Wiley, New York, NY, 1977.
- [3] W. Gao, Y. Zhang, D. Ramanujan, K. Ramani, Y. Chen, C.B. Williams, C.C.L. Wang, Y.C. Shin, S. Zhang, P.D. Zavattieri, The status, challenges, and future of additive manufacturing in engineering, *Comput. Des.* 69 (2015) 65–89. doi:10.1016/j.cad.2015.04.001.
- [4] E. MacDonald, R. Wicker, Multiprocess 3D printing for increasing component functionality, *Science* (80-. ). 353 (2016). doi:10.1126/science.aaf2093.
- [5] R. Mendes, P. Fanzio, L. Campo-Deaño, F.J. Galindo-Rosales, Microfluidics as a platform for the analysis of 3D printing problems, *Materials* (Basel). 12 (2019) 1–20. doi:10.3390/ma12172839.