SIMULAÇÃO VOF DO ESCOAMENTO NÃO NEWTONIANO NA REGIÃO DE FORMAÇÃO DO FILME EM REVESTIMENTO POR FENDA (SLOT DIE COATING)

Gustavo Antônio Dominoni, Marcus Vinícius Canhoto Alves

INTRODUÇÃO

O revestimento por fenda (slot die coating) é um processo de deposição de filmes líquidos finos sobre substrato em movimento, empregado na fabricação de eletrodos de baterias de íon-lítio e de células solares de perovskita, em que o controle da espessura é requisito crítico de qualidade. Sua adoção industrial decorre do caráter pré-medido: dentro da janela de operação, a espessura é determinada pela razão entre a vazão alimentada e a velocidade do substrato, faixa limitada por defeitos como o aprisionamento de ar e o rompimento do cordão de líquido (Ding; Liu; Harris, 2016). A caracterização experimental dessa região é dificultada pela pequena escala dos meniscos e pelo acesso óptico limitado ao interior do cabeçote, o que faz da fluidodinâmica computacional uma abordagem complementar de análise, sobretudo pelo método de fração de volume (Volume of Fluid, VOF), de Hirt e Nichols (1981), aplicado ao revestimento por fenda em OpenFOAM por Hoffmann et al. (2023).

O objetivo geral é simular o escoamento bifásico de um fluido não newtoniano na região de formação do filme, pelo método VOF, avaliando a sensibilidade da solução à malha e caracterizando a espessura do filme ao longo de uma janela de operação definida pela velocidade do substrato e pela vazão de alimentação. Especificamente, adaptou-se a geometria de Silva et al. (2023) e Siqueira, Thompson e Carvalho (2024), configurou-se o modelo pseudoplástico de Bird–Carreau, avaliou-se a diferença de espessura entre níveis de refino frente ao índice de convergência de malha (GCI) de Celik et al. (2008) e caracterizaram-se os números capilar (Ca) e de Reynolds (Re).

DESENVOLVIMENTO

O domínio bidimensional é composto por três blocos hexaédricos gerados por blockMesh: a fenda de alimentação (5 mm × 1 mm), a região do filme sob o lábio do cabeçote e a câmara aberta a jusante sobre o substrato móvel (45 mm × 2 mm), com condição empty nas faces normais a z. Empregou-se o solver de fração de volume do OpenFOAM 13 (interFoam / incompressibleVoF), em formulação de campo único, resolvendo a continuidade, a quantidade de movimento com força capilar CSF (Continuum Surface Force) e o transporte da fração volumétrica α com termo de compressão interfacial. A advecção de α usou reconstrução geométrica PLIC com limitador vanLeer e limitação pelo algoritmo MULES; o acoplamento pressão–velocidade utilizou o PIMPLE em modo PISO, com Euler implícito e passo fixo de 1×10^{-6} s. Desprezou-se a gravidade e adotou-se tensão superficial de 0,07 N/m.

A fase líquida tem massa específica de 1000 kg/m³ e reologia pseudoplástica de Bird–Carreau (ν_0 = 10 m²/s, ν_∞ = 0,1 m²/s, k = 0,3 s, n = 0,6, valores de referência não calibrados a um fluido real); o ar foi tratado como newtoniano. A campanha teve dois blocos: o A, de sensibilidade de malha, com ponto de operação fixo e dois níveis válidos de refino (2.625 e 6.720 células); o B, na malha de 6.720 células, variou independentemente a velocidade do substrato (0,010 a 0,020 m/s) e a de entrada (0,001 a 0,002 m/s), em sete casos. O pós-processamento foi feito no ParaView (pvpython): interface pelo cruzamento α = 0,5, espessura por sondagem vertical em quatro posições ao longo de x e vazões por integração numérica do perfil de velocidade.

RESULTADOS

A fração volumétrica permaneceu dentro do intervalo fisicamente admissível [0, 1] em todos os casos, com desvios da ordem de 10^{-14} (ruído de ponto flutuante). A limitação (boundedness) foi preservada pela combinação PLIC–vanLeer–MULES. O filme mostrou-se plenamente desenvolvido antes de x = 10 mm, com variação inferior a 1,5 %. Entre as malhas, a diferença de espessura foi de cerca de 22 % (0,3940 mm contra 0,5075 mm), uniforme ao longo de x e, portanto, um deslocamento sistemático da solução. Como o procedimento de Celik et al. (2008) exige ao menos três níveis de malha para estimar a ordem aparente de convergência, o GCI formal não pôde ser calculado.

No estudo paramétrico (Tabela 1), as tendências foram monotônicas e corretas: a espessura decresce com o aumento da velocidade do substrato e cresce com o da vazão nominal. As magnitudes, porém, ficaram cerca de uma ordem de grandeza abaixo da previsão pré-medida ideal: dobrar a velocidade do substrato reduziu a espessura em apenas 5,0 %, e dobrar a vazão a elevou em 8,5 %. O balanço de massa esclarece a discrepância, pois a vazão efetivamente transportada foi de 2,9 a 10,2 vezes a nominal. Os campos mostram translação praticamente rígida a jusante do lábio, com velocidade igual à do substrato, e a razão entre os tempos de convecção e de difusão viscosa (10^4 a 10^7) indica perfil ditado pelo arraste, e não pela vazão imposta na fenda. O regime é viscoso e rastejante (Ca de 14,3 a 28,6; Re de 10^{-5} a 10^{-4}), com h/folga de 0,48 a 0,55, compatível com a região viscosa de Ding, Liu e Harris (2016).

A verificação reológica revelou, contudo, viscosidade resolvida invariável em torno de 0,1 m^2/s entre regiões com cisalhamento de 0,02 s^{-1} e de até 260 s^{-1} (Tabela 2), comportamento próprio de um fluido newtoniano. A inspeção do log e do código-fonte do OpenFOAM confirmou a causa: a classe instanciada não lê o parâmetro ν_0 do subdicionário do modelo, herdando-o das propriedades da fase líquida, onde coincide com ν_∞, o que anula o termo de afinamento por cisalhamento. Limitam o estudo os dois níveis válidos de malha e a viscosidade de referência muito superior à de fluidos reais.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo geral foi alcançado parcialmente: a simulação bifásica foi executada com robustez numérica demonstrada, a sensibilidade à malha foi quantificada e as tendências da janela de operação foram corretamente reproduzidas, ainda que o número de níveis válidos tenha impedido formalizar a incerteza numérica. A caracterização do afinamento por cisalhamento, elemento central do objetivo, não se concretizou: o escoamento resolvido corresponde ao de um fluido newtoniano de alta viscosidade, em razão de erros de configuração no dicionário do modelo reológico, identificados a partir dos próprios dados e do código do solver. O diagnóstico, contudo, aponta os próximos passos: corrigir a declaração dos coeficientes reológicos, repetir o levantamento paramétrico com viscosidade compatível com fluidos reais e executar ao menos três níveis de malha com refino adaptativo.

Palavras-chave: revestimento por fenda; escoamento bifásico; método de fração de volume; reologia não newtoniana; OpenFOAM.

ANEXOS

Tabela 1. *Espessura do filme e balanço de massa nos sete casos da janela de operação.*

Caso	U_{ent} (m/s)	U_{sub} (m/s)	h médio (mm)	Δh vs. base	Q_{med}/Q_{nom}
base	0,0010	0,010	0,5075	—	5,1
$1{,}3U_{sub}$	0,0010	0,013	0,4971	−2,1 %	6,6
$1{,}5U_{sub}$	0,0010	0,015	0,4916	−3,1 %	7,6
$2{,}0U_{sub}$	0,0010	0,020	0,4821	−5,0 %	10,2
1,3×vazão	0,0013	0,010	0,5226	+3,0 %	4,2
1,5×vazão	0,0015	0,010	0,5327	+5,0 %	3,6
2,0×vazão	0,0020	0,010	0,5505	+8,5 %	2,9

Tabela 2. *Viscosidade prevista pelo modelo declarado versus viscosidade efetivamente resolvida.*

Região do domínio	$\dot{\gamma}$ típico (s^{-1})	ν previsto, Bird–Carreau (m^2/s)	ν medido, solver (m^2/s)
Filme (x > 6 mm)	0,02 – 0,33	9,98 – 10,00	0,0997 – 0,1000
Fenda (x < 5 mm)	100 – 260	1,83 – 2,64	≈ 0,1 (sem variação)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CELIK, I. B.; GHIA, U.; ROACHE, P. J.; FREITAS, C. J.; COLEMAN, H.; RAAD, P. E. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. *Journal of Fluids Engineering*, v. 130, n. 7, p. 078001, 2008.

DING, X.; LIU, J.; HARRIS, T. A. L. A review of the operating limits in slot die coating processes. *AIChE Journal*, v. 62, n. 7, p. 2508–2524, 2016.

HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, v. 39, p. 201–225, 1981.

HOFFMANN, A. et al. CFD model of slot die coating for lithium-ion battery electrodes in 2D and 3D with load balanced dynamic mesh refinement enabled with a local-slip boundary condition in OpenFOAM. *Journal of Coatings Technology and Research*, v. 20, n. 1, p. 3–14, 2023.

SILVA, F. O.; SIQUEIRA, I. R.; CARVALHO, M. S.; THOMPSON, R. L. Slot coating flows with a Boussinesq–Scriven viscous interface. *Physics of Fluids*, v. 35, n. 4, p. 042106, 2023.

SIQUEIRA, I. R.; THOMPSON, R. L.; CARVALHO, M. S. Free surface flows with Boussinesq–Scriven viscous interfaces. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE CIÊNCIAS TÉRMICAS E ENGENHARIA, 20., 2024, Foz do Iguaçu. Anais [...]. Foz do Iguaçu: ABCM, 2024.