*Simulação do processo de moldagem
por injeção 2D usando malhas não
estruturadas*

Kémelli Campanharo Estacio

Simulação do processo de moldagem por injeção 2D usando malhas não estruturadas ¹

Kémelli Campanharo Estacio

Orientador: *Prof. Dr. Norberto Mangiavacchi*

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação — ICMC/USP — como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências de Computação e Matemática Computacional.

“VERSÃO REVISADA APÓS A DEFESA”

Data da Defesa:	29/03/2004
Visto do Orientador:	

USP - São Carlos
Maio/2004

¹Trabalho realizado com auxílio financeiro da FAPESP.

Aos meus pais, Cida e Alceu, com muito amor.

Agradecimentos

Tenho muito a agradecer a Deus. Gostaria de agradecer a Ele por uma vida tão repleta de bênçãos, começando pela família que Ele escolheu para mim. Agradeço pelos tantos momentos de felicidade e também pelos não tão felizes assim, que, além de me deixarem mais forte, fizeram-me crescer e perceber, ao meu redor, pessoas muito especiais.

Agradeço a minha mãe Cida e ao meu pai Alceu. Para eles, por mais que eu escreva e tente explicar, jamais conseguirei expressar minha gratidão tal como ela é. Dedicar esse trabalho a eles é o mínimo que eu poderia fazer para as duas pessoas que eu mais admiro e respeito nesse mundo. A eles, que sempre me estimularam a estudar, além de me aconselharem, acompanharem e apoiarem em todas as situações da minha vida, deixo aqui o meu mais sincero obrigado.

Também agradeço aos meus irmãos Fábio e Renan, que junto com meus pais, sempre fizeram com que eu me sentisse parte de uma família muito especial.

Agradeço ao meu orientador Norberto pela excelente orientação e pela oportunidade de podermos trabalhar juntos. Mais que um orientador, ele se tornou para mim um exemplo de profissional e de ser humano.

Agradeço a todos os professores que, direta ou indiretamente, contribuíram para o sucesso deste trabalho.

Agradeço aos meus amigos. Aos amigos de longa data, aos de não tão longa data assim, e também aos amigos recentes. Agradeço pelas boas gargalhadas que demos juntos, pelos abraços, pelas conversas, pelas discussões, pelo aprendizado, ..., enfim, por poder considerá-los amigos verdadeiros.

Agradeço, por fim, a todas pessoas que de alguma maneira se tornaram extremamente especiais para mim e que estarão, para sempre, aqui, dentro do meu coração.

“Eis o princípio da sabedoria: adquiere a sabedoria. Adquiere a inteligência em troca de tudo o que possuis.”

(Provérbios 4:7)

Resumo

Moldagem por injeção é um dos mais importantes processos industriais para produção de produtos plásticos finos. Esse processo é dividido essencialmente em quatro estágios: plastificação, preenchimento, empacotamento e resfriamento. O escoamento de um fluido caracterizado por alta viscosidade em uma cavidade estreita é um problema tipicamente encontrado em processos de moldagem por injeção. Neste caso, o escoamento pode ser descrito por uma formulação conhecida como aproximação de Hele-Shaw. Tal formulação pode ser derivada das equações de conservação tridimensionais usando um número de suposições a respeito do polímero injetado e da geometria da cavidade do molde, juntamente com a integração e o acoplamento das equações da conservação da quantidade de movimento e da continuidade. Essa formulação, referindo às limitações da geometria do molde como sendo canais estreitos e quase sem curvatura, é comumente denominada formulação $2^{1/2}$ D. Neste trabalho, é apresentada uma técnica para a simulação da fase de preenchimento de um processo de moldagem por injeção, usando essa formulação $2^{1/2}$ D, com um método de volumes finitos e malhas não estruturadas. O modelo de Cross modificado com dependência da temperatura de Arrhenius é empregado para descrever a viscosidade do polímero fundido. O campo de distribuição de temperatura é tridimensional e é resolvido usando um esquema semi-Lagrangeano baseado em volumes finitos. As malhas não estruturadas utilizadas são geradas por triangulação de Delaunay e o método numérico implementado usa a estrutura de dados topológica SHE - *Singular Handle Edge*, que é capaz de lidar com condições de contorno e singularidades, aspectos comumente encontrados em simulações numéricas de escoamento de fluidos.

Abstract

Injection molding is one of the most important industrial processes for the manufacturing of thin plastic products. This process can be divided into four stages: plastic melting, filling, packing and cooling phases. The flow of a fluid characterized by high viscosity in a narrow gap is a problem typically found in injection molding processes. In this case, the flow can be described by a formulation known as Hele-Shaw approach. Such formulation can be obtained from the three-dimensional conservation equation using a number of assumptions regarding the injected polymer and the geometry of the mold, together with the integration and the coupling of the momentum and continuity equations. This approach, referring to limitations of the mould geometry to narrow, weakly curved channels, is usually called $2^{1/2}$ D approach, In this work a technique for the simulation of the filling stage of the injection molding process, using this $2^{1/2}$ D approach, with a finite volume method and unstructured meshes, is presented. The modified-Cross model with Arrhenius temperature dependence is employed to describe the viscosity of the melt. The temperature field is 3D and it is solved using a semi-Lagrangian scheme based on the finite volume method. The employed unstructured meshes are generated by Delaunay triangulation and the implemented numerical method uses the topological data structure SHE - *Singular Handle Edge*, capable to deal with boundary conditions and singularities, aspects commonly found in numerical simulation of fluid flow.

Lista de Figuras

1	Esquema de uma injetora tipo parafuso recíproco.	2
2.1	Sistema de coordenadas para um molde de cavidade [Kennedy, 1995]. . . .	22
2.2	Espessura da camada solidificada. Adaptada de Kennedy [Kennedy, 1995].	30
2.3	Condições de contorno para a simulação de moldagem por injeção [Kennedy, 1995].	37
3.1	Relações entre as entidades que constituem a estrutura de dados SHE [Nonato et al., 2002].	46
4.1	Exemplo de malha triangular e os volumes de controle associados a esta malha.	52
4.2	Volume de controle para o método da mediana [Maliska, 1995].	53
4.3	Elemento triangular [Maliska, 1995].	54
4.4	Representação de $\vec{J}$ nas interfaces de integração [Maliska, 1995].	56
4.5	Soluções numérica e exata do problema, e comparação entre elas, obtidas em uma malha de 587 elementos.	59
5.1	Volume de controle V_1 centrado em <i>vert1</i> [Maliska, 1995].	63
5.2	Elemento triangular [Maliska, 1995].	64
8.1	Molde em formato retangular (canal bidimensional).	88
8.2	Malhas com 423 e 2393 elementos, geradas pelo Easymesh [Niceno, 2001].	88
8.3	Comparação entre as soluções numéricas e analítica da simulação da injeção de fluido em um molde em formato retangular. O gráfico ilustra a pressão de injeção em função do tempo de injeção.	90
8.4	Molde em formato de disco, cuja injeção é realizada pelo disco interior, de raio r_1	90
8.5	Malhas com 617 e 4989 elementos, geradas pelo Easymesh [Niceno, 2001] sobre o molde em forma de disco.	91
8.6	Comparação entre as soluções numéricas e analítica da simulação da injeção de fluido em um molde em formato de disco. O gráfico ilustra a pressão de injeção em função do tempo de injeção.	94
8.7	Molde em forma de uma placa retangular com um canal de entrada.	95

8.8	Malha não estruturada gerada sobre a placa com 2995 volumes de controle.	95
8.9	Comparação entre a solução obtida neste trabalho e as soluções apresentadas por Chang e Yang. O gráfico ilustra curva da pressão de injeção em função do tempo de injeção.	96
8.10	Comparação entre as soluções analítica e numéricas, obtidas usando as malhas com 423 e 2393 elementos e o modelo bidimensional para a temperatura.	99
9.1	Molde em forma de placa retangular.	102
9.2	Malha não estruturada gerada sobre o molde em forma de placa retangular com 313 elementos e 180 volumes finitos.	102
9.3	Quatro estágios da solução da equação da pressão para o caso de velocidade de injeção prescrita durante o preenchimento do molde retangular. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$	103
9.4	Vetores velocidade obtidos após o cálculo do campo da pressão para o preenchimento de um molde retangular.	104
9.5	Quatro estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade, ou seja, $z = 0$, durante o preenchimento do molde com velocidade de injeção prescrita.	104
9.6	Quatro estágios da solução da equação da energia bidimensional, para o caso de velocidade de injeção prescrita.	105
9.7	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075 m$, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01 m$ é prescrita e dada por $T_w = 313 K$	105
9.8	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075 m$, respectivamente, ao final da injeção. A temperatura da última camada ($z = 0,01$) é prescrita e dada por $T_w = 313 K$	106
9.9	Perfis da distribuição da temperatura bidimensional (a) e da média entre os perfis da temperatura tridimensional (b) ao longo do molde retangular. .	106
9.10	Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, plotados ao final da injeção.	106
9.11	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente.	107
9.12	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$	108

9.13	Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.	108
9.14	Molde em forma de placa retangular com contração.	109
9.15	Malha não estruturada gerada sobre o molde com 299 volumes finitos e 507 elementos.	109
9.16	Seis estágios da solução da equação da pressão para o caso de velocidade de injeção prescrita em um molde retangular com uma contração. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$	111
9.17	Vetores velocidade do preenchimento de um molde retangular com uma contração.	112
9.18	Seis estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade, ou seja, $z = 0$, para o caso de velocidade de injeção prescrita.	113
9.19	Seis estágios da solução da equação da energia bidimensional para o caso de velocidade de injeção prescrita.	114
9.20	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular com contração, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075 m$, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01$ é prescrita e dada por $T_w = 313 K$	115
9.21	Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, do molde em formato retangular com uma contração.	115
9.22	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente.	116
9.23	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$	117
9.24	Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.	117
9.25	Molde em forma de placa retangular com contração.	118
9.26	Malha não estruturada gerada sobre o molde com 318 elementos e 554 volumes finitos.	118
9.27	Seis estágios da solução da equação da pressão na simulação do preenchimento de um molde retangular com duas regiões de injeção e com velocidade de injeção prescrita. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$	119

9.28 Vetores velocidade do preenchimento de um molde retangular com duas regiões de injeção.	120
9.29 Seis estágios do avanço da superfície livre durante o preenchimento do molde retangular com duas regiões de injeção.	121
9.30 Seis estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade de um molde retangular com duas regiões de injeção.	122
9.31 Seis estágios da solução da equação da energia bidimensional para um molde retangular com duas regiões de injeção.	123
9.32 Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde com duas regiões de injeção, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075 m$, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01 m$ é prescrita e dada por $T_w = 313 K$	124
9.33 Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$	124
9.34 Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente.	125
9.35 Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$	126
9.36 Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.	126
9.37 Molde de geometria complexa.	127
9.38 Malha não estruturada gerada sobre o molde com 563 elementos triangulares e 333 volumes finitos.	127
9.39 Seis estágios da solução da equação da pressão na simulação do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções circulares usando velocidade prescrita. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$	128
9.40 Vetores velocidade do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções circulares.	129
9.41 Seis estágios do avanço da superfície livre durante o preenchimento do molde.	130
9.42 Seis estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade de um molde de geometria complexa com duas inserções.	131
9.43 Seis estágios da solução da equação da energia bidimensional para um molde de geometria complexa com duas inserções.	132

9.44	Quatro estágios da solução da equação da pressão para o caso de pressão injecção prescrita durante o preenchimento do molde retangular. Os valores estão divididos por $p_0 = 22500$	134
9.45	Vetores velocidade obtidos após o cálculo do campo da pressão para o preenchimento de um molde retangular.	135
9.46	Quatro estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade, ou seja, $z = 0$, durante o preenchimento do molde retangular com pressão de injecção prescrita.	135
9.47	Quatro estágios da solução da equação da energia bidimensional, para o caso de pressão de injecção prescrita.	136
9.48	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075\text{ m}$, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01\text{ m}$ é prescrita e dada por $T_w = 313\text{ K}$	136
9.49	Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$	137
9.50	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente, para o caso de pressão de injecção prescrita.	137
9.51	Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$	138
9.52	Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.	138
9.53	Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$ com pressões de injecção dadas por $p_0 = 45000\text{ N/m}^2$ e $p_0 = 90000\text{ N/m}^2$, respectivamente.	140
9.54	Pressão de injecção pelo tempo de preenchimento para os modelos bidimensional e tridimensional da temperatura.	140
A.1	Volume de controle para o método da mediana [Maliska, 1995].	154
A.2	Representação de $\vec{J}$ nas interfaces de integração [Maliska, 1995].	156

Sumário

Introdução	1
1 Equações Governantes para Escoamento de Fluidos	7
1.1 Considerações Iniciais	7
1.1.1 A Derivada Material	7
1.1.2 Teorema da Divergência de Gauss	8
1.1.3 Teorema do Transporte de Reynolds	8
1.2 Conservação de Massa	9
1.3 Conservação da Quantidade de Movimento Linear	10
1.4 Conservação de Energia	11
1.4.1 Relacionando Energia Específica à Temperatura	14
1.4.2 A Equação da Energia em Termos da Temperatura	17
1.5 Considerações Finais	17
2 Equações Governantes para a Fase de Preenchimento	19
2.1 Introdução	19
2.2 Suposições sobre o Material	20
2.2.1 Compressibilidade do Fluido	20
2.2.2 Modelo do Fluido	20
2.2.3 Propriedades Térmicas do Fluido	21
2.2.4 Equações Resultantes	21
2.3 Considerações Geométricas: A Cavidade	22
2.3.1 Análise Dimensional	22
2.3.2 A Equação da Continuidade para a Cavidade	24
2.3.3 A Equação da Quantidade de Movimento para a Cavidade	25
2.3.4 Equação da Energia para a Cavidade	27
2.3.5 Equações Resultantes	29
2.4 Simplificação por Análise Matemática	29
2.4.1 Integração das Equações da Quantidade de Movimento	30
2.4.2 Integração da Equação da Continuidade	34
2.5 Simplificação devido à Simetria	35
2.6 Condições de Contorno	36

2.6.1	Condições de Contorno para a Pressão	37
2.6.2	Condições de Contorno para a Temperatura	38
2.7	O Modelo da Viscosidade	38
2.8	Considerações Finais	39
3	Solução Numérica para a Fase de Preenchimento	41
3.1	Considerações Iniciais	41
3.2	As Equações e as Condições de Contorno	42
3.2.1	O Processo de Solução	43
3.3	A Estrutura de Dados Utilizada	45
3.3.1	A Estrutura de Dados <i>Singular Handle Edge</i>	45
3.4	Considerações Finais	47
4	Solução da Equação da Pressão	49
4.1	Introdução	49
4.2	O Método de Volumes Finitos	50
4.3	Solução por Volumes Finitos da Equação da Pressão	52
4.3.1	Método das Medianas	52
4.3.2	Solução da Equação da Pressão	53
4.3.3	Condições de Contorno	57
4.3.4	Validação do Método de Volumes Finitos	58
4.4	Considerações Finais	60
5	O Avanço da Superfície Livre	61
5.1	Introdução	61
5.2	O Método <i>Volume of Fluid</i>	62
5.2.1	Contribuições dos Vértices	64
5.2.2	O Avanço no Tempo	68
5.3	Considerações Finais	68
6	O Modelo Bidimensional para a Temperatura	69
6.1	Introdução	69
6.2	A Equação para a Velocidade	70
6.3	A Equação para a Temperatura	71
6.3.1	A Equação da Temperatura em Termos de Valores Médios	72
6.4	O Processo de Solução do Modelo Bidimensional	77
6.5	Considerações Finais	77
7	O Modelo Tridimensional para a Temperatura	79
7.1	O Método Semi-Lagrangeano	79
7.1.1	Aproximação dos Termos da Equação da Temperatura	80
7.1.2	Solução da Equação da Temperatura	83
7.2	Considerações Finais	85

8	Validação do Modelo	87
8.1	Validações para os Cálculos dos Campos de Pressão, Velocidade e Posição da Superfície Livre	87
8.1.1	O Escoamento em um Canal	88
8.1.2	O Escoamento em um Disco	90
8.1.3	O Escoamento em uma Placa Retangular com um Canal de Entrada	95
8.1.4	Observações	97
8.2	Validação do Campo da Temperatura	97
8.2.1	O Escoamento em um Canal	97
8.2.2	Observações	99
8.3	Considerações Finais	99
9	Resultados Numéricos	101
9.1	Escoamentos com Velocidade de Injeção Prescrita	101
9.1.1	Preenchimento de uma Placa Retangular	102
9.1.2	Preenchimento de uma Placa com uma Contração	109
9.1.3	Preenchimento de uma Placa com Duas Regiões de Injeção	118
9.1.4	Preenchimento de um Molde de Geometria Complexa	127
9.2	Escoamentos com Pressão de Injeção Prescrita	133
9.2.1	Preenchimento de uma Placa Retangular	133
9.3	Considerações Finais	141
10	Conclusões, Contribuições e Trabalhos Futuros	143
10.1	Síntese do Trabalho Desenvolvido	143
10.2	Considerações sobre os Resultados Obtidos	145
10.3	Contribuição	145
10.4	Trabalhos Futuros	146
A	Discretizações da Equação da Pressão	153
A.1	Cálculo das Contribuições	154
A.1.1	Contribuições do Elemento 123 para o Vértice 1	156
A.1.2	Contribuições do Elemento 123 para o Vértice 2	157
A.1.3	Contribuições do Elemento 123 para o Vértice 3	158
A.1.4	As Contribuições	159
B	Análise Dimensional das Equações Governantes	161
B.1	Valores Característicos	161
B.2	Equações Governantes da Fase de Preenchimento	162
B.2.1	Equação da Continuidade para a Cavidade	162
B.2.2	Equação da Quantidade de Movimento para a Cavidade	163
B.2.3	Equação da Temperatura para a Cavidade	168

Introdução

Escoamentos de fluidos são governados por equações conhecidas como equações de conservação: equação da conservação da quantidade de movimento, equação da conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, e equação da conservação da energia [Anderson Jr., 1995, Fortuna, 2000, Auada, 1997, Panton, 1996].

Devido à complexidade das equações governantes, a construção de soluções analíticas não é uma tarefa trivial, e em diversas situações e aplicações, mesmo a simulação numérica de escoamentos requer a utilização de técnicas numéricas de alta eficiência e recursos computacionais de alto desempenho. Uma dessas aplicações é encontrada em indústrias de produtos fabricados a partir da injeção de polímeros fundidos, em um processo denominado Moldagem por Injeção.

O processo de moldagem por injeção consiste essencialmente no derretimento do material polimérico e na sua injeção em alta pressão para o interior de um molde relativamente frio, no qual endurece e toma a forma final. Embora o processo de moldagem por injeção seja aparentemente simples, há uma complexa interação entre as condições do processo, a geometria do molde e as propriedades do polímero. A combinação desses três fatores determina a qualidade final da peça [Tucker III, 1989].

Polímeros

A origem da palavra *plástico* origina-se do grego *plastikós*, que significa “adequado à moldagem”, e define sua principal característica, que é a flexibilidade [Alcaplas, 2004]. Plásticos são materiais formados pela união de grandes cadeias moleculares chamadas polímeros que, por sua vez, são formadas por moléculas menores chamadas de monômeros.

Os polímeros podem ser naturais ou sintéticos. Os naturais, tais como algodão, madeira, cabelos, chifre de boi, látex entre outros, são comuns em plantas e animais. Os sintéticos, tais como os plásticos, são obtidos pelo homem por meio de reações químicas.

O tamanho e a estrutura da molécula do polímero determinam as propriedades do material plástico, classificando-os, em termoplásticos, termofixos e elastômeros. Os polímeros

termoplásticos, amplamente utilizados em processos de moldagem por injeção, são plásticos que não sofrem alterações na sua estrutura química durante o aquecimento e que após o resfriamento podem ser novamente fundidos. Polipropileno, poliestireno, policloreto de vinila (PVC), polietileno tereftalato (PET), são exemplos desse tipo de polímero. Ao contrário dos termoplásticos, a principal característica dos termofixos é a impossibilidade de serem novamente fundidos após o resfriamento. Alguns exemplos de termofixos são resinas fenólicas, epoxi e poliuretanos. Um dos exemplos mais comuns entre os polímeros elastômeros é o silicone e a principal característica dessa classe de polímeros é a de apresentarem grande capacidade de deformação elástica à temperatura ambiente.

Como esses tipos de polímeros fundem ao serem aquecidos, eles podem ser usados no processo de moldagem por injeção. A principal diferença é a temperatura do molde, que, para materiais termoplásticos pode-se utilizar moldes frios (à temperatura ambiente) e para termofixos, o molde deve ser aquecido adequadamente.

A Moldagem por Injeção

O processo de moldagem por injeção envolve o enchimento rápido sob pressão de uma cavidade de um molde com um polímero, seguido da sua solidificação para formar um produto [Bretas e D'Avila, 2000]. As aplicações de produtos feitos por injeção podem ser vistas em produtos de microeletrônica, pré-formas de garrafas, telefones, carcaças de microcomputadores, pára-choques de automóveis, dentre outros. Enfim, pelo processo de injeção, é possível confeccionar uma imensa variedade de produtos, de várias formas e tamanhos. A Figura 1 mostra um típica máquina de injeção, comumente denominada injetora.

Figura 1: Esquema de uma injetora tipo parafuso recíproco.

O processo de moldagem por injeção envolve quatro estágios principais: plastificação, preenchimento, empacotamento e resfriamento.

No estágio de plastificação, ou fusão, a unidade de alimentação opera como uma extrusora, fundindo e homogeneizando o polímero, ou uma mistura de diversos tipos de polímero. O parafuso em rotação transporta esse material para a sua frente. Para poder acomodar o polímero fundido na frente do parafuso, é necessário que o parafuso se desloque para trás, formando assim, um reservatório. Esse material acumulado não é imediatamente injetado, já que existe uma válvula entre a ponta do reservatório e o molde que se fecha durante o estágio de plastificação.

No estágio de injeção ou preenchimento, o parafuso funciona como um pistão, deslocando-se para frente sem girar, injetando o polímero do reservatório para a cavidade do molde. A pressão necessária para injetar o polímero pode ser muito alta. Essa pressão age na área do molde em contato com o polímero e tenta forçar o molde a abrir. Uma prensa é responsável por manter o molde fechado durante a injeção aplicando uma força contrária no molde.

O molde encontra-se, geralmente, a uma temperatura abaixo da temperatura de solidificação do polímero, quando se usa polímeros termoplásticos. Para diminuir o encolhimento e o enrugamento das peças, uma pressão elevada (pressão de empacotamento) é mantida durante o resfriamento. Esse estágio é chamado empacotamento.

Como a densidade do polímero dentro do molde está aumentando, devido à diminuição do volume provocada pelo resfriamento, é necessário que mais polímero entre na cavidade do molde para que a peça final não tenha variações dimensionais, e sim as dimensões do molde. Após o resfriamento, o molde é aberto e a peça é removida automaticamente, geralmente por pinos de ejeção inseridos no molde.

A Necessidade de Simulação Numérica

As condições sobre as quais uma peça é moldada têm um efeito significativo na qualidade da peça, sendo que qualidade deve incluir: acabamento da superfície, estabilidade dimensional e propriedades mecânicas adequadas.

Novos polímeros e a demanda por peças de melhor qualidade têm forçado engenheiros e pesquisadores a melhorar a eficiência do processo de moldagem por injeção. Atualmente existem algumas ferramentas comerciais de simulação do processo, como o Moldflow [Moldflow, 2004] e o Moldex3d [Moldex3d, 2004]. Apesar dessas ferramentas, as pesquisas por modelos e métodos mais adequados e o desenvolvimento de outras ferramentas de simulação e análise do processo têm sido amplamente difundidos, como uma forma de substituir o processo de tentativa e erro [Chang e Yang, 2001].

Adotando algumas simplificações geométricas e físicas e fazendo uma análise matemática das equações tridimensionais governantes do escoamento de fluidos, uma formulação simplificada do problema para estudar o escoamento do fluido dentro da cavidade de um

molde foi proposta [Vasconcellos, 1999]. Assim, ao invés de se resolver a equação da continuidade juntamente com as três componentes da equação da quantidade de movimento e a equação da energia, resolve-se duas equações: uma bidimensional para a pressão, chamada equação de Hele-Shaw, e uma tridimensional para a energia em termos da temperatura. Essa formulação é comumente denominada uma formulação $2^{1/2}$ D.

Com relação à solução numérica das equações, o uso de malhas cartesianas e malhas estruturadas, em geral, apresenta pouca flexibilidade de refinamento, produzindo, em muitos casos, uma resolução excessiva em algumas regiões do escoamento e em outras regiões mais críticas a resolução é insuficiente para se obter resultados satisfatórios.

A utilização de malhas não estruturadas em aplicações que requerem refinamento em regiões da solução pode resultar em grande redução do custo computacional, desde que as malhas utilizadas sejam adaptadas aos requisitos de precisão do problema. Para implementar uma metodologia desse tipo é necessário utilizar um método numérico consistente e uma estrutura de dados que permita introduzir refinamentos na malha de forma eficiente.

Para a implementação da solução numérica associada ao problema do preenchimento de moldes, o método numérico empregado é o método de volumes finitos e a estrutura de dados escolhida é a estrutura SHE - *Singular Handle Edge* [Nonato et al., 2002, Nonato et al., 2004, Nonato et al., 2003], desenvolvida no Laboratório de Computação de Alto Desempenho pelo Prof. Dr. Luis Gustavo Nonato, do grupo de Mecânica dos Fluidos Computacional do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC-USP).

Este projeto de mestrado teve como finalidade desenvolver uma ferramenta que permita simular a fase de preenchimento do processo de moldagem por injeção, com um fluido não Newtoniano e com a influência da temperatura, usando o método de volumes finitos e malhas não estruturadas.

Organização do Texto

Com o intuito apresentar as estratégias empregadas para a simulação da fase de preenchimento do processo de moldagem por injeção implementadas em uma ferramenta computacional, como parte deste projeto de mestrado, este texto encontra-se organizado como segue:

- Capítulo 1: As equações de conservação: equação da conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia, que regem o comportamento de fluidos em geral, são apresentadas;
- Capítulo 2: As equações governantes para a fase de preenchimento do processo de moldagem por injeção são derivadas das equações de conservação e um modelo para a viscosidade é apresentado;

- Capítulo 3: Neste capítulo são apresentadas as estratégias para a solução numérica das equações descritas no Capítulo 2, juntamente com a estrutura de dados utilizada na obtenção da solução;
- Capítulo 4: O método de volumes finitos e sua aplicação à equação da pressão, bem como uma validação do método implementado são descritos neste capítulo;
- Capítulo 5: O método numérico utilizado para a predição da posição da superfície livre é apresentado;
- Capítulo 6: Uma formulação bidimensional para a equação da energia em termos da temperatura e a estratégia de solução são apresentadas neste capítulo;
- Capítulo 7: Neste capítulo é apresentada a estratégia de solução para o modelo tridimensional da equação da temperatura;
- Capítulo 8: As validações dos modelos implementados são apresentadas;
- Capítulo 9: Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com o código desenvolvido neste trabalho;
- Capítulo 10: Neste capítulo a conclusão deste trabalho de mestrado é apresentada;
- Apêndice A: As discretizações da equação da pressão para os vértices dos triângulos da malha não estruturada são apresentadas;
- Apêndice B: Neste capítulo é apresentada a análise dimensional detalhada das equações governantes do escoamento de fluidos, resultando em equações mais simples para o preenchimento da cavidade de um molde.

Equações Governantes para Escoamento de Fluidos

Neste capítulo as equações que governam o escoamento de um fluido são derivadas. Estas equações são obtidas usando princípios de conservação de massa, quantidade de movimento e energia e são aplicadas ao escoamento de fluidos. Após a derivação das equações governantes, condições de contorno apropriadas para a simulação do processo de moldagem por injeção são descritas [Panton, 1996, Batchelor, 1967, Kennedy, 1995].

1.1 Considerações Iniciais

Na derivação das equações governantes para um fluido, em particular para um polímero fundido, é assumido que o fluido é um contínuo. Isso quer dizer que a estrutura molecular do material é ignorada, e assume-se que é possível definir variáveis físicas como pressão, velocidade e densidade num ponto do fluido. Além disso, os valores dessas variáveis mudam suavemente e então a diferenciação é permitida.

Embora o fato de desconsiderar a estrutura molecular dos fluidos seja uma grande restrição, isso faz com que a hipótese do contínuo permita uma descrição muito próxima do movimento do fluido e permita também a utilização de técnicas matemáticas.

1.1.1 A Derivada Material

Algumas propriedades dos fluidos são funções do tempo e do espaço. Ao analisar o movimento de um fluido, é necessário usar derivadas, com relação ao tempo, dessas propriedades.

Para qualquer função dependente do tempo e do espaço, $f(x, y, z, t)$ tem-se:

$$\frac{df}{dt} = (\vec{v} \cdot \nabla f) + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (1.1)$$

Freqüentemente a notação

$$\frac{D}{Dt} = \vec{v} \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.2)$$

é usada para denotar tal diferenciação.

Chama-se $\frac{Df}{Dt}$ de derivada material de f , que também é conhecida como derivada substancial ou convectiva. Fisicamente, $\frac{Df}{Dt}$ considera tanto o movimento do fluido quanto a variação de f com relação ao tempo.

É possível calcular a derivada material de um escalar, vetor ou tensor, desde que sejam quantidades que variam com o tempo e o espaço.

1.1.2 Teorema da Divergência de Gauss

Este importante teorema relaciona integrais de volume e de superfície [Aris, 1962]. O Teorema da Divergência de Gauss pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\int_V (\nabla \cdot \vec{f}) dV = \int_S (\vec{f} \cdot \vec{n}) dS \quad (1.3)$$

onde V é a região no espaço, S é a fronteira fechada de V , $\vec{n}$ é um vetor unitário normal a S que aponta para fora e $\vec{f}$ é uma função vetorial suave.

Um resultado similar é válido em dimensões menores e pode ser chamado de teorema da divergência no plano:

$$\int_A (\nabla \cdot \vec{f}) dA = \int_S (\vec{f} \cdot \vec{n}) dS \quad (1.4)$$

onde A é a região no plano, S é a fronteira fechada de A , $\vec{n}$ é um vetor unitário normal a S que aponta para fora e $\vec{f}$ é uma função vetorial suave.

1.1.3 Teorema do Transporte de Reynolds

Para derivar as equações governantes, será necessário considerar integrais de qualquer função dependente do tempo e do espaço $f(\vec{x}, t)$ sobre um volume de fluido [Aris, 1962]. Este volume se move com o fluido, de forma que ele sempre consista das mesmas partículas do fluido. Tal volume é chamado de *volume material* e é denotado por $V(t)$.

A expressão

$$F(t) = \int_{V(t)} f(\vec{x}, t) dV \quad (1.5)$$

define uma função de t .

O Teorema do Transporte de Reynolds diz como calcular da derivada de $F(t)$ com relação ao tempo:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} f(\vec{x}, t) dV = \int_{V(t)} \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + (\nabla \cdot f\vec{v}) \right\} dV \quad (1.6)$$

onde $\vec{v}$ é a velocidade de uma partícula de fluido.

Aplicando o teorema da divergência ao lado direito da equação (1.6), obtém-se a seguinte forma equivalente ao teorema do transporte:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} f(\vec{x}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{S(t)} f(\vec{v} \cdot \vec{n}) dS \quad (1.7)$$

onde $S(t)$ é a superfície de $V(t)$ e $\vec{n}$ é o vetor unitário normal a $S(t)$.

Fisicamente, a equação (1.7) expressa que a taxa de variação da integral de $f(\vec{x}, t)$ no volume material móvel $V(t)$ é igual a integral da taxa de variação de $f(\vec{x}, t)$ sobre uma região fixada mais o fluxo resultante de $f(\vec{x}, t)$ ao longo da superfície $S(t)$. Este resultado é válido para qualquer função escalar, vetorial ou tensorial $f(\vec{x}, t)$.

1.2 Conservação de Massa

O princípio da conservação de massa afirma que em um volume material, no qual não há fontes e sumidouros, a massa é constante ou, equivalentemente, a taxa de variação de massa no volume material é nula [Ferreira et al., 1998, Fortuna, 2000].

Seja $V(t)$ o volume material do fluido, então a conservação de massa significa que a massa contida em $V(t)$ não muda. A massa m em $V(t)$ é dada por

$$m = \int_{V(t)} \rho(\vec{x}, t) dV \quad (1.8)$$

onde $\rho(\vec{x}, t)$ é a densidade do fluido no ponto $\vec{x}$ no tempo t .

Como conservação de massa implica que a taxa de variação de m com relação a t é zero, tem-se:

$$0 = \frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho(\vec{x}, t) dV \quad (1.9)$$

Note que a derivada material é usada porque o volume $V(t)$ se move com o fluido.

Aplicando o Teorema do Transporte de Reynolds ao lado direito da equação, obtém-se:

$$0 = \int_{V(t)} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho\vec{v}) \right\} dV \quad (1.10)$$

Como o volume $V(t)$ é arbitrário, o integrando deve ser identicamente zero, isto é,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \quad (1.11)$$

Esta equação é chamada *equação da continuidade* para um escoamento compressível.

Para um escoamento incompressível, a densidade do fluido é constante e então a equação (1.11) se torna:

$$(\nabla \cdot \vec{v}) = 0 \quad (1.12)$$

Algumas vezes é útil expressar a equação da continuidade em termos da derivada material. Expandindo a equação (1.11), tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho(\nabla \cdot \vec{v}) + (\vec{v} \cdot \nabla \rho) = 0 \quad (1.13)$$

Finalmente, usando a definição de derivada material,

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot \vec{v}) \quad (1.14)$$

1.3 Conservação da Quantidade de Movimento Linear

O princípio da conservação da quantidade de movimento linear afirma que a taxa de variação da quantidade de movimento linear em um volume material, $V(t)$, é igual à soma das forças externas agindo sobre $V(t)$, ou seja,

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \vec{v} dV = \sum \vec{F}_{ext} \quad (1.15)$$

As forças externas agindo sobre V incluem as forças de corpo (devido à gravidade) e trações. A força total de corpo, $\vec{F}_c$ é dada por

$$\vec{F}_c = \int_{V(t)} \rho \vec{g} dV \quad (1.16)$$

onde $\vec{g}$ é a força total de corpo por unidade de massa. Geralmente, $\vec{g}$ é devido a efeitos gravitacionais.

A força de tração agindo sobre um elemento dS , da fronteira da superfície de $V(t)$ é dada por $\vec{t} dS$ onde $\vec{t}$ é o vetor tensão. A força total de tração, $\vec{F}_t$, é, portanto, dada por

$$\vec{F}_t = \int_{S(t)} \vec{t} dS = \int_{S(t)} \underline{\sigma} \cdot \vec{n} dS \quad (1.17)$$

onde $S(t)$ é a contorno da superfície de $V(t)$, $\underline{\sigma}$ é o tensor tensão, e $\vec{n}$ é o vetor unitário normal a $S(t)$.

Aplicando o teorema da Divergência, tem-se:

$$\vec{F}_t = \int_{V(t)} [\nabla \cdot \underline{\sigma}] dV \quad (1.18)$$

Das equações (1.16) e (1.18), a força externa total é dada por:

$$\sum \vec{F}_{ext} = \vec{F}_c + \vec{F}_t = \int_{V(t)} \rho \vec{g} dV + \int_{V(t)} [\nabla \cdot \underline{\sigma}] dV \quad (1.19)$$

Substituindo este resultado em (1.15) tem-se

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \vec{v} dV = \int_{V(t)} \rho \vec{g} dV + \int_{V(t)} [\nabla \cdot \underline{\sigma}] dV \quad (1.20)$$

Aplicando o teorema do transporte ao lado esquerdo da equação acima,

$$\int_{V(t)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + [\nabla \cdot \{\rho \vec{v} \vec{v}\}] \right\} dV = \int_{V(t)} \rho \vec{g} dV + \int_{V(t)} [\nabla \cdot \underline{\sigma}] dV \quad (1.21)$$

Como $V(t)$ é arbitrário, teremos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) = \rho \vec{g} + [\nabla \cdot \underline{\sigma}] - [\nabla \cdot \{\rho \vec{v} \vec{v}\}] \quad (1.22)$$

Esta equação é chamada *equação da conservação da quantidade de movimento linear* ou simplesmente *equação da quantidade de movimento*.

Pode-se observar que a equação (1.22) é análoga à segunda lei de Newton, pois, reescrevendo-a utilizando a notação de derivada material obtém-se:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} + \nabla \cdot \underline{\sigma} \quad (1.23)$$

Essa equação estabelece que a massa por unidade de volume (ρ) vezes a aceleração $\left(\frac{D\vec{v}}{Dt}\right)$ da partícula material é igual à força resultante aplicada sobre a partícula do fluido [Ferreira et al., 1998].

1.4 Conservação de Energia

O princípio da conservação da energia é a base da primeira lei da termodinâmica: a variação de energia num volume material é igual à soma dos trabalhos realizados por forças externas sobre o volume menos a perda de calor [Pontes, 1999].

Em outras palavras, a primeira lei da termodinâmica diz que o aumento na energia total de um volume material $V(t)$, com fronteira $S(t)$ é igual ao trabalho feito sobre o volume menos a perda de calor por $S(t)$. A energia total do fluido num volume material

$V(t)$ é dada pela soma das energias interna e cinética [Panton, 1996]. Se $\rho\hat{U}$ é a energia interna por unidade de volume, a energia total é dada por:

$$\int_{V(t)} \rho \left(\frac{1}{2} v^2 + \hat{U} \right) dV = \int_{V(t)} \frac{1}{2} \rho v^2 dV + \int_{V(t)} \rho \hat{U} dV \quad (1.24)$$

A taxa de trabalho feito sobre o volume material por forças externas é devida a forças de corpo e tração.

A taxa de trabalho feita pelas forças do tipo tração é dada por:

$$\int_{S(t)} (\vec{v} \cdot \vec{t}) dS = \int_{S(t)} \vec{v} \cdot [\underline{\sigma} \cdot \vec{n}] dS \quad (1.25)$$

onde a definição de vetor tensão $\vec{t}$ foi utilizada.

Aplicando o teorema da divergência, o lado direito da equação pode ser escrito como uma integral de volume:

$$\begin{aligned} \int_{S(t)} (\vec{v} \cdot \vec{t}) dS &= \int_{S(t)} \vec{v} \cdot [\underline{\sigma} \cdot \vec{n}] dS \\ &= \int_{V(t)} (\nabla \cdot [\vec{v} \cdot \underline{\sigma}]) dV \end{aligned} \quad (1.26)$$

Serão consideradas apenas as forças de corpo devido à gravidade. Denotando a aceleração da gravidade por $\vec{g}$, a taxa de trabalho feito sobre o volume material por forças gravitacionais é dada por:

$$\int_{V(t)} \rho (\vec{g} \cdot \vec{v}) dV \quad (1.27)$$

A taxa total de trabalho feito sobre o volume material devido à tração e à força gravitacional é, portanto, a soma das equações (1.26) e (1.27).

Considerando agora o fluxo de calor ao longo da superfície $S(t)$, seja $\vec{q}$ o fluxo de calor num ponto sobre $S(t)$. A taxa de perda de calor de $S(t)$ é dada por:

$$- \int_{S(t)} (\vec{q} \cdot \vec{n}) dS = - \int_{V(t)} (\nabla \cdot \vec{q}) dV \quad (1.28)$$

onde, novamente, o teorema da divergência foi usado para transformar a integral de superfície numa integral de volume.

Igualando a soma das equações (1.26), (1.27) e (1.28) à taxa de aumento da energia total, e usando a equação (1.24) obtém-se

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \frac{1}{2} \rho v^2 dV}_{(i)} + \underbrace{\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \hat{U} dV}_{(ii)} = \underbrace{\int_{V(t)} (\nabla \cdot [\vec{v} \cdot \underline{\sigma}]) dV}_{(iii)} + \underbrace{\int_{V(t)} \rho (\vec{g} \cdot \vec{v}) dV}_{(iv)} - \underbrace{\int_{V(t)} (\nabla \cdot \vec{q}) dV}_{(v)} \quad (1.29)$$

É útil considerar o significado físico da equação (1.29). Por conveniência, cada termo foi rotulado; o significado físico dos termos são:

- i. é a taxa de variação da energia cinética do volume material;
- ii. é a taxa de variação da energia interna do volume material;
- iii. é a taxa de trabalho feito sobre o fluido dentro do volume material por forças viscosas;
- iv. é a taxa de trabalho feito sobre o fluido dentro do volume material pela força gravitacional;
- v. é a perda de calor do fluido dentro do volume material devido à condução ao longo de $S(t)$.

Pode ser mostrado que a taxa de variação de energia cinética é dada por [Aris, 1962]:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \frac{1}{2} \rho v^2 dV = \int_{V(t)} \rho (\vec{g} \cdot \vec{v}) dV - \int_{V(t)} (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) dV + \int_{V(t)} (\nabla \cdot [\vec{v} \cdot \underline{\sigma}]) dV \quad (1.30)$$

Substituindo esse resultado na equação (1.29) obtém-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \hat{U} dV = \int_{V(t)} (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) dV - \int_{V(t)} (\nabla \cdot \vec{q}) dV \quad (1.31)$$

Aplicando o teorema do transporte ao lado esquerdo da equação,

$$\int_{V(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{U}) + (\nabla \cdot \rho \hat{U} \vec{v}) \right) dV = \int_{V(t)} (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) dV - \int_{V(t)} (\nabla \cdot \vec{q}) dV \quad (1.32)$$

E como a região $V(t)$ é arbitrária, deve-se ter:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{U}) + (\nabla \cdot \rho \hat{U} \vec{v}) = (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) - (\nabla \cdot \vec{q}) \quad (1.33)$$

Expandindo o lado esquerdo da equação e usando a definição de derivada material, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{U}) + (\nabla \cdot \rho \hat{U} \vec{v}) &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{U}) + \rho \hat{U} (\nabla \cdot \vec{v}) + (\vec{v} \cdot \nabla) \rho \hat{U} \\ &= \frac{D}{Dt} (\rho \hat{U}) + \rho \hat{U} (\nabla \cdot \vec{v}) \\ &= \rho \frac{D\hat{U}}{Dt} + \hat{U} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \hat{U} (\nabla \cdot \vec{v}) \\ &= \rho \frac{D\hat{U}}{Dt} \end{aligned} \quad (1.34)$$

onde na última linha foi usada a equação da continuidade, equação (1.14).

Usando a equação (1.34) é possível obter a seguinte forma da equação (1.33):

$$\rho \frac{D\hat{U}}{Dt} = (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) - (\nabla \cdot \vec{q}) \quad (1.35)$$

1.4.1 Relacionando Energia Específica à Temperatura

Em geral, é mais conveniente escrever a equação (1.35) em termos de temperatura T , do que em termos de energia interna $\hat{U}$.

Seja,

$$\hat{H} = \hat{U} + p\hat{V} \quad (1.36)$$

onde p é a pressão e $\hat{V}$ é o volume específico, denotando a entalpia específica. Uma combinação entre a primeira e a segunda lei da termodinâmica pode ser escrita da seguinte maneira [Sears e Salinger, 1975]:

$$\hat{S} = \frac{1}{T}(d\hat{H} - \hat{V}dp) \quad (1.37)$$

onde $\hat{S}$ é a entropia específica.

Supõe-se que $\hat{H}$ é uma função da pressão e da temperatura, ou seja, $\hat{H} = \hat{H}(p, T)$, então:

$$d\hat{H} = \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T dp + \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial T} \right)_p dT \quad (1.38)$$

Substituindo essa expressão em (1.37), tem-se:

$$d\hat{S} = \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T - \hat{V} \right] dp + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial T} \right)_p dT \quad (1.39)$$

Mas $\hat{S}$ também é uma função de p e T , portanto,

$$d\hat{S} = \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial p} \right)_T dp + \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial T} \right)_p dT \quad (1.40)$$

Igualando os coeficiente de (1.39) e (1.40), obtém-se

$$\left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T - \hat{V} \right] \quad (1.41)$$

e

$$\left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial T} \right)_p \quad (1.42)$$

Derivando a equação (1.41) com relação a T :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial T \partial p} &= \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial p} \right)_T \right]_p \\
 &= -\frac{1}{T^2} \left[\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T - \hat{V} \right] + \frac{1}{T} \left(\left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T \right]_p - \left(\frac{\partial \hat{V}}{\partial T} \right)_p \right) \\
 &= -\frac{1}{T^2} \left[\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T - \hat{V} \right] + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial T \partial p} - \left(\frac{\partial \hat{V}}{\partial T} \right)_p \right)
 \end{aligned} \tag{1.43}$$

Agora, derivando (1.42) com relação a p ,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p \partial T} &= \left[\frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial T} \right)_p \right]_T \\
 &= \frac{1}{T} \left[\frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial T} \right)_p \right]_T \\
 &= \frac{1}{T} \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial T \partial p}
 \end{aligned} \tag{1.44}$$

Como

$$\frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial T \partial p} = \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial p \partial T} \tag{1.45}$$

é possível igualar as equações (1.43) e (1.44) e obter,

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_T = \hat{V} - T \left(\frac{\partial \hat{V}}{\partial T} \right)_p \tag{1.46}$$

Substituindo esse resultado na equação (1.38),

$$d\hat{H} = \left(\hat{V} - T \left(\frac{\partial \hat{V}}{\partial T} \right)_p \right) dp + \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \right)_p dT \tag{1.47}$$

Esta equação pode ser escrita numa forma mais simplificada, notando que o calor específico de um material sob pressão constante c_p e o coeficiente de expansão térmica volumétrica β estão relacionados às derivadas parciais, como a seguir:

$$c_p = \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial T} \right)_p, \quad \beta = \frac{1}{\hat{V}} \left(\frac{\partial \hat{V}}{\partial T} \right)_p \tag{1.48}$$

Portanto, a equação (1.47) pode ser escrita como:

$$d\hat{H} = (1 - \beta T)\hat{V}dp + c_p dT \quad (1.49)$$

Usando a equação (1.36) encontra-se:

$$d\hat{H} = d\hat{U} + \hat{V}dp + pd\hat{V} \quad (1.50)$$

Substituindo $d\hat{H}$ e rearranjando,

$$\begin{aligned} d\hat{U} &= (1 - \beta T)\hat{V}dp + c_p dT - pd\hat{V} - \hat{V}dp \\ &= c_p dT - \beta T\hat{V}dp - pd\hat{V} \end{aligned} \quad (1.51)$$

A derivada da energia específica com relação ao tempo é, portanto, dada por:

$$\frac{d\hat{U}}{dt} = c_p \frac{dT}{dt} - \beta T\hat{V} \frac{dp}{dt} - p \frac{d\hat{V}}{dt} \quad (1.52)$$

E em termos da derivada material

$$\frac{D\hat{U}}{Dt} = c_p \frac{DT}{Dt} - \beta T\hat{V} \frac{Dp}{Dt} - p \frac{D\hat{V}}{Dt} \quad (1.53)$$

Agora considere o termo $D\hat{V}/DT$, como $\hat{V} = 1/\rho$, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{D\hat{V}}{Dt} &= \frac{\partial \hat{V}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \hat{V} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) + \vec{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\rho} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \rho} + \left(\frac{1}{\rho} \right) \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{1}{\rho} \right) \nabla \rho \right] \\ &= -\frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \rho \right) \\ &= -\frac{1}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt} \\ &= -\frac{1}{\rho^2} \nabla \cdot \vec{v} \end{aligned} \quad (1.54)$$

onde, na última equação foi usada a equação (1.14).

Substituindo a equação acima em (1.53) e multiplicando pela densidade,

$$\rho \frac{D\hat{U}}{Dt} = \rho c_p \frac{DT}{Dt} - \beta T \frac{Dp}{Dt} - p \nabla \cdot \vec{v} \quad (1.55)$$

Esta expressão relaciona a taxa de variação de energia específica à taxa de variação da temperatura.

1.4.2 A Equação da Energia em Termos da Temperatura

A equação (1.55) pode ser usada para expressar a equação de energia em termos da temperatura. A equação da energia, (1.35), é dada por:

$$\rho \frac{D\hat{U}}{Dt} = (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) - (\nabla \cdot \vec{q}) \quad (1.56)$$

Substituindo essa equação em (1.55) e expandindo as derivadas materiais,

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla p \right) + p \nabla \cdot \vec{v} + (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) - (\nabla \cdot \vec{q}) \quad (1.57)$$

Finalmente, relaciona-se o vetor fluxo de calor $\vec{q}$ à temperatura. Isso pode ser feito usando a lei de Fourier da condução de calor [Bird et al., 2002], que diz que

$$\vec{q} = -k \nabla T \quad (1.58)$$

onde k é a condutividade térmica.

Substituindo essa equação em (1.57), obtém-se a forma final da equação de energia:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla p \right) + p \nabla \cdot \vec{v} + (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) + \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1.59)$$

1.5 Considerações Finais

Neste capítulo foram apresentados alguns resultados e definições importantes utilizados na derivação das equações governantes do escoamento de fluidos, como o conceito de derivada material e os teoremas de Gauss e de Reynolds.

As três equações de conservação, conhecidas como equação da conservação de massa, ou continuidade, equação da conservação da quantidade de movimento e equação da conservação de energia foram deduzidas a partir de princípios físicos.

No próximo capítulo as equações governantes são simplificadas para o caso específico da fase de preenchimento com o auxílio de suposições sobre o tipo de fluido injetado e de análise matemática, e são apresentados também as condições de contorno para as equações e o modelo adotado para a viscosidade do fluido.

Equações Governantes para a Fase de Preenchimento

Neste capítulo, as equações que governam o escoamento do fundido durante a fase de preenchimento são derivadas. Essas equações são obtidas pela simplificação e adequação das equações que governam o comportamento de fluidos em movimento baseadas em suposições sobre o modelo do fluido injetado, em considerações geométricas sobre a cavidade do molde, na análise matemática das equações e devido à simetria do escoamento.

2.1 Introdução

As equações que governam o comportamento de um fluido em movimento são:

Equação da Continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1)$$

Equação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) = \rho \vec{g} + [\nabla \cdot \underline{\sigma}] - [\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v}] \quad (2.2)$$

Equação da Energia

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla p \right) + p \nabla \cdot \vec{v} + (\underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\}) + \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.3)$$

Essas equações estão na forma geral e são válidas para qualquer material. Com os computadores e a tecnologia de teste de material atuais, resolvê-las em domínios complicados como injeção em moldes com cavidades ainda é uma tarefa muito difícil.

Nas últimas duas décadas, numerosos pesquisadores têm tentado analisar o processo de moldagem por injeção por meio de simplificações distintas e aproximações limitadas pelos recursos computacionais disponíveis [Vasconcellos, 1999, Chang e Yang, 2001]. Assim, para construir soluções no tempo utilizando dados materiais mais razoáveis, recorre-se a algumas suposições com o objetivo de promover simplificações nas equações governantes.

2.2 Suposições sobre o Material

2.2.1 Compressibilidade do Fluido

Suposição: Durante a fase de preenchimento, o fundido é considerado incompressível.

Essa suposição significa que a densidade é constante e, portanto, da equação (2.2), tem-se:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.4)$$

A equação (2.4) permite alguma simplificação na equação da quantidade de movimento. Considere o termo envolvendo o produto $\vec{v}\vec{v}$ na equação (2.2). Usando a identidade

$$(\nabla \cdot \vec{a}\vec{s}) = \vec{a} \cdot (\nabla \vec{s}) + \vec{s}(\nabla \cdot \vec{a})$$

tem-se:

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot \rho \vec{v}\vec{v}] &= \rho [\nabla \cdot \vec{v}\vec{v}] \\ &= \rho [\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}] + \rho \vec{v}(\nabla \cdot \vec{v}) \\ &= \rho [\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}] \end{aligned} \quad (2.5)$$

2.2.2 Modelo do Fluido

Suposição: O fundido pode ser representado como um fluido Newtoniano Generalizado.

Esta suposição implica que os efeitos viscoelásticos serão ignorados, ou seja, que a viscosidade η depende da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$, ou seja $\eta = \eta(\dot{\gamma})$, e, portanto, o tensor extra tensão $\underline{\tau}$ pode ser escrito como

$$\underline{\tau} = \eta(\dot{\gamma})\dot{\underline{\gamma}} \quad (2.6)$$

e o tensor tensão total como:

$$\begin{aligned} \underline{\sigma} &= -p\underline{I} + \underline{\tau} \\ &= -p\underline{I} + \eta(\dot{\gamma})\dot{\underline{\gamma}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde $\underline{I}$ é o tensor identidade e $\dot{\underline{\gamma}}$ é o tensor taxa de deformação.

Essa suposição altera as expressões $(\nabla \cdot \underline{\sigma})$ e $\underline{\sigma} : (\nabla \vec{v})$ nas equações (2.2) e (2.3), respectivamente. Desta forma, tem-se:

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot \underline{\sigma}] &= [\nabla \cdot (-p\underline{I} + \eta\dot{\underline{\gamma}})] \\ &= -\nabla p + [\nabla \cdot \eta\dot{\underline{\gamma}}] \end{aligned} \quad (2.8)$$

e

$$\begin{aligned} \underline{\sigma} : \{\nabla \vec{v}\} &= (-p\underline{I} + \underline{\tau}) : \nabla \vec{v} \\ &= \{(-p\underline{I} + \eta\dot{\underline{\gamma}}) : \nabla \vec{v}\} \\ &= (-p\underline{I} : \nabla \vec{v}) + (\eta\dot{\underline{\gamma}} : \nabla \vec{v}) \\ &= -p(\nabla \cdot \vec{v}) + \{\eta(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^t) : \nabla \vec{v}\} \\ &= \eta\{(\nabla \vec{v} : \nabla \vec{v}) + ((\nabla \vec{v})^t : \nabla \vec{v})\} \\ &\quad \text{Como o fluido é incompressível} \\ &= \frac{1}{2}\eta\{\nabla \vec{v} : \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^t : \nabla \vec{v} + \nabla \vec{v} : (\nabla \vec{v})^t + (\nabla \vec{v})^t : (\nabla \vec{v})^t\} \\ &= \frac{1}{2}\eta\{\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^t\} : \{\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^t\} \\ &= \frac{1}{2}\eta(\dot{\underline{\gamma}} : \dot{\underline{\gamma}}) \\ &= \eta\dot{\gamma}^2 \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ é definida pela equação:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2}\dot{\underline{\gamma}} : \dot{\underline{\gamma}}} \quad (2.10)$$

2.2.3 Propriedades Térmicas do Fluido

Suposição: A condutividade térmica do material é assumida constante.

Apesar do fato da condutividade térmica, k , depender da temperatura, essa suposição é imposta por causa da dificuldade na obtenção de dados materiais.

Usando a suposição, o termo envolvendo k na equação (2.3) pode ser escrito como:

$$\nabla \cdot (k\nabla T) = k\nabla^2 T \quad (2.11)$$

2.2.4 Equações Resultantes

Impondo as suposições anteriores, as seguintes equações são obtidas:

Equação da Continuidade:

$$(\nabla \cdot \vec{v}) = 0 \quad (2.12)$$

Equação da Quantidade de Movimento:

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \rho \vec{g} - \nabla p + [\nabla \cdot \eta \dot{\gamma}] - \rho [\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}] \quad (2.13)$$

Equação da Energia em termos da Temperatura:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla p \right) + \eta \dot{\gamma}^2 + k \nabla^2 T \quad (2.14)$$

2.3 Considerações Geométricas: A Cavidade

A solução das equações (2.12) a (2.14) é ainda um problema formidável. Felizmente, uma maior simplificação é possível devido à geometria dos moldes de injeção.

2.3.1 Análise Dimensional

Em geral, peças moldadas por injeção são finas. O escoamento na cavidade é, portanto, similar ao escoamento em um canal bidimensional estreito. A Figura 2.1 mostra a geometria de uma cavidade simples. Por conveniência, um sistema de coordenadas cartesianas é adotado para descrever a cavidade. Os eixos são organizados de tal forma que, em qualquer ponto na cavidade o plano $x - y$ coincide com o plano médio da parte a ser moldada, e os pontos do eixo- z se encontram na direção da espessura.

Figura 2.1: Sistema de coordenadas para um molde de cavidade [Kennedy, 1995].

Para simplificar as equações emprega-se uma técnica chamada análise dimensional. Basicamente, a idéia é obter estimativas da ordem de magnitude de cada termo nas equações governantes. Termos de ordem suficientemente baixa têm pequena influência e são, portanto, desconsiderados. Desta forma, a idéia de valores característicos é essencial ao método. Estes são valores típicos das variáveis, tais como comprimento da cavi-

dade, espessura da cavidade, velocidade do fundido e viscosidade. Valores exatos não são necessários - estimativas da ordem de magnitude são suficientes.

Os valores característicos são¹:

- Espessura da cavidade, $H = 10^{-3} \text{ m}$
- Comprimento da cavidade, $L = H/\delta \text{ m}$ onde $\delta = H/L \ll 1$
- Velocidade do fundido, $V = 10^{-1} \text{ m/s}$
- Pressão na cavidade, $p_0 = 10^7 \text{ N/m}^2$
- Viscosidade do fundido, $\eta_0 = 10^4 \text{ Ns/m}^2$
- Coeficiente de expansão térmica, $\beta = 10^{-3} \text{ 1/K}$
- Condutividade térmica do fundido, $k = 10^{-1} \text{ W/mK}$
- Densidade do fundido, $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$
- Diferença de temperatura entre o molde e o fundido, $T_0 = 10^2 \text{ K}$

Usando esses valores típicos, as variáveis relevantes nas equações podem ser definidas em termos de variáveis adimensionais, como segue:

- Coordenada-x: $x = Lx^* = H/\delta x^*$
- Coordenada-y: $y = Ly^* = H/\delta y^*$
- Coordenada-z: $z = Hz^*$
- Tempo: $t = [L/V]t^* = [H/\delta V]t^*$
- Componente x da velocidade: $v_x = [L/T]v_x^* = Vv_x^*$
- Componente y da velocidade: $v_y = [L/T]v_y^* = Vv_y^*$
- Componente z da velocidade: $v_z = [H/T]v_z^* = \delta Vv_z^*$
- Pressão: $p = p_0p^*$
- Viscosidade: $\eta = \eta_0\eta^*$
- Diferença de temperatura: $\Delta T = T_0\Delta T^*$

¹Boshouwers, G. e van der Werf, J. apud [Kennedy, 1995], p. 63

onde as quantidades marcadas com o asterisco (*) são adimensionais e de ordem um.

A aproximação envolverá, portanto, a substituição de variáveis adimensionais em cada equação, para, então, estimar a ordem de magnitude de cada termo. Por exemplo,

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{V}{L} \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} \quad (2.15)$$

Como as variáveis adimensionais são de ordem um, a ordem de magnitude de $\frac{\partial v_x}{\partial x}$ é igual à ordem de magnitude de $\frac{V}{L}$. Por simplicidade, escreve-se:

$$O \left[\frac{\partial v_x}{\partial x} \right] = O \left[\frac{V}{L} \right] \quad (2.16)$$

onde $O[\cdot]$ é lido como *ordem de magnitude de* $[\cdot]$.

Usando os valores característicos dados por V e L tem-se:

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial v_x}{\partial x} \right] &= O \left[\frac{V}{L} \right] \\ &= O \left[\frac{\delta V}{H} \right] \\ &= O \left[\frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] \\ &= O [10^2 \delta] \end{aligned} \quad (2.17)$$

2.3.2 A Equação da Continuidade para a Cavidade

A equação da continuidade (2.12) para um fluido não-Newtoniano generalizado incompressível pode ser escrita em coordenadas cartesianas, como segue:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.18)$$

Usando os valores característicos e as variáveis não-adimensionais dados na seção anterior, encontramos todos os termos tendo ordem de magnitude similar:

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial v_x}{\partial x} \right] &= O \left[\frac{V}{L} \right] \\ &= O \left[\frac{\delta V}{H} \right] \\ &= O \left[\frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] \\ &= O [10^2 \delta] \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$O \left[\frac{\partial v_y}{\partial y} \right] = O [10^2 \delta] \quad (2.20)$$

$$O \left[\frac{\partial v_z}{\partial z} \right] = O [10^2 \delta] \quad (2.21)$$

Como todos os termos na equação (2.18) têm magnitudes similares, não é possível simplificar mais a equação.

2.3.3 A Equação da Quantidade de Movimento para a Cavidade

A equação da quantidade de movimento (2.13) é uma equação vetorial. Quando expressa em coordenadas cartesianas, resulta nas três seguintes equações:

- componente-x da quantidade de movimento

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_x}{\partial t}}_{(i)} &= \underbrace{\rho f_{(x)}}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}_{(iii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{(iv)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \right)}_{(v)} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right)}_{(vi)} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{(vii)} \end{aligned} \quad (2.22)$$

- componente-y da quantidade de movimento

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_y}{\partial t}}_{(i)} &= \underbrace{\rho f_y}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial y}}_{(iii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \right)}_{(iv)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(2\eta \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)}_{(v)} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \right)}_{(vi)} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{(vii)} \end{aligned} \quad (2.23)$$

- componente-z da quantidade de movimento

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_{(i)} &= \underbrace{\rho f_z}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial z}}_{(iii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right)}_{(iv)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \right)}_{(v)} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{(vi)} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{(vii)} \end{aligned} \quad (2.24)$$

Nas equações acima é válido notar o significado físico dos termos. O termo (i) é a taxa de variação da quantidade de movimento, o termo (ii) representa forças decorrentes da

gravidade, o termo (iii) é o gradiente de pressão, os termos (iv) a (vi) representam forças viscosas e o termo (vii), forças inerciais.

Para determinar a ordem de magnitude dos termos das equações (2.22) a (2.24) e então analisar a relevância de cada um, expande-se ainda mais as equações e se procede de maneira análoga ao caso da equação da continuidade. Detalhes da análise dimensional podem ser encontrados no Apêndice B.

A seguir são apresentadas as equações (2.22) a (2.24) expandidas, juntamente com a ordem de magnitude de cada termo:

Componente- x

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_x}{\partial t}}_{10^4 \delta} &= \underbrace{\rho f_x}_{10^4} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}_{10^{10} \delta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{10^9} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_x v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{10^4 \delta} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Componente- y

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_y}{\partial t}}_{10^4 \delta} &= \underbrace{\rho f_y}_{10^4} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial y}}_{10^{10} \delta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(2\eta \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{10^9} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{10^4 \delta} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Componente- z

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_{10^4 \delta} &= \underbrace{\rho f_z}_{10^4} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial z}}_{10^{10} \delta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{10^9 \delta^2} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{10^9 \delta^2} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{10^4 \delta} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Tendo sido calculadas as ordens de magnitude dos termos das equações (2.22) a (2.24), elas podem ser tabeladas de modo a facilitar a análise.

Como a maioria das peças moldadas por injeção são constituídas por paredes finas, espera-se δ muito menor do que um. Tipicamente, δ varia no intervalo $0.001 < \delta < 0.1$. Conhecendo os prováveis valores de δ , os termos mais dominantes são o gradiente de

Número do termo	Descrição (força /unidade de massa)	Magnitude da componente x	Magnitude da componente y	Magnitude da componente z
(i)	Componente da força total	$10^2\delta$	$10^2\delta$	$10^2\delta^2$
(ii)	Força gravitacional	10^4	10^4	10^4
(iii)	Gradiente de pressão	$10^{10}\delta$ (*)	$10^{10}\delta$ (*)	10^{10} (*)
(iv)	Força viscosa	$10^9\delta^2$	$10^9\delta^2$	$10^9\delta$
(v)	Força viscosa	$10^9\delta^2$	$10^9\delta^2$	$10^9\delta^3$
(vi)	Força viscosa	$10^9\delta^2$	$10^9\delta^2$	$10^9\delta$
(vii)	Força viscosa	10^9 (*)	10^9 (*)	$10^9\delta^3$
(viii)	Força viscosa	$10^9\delta^2$	$10^9\delta^2$	$10^9\delta$
(ix)	Força inercial	$10^4\delta$	$10^4\delta$	$10^4\delta^2$
(x)	Força inercial	$10^4\delta$	$10^4\delta$	$10^4\delta^2$
(xi)	Força inercial	$10^4\delta$	$10^4\delta$	$10^4\delta^2$

Tabela 2.1: Comparação entre as ordens de magnitude dos termos das componentes da equação da quantidade de movimento.

pressão e as forças viscosas resultantes das derivadas na direção z . Estes termos estão marcados com asteriscos (*) na tabela. Em particular, para $\delta = 0.1$, forças gravitacionais e inerciais são, respectivamente, cinco e seis ordens de magnitude menores dos que os termos de ordens mais altas. Desta forma, ignora-se todos os termos menores ou iguais a $10^9\delta$, e então, as equações para as componentes x , y e z da equação quantidade de movimento se tornam, respectivamente:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \\
 \frac{\partial p}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \\
 \frac{\partial p}{\partial z} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

2.3.4 Equação da Energia para a Cavidade

A equação da energia (2.14) pode ser escrita em coordenadas cartesianas como segue:

$$\underbrace{\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_{(i)} = \underbrace{\beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + v_x \frac{\partial p}{\partial x} + v_y \frac{\partial p}{\partial y} + v_z \frac{\partial p}{\partial z} \right)}_{(ii)} + \underbrace{\eta \dot{\gamma}^2}_{(iii)} + k \underbrace{\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)}_{(iv)} \tag{2.29}$$

O termo (i) representa a taxa total de variação de energia mais a energia devido à convecção nas direções x , y e z . O termo (ii) é a taxa total de variação de energia devido à compressão e/ou à expansão do fundido. O termo (iii) é a taxa de geração de energia devido à dissipação de viscosidade ou aquecimento viscoso e o termo (iv) representa a taxa de variação de energia devido à condução nas direções x , y e z .

Como procedido anteriormente, a ordem de magnitude de cada termo será estimada usando os valores característicos da Seção (2.3.1). Detalhes dos cálculos podem ser encontrados no Apêndice B.

Expandindo a equação escrevendo sob cada termo a sua ordem de magnitude, obtém-se

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{(10^{10}\delta)} + \underbrace{\rho c_p v_x \frac{\partial T}{\partial x}}_{(10^{10}\delta)} + \underbrace{\rho c_p v_y \frac{\partial T}{\partial y}}_{(10^{10}\delta)} + \underbrace{\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z}}_{(10^{10}\delta)} \\
&= \underbrace{\beta T \frac{\partial p}{\partial t}}_{(10^8\delta)} + \underbrace{\beta T v_x \frac{\partial p}{\partial x}}_{(10^8\delta)} + \underbrace{\beta T v_y \frac{\partial p}{\partial y}}_{(10^8\delta)} + \underbrace{\beta T v_z \frac{\partial p}{\partial z}}_{(10^8\delta)} \\
&+ \underbrace{\eta \dot{\gamma}^2}_{(10^8)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}}_{(10^7\delta^2)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}}_{(10^7\delta^2)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}}_{(10^7)}
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Pode-se, então, observar que os termos envolvendo variação de energia devido à compressão e/ou à expansão e à condução nas direções x e y são de ordem de magnitude significativamente menor. Desta forma, estes termos são ignorados e obtém-se a seguinte equação de energia:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \tag{2.31}$$

onde a taxa de cisalhamento é definida por

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\left(\frac{\partial v_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} \right)^2} \tag{2.32}$$

A equação (2.31) é mais simples que a equação original. Entretanto, é possível simplificá-la ainda mais ignorando o termo convectivo na direção- z , $v_z \frac{\partial T}{\partial z}$. A motivação para ignorar o termo convectivo é que as velocidades nas direções x e y podem ser obtidas de uma forma simples pelas equações da quantidade de movimento. Negligenciar o termo implica que não há convecção na direção- z .

A rigor, na vizinhança da superfície livre, ocorre o efeito chamado frente de fluxo (*fountain flow*), também conhecido como escoamento em chafariz, que faz o fluido dividir-se e, então, ocorrer convecção na direção perpendicular às paredes da cavidade, ou seja, a componente da velocidade na direção- z torna-se não-desprezível. Contudo, o efeito frente

de fluxo é importante numa região de dimensão da ordem da espessura da cavidade, ou seja, muito pequena, e comumente é desprezado [Kennedy, 1995].

Suposição: O calor de convecção transferido na direção- z pode ser ignorado.

A equação de energia fica:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.33)$$

2.3.5 Equações Resultantes

Usando as suposições sobre o comportamento do material e a análise dimensional para estimar a magnitude dos termos em cada equação, as equações (2.12) a (2.14) se reduzem a:

Equação da Continuidade

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.34)$$

Equações da Quantidade de Movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial p}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (2.35)$$

Equação da Energia

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.36)$$

2.4 Simplificação por Análise Matemática

Até agora, foram usadas as propriedades do material e a geometria da cavidade para simplificar as equações para a fase de preenchimento.

É possível simplificá-las ainda mais, por meio da integração das equações da continuidade e da quantidade de movimento.

2.4.1 Integração das Equações da Quantidade de Movimento

Das últimas equações da quantidade de movimento (2.35) tem-se que a pressão é uma função somente de x e de y . Por essa razão, é conveniente integrar as equações da quantidade de movimento ao longo da espessura com o propósito de obter expressões para as velocidades v_x e v_y .

Contudo, é necessário observar que, em moldagem por injeção, o material está em ambos estados físicos: sólido e líquido. O fundido é imprensado entre uma camada de material solidificado o qual adere às paredes da cavidade. As equações governantes foram derivadas para fluidos e é inadequado aplicá-las à camada solidificada.

Usa-se, portanto, o conceito de temperatura *no-flow* para distinguir entre as fases sólida e líquida. A temperatura *no-flow* do material é definida como a temperatura na qual o material pode ser considerado sólido.

Suposição: Durante a fase de preenchimento, existe uma região chamada camada solidificada (*frozen layer*), na qual as velocidades v_x , v_y e v_z são nulas. Além disso, a camada solidificada é definida como sendo o material que está abaixo da temperatura *no-flow*.

A Figura 2.2 define a notação que será utilizada: a linha central está em $z = 0$ e a localização da interface entre a camada solidificada e o fundido no ponto (x, y) está em $z = h^+(x, y)$ e $z = h^-(x, y)$.

Figura 2.2: Espessura da camada solidificada. Adaptada de Kennedy [Kennedy, 1995].

A espessura da cavidade é $2H$ e a espessura da região de fundido em qualquer ponto (x, y) é $h^+ - h^-$. Note que nenhuma suposição sobre a simetria da camada solidificada foi feita até agora; portanto, é possível que $|h^+| \neq |h^-|$.

Lembrando que as equações da quantidade de movimento são:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (2.39)$$

Para começar, integra-se a equação (2.37) com relação a z de h^- a z e obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_{h^-}^z \frac{\partial p}{\partial x} dz' &= \int_{h^-}^z \frac{\partial}{\partial z'} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z'} \right) dz' \\ \frac{\partial p}{\partial x} z &= \eta \frac{\partial v_x}{\partial z} - \left[\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right]_{z=h^-} + \left[\frac{\partial p}{\partial x} z \right]_{z=h^-} \\ &= \eta \frac{\partial v_x}{\partial z} - A(x, y) \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde $A(x, y) = [\eta \partial v_x / \partial z]_{z=h^-} - [z \partial p / \partial x]_{z=h^-}$ é constante para (x, y) dados.

Dividindo ambos os lados da equação (2.40) por η e integrando de h^- a z e obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' &= \int_{h^-}^z \frac{\partial v_x}{\partial z'} dz' - A(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \\ &= v_x(z) - v_x(h^-) - A(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Na interface formada pela camada solidificada e o fundido, onde $z = h^-$ ou $z = h^+$, tem-se $v_x = 0$. Esta condição é chamada não-escorregamento (*no-slip*). Aplicando a condição de não-escorregamento na equação (2.41) e rearranjando-a, obtém-se:

$$v_x(z) = \frac{\partial p}{\partial x} \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' + A(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \quad (2.42)$$

Utilizando as operações acima na equação (2.38), é obtida uma expressão semelhante para a componente y da velocidade:

$$v_y(z) = \frac{\partial p}{\partial y} \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' + B(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \quad (2.43)$$

onde $B(x, y) = [\eta \partial v_y / \partial z]_{z=h^-} - [z \partial p / \partial y]_{z=h^-}$ é constante para (x, y) dados.

Aplicando a condição de não-escorregamento na equação (2.42) tem-se:

$$0 = \frac{\partial p}{\partial x} \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' + A(x, y) \int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta} \quad (2.44)$$

e então

$$\begin{aligned} A(x, y) &= -\frac{\partial p}{\partial x} \left\{ \frac{\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz'}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}} \right\} \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x} C(x, y) \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde definimos a constante

$$C(x, y) = \frac{\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz'}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}} \quad (2.46)$$

Do mesmo modo, usando a equação (2.43), obtém-se:

$$\begin{aligned} B(x, y) &= -\frac{\partial p}{\partial y} \left\{ \frac{\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz'}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}} \right\} \\ &= -\frac{\partial p}{\partial y} C(x, y) \end{aligned} \quad (2.47)$$

Usando esses resultados, as equações (2.42) e (2.43) podem ser escritas, respectivamente, como:

$$v_x = \frac{\partial p}{\partial x} \left\{ \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' - C(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \right\} \quad (2.48)$$

$$v_y = \frac{\partial p}{\partial y} \left\{ \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' - C(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \right\} \quad (2.49)$$

A partir das equações (2.48) e (2.49) foi estabelecida uma das condições de contorno para a pressão. Conforme mencionado anteriormente, nas faces laterais e inserções do molde impõe-se que a velocidade na direção $\vec{n}$, normal a essas faces e restrita ao plano xy , é nula, ou seja, $\frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0$.

Agora vamos definir as velocidades médias $\bar{v}_x$ e $\bar{v}_y$ como segue:

$$\bar{v}_x = \frac{1}{h^+ - h^-} \int_{h^-}^{h^+} v_x(z) dz \quad (2.50)$$

$$\bar{v}_y = \frac{1}{h^+ - h^-} \int_{h^-}^{h^+} v_y(z) dz \quad (2.51)$$

Substituindo a equação (2.48) em (2.50) tem-se:

$$\bar{v}_x = \frac{1}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial x} \left[\int_{h^-}^{h^+} \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' dz - C(x, y) \int_{h^-}^{h^+} \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} dz \right] \quad (2.52)$$

Essa integral pode ser avaliada usando integração por partes. Para avaliar

$$\int_{h^-}^{h^+} \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' dz \quad (2.53)$$

usamos $u = z$ e $v = \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz'$, então

$$\begin{aligned}
 \int_{h^-}^{h^+} \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' dz &= \int_{h^-}^{h^+} v \frac{du}{dz} dz \\
 &= [vu]_{z=h^-}^{z=h^+} - \int_{h^-}^{h^+} u \frac{dv}{dz} dz \\
 &= \left[z \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' \right]_{z=h^-}^{z=h^+} - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz' \\
 &= h^+ \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz'
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

De maneira análoga, para avaliar

$$\int_{h^-}^{h^+} \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} dz \tag{2.55}$$

usamos $u = z$ e $v = \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta}$, então

$$\begin{aligned}
 \int_{h^-}^{h^+} \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} dz &= \int_{h^-}^{h^+} v \frac{du}{dz} dz \\
 &= [vu]_{z=h^-}^{z=h^+} - \int_{h^-}^{h^+} u \frac{dv}{dz} dz \\
 &= \left[z \int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta} \right]_{z=h^-}^{z=h^+} - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' \\
 &= h^+ \int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta} - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz'
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

Substituindo as equações (2.54) e (2.56) na equação (2.52) e usando a equação (2.46), tem-se:

$$\begin{aligned}
 \bar{v}_x &= \frac{1}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial x} \left[h^+ \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz' - C(x, y) \left\{ h^+ \int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta} - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' \right\} \right] \\
 &= \frac{1}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial x} \left[h^+ \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' - \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz' - h^+ \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' + \frac{\left(\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' \right)^2}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}} \right] \\
 &= \frac{1}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial x} \left[- \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz' + \frac{\left(\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' \right)^2}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}} \right] \\
 &= \frac{-2S_2}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial x}
 \end{aligned} \tag{2.57}$$

onde definimos

$$S_2 = \frac{1}{2} \left\{ \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz' - \frac{\left(\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' \right)^2}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}} \right\} \quad (2.58)$$

A quantidade S_2 é chamada fluidez. Usa-se o subscrito para indicar que está associada com o fluxo num canal que é essencialmente bidimensional.

A componente- y da velocidade média pode ser encontrada de maneira análoga substituindo a equação (2.49) na equação (2.51). Desta forma,

$$\bar{v}_y = \frac{-2S_2}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (2.59)$$

2.4.2 Integração da Equação da Continuidade

Durante a fase de preenchimento a equação da continuidade é:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.60)$$

Integrando o lado esquerdo da equação com relação a z , entre $z = -H$ e $z = +H$, tem-se:

$$\begin{aligned} \int_{H^-}^{H^+} \frac{\partial v_x}{\partial x} dz + \int_{H^-}^{H^+} \frac{\partial v_y}{\partial y} dz + \int_{H^-}^{H^+} \frac{\partial v_z}{\partial z} dz &= \int_{h^-}^{h^+} \frac{\partial v_x}{\partial x} dz + \int_{h^-}^{h^+} \frac{\partial v_y}{\partial y} dz + [v_z]_{z=H^-}^{z=H^+} \\ &\text{como } v_x = v_y = v_z = 0 \text{ na camada solidificada} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \int_{h^-}^{h^+} v_x dz + \frac{\partial}{\partial y} \int_{h^-}^{h^+} v_y dz \\ &= \frac{\partial}{\partial x} ((h^+ - h^-) \bar{v}_x) + \frac{\partial}{\partial y} ((h^+ - h^-) \bar{v}_y) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(2S_2 \frac{\partial p}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(2S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.61)$$

onde, nas duas últimas expressões, foram usadas as definições e valores das velocidades médias dadas nas equações (2.50), (2.51), (2.57) e (2.59).

Substituindo a equação acima em (2.60), obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.62)$$

Essa equação é uma equação simplificada para a pressão que combina as equações da continuidade e quantidade de movimento e é conhecida como equação de Hele-Shaw.

2.5 Simplificação devido à Simetria

A equação (2.62) pode ser simplificada ainda mais se assumirmos que o campo de fluido é simétrico com relação a linha central.

Além disso, para simplificar (2.62), a simetria no campo de fluido também significa que os cálculos precisam somente ser feitos para uma metade da espessura da cavidade, possibilitando um considerável ganho na velocidade computacional e redução dos requisitos de armazenagem de memória computacional. Essa suposição é, portanto, aceitável.

Suposição: O campo de fluido é assumido ser simétrico com relação a linha central

Essa suposição implica que a camada solidificada é também simétrica sobre a linha central da cavidade. Em algumas situações isto, contudo, não é válido, por exemplo, próximo a um canto.

Fluxo assimétrico próximo a cantos felizmente é um efeito local e um pequeno erro seria introduzido por essa suposição.

A variação da temperatura entre as metades dos moldes é freqüentemente encontrada em moldes reais. Devido à baixa condutividade térmica dos plásticos, a variação da temperatura deve ser particularmente alta para induzir assimetria significativa e então mais uma vez um pequeno erro será produzido.

Como resultado dessa suposição, tem-se:

1. A espessura da camada solidificada é simétrica ao longo a linha central, ou seja,

$$|h^+| = |h^-| = h \quad (2.63)$$

2. O perfil da velocidade ao longo da cavidade é simétrico sobre a linha central da cavidade ($z = 0$), então

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\partial v_y}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \quad (2.64)$$

3. O campo de temperatura é simétrico com relação a linha central da cavidade, ($z = 0$), então

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \quad (2.65)$$

4. O campo de viscosidade é simétrico com relação a linha central da cavidade $z = 0$.

Isto significa que,

$$\begin{aligned}
 \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz' &= \int_{-h}^h \frac{z'}{\eta} dz' \\
 &= \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' + \int_{-h}^0 \frac{z'}{\eta} dz' \\
 &= \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

e, por (2.58) tem-se:

$$\begin{aligned}
 S_2 &= \frac{1}{2} \int_{h^-}^{h^+} \frac{z'^2}{\eta} dz' \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-h}^h \frac{z'^2}{\eta} dz' \\
 &= \frac{1}{2} \left[\int_{-h}^0 \frac{z'^2}{\eta} dz' + \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz' \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left[\int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz' + \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz' \right] \\
 &= \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz'
 \end{aligned} \tag{2.67}$$

Por outro lado, substituindo a expressão (2.66) na equação (2.46) da constante $C(x, y)$, obtém-se que as componentes v_x e v_y da velocidade, definidas pelas equações (2.48) e (2.49) respectivamente, também são simplificadas, resultando em:

$$v_x = -\frac{\partial p}{\partial x} \left(\int_0^z \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \right) \tag{2.68}$$

$$v_y = -\frac{\partial p}{\partial y} \left(\int_0^z \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \right) \tag{2.69}$$

2.6 Condições de Contorno

A Figura 2.3 mostra uma cavidade simples de um molde, para a qual será discutida as condições de contorno necessárias para o problema de moldagem por injeção.

Há várias superfícies nas quais as condições de contorno devem ser descritas:

- Σ_{inj} é a superfície ao longo da qual o fundido é injetado na cavidade;
- Σ_{em} é a superfície definindo a face lateral do molde que está em contato com o fundido;

Figura 2.3: Condições de contorno para a simulação de moldagem por injeção [Kennedy, 1995].

- Σ_{w+} é a superfície da parede superior do molde;
- Σ_{w-} é a superfície da parede inferior do molde;
- Σ_{ins} é a superfície definindo qualquer inserção no molde. Embora na figura haja somente uma, a quantidade de inserções pode variar;
- Σ_{mf} é a superfície definindo a posição da superfície livre do fundido (*melt front*).

Para o problema de moldagem por injeção, condições de contorno relacionam a solução da pressão e distribuições térmicas na cavidade. Na verdade, equação da pressão, resultante do acoplamento das equações da continuidade e da quantidade de movimento, é acoplada à equação da energia porque a viscosidade do material, que afeta a pressão, é determinada por ambas temperatura e taxa de cisalhamento. A solução do problema de moldagem por injeção requer, portanto, a solução das equações da pressão e da energia.

2.6.1 Condições de Contorno para a Pressão

As condições de contorno relacionadas à pressão são:

- Em qualquer fronteira impermeável, o gradiente de pressão na direção normal à fronteira é zero. As fronteiras impermeáveis são as faces laterais, as paredes e quaisquer inserções no molde. Portanto,

$$\frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre} \quad \Sigma_{em}, \Sigma_{w+}, \Sigma_{w-}, \Sigma_{ins} \quad (2.70)$$

Fisicamente isso quer dizer que o material não pode escoar através das faces laterais e paredes do molde, como foi mostrado na Seção 2.4.1.

- A vazão q do fundido, ou a pressão p , é especificada na superfície na qual o fundido

adentra na cavidade, ou seja,

$$q = q_{inj} \quad \text{ou} \quad p = p_{inj} \quad \text{sobre} \quad \Sigma_{inj} \quad (2.71)$$

Um valor para a vazão pode ser obtido dividindo-se o volume da peça a ser moldada pelo tempo de preenchimento especificado.

- Assumindo que a pressão dada é a pressão relativa atmosférica (pressão manométrica), ela é zero na superfície livre, isto é,

$$p = 0 \quad \text{sobre} \quad \Sigma_{mf} \quad (2.72)$$

Como a maioria dos moldes são ventilados de modo a permitir que o ar a frente do molde escape, esta suposição é fisicamente sensata.

2.6.2 Condições de Contorno para a Temperatura

As condições de contorno relacionadas à temperatura são:

- O perfil da temperatura ao longo da espessura da cavidade, $T(z)$, é prescrito para a superfície na qual o fundido é injetado, isto é,

$$T(z) = T_{inj}(z) \quad (2.73)$$

Embora haja a possibilidade de prescrever um perfil para a temperatura, é comum assumir que a temperatura é uniforme no(s) ponto(s) de injeção.

- A temperatura T é prescrita sobre toda a fronteira do molde. Temperaturas diferentes podem ser prescritas em cada fronteira, isto é,

$$\begin{aligned} T &= T_{em} & \text{sobre} & \Sigma_{em} \\ T &= T_{w+} & \text{sobre} & \Sigma_{w+} \\ T &= T_{w-} & \text{sobre} & \Sigma_{w-} \\ T &= T_{ins} & \text{sobre} & \Sigma_{ins} \end{aligned} \quad (2.74)$$

2.7 O Modelo da Viscosidade

O modelo de viscosidade escolhido neste trabalho é o Modelo de Cross modificado com dependência de temperatura de Arrhenius [Chang e Yang, 2001, Chang et al., 2001]:

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \frac{\eta_0(T)}{1 + \left(\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau^*} \right)^{1-n}} \quad (2.75)$$

com

$$\eta_0(T) = B \exp\left(\frac{T_b}{T}\right) \quad (2.76)$$

onde n é o índice da lei de potência, η_0 é viscosidade para taxa de cisalhamento nula, τ^* é o parâmetro que descreve a região de transição entre a taxa de cisalhamento nula, também conhecida como platô Newtoniano, e a região da lei de potência da curva da viscosidade.

Para poliestireno, as constantes neste modelo são $n = 0,2838$, $\tau^* = 1,791 \times 10^4 Pa$, $B = 2,591 \times 10^{-7} Pas$ e $T_b = 11680 K$. A densidade, o calor específico e a condutividade térmica são, respectivamente, $\rho = 940 Kg/m^3$, $c_p = 2100 J/KgK$ e $k = 0,18W/mK$ [Chen et al., 1998].

2.8 Considerações Finais

Neste capítulo, as equações que governam o escoamento do polímero fundido durante a fase de preenchimento foram derivadas, considerando simplificações a respeito do fluido injetado, da geometria do molde e realizando uma análise dimensional e matemática das equações governantes. Todas essas suposições resultaram no acoplamento das equações da continuidade e da quantidade de movimento em uma equação bidimensional para a pressão conhecida como equação de Hele-Shaw, e uma equação tridimensional para a energia em termos da temperatura. Devido a essas simplificações, a validade das simulações torna-se restrita a moldes com pequena espessura e pouca curvatura.

Considerando o polímero como sendo um fluido Newtoniano Generalizado, um modelo para a viscosidade foi escolhido. De modo a possibilitar futuras comparações com os resultados obtidos na literatura, e de modo a determinar as constantes presentes no modelo da viscosidade, a função escolhida para essa variável é o modelo de Cross modificado com dependência de temperatura de Arrhenius. Esse modelo permite considerar os efeitos da temperatura e da taxa de cisalhamento no cálculo da viscosidade.

No próximo capítulo serão apresentadas a estratégia de solução dessas equações, definida neste trabalho, e a estrutura de dados utilizada para a solução.

Solução Numérica para a Fase de Preenchimento

Neste capítulo, são apresentadas as equações governantes da fase de preenchimento do processo de moldagem por injeção juntamente com as estratégias adotadas para a solução numérica dessas equações e a estrutura de dados utilizada.

3.1 Considerações Iniciais

O uso de malhas não-estruturadas para discretização de domínios está cada vez mais presente nos métodos numéricos. Isto se justifica pela facilidade de adaptação destas malhas em geometrias complexas, permitindo que refinamentos locais possam ser feitos em regiões específicas [[Maliska, 1995](#), [Maliska e Shneider, 2000](#)].

Para a mecânica dos fluidos computacional, revelam-se bastante promissores os métodos que possuem maior versatilidade geométrica e que utilizam técnicas de balanço de conservação das propriedades no volume de controle na forma integral, como o método de Volumes Finitos.

A solução numérica das equações para a fase de preenchimento é feita em três passos principais: cálculo do campo de pressão, cálculo do campo de temperatura e avanço do escoamento [[Kennedy, 1995](#)].

A malha utilizada no processo de solução é uma malha não estruturada triangular gerada por Triangulação de Delaunay [[Edelsbrunner, 2000](#), [Ruppert, 1994](#), [Shewchuk, 1999](#), [Niceno, 2001](#)] e os métodos empregados são: para a equação da pressão será usado o método de volumes finitos e para a equação da energia serão utilizadas diferenças finitas para a derivada temporal e a espacial na direção- z e um esquema de volumes finitos com

características semi-Lagrangeanas para os demais termos.

3.2 As Equações e as Condições de Contorno

As equações governantes para a fase de preenchimento foram derivadas no Capítulo 2. São elas:

Equação de Hele-Shaw

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.1)$$

Equação da Temperatura

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (3.2)$$

onde a fluidez e a velocidade, considerando o escoamento simétrico, são dadas por:

$$S_2 = \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz' \quad (3.3)$$

$$v_x = -\frac{\partial p}{\partial x} \left(\int_0^z \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \right) \quad (3.4)$$

$$v_y = -\frac{\partial p}{\partial y} \left(\int_0^z \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \right) \quad (3.5)$$

As equações (3.1) e (3.2) devem ser resolvidas sujeitas às seguintes condições de contorno:

i. A pressão é zero na superfície livre, ou seja,

$$p = 0 \quad \text{sobre a superfície livre} \quad (3.6)$$

ii. A pressão ou a vazão é definida no(s) ponto(s) onde o fundido é injetado, isto é,

$$p = p_{in} \quad \text{ou} \quad q = q_{in} \quad \text{sobre o(s) ponto(s) de injeção} \quad (3.7)$$

iii. O gradiente de pressão na direção normal é zero em qualquer fronteira impermeável, ou seja, na fronteira, tem-se

$$\frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (3.8)$$

iv. A temperatura na parede da cavidade ou em algum ponto interior à parede do molde é definida, isto é,

$$T = T_w \quad \text{em} \quad z = h \quad \text{ou} \quad z = h + \delta \quad (3.9)$$

v. O gradiente de temperatura na direção- z é zero na linha central da cavidade, isto é,

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0 \quad (3.10)$$

vi. A temperatura do fundido no(s) ponto(s) de injeção é definida, isto é,

$$T = T_{in} \quad \text{sobre o(s) ponto(s) de injeção} \quad (3.11)$$

3.2.1 O Processo de Solução

As equações para a pressão e a temperatura, sujeitas às respectivas condições de contorno são resolvidas segundo o processo de solução descrito a seguir:

1. Solução da equação da pressão para um dado tempo t_0 e uma posição da superfície livre.
 - (a) Usando uma aproximação de volumes finitos da equação (3.1) é resolvida, obtendo assim a distribuição da pressão p em t_0 ;
 - (b) Usando as equações (3.4) e (3.5), as componentes da velocidade v_x e v_y são obtidas;
2. A distribuição da temperatura em t_0 é obtida usando a equação (3.2);
3. A posição da superfície livre em $t_0 + dt$ é encontrada.

Os passos 1, 2 e 3 acima são repetidos até que o molde esteja preenchido.

Como a fluidez S_2 depende da viscosidade, que, por sua vez, depende tanto da temperatura quanto da taxa de cisalhamento, as equações (3.1) e (3.2) devem ser resolvidas simultaneamente. Entretanto, para a solução numérica, as equações podem ser desacopladas usando um incremento (passo) pequeno no tempo. Num tempo particular, a temperatura é assumida constante e o campo de pressão é calculado assumindo um valor para a viscosidade àquela temperatura. Assegurando-se que os passos no tempo são suficientemente pequenos, este desacoplamento garante resultados satisfatórios.

3.2.1.1 Os Passos para a Solução

Os passos 1, 2 e 3 foram descritos anteriormente de maneira sucinta e envolvem diversas aproximações e cálculos para a correta simulação do preenchimento de um molde. Nesta seção, eles serão apresentados em sua forma completa.

1. Solução da equação da pressão

(a) Cálculo de S_2

Se este é o começo de uma análise, um valor nominal da viscosidade à temperatura de fundição é usado. Se este não é o primeiro passo de uma análise, os dados da taxa de cisalhamento e da temperatura de um passo anterior podem ser usados para calcular S_2 .

(b) Cálculo do campo de pressão

Com a fluidez conhecida, resolve-se a equação (3.1) para a pressão sujeita a condições de contorno (3.6), (3.7) e (3.8).

(c) Determinação do campo de velocidade

Depois de calcular o campo de pressão, é possível determinar a velocidade usando as equações (3.4) e (3.5).

(d) Determinação da taxa de cisalhamento

Um novo valor para a taxa de cisalhamento pode então ser calculado usando o atual valor da velocidade.

(e) Cálculo da viscosidade

Assumindo a temperatura constante, a viscosidade é atualizada usando esse valor da taxa de cisalhamento.

Os passos de (a) a (e) são repetidos até que em duas iterações consecutivas, a variação da pressão seja menor do que uma tolerância permitida.

2. Solução da equação da temperatura

(a) Cálculo dos termos convectivos e de dissipação viscosa

Após a convergência do cálculo da pressão, os valores atuais das velocidades v_x e v_y , a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ e viscosidade η são usados na equação (3.2) para calcular os termos convectivos e de dissipação viscosa.

(b) Cálculo da condução

Tendo sido calculados os termos convectivos e de dissipação viscosa, a solução de (3.2) fica reduzida a um problema de condução com estes termos tratados como termos fonte.

Os cálculos da condução são realizados por métodos de diferenças finitas e fornecem o campo de temperatura.

3. Avanço da superfície livre

(a) Conhecendo a vazão em cada volume de controle, é possível prever qual deles irá preencher no próximo passo no tempo. A superfície livre é então avançada adequadamente.

Portanto, faz-se necessário implementar esquemas de solução para estas equações e para o avanço da superfície livre. A equação da pressão será resolvida usando um Método de Volumes Finitos, como descrito no Capítulo 4. A predição da posição da superfície livre será obtida por meio de um método *Volume Tracking*, e a equação da temperatura será resolvida usando um Método de Volumes Finitos para o cálculo dos termos convectivo e de dissipação viscosa e um Método de Diferenças Finitas para o cálculo da condução e para o avanço temporal.

A solução da equação da temperatura é implementada de duas formas distintas. A primeira delas consiste num modelo bidimensional, mais simples, que utiliza valores médios na espessura das variáveis, como a velocidade e a temperatura, e dos termos presentes na equação. A segunda forma, é o próprio modelo tridimensional proposto originalmente.

3.3 A Estrutura de Dados Utilizada

Para armazenar e manipular eficientemente uma triangulação, e conseqüentemente, uma malha triangular não estruturada bidimensional, com seu conjunto de vértices, arestas e triângulos, são necessárias poderosas estruturas de dados. Os modelos que fornecem maior eficiência são os modelos topológicos, porque conseguem fornecer relações de vizinhança entre quaisquer entidades e as manipulam sem cálculos numéricos.

A estrutura de dados que será utilizada neste trabalho é uma estrutura de dados topológica chamada SHE - *Singular Handle Edge*, desenvolvida no Laboratório de Computação de Alto Desempenho - LCAD, do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC/USP, pelo Prof. Dr. Luis Gustavo Nonato [Nonato et al., 2003].

3.3.1 A Estrutura de Dados Singular Handle Edge

A estrutura de dados SHE é semelhante a outras estruturas de dados topológicas descritas na literatura como *windge-edge*, *half-edge* e *quad-edge*, [Nonato et al., 2002], exceto que ela é capaz de manipular vértices singulares e mantém uma representação explícita das curvas da contorno de uma triangulação. Embora a representação explícita da contorno não seja comum em estruturas de dados topológicas, é essencial para uma implementação de operadores de Morse, [Nonato et al., 2004], e simplifica a armazenagem de condições de contorno que tipicamente aparecem em simulações numérica.

A Singular Handle Edge é organizada em termos de sete entidades explicitamente representadas, que são:

- **Mesh:** representa cada componente conectada de uma malha;

- **Vertex:** representa os vértices da malha;
- **Half-edge:** representa uma aresta contida numa face;
- **Sing:** representa cada componente singular incidente a um vértice;
- **Face:** representa as faces ou células da malha;
- **Boundary-curve:** representa as curvas da contorno na malha;
- **Boundary-edge:** representa as arestas da contorno.

As entidades Half-edge, Sing e Boundary-edge são armazenadas em listas circulares dinâmicas, enquanto as demais entidades são armazenadas em listas não circulares. As relações entre as entidades são mostradas na Figura 3.1.

Figura 3.1: Relações entre as entidades que constituem a estrutura de dados SHE [Nonato et al., 2002].

Cada Mesh aponta para as listas de suas componentes: Vertices, Faces e Boundary-curves (3.1 a). Cada Vertex aponta para sua lista Sing e aponta também de volta para a malha na qual está contido (3.1 b).

A Half-edge é sempre orientada no sentido anti-horário, e possui um ponteiro que aponta para o seu vértice inicial. A entidade Half-edge também aponta para a Half-edge em sua face adjacente se ela não está num contorno, em caso contrário aponta para uma Boundary-edge (3.1 c). Cada Sing aponta para a Half-edge que “deixa” seu vértice associado. Se o vértice é singular então tem uma lista circular Sing, e cada elemento nesta lista aponta para uma Half-edge no contorno de cada componente formando a singularidade (3.1 d).

Cada entidade Face aponta para a lista circular de Half-edges que define sua orientação (3.1 e). Boundary-curve aponta para uma lista circular de suas Boundary-edges. Cada Boundary-edge aponta para a Boundary-curve na qual está contida e para a Half-edge que representa (3.1 f).

3.3.1.1 Implementação

A estrutura de dados e um completo conjunto de métodos para acessar a sua informação armazenada foram implementados em C++.

Um mecanismo chamado *iterator* é oferecido para atravessar os elementos da SHE, que permite percorrer as listas com um simples `for`. Os métodos `Begin()` e `End()`, definidos para cada classe, são responsáveis pela inicialização e finalização do *iterator*.

Por exemplo, o seguinte código poderia ser empregado para imprimir as coordenadas de todos os vértices na malha, percorrendo a lista `Vertex`:

```
Iterator <SHE_Vertex> iv;  
for (iv = m->Begin_vertex(); iv != m->End_vertex(); ++iv)  
    cout << iv->Get_x() << iv->Get_y();
```

A principal vantagem do *iterator* é que ele “esconde” as listas do utilizador e padroniza o acesso a elas.

3.4 Considerações Finais

Neste capítulo foram apresentadas as equações governantes da fase de preenchimento da moldagem por injeção, juntamente com as condições iniciais e/ou de contorno para essas equações, e o processo de solução dessas equações. O processo de solução foi primeiramente apresentado de maneira sucinta e depois detalhado com o intuito de apresentar claramente os passos necessários para a solução desse problema, e de apresentar também a possibilidade de uma nova aproximação para a solução da equação da temperatura. As principais características da estrutura de dados também foram apresentadas.

Os próximos capítulos apresentarão detalhadamente as etapas de solução das equações governantes e do avanço da superfície livre. Em particular, o próximo capítulo apresentará o método de volumes finitos e sua utilização para a solução da equação de Hele-Shaw.

Solução da Equação da Pressão

Este capítulo apresenta um breve histórico do desenvolvimento e utilização do método de volumes finitos, bem como a idéia básica do método e, em seguida, a solução da equação da pressão utilizando uma abordagem em volumes finitos.

4.1 Introdução

O uso de malhas não estruturadas mais freqüentemente esteve associado ao método de elementos finitos, geralmente empregando malhas triangulares. Um dos trabalhos pioneiros utilizando volumes finitos em malhas triangulares é o de Winslow [[Winslow, 1967](#)].

Recentemente, um grande esforço de pesquisa vem sendo aplicado para o desenvolvimento de métodos numéricos para o escoamento de fluidos nos quais malhas não estruturadas são usadas juntamente com o método de volumes finitos [[Baliga e Patankar, 1981](#)] [[Baliga et al., 1983](#)] [[Prakash e Patankar, 1986](#)] [[Maliska, 1995](#)] [[Maliska e Shneider, 2000](#)] [[Sparrow et al., 1988](#)] [[Vasconcellos, 1999](#)].

Tais métodos têm recebido a denominação de “Control Volume Based Finite Element Method”, em primeiro lugar, pelo uso de malhas não estruturadas triangulares que dão origem aos volumes finitos, também denominados volumes de controle, e, segundo, pelos passos seguidos na formulação, semelhantes aos da formulação clássica de elementos finitos.

Volumes de controle centrados nos vértices dos triângulos da malha não estruturada podem ser criados de duas formas distintas [[Maliska, 1995](#)]. Uma delas utiliza a triangulação de Delaunay [[Shewchuk, 1999](#), [Ruppert, 1994](#), [Edelsbrunner, 2000](#)] e dá origem aos diagramas de Voronoi. A outra utiliza o método das medianas e dá origem a diagramas mais gerais, como os empregados em Baliga e Patankar [[Baliga e Patankar, 1981](#)], Baliga,

Phan e Patankar [Baliga et al., 1983] e Prakash e Patankar [Prakash e Patankar, 1986].

4.2 O Método de Volumes Finitos

O conceito chave usado durante toda a formulação de volumes finitos é o princípio de conservação de uma determinada quantidade física expressa pelas equações governantes sobre qualquer volume finito, também denominado volume de controle [Xue et al., 1999]. O domínio do escoamento é discretizado em um conjunto de volumes de controle não sobrepostos, que podem ser irregulares no tamanho e na forma.

Os valores de uma variável dependente Φ são armazenados no centróide dos volumes do controle, ou seja, nos vértices dos triângulos da malha. As equações discretizadas da variável dependente Φ são obtidas integrando a equação governante sobre cada um dos volumes de controle no domínio. O processo de discretização torna-se mais conveniente reconhecendo-se o fato que todas as equações governantes relevantes possuem uma forma comum, isto é, a forma da equação geral do transporte:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\Lambda\Phi)}_{\text{termo não estacionário}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\Lambda u_k \Phi)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \right)}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{S_\Phi}_{\text{termo fonte}} \quad (4.1)$$

onde a notação tensorial foi usada. O símbolo Φ refere-se à uma variável dependente que pode ser uma componente de um vetor, um tensor ou mesmo um escalar. Os coeficientes Λ e Γ têm significados diferentes para cada variável dependente, e S_Φ é chamado termo fonte, que engloba todos os termos que não podem ser acomodados nos termos convectivo e difusivo, e é específico a um Φ particular.

Integrando-se a equação geral do transporte sobre o intervalo de tempo δt e o respectivo volume de controle com o volume genérico ΔV e a área das superfícies do volume Ω_{cv} , e usando o Teorema da Divergência de Gauss sempre que possível, a equação integrada de uma variável dependente particular Φ sobre cada volume de controle pode ser discretizada como:

$$\int_{\delta t} \int_{\Delta V} \Lambda \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV dt + \int_{\delta t} \int_{\Omega_{cv}} J_k n_k d\Omega dt = \int_{\delta t} \int_{\Delta V} S_\Phi dV dt \quad (4.2)$$

onde

$$J_k = \Lambda u_k \Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \quad (4.3)$$

denota o fluxo total (convecção mais difusão) que passa através da face com n_k sendo o vetor normal unitário que aponta para fora.

Supondo que o valor no nó central P do volume de controle prevalece sobre todo o volume de controle para os termos que não são explicitamente uma função da posição, tal como o termo da derivada temporal $\frac{\partial \Phi}{\partial t}$, o termo fonte S_Φ , e adotando a fórmula de Euler implícita atrasada de primeira ordem sobre o intervalo de tempo δt , em vista de

sua simplicidade e estabilidade incondicional para cálculos numéricos, temos:

$$a_p^0 (\Phi_p - \Phi_p^n) + \int_{\Omega_{cv}} J_k n_k d\Omega = \bar{S}_c + \bar{S}_p \Phi_p \quad (4.4)$$

com

$$a_p^0 = \frac{\Lambda}{\delta t} \Delta V \quad (4.5)$$

onde o sobrescrito n denota os valores resultantes do nível de tempo anterior, e a integral no volume do termo fonte S_Φ , que geralmente é dependente da própria variável dependente, foi linearizada como uma função de Φ_p com $\bar{S}_c$ sendo a parte que não depende explicitamente de Φ_p e $\bar{S}_p$ o coeficiente de Φ_p . O *overbar* indica que os valores aplicados são avaliados usando o campo conhecido no tempo n (ou da iteração precedente).

Agora, o único termo integral restante é aquele que envolve o fluxo total J_k . Uma vez que conhecemos os valores da variável dependente nas faces do volume de controle a partir de um esquema de aproximação da variação espacial apropriado (isto é, a função de interpolação baseada no volume de controle) que relaciona o fluxo total J_k em cada face do volume de controle aos valores da variável dependente nos nós vizinhos, então esta integral pode ser manipulada usando o valor multiplicado pela respectiva área da face.

Assim, a forma final da equação integrada, ou seja, a equação de aproximação algébrica que estabelece a relação do valor Φ_p no nó central P com os valores dos nós dos seus vizinhos, é determinada e pode ser simbolicamente expressa em uma forma generalizada (nominalmente linear) para cada um dos volumes de controle do domínio:

$$a_p \Phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + \bar{S}_c + a_p^0 \Phi_p^0 \quad (4.6)$$

com

$$a_p = \sum_{nb} a_{nb} + a_p^0 - \bar{S}_p \quad (4.7)$$

onde a soma deve ser feita sobre todos os nós vizinhos nb dos nós centrados em P . Os coeficientes a_{nb} são funções das variáveis dependentes e seus conteúdos dependem de como estabelecer a relação entre o fluxo total J_k e os valores da variável dependente nos nós vizinhos, dependendo, assim, tanto da forma do volume de controle usado quanto do esquema de aproximação adotado. São estes coeficientes que determinam a exatidão espacial da solução final.

Após ter executado as etapas acima mencionadas para cada um dos volumes de controle no domínio, cada um dos nós no domínio do escoamento tem sua própria equação discretizada como a equação (4.6). Estas equações algébricas lineares podem prontamente ser resolvidas usando um método estável e eficiente, como, por exemplo o Método dos Gradientes Conjugados [Quarteroni et al., 2000], no caso de matrizes simétricas ou GMRES, no caso geral [Saad e Schlitz, 1986].

4.3 Solução por Volumes Finitos da Equação da Pressão

Conforme mencionado na Seção 4.2, para obter os volumes de controle elementares a partir de uma malha não-estruturada, dispõe-se de algumas técnicas. Uma delas é o método das medianas, onde os volumes são gerados a partir de uma triangulação, que pode ser uma triangulação qualquer ou a triangulação de Delaunay. Esse processo de obtenção dos volumes será empregado no modelo numérico a ser desenvolvido neste trabalho.

4.3.1 Método das Medianas

Uma forma de se obter os volumes de controle não-estruturados é através do método das medianas. Apesar deste trabalho empregar malhas Delaunay na simulação de escoamentos, o método das medianas é geral e pode ser aplicado a qualquer tipo de malha triangular, para a construção dos volumes de controle.

Considere a geometria mostrada na Figura 4.1(a), discretizada utilizando uma triangulação e sobre a qual serão construídos os volumes elementares utilizando o método das medianas.

Figura 4.1: Exemplo de malha triangular e os volumes de controle associados a esta malha.

Esse método consiste em ligar os centróides dos triângulos com os pontos médios dos lados dos triângulos. Uma vantagem desse método é que utilizando os centróides dos triângulos para gerar os volumes de controle, fica assegurado que não existirá volumes de controle exteriores à malha, e mais, a área de cada volume de controle interior a um determinado elemento triangular é exatamente igual a um terço da área do elemento, o que simplifica os cálculos.

4.3.2 Solução da Equação da Pressão

Considere a equação da pressão (4.8):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0 \quad (4.8)$$

onde $S_2 = \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz'$

Usando a notação de fluxo $\vec{J}$, é possível escrever:

$$\nabla \cdot (\vec{J}) = 0 \quad (4.9)$$

onde $\vec{J}$ é dado por

$$\vec{J} = -S_2 \nabla p \quad (4.10)$$

De forma semelhante a outros métodos de obtenção das equações aproximadas partindo-se das equações de balanço, o procedimento do método de volumes finitos consiste na integração da equação diferencial na forma conservativa no volume de controle. Neste caso, o volume de controle está mostrado na Figura 4.2 onde vemos que ele é composto por contribuições de diversos elementos do tipo 123.

Figura 4.2: Volume de controle para o método da mediana [Maliska, 1995].

Integrando a equação (4.9) no volume de controle, obtemos:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{J} dV = 0 \quad (4.11)$$

Aplicando o Teorema da Divergência de Gauss a essa integral, obtemos:

$$\int_S \vec{J} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (4.12)$$

onde $\vec{n}$ é um vetor unitário normal a S que aponta para fora e S é a fronteira fechada do volume V .

A integral de superfície, calculada no volume de controle do vértice 1, como ilustrado na Figura 4.2, resulta em:

$$\int_a^0 \vec{J} \cdot \vec{n} dS + \int_0^c \vec{J} \cdot \vec{n} dS + [\text{contribuições de outros elementos associados ao nó 1}] = 0 \quad (4.13)$$

Como o fluxo $\vec{J}$ depende das derivadas parciais de p , a integração dada pela equação (4.13) requer o valor dessas derivadas ao longo das linhas $\overline{a0}$ e $\overline{0c}$. Os valores de p , por outro lado, são armazenados nos vértices dos elementos triangulares. É necessário, portanto, o estabelecimento de uma função de interpolação para p .

Tal função de interpolação deve, a partir do conhecimento de p nos vértices dos triângulos, permitir o cálculo de p e de suas derivadas em qualquer posição dentro do elemento triangular. Em especial, os valores das derivadas de p serão necessários em pontos t e r , conforme mostra a Figura 4.3.

Figura 4.3: Elemento triangular [Maliska, 1995].

A função de interpolação escolhida para p é:

$$p = Ax + By + C \quad (4.14)$$

Com os valores de p_1 , p_2 e p_3 e os valores das coordenadas (x, y) nos pontos 1, 2 e 3, é possível encontrar os valores das constantes A , B e C , da seguinte maneira: em $(x, y) = (x_1, y_1)$, temos que $p = p_1$, em $(x, y) = (x_2, y_2)$, temos que $p = p_2$ e em $(x, y) = (x_3, y_3)$, temos que $p = p_3$. Substituindo esses valores na equação (4.14), obtém-se:

$$\begin{aligned} p_1 &= Ax_1 + By_1 + C \\ p_2 &= Ax_2 + By_2 + C \\ p_3 &= Ax_3 + By_3 + C \end{aligned} \quad (4.15)$$

Essas três expressões podem ser escritas como o seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

cuja solução resulta nos valores para as constantes A , B e C , apresentados a seguir:

$$A = \frac{[(y_2 - y_3)p_1 + (y_3 - y_1)p_2 + (y_1 - y_2)p_3]}{D} \quad (4.17)$$

$$B = \frac{[(x_3 - x_2)p_1 + (x_1 - x_3)p_2 + (x_2 - x_1)p_3]}{D} \quad (4.18)$$

$$C = \frac{[(x_2y_3 - x_3y_2)p_1 + (x_3y_1 - x_1y_3)p_2 + (x_1y_2 - x_2y_1)p_3]}{D} \quad (4.19)$$

com D dado por:

$$D = (x_1y_2 + x_2y_3 + x_3y_1 - y_1x_2 - y_2x_3 - y_3x_1) \quad (4.20)$$

Lembrando que o vetor fluxo é dado por:

$$\vec{J} = (J_x, J_y) = \left(-S_2 \frac{\partial p}{\partial x}, -S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) \quad (4.21)$$

é possível obter as derivadas de p com relação a x e a y usando a função de interpolação (4.14). Assim as componentes J_x e J_y resultam em:

$$J_x = -AS_2, \quad J_y = -BS_2 \quad (4.22)$$

Substituindo as expressões da equação (4.22) na equação (4.13), é possível calcular as integrações ao longo de $\overline{a0}$ e $\overline{0c}$:

$$\begin{aligned} \int_a^0 \vec{J} \cdot \vec{n} dS &= J_x(y_a - y_0) + J_y(x_a - x_0) \\ &= (AS_2)(y_a - y_0) + (BS_2)(x_0 - x_a) \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \int_0^c \vec{J} \cdot \vec{n} dS &= J_x(y_c - y_0) + J_y(x_0 - x_c) \\ &= (AS_2)(y_0 - y_c) + (BS_2)(x_c - x_0) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Assim

$$\int_S \vec{J} \cdot \vec{n} dS = AS_2(y_a - y_c) + (BS_2)(x_c - x_a) \quad (4.25)$$

A Figura 4.4 apresenta a interpretação geométrica das integrações dadas pelas equações (4.23) e (4.24). Considerando o vetor $\vec{J}$ nos pontos r e t , o produto $-J_x(y_a - y_0) + J_y(x_a - x_0)$ nós dá o fluxo que atravessa a face $\overline{a0}$, ao passo que o produto $J_x(y_c - y_0) - J_y(x_c - x_0)$ calcula o fluxo em $\overline{0c}$. Os sinais que aparecem estão de acordo com o sistema de eixo local.

Substituindo as expressões para as constantes A e B na equação (4.25), temos que a integração ao longo da superfície S pertencente ao elemento $\overline{123}$ relativa ao volume de

Figura 4.4: Representação de $\vec{J}$ nas interfaces de integração [Maliska, 1995].

controle associado ao vértice 1 resulta, em:

$$\int_a^0 \vec{J} \cdot \vec{n} dS + \int_0^c \vec{J} \cdot \vec{n} dS - \int_{1a0c} F dV = C_{11}p_1 + C_{12}p_2 + C_{13}p_3 \quad (4.26)$$

onde os coeficientes são dados por:

$$C_{11} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_2 - y_3) + (x_a - x_c)(x_2 - x_3)] \quad (4.27)$$

$$C_{12} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_3 - y_1) + (x_a - x_c)(x_3 - x_1)] \quad (4.28)$$

$$C_{13} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_1 - y_2) + (x_a - x_c)(x_1 - x_2)] \quad (4.29)$$

A contribuição para os volumes de controle dos vértices 2 e 3 pode ser computada de maneira análoga. Chamando

$$p_e = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

o vetor das pressões no elemento $\overline{123}$, a contribuição para os volumes de controle do elemento $\overline{123}$, associada aos vértices 1, 2 e 3 do elemento e

$$u_e = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

pode ser calculada por

$$u_e = C_e p_e \quad (4.32)$$

onde C_e é uma matriz 3×3 constituída pelos coeficientes C_{ij} , com $1 \leq i, j \leq 3$ dos vértices 1, 2 e 3. Detalhes dos cálculos das contribuições para os vértices 2 e 3 podem ser

encontrados no Apêndice A.

O cálculo da matriz C_e , e conseqüentemente, da contribuição u_e , é feito para cada elemento da malha. Portanto, é necessário adicionar todas as contribuições devidas a todos os n elementos da malha. Como os elementos e os vértices da malha são enumerados, um procedimento para somar estas contribuições consiste em calcular as matrizes C_e dos elementos e montar (*assemble*) uma matriz esparsa K , de dimensão $n \times n$. As contribuições para os vetores u_e , no caso de pressão prescrita, são montados no vetor F , resultando no sistema:

$$K p = F \quad (4.33)$$

Esse sistema linear é simétrico e é resolvido pelo método dos Gradientes Conjugados. Após obtida a solução, são encontrados os valores de p determinados em todos os vértices dos triângulos, ou seja, no centro dos volumes de controle nos quais foram realizados os balanços de conservação da pressão p .

4.3.3 Condições de Contorno

No método de discretização adotado, os volumes que se encontram na fronteira do domínio tem seus centros localizados sobre essa fronteira. Portanto, para p prescrito a equação do volume de fronteira passa assumir a forma $p = p_{prescrito}$. Em caso de fluxo ou velocidade prescritos, a equação associada a este volume de fronteira é empregada e o fluxo conhecido é utilizado.

Considerando que a aresta $\overline{12}$ na Figura 4.3 seja uma aresta de fronteira, a contribuição do segmento $\overline{1a}$ para o volume de controle centrado em 1 é dado por:

$$\int_1^a \vec{J} \cdot \vec{n} dS \quad (4.34)$$

Lembrando que

$$\vec{J} = -S_2 \nabla p \quad (4.35)$$

então

$$\vec{J} \cdot \vec{n} = -S_2 \frac{\partial p}{\partial \vec{n}} \quad (4.36)$$

Por outro lado, temos que a velocidade média na direção normal é dada por:

$$\bar{v}_n = -\frac{S_2}{h} \frac{\partial p}{\partial \vec{n}} \quad (4.37)$$

Substituindo convenientemente a equação (4.37) na equação (4.36) temos que:

$$\vec{J} \cdot \vec{n} = \bar{v}_n h \quad (4.38)$$

e a integração da equação (4.34) pode ser avaliada como

$$\int_1^a \vec{J} \cdot \vec{n} dS = \bar{v}_n h \Delta S \quad (4.39)$$

onde $\bar{v}_n$ é a velocidade prescrita na região de injeção e $\Delta S = \sqrt{(x_1 - x_a)^2 + (y_1 - y_a)^2}$.

No caso de condições de fluxo nulo, a contribuição é nula e, portanto, esta condição é satisfeita automaticamente.

Assim, a aplicação das condições de contorno consiste basicamente em fazer o balanço da propriedade considerada, no caso a massa, no volume de fronteira, obtendo-se a equação discretizada já contendo a informação da condição de contorno.

4.3.4 Validação do Método de Volumes Finitos

Com o objetivo de validar o método implementado foi resolvida a equação da pressão,

$$\nabla \cdot (S_2 \nabla p) = 0 \quad (4.40)$$

considerando a fluidez S_2 é constante. Nesse caso, é possível escrever a equação (4.40) da seguinte maneira:

$$\nabla^2 p = 0 \quad (4.41)$$

Esta equação é denominada equação de Laplace.

A equação de Laplace, definida num retângulo $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$ e sujeita às seguintes condições de contorno dada por:

$$\begin{aligned} \nabla^2 p &= 0 \quad \text{em} \quad \Omega \\ p(0, y) &= p(\pi, y) = \text{sen}(y), \quad 0 \leq y \leq \pi \\ p(x, 0) &= p(x, \pi) = \text{sen}(x), \quad 0 \leq x \leq \pi \end{aligned} \quad (4.42)$$

apresenta solução analítica u conhecida e dada por [Lório, 1991]:

$$u(x, y) = \frac{\text{senh}(\pi - x)\text{sen}(y) + \text{senh}(x)\text{sen}(y) + \text{sen}(x)\text{senh}(\pi - y) + \text{sen}(x)\text{senh}(y)}{\text{senh}(\pi)} \quad (4.43)$$

Uma maneira quantitativa de analisar a precisão do método é comparando as soluções obtidas. A Figura 4.5 mostra as soluções numérica e exata respectivamente.

Para melhor avaliar os resultados apresentados, e mostrar a convergência do método numérico apresentado neste trabalho, foi realizado o cálculo do erro relativo entre a solução numérica e a solução analítica, segundo a norma l_2 para diferentes malhas. O cálculo do erro é feito da seguinte maneira:

$$E = \frac{\sum (u - p)^2}{\sum (u)^2} \quad (4.44)$$

Figura 4.5: Soluções numérica e exata do problema, e comparação entre elas, obtidas em uma malha de 587 elementos.

onde E é o erro relativo, p é a solução numérica e u é a solução analítica. Três valores do erro entre as soluções numérica e analítica são apresentados na Tabela 4.1.

<i>Malhas</i>	Elementos	Erro
Malha grossa	587	$1,10 \times 10^{-5}$
Malha Intermediária	2377	$6,91 \times 10^{-6}$
Malha Fina	9219	$5,52 \times 10^{-6}$

Tabela 4.1: Erro relativo na norma l_2 entre as soluções numérica e analítica calculado em três malhas diferentes.

Na Tabela 4.1 pode-se observar que os erros decrescem à medida que a malha é refinada, mostrando, portanto, a convergência do método numérico implementado.

4.4 Considerações Finais

Neste capítulo, uma idéia geral do método de volumes finitos é inicialmente apresentada. Em seguida, o método das medianas, utilizado para a construção dos volumes finitos, também denominados volumes de controle, foi apresentado juntamente com a sua aplicação à solução da equação da pressão.

Considerando a fluidez constante, a equação da pressão torna-se uma equação de Laplace, que para algumas condições de contorno, como as apresentadas na Seção 4.3.4, apresenta solução analítica simples. Essa solução foi utilizada para validar o método implementado neste trabalho.

Como a predição da posição da superfície livre também faz parte da solução do problema, no próximo capítulo será apresentada a estratégia escolhida para o avanço do fluido durante a injeção.

O Avanço da Superfície Livre

Este capítulo apresenta uma técnica para a predição da superfície livre, como parte da solução das equações governantes da fase de preenchimento da moldagem por injeção.

5.1 Introdução

A predição da superfície livre é um aspecto muito importante em simulação de escoamentos. A posição da superfície livre é conhecida inicialmente e deve ser determinada como parte da solução em tempos posteriores.

Existem vários métodos para a predição da superfície livre que, por sua vez, não apresentam nem a mesma eficiência computacional e nem são adequados às mesmas situações físicas. Portanto a escolha do método é muito importante e deve ser decidida levando em conta tanto o problema físico quanto os recursos computacionais disponíveis [Ransau, 2002].

Esses métodos podem ser classificados em dois grupos principais: métodos do tipo *Interface Tracking* e métodos do tipo *Interface Capturing*, também conhecidos como *Volume Tracking* métodos [Sousa e Mangiavacchi, 2002, Sousa et al., 2004]. Os métodos do tipo *Interface Tracking* são aqueles que definem a superfície livre como uma interface abrupta cujos movimentos são seguidos e cuja pergunta temática é: “onde está a superfície?”. Nos métodos do tipo *Volume Tracking* a forma da superfície livre é determinada por células que estão parcialmente cheias de fluido, e a pergunta tema é “onde está o volume de fluido?”

Os métodos do tipo *Volume Tracking* têm se mostrado bastante adequados aos casos de escoamentos de fluidos em geometria complexas e por isso têm sido amplamente estudados

e utilizados [Ransau, 2002].

Alguns exemplos desses métodos são: *Marker-and-Cell* (MAC) [Harlow e Welch, 1967] e seus sucessores *Simplified Marker-and-Cell* (SMAC) [Amsden e Harlow, 1970] e *Generalized Simplified Marker-and-Cell* (GENSMAC) [Tome e McKee, 1994], e também os métodos *Level-Set* [Sussman et al., 1994] e *Volume of Fluid* (VOF) [Ransau, 2002]. O método de predição da posição da superfície livre utilizado neste trabalho é o método *Volume of Fluid*.

5.2 O Método Volume of Fluid

O método *Volume of Fluid* (VOF) foi originalmente introduzido em 1981 por Hirt e Nichols [Hirt e Nichols, 1981] e pode ser aplicado a problemas com vários fluidos com diferentes densidades e também é capaz de lidar com fenômenos físicos complexos como, por exemplo, o *splash* [Ransau, 2002].

A idéia principal no método VOF é introduzir uma função ϕ cujo valor é $\phi = 1$ em qualquer ponto ocupado por fluido e $\phi = 0$ caso contrário. O valor médio de ϕ em uma célula representa a fração de volume da célula ocupada pelo fluido. Em particular $\phi = 1$ corresponde à célula cheia de fluido, $\phi = 0$ à célula vazia e $0 < \phi < 1$ à célula contendo a superfície livre.

A dependência temporal de ϕ é governada pela seguinte equação de advecção:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}\phi) = 0 \quad (5.1)$$

Um algoritmo VOF típico geralmente consiste de duas partes:

1. um esquema para rastrear o volume e localizar a superfície livre;
2. uma forma de impor as condições de contorno na superfície livre.

A primeira parte de um algoritmo VOF, isto é a localização da superfície livre, consiste em um esquema permitindo o cálculo da evolução da função ϕ , o que significa resolver a equação (5.1). Para tanto, várias aproximações podem ser utilizadas, e uma delas, a escolhida neste trabalho, consiste em resolver a seguinte forma integral da equação (5.1), usando uma discretização em volumes finitos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi dV + \int_S \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (5.2)$$

Supondo que exista um vértice *vert1* associado ao volume finito V_1 , que no nosso caso é uma área. Supondo ainda que V_1 está parcialmente cheio, ou seja $0 < \phi(\text{vert1}) < 1$ e

que a estrela de $vert1$ seja composta pelos vértices $vert2, vert3, \dots, vert6$, como ilustrado na Figura 5.1. Lembrando que $\phi(vert1)$ representa a fração de volume de V_1 que contém

Figura 5.1: Volume de controle V_1 centrado em $vert1$ [Maliska, 1995].

fluido, tem-se que o volume de fluido do vértice $vert1$ é $\phi(vert1) \cdot V_1$.

Voltando à equação (5.2), para o volume finito V_1 tem-se que a taxa de variação do volume do fluido em $vert1$ é igual à soma das contribuições provenientes dos vértices vizinhos i em que $\phi(vert_i) = 1$, isto é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_1} \phi(vert1) dV = - \int_S \phi(vert_i) \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (5.3)$$

Matematicamente, considerando que ϕ é uniforme no volume do vértice $vert1$, é possível simplificar o lado esquerdo, obtendo:

$$V_1 \frac{\partial \phi(vert1)}{\partial t} = - \int_S \phi(vert_i) \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (5.4)$$

onde a integral da superfície da direita vai incluir a contribuição de todos os volumes associados a vértices cheios.

Logo, discretizando, tem-se que:

$$\phi(vert1)^{n+1} = \phi(vert1)^n - \frac{dt}{V_1} \int_S \phi(vert_i) \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (5.5)$$

Agora serão calculadas as contribuições dos demais volumes de controle.

Considerando um volume de controle conforme o descrito na Figura 5.1, e um elemento do tipo $\overline{123}$, conforme o descrito na Figura 5.2, é possível proceder analogamente ao caso da discretização da equação da pressão e obter:

$$\int_S \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \int_a^0 \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS + \int_0^c \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (5.6)$$

onde $\vec{v} = (v_x, v_y)$.

Figura 5.2: Elemento triangular [Maliska, 1995].

De acordo com o sistema de eixos local, conforme o ilustrado na Figura 5.2, as integrações ao longo dos segmentos $\overline{a0}$ e $\overline{0c}$ resultam em:

$$\int_a^0 \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \phi_i v_x (y_0 - y_a) + \phi_i v_y (x_a - x_0) \quad (5.7)$$

$$\int_0^c \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \phi_i v_x (y_c - y_0) + \phi_i v_y (x_0 - x_c) \quad (5.8)$$

É possível, agora, calcular as contribuições dos elementos que apresentam $\phi(\text{vert}_i) = 1$.

5.2.1 Contribuições dos Vértices

5.2.1.1 Contribuições dos vértices 2 e 3 para o vértice 1

Para este vértice, tem-se que:

$$\begin{aligned} x_a &= \frac{x_1 + x_2}{2} \\ x_c &= \frac{x_1 + x_3}{2} \\ y_a &= \frac{y_1 + y_2}{2} \\ y_c &= \frac{y_1 + y_3}{2} \end{aligned} \quad (5.9)$$

Procedendo analogamente ao caso da pressão, tem-se:

1. Contribuição do vértice 2 para o vértice 1

Tem-se, então, que:

$$\begin{aligned}
 \int_a^0 \vec{v} \cdot \vec{n} \, dS &= v_x(y_0 - y_a) + v_y(x_a - x_0) \\
 &= v_x \left(\frac{y_1 + y_2 + y_3}{3} - \frac{y_1 + y_2}{2} \right) + v_y \left(\frac{x_1 + x_2}{2} - \frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \right) \\
 &= \frac{1}{6} [v_x(-y_1 - y_2 + 2y_3) - v_y(-x_1 - x_2 + y_3)]
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

e, portanto,

$$C_{12} = \frac{1}{6} [v_x(-y_1 - y_2 + 2y_3) - v_y(-x_1 - x_2 + x_3)] \tag{5.11}$$

2. Contribuição do vértice 3 para o vértice 1:

Tem-se, então, que:

$$\begin{aligned}
 \int_0^c \vec{v} \cdot \vec{n} \, dS &= v_x(y_c - y_0) + v_y(x_0 - x_c) \\
 &= v_x \left(\frac{y_1 + y_3}{2} - \frac{y_1 + y_2 + y_3}{3} \right) + v_y \left(\frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} - \frac{x_1 + x_3}{2} \right) \\
 &= \frac{1}{6} [v_x(y_1 - 2y_2 + y_3) - v_y(x_1 - 2x_2 + x_3)]
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

e, portanto,

$$C_{13} = \frac{1}{6} [v_x(y_1 - 2y_2 + y_3) - v_y(x_1 - 2x_2 + x_3)] \tag{5.13}$$

5.2.1.2 Contribuições dos vértices 1 e 3 para o vértice 2

Para este vértice, tem-se que:

$$\begin{aligned}
 x_a &= \frac{x_3 + x_2}{2} \\
 x_c &= \frac{x_1 + x_2}{2} \\
 y_a &= \frac{y_3 + y_2}{2} \\
 y_c &= \frac{y_1 + y_2}{2}
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Analogamente ao caso anterior, tem-se:

1. Contribuição do vértice 1 para o vértice 2:

Então:

$$\begin{aligned}
 \int_0^c \vec{v} \cdot \vec{n} \, dS &= v_x(y_c - y_0) + v_y(x_0 - x_c) \\
 &= v_x \left(\frac{y_1 + y_2}{2} - \frac{y_1 + y_2 + y_3}{3} \right) + v_y \left(\frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} - \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \\
 &= \frac{1}{6} [v_x(y_1 + y_2 - 2y_3) - v_y(x_1 + x_2 - y_3)]
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

e, portanto,

$$C_{21} = \frac{1}{6} [v_x(y_1 + y_2 - 2y_3) - v_y(x_1 + x_2 - y_3)] = -C_{12} \tag{5.16}$$

2. Contribuição do vértice 3 para o vértice 2: Então:

$$\begin{aligned}
 \int_a^0 \vec{v} \cdot \vec{n} \, dS &= v_x(y_0 - y_a) + v_y(x_a - x_0) \\
 &= v_x \left(\frac{y_1 + y_2 + y_3}{3} - \frac{y_2 + y_3}{2} \right) + v_y \left(\frac{x_2 + x_3}{2} - \frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \right) \\
 &= \frac{1}{6} [v_x(2y_1 - y_2 - y_3) - v_y(2x_1 - x_2 - x_3)]
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

e, portanto,

$$C_{23} = \frac{1}{6} [v_x(2y_1 - y_2 - y_3) - v_y(2x_1 - x_2 - x_3)] \tag{5.18}$$

5.2.1.3 Contribuições dos vértices 1 e 2 para o vértice 3

Para este vértice, tem-se que:

$$\begin{aligned}
 x_a &= \frac{x_1 + x_3}{2} \\
 x_c &= \frac{x_2 + x_3}{2} \\
 y_a &= \frac{y_1 + y_3}{2} \\
 y_c &= \frac{y_2 + y_3}{2}
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

Analogamente ao caso anterior, tem-se:

1. Contribuição do vértice 1 para o vértice 3:

Então:

$$\begin{aligned}
\int_a^0 \vec{v} \cdot \vec{n} dS &= v_x(y_0 - y_a) + v_y(x_a - x_0) \\
&= v_x \left(\frac{y_1 + y_2 + y_3}{3} - \frac{y_1 + y_3}{2} \right) + v_y \left(\frac{x_1 + x_3}{2} - \frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \right) \\
&= \frac{1}{6} [v_x(-y_1 + 2y_2 - y_3) - v_y(-x_1 + 2x_2 - x_3)]
\end{aligned} \tag{5.20}$$

Portanto,

$$C_{31} = \frac{1}{6} [v_x(-y_1 + 2y_2 - y_3) - v_y(-x_1 + 2x_2 - x_3)] = -C_{13} \tag{5.21}$$

2. Contribuição do vértice 2 para o vértice 3:

Tem-se, então, que:

$$\begin{aligned}
\int_0^c \vec{v} \cdot \vec{n} dS &= v_x(y_c - y_0) + v_y(x_0 - x_a) \\
&= v_x \left(\frac{y_2 + y_3}{2} - \frac{y_1 + y_2 + y_3}{3} \right) + v_y \left(\frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} - \frac{x_2 + x_3}{2} \right) \\
&= \frac{1}{6} [v_x(-2y_1 + y_2 + y_3) - v_y(-2x_1 + x_2 + x_3)]
\end{aligned} \tag{5.22}$$

logo,

$$C_{32} = \frac{1}{6} [v_x(-2y_1 + y_2 + y_3) - v_y(-2x_1 + x_2 + x_3)] = -C_{23} \tag{5.23}$$

A matriz C das contribuições dos vértices é dada por:

$$C = \begin{bmatrix} 0 & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & 0 & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & 0 \end{bmatrix} \tag{5.24}$$

Nesta seção foram desenvolvidos os cálculos das contribuições de dois vértices de um triângulo para o terceiro, sem considerar o valor da variável ϕ nestes vértices. Como somente os vértices que apresentam $\phi = 1$ contribuem para os vértices vizinhos, juntamente ao cálculo da matriz C , define-se um vetor Φ , cujas coordenadas Φ_i , $i = 1, \dots, 3$ são definidas como segue:

$$\Phi_i = 1 \text{ se } \phi_i = 1 \text{ e } \Phi_i = 0 \text{ caso contrário}$$

Desta forma, as contribuições dos vértices cheios aos vértices vizinhos será dada pelo produto:

$$C \Phi \tag{5.25}$$

5.2.2 O Avanço no Tempo

Tem-se, da equação discretizada (5.5) e das contribuições dos vértices vizinhos, dadas pela equação (5.25), que:

$$\phi(\text{vert}_i)^{n+1} = \phi(\text{vert}_i)^n - \frac{dt}{V_i} C\Phi \quad (5.26)$$

Deseja-se que, a cada passo no tempo dt , apenas um volume finito se encha. Para tanto, calcula-se o passo de tempo dt necessário para o preenchimento de cada vértice pertencente à superfície livre ($0 < \phi < 1$), e então escolhe-se o menor valor encontrado:

$$1 = \phi(\text{vert}_i)^n - \frac{1}{V_i} C\Phi dt_{\text{preench}} \quad (5.27)$$

onde dt_{preench} é o passo de tempo que na iteração n preencherá apenas um volume finito. Logo:

$$dt_{\text{preench}} = -\frac{(1 - \phi(\text{vert}_i)^n)V_i}{C\Phi} \quad (5.28)$$

Essa estratégia resulta num esquema com pequena difusão numérica, uma das desvantagens freqüentemente encontradas em métodos do tipo VOF [Ransau, 2002].

5.3 Considerações Finais

O método *Volume of Fluid* (VOF), escolhido para o avanço da superfície livre durante o processo de moldagem por injeção, foi apresentado neste capítulo. Dentre as alternativas existentes, a estratégia escolhida considera apenas contribuições dos volumes de controle que estão completamente cheios de fluido, embora, fisicamente, entre dois volumes de controle vizinhos parcialmente cheios seja possível ocorrer troca de fluido. Contudo, essa aproximação resulta em um esquema sem difusão numérica, freqüentemente encontrada em outras estratégias do tipo VOF. Nesse contexto, a difusão numérica resulta em volumes de controle à frente a superfície livre começarem a encher antes da chegada da própria superfície livre.

Tendo sido calculado o campo de distribuição de pressão e avançada a superfície livre do escoamento, o próximo passo para a solução do problema é a obtenção da distribuição do campo de temperatura do fluido injetado. No próximo capítulo será apresentada uma formulação bidimensional, ainda mais simplificada, para a equação da temperatura.

O Modelo Bidimensional para a Temperatura

No Capítulo 1 foram apresentadas as equações governantes para a fase de preenchimento de um molde em sua formulação original e no Capítulo 2 essas equações foram convenientemente simplificadas para o caso do preenchimento de um molde composto por uma cavidade estreita. Neste capítulo são apresentadas uma formulação ainda mais simplificada para essas equações, em particular para as expressões da velocidade, da viscosidade e da própria temperatura, bem como a estratégia de solução.

6.1 Introdução

Analisando a equação da temperatura

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (6.1)$$

pode-se observar que o campo de distribuição de temperatura é tridimensional, uma vez que os termos de dissipação viscosa e de condução dependem de z .

O modelo bidimensional para a equação da temperatura é formulado utilizando valores médios de velocidade e da própria temperatura para calcular os campos de distribuição de pressão e temperatura, agora independentes da direção- z , ao longo do molde. Esses valores médios são calculados usando a seguinte definição:

Definição 1 Dada uma variável ϕ , o valor médio de ϕ é definido por:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{h^+ - h^-} \int_{h^+}^{h^-} \phi \, dz$$

onde h^+ e h^- são as coordenadas- z das paredes do molde

Se o escoamento for considerado simétrico, a definição 1 pode ser simplificada, resultando em:

Definição 2 *Dada uma variável ϕ , o valor médio de ϕ em um molde simétrico é definido por:*

$$\bar{\phi} = \frac{1}{h} \int_0^h \phi \, dz$$

onde h é o valor da espessura do molde.

A equação para a pressão original não apresenta termos dependentes da direção- z , e, portanto, no modelo bidimensional a expressão para a equação da pressão não sofre alterações:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0 \quad (6.2)$$

onde S_2 é a fluidez, que para um escoamento simétrico é dada por:

$$S_2 = \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz' \quad (6.3)$$

6.2 A Equação para a Velocidade

Na formulação original, as componentes v_x e v_y da velocidade $\vec{v}$ com a qual o fluido adentra a cavidade do molde são dadas por:

$$v_x = \frac{\partial p}{\partial x} \left\{ \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' - C(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \right\} \quad (6.4)$$

$$v_y = \frac{\partial p}{\partial y} \left\{ \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' - C(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \right\} \quad (6.5)$$

onde a constante C é definida por:

$$C(x, y) = \frac{\int_{h^-}^{h^+} \frac{z'}{\eta} dz'}{\int_{h^-}^{h^+} \frac{dz'}{\eta}}$$

No modelo bidimensional, essas expressões são substituídas pelos valores médios das componentes de velocidade $\bar{v}_x$ e $\bar{v}_y$, definidos na Seção 2.4.1:

$$\bar{v}_x = \frac{1}{h^+ - h^-} \int_{h^-}^{h^+} v_x \, dz \quad (6.6)$$

$$\bar{v}_y = \frac{1}{h^+ - h^-} \int_{h^-}^{h^+} v_y \, dz \quad (6.7)$$

que, após substituições adequadas descritas no Capítulo 2, são escritas como:

$$\bar{v}_x = -\frac{2S_2}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (6.8)$$

$$\bar{v}_y = -\frac{2S_2}{h^+ - h^-} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (6.9)$$

onde S_2 é a fluidez.

Considerando o escoamento simétrico, as velocidades v_x e v_y podem finalmente ser escritas como:

$$\bar{v}_x = -\frac{S_2}{h} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (6.10)$$

$$\bar{v}_y = -\frac{S_2}{h} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (6.11)$$

6.3 A Equação para a Temperatura

A estratégia escolhida para calcular as contribuições do campo de temperatura é um método semi-Lagrangeano [Phillips e Williams, 2001, Hirt et al., 1970]. A idéia básica desse método é acompanhar uma partícula de fluido durante sua trajetória ao longo da malha definida sobre o escoamento. Para isso, escreve-se a equação da temperatura (6.1) em termos da derivada material:

$$\frac{DT}{Dt} = f \quad \text{onde} \quad f = \frac{1}{\rho c_p} \left(\eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (6.12)$$

Utilizando, então, o referencial Lagrangeano, a derivada material $\frac{DT}{Dt}$ pode ser aproximada por:

$$\frac{T(p_a, t + dt) - T(p_a, t)}{dt} = f \quad (6.13)$$

onde p_a é uma partícula arbitrária.

Escolhendo a partícula que ocupa a posição $\vec{x}$ de um vértice no tempo $t + dt$ e escrevendo essa expressão em termos das coordenadas $\vec{x} = (x, y)$, tem-se:

$$T(\vec{x}, t + dt) = T(\vec{x} - d\vec{x}, t) + dt f \quad (6.14)$$

onde

$$d\vec{x} = \vec{v} dt \quad (6.15)$$

Note que $\vec{x}$ é a posição ocupada no tempo $t + dt$ por uma partícula de fluido que ocupava a posição $\vec{x} - d\vec{x}$ no tempo t .

Considerando uma aproximação linear para T no triângulo que contém $\vec{x}$, então

$T(\vec{x} - d\vec{x}, t)$ pode ser aproximado usando uma expansão em série de Taylor truncada, como segue:

$$T(\vec{x} - d\vec{x}, t) = T(\vec{x}, t) - d\vec{x} \cdot \nabla T \quad (6.16)$$

Substituindo a expressão (6.15) em (6.16) e depois esta em (6.14), obtém-se:

$$T(\vec{x}, t + dt) = T(\vec{x}, t) - dt \vec{v} \cdot \nabla T + dt f \quad (6.17)$$

onde ∇T é calculado sobre o elemento que contém a partícula p_a no tempo t , ou seja, $\nabla T = \nabla T(\vec{x}, t)$, e $\vec{v}$ é a velocidade no vértice.

De modo a simplificar a notação, considera-se $v = \vec{v}$, $T(t + dt) = T(\vec{x}, t + dt)$, $T = T(\vec{x}, t)$, e então a equação (6.17) é escrita como:

$$T(t + dt) = T - dt v \cdot \nabla T + dt f \quad (6.18)$$

A próxima etapa consiste em determinar o valor médio para esta expressão.

6.3.1 A Equação da Temperatura em Termos de Valores Médios

Nessa seção serão apresentados os passos para o cálculo dos valores médios das variáveis da equação da temperatura.

A equação da temperatura pode ser escrita conforme a expressão (6.18):

$$T(t + dt) = T - dt v \cdot \nabla T + \frac{dt}{\rho c_p} \left(\eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (6.19)$$

Aplicando a definição 2 nessa equação, já considerando o escoamento simétrico, obtém-se uma expressão para a equação da temperatura em termos de valores médios:

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \int_0^h T(t + dt) dz &= \frac{1}{h} \int_0^h T dz - \frac{1}{h} \int_0^h (dt v \cdot \nabla T) dz + \frac{1}{h} \int_0^h \frac{dt}{\rho c_p} \left(\eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) dz \\ \frac{1}{h} \int_0^h T(t + dt) dz &= \frac{1}{h} \int_0^h T dz - dt \left(\frac{1}{h} \int_0^h v \cdot \nabla T dz \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{1}{h} \int_0^h \eta \dot{\gamma}^2 dz + \frac{1}{h} \int_0^h k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} dz \right) \right) \\ \overline{T}(t + dt) &= \overline{T} - dt \left[\overline{v \cdot \nabla T} + \frac{1}{\rho c_p} \left(\overline{\eta \dot{\gamma}^2} + \overline{k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.20)$$

Dessa forma, é necessário calcular os valores médios dos termos convectivos, de dissipação viscosa e de condução.

6.3.1.1 Cálculo da Dissipação Viscosa Média

O termo que representa a dissipação viscosa na equação da temperatura é composto do produto da viscosidade η pela taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ ao quadrado, que é dependente da velocidade.

Assumindo um perfil parabólico para a velocidade, $v = (v_x, v_y)$ pode ser escrita da seguinte maneira:

$$v = -\frac{v_{max}}{h^2}(z - h)(z + h) \quad (6.21)$$

onde h é a espessura do molde.

De acordo com a definição 2 de valor médio, a velocidade média $\bar{v}$ é dada por:

$$\begin{aligned} \bar{v} &= \frac{1}{h} \int_0^h v \, dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h -\frac{v_{max}}{h^2}(z - h)(z + h) \, dz \end{aligned} \quad (6.22)$$

É importante observar que nesse modelo para a velocidade, o valor máximo é dado na linha central da cavidade, ou seja, quando $z = 0$, $v = v_{max}$ e que a velocidade é nula nas paredes do molde, isto é, quando $z = h$, $v = 0$.

Considerando a espessura do molde, h , constante, é possível calcular essa integral e obter:

$$\bar{v} = \frac{2}{3}v_{max} \quad (6.23)$$

donde

$$v_{max} = \frac{3}{2}\bar{v} \quad (6.24)$$

Conhecendo a relação entre a velocidade média e a velocidade máxima do fluido, é possível calcular o valor médio da dissipação viscosa.

A dissipação viscosa é dada por:

$$\eta\dot{\gamma}^2 = \eta \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (6.25)$$

Aplicando a definição 2 na equação anterior, a dissipação viscosa média é dada por:

$$\begin{aligned} \overline{\eta\dot{\gamma}^2} &= \frac{1}{h} \int_0^h \eta\dot{\gamma}^2 \, dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h \eta \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} \right)^2 \right] \, dz \end{aligned} \quad (6.26)$$

Utilizando o perfil de velocidade definido na equação (6.21) os valores das derivadas par-

ciais $\frac{\partial v_x}{\partial z}$ e $\frac{\partial v_y}{\partial z}$ podem ser calculados:

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} = -\frac{v_{x_{max}}}{h^2} 2z \quad \text{e} \quad \frac{\partial v_y}{\partial z} = -\frac{v_{y_{max}}}{h^2} 2z \quad (6.27)$$

donde

$$\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)^2 = \frac{4|v_{x_{max}}|^2}{h^4} z^2 \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial v_y}{\partial z}\right)^2 = \frac{4|v_{y_{max}}|^2}{h^4} z^2 \quad (6.28)$$

Agora, também prescrevendo um perfil parabólico para a viscosidade, tem-se que:

$$\eta = -\frac{\eta_c - \eta_w}{h^2}(z - h)(z + h) + \eta_w \quad (6.29)$$

Assim como no caso da velocidade, uma breve análise dos valores da viscosidade será feita. Para $z = 0$, tem-se $\eta = \eta_c$, que é o menor valor da viscosidade e para $z = h$, $\eta = \eta_w$, que é um valor muito alto para a viscosidade, uma vez que na parede a velocidade é nula.

Substituindo as equações (6.28) e (6.29) na equação (6.26) tem-se:

$$\begin{aligned} \overline{\eta \dot{\gamma}^2} &= \frac{1}{h} \int_0^h \eta \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z}\right)^2 \right] dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h \left[\left(-\frac{\eta_c - \eta_w}{h^2}(z - h)(z + h) + \eta_w \right) \left(\frac{v_{x_{max}}^2}{h^4} z^2 + \frac{v_{y_{max}}^2}{h^4} z^2 \right) \right] dz \\ &= \frac{v_{x_{max}}^2 + v_{y_{max}}^2}{15h^2} (8\eta_c + 12\eta_w) \end{aligned} \quad (6.30)$$

Utilizando a relação entre a velocidade média e a máxima, dada pela equação (6.24), uma expressão para a dissipação viscosa média finalmente é estabelecida:

$$\overline{\eta \dot{\gamma}^2} = \frac{3}{5h^2} (\bar{v}_y^2 + \bar{v}_x^2) (2\eta_c + 3\eta_w) \quad (6.31)$$

6.3.1.2 Cálculo da Condução Média

Analogamente aos casos anteriores, usando a definição 2, tem-se que a condução média é dada por:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{h} \int_0^h k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} dz \quad (6.32)$$

Integrando $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ com relação a z , tem-se que:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = k \frac{1}{h} \left(\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_h - \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_0 \right) \quad (6.33)$$

Assim, para o cálculo da condução média serão necessários os cálculos das derivadas parciais de T com relação a z em $z = 0$ e em $z = h$.

Para isso, analogamente ao caso da velocidade, assume-se um perfil parabólico para a temperatura:

$$T = -\frac{T_{max} - T_w}{h^2}(z - h)(z + h) + T_w \quad (6.34)$$

A derivada parcial de T com relação à espessura z é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{T_{max} - T_w}{h^2} 2z \quad (6.35)$$

donde

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h} = -\frac{2}{h}(T_{max} - T_w) \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad (6.36)$$

Note que esta última derivada indica que o perfil assumido para a temperatura está de acordo com as condições de contorno do escoamento, que afirmam que a derivada de T com relação a z na linha central da cavidade, isto é, quando $z = 0$, é nula.

Portanto, de (6.35) e (6.36), tem-se que o valor médio da condução de temperatura é dado por:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = -\frac{2k}{h^2}(T_{max} - T_w) \quad (6.37)$$

Analogamente ao caso da dissipação viscosa, é possível aplicar a definição 2 na equação (6.34), e encontrar uma relação entre os valores da temperatura máxima e da temperatura média do fluido:

$$\bar{T} = \frac{2}{3}T_{max} + \frac{1}{3}T_w \quad (6.38)$$

donde

$$T_{max} = \frac{3}{2}\bar{T} - \frac{1}{2}T_w \quad (6.39)$$

Finalmente, substituindo a expressão (6.39) na equação (6.37), a condução média pode ser escrita em termos de valores médios da temperatura:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = -\frac{3k}{h^2}(\bar{T} - T_w) \quad (6.40)$$

6.3.1.3 Cálculo da Convecção Média

O termo que representa a convecção na equação da temperatura é composto do produto da velocidade v pelo gradiente de temperatura ∇T , e pretende-se, então, calcular um valor médio para este termo.

O perfil parabólico da velocidade definido pela equação (6.21) pode ser reescrito em

termos de valores médios usando a equação (6.24), ou seja:

$$v = -\frac{3\bar{v}}{2h^2}(z-h)(z+h) \quad (6.41)$$

Da mesma maneira, usando a equação (6.39) para reescrever o perfil parabólico da temperatura definido pela equação (6.34), obtém-se:

$$T = -\frac{3}{2h^2}(\bar{T} - T_w)(z-h)(z+h) + T_w \quad (6.42)$$

Definindo a função de correção $f(z)$ como:

$$f(z) = -\frac{3}{h^2}(z-h)(z+h) \quad (6.43)$$

tem-se que v e T podem ser escritas como:

$$v = \bar{v}f(z) \quad (6.44)$$

e

$$T = \bar{T}f(z) + (1 + T_w)f(z) \quad (6.45)$$

Aplicando a definição 2 ao termo convectivo, e usando as equações (6.44) e (6.45), obtém-se:

$$\begin{aligned} \overline{v \cdot \nabla T} &= \frac{1}{h} \int_0^h v \cdot \nabla T \, dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h [\bar{v}f(z)] \cdot \nabla [\bar{T}f(z) + (1 + T_w)f(z)] \, dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h [\bar{v}f(z)] \cdot [\nabla (\bar{T}f(z)) + \nabla ((1 + T_w)f(z))] \, dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h [\bar{v}f(z)] \cdot \nabla [\bar{T}f(z)] \, dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h f(z)^2 (\bar{v} \cdot \nabla \bar{T}) \, dz \\ &= (\bar{v} \cdot \nabla \bar{T}) \frac{1}{h} \int_0^h f(z)^2 \, dz \end{aligned} \quad (6.46)$$

Calculando a integral de $f(z)^2$ na espessura tem-se que o valor médio da convecção é dado por:

$$\overline{v \cdot \nabla T} = \frac{6}{5} (\bar{v} \cdot \nabla \bar{T}) \quad (6.47)$$

E uma expressão para a equação bidimensional da temperatura, em termos de valores

médios, é dada por:

$$\bar{T}(t + dt) = \bar{T} - dt \left[\frac{6}{5} (\bar{v} \cdot \nabla \bar{T}) + \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{3}{5h^2} (\bar{v}_y^2 + \bar{v}_x^2) (2\eta_c + 3\eta_w) + \frac{3k}{h^2} (\bar{T} - T_w) \right) \right] \quad (6.48)$$

6.4 O Processo de Solução do Modelo Bidimensional

Sendo conhecidas as equações para a pressão, a velocidade, a temperatura e para o avanço da superfície livre, o processo de solução do preenchimento do molde pode ser sintetizado em:

1. Para um dado tempo t_0 e uma posição da superfície livre, uma aproximação de volumes finitos da equação (6.2) é resolvida, obtendo assim a distribuição da pressão p em t_0 ;
2. Usando as equações (6.10) e (6.11), as componentes da velocidade v_x e v_y são obtidas;
3. A distribuição da temperatura em t_0 é obtida usando a aproximação bidimensional dada pela equação (6.48);
4. A posição da superfície livre em $t_0 + dt$ é encontrada.

Os passos acima são repetidos até que o molde esteja completamente preenchido.

6.5 Considerações Finais

No capítulo anterior foram apresentadas as equações governantes para a fase de preenchimento do processo de moldagem por injeção: uma equação bidimensional para a pressão, conhecida como equação de Hele-Shaw, e uma equação tridimensional para a temperatura.

Neste capítulo foi apresentada uma estratégia de solução para essa equação, considerando um referencial semi-Lagrangeano para a discretização do termo convectivo e também considerando valores médios com relação à espessura para todos os termos da equação. Essa suposição resultou em uma formulação bidimensional para a equação da temperatura, ainda mais simples que a originalmente proposta, e pode ser considerada como um passo intermediário na obtenção da solução do problema do preenchimento de um molde.

A estratégia de solução para a equação da energia em sua formulação tridimensional original será apresentada no próximo capítulo.

O Modelo Tridimensional para a Temperatura

Neste capítulo é apresentada a estratégia de solução da equação da energia em termos da temperatura em sua formulação original proposta para o escoamento de um fluido durante o processo de moldagem por injeção.

7.1 O Método Semi-Lagrangeano

A equação da energia em termos da temperatura foi convenientemente simplificada no Capítulo 2 para o caso da fase de preenchimento de um molde durante o processo de moldagem por injeção, resultando em:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (7.1)$$

A estratégia escolhida para calcular as contribuições do campo de temperatura, analogamente ao caso bidimensional, é um método semi-Lagrangeano [Phillips e Williams, 2001, Hirt et al., 1970].

A idéia básica desse método é acompanhar uma partícula de fluido durante sua trajetória ao longo da malha definida sobre o escoamento. Para isso, escreve-se a equação da temperatura (7.1) em termos da derivada material:

$$\frac{DT}{Dt} = f \quad \text{onde} \quad f = \frac{1}{\rho c_p} \left(\eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (7.2)$$

Utilizando, então, o referencial Lagrangeano, a derivada material $\frac{DT}{Dt}$ pode ser apro-

ximada por:

$$\frac{T(p_a, t + dt) - T(p_a, t)}{dt} = f \quad (7.3)$$

onde p_a é uma partícula arbitrária.

Escolhendo a partícula que ocupa a posição $\vec{x}$ de um vértice no tempo $t + dt$ e escrevendo essa expressão em termos das coordenadas $\vec{x} = (x, y)$, tem-se:

$$T(\vec{x}, t + dt) = T(\vec{x} - d\vec{x}, t) + dt f \quad (7.4)$$

onde

$$d\vec{x} = \vec{v} dt \quad (7.5)$$

Note que $\vec{x}$ é a posição ocupada no tempo $t + dt$ por uma partícula de fluido que ocupava a posição $\vec{x} - d\vec{x}$ no tempo t . Considerando uma aproximação linear para T no triângulo que contém $\vec{x} - d\vec{x}$, então $T(\vec{x} - d\vec{x}, t)$ pode ser aproximado usando uma expansão em série de Taylor truncada, como segue:

$$T(\vec{x} - d\vec{x}, t) = T(\vec{x}, t) - d\vec{x} \cdot \nabla T \quad (7.6)$$

Substituindo a expressão (7.5) em (7.6) e depois esta em (7.4), obtém-se:

$$T(\vec{x}, t + dt) = T(\vec{x}, t) - dt \vec{v} \cdot \nabla T + dt f \quad (7.7)$$

onde ∇T é calculado sobre o elemento que contém a partícula p_a no tempo t , ou seja, $\nabla T = \nabla T(\vec{x}, t)$, e $\vec{v}$ é a velocidade no vértice, donde

$$T(t + dt) = T - dt \vec{v} \cdot \nabla T + \frac{dt}{\rho c_p} \left(\eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (7.8)$$

O termo convectivo $\vec{v} \cdot \nabla T$ é calculado usando uma interpolação linear para T em cada triângulo, de maneira análoga ao cálculo do gradiente de pressão na solução da equação de Hele-Shaw (veja Seção 4.3.2). O termo de dissipação viscosa $\eta \dot{\gamma}^2$ é calculado usando um modelo de Cross modificado para a viscosidade e o termo de condução $k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$, claramente dependente da direção- z é aproximado por um esquema de diferenças finitas centrado.

7.1.1 Aproximação dos Termos da Equação da Temperatura

Nesta seção são apresentados os cálculos para avaliar o valor dos termos da equação da temperatura.

7.1.1.1 Cálculo da Convecção

O termo da equação da temperatura que representa a convecção no escoamento do fluido é dado pelo produto $\vec{v} \cdot \nabla T$. O cálculo do gradiente de T é feito de maneira análoga ao do

gradiente de pressão, usando uma interpolação linear, usando os valores da temperatura T_1 , T_2 e T_3 nos vértices dos triângulos:

$$T = Ax + By + C \quad (7.9)$$

com A , B e C dados por:

$$A = \frac{[(y_2 - y_3)T_1 + (y_3 - y_1)T_2 + (y_1 - y_2)T_3]}{D} \quad (7.10)$$

$$B = \frac{[(x_3 - x_2)T_1 + (x_1 - x_3)T_2 + (x_2 - x_1)T_3]}{D} \quad (7.11)$$

$$C = \frac{[(x_2y_3 - x_3y_2)T_1 + (x_3y_1 - x_1y_3)T_2 + (x_1y_2 - x_2y_1)T_3]}{D} \quad (7.12)$$

e D dado por:

$$D = (x_1y_2 + x_2y_3 + x_3y_1 - y_1x_2 - y_2x_3 - y_3x_1) \quad (7.13)$$

Assim, é possível calcular as derivadas parciais de T com relação a x e y e obter:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = A \quad \text{e} \quad \frac{\partial T}{\partial y} = B \quad (7.14)$$

A escolha do valor da velocidade para efetuar o produto $\vec{v} \cdot \nabla T$, para cada triângulo, é feita da seguinte maneira:

1. Para cada triângulo

(a) Calcula-se $\frac{\partial T}{\partial x}$ e $\frac{\partial T}{\partial y}$ segundo a equação (7.14);

2. Para cada vértice do triângulo verifica-se se alguma partícula p_a se originou deste elemento no tempo t realizando os seguintes passos:

- (a) Calcula-se o produto vetorial entre o vetor velocidade na célula e os vetores que compõem as arestas incidentes àquele vértice;
- (b) Se esses dois produtos tiverem sinais trocados, então a partícula p_a pertence àquele triângulo e portanto, realiza-se o produto $\vec{v} \cdot \nabla T$ com esse valor da velocidade e armazena-se o resultado no vértice relativo à coordenada $\vec{x}$.

7.1.1.2 Cálculo da Dissipação Viscosa

O termo da equação da temperatura que representa a dissipação viscosa no escoamento do fluido é dado por $\eta\dot{\gamma}^2$, com a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ dada por:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z}\right)^2} \quad (7.15)$$

As derivadas $\frac{\partial v_x}{\partial z}$ e $\frac{\partial v_y}{\partial z}$ podem ser obtidas usando as equações das componentes v_x e v_y da velocidade:

$$v_x = \frac{\partial p}{\partial x} \left\{ \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' - C(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \right\} \quad (7.16)$$

$$v_y = \frac{\partial p}{\partial y} \left\{ \int_{h^-}^z \frac{z'}{\eta} dz' - C(x, y) \int_{h^-}^z \frac{dz'}{\eta} \right\} \quad (7.17)$$

que, para um escoamento simétrico, são dadas por:

$$v_x = \frac{\partial p}{\partial x} \left(\int_0^z \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \right) \quad (7.18)$$

$$v_y = \frac{\partial p}{\partial y} \left(\int_0^z \frac{z'}{\eta} dz' - \int_0^h \frac{z'}{\eta} dz' \right) \quad (7.19)$$

Assim:

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{z}{\eta} \quad (7.20)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial y} \frac{z}{\eta} \quad (7.21)$$

Substituindo as equações (7.20) e (7.21) na equação (7.15), tem-se:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= \frac{z}{\eta} \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)^2} \\ &= \frac{z}{\eta} |\nabla p| \end{aligned} \quad (7.22)$$

onde os valores das derivadas $\frac{\partial p}{\partial x}$ e $\frac{\partial p}{\partial y}$ foram calculados durante a solução da equação da pressão e a viscosidade é dada por:

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \frac{\eta_0(T)}{1 + \left(\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau^*} \right)^{1-n}} \quad (7.23)$$

com

$$\eta_0(T) = B \exp \left(\frac{T_b}{T} \right) \quad (7.24)$$

Substituindo a expressão da viscosidade (7.23) na equação (7.22), tem-se que a taxa de cisalhamento pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\dot{\gamma} = |\nabla p| \frac{z}{\eta_0} \left[1 + \left(\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau^*} \right)^{1-n} \right] \quad (7.25)$$

Definindo uma função $G = G(\dot{\gamma})$ como:

$$G(\dot{\gamma}) = \dot{\gamma} - |\nabla p| \frac{z}{\eta_0} \left[1 + \left(\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau^*} \right)^{1-n} \right] \quad (7.26)$$

é possível utilizar o método de Newton e encontrar a raiz dessa equação, usando a seguinte função de iteração:

$$\dot{\gamma}^{k+1} = \dot{\gamma}^k - \frac{G(\dot{\gamma}^k)}{G'(\dot{\gamma}^k)} \quad (7.27)$$

onde $G'(\dot{\gamma}^k)$ é a derivada de $G(\dot{\gamma}^k)$ com relação a $\dot{\gamma}^k$.

Conhecendo, então, o valor da taxa de cisalhamento a um determinado valor para a espessura, o valor da viscosidade nesta espessura é determinado usando a equação (7.23), e, finalmente, o produto dessa variável pelo quadrado da taxa de cisalhamento resultará no valor da dissipação viscosa nessa espessura.

7.1.1.3 Cálculo da Condução

A condução, representada pelo termo $k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$, claramente dependente da direção- z , é aproximado por um esquema de diferenças finitas progressivo, respeitando as condições de contorno para a temperatura, ou seja:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = k \frac{T_{i,k+1} - 2T_{i,k} + T_{i,k-1}}{dz^2} \quad (7.28)$$

onde o índice i relaciona-se com as coordenadas (x, y) da malha e o índice k , com a coordenada z .

Como o termo condutivo é dependente da direção- z , e foi discretizado nessa direção, é necessário também discretizar a espessura do molde. Nesse trabalho, considera-se o escoamento simétrico, e portanto, os cálculos são feitos apenas para metade do escoamento. Desta forma, a malha de diferenças finitas na direção espacial z é definida como uma malha de Nz camadas e com espaçamento $dz = \frac{h}{Nz}$.

7.1.2 Solução da Equação da Temperatura

Tendo sido estabelecidas as estratégias para a solução da equação da energia nas direções espaciais x , y e z , é necessário estabelecer as estratégias para a solução transiente. Os métodos comumente utilizados são os métodos de diferenças finitas explícito, implícito e o de Crank-Nicolson. Tendo sido utilizada a estratégia semi-Lagrangeana para a solução da equação tridimensional da temperatura, a discretização do termo convectivo resultou em um esquema explícito para o avanço no tempo.

Desta forma, para avaliar o valor da temperatura no tempo $n + 1$, procede-se da seguinte maneira: os termos convectivo e dissipativo são avaliados no tempo n , e o termo

de condução definirá o esquema de diferenças finitas empregado, podendo ser avaliado no tempo n , resultando em um esquema explícito, o tempo $n + 1$, resultando em um esquema implícito, ou em ambos os tempos, fazendo-se uma média entre eles, resultando em um esquema de Crank-Nicolson.

7.1.2.1 Método de Diferenças Finitas Explícito

Neste caso é usada uma aproximação de diferenças centradas, de segunda ordem, para o termo espacial:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \approx \frac{T_{k+1}^n - 2T_k^n + T_{k-1}^n}{(dz)^2} \quad (7.29)$$

Usando essa relação, a equação (7.8) pode ser escrita como:

$$T_{i,k}^{n+1} = T_{i,k}^n - dt [\vec{v} \cdot \nabla T]_{i,k}^n + \frac{dt}{\rho c_p} \left([\eta \dot{\gamma}^2]_{i,k}^n + k \frac{T_{i,k+1}^n - 2T_{i,k}^n + T_{i,k-1}^n}{dz^2} \right) \quad (7.30)$$

Para garantir a estabilidade da solução da equação (7.30), usando um esquema de diferenças finitas explícito, é necessário:

$$\begin{aligned} M &= \frac{kdt}{\rho c_p (dz)^2} \\ &\leq \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (7.31)$$

7.1.2.2 Método de Diferenças Finitas Implícito

Uma técnica implícita de solução tem a vantagem de ser incondicionalmente estável para qualquer tamanho de passo no tempo [Kennedy, 1995]. Entretanto é mais caro computacionalmente do que o esquema explícito utilizado acima.

Como no caso explícito, se a equação é resolvida no tempo t^{n+1} , então os termos de convecção e dissipação viscosa do tempo anterior podem ser adicionados como termos fonte à equação da condução.

Usando uma equação de diferenças progressivas de dois pontos para a derivada temporal e uma equação de diferenças centradas de três pontos para a derivada espacial, tem-se:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \approx \frac{T_{k+1}^{n+1} - 2T_k^{n+1} + T_{k-1}^{n+1}}{(dz)^2} \quad (7.32)$$

Substituindo essas expressões em (7.8) obtém-se:

$$T_{i,k}^{n+1} = T_{i,k}^n - dt [\vec{v} \cdot \nabla T]_{i,k}^n + \frac{dt}{\rho c_p} \left([\eta \dot{\gamma}^2]_{i,k}^n + k \frac{T_{i,k+1}^{n+1} - 2T_{i,k}^{n+1} + T_{i,k-1}^{n+1}}{dz^2} \right) \quad (7.33)$$

e rearranjando os termos, obtém-se:

$$-MT_{i,k+1}^{n+1} + (1 + 2M)T_{i,k}^{n+1} - MT_{i,k-1}^{n+1} - dt [\vec{v} \cdot \nabla T]_{i,k}^n + \frac{dt}{\rho c_p} [\eta \dot{\gamma}^2]_{i,k}^n \quad (7.34)$$

onde

$$M = \frac{k dt}{\rho c_p (dz)^2} \quad (7.35)$$

Os valores desconhecidos de T em qualquer novo tempo t^{n+1} são encontrados escrevendo a equação (7.34) para cada nó preenchido no modelo. Essas equações podem ser arranjadas numa matriz na forma a seguir:

$$\Lambda T^{n+1} = b \quad (7.36)$$

onde Λ é uma matriz quadrada, T^{n+1} é uma matriz coluna dos valores desconhecidos de T no novo tempo e b é uma matriz coluna dos antigos valores de T e termos fonte associados com os termos de convecção e dissipação viscosa. A equação matricial é resolvida para T^{n+1} usando o Algoritmo de Thomas [Fortuna, 2000].

7.1.2.3 Método de Crank Nicolson Generalizado

O método de Crank Nicolson é construído fazendo uma média entre os esquemas explícito e implícito. Se essa média for ponderada de um critério α , então o método pode ser considerado um método de Crank-Nicolson Generalizado.

Neste caso, a equação da temperatura discretizada é dada por:

$$\begin{aligned} T_{i,k}^{n+1} = & T_{i,k}^n - dt [\vec{v} \cdot \nabla T]_{i,k}^n + \frac{dt}{\rho c_p} [\eta \dot{\gamma}^2]_{i,k}^n \\ & + \frac{dt}{\rho c_p} \left(\alpha k \frac{T_{i,k+1}^{n+1} - 2T_{i,k}^{n+1} + T_{i,k-1}^{n+1}}{dz^2} + (1 - \alpha) k \frac{T_{i,k+1}^n - 2T_{i,k}^n + T_{i,k-1}^n}{dz^2} \right) \end{aligned} \quad (7.37)$$

Para $\alpha = 0$ teremos o método explícito, para $\alpha = 1$ teremos o método implícito, para $\alpha = 0.5$ teremos o método de Crank-Nicolson. Para outros valores de α teremos o método de Crank-Nicolson Generalizado.

7.2 Considerações Finais

Neste capítulo foi apresentada a estratégia de solução da equação da temperatura tridimensional. O termo convectivo foi discretizado utilizando um método semi-Lagrangeano e a estratégia para a sua aproximação, em cada triângulo, também foi apresentada. A estratégia para a aproximação do termo de dissipação viscosa, cuja viscosidade para cada célula e cada camada de fluido é determinada utilizando o método de Newton, também foi

apresentada neste capítulo. O termo de condução apresenta segunda derivada com relação a z e sua discretização determina se o método de solução da equação da temperatura é explícito, implícito ou semi-implícito (Crank-Nicolson).

O campo de distribuição de temperatura é determinado para todos os volumes de controle que já estão cheios de fluido (direções x e y) e também nas N_z camadas determinadas (direção z).

O próximo capítulo trata da validação do método numérico implementado neste trabalho de mestrado, tanto com relação ao campo hidrodinâmico, que se relaciona com a pressão e a velocidade, à posição da superfície livre e também com relação à discretização do termo convectivo da equação da temperatura.

Validação do Modelo

Neste capítulo serão validados os cálculos da equação da pressão, da velocidade e da posição da superfície livre e dos termos convectivos presentes nos modelos para a equação da temperatura em duas e três dimensões. Para validar, simultaneamente, as estratégias de solução para pressão, velocidade e posição da superfície livre desenvolvidas neste trabalho foram simulados dois problemas físicos com soluções analíticas conhecidas, de modo a comparar os resultados. Uma terceira validação do código foi feita comparando os resultados obtidos com os resultados apresentados por Chang e Yang [Chang e Yang, 2001]. Para validar a aproximação do termo convectivos dos modelos para a equação da temperatura e a estratégia de solução, o resultado obtido neste trabalho é comparado com uma solução analítica.

8.1 Validações para os Cálculos dos Campos de Pressão, Velocidade e Posição da Superfície Livre

Analisando a equação de Hele-Shaw, tem-se que o campo de pressão é dependente da fluidez do polímero, que, por sua vez, depende da viscosidade. A viscosidade é função da temperatura e da taxa de cisalhamento, que depende da velocidade. Por outro lado, a velocidade depende do gradiente de pressão e a posição da superfície livre depende da velocidade. Portanto, nessa seção serão apresentadas as validações destes três aspectos simultaneamente: o campo de pressão, o campo de velocidade e a posição da superfície livre.

8.1.1 O Escoamento em um Canal

Considere um canal bidimensional de dimensões $1m \times 0,1m$, conforme o ilustrado na Figura 8.1:

Figura 8.1: Molde em formato retangular (canal bidimensional).

A malha não estruturada triangular gerada sobre este canal sobre a qual serão feitos os cálculos da solução do problema foi gerada pelo *Easymesh* [Niceno, 2001]. Dois exemplos de malhas, uma mais grossa e outra mais fina, geradas sobre o canal são ilustrados na Figura 8.2.

Figura 8.2: Malhas com 423 e 2393 elementos, geradas pelo Easymesh [Niceno, 2001].

8.1.1.1 Condições do Escoamento

Nesta simulação, as condições do escoamento do fluido são dadas por:

- O fluido é considerado Newtoniano;
- O escoamento é considerado isotérmico. Então, a temperatura de injeção do fluido é igual à temperatura do molde, ou seja, $T_{inj} = T_w = 313 K$;
- Densidade do fluido: $\rho = 1000 kg/m^3$;
- Viscosidade do fluido: $\eta_0 = 10000 Ns/m^2$;
- Condutividade térmica do fluido: $k = 0,18 W/mK$;
- Velocidade de injeção: $v_0 = 0,5 m/s$;
- Pressão de referência na cavidade: $p_0 = 10^7 N/m^2$;
- Espessura da cavidade: $h = 0,002 m$;

Ao considerar o fluido Newtoniano e a espessura da cavidade constante, é possível simplificar a equação para a fluidez (2.67) e obter:

$$S_2 = \frac{1}{3} \frac{h^3}{\eta_0} \quad (8.1)$$

8.1.1.2 Solução Analítica

Para construir uma expressão para a solução analítica em um canal bidimensional, vamos considerar os dados do escoamento conforme os descritos da Seção 8.1.1.1. Tem-se, da equação da velocidade (6.10), que:

$$\bar{v}_x = -\frac{S_2}{h} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (8.2)$$

Considerando que a componente x velocidade ao longo do canal é constante e que a componente y é nula, encontramos uma expressão para o gradiente de p :

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\bar{v}_x \frac{h}{S_2} \quad (8.3)$$

Por outro lado, considerando que a distribuição de pressão é linear, é possível escrevê-la usando a série de Taylor

$$P(x + \Delta L) = P + \Delta L \frac{\partial p}{\partial x} \quad (8.4)$$

donde

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{P(x + \Delta L) - P}{\Delta L} \quad (8.5)$$

onde ΔL é o deslocamento do fluido, $P(x + \Delta L) = P_0$ é a pressão na superfície livre e $P(x) = P_{inj}$ é a pressão na região de injeção. Então:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{P_0 - P_{inj}}{\Delta L} \quad (8.6)$$

Como a pressão na superfície livre é nula, a equação (8.6) pode ser escrita como:

$$P_{inj} = -\Delta L \frac{\partial p}{\partial x} \quad (8.7)$$

Substituindo a equação (8.3) na equação (8.7), tem-se que

$$P_{inj} = P_0 + \bar{v}_x \Delta L \frac{h}{S_2} \quad (8.8)$$

onde $\Delta L = \bar{v}_x t$ é o deslocamento da superfície livre no tempo t .

8.1.1.3 Comparação entre as Soluções

Simulando o escoamento com características descritas na Seção 8.1.1.1, e conhecendo a solução analítica para esse escoamento, é possível comparar as soluções obtidas e avaliar a precisão e a robustez do método numérico desenvolvido.

Uma comparação quantitativa entre as soluções analítica e numéricas usando as malhas descritas na Figura 8.2, é ilustrada na Figura 8.3.

Figura 8.3: Comparação entre as soluções numéricas e analítica da simulação da injeção de fluido em um molde em formato retangular. O gráfico ilustra a pressão de injeção em função do tempo de injeção.

A Figura 8.3 mostra que há uma boa concordância entre os perfis numéricos e analíticos, tanto utilizando uma malha mais fina, quanto utilizando a malha grossa.

8.1.2 O Escoamento em um Disco

Considere um disco de raios r_1 e r_2 , conforme o ilustrado na Figura 8.1:

Figura 8.4: Molde em formato de disco, cuja injeção é realizada pelo disco interior, de raio r_1 .

As malhas não estruturadas triangulares geradas sobre este molde sobre a qual serão feitos os cálculos da solução do problema, analogamente ao caso anterior, foram geradas

pelo *Easymesh* [Niceno, 2001]. Dois exemplos de malhas, uma mais grossa e outra mais fina, geradas sobre o disco são ilustradas na Figura 8.5.

Figura 8.5: Malhas com 617 e 4989 elementos, geradas pelo Easymesh [Niceno, 2001] sobre o molde em forma de disco.

8.1.2.1 Condições do Escoamento

Nesta simulação, as condições do escoamento do fluido são dadas por:

- O fluido é considerado Newtoniano, ou seja a viscosidade é constante;
- O escoamento é considerado isotérmico. Então, a temperatura de injeção do fluido é igual à temperatura do molde, ou seja, $T_{inj} = T_w = 313\text{ K}$;
- Densidade do fluido: $\rho = 1000\text{ kg/m}^3$;
- Viscosidade do fluido: $\eta_0 = 10000\text{ N s/m}^2$;
- Condutividade térmica do fluido: $k = 0,18\text{ W/mK}$;
- Velocidade de injeção: $v_0 = 0,33\text{ m/s}$;
- Pressão de referência na cavidade: $p_0 = 10^7\text{ N/m}^2$;
- Espessura da cavidade: $h = 0,002\text{ m}$;

8.1.2.2 Solução Analítica

Para encontrarmos uma solução analítica deste problema, vamos primeiramente recordar alguns operadores como o divergente e o gradiente, em termos de coordenadas cilíndricas.

1. Divergente:

Em coordenadas cilíndricas, a velocidade $\vec{v} = \vec{v}(r, \theta, z)$ tem componentes v_r , v_θ e v_z .

Para um vetor $\vec{v} = (v_r, v_\theta, v_z)$, o divergente de $\vec{v}$ é definido por:

$$(\nabla \cdot \vec{v}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (8.9)$$

2. Gradiente:

O gradiente de uma função escalar $\psi = \psi(r, \theta, z)$ é definido por:

$$(\nabla\psi) = \frac{\partial\psi}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\vec{e}_\theta + \frac{\partial\psi}{\partial z}\vec{e}_z \quad (8.10)$$

Usando essas relações e considerando a fluidez S_2 constante, é possível escrever a equação da velocidade na direção radial v_r e a da pressão (6.2) da seguinte maneira:

$$v_r = \frac{S_2}{h} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (8.11)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (8.12)$$

Analogamente aos casos anteriores, considera-se o escoamento simétrico. Neste caso, tem-se que derivada com relação à θ é nula, ou seja, a equação da pressão em coordenadas cilíndricas pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right) = 0 \quad (8.13)$$

Como a pressão é função de uma só variável, as derivadas parciais são reduzidas a derivadas totais:

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{dp}{dr} \right) = 0 \quad (8.14)$$

Integrando a equação (8.14) obtém-se:

$$r \frac{dp}{dr} = c_1 \quad (8.15)$$

donde

$$dp = \frac{c_1}{r} dr \quad (8.16)$$

É possível encontrar uma expressão para a pressão integrando a equação (8.16):

$$p = c_1 \ln |r| + c_2 \quad (8.17)$$

Os valores das constantes c_1 e c_2 são obtidos aplicando as condições de contorno para a pressão à equação (8.17).

Condições de contorno para a pressão no disco

As condições de contorno para a pressão definidas em um disco conforme o ilustrado na Figura 8.5 são definidas por:

1. Em $r = r_2$ a pressão é definida como sendo nula (pressão na superfície livre);
2. Em $r = r_1$, o gradiente de pressão na direção radial é prescrito, ou seja:

$$\frac{dp}{dr} = b \quad (8.18)$$

onde b é conhecido e dado pela equação (8.11) fazendo $r = r_1$:

$$b = -\frac{h}{S_2}v_{r_1} \quad (8.19)$$

Aplicando a primeira condição de contorno na equação (8.17), tem-se que

$$0 = c_1 \ln(r_1) + c_2 \Rightarrow c_2 = -c_1 \ln(r_1) \quad (8.20)$$

e substituindo a segunda condição de contorno na equação (8.15), encontramos um valor para a constante c_1 :

$$\frac{dp}{dr} = \frac{c_1}{r} \Rightarrow c_1 = br \quad (8.21)$$

Substituindo esta expressão em (8.20), tem-se que

$$c_2 = -br \ln(r_1) \quad (8.22)$$

Assim, a equação para a pressão em coordenadas cilíndricas (8.17) pode ser escrita como:

$$p = br(\ln(r) - \ln(r_1)) \quad (8.23)$$

A equação da pressão dependente do tempo

O volume V de fluido injetado em um molde durante o tempo t é dado por:

$$V(t) = v_{inj}A_{inj}t \quad (8.24)$$

onde v_{inj} é a velocidade de injeção e $A_{inj} = 2\pi r_1 h$ é a área de injeção do fluido.

No tempo t vamos considerar que o volume de fluido seja V_T , ou seja,

$$V(t) = V_T \quad (8.25)$$

Este volume corresponde ao volume do disco compreendido entre os raios r_1 e o raio da superfície livre r_s , donde

$$V_T = V_2 - V_1 \quad (8.26)$$

com V_1 sendo o volume do disco de raio r_1 e V_s o volume do disco de raio da superfície livre r_s .

Assim, é possível escrever V_T em termos dos raios r_1 e r_s :

$$V_T = V_s - V_1 \quad \Rightarrow \quad V_T = \pi r_s^2 h - \pi r_1^2 h \quad (8.27)$$

Igualando as equações (8.24) e (8.27),

$$v_{inj} 2\pi r_1 h t = \pi h (r_s^2 - r_1^2) \quad (8.28)$$

donde

$$r_s = \sqrt{r_1^2 + 2r_1 v_{inj} t} \quad (8.29)$$

Finalmente, substituindo as expressões (8.19) e (8.29) na expressão (8.23) obtém-se uma equação para a pressão como variável dependente do tempo:

$$p = -rh \frac{v_{r_1}}{S_2} \left(\ln(r) - \frac{1}{2} \ln(r_1^2 + 2r_1 v_{inj} t) \right) \quad (8.30)$$

8.1.2.3 Comparação entre as Soluções

Simulando o escoamento com características descritas na Seção 8.1.2.1, e conhecendo a solução analítica para esse escoamento, é possível comparar as soluções obtidas e avaliar, mais uma vez, a precisão do método numérico desenvolvido.

Uma comparação quantitativa entre as soluções analítica e numéricas para a pressão de injeção ($r = r_1$) usando as malhas descritas na Figura 8.5, é ilustrada na Figura 8.6:

Figura 8.6: Comparação entre as soluções numéricas e analítica da simulação da injeção de fluido em um molde em formato de disco. O gráfico ilustra a pressão de injeção em função do tempo de injeção.

Novamente, a Figura 8.6 mostra que há uma boa concordância entre os perfis numéricos e analíticos, que aumenta conforme refinamos a malha.

8.1.3 O Escoamento em uma Placa Retangular com um Canal de Entrada

Considere uma placa retangular dimensões $0,15 \times 0,1 \times 0,02$ m, com um canal de entrada, conforme o ilustrado na Figura 8.7.

Figura 8.7: Molde em forma de uma placa retangular com um canal de entrada.

A malha não estruturada utilizada nesta simulação também foi gerada pelo *Easymesh* [Niceno, 2001] e é ilustrada na Figura 8.8. Ela apresenta 2995 volumes de controle. A malha utilizada por Chang e Yang é estruturada e apresenta 5840 volumes de controle.

Figura 8.8: Malha não estruturada gerada sobre a placa com 2995 volumes de controle.

8.1.3.1 Condições do Escoamento

Nesta simulação, as condições do escoamento do fluido são dadas por:

- O fluido é considerado Newtoniano;
- O escoamento é considerado isotérmico. Então, a temperatura de injeção do fluido é igual à temperatura do molde, ou seja, $T_{inj} = T_w = 313$ K;
- Densidade do fluido: $\rho = 1000$ kg/m³;
- Viscosidade do fluido: $\eta_0 = 7700$ Ns/m²;
- Condutividade térmica do fluido: $k = 0,18$ W/mK;
- Velocidade de injeção: $v_0 = 0,395$ m/s;

- Pressão de referência na cavidade: $p_0 = 10^7 \text{ N/m}^2$;
- Espessura da cavidade: $h = 0,002 \text{ m}$;

No trabalho de Chang e Yang o tempo necessário para o total preenchimento do molde é uma variável definida no início da simulação e é dada por $t = 2 \text{ s}$. Desta forma, para que nesta simulação o tempo de injeção também seja de 2 segundos, a equação (8.24) é utilizada para definir a velocidade de injeção, logo:

$$\begin{aligned}
 v_0 &= \frac{V}{A_{inj}t} \\
 &= \frac{Ah}{lht} \\
 &= \frac{A}{lt}
 \end{aligned} \tag{8.31}$$

Para este problema, $A = 0,0158 \text{ m}^2$, $h = 0,002 \text{ m}$ e o tempo escolhido é $t = 2 \text{ s}$, donde $v_0 = 0,395 \text{ m/s}$.

8.1.3.2 Comparação entre as Soluções

Uma comparação entre a solução numérica obtida neste trabalho e os resultados obtidos por Chang e Yang é apresentada na Figura 8.9.

Figura 8.9: Comparação entre a solução obtida neste trabalho e as soluções apresentadas por Chang e Yang. O gráfico ilustra curva da pressão de injeção em função do tempo de injeção.

Pode-se observar uma concordância muito boa entre os resultados do modelo $2^{1/2}D$ de Chang e Yang e os do presente trabalho, validando, portanto, o modelo para o campo hidrodinâmico (pressão e velocidade) e para a correta predição da posição da superfície livre para o caso de geometrias arbitrariamente complexas.

8.1.4 Observações

Nesta seção foram apresentadas três validações realizadas simultaneamente para os cálculos dos campos de pressão e velocidade e para a correta predição da posição da superfície livre. Estas três simulações mostram, para o caso do escoamento de um fluido Newtoniano desacoplado da temperatura, resultados extremamente satisfatórios, validando o código desenvolvido.

8.2 Validação do Campo da Temperatura

A equação da temperatura é composta por termos de convecção, difusão e condução. Dentre eles, o termo convectivo é o que mais representa dificuldades quanto a discretização numérica e está presente em ambas formulações bidimensional e tridimensional para a temperatura. Nessa seção será validada a discretização deste termo na equação bidimensional, utilizando um referencial semi-Lagrangeano.

8.2.1 O Escoamento em um Canal

Nesta validação será considerado o escoamento em um canal, conforme ilustrado anteriormente na Figura 8.1. As malhas não estruturadas triangulares geradas sobre este canal também foram ilustradas na Figura 8.2.

8.2.1.1 Condições do Escoamento

Nesta simulação, as condições do escoamento do fluido são dadas por:

- O fluido é considerado Newtoniano;
- O escoamento é considerado não-isotérmico. Então, a temperatura de injeção do fluido é $T_{inj} = 513\text{ K}$ e a temperatura do molde é dada por $T_w = 313\text{ K}$;
- Densidade do fluido: $\rho = 1000\text{ kg/m}^3$;
- Viscosidade do fluido: $\eta_0 = 10000\text{ Ns/m}^2$, e mais, como o fluido é Newtoniano, tem-se que $\eta_c = \eta_w$;
- Condutividade térmica do fluido: $k = 0,18\text{ W/mK}$;
- Velocidade: $v_0 = 0,01\text{ m/s}$;
- Pressão de referência na cavidade: $p_0 = 10^7\text{ N/m}^2$;
- Espessura da cavidade: $h = 0,01\text{ m}$;

8.2.1.2 Solução Analítica

Para construir uma expressão para a solução analítica em uma placa retangular simples, vamos considerar os dados do escoamento conforme os descritos da Seção 8.2.1.1. Considerando uma formulação Euleriana para o escoamento nesta placa, a temperatura $T(\vec{x}, t)$, onde $\vec{x} = (x, y)$, pode ser escrita como $T(\xi, t)$, com $\vec{x} = \vec{x}(\xi)$.

O vetor posição $\vec{x}(\xi)$ é dado por:

$$\vec{x}(\xi) = \xi + V_0 t \quad (8.32)$$

onde V_0 é a velocidade de injeção do fluido e t é o tempo.

Segundo a equação (6.12), para os valores médios de T , tem-se que

$$\frac{D\bar{T}}{Dt} = \bar{f} \quad (8.33)$$

donde

$$\frac{D\bar{T}}{Dt} = \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{3}{5h^2} (\bar{v}_y^2 + \bar{v}_x^2) (2\eta_c + 3\eta_w) + \frac{3k}{h^2} (\bar{T} - T_w) \right) \quad (8.34)$$

que, para ξ e viscosidade constantes, pode ser reescrita como:

$$\left. \frac{d\bar{T}}{dt} \right|_{\xi \text{ constante}} = \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{3\eta_0}{h^2} (\bar{v}_y^2 + \bar{v}_x^2) + \frac{3k}{h^2} (\bar{T} - T_w) \right) \quad (8.35)$$

Considerando que a componente da velocidade na direção- y seja nula, é possível reescrever a equação (8.35) e obter:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\bar{T}}{dt} \right|_{\xi \text{ constante}} &= \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{3\eta_0}{h^2} \bar{v}_x^2 + \frac{3k}{h^2} T_w \right) + \frac{3k}{h^2 \rho c_p} \bar{T} \\ &= c_0 + c_1 \bar{T} \end{aligned} \quad (8.36)$$

Portanto, a equação (8.36) é uma equação diferencial ordinária da forma

$$\bar{T}' + c_1 \bar{T} - c_0 = 0 \quad (8.37)$$

e admite solução analítica, dada por [Boyce e DiPrima, 1969]:

$$\begin{aligned} \bar{T} &= e^{-c_1 x} \int^x e^{c_1 t} dt + c e^{-c_1 x} \\ &= \frac{c_0}{c_1} + c e^{-c_1 x} \end{aligned} \quad (8.38)$$

Lembrando que em $x = 0$, tem-se $T = T_{inj}$, então a equação (8.38) é escrita como:

$$\bar{T} = \frac{c_0}{c_1} + T_{inj} e^{-c_1 x} \quad (8.39)$$

8.2.1.3 Comparação entre as Soluções

Simulando o escoamento com características descritas na Seção 8.2.1.1, e conhecendo a solução analítica para esse escoamento, é possível comparar as soluções obtidas e avaliar, mais uma vez, a precisão do método numérico desenvolvido, agora para o cálculo da temperatura.

Uma comparação qualitativa entre as soluções analítica e numérica para a distribuição bidimensional para a temperatura é ilustrada na Figura 8.10.

Figura 8.10: Comparação entre as soluções analítica e numéricas, obtidas usando as malhas com 423 e 2393 elementos e o modelo bidimensional para a temperatura.

A Figura 8.10 ilustra a concordância entre os perfis numérico e analítico, e além disso, ilustra também o aumento da qualidade da solução numérica com o refinamento da malha.

8.2.2 Observações

A simulação do escoamento de um fluido Newtoniano de viscosidade constante em condições não-isotérmicas e a conseqüente comparação dos resultados obtidos com a solução analítica validou o código desenvolvido, especialmente com relação à estratégia de discretização dos termos convectivos, utilizando um referencial semi-Lagrangeano, presentes nos dois modelos da equação da temperatura.

8.3 Considerações Finais

Neste capítulo foram apresentadas validações para a solução da equação da pressão, do campo de velocidades, da posição da superfície livre e do termo convectivo presente tanto na equação bidimensional para a temperatura, quanto na tridimensional, para o caso de fluidos Newtonianos.

Os resultados obtidos utilizando o código desenvolvido, quando comparados com solu-

ções analíticas e com os resultados apresentados por outros autores, revelam a qualidade da solução obtida e a conseqüente robustez da ferramenta desenvolvida.

Nesse sentido, tendo sido validado o código, a próxima etapa consiste em simular algumas situações no que diz respeito ao preenchimento de um molde e analisar os resultados obtidos. Esta etapa será descrita no Capítulo [9](#).

Resultados Numéricos

Neste capítulo são apresentados alguns dos resultados obtidos utilizando-se a ferramenta de simulação desenvolvida neste trabalho de mestrado, lembrando que o seu objetivo é simular a fase de preenchimento de um processo de moldagem por injeção. Os resultados apresentados são referentes a simulações de fluidos não Newtonianos e não isotérmicos, tendo sido utilizados ambos os modelos, bidimensional e tridimensional, para a equação da temperatura e dois tipos de condições de contorno para a pressão na região de injeção: pressão prescrita e velocidade prescrita.

9.1 Escoamentos com Velocidade de Injeção Prescrita

Esta seção apresenta algumas das várias simulações realizadas com condição de contorno do tipo velocidade prescrita. São elas: o preenchimento de um molde retangular, o preenchimento de um molde retangular com contração, o preenchimento de uma molde usando duas regiões de injeção e a simulação do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções.

As condições do escoamento comuns a todas essas simulações são:

- Viscosidade do fluido:

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

com

$$\eta_0(T) = B \exp \left(\frac{T_b}{T} \right)$$

onde $n = 0,2838$, $\tau^* = 1,791 \times 10^4 \text{ Pa}$, $B = 2,591 \times 10^{-7} \text{ Pas}$ e $T_b = 11680 \text{ K}$.

- Temperatura de injeção: $T_{inj} = 513 \text{ K}$;

- Temperatura das paredes do molde: $T_w = 313\text{ K}$;
- Condutividade térmica do fluido: $k = 0,18\text{ W/mK}$;
- Densidade do fluido: $\rho = 1000\text{ kg/m}^3$;
- Calor específico do fluido: $c_p = 2100\text{ J/KgK}$;
- Pressão de referência na cavidade: $p_0 = 10^5\text{ N/m}^2$;
- Espessura da cavidade: $h = 0,01\text{ m}$;
- Número de camadas para a solução da equação da energia tridimensional: $N_z = 5$;
- Velocidade de injeção prescrita: $v_0 = 0,01\text{ m/s}$.

9.1.1 Preenchimento de uma Placa Retangular

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações numéricas do preenchimento de uma placa retangular, conforme ilustrado na Figura 9.1:

Figura 9.1: Molde em forma de placa retangular.

A malha não estruturada utilizada nessa simulação é ilustrada na Figura 9.2.

Figura 9.2: Malha não estruturada gerada sobre o molde em forma de placa retangular com 313 elementos e 180 volumes finitos.

9.1.1.1 Resultados Obtidos

As figuras 9.3, 9.4, 9.5 e 9.6 mostram os resultados obtidos para a distribuição da pressão, velocidade, temperatura tridimensional e bidimensional, respectivamente, durante a simulação numérica do preenchimento de um molde em forma de placa retangular. São ilustrados quatro estágios da simulação, quando $t = 5,09\text{ s}$, $t = 17,23\text{ s}$, $t = 31,75\text{ s}$ e $t = 46,37\text{ s}$.

Os perfis da distribuição da temperatura ao longo do molde, isto é a evolução da distribuição da temperatura com relação tanto ao comprimento do molde, quanto com relação à camada são apresentados na Figura 9.7, podendo também ser analisados utilizando a Figura 9.8. O perfil da distribuição da temperatura bidimensional ao longo do molde e o perfil da média da temperatura tridimensional são ilustrados nas figuras 9.9 e 9.10.

Figura 9.3: Quatro estágios da solução da equação da pressão para o caso de velocidade de injeção prescrita durante o preenchimento do molde retangular. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$.

Figura 9.4: Vetores velocidade obtidos após o cálculo do campo da pressão para o preenchimento de um molde retangular.

Figura 9.5: Quatro estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade, ou seja, $z = 0$, durante o preenchimento do molde com velocidade de injeção prescrita.

Figura 9.6: Quatro estágios da solução da equação da energia bidimensional, para o caso de velocidade de injeção prescrita.

Figura 9.7: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ m, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01$ m é prescrita e dada por $T_w = 313$ K.

Figura 9.8: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ m, respectivamente, ao final da injeção. A temperatura da última camada ($z = 0,01$) é prescrita e dada por $T_w = 313$ K.

Figura 9.9: Perfis da distribuição da temperatura bidimensional (a) e da média entre os perfis da temperatura tridimensional (b) ao longo do molde retangular.

Figura 9.10: Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, plotados ao final da injeção.

Usando a Figura 9.10 para comparar os perfis obtidos pelo modelo bidimensional para a equação da temperatura e pela média dos valores da temperatura tridimensional nas cinco camadas do molde, pode-se observar que o modelo bidimensional resultou em uma aproximação bastante razoável para a temperatura média no molde.

Os resultados ilustrados nas figuras 9.3 a 9.10 foram obtidos utilizando uma discretização espacial em z que considera cinco camadas, ou seja, $N_z = 5$. Para ilustrar uma quantidade maior de perfis de temperatura tridimensional, são consideradas agora mais camadas na direção- z , dadas por $N_z = 13$, $N_z = 21$ e $N_z = 33$ camadas. Os perfis de temperatura tridimensional, considerando essas quantidades de camadas, são ilustrados na Figura 9.11.

Tendo sido consideradas também 13, 21 e 33 camadas para a discretização espacial em z , as aproximações para os perfis da temperatura tridimensional nas camadas comuns a essas discretizações do molde podem ser comparadas. Neste caso, as camadas comuns ocorrem quando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ metros, e a comparação entre elas está ilustrada na Figura 9.12. Para uma melhor visualização dos resultados considerados, algumas camadas da discretização espacial na direção- z foram omitidas. A Figura 9.13 ilustra a comparação entre as temperaturas bidimensionais e as médias das temperaturas tridimensionais nestes quatro casos de quantidade de camadas.

Figura 9.11: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente.

Figura 9.12: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$.

Figura 9.13: Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.

Analisando a Figura 9.13 pode-se observar que a média da temperatura tridimensional se aproxima da temperatura bidimensional conforme o número de camadas na direção- z diminui.

9.1.1.2 Observações

O tempo exato para o completo preenchimento desse molde, baseado na conservação de massa, nessas condições de escoamento, pode ser calculado utilizando a equação (9.1):

$$t = \frac{A}{l v_0} \quad (9.1)$$

sendo A a área do molde, l o comprimento da região de injeção e v_0 a velocidade de injeção do fluido.

De acordo com a equação (9.1), o tempo exato para o preenchimento do molde é de 50 segundos e, de acordo com a simulação, o tempo de injeção necessário para o total preenchimento do molde foi 49,41 segundos, o que corresponde a um erro de apenas 1,18% em relação ao tempo exato.

Simulando o escoamento nas condições descritas anteriormente, mas utilizando uma malha com 544 volumes de controle e 1003 elementos, o tempo de injeção predito passa a ser de $t = 49,82 \text{ s}$ resultando em um erro de 0,36%.

9.1.2 Preenchimento de uma Placa com uma Contração

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações numéricas do preenchimento de uma placa retangular com uma contração na região central, conforme ilustrado na Figura 9.14.

Figura 9.14: Molde em forma de placa retangular com contração.

A malha não estruturada utilizada nessa simulação é ilustrada na Figura 9.15.

Figura 9.15: Malha não estruturada gerada sobre o molde com 299 volumes finitos e 507 elementos.

9.1.2.1 Resultados Obtidos

Os resultados obtidos com a simulação numérica do preenchimento do molde retangular com uma contração são ilustrados nas figuras 9.16, 9.18 e 9.17. Seis estágios da solução da equação da pressão, da temperatura tridimensional e do campo de velocidades, são apresentados. As figuras foram obtidas para $t = 4,42 s$, $t = 7,21 s$, $t = 8,00 s$, $t = 9,77 s$, $t = 11,83 s$ e $t = 15,57 s$.

A Figura 9.20 ilustra os perfis da distribuição da temperatura ao longo do molde ao final da injeção para $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075 m$, e a Figura 9.21 ilustra o perfil da distribuição da temperatura bidimensional, juntamente com perfil da média da temperatura tridimensional. Em ambos os casos são ilustrados os valores da temperatura para os pontos (x, y) da malha, tais que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$ ao término do preenchimento do molde.

Os resultados ilustrados nas figuras 9.16 a 9.21 foram obtidos utilizando uma discretização espacial em z que considera cinco camadas, ou seja, $N_z = 5$. Para ilustrar uma quantidade maior de perfis de temperatura tridimensional, são consideradas agora mais camadas na direção- z , dadas por $N_z = 13$, $N_z = 21$ e $N_z = 33$ camadas. Os perfis de temperatura tridimensional, considerando essas quantidades de camadas, são ilustrados na Figura 9.22.

As aproximações para os perfis da temperatura tridimensional nas camadas comuns a essas três discretizações do molde podem ser comparadas. Neste caso, as camadas comuns ocorrem quando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ metros, e a comparação entre elas está ilustrada na Figura 9.23. A Figura 9.24 ilustra a comparação entre as temperaturas bidimensionais e as médias das temperaturas tridimensionais nestes quatro casos de quantidade de camadas.

Analisando a Figura 9.24 pode-se observar, mais uma vez, que a média da temperatura tridimensional se aproxima da temperatura bidimensional conforme o número de camadas na direção- z diminui.

9.1.2.2 Observações

O tempo de injeção necessário para o total preenchimento do molde foi 16,35 segundos, de acordo com a simulação, o que corresponde a um erro de 1,86% em relação ao tempo exato, que, para essa simulação, segundo a equação (9.1), é de 16,66 segundos. Simulando o escoamento nas mesmas condições, mas com uma malha mais fina, com 2695 elementos e 1450 volumes finitos, o tempo previsto para o completo preenchimento do molde é de 16,55 segundos, o que representa um erro de apenas 0,66%.

A variação de temperatura no plano central da cavidade, isto é, quando $z = 0$, nas condições do escoamento é da ordem de 0,02 graus. Apesar de ser uma variação pouco sig-

Figura 9.16: Seis estágios da solução da equação da pressão para o caso de velocidade de injeção prescrita em um molde retangular com uma contração. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$.

nificativa, deve-se observar que, segundo a simulação, ela ocorre nas regiões mais próximas à contração, devido à baixa velocidade do fluido nessas regiões. No entanto, as outras camadas sofrem variações de temperatura mais acentuadas.

Figura 9.17: Vetores velocidade do preenchimento de um molde retangular com uma contração.

Figura 9.18: Seis estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade, ou seja, $z = 0$, para o caso de velocidade de injeção prescrita.

Figura 9.19: Seis estágios da solução da equação da energia bidimensional para o caso de velocidade de injeção prescrita.

Figura 9.20: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular com contração, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ m, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01$ é prescrita e dada por $T_w = 313$ K.

Figura 9.21: Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, do molde em formato retangular com uma contração.

Figura 9.22: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente.

Figura 9.23: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$.

Figura 9.24: Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,03$ e $0 \leq x \leq 0,2$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.

9.1.3 Preenchimento de uma Placa com Duas Regiões de Injeção

Nesta seção serão apresentados os resultados das simulações numéricas do preenchimento de uma placa retangular, conforme ilustrado na Figura 9.25.

Figura 9.25: Molde em forma de placa retangular com contração.

A malha não estruturada utilizada nesta simulação é ilustrada na Figura 9.26.

Figura 9.26: Malha não estruturada gerada sobre o molde com 318 elementos e 554 volumes finitos.

9.1.3.1 Resultados Obtidos

Nas figuras 9.27, 9.28, 9.29, 9.30, 9.31 são ilustrados o campo de pressão, o de velocidade o avanço da superfície livre e os campos de temperatura tridimensional para o plano central da cavidade, e o da temperatura bidimensional, respectivamente. Seis estágios do preenchimento do molde são ilustrados, a saber, quando $t = 17,91 s$, $t = 49,63 s$, $t = 78,73 s$, $t = 83,24 s$, $t = 89,07 s$ e $t = 123,38 s$, respectivamente.

Na Figura 9.32 são ilustrados os perfis da distribuição da temperatura ao longo do molde ao final da injeção para $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075 m$, e na Figura 9.33 são ilustrados o perfil da distribuição da temperatura bidimensional e perfil da média da temperatura tridimensional. Em ambos os casos são ilustrados os valores da temperatura para os pontos (x, y) da malha tais que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$ ao término do preenchimento do molde.

Conforme discutido anteriormente, os resultados ilustrados nas figuras 9.27 a 9.33 foram obtidos utilizando uma discretização espacial em z que considera cinco camadas. É possível ilustrar quantidade maior de perfis de temperatura tridimensional, considerando 13, 21 e 33 camadas na discretização na direção- z . Os perfis de temperatura tridimensional, considerando essas quantidades de camadas, são ilustrados na Figura 9.34.

Tendo sido consideradas também 13, 21 e 33 camadas para a discretização espacial

Figura 9.27: Seis estágios da solução da equação da pressão na simulação do preenchimento de um molde retangular com duas regiões de injeção e com velocidade de injeção prescrita. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$.

Figura 9.28: Vetores velocidade do preenchimento de um molde retangular com duas regiões de injeção.

Figura 9.29: Seis estágios do avanço da superfície livre durante o preenchimento do molde retangular com duas regiões de injeção.

Figura 9.30: Seis estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade de um molde retangular com duas regiões de injeção.

Figura 9.31: Seis estágios da solução da equação da energia bidimensional para um molde retangular com duas regiões de injeção.

Figura 9.32: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde com duas regiões de injeção, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ m, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01$ m é prescrita e dada por $T_w = 313$ K.

Figura 9.33: Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$.

em z , as aproximações para os perfis da temperatura tridimensional nas camadas comuns a essas discretizações do molde podem ser comparadas. Neste caso, as camadas comuns ocorrem quando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ metros, e a comparação entre elas está ilustrada na Figura 9.35. Para uma melhor visualização dos resultados considerados, algumas camadas da discretização espacial na direção- z foram omitidas. A Figura 9.36 ilustra a comparação entre as temperaturas bidimensionais e as médias das temperaturas tridimensionais nestes quatro casos de quantidade de camadas.

Figura 9.34: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente.

9.1.3.2 Observações

O tempo de injeção necessário para o total preenchimento do molde, segundo a simulação, foi 123,51 segundos. De acordo com a equação (9.1), o tempo exato é de 125 segundos, logo, o erro resultante nessa simulação é de 1,19%. Simulando o mesmo problema usando uma malha com 768 volumes finitos e 1402 elementos triangulares, o tempo de injeção é dado por 124,09 segundos resultando em um erro numérico de 0,72%.

Figura 9.35: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$.

Figura 9.36: Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,5$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.

9.1.4 Preenchimento de um Molde de Geometria Complexa

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações numéricas do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções circulares, conforme ilustrado na Figura 9.37.

Figura 9.37: Molde de geometria complexa.

A malha não estruturada utilizada nesta simulação é ilustrada na Figura 9.38.

Figura 9.38: Malha não estruturada gerada sobre o molde com 563 elementos triangulares e 333 volumes finitos.

9.1.4.1 Resultados Obtidos

As figuras 9.39, 9.40, 9.41, 9.42 e 9.43 mostram os resultados obtidos para a distribuição da pressão, velocidade, avanço da superfície livre, e temperaturas tridimensional e bidimensional, respectivamente, durante a simulação numérica do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções circulares. São ilustrados seis etapas dessa simulação, para $t = 15,38\text{ s}$, $t = 23,09\text{ s}$, $t = 37,21\text{ s}$, $t = 46,41\text{ s}$, $t = 51,61\text{ s}$ e $t = 56,53\text{ s}$.

9.1.4.2 Observações

Nessa simulação é possível observar a capacidade do presente modelo de tratar a subdivisão do escoamento do fluido e com a posterior fusão das duas correntes de fluido, e suas superfícies livres durante o processo de moldagem por injeção. A predição e a localização

Figura 9.39: Seis estágios da solução da equação da pressão na simulação do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções circulares usando velocidade prescrita. Os valores estão divididos por $p_{max} = 10^5$.

Figura 9.40: Vetores velocidade do preenchimento de um molde de geometria complexa com duas inserções circulares.

Figura 9.41: Seis estágios do avanço da superfície livre durante o preenchimento do molde.

desse efeito têm fundamental importância para a análise de estabilidade da peça moldada, uma vez que nessas regiões a peça está mais sujeita a deformações e instabilidades.

O tempo de injeção necessário para o total preenchimento do molde, segundo a simulação, foi 57,48 segundos. De acordo com a equação (9.1), o tempo exato é de 52,5 segundos, logo, o erro cometido nessa simulação é de 8,41%. Simulando o mesmo problema usando uma malha com 970 volumes finitos e 5546 elementos triangulares, o tempo de injeção é dado por 52,61 segundos resultando em um erro numérico de 0,20%.

Figura 9.42: Seis estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade de um molde de geometria complexa com duas inserções.

Figura 9.43: Seis estágios da solução da equação da energia bidimensional para um molde de geometria complexa com duas inserções.

9.2 Escoamentos com Pressão de Injeção Prescrita

As condições de contorno definidas na região de injeção de fluido podem ser de dois tipos: velocidade de injeção prescrita e pressão prescrita. Na seção anterior foram apresentados os resultados de algumas simulações utilizando velocidade de injeção prescrita, que é a condição de contorno mais comumente utilizada no problema do preenchimento de um molde. Nesta seção a condição de pressão prescrita na região de injeção de fluido é utilizada com o intuito de ilustrar a capacidade da ferramenta desenvolvida de lidar também com esse tipo de condição de contorno.

9.2.1 Preenchimento de uma Placa Retangular

Nesta seção são apresentados os resultados da simulação numérica do preenchimento da placa retangular utilizada na Seção 9.1.1 e ilustrada na Figura 9.1. A malha não estruturada utilizada nesta simulação também é a mesma utilizada na Seção 9.1.1, e se encontra ilustrada na Figura 9.2.

As condições desse escoamento são:

- Viscosidade do fluido:

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

com

$$\eta_0(T) = B \exp \left(\frac{T_b}{T} \right)$$

onde $n = 0,2838$, $\tau^* = 1,791 \times 10^4 \text{ Pa}$, $B = 2,591 \times 10^{-7} \text{ Pa s}$ e $T_b = 11680 \text{ K}$.

- Temperatura de injeção: $T_{inj} = 513 \text{ K}$;
- Temperatura das paredes do molde: $T_w = 313 \text{ K}$;
- Condutividade térmica do fluido: $k = 0,18 \text{ W/mK}$;
- Densidade do fluido: $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$;
- Calor específico do fluido: $c_p = 2100 \text{ J/KgK}$;
- Velocidade de referência na cavidade: $v_0 = 0,01 \text{ m/s}$;
- Espessura da cavidade: $h = 0,01 \text{ m}$;
- Número de camadas para a solução da equação da energia tridimensional: $N_z = 5$;
- Pressão de injeção do fluido: $p_0 = 22500 \text{ N/m}^2$.

9.2.1.1 Resultados Obtidos

As figuras 9.44, 9.45, 9.46 e 9.47 mostram os resultados obtidos para a distribuição da pressão, velocidade, temperaturas tridimensional e bidimensional, respectivamente, durante a simulação numérica do preenchimento de um molde em forma de placa retangular, utilizando pressão de injeção prescrita. São ilustrados quatro estágios da simulação, quando $t = 2,39\text{ s}$, $t = 6,77\text{ s}$, $t = 14,74\text{ s}$ e $t = 40,10\text{ s}$.

Os perfis da distribuição da temperatura ao longo do molde para os pontos (x, y) tais que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, são apresentados na Figura 9.48. O perfil da distribuição da temperatura bidimensional longo do molde, juntamente com perfil da média da temperatura tridimensional, para esses mesmos pontos, são ilustrados na Figuras 9.49.

Figura 9.44: Quatro estágios da solução da equação da pressão para o caso de pressão injeção prescrita durante o preenchimento do molde retangular. Os valores estão divididos por $p_0 = 22500$.

Os resultados ilustrados nas figuras 9.44 a 9.49 foram obtidos utilizando uma discretização espacial em z que considera cinco camadas, ou seja, $N_z = 5$. Para ilustrar uma quantidade maior de perfis de temperatura tridimensional, são consideradas agora mais camadas na direção- z , dadas por $N_z = 13$, $N_z = 21$ e $N_z = 33$ camadas. Os perfis de temperatura tridimensional, considerando essas quantidades de camadas, são ilustrados na Figura 9.50.

Tendo sido consideradas também 13, 21 e 33 camadas para a discretização espacial

Figura 9.45: Vetores velocidade obtidos após o cálculo do campo da pressão para o preenchimento de um molde retangular.

Figura 9.46: Quatro estágios da solução da equação da energia tridimensional no plano central da cavidade, ou seja, $z = 0$, durante o preenchimento do molde retangular com pressão de injeção prescrita.

Figura 9.47: Quatro estágios da solução da equação da energia bidimensional, para o caso de pressão de injeção prescrita.

Figura 9.48: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$ plotados para as camadas $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ m, respectivamente. A temperatura da última camada, isto é, quando $z = 0,01$ m é prescrita e dada por $T_w = 313$ K.

em z , as aproximações para os perfis da temperatura tridimensional nas camadas comuns a essas discretizações do molde podem ser comparadas. Neste caso, as camadas comuns ocorrem quando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$ metros, e a comparação entre elas está ilustrada na Figura 9.51. Da mesma forma como procedido anteriormente, para se obter uma melhor visualização dos resultados considerados, algumas camadas da discretização espacial na direção- z foram omitidas. A Figura 9.52 ilustra a comparação entre as temperaturas bidimensionais e as médias das temperaturas tridimensionais nestes quatro casos de quantidade de camadas.

Figura 9.49: Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$.

Figura 9.50: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, respectivamente, para o caso de pressão de injeção prescrita.

Analisando a Figura 9.52 pode-se observar que a média da temperatura tridimensional se aproxima da temperatura bidimensional conforme o número de camadas na direção- z diminui.

Figura 9.51: Perfis da distribuição da temperatura tridimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas, e considerando $z = 0$, $z = 0,0025$, $z = 0,005$ e $z = 0,0075$.

Figura 9.52: Perfis da distribuição da temperatura média tridimensional e da temperatura bidimensional ao longo do molde retangular, para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$, utilizando 5, 13, 21 e 33 camadas.

9.2.1.2 Observações

Pode-se observar na Figura 9.44 que a pressão na região de entrada se mantém constante e igual ao valor prescrito durante toda a simulação, como o esperado. A pressão na superfície livre também se mantém constante, o que leva a uma redução gradual da velocidade de injeção durante o preenchimento.

Para esse problema, devido às baixas velocidades (e longos períodos de permanência), no final do processo de injeção, as camadas superficiais atingem temperaturas bastante reduzidas, o que leva ao aparecimento de uma camada praticamente solidificada, como pode ser observado na Figura 9.48. Nessa situação, a aproximação do perfil parabólico para a velocidade e a temperatura utilizada no modelo bidimensional se afasta consideravelmente da realidade.

Os tempos de injeção dos modelos bidimensional e tridimensional são diferentes e isso leva a distribuições de temperaturas médias ao longo do molde também diferentes, como pode ser visto na Figura 9.49.

Apesar do modelo bidimensional resultar em uma distribuição qualitativamente satisfatória, os erros introduzidos nas aproximações do modelo bidimensional, neste caso, são elevados, sendo necessário o uso da abordagem tridimensional para obter resultados quantitativamente corretos.

Usando a Figura 9.10 para comparar os perfis obtidos pelo modelo bidimensional para a equação da temperatura e pela média dos valores da temperatura tridimensional nas cinco camadas do molde, pode-se observar que o modelo bidimensional resultou em uma aproximação bastante diferente para a temperatura média no molde.

Utilizando as mesmas condições de escoamento, mas agora considerando pressões de injeção duas e quatro vezes maior, isto é, $p_0 = 45000 \text{ N/m}^2$ e $p_0 = 90000 \text{ N/m}^2$, essa diferença é atenuada, como pode ser observado na Figura 9.53.

Para o preenchimento de um molde utilizando pressão de injeção prescrita não é possível prever de forma simples, usando a conservação de massa, o tempo exato para o total enchimento do molde, pois a fluidez depende de forma não linear da temperatura e da taxa de deformação do fluido.

Pressões de injeção maiores requerem tempos de preenchimento menores, como pode ser observado na Figura 9.54. A medida que a pressão de injeção é reduzida, o tempo de injeção aumenta drasticamente até se atingir uma pressão crítica que corresponde à menor pressão para a qual é possível preencher o molde completamente.

Contudo, pode se observar que as previsões obtidas pelo modelo bidimensional são diferentes das obtidas pelo modelo tridimensional. Os tempos do modelo bidimensional são substancialmente inferiores que os tempos do modelo tridimensional para uma mesma pressão. Adicionalmente, a pressão crítica para o modelo bidimensional é inferior do que a do modelo tridimensional para uma mesma configuração.

Estas discrepâncias podem ser atribuídas às hipóteses empregadas no modelo bidimensional, que se afastam consideravelmente das condições reais neste caso, conforme discutido anteriormente.

Figura 9.53: Perfis da distribuição da temperatura bidimensional e da média entre os perfis da temperatura tridimensional para o ponto (x, y) tal que $y = 0,05$ e $0 \leq x \leq 0,1$ com pressões de injeção dadas por $p_0 = 45000 \text{ N/m}^2$ e $p_0 = 90000 \text{ N/m}^2$, respectivamente.

Figura 9.54: Pressão de injeção pelo tempo de preenchimento para os modelos bidimensional e tridimensional da temperatura.

9.3 Considerações Finais

Neste capítulo foram apresentadas simulações de diversos tipos de moldes, utilizando condições de contorno para a velocidade e a pressão de injeção. Os exemplos mostram diversos tipos de injeção e foram escolhidos de modo a retratar o que acontece na prática. É importante observar que o código desenvolvido consegue lidar com essas situações sem qualquer restrição.

Um exemplo da capacidade do método de lidar com fenômenos comuns em processos de moldagem por injeção pode ser encontrada na Seção 9.1.3, na qual o molde é preenchido utilizando duas regiões de injeção. Outro exemplo, encontrado na Seção 9.1.4, mostra a capacidade do presente modelo de lidar com a divisão do escoamento nas proximidades das inserções circulares e com a posterior fusão da superfície livre, durante o preenchimento do molde. A predição e a localização desse efeito são essenciais para garantir a qualidade final da peça, uma vez que regiões de fusão de fluido estão entre as áreas mais frágeis da peça moldada por injeção.

Com relação às formulações para a equação da temperatura, pode-se observar resultados qualitativamente satisfatórios, no caso de velocidade de injeção prescrita, quando as duas formulações são comparadas, fato que valida o método de solução para a equação tridimensional para a temperatura. Já no caso de pressão de injeção prescrita, as diferenças entre os modelos bidimensional e tridimensional são mais acentuadas.

As malhas utilizadas nas simulações podem ser consideradas grossas, mas a escolha foi baseada em uma melhor visualização dos dados obtidos. Contudo, ao se utilizar malhas mais finas nessas simulações, nota-se uma diminuição no erro numérico em todos os casos, o que significa que o método implementado é convergente.

Conclusões, Contribuições e Trabalhos Futuros

Neste último capítulo são apresentados uma síntese deste trabalho de mestrado, algumas conclusões e a sua contribuição e também apresentar algumas possibilidades de trabalhos futuros.

10.1 Síntese do Trabalho Desenvolvido

O objetivo desse trabalho de mestrado foi desenvolver uma ferramenta para simular a fase de preenchimento do processo de moldagem por injeção, com um fluido não Newtoniano, considerando a influência da temperatura, e usando o método de volumes finitos e malhas não estruturadas. A escolha pela utilização de malhas não estruturadas foi baseada nas dificuldades de utilização de malhas estruturadas em geometrias complexas, comumente utilizadas com moldes em processos de moldagem por injeção. Para implementação da solução numérica associada ao problema do preenchimento de moldes foram utilizados o método de volumes finitos e uma estrutura de dados topológica denominada SHE - *Singular Handle Edge* [Nonato et al., 2002, Nonato et al., 2003, Nonato et al., 2004].

Dessa forma, para a implementação da ferramenta, algumas tarefas preliminares foram necessárias, tais como a apresentação das equações governantes do escoamento de fluidos em geral, a adaptação dessas equações ao caso do preenchimento de um molde, a determinação de um processo de solução e a especificação das etapas do processo de solução das equações.

Para tanto, no Capítulo 1 foram apresentados alguns resultados e definições importantes utilizados na derivação das equações governantes do escoamento de fluidos, como o conceito de derivada material e os teoremas de Gauss e de Reynolds. Em seguida foram deduzidas, a partir de princípios físicos, as três equações de conservação, conhecidas como

equação da conservação de massa, ou continuidade, equação da conservação da quantidade de movimento e equação da conservação de energia.

No Capítulo 2, as equações que governam o escoamento do fundido durante a fase de preenchimento foram derivadas, considerando simplificações a respeito do fluido injetado, da geometria do molde e realizando uma análise dimensional e matemática das equações governantes. Como resultado dessas simplificações, foram derivadas uma equação bidimensional para a pressão, conhecida como equação de Hele-Shaw, e uma equação tridimensional para a energia em termos da temperatura. Um modelo para a viscosidade também foi proposto, considerando o polímero como sendo um fluido Newtoniano Generalizado. Esse modelo considera influência da temperatura e da taxa de cisalhamento e é conhecido como modelo de Cross com dependência da temperatura de Arrhenius.

O processo de solução das equações governantes do preenchimento de um molde e as condições de contorno para esse problema foram apresentadas no Capítulo 3. Tendo sido estipulado o processo de solução, a próxima tarefa, descrita no Capítulo 4, consistiu de aplicar o método de volumes finitos para a solução da equação de Hele-Shaw. Na formulação adotada, os volumes de controle foram gerados pelo método das medianas. No final do capítulo, uma validação do método numérico desenvolvido foi realizada utilizando uma equação de Laplace com solução analítica conhecida.

Como a predição da posição da superfície livre também faz parte da solução do problema, no Capítulo 5 foi apresentada a estratégia escolhida, *Volume of Fluid*, para o avanço do fluido durante a injeção. Essa estratégia considera somente contribuições de volumes que estão completamente cheios de fluidos e, apesar de em algumas situações ser desejável que volumes parcialmente cheios contribuam para os seus vizinhos, essa estratégia evita a dissipação numérica.

No Capítulo 6 foi apresentada uma estratégia de solução para a equação da temperatura baseada em um referencial semi-Lagrangeano para a discretização do termo convectivo da equação. Além disso, foram considerados valores médios com relação à espessura para todos os termos da equação, resultando, assim, em uma formulação bidimensional, e por essa razão, simplificada, para a equação da temperatura.

A solução do problema do preenchimento de um molde foi finalmente encontrada com a discretização e a implementação da equação tridimensional para a temperatura, descritas em detalhes no Capítulo 7.

De modo a validar o código desenvolvido e a classificar os resultados gerados como confiáveis, diversas comparações entre os resultados obtidos com a ferramenta desenvolvida e suas respectivas soluções analíticas foram apresentadas no Capítulo 8.

Finalmente, alguns resultados obtidos com a simulação do preenchimento de moldes de diversas geometrias foram apresentados e analisados no Capítulo 9 e são discutidos a

seguir.

10.2 Considerações sobre os Resultados Obtidos

No Capítulo 9 foram apresentadas algumas simulações realizadas utilizando a ferramenta desenvolvida. Nessas simulações desejou-se retratar a realidade do processo de moldagem por injeção, utilizando moldes com geometrias distintas, com mais de uma região de injeção e com inserções.

Todas as simulações apresentaram resultados mais que satisfatórios, mesmo utilizando malhas grossas, o que demonstra a robustez do método implementado.

No caso da injeção em um molde de geometria complexa com duas inserções (Seção 9.1.4), foi possível observar a capacidade do presente modelo de lidar com a divisão do escoamento nas proximidades das inserções circulares e com a posterior fusão da superfície livre, e conseqüentemente, das duas correntes de fluido durante o preenchimento do molde. A predição e a localização desse efeito são essenciais para garantir a qualidade final da peça, uma vez que regiões de fusão de fluido estão entre as áreas mais frágeis da peça moldada por injeção.

Uma consideração importante a respeito do código desenvolvido diz respeito à formulação bidimensional para a equação da temperatura. Essa formulação, apesar de ser consideravelmente mais simples, apresenta resultados qualitativamente satisfatórios, principalmente para os casos de velocidade de injeção prescrita, e ao comparar as duas formulações (bi e tridimensional) para a temperatura, é possível validar a formulação mais completa.

Embora a condição de contorno do tipo velocidade prescrita nas regiões de injeção de fluido seja mais comumente encontrada nos aplicativos comerciais, a ferramenta desenvolvida neste trabalho também suporta a condição de contorno do tipo pressão prescrita nas regiões de injeção de fluido.

10.3 Contribuição

O objetivo deste trabalho de mestrado foi desenvolver uma ferramenta que fosse capaz de resolver as equações governantes da fase de preenchimento de um processo de moldagem por injeção e, então, simular o preenchimento do molde utilizando malhas não estruturadas e o método de volumes finitos. Esse objetivo foi alcançado com sucesso.

O Grupo de Mecânica dos Fluidos Computacional, do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação da Universidade de São Paulo, ICMC-USP, tem desenvolvido e aprimorado, com novos módulos, durante os últimos anos, uma ferramenta de simulação numérica denominada *Freeflow*. Essa ferramenta utiliza malhas estruturadas cartesianas,

e as discretizações das equações governantes do escoamento de fluidos são feitas utilizando diferenças finitas e o método GENSMAC [Tome e McKee, 1994].

Este é o primeiro trabalho do grupo que implementa o método de volumes finitos utilizando malhas não estruturadas. Nesse sentido, este trabalho vem a contribuir junto ao grupo com a possibilidade de se criar um novo módulo para o *Freeflow* com essa abordagem, e também com a possibilidade de utilizar o código desenvolvido para fazer validações e comparações para o próprio *Freeflow*, considerando escoamentos de fluidos não Newtonianos com baixos números de Reynolds.

10.4 Trabalhos Futuros

Diversas sugestões para trabalhos futuros podem ser apresentadas. Dentre elas existe a possibilidade de estender o método proposto, considerando agora a espessura do molde variável. Essa implementação, proposta por Kennedy [Kennedy, 1995] e utilizada no MoldFlow [Moldflow, 2004], considera o resfriamento do fluido durante o preenchimento do molde e possibilita o aparecimento de camadas solidificadas de fluido.

Uma outra possibilidade para um trabalho futuro consiste em, ainda considerando o escoamento em forma de casca, isto é utilizando a formulação $2^{1/2}D$, reimplementá-lo em um ambiente tridimensional. Em outras palavras, durante o escoamento a espessura do molde continuaria sendo muito menor que o comprimento, mas agora não haveria a necessidade de o molde ser “planar”.

Apesar de o modelo escolhido para representar os polímeros, como fluidos Newtonianos Generalizados, em diversas situações assegurar resultados suficientemente satisfatórios para as simulações, sabe-se que um modelo viscoelástico é mais adequado para descrever esse tipo de fluido. Nesse sentido, uma possibilidade de expansão da ferramenta desenvolvida é tornar possível a simulação do preenchimento de moldes utilizando tais tipos de fluidos.

Desenvolver uma interface mais amigável e flexível e que possibilite a importação de dados utilizados na indústria de plásticos também é uma das possibilidades de trabalhos futuros.

Por fim, em algumas simulações, como no caso de injeção de peças que não podem ser classificadas como casca, ou seja, de espessuras elevadas, a aproximação da distribuição bidimensional da pressão pode não ser adequada. Portanto, um trabalho futuro pode consistir em desenvolver uma ferramenta de simulação do preenchimento de um molde utilizando a formulação completa, tridimensional, das equações.

Referências Bibliográficas

- [Alcaplas, 2004] Alcaplas (2004). Alcaplas indústria de plásticos ltda. Disponível em <<http://www.alcaplas.com.br/informacoes/plasticos/>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Amsden e Harlow, 1970] Amsden, A. A. e Harlow, F. H. (1970). The SMAC method: a numerical technique for calculating incompressible fluid flow. Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory. Report LA, 4370.
- [Anderson Jr., 1995] Anderson Jr., J. D. (1995). *Computational Fluid Dynamics - the basics with aplicattions*. McGraw-Hill, New York.
- [Aris, 1962] Aris, R. (1962). *Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- [Auada, 1997] Auada, R. B. (1997). Utilização de malhas não estruturadas em dinâmica dos fluidos computacional. Master's thesis, Escola Politécnica - Universidade de São Paulo, São Paulo.
- [Baliga e Patankar, 1981] Baliga, B. R. e Patankar, S. V. (1981). A new finite element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer*, 3:393–409.
- [Baliga et al., 1983] Baliga, B. R., Phan, T. T., e Patankar, S. V. (1983). Solution of some two-dimensional incompressible fluid flow anf heat transfer problems using a control-volume finite-element method. *Numerical Heat Transfer*, 6:263–282.
- [Batchelor, 1967] Batchelor, G. K. (1967). *Introduction to fluid dynamics*. Cambridge: University Press, Cambridge.
- [Bird et al., 2002] Bird, R. A., Stewart, W. E., e Lightfoot, E. N. (2002). *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, New York, 2nd. edition.
- [Boyce e DiPrima, 1969] Boyce, W. E. e DiPrima, R. C. (1969). *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. John Wiley & Sons, New York, 2 edition.

- [Bretas e D'Avila, 2000] Bretas, R. E. S. e D'Avila, M. A. (2000). *Reologia de Polímeros Fundidos*. Editora da UFSCar, São Carlos.
- [Chang et al., 2001] Chang, R.-Y., Chang, W.-Y., Yang, W.-H., Yang, W.-L., e C.Hsu, D. (2001). A novel three-dimensional analysis of polymer injection molding. Disponível em <www.moldex3d.com/ch/services/paper/antec/2001/0736.PDF>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Chang e Yang, 2001] Chang, R.-Y. e Yang, W.-H. (2001). Numerical simulation of mold filling in injection molding using a three-dimensional finite volume approach. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 37:125–148.
- [Chen et al., 1998] Chen, S. C., Chen, Y. C., e Cheng, N. T. (1998). Simulation of injection-compression mold-filling process. *Int. Comm. Heat Mass Transfer.*, 25(7):907–917.
- [Edelsbrunner, 2000] Edelsbrunner, H. (2000). Triangulations and meshes in computational geometry. Disponível em <<http://www.cs.duke.edu/~edels/BookSurv/>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Ferreira et al., 1998] Ferreira, V. G., Mello, O. D., Oliveira, J. N., e Fortuna, A. O. (1998). Tópicos teóricos e computacionais em escoamento de fluidos. Notas do ICMC. Série Computação. número 39.
- [Fortuna, 2000] Fortuna, A. O. (2000). *Técnicas Computacionais para Dinâmica de Fluidos – Conceitos Teóricos e Aplicações*. Edusp, São Paulo.
- [Harlow e Welch, 1967] Harlow, F. H. e Welch, J. E. (1967). Numerical calculations of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *Phys. Fluids*, 8:2182–2189.
- [Hirt et al., 1970] Hirt, C. W., Cook, J. L., e Butler, T. D. (1970). A lagrangean method for calculating the dynamics of an incompressible fluid with free surface. *Journal of Computational Physics*, pages 103–124.
- [Hirt e Nichols, 1981] Hirt, C. W. e Nichols, B. D. (1981). Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journ. Comp. Phys.*, 39:201–225.
- [Iório, 1991] Iório, V. M. (1991). *EDP - Um curso de graduação*. Instituto de Matemática Pura e Aplicada - CNPq, Rio de Janeiro.
- [Kennedy, 1995] Kennedy, P. (1995). *Flow Analysis of Injection Molds*. Hanser Publishers, New York.
- [Maliska, 1995] Maliska, C. R. (1995). *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional - Fundamentos e Coordenadas Generalizadas*. LTC - Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro.

- [Maliska e Shneider, 2000] Maliska, C. R. e Shneider, F. A. (2000). Uma formulação em volumes finitos usando malhas não estruturadas. In *Proceedings do ENCIT 2000*.
- [Moldex3d, 2004] Moldex3d (2004). Coretech system corporation. Disponível em <<http://www.moldex3d.com>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Moldflow, 2004] Moldflow (2004). Moldflow corporation headquarters. Disponível em <<http://www.moldflow.com>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Niceno, 2001] Niceno, B. (2001). Easymesh: a free two-dimensional quality mesh generator based on delaunay triangulation. Disponível em <<http://www-dinma.univ.trieste.it/nirftc/research/easymesh/Default.htm>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Nonato et al., 2004] Nonato, L. G., Castelo F^o, A., Minghin, R., e Batista Neto, J. E. S. (2004). Morse operators for digital planar surfaces and their application to image segmentation. *IEEE Transactions on Image Processing*, 13(2):216 – 227.
- [Nonato et al., 2002] Nonato, L. G., Castelo F^o, A., e Oliveira, M. C. F. (2002). A topological approach for handling triangle insertion and removal into two-dimensional unstructured meshes. Disponível em <<http://citeseer.nj.nec.com/551625.html>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Nonato et al., 2003] Nonato, L. G., Castelo F^o, A., Lizier, M. A. S., e Oliveira, M. C. F. (2003). Topological approach for detecting objects from images. In *Vision Geometry XII*, San Jose. SPIE, Proceedings of SPIE.
- [Panton, 1996] Panton, R. L. (1996). *Incompressible flow*. Wiley Interscience, New York, 2nd. edition.
- [Phillips e Williams, 2001] Phillips, T. N. e Williams, A. J. (2001). A semi-lagrangian finite volume method for newtonian contraction flows. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(6):2152–2177.
- [Pontes, 1999] Pontes, J. (1999). Fenômenos de transferência. Technical report, Escola de Engenharia - COPPE. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- [Prakash e Patankar, 1986] Prakash, C. e Patankar, S. V. (1986). A control volume-based finite-element method for solving the navier-stokes equation using equal-order velocity-pressure interpolation. *Numerical Heat Transfer*, 9:253–276.
- [Quarteroni et al., 2000] Quarteroni, A., Sacco, R., e Saleri, F. (2000). *Numerical Mathematics*. Number 37 in Texts in applied mathematics. Springer, New York.
- [Ransau, 2002] Ransau, S. R. (2002). Solution methods for incompressible viscous free surface flows: A litterature review. Disponível em

- <<http://www.math.ntnu.no/preprint/numerics/2002/>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Ruppert, 1994] Ruppert, J. (1994). A delaunay refinement algorithm for quality 2-dimensional mesh generation. Disponível em <<http://www.nas.nasa.gov/Research/Reports/Techreports/1994/rnr-94-002-abstract.html>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Saad e Schlitz, 1986] Saad, Y. e Schlitz, M. H. (1986). Gmres: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 7:856–916.
- [Sears e Salinger, 1975] Sears, F. W. e Salinger, G. L. (1975). *Thermodynamics, kinetic theory, and statistical thermodynamics*. Addison Wesley, 3rd. edition.
- [Shewchuk, 1999] Shewchuk, J. R. (1999). Lecture notes on delaunay mesh generation. Disponível em <<http://citeseer.nj.nec.com/shewchuk99lecture.html>>. Acesso em: 12 de abril de 2004.
- [Sousa e Mangiavacchi, 2002] Sousa, F. S. e Mangiavacchi, N. (2002). Simulação numérica de escoamentos multifásicos usando o sistema freeflow-3d. Master's thesis, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - Universidade de São Paulo, São Carlos.
- [Sousa et al., 2004] Sousa, F. S., Mangiavacchi, N., Nonato, L. G., Castelo, A., Tomé, M. F., Ferreira, V. G., Cuminato, J. A., e McKee, S. (2004). A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics, In Press, Corrected Proof (Available online 27 February 2004)*.
- [Sparrow et al., 1988] Sparrow, E. M., Schneider, G. E., e Pletcher, R. H. (1988). *Handbook of Numerical Heat Transfer*. John Wiley & Sons.
- [Sussman et al., 1994] Sussman, M., Smereka, P., e Osher, S. (1994). A level set approach for computing solutions do incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114:146–159.
- [Tome e McKee, 1994] Tome, M. F. e McKee, S. (1994). GENSMAC: A computational marker-and-cell method for free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 110:171–186.
- [Tucker III, 1989] Tucker III, C. L., editor (1989). *Computer Modeling for Polymer Processing - Fundamentals*. Computed Aided Engineering for Polymer Processing. Hanser Publishers, Munich.

-
- [Vasconcellos, 1999] Vasconcellos, J. F. V. (1999). *Um método de Volumes Finitos Usando Malhas Não Estruturadas para o Estudo de Escoamentos com Frentes Livres*. PhD thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.
- [Winslow, 1967] Winslow, A. M. (1967). Numerical solution of quasi-linear poisson equation in a non-uniform triangle mesh. *Journal of Computational Physics*, 2:149–172.
- [Xue et al., 1999] Xue, S. C., Tanner, R. I., e Phan-Thien, N. (1999). Three-dimensional numerical simulation of viscoelastic flows – predictability and accuracy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 180:305–331.

Discretizações da Equação da Pressão

Resolver a equação (A.1) pelo método de volumes finitos consiste em integrá-la em sua forma conservativa (também chamada forma divergente) no volume.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0 \quad (\text{A.1})$$

onde $S_2 = \int_0^h \frac{z'^2}{\eta} dz'$

Assim, escrevemos a equação (A.1) usando a notação de fluxo $\vec{J}$:

$$\nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (\text{A.2})$$

onde $\vec{J}$ é dado por

$$\vec{J} = -S_2 \nabla p \quad (\text{A.3})$$

que, integrada no volume, resulta em:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{J} dV = 0 \quad (\text{A.4})$$

Agora, aplicando o Teorema da Divergência de Gauss, essa integral no volume resulta em uma integral de superfície:

$$\int_S \vec{J} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (\text{A.5})$$

onde $\vec{n}$ é um vetor unitário normal a S que aponta para fora e S é a fronteira fechada do volume V . O volume de controle está mostrado na Figura A.1 onde vemos que ele é composto por contribuições de diversos elementos do tipo 123.

Figura A.1: Volume de controle para o método da mediana [Maliska, 1995].

A.1 Cálculo das Contribuições

A integral de superfície, calculada no volume de controle do vértice 1, como o ilustrado na Figura A.1, resulta em:

$$\int_a^0 \vec{J} \cdot \vec{n} dS + \int_0^c \vec{J} \cdot \vec{n} dS + [\text{contribuições de outros elementos associados ao nó 1}] = 0 \quad (\text{A.6})$$

Estabelecendo uma função de interpolação para p , é possível calcular o fluxo $\vec{J}$, uma vez que ele depende das derivadas parciais de p ao longo das linhas $\overline{a0}$ e $\overline{0c}$:

$$p = Ax + By + C \quad (\text{A.7})$$

Com os valores de p_1 , p_2 e p_3 e os valores das coordenadas (x, y) nos pontos 1, 2 e 3, é possível encontrar os valores das constantes A , B e C , da seguinte maneira: em $(x, y) = (x_1, y_1)$, tem-se que $p = p_1$, em $(x, y) = (x_2, y_2)$, tem-se que $p = p_2$ e em $(x, y) = (x_3, y_3)$, tem-se que $p = p_3$. Substituindo esses valores na equação (A.7), obtém-se:

$$\begin{aligned} p_1 &= Ax_1 + By_1 + C \\ p_2 &= Ax_2 + By_2 + C \\ p_3 &= Ax_3 + By_3 + C \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Essas três expressões podem ser escritas como o seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

cuja solução resulta nos valores para as constantes A , B e C , apresentados a seguir:

$$A = \frac{[(y_2 - y_3)p_1 + (y_3 - y_1)p_2 + (y_1 - y_2)p_3]}{D} \quad (\text{A.10})$$

$$B = \frac{[(x_3 - x_2)p_1 + (x_1 - x_3)p_2 + (x_2 - x_1)p_3]}{D} \quad (\text{A.11})$$

$$C = \frac{[(x_2y_3 - x_3y_2)p_1 + (x_3y_1 - x_1y_3)p_2 + (x_1y_2 - x_2y_1)p_3]}{D} \quad (\text{A.12})$$

com D dado por:

$$D = (x_1y_2 + x_2y_3 + x_3y_1 - y_1x_2 - y_2x_3 - y_3x_1) \quad (\text{A.13})$$

Lembrando que o vetor fluxo é dado por:

$$\vec{J} = (J_x, J_y) = \left(-S_2 \frac{\partial p}{\partial x}, -S_2 \frac{\partial p}{\partial y} \right) \quad (\text{A.14})$$

é possível obter as derivadas de p com relação a x e a y usando a função de interpolação (A.7). Assim as componentes J_x e J_y resultam em:

$$J_x = -AS_2, \quad J_y = -BS_2 \quad (\text{A.15})$$

Substituindo as expressões da equação (A.15) na equação (A.6), é possível calcular as integrais ao longo de $\overline{a0}$ e $\overline{0c}$:

$$\begin{aligned} \int_a^0 \vec{J} \cdot \vec{n} dS &= J_x(y_a - y_0) + J_y(x_a - x_0) \\ &= (AS_2)(y_a - y_0) + (BS_2)(x_0 - x_a) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \int_0^c \vec{J} \cdot \vec{n} dS &= J_x(y_c - y_0) + J_y(x_0 - x_c) \\ &= (AS_2)(y_0 - y_c) + (BS_2)(x_c - x_0) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Assim

$$\int_S \vec{J} \cdot \vec{n} dS = AS_2(y_a - y_c) + (BS_2)(x_c - x_a) \quad (\text{A.18})$$

A Figura A.2 apresenta a interpretação geométrica das integrações dadas pelas equações (A.16) e (A.17). Considerando o vetor $\vec{J}$ nos pontos r e t , o produto $-J_x(y_a - y_0) + J_y(x_a - x_0)$ nós dá o fluxo que atravessa a face $\overline{a0}$, ao passo que o produto $J_x(y_c - y_0) - J_y(x_c - x_0)$ calcula o fluxo em $\overline{0c}$. Os sinais que aparecem estão de acordo com o sistema de eixo local.

Substituindo as expressões para as constantes A e B na equação (A.18), tem-se que a

Figura A.2: Representação de $\vec{J}$ nas interfaces de integração [Maliska, 1995].

integração ao longo da superfície S pertencente ao elemento $\overline{123}$ resulta, em:

$$\int_a^0 \vec{J} \cdot \vec{n} dS + \int_0^c \vec{J} \cdot \vec{n} dS = C_1 p_1 + C_2 p_2 + C_3 p_3 \quad (\text{A.19})$$

onde os coeficientes são dados por:

$$C_{11} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_2 - y_3) + (x_a - x_c)(x_2 - x_3)] \quad (\text{A.20})$$

$$C_{12} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_3 - y_1) + (x_a - x_c)(x_3 - x_1)] \quad (\text{A.21})$$

$$C_{13} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_1 - y_2) + (x_a - x_c)(x_1 - x_2)] \quad (\text{A.22})$$

Das equações (A.20) a (A.22), tem-se que as contribuições de um elemento do tipo 123 para os volumes de controle associados a seus vértices 1, 2 e 3 dependem das coordenadas dos vértices e dos pontos médios das arestas incidentes a eles. Desta forma, vamos calcular as contribuições para cada um deles.

A.1.1 Contribuições do Elemento 123 para o Vértice 1

Vamos encontrar os valores das constantes C_1 , C_2 e C_3 para o vértice 1. Para este vértice, elas são dadas por:

$$C_{11} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_2 - y_3) + (x_a - x_c)(x_2 - x_3)] \quad (\text{A.23})$$

$$C_{12} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_3 - y_1) + (x_a - x_c)(x_3 - x_1)] \quad (\text{A.24})$$

$$C_{13} = \frac{S_2}{D} [(y_a - y_c)(y_1 - y_2) + (x_a - x_c)(x_1 - x_2)] \quad (\text{A.25})$$

Neste caso, tem-se que:

$$\begin{aligned}x_a &= \frac{x_1 + x_2}{2} \\x_c &= \frac{x_1 + x_3}{2} \\y_a &= \frac{y_1 + y_2}{2} \\y_c &= \frac{y_1 + y_3}{2}\end{aligned}\tag{A.26}$$

então

$$\begin{aligned}x_a - x_c &= \frac{x_2 - x_3}{2} \\y_a - y_c &= \frac{y_2 - y_3}{2}\end{aligned}\tag{A.27}$$

Substituindo as expressões da equação (A.27) nas equações (A.23) a (A.25), tem-se:

$$C_{11} = \frac{S_2}{2D}[(x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2]\tag{A.28}$$

$$C_{12} = \frac{S_2}{2D}[(x_2 - x_3)(x_3 - x_1) + (y_2 - y_3)(y_3 - y_1)]\tag{A.29}$$

$$C_{13} = \frac{S_2}{2D}[(x_2 - x_3)(x_1 - x_2) + (y_2 - y_3)(y_1 - y_2)]\tag{A.30}$$

onde primeiro índice indica que a contribuição foi calculada para o volume associado ao vértice 1.

A.1.2 Contribuições do Elemento 123 para o Vértice 2

Vamos encontrar os valores das constantes C_1 , C_2 e C_3 para o vértice 2. Para este vértice, elas são dadas por:

$$C_{22} = \frac{S_2}{D}[(y_a - y_c)(y_3 - y_1) + (x_a - x_c)(x_3 - x_1)]\tag{A.31}$$

$$C_{23} = \frac{S_2}{D}[(y_a - y_c)(y_1 - y_2) + (x_a - x_c)(x_1 - x_2)]\tag{A.32}$$

$$C_{21} = \frac{S_2}{D}[(y_a - y_c)(y_2 - y_3) + (x_a - x_c)(x_2 - x_3)]\tag{A.33}$$

Note que foi feita uma rotação no sentido anti-horário nos índices. Neste caso, tem-se

que:

$$\begin{aligned}x_a &= \frac{x_2 + x_3}{2} \\x_c &= \frac{x_1 + x_2}{2} \\y_a &= \frac{y_2 + y_3}{2} \\y_c &= \frac{y_1 + y_2}{2}\end{aligned}\tag{A.34}$$

então

$$\begin{aligned}x_a - x_c &= \frac{x_3 - x_1}{2} \\y_a - y_c &= \frac{y_3 - y_1}{2}\end{aligned}\tag{A.35}$$

Substituindo as expressões da equação (A.35) nas equações (A.31) a (A.33), tem-se:

$$C_{22} = \frac{S_2}{2D}[(x_3 - x_1)^2 + (y_3 - y_1)^2]\tag{A.36}$$

$$C_{23} = \frac{S_2}{2D}[(x_1 - x_2)(x_3 - x_1) + (y_1 - y_2)(y_3 - y_1)]\tag{A.37}$$

$$C_{21} = \frac{S_2}{2D}[(x_2 - x_3)(x_3 - x_1) + (y_2 - y_3)(y_3 - y_1)]\tag{A.38}$$

onde primeiro índice indica que a contribuição foi calculada para o volume associado ao vértice 2.

A.1.3 Contribuições do Elemento 123 para o Vértice 3

Analogamente ao caso anterior, para calcular as contribuições dos vértices 1 e 2 para o vértice 3, fazemos mais uma rotação no sentido anti-horário nos índices, ou seja, as constantes C_1 , C_2 e C_3 são dadas por:

$$C_{33} = \frac{S_2}{D}[(y_a - y_c)(y_1 - y_2) + (x_a - x_c)(x_1 - x_2)]\tag{A.39}$$

$$C_{31} = \frac{S_2}{D}[(y_a - y_c)(y_2 - y_3) + (x_a - x_c)(x_2 - x_3)]\tag{A.40}$$

$$C_{32} = \frac{S_2}{D}[(y_a - y_c)(y_3 - y_1) + (x_a - x_c)(x_3 - x_1)]\tag{A.41}$$

Neste caso, tem-se que:

$$\begin{aligned}x_a &= \frac{x_1 + x_3}{2} \\x_c &= \frac{x_2 + x_3}{2} \\y_a &= \frac{y_1 + y_3}{2} \\y_c &= \frac{y_2 + y_3}{2}\end{aligned}\tag{A.42}$$

então

$$\begin{aligned}x_a - x_c &= \frac{x_1 - x_2}{2} \\y_a - y_c &= \frac{y_1 - y_2}{2}\end{aligned}\tag{A.43}$$

Substituindo as expressões da equação (A.39) nas equações (A.41) a (A.43), tem-se:

$$C_{33} = \frac{S_2}{2D}[(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2]\tag{A.44}$$

$$C_{31} = \frac{S_2}{2D}[(x_2 - x_3)(x_1 - x_2) + (y_2 - y_3)(y_1 - y_2)]\tag{A.45}$$

$$C_{32} = \frac{S_2}{2D}[(x_3 - x_1)(x_1 - x_2) + (y_3 - y_1)(y_1 - y_2)]\tag{A.46}$$

onde primeiro índice indica que a contribuição foi calculada para o volume associado ao vértice 3.

A.1.4 As Contribuições

Tendo sido calculadas as constantes C_{ij} , $1 \leq i, j \leq 3$, do elemento 123 para os volumes de controle associados a cada um dos vértice 1, 2 e 3, é possível reunir essas constantes, em uma matriz C_e , $1 \leq i, j \leq 3$:

$$C_e = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix}\tag{A.47}$$

Note que a matriz C_e é simétrica.

Chamando

$$p_e = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix}\tag{A.48}$$

o vetor das pressões no elemento $\overline{123}$, a contribuição para os volumes de controle do

elemento $\overline{123}$, associada aos vértices 1, 2 e 3 do elemento e

$$u_e = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} \quad (\text{A.49})$$

pode ser calculada por

$$u_e = C_e p_e \quad (\text{A.50})$$

onde C_e é uma matriz 3×3 constituída pelos coeficientes C_{ij} , com $1 \leq i, j \leq 3$ dos vértices 1, 2 e 3.

O cálculo da matriz C_e , e conseqüentemente, da contribuição u_e , é feito para cada elemento da malha. Portanto, é necessário adicionar todas as contribuições devidas a todos os n elementos da malha. Como os elementos e os vértices da malha são enumerados, um procedimento para somar estas contribuições consiste em calcular as matrizes C_e dos elementos e montar (*assemble*) uma matriz esparsa K , de dimensão $n \times n$. As contribuições para os vetores u_e , no caso de pressão prescrita, são montados no vetor F , resultando no sistema:

$$K p = F \quad (\text{A.51})$$

Esse sistema linear é simétrico e é resolvido pelo método dos Gradientes Conjugados. Após obtida a solução, são encontrados valores de p determinados em todos os vértices dos triângulos, ou seja, no centro dos volumes de controle nos quais foram realizados os balanços de conservação da pressão p .

Análise Dimensional das Equações Governantes

Neste capítulo a ordem de magnitude dos termos nas equações governantes são estimados usando valores característicos das variáveis. Alguns valores apresentarão ordens de magnitude tão baixas que poderão ser ignorados, simplificando assim as equações.

B.1 Valores Característicos

Como descrito na Seção (2.3.1), os valores característicos são¹:

- Espessura da cavidade, $H = 10^{-3} \text{ m}$
- Comprimento da cavidade, $L = H/\delta \text{ m}$ onde $\delta = H/L \ll 1$
- Velocidade do fundido, $V = 10^{-1} \text{ m/s}$
- Pressão na cavidade, $p_0 = 10^7 \text{ N/m}^2$
- Viscosidade do fundido, $\eta_0 = 10^4 \text{ Ns/m}^2$
- Expansividade, $\beta = 10^{-3} \text{ 1/K}$
- Condutividade térmica do fundido, $k = 10^{-1} \text{ W/mK}$
- Densidade do fundido, $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$
- Diferença de temperatura entre o molde e o fundido, $T_0 = 10^2 \text{ K}$

¹Boshouwers, G. e van der Werf, J. apud [Kennedy, 1995], p. 63

Usando esses valores típicos, as variáveis relevantes nas equações podem ser definidas em termos de variáveis adimensionais, como segue:

- Coordenada-x: $x = Lx^* = H/\delta x^*$
- Coordenada-y: $y = Ly^* = H/\delta y^*$
- Coordenada-z: $z = Hz^*$
- Tempo: $t = [L/V]t^* = [H/\delta V]t^*$
- Componente x da velocidade: $v_x = [L/T]v_x^* = Vv_x^*$
- Componente y da velocidade: $v_y = [L/T]v_y^* = Vv_y^*$
- Componente z da velocidade: $v_z = [H/T]v_z^* = \delta Vv_z^*$
- Pressão: $p = p_0p^*$
- Viscosidade: $\eta = \eta_0\eta^*$
- Diferença de temperatura: $\Delta T = T_0\Delta T^*$

onde as quantidades marcadas com o asterisco (*) são adimensionais e de ordem um.

B.2 Equações Governantes da Fase de Preenchimento

As equações da continuidade, da quantidade de movimento e da temperatura para a fase de preenchimento são, respectivamente:

$$(\nabla \cdot \vec{v}) = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \rho \vec{g} - \nabla p + [\nabla \cdot \eta \dot{\gamma}] - \rho[\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}] \quad (\text{B.2})$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla p \right) \eta \dot{\gamma}^2 + k \nabla^2 T \quad (\text{B.3})$$

Vamos agora fazer a análise dimensional de cada uma destas equações.

B.2.1 Equação da Continuidade para a Cavidade

Conforme o apresentado na Seção (2.3.1), a equação da continuidade (B.1) para um fluido não-Newtoniano generalizado incompressível pode ser escrita em coordenadas cartesianas, como segue:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{B.4})$$

Usando os valores característicos das variáveis não-adimensionais dadas na seção anterior, encontramos todos os termos tendo ordem de magnitude similar:

$$\begin{aligned}
 O\left[\frac{\partial v_x}{\partial x}\right] &= O\left[\frac{V}{L}\right] \\
 &= O\left[\frac{\delta V}{H}\right] \\
 &= O\left[\frac{10^{-1}\delta}{10^{-3}}\right] \\
 &= O[10^2\delta] \\
 O\left[\frac{\partial v_y}{\partial y}\right] &= O[10^2\delta] \\
 O\left[\frac{\partial v_z}{\partial z}\right] &= O[10^2\delta]
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Como todos os termos na equação (B.4) têm magnitudes similares, não é possível simplificar mais a equação.

B.2.2 Equação da Quantidade de Movimento para a Cavidade

A equação da quantidade de movimento (B.2) é uma equação vetorial, quando expressa em coordenadas cartesianas, resulta nas seguintes três equações:

- componente-x da quantidade de movimento

$$\begin{aligned}
 \rho \frac{\partial v_x}{\partial t} &= \rho f_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \right) \\
 &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right) - \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

- componente-y da quantidade de movimento

$$\begin{aligned}
 \rho \frac{\partial v_y}{\partial t} &= \rho f_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(2\eta \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) \\
 &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \right) - \rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

- componente-z da quantidade de movimento

$$\begin{aligned}
 \rho \frac{\partial v_z}{\partial t} &= \rho f_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \right) \\
 &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) - \rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

Vamos expandir ainda mais os termos das componentes e numerá-los e, em seguida, analisar a ordem de magnitude de cada um.

B.2.2.1 Análise dos Termos da Componente- x

A equação da componente- x da equação da quantidade de movimento, com seus termos expandidos e numerados é:

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_x}{\partial t}}_{(i)} = & \underbrace{\rho f_x}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}_{(iii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{(iv)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{(v)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{(vi)} \\ & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{(vii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{(viii)} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{(ix)} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{(x)} - \underbrace{\rho \left(v_x v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{(xi)} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Vamos agora avaliar a ordem de magnitude de cada termo:

Termo (i):

$$O \left[\rho \frac{\partial v_x}{\partial t} \right] = O \left[\rho_0 \frac{V}{t} \right] = O \left[\rho_0 \frac{\delta V^2}{H} \right] = O \left[10^3 \frac{10^{-2} \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta] \quad (\text{B.10})$$

Termo (ii):

$$O[\rho g_{(x)}] = O[\rho_0 g_0] = O[10^3 10] = O[10^4] \quad (\text{B.11})$$

Termo (iii):

$$O \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right] = O \left[\frac{p_0}{L} \right] = O \left[\frac{\delta p_0}{H} \right] = O \left[\frac{10^7 \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^{10} \delta] \quad (\text{B.12})$$

Termo (iv):

$$O \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) \right] = O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{V}{L} \right) \right] = O \left[\eta_0 \frac{\delta^2 V}{H^2} \right] = O \left[10^4 \frac{10^{-1} \delta^2}{10^{-6}} \right] = O[10^9 \delta^2] \quad (\text{B.13})$$

Termo (v):

$$O \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \right] = O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{V}{L} \right) \right] = O \left[\eta_0 \frac{\delta^2 V}{H^2} \right] = O \left[10^4 \frac{10^{-1} \delta^2}{10^{-6}} \right] = O[10^9 \delta^2] \quad (\text{B.14})$$

Termo (vi):

$$O \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \right] = O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{V}{L} \right) \right] = O \left[\eta_0 \frac{\delta^2 V}{H^2} \right] = O \left[10^4 \frac{10^{-1} \delta^2}{10^{-6}} \right] = O[10^9 \delta^2] \quad (\text{B.15})$$

Termo (vii):

$$O \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \right] = O \left[\frac{1}{H} \left(\eta_0 \frac{V}{H} \right) \right] = O \left[\eta_0 \frac{V}{H^2} \right] = O \left[10^4 \frac{10^{-1}}{10^{-6}} \right] = O[10^9] \quad (\text{B.16})$$

Termo (viii):

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right] &= O \left[\frac{1}{H} \left(\eta_0 \frac{\delta V}{L} \right) \right] = O \left[\frac{1}{H} \eta_0 \frac{\delta^2 V}{H} \right] = O \left[\frac{1}{10^{-3}} 10^4 \frac{10^{-1} \delta^2}{10^{-3}} \right] \\ &= O[10^9 \delta^2] \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Termo (ix):

$$O \left[\rho v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{V}{L} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{\delta V}{H} \right] = O \left[10^3 10^{-1} \frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta] \quad (\text{B.18})$$

Termo (x):

$$O \left[\rho v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{V}{L} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{\delta V}{H} \right] = O \left[10^3 10^{-1} \frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta] \quad (\text{B.19})$$

Termo (xi):

$$O \left[\rho v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right] = O \left[\rho_0 \delta V \frac{V}{H} \right] = O \left[10^3 10^{-1} \frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta] \quad (\text{B.20})$$

Para comparar esses resultados é conveniente escrever a ordem sob cada termo na equação (B.9):

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_x}{\partial t}}_{10^4 \delta} &= \underbrace{\rho f_x}_{10^4} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}_{10^{10} \delta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{10^9} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{10^4 \delta} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

B.2.2.2 Análise dos Termos da Componente- y

Comparando a componente y da equação da quantidade de movimento (equação (B.6)), com a componente x (equação (B.7)), fica claro que as ordens de magnitude de seus termos

são idênticas às ordens de magnitude dos termos da equação da componente x . Ou seja,

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_y}{\partial t}}_{10^4 \delta} &= \underbrace{\rho f_y}_{10^4} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial y}}_{10^{10} \delta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(2\eta \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{10^9} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)}_{10^4 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{10^4 \delta} \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

B.2.2.3 Análise dos Termos da Componente- z

Expandindo a componente z da equação da quantidade de movimento, tem-se:

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_{(i)} &= \underbrace{\rho f_z}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial z}}_{(iii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{(iv)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{(v)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{(vi)} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{(vii)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{(viii)} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{(ix)} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{(x)} - \underbrace{\rho \left(v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{(xi)} \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Agora, vamos avaliar cada termo nesta equação

Termo (i):

$$O \left[\rho \frac{\partial v_z}{\partial t} \right] = O \left[\rho_0 \frac{\delta V}{t_0} \right] = O \left[\rho_0 \frac{\delta^2 V^2}{H} \right] = O \left[10^3 \frac{\delta^2 10^{-2}}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta^2] \quad (\text{B.24})$$

Termo (ii):

$$O[\rho g_z] = O[\rho_0 g_0] = O[10^3 10] = O[10^4] \quad (\text{B.25})$$

Termo (iii):

$$O \left[\frac{\partial p}{\partial z} \right] = O \left[\frac{p_0}{H} \right] = O \left[\frac{10^7}{10^{-3}} \right] = O[10^{10}] \quad (\text{B.26})$$

Termo (iv):

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \right] &= O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{V}{H} \right) \right] = O \left[\frac{\delta}{H} \left(\eta_0 \frac{V}{H} \right) \right] = O \left[\frac{\delta}{10^{-3}} \left(10^4 \frac{10^{-1}}{10^{-3}} \right) \right] \\ &= O[10^9 \delta] \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Termo (v):

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] &= O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{\delta V}{L} \right) \right] = O \left[\frac{\delta}{H} \left(\eta_0 \frac{\delta^2 V}{H} \right) \right] \\ &= O \left[\frac{\delta}{10^{-3}} \left(10^4 \frac{10^{-1} \delta^3}{10^{-3}} \right) \right] = O[10^9 \delta^3] \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Termo (vi):

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \right] &= O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{V}{L} \right) \right] = O \left[\frac{\delta}{H} \left(\eta_0 \frac{V}{H} \right) \right] = O \left[\frac{\delta}{10^{-3}} \left(10^4 \frac{10^{-1}}{10^{-3}} \right) \right] \\ &= O[10^9 \delta] \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Termo (vii):

$$\begin{aligned} O \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \right] &= O \left[\frac{1}{L} \left(\eta_0 \frac{\delta V}{L} \right) \right] = O \left[\frac{\delta}{H} \left(\eta_0 \frac{\delta^2 V}{H} \right) \right] \\ &= O \left[\frac{\delta}{10^{-3}} \left(10^4 \frac{10^{-1} \delta^3}{10^{-3}} \right) \right] = O[10^9 \delta^3] \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Termo (viii):

$$O \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] = O \left[\frac{1}{H} \left(\eta_0 \frac{\delta V}{L} \right) \right] = O \left[\frac{1}{10^{-3}} \left(10^4 \frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right) \right] = O[10^9 \delta] \quad (\text{B.31})$$

Termo (ix):

$$O \left[\rho v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{\delta V}{L} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{\delta^2 V}{H} \right] = O \left[10^3 10^{-1} \frac{10^{-1} \delta^2}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta^2] \quad (\text{B.32})$$

Termo (x):

$$O \left[\rho v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{\delta V}{L} \right] = O \left[\rho_0 V \frac{\delta^2 V}{H} \right] = O \left[10^3 10^{-1} \frac{10^{-1} \delta^2}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta^2] \quad (\text{B.33})$$

Termo (xi):

$$O \left[\rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] = O \left[\rho_0 \delta V \frac{\delta V}{H} \right] = O \left[10^3 \delta 10^{-1} \frac{10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^4 \delta^2] \quad (\text{B.34})$$

Para comparar esses resultados é conveniente escrever a ordem sob cada termo na

equação (B.23):

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_{10^4 \delta} = & \underbrace{\rho f_z}_{10^4} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial z}}_{10^{10}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{10^9 \delta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{10^9 \delta^3} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right)}_{10^9 \delta} \\
 & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{10^9 \delta^3} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{10^9 \delta} - \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)}_{10^4 \delta^2} - \underbrace{\rho \left(v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)}_{10^4 \delta^2} - \underbrace{\rho \left(v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_{10^4 \delta^2}
 \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Como a maioria das peças moldadas por injeção são constituídas por paredes finas, espera-se δ muito menor do que um. Tipicamente, δ varia no intervalo $0,001 < \delta < 0,1$. Conhecendo os prováveis valores de δ , os termos mais dominantes são o gradiente de pressão e as forças viscosas resultantes das derivadas na direção z . Estes termos estão marcados com asteriscos (*) na tabela.

Em particular, para $\delta = 0,1$, forças gravitacionais e inerciais são, respectivamente, cinco e seis ordens de magnitude menores que os maiores termos. Desta forma, ignora-se todos os termos menores ou iguais a $10^9 \delta$, e então, as equações para as componentes x , y e z da equação quantidade de movimento se tornam, respectivamente:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \\
 \frac{\partial p}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \\
 \frac{\partial p}{\partial z} &= 0
 \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

B.2.3 Equação da Temperatura para a Cavidade

A equação da energia para a fase de preenchimento, equação (2.14), pode ser escrita em coordenadas cartesianas como segue:

$$\begin{aligned}
 \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) &= \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + v_x \frac{\partial p}{\partial x} + v_y \frac{\partial p}{\partial y} + v_z \frac{\partial p}{\partial z} \right) \\
 &+ \eta \dot{\gamma}^2 + k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)
 \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

Analogamente ao caso das equações da quantidade de movimento, a ordem de mag-

nitidade de cada termo é estimada usando valores característicos. Expandindo a equação e numerando cada termo, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{(i)} + \underbrace{\rho c_p v_x \frac{\partial T}{\partial x}}_{(ii)} + \underbrace{\rho c_p v_y \frac{\partial T}{\partial y}}_{(iii)} + \underbrace{\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z}}_{(iv)} \\
 &= \underbrace{\beta T \frac{\partial p}{\partial t}}_{(v)} + \underbrace{\beta T v_x \frac{\partial p}{\partial x}}_{(vi)} + \underbrace{\beta T v_y \frac{\partial p}{\partial y}}_{(vii)} + \underbrace{\beta T v_z \frac{\partial p}{\partial z}}_{(viii)} \\
 &+ \underbrace{\eta \dot{\gamma}^2}_{(ix)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}}_{(x)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}}_{(xi)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}}_{(xii)}
 \end{aligned} \tag{B.38}$$

Agora calcula-se se a ordem de magnitude de cada um dos termos:

Termo (i):

$$\begin{aligned}
 O \left[\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \right] &= O \left[\rho_0 c_{p0} \frac{T_0}{t_0} \right] = O \left[\rho_0 c_{p0} \frac{\delta T_0 V}{H} \right] = O \left[10^3 10^3 \frac{10^2 10^{-1} \delta}{10^{-3}} \right] \\
 &= O[10^{10} \delta]
 \end{aligned} \tag{B.39}$$

Termo (ii):

$$\begin{aligned}
 O \left[\rho c_p v_x \frac{\partial T}{\partial x} \right] &= O \left[\rho_0 c_{p0} V \frac{T_0}{t_0} \right] = O \left[\rho_0 c_{p0} V \frac{\delta T_0}{H} \right] = O \left[10^3 10^3 10^{-1} \frac{10^2 \delta}{10^{-3}} \right] \\
 &= O[10^{10} \delta]
 \end{aligned} \tag{B.40}$$

Termo (iii):

$$\begin{aligned}
 O \left[\rho c_p v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right] &= O \left[\rho_0 c_{p0} V \frac{T_0}{t_0} \right] = O \left[\rho_0 c_{p0} V \frac{\delta T_0}{H} \right] = O \left[10^3 10^3 10^{-1} \frac{10^2 \delta}{10^{-3}} \right] \\
 &= O[10^{10} \delta]
 \end{aligned} \tag{B.41}$$

Termo (iv):

$$\begin{aligned}
 O \left[\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] &= O \left[\rho_0 c_{p0} \delta V \frac{T_0}{H} \right] = O \left[\rho_0 c_{p0} \delta V \frac{\delta T_0}{H} \right] = O \left[10^3 10^3 \delta 10^{-1} \frac{10^2}{10^{-3}} \right] \\
 &= O[10^{10} \delta]
 \end{aligned} \tag{B.42}$$

Termo (v):

$$\begin{aligned} O \left[\beta T \frac{\partial p}{\partial t} \right] &= O \left[\beta_0 T_0 \frac{p_0}{t_0} \right] = O \left[\beta_0 T_0 \frac{p_0 \delta V}{H} \right] = O \left[10^{-3} 10^2 \frac{10^7 \delta 10^{-1}}{10^{-3}} \right] \\ &= O[10^8 \delta] \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

Termo (vi):

$$\begin{aligned} O \left[\beta T v_x \frac{\partial p}{\partial x} \right] &= O \left[\beta_0 T_0 V \frac{p_0}{L} \right] = O \left[\beta_0 T_0 V \frac{\delta p_0}{H} \right] = O \left[10^{-3} 10^2 10^{-1} \frac{10^7 \delta}{10^{-3}} \right] \\ &= O[10^8 \delta] \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

Termo (vii):

$$\begin{aligned} O \left[\beta T v_y \frac{\partial p}{\partial y} \right] &= O \left[\beta_0 T_0 V \frac{p_0}{L} \right] = O \left[\beta_0 T_0 V \frac{\delta p_0}{H} \right] \\ &= O \left[10^{-3} 10^2 10^{-1} \frac{10^7 \delta}{10^{-3}} \right] = O[10^8 \delta] \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Termo (viii):

$$O \left[\beta T v_z \frac{\partial p}{\partial z} \right] = O \left[\beta_0 T_0 \delta V \frac{p_0}{H} \right] = O \left[10^{-3} 10^2 \delta 10^{-1} \frac{10^7}{10^{-3}} \right] = O[10^8 \delta] \quad (\text{B.46})$$

Termo (ix):

$$O[\eta \dot{\gamma}^2] = O \left[\eta_0 \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} \right)^2 \right] = O \left[\eta_0 \left(\frac{V}{H} \right)^2 \right] = O \left[10^4 \left(\frac{10^{-1}}{10^{-3}} \right)^2 \right] = O[10^8] \quad (\text{B.47})$$

Termo (x):

$$O \left[k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right] = O \left[k_0 \frac{T_0}{L^2} \right] = O \left[k_0 \frac{T_0 \delta^2}{H^2} \right] = O \left[10^{-1} \frac{10^2 \delta^2}{10^{-6}} \right] = O[10^7 \delta^2] \quad (\text{B.48})$$

Termo (xi):

$$\begin{aligned} O \left[k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] &= O \left[k_0 \frac{T_0}{L^2} \right] = O \left[k_0 \frac{T_0 \delta^2}{H^2} \right] = O \left[10^{-1} \frac{10^2 \delta^2}{10^{-6}} \right] \\ &= O[10^7 \delta^2] \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

Termo (xii):

$$O \left[k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] = O \left[k_0 \frac{T_0}{H^2} \right] = O \left[10^{-1} \frac{10^2}{10^{-6}} \right] = O[10^7] \quad (\text{B.50})$$

Escrevendo essas magnitudes abaixo dos seus respectivos termos, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{(10^{10}\delta)} + \underbrace{\rho c_p v_x \frac{\partial T}{\partial x}}_{(10^{10}\delta)} + \underbrace{\rho c_p v_y \frac{\partial T}{\partial y}}_{(10^{10}\delta)} + \underbrace{\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z}}_{(10^{10}\delta)} \\
 &= \underbrace{\beta T \frac{\partial p}{\partial t}}_{(10^8\delta)} + \underbrace{\beta T v_x \frac{\partial p}{\partial x}}_{(10^8\delta)} + \underbrace{\beta T v_y \frac{\partial p}{\partial y}}_{(10^8\delta)} + \underbrace{\beta T v_z \frac{\partial p}{\partial z}}_{(10^8\delta)} \\
 &+ \underbrace{\eta \dot{\gamma}^2}_{(10^8)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}}_{(10^7\delta^2)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}}_{(10^7\delta^2)} + \underbrace{k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}}_{(10^7)}
 \end{aligned} \tag{B.51}$$

Pode-se, então, observar que os termos envolvendo variação de energia devido compressão e/ou expansão e condução nas direções x e y são de ordem de magnitude significativamente menor. Desta forma, estes termos são ignorados e obtém-se a seguinte equação de energia:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \eta \dot{\gamma}^2 + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \tag{B.52}$$