

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**ANÁLISE NUMÉRICA DE TENSÕES INDUZIDAS PELO
ESCOAMENTO NÃO ISOTÉRMICO DE UM POLÍMERO NO
PREENCHIMENTO DE CAVIDADES DE PAREDES FINAS**

TESE DE DOUTORADO

JOÃO ANTÔNIO PINTO DE OLIVEIRA

PORTO ALEGRE, RS

2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**ANÁLISE NUMÉRICA DE TENSÕES INDUZIDAS PELO
ESCOAMENTO NÃO ISOTÉRMICO DE UM POLÍMERO NO
PREENCHIMENTO DE CAVIDADES DE PAREDES FINAS**

João Antônio Pinto de Oliveira

Tese de doutorado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título
de doutor em engenharia

Área de Concentração: Pesquisa e
Desenvolvimento de Processos

Orientador:

Prof. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo, D.Sc.

Co-orientador:

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

PORTO ALEGRE, RS

2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A comissão examinadora, abaixo assinada, aprova a Tese de Doutorado *Análise Numérica de Tensões Induzidas pelo Escoamento não Isotérmico de um Polímero no Preenchimento de cavidades de Paredes Finas*, elaborada por João Antônio Pinto de Oliveira, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Aurélio da Costa Sabino Netto

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli

Prof. Dr. André Rodrigues Muniz

Para minha esposa Carla e minha filha Gabriela pelo apoio, paciência, dedicação, incentivo e amor.

Em memória de minha querida e dedicada mãe, Amparo.

Agradecimentos

Ao meu orientador Nilo minha gratidão pela paciência e pela orientação valiosa que tornou possível a realização deste trabalho.

Ao meu co-orientador Argemiro e ao Jovani Fávero pelo suporte nas horas certas.

Aos colegas Andréia Rodrigues Machado e Jonas Granada pela colaboração valiosa.

Ao IFSul pela liberação para realização deste trabalho.

Aos colegas do IFSul pela amizade e pelo apoio a todas as minhas necessidades.

Pela ajuda sempre que solicitada, agradeço aos colegas Aurélio, Bork, Climaco, Durval, Marcus, Pedrini, Fátima e Genízia.

Aos colegas do LASIM.

Aos colegas Cleiton e Rodolfo pela amizade e pela colaboração.

Ao DEQUI pela oportunidade, pelas excelentes condições de trabalho e pela generosidade.

Aos professores e funcionários do DEQUI sempre dispostos a colaborar com o crescimento do trabalho.

Ao Igor Rodacovski pelo suporte qualificado e atencioso na área da informática.

Aos professores das bancas do Oktoberforum, de qualificação e da defesa pela valiosa colaboração a este trabalho.

Resumo

O processo de moldagem por injeção de peças de paredes finas apresenta diferenças significativas em relação a processos convencionais de moldagem por injeção de termoplásticos. Processos de paredes finas são caracterizados pelo preenchimento de cavidades com espessuras inferiores a 1 mm utilizando velocidades de preenchimento elevadas. Estes dois fatores afetam o desenvolvimento de tensões induzidas pelo escoamento durante o preenchimento da cavidade, sendo que não foram encontrados na literatura estudos de determinação de tensões induzidas pelo escoamento em cavidades de paredes finas. Neste trabalho são apresentados resultados de determinação de tensões induzidas pelo escoamento em cavidades de paredes finas em comparação com resultados de simulação com cavidades características de processos convencionais. Para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento foi utilizado o modelo incompressível de Leonov. Para isso foi desenvolvida uma metodologia numérica para tratar problemas não isotérmicos utilizando o pacote CFD *OpenFOAM*. Foi utilizada a abordagem não acoplada, ou seja, o comportamento viscoelástico não é considerado na obtenção dos campos de velocidade, pressão e temperatura. Esta metodologia foi utilizada na simulação do preenchimento de cavidades bidimensionais. Os resultados indicaram que as tensões são influenciadas fortemente pela espessura da cavidade enquanto a velocidade de escoamento causou pequena variação das tensões induzidas pelo escoamento. Este trabalho mostrou que as tensões induzidas pelo escoamento não podem ser desconsideradas na produção de peças moldadas por injeção pelo processo de paredes finas.

Palavras chaves: moldagem por injeção, paredes finas, tensões induzidas pelo escoamento, escoamento viscoelástico, modelo de Leonov, *OpenFOAM*, *viscoelasticInterFoam*

Abstract

Thin wall injection molding process of thermoplastics has significant differences compared to conventional injection molding process. Thin wall processes are characterized by cavities thinner than 1 mm and very high injection velocities. Although these two factors are expected to increase the flow induced stresses development during cavities filling, no previous study on this subject has been found in literature. In the present work, flow induced stresses under thin wall injection molding conditions are calculated using a viscoelastic model and compared to the results obtained under conventional injection conditions. In order to do this, a numerical methodology, based on the solver *viscoelasticInterFoam*, was developed in the *OpenFOAM* package to deal with the non-isothermal flow occurring during the mold filling stage. A non-coupled approach was used to calculate the stress field, i.e., the viscoelastic behavior was not considered in the determination of velocity, pressure and temperature fields. This methodology was used in the analysis of the filling stage of two-dimensional cavities. The results indicated that the cavity thickness has more influence on the flow induced stresses than the injection velocity. The obtained results also indicate that the flow induced stresses cannot be neglected in thin wall injection molding processes.

Key words: polymer injection molding, thin wall, flow induced stresses, viscoelastic flow, Leonov model, *OpenFOAM*, *viscoelasticInterFoam*.

Sumário

	Lista de Figuras	xix
	Lista de Tabelas	xxv
	Lista de Símbolos	xxvii
1	Introdução	1
2	Conceitos fundamentais e revisão bibliográfica	4
2.1	O processo de injeção de peças de paredes finas	4
2.1.1	O processo de injeção e suas etapas	4
2.1.2	Peças injetadas de paredes finas	5
2.1.3	Características de processamento de peças de paredes finas	6
2.1.4	Características das máquinas injetoras para paredes finas	7
2.1.5	Características dos materiais recomendados para processos de paredes finas	7
2.1.6	Projeto de peças e de moldes para processos de paredes finas	8
2.2	Mecanismos propostos para o desenvolvimento de tensões residuais e orientação molecular em peças injetadas	10
2.3	Métodos para determinação de tensões residuais	14
2.4	Cálculo de tensões residuais	16
2.4.1	Cálculo de tensões residuais induzidas pelo escoamento	16
2.4.2	Cálculo de tensões residuais induzidas pelo resfriamento	18
2.5	Simulação do processo de injeção	21

3	Metodologia	23
3.1	Equações governantes para a simulação do processo de preenchimento de cavidades de moldes de injeção	23
3.1.1	Equações de conservação	24
3.1.2	Equações constitutivas mecânicas utilizadas	26
3.1.2.1	Fluido Newtoniano	26
3.1.2.2	Fluido Newtoniano Generalizado	26
3.1.2.3	Fluidos viscoelásticos	27
3.1.3	Dependência dos parâmetros das equações constitutivas com a temperatura	29
3.2	Metodologia numérica	30
3.2.1	<i>Solvers</i> para problemas isotérmicos utilizados neste trabalho	32
3.2.2	Implementação do <i>solver</i> para problemas não-isotérmicos	32
3.2.3	Esquemas de discretização e solução dos sistemas de equações discretizados	34
3.2.4	Condições de contorno e iniciais	35
3.3	Definição dos casos de estudo: geometrias e malhas	35
3.3.1	Caso I: testes preliminares em problemas isotérmicos	35
3.3.2	Caso II: validação da metodologia desenvolvida para escoamento isotérmico	39
3.3.3	Caso III: cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos	40
3.3.4	Caso IV: cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos – testes preliminares	41
3.3.5	Caso V: comparação dos resultados obtidos com a metodologia desenvolvida para escoamento não isotérmico com resultados da literatura	42
3.3.6	Caso VI: cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas em comparação com condições convencionais	43

3.3.7	Caso VII: estudo aplicabilidade da metodologia desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com resultados experimentais	44
3.4	Propriedades termofísicas e reológicas empregadas nas simulações	45
3.4.1	Caso I: valores dos parâmetros para os testes preliminares em problemas isotérmicos	45
3.4.2	Caso II: valores dos parâmetros para validação da metodologia implementada para processos isotérmicos	47
3.4.3	Caso III: valores dos parâmetros para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos	48
3.4.4	Caso IV: valores dos parâmetros para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos – avaliação preliminar	49
3.4.5	Caso V: valores dos parâmetros para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos – comparação com resultados da literatura	50
3.4.6	Caso VI: valores dos parâmetros para o cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas em comparação com condições convencionais	52
3.4.7	Caso VII: valores dos parâmetros para o estudo da aplicabilidade da metodologia não isotérmica desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com resultados experimentais	53
4	Resultados e Discussão	54
4.1	Caso I: testes preliminares em problemas isotérmicos	55
4.1.1	Cavidade tridimensional de paredes finas	55
4.1.2	Cavidade tridimensional de paredes finas com maior complexidade	65
4.2	Caso II: resultados da validação da metodologia desenvolvida para escoamento isotérmico através de acompanhamento da pressão no ponto de injeção durante o preenchimento	69
4.3	Caso III: cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos	70

4.3.1	Avaliação do <i>solver viscoelasticInterFoam</i> no limite newtoniano	70
4.3.2	Comparação de tensões induzidas pelo escoamento isotérmico entre peças convencionais e de paredes finas	73
4.4	Caso IV: resultados para cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em condições não isotérmicas e metodologia não acoplada – testes preliminares	77
4.5	Caso V: comparação dos resultados obtidos com a metodologia desenvolvida para cálculo de tensões viscoelásticas, em condições não isotérmicas e metodologia acoplada, com resultados da literatura	80
4.6	Caso VI: resultados para o cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas em comparação com condições convencionais	82
4.6.1	Influência da velocidade do fluido	83
4.6.2	Influência da espessura da cavidade	88
4.7	Caso VII: Resultados para o estudo da aplicabilidade da metodologia desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com resultados experimentais	91
5	Conclusões	96
	Referências Bibliográficas	98
	Apêndice	106
	Anexos	108

Lista de Figuras

2.1	Molde para embalagem de queijo, com seis cavidades, em PP, tempo de ciclo 4,2 s.	9
2.2	Molde para embalagem de margarina, com quatro cavidades, em PP, tempo de ciclo 5,2 s.	9
2.3	Molde para copos de plástico, com quatro cavidades, em PS, tempo de ciclo 4 s.	9
2.4	Representação esquemática dos perfis de velocidade, taxa de cisalhamento e temperatura, e da orientação molecular resultante das taxas de cisalhamento elevadas.	10
2.5	Variação da primeira diferença de tensões normais induzidas pelo escoamento em função da espessura adimensional calculada com o modelo de Leonov.	11
2.6	(a) Perfil de temperaturas durante o resfriamento. (b) Representação esquemática do perfil das diversas camadas caso não existisse restrição de contração entre as camadas resultando inexistência de tensões. (c) Perfil de tensões resultante da restrição de contração entre as camadas.	12
2.7	Componente τ_{11} em função da espessura adimensional calculada para quatro pontos da malha e comparada com resultados experimentais, representados com o símbolo o, obtidos pelo método de remoção de camadas.	13
3.1	Placa plana de paredes finas mostrando o plano xy e os canais de degasagem.	36
3.2	(a) Geometria e malha usados na análise da qualidade dos resultados. (b) Vista 3D mostrando detalhe do ponto de injeção e dos canais de saída de ar. (c) Volumes de controle no plano xz .	38

	(espessura).	
3.3	(a) Geometria e malha para estudo da evolução da pressão no preenchimento da cavidade. (b) Detalhe do ponto de injeção. (c) Malha no plano xz (espessura).	39
3.4	Geometria e malha usados na análise das tensões induzidas pelo escoamento.	41
3.5	Malha utilizada no teste não isotérmico.	41
3.6	Geometria e malha usada na análise de tensões induzidas pelo escoamento para uma placa com 2 mm de espessura. (a) Geometria completa em um plano xy (dimensões em mm). (b) Metade da peça no plano xy . (c) Detalhe da malha refinada na entrada da cavidade no plano xy .	42
3.7	(a) Geometria e (b) malha usada na análise das tensões induzidas pelo escoamento para geometria de placas paralelas com 0,7 mm de espessura.	43
3.8	(a) Peça moldada por injeção. (b) Geometria digitalizada.	44
4.1	Influência do refinamento e da razão de aspecto da malha sobre a definição da interface ao longo da espessura (plano xz). Nesta Figura a cor vermelha representa a parte preenchida da cavidade enquanto a cor azul representa a região não preenchida. As demais cores representam a interface entre os dois fluidos.	56
4.2	Posição da frente de fluxo no tempo 1,2 s (plano xy).	57
4.3	Resultados do teste de convergência.	58
4.4	Resultados de pressão de preenchimento em função do tempo de preenchimento para dois polímeros: teste 1, baixa viscosidade ($\eta = 4,22 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), e um com alta viscosidade ($\eta = 42152 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).	59
4.5	Fração sequencial em função do número de processadores em paralelo.	61
4.6	Comparação de resultados de pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento para uma simulação sem e	64

outra com *multigrid*.

4.7	Comparação de resultados de pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento para uma simulação sem e outra com relaxação.	64
4.8	Deslocamento da frente de fluxo.	65
4.9	Evolução da frente de fluxo.	66
4.10	Frente de fluxo (6.048 células). (a) Plano central; (b) Plano da parede.	67
4.11	Comparação da definição da interface obtida com duas malhas distintas: (a) 6.048 células com razão de aspecto máxima de 25 e (b) 101.282 células com razão de aspecto máxima de 5,8.	68
4.12	Comparação dos resultados de pressão no ponto de injeção durante o preenchimento da cavidade em função do tamanho da malha.	69
4.13	Evolução da pressão no ponto de injeção durante o preenchimento da cavidade para este trabalho junto com resultados da literatura.	70
4.14	Evolução da velocidade(u_x) na linha central no tempo de preenchimento de 0,2 s, com velocidade constante na entrada de 0,1 m/s, com os <i>solvers viscoelasticInterFoam</i> e <i>InterFoam</i> .	71
4.15	Perfil de velocidades na direção y , em $x = 2,5$ mm, no tempo de preenchimento de 0,1 s, com velocidade na entrada constante de 0,1 m/s, com os <i>solvers viscoelasticInterFoam</i> e <i>interFoam</i> .	72
4.16	Perfil de tensão τ_{xy} em $x = 2,5$ mm, tempo = 0,2 s, com os <i>solvers interFoam</i> e <i>viscoelasticInterFoam</i> .	73
4.17	Perfil, ao longo da espessura, da primeira diferença de tensões normais em uma placa com espessura de 2 mm, com velocidade de escoamento de $0,0896 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ em $x = 0,03$ m. Placa com 60 mm de comprimento.	74

4.18	Perfis da primeira diferença de tensões normais, ao longo da espessura, em placas com espessuras de 0,4 mm, 0,6 mm e 0,8 mm, em $x = 0,03$ m, para o tempo $t = 0,05$ s.	75
4.19	Perfis da primeira diferença de tensões normais, ao longo da espessura, em placas com espessura de 1 mm, em $x = 0,03$ m, para diferentes velocidades na entrada da cavidade.	76
4.20	Tensões induzidas pelo escoamento em três pontos situados em diferentes distâncias em relação ao ponto de injeção (3, 10 e 15 mm) em uma placa com espessura de 1 mm para o tempo de preenchimento $t = 0,2$ s.	78
4.21	Perfis ao longo da espessura da primeira diferença de tensões normais em uma placa de 1 mm, calculada para um processo isotérmico e não isotérmico, a $x = 0,01$ m para o tempo $t = 0,2$ s.	79
4.22	Perfis do componente da velocidade na direção x , ao longo da espessura, em uma placa com 1 mm de espessura, calculada para um processo isotérmico e não isotérmico, para o tempo $t = 0,2$ s.	79
4.23	Perfis ao longo da espessura da taxa de cisalhamento, em uma placa com espessura de 1 mm, calculada para um processo isotérmico e um processo não isotérmico, para o tempo $t = 0,2$ s.	80
4.24	Resultados do teste de convergência de malha para simulação de 0,23 s de preenchimento da cavidade.	81
4.25	Resultados da primeira diferença de tensões normais em função da espessura adimensional obtidos neste trabalho comparado com os resultados apresentados em DOUVEN (1991) para tempo de preenchimento de 0,95 s.	82
4.26	Perfis de velocidade a $x = 0,03$ m, para sete valores de velocidade na entrada da cavidade (componente u_x), em uma cavidade de parede fina com 0,9 mm de espessura.	83
4.27	Perfis de taxa de cisalhamento ao longo da espessura em $x = 0,03$ m, para sete valores de velocidade na entrada da cavidade (componente u_x), em uma cavidade de parede fina com espessura de 0,9 mm.	84

4.28	Perfis de temperatura ao longo da espessura a $x = 0.03$ m, para cinco diferentes velocidades na entrada (componente u_x), em uma cavidade de paredes finas, com 0,9 mm de espessura.	85
4.29	Primeira diferença de tensões normais para quatro diferentes velocidades na entrada na cavidade (componente u_x) em uma cavidade em condições de paredes finas com 0,9 mm de espessura.	86
4.30	Primeira diferença de tensões normais para três diferentes velocidades na entrada na cavidade (componente u_x) em uma cavidade em condições de paredes finas com 0,9 mm de espessura.	86
4.31	Primeira diferença de tensões normais para três diferentes velocidades na entrada na cavidade (componente u_x) em uma cavidade em condições de paredes finas com 0,9 mm de espessura.	87
4.32	Primeira diferença de tensões normais, em $x = 0,03$ m, para simulações com condições de paredes finas (placas com diferentes espessuras com velocidade $0,6 \text{ m.s}^{-1}$) em comparação com uma condição convencional (2,0 mm de espessura com velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$).	88
4.33	Primeira diferença de tensões normais para uma cavidade de paredes finas com espessura de 0,9 mm, com três velocidades diferentes, em comparação com um processo convencional: velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$ e espessura de 2,0 mm.	89
4.34	Primeira diferença de tensões normais para uma cavidade de paredes finas com espessura de 0,7 mm, com três velocidades diferentes, em comparação com um processo convencional: velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$ e espessura de 2,0 mm.	90
4.35	Primeira diferença de tensões normais para uma cavidade de paredes finas com espessura de 0,5 mm, com três velocidades diferentes, em comparação com um processo convencional: velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$ e espessura de 2,0 mm.	90

- 4.36 Taxas de cisalhamento no preenchimento de uma cavidade com espessura de 0,3 mm com velocidade de 2,0 m.s⁻¹. As áreas azuis representam taxas de cisalhamento inferiores a 40.000 s⁻¹. 91
- 4.37 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 5 cm³. (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,04 s. 92
- 4.38 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 7 cm³. (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,1 s. 93
- 4.39 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 10 cm³. (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,16 s. 93
- 4.40 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 13 cm³. (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,35 s. 94
- 4.41 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 16 cm³. (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,48 s. 94

Lista de Tabelas

3.1	Tamanhos das malhas utilizadas nas simulações	37
3.2	Malhas utilizadas no teste de convergência para o caso de estudo II	40
3.3	Características das malhas utilizadas no caso de estudo VI	43
3.4	Propriedades para o trabalho de avaliação da qualidade dos resultados em função das características da malha	46
3.5	Propriedades reológicas	47
3.6	Propriedades para comportamento Newtoniano	48
3.7	Propriedades térmicas e parâmetros para o Modelo Cross-WLF	49
3.8	Parâmetros térmicos para o PS (Styron 678E)	50
3.9	Parâmetros para a equação Cross-WLF para o PS (Styron 678E)	51
3.9	Parâmetros viscoelásticos lineares para o modelo Leonov (Styron 678E)	51
3.10	Parâmetros térmicos para o PS (Styron 615APR)	52
3.11	Parâmetros para o modelo Cross-WLF (Styron 615APR)	52
3.12	Parâmetros viscoelásticos lineares para o modelo de Leonov (Styron 615APR)	53
4.1	<i>Speedup</i> e Eficiência (OpenMP/MPI) Teste 4	60
4.2	<i>Speedup</i> para processamento em paralelo com 4 processadores	62

4.3	Influência do uso de técnicas <i>multigrid</i> sobre o desempenho computacional	62
4.4	Resultados de avaliação de diversos <i>solvers</i> para a equação da velocidade	63

Lista de Símbolos

α	fração sequencial (processamento em paralelo)
β	coeficiente de compressibilidade
$\underline{\underline{\delta}}$	tensor unitário
ε	parâmetro de não linearidade (modelo PTT)
$\dot{\gamma}$	taxa de cisalhamento
η	eficiência (processamento em paralelo)
η	viscosidade Newtoniana e parâmetro viscoelástico linear obtido no limite de deformações infinitesimais
η_0	viscosidade extrapolada a taxa de cisalhamento nula
η_∞	viscosidade extrapolada a taxa de cisalhamento infinita
η_P	parâmetro viscoelástico linear para o modelo Leonov
κ	condutividade térmica
λ	tempo de relaxação (parâmetro viscoelástico linear obtido no limite de deformações infinitesimais)
$\underline{\underline{\pi}}$	tensor das tensões totais
ρ	massa específica
$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\sigma}}}$	derivada convectiva superior do tensor tensão $\underline{\underline{\sigma}}$
$\underline{\underline{\sigma}}$	tensor tensão definido por $\underline{\underline{\tau}} \equiv \underline{\underline{\sigma}} - G\underline{\underline{\delta}}$
$\underline{\underline{\tau}}$	tensor das tensões viscosas
τ^*	tensão de cisalhamento na transição entre o comportamento Newtoniano e o comportamento representado pela lei das potências (modelo Bird-Carreau)
$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}$	é a derivada convectiva superior do tensor $\underline{\underline{\tau}}$

$tr(\underline{\underline{\tau}})$	traço do tensor das tensões viscosas $\underline{\underline{\tau}}$.
ξ	Parâmetro que quantifica a velocidade de escorregamento entre os segmentos da rede molecular e o contínuo (modelo PTT)
a_T	função deslocamento tempo – temperatura (propriedade material)
A_1 e \tilde{A}_2	parâmetros que dependem do material para o modelo WLF
c_p	calor específico a pressão constante
$\underline{\underline{D}}$	tensor taxa de deformação
$D_1, D_2,$ D_3	parâmetros que dependem do material para o modelo WLF
\underline{g}	vetor aceleração da gravidade
G	constante definida como $G = \eta/\lambda$
k	parâmetro do modelo Bird-Carreau
n	índice adimensional da lei das potências (modelo Bird-Carreau)
p	pressão
\underline{q}	vetor fluxo de calor
S	<i>speedup</i> (processamento em paralelo)
t	tempo
T	temperatura
T_0	temperatura de referência
T_g	temperatura de transição vítrea
D/Dt	derivada material (ou substantiva) do tempo
\underline{u}	vetor velocidade

Capítulo 1

Introdução

A moldagem por injeção é um dos processos mais importantes da indústria de polímeros. Este processo pode ser separado em três etapas: preenchimento, recalque e resfriamento. A simulação numérica deste processo é muito importante tanto para o projeto do molde como para a determinação das condições de operação.

Um aspecto importante na simulação do processo de moldagem por injeção é a predição das tensões residuais em função dos parâmetros de processo (WANG & YANG, 2005; CAO et al., 2008), pois os métodos apresentados na literatura para a determinação experimental destas tensões são muito trabalhosos e nem sempre apresentam resultados confiáveis (TREUTING & READ, 1951; RUSSEL & BEAUMONT, 1980; ISAYEV & CROUTHAMEL, 1984; PATERSON & WHITE, 1989; HASTENBERG et al., 1992; KABANEMI et al., 1998; MILLER & RAMANI, 1999; TURNBULL et al., 1999; KIM et al., 2002; HEMSLEY & ROBINSON, 1992; MAXWELL & TURNBULL, 2003; KIM et al., 2007; KIM & YOUN, 2007).

São chamadas de tensões residuais aquelas tensões que permanecem no produto acabado após a remoção de sua força geradora original (campos de fluxo, de temperatura, ou de pressão, principalmente). São tensões mecânicas presentes no moldado mesmo na ausência da aplicação de forças externas. As tensões residuais são somadas às cargas externas exercidas sobre a peça durante sua vida útil sendo, portanto, um item importante para a sua qualidade. São a causa principal de variações dimensionais (contração e empenamento), após a extração da peça, e da ocorrência de quebra sob tensões ambientais (*environmental stress cracking*) (KAMAL et al., 2002). Quanto maior for a relação entre o caminho de fluxo e a espessura da peça, maior será a tendência de que esta sofra empenamento e desenvolvimento de tensões residuais (ROSATO & ROSATO, 1995; HUANG & TAI, 2001; SHEN & LI, 2003; BRETAS & D'ÁVILA, 2005).

As tensões residuais em peças plásticas podem ser classificadas em tensões residuais induzidas pelo escoamento e termicamente induzidas, ou seja, induzidas pelos campos de temperatura e de pressão durante o resfriamento da peça (DOUVEN et al., 1995; ZOETELIEF et al., 1996).

CHANG & CHIOU (1995) calcularam as tensões desenvolvidas em processos de injeção convencional (peças com espessuras iguais ou superiores a 2 mm), e observaram que as tensões termicamente induzidas são de uma a duas ordens de magnitude maiores do que as tensões induzidas pelo escoamento. Além disso, um grande número de artigos publicados, com relação a tensões residuais em peças plásticas, desprezou as tensões induzidas pelo escoamento (REZAYAT & STAFFORD, 1991; JANSEN, 1994; BUSHKO & STOKES, 1995; JANSEN & TITOMANLIO, 1996; TITOMANLIO & JANSEN, 1996; ZOETELIEF et al., 1996; CHEN et al., 2000; KAMAL et al., 2002; ZHANG et al., 2002; SHEN & LI, 2003; YOUNG, 2004; WANG & YANG, 2005; ZHOU & LI, 2005; ZHOU et al., 2008).

Entretanto, este tipo de tensão residual está sempre presente, em algum nível, em peças moldadas por injeção e podem, em alguns casos críticos, exercer um papel importante em suas propriedades finais. A presença de tensões residuais induzidas pelo escoamento em peças poliméricas é devido ao fato de que sua completa relaxação é parcialmente impedida pelas elevadas taxas de resfriamento usadas no processo (DOUVEN et al., 1995). A influência em potencial das tensões residuais sobre as propriedades finais das peças está relacionada com o efeito da orientação molecular congelada sobre a anisotropia das propriedades óticas, térmicas e mecânicas, e sobre a estabilidade dimensional das peças em longo prazo.

Neste sentido, é relevante considerar a produção de peças de paredes finas. Este processo pode ser definido através das características geométricas das peças produzidas: espessuras iguais ou inferiores a 1 mm e razão entre caminho de fluxo e espessura superior a 100 (PARK et al., 2006). A importância das peças de paredes finas tem crescido nos últimos anos devido a vantagens como maiores taxas de produção e redução do tamanho das peças e do consumo de matérias-primas (WEISS, 2000; HUANG & TAI, 2001; SPINA, 2004). Embalagens para alimentos e componentes de telefones celulares e de computadores portáteis são aplicações típicas deste processo. Em comparação com processos de injeção convencionais, a redução da espessura leva a menores tempos de resfriamento e requerem maiores pressões, velocidades de injeção e forças de fechamento do molde. A velocidade de preenchimento deve ser a maior possível para evitar que o rápido resfriamento da peça prejudique o seu preenchimento total. Desta maneira geram-se uma maior taxa de cisalhamento e orientação molecular e isto pode levar a uma maior possibilidade de geração de tensões residuais e empenamento. Assim, pode-se esperar que a importância relativa das tensões induzidas pelo escoamento seja mais pronunciada em peças de paredes finas do que em peças obtidas por processos convencionais. Apesar disso, a abordagem de desprezar as tensões induzidas pelo escoamento tem sido aplicada também para calcular as tensões residuais em peças de paredes finas (WANG & YANG, 2005), embora não se tenha

encontrado na literatura dados que comprovem que os resultados encontrados para processos de injeção convencionais sejam válidos para produção de peças de paredes finas.

Neste contexto, os objetivos principais deste trabalho são o desenvolvimento de um *solver* para simulação computacional da etapa de preenchimento do molde, em processos de injeção, possibilitando o cálculo das tensões geradas neste processo, utilizando um modelo viscoelástico, e a utilização deste *solver* para a análise de injeção de peças de paredes finas, em condições não isotérmicas, comparando com a injeção de peças convencionais.

Capítulo 2

Conceitos fundamentais e revisão bibliográfica

Neste capítulo são apresentados alguns conceitos fundamentais sobre o processo de injeção, na Seção 2.1, sobre os mecanismos propostos para o desenvolvimento de tensões residuais e orientação molecular em peças injetadas, na Seção 2.2, e sobre os métodos experimentais para determinação de tensões residuais, na Seção 2.3. Nas Seções 2.4 e 2.5 são apresentados, respectivamente, resultados de revisão bibliográfica sobre cálculo de tensões residuais e simulação do processo de injeção.

2.1 O processo de injeção de peças de paredes finas

2.1.1 O processo de injeção e suas etapas

Em um ciclo de moldagem por injeção, supondo adequada plastificação (fusão) do polímero, podem-se distinguir pelo menos quatro etapas distintas que influenciam as propriedades da peça: preenchimento volumétrico, pressurização, recalque e resfriamento. Durante a etapa de preenchimento o molde é preenchido com polímero plastificado que é injetado sob pressão elevada. Assim, próximo ao ponto de injeção (abertura para entrada de polímero na cavidade) se tem pressões elevadas, enquanto na frente de fluxo o material está sob pressões próximas à atmosférica. Depois do preenchimento completo da peça, começa a etapa de pressurização. Nesta etapa é adicionada uma quantidade de material além da necessária para o preenchimento volumétrico da cavidade resultando um aumento significativo da pressão. No recalque a pressão no ponto de injeção é controlada até que o material neste ponto encontre-se solidificado. A pressão exercida sobre o material contido na cavidade, durante o recalque, tem o objetivo de impedir retorno de polímero através do ponto de injeção e

introduzir mais material no molde à medida que a pressão da parte central da cavidade diminui em consequência da diminuição do volume específico do material durante o seu resfriamento. Apesar de que o resfriamento do material inicia ainda na etapa de preenchimento, quando o material quente entra em contato com as superfícies mais frias da cavidade do molde formando uma camada solidificada, é costume chamar-se de etapa de resfriamento propriamente dita a etapa que segue o recalque. Nesta última etapa, a pressão na cavidade sofre uma redução substancial. As camadas que solidificam na etapa de resfriamento se encontram na região do núcleo da peça (HASTENBERG et al., 1992).

2.1.2 Peças injetadas de paredes finas

Peças com paredes finas apresentam espessura de parede pequena e relação [caminho de fluxo] / [espessura] elevada, exigindo velocidades, pressões de injeção e forças de fechamento do molde mais elevadas. Os valores de espessura de parede e relação [caminho de fluxo] / [espessura] que definem peças de paredes finas variam na literatura.

São consideradas como peças com paredes finas aquelas cuja espessura está abaixo de 1,0 mm (PARK et al., 2006). Já as peças convencionais apresentam espessura de parede acima de 2,0 mm (WEISS, 2000; DOUVEN, 1995). Uma transição para paredes finas ocorre com peças cujas espessuras de parede situam-se entre 1,0 e 2,0 mm.

Entretanto, esta classificação apenas pela espessura da peça não é a mais adequada, pois a necessidade da utilização de maiores velocidades e pressões de preenchimento não é consequência apenas da pequena espessura da peça, mas também do aumento da relação [caminho de fluxo] / [espessura]. Assim, por exemplo, FASSET (1995) definiu processo de paredes finas como a moldagem por injeção de peças com espessura igual ou menor que 1,0 mm e área superficial de 50,0 cm² ou mais. Em geral, outros autores costumam adotar a relação [caminho de fluxo] / [espessura], e não a área da peça, para levar em consideração o percurso a ser percorrido pelo material dentro da cavidade. LIAO et al. (2004) e CHEN et al. (2007) definiram como sendo de paredes finas a peça com espessura menor que 1,5 mm e relação [caminho de fluxo] / [espessura] maior que 100. PARK et al. (2006) definiram como sendo de paredes finas a peça com espessura menor que 1,0 mm e relação [caminho de fluxo] / [espessura] maior que 100. De acordo com WENDER (2011) os casos mais críticos são os que apresentam espessura de 0,4 mm e relação [caminho de fluxo] / [espessura] de 350,0.

Tendo como base estas informações, neste trabalho serão tratadas como peças de paredes finas aquelas com espessura máxima de 1 mm e relação [caminho de fluxo] / [espessura] maior que 100 (PARK et al, 2006).

De acordo com FASSET (1995) a moldagem de peças de paredes finas apresenta três áreas gerais: processo, moldes e máquinas injetoras.

2.1.3 Características de processamento de peças de paredes finas

Conforme comentado na seção 2.1.2, o requerimento de elevadas pressões, velocidades de injeção e força de fechamento do molde são as principais características de processamento de peças de paredes finas. Estes requisitos estão relacionados com o rápido resfriamento e solidificação característicos de processos de paredes finas. Além do fato de que a pressão necessária para o preenchimento de uma cavidade aumenta com a diminuição da espessura da peça e com o aumento do caminho de fluxo, observa-se que à medida que diminui a espessura da parede das peças injetadas aumenta a relação entre a espessura da camada solidificada (pele) e a espessura do núcleo de polímero plastificado. Isto faz com que a área transversal disponível para o fluxo do material diminua ainda mais em peças de paredes finas do que em peças convencionais (PARK et al., 2006). Com elevadas velocidades de preenchimento da cavidade obtém-se adequada pressurização devido ao núcleo ainda se apresentar fluido no final do preenchimento da cavidade. Elevadas velocidades de injeção são necessárias, também, para proporcionar redução da viscosidade do material devido as suas características reológicas pseudoplásticas. Por isso é fundamental que o equipamento disponível para o processamento de peças de paredes finas possibilite pressões e velocidades de preenchimento maiores do que equipamentos convencionais. Isto pode ser observado, por exemplo, ao comparar as pressões de preenchimento máximas apresentadas por WANG & YOUNG (2005) para produção de peças de paredes finas (160 - 170 MPa) com as utilizadas por ZOETELIEF et al. (1996) para a produção de peças convencionais (50 – 60 MPa). Estes valores correspondem à pressão no ponto de injeção.

A velocidade de injeção pode ser expressa diretamente em termos da velocidade de deslocamento do parafuso durante a etapa em que o material é injetado na cavidade (medida em mm/s) ou indiretamente, em termos do tempo de injeção. Neste último caso, conhecendo-se o volume de injeção determina-se a vazão em cm^3/s . A velocidade do material, no ponto de injeção ou dentro da cavidade, pode ser calculada através da divisão da vazão pela área da seção transversal disponível para o escoamento na região considerada. Tempos típicos de preenchimento em processos de paredes finas estão entre 0,1 a 2,0 s (WEISS, 2000), enquanto que em processos convencionais este tempo é maior do que 2,0 s.

A maior velocidade de injeção requerida, combinada com menores seções transversais, causa o aumento da taxa de cisalhamento a que o material é submetido durante o preenchimento do molde, em processos de paredes finas, devendo levar a uma maior orientação molecular do material e, em casos extremos, a sua degradação.

A utilização de elevadas velocidades de injeção, mantendo a temperatura do polímero dentro dos valores recomendados pelo fabricante, favorece o preenchimento da cavidade sem causar significativa degradação do material. Embora a temperatura do

material seja elevada devido ao cisalhamento, baixa degradação é possível porque o tempo total em que a temperatura se eleva é extremamente curto. Este pico de temperatura de menos de um segundo não causa degradação significativa do material (FASSET, 1995).

À medida que diminui a espessura da parede, diminui também o tempo de ciclo porque existe menos material para esfriar e, principalmente, porque maior proporção da massa de polímero da peça está em contato com as superfícies da cavidade. Segundo MILLER (1995), o tempo de resfriamento é aproximadamente proporcional ao quadrado da espessura da peça. Por este motivo a eficiência do recalque diminui significativamente. WANG & YOUNG (2005) não observaram influência significativa da pressão de recalque nos resultados obtidos em suas previsões com peças de paredes finas. Peças com paredes finas requerem menor quantidade de material para serem produzidas. Caso o volume de injeção (*shot size*) diminua muito, haverá o risco de degradação do material no canhão da máquina (cilindro dentro do qual se encontra o parafuso que é responsável pela plastificação e pela pressão de injeção), caso a injetora não tenha sido dimensionada para esta aplicação.

2.1.4 Características das máquinas injetoras para paredes finas

Segundo SCHOTT (1998), para processos de paredes finas a máquina deve ser capaz de fornecer velocidades de injeção de até 1000,0 mm/s, com pressões hidráulicas de até 240,0 MPa. Máquinas convencionais fornecem velocidades de até 250,0 mm/s com pressões de 140,0 MPa. A velocidade na cavidade vai depender da área da seção transversal disponível para o escoamento. CHEN et al. (2007) utilizaram taxas de fluxo entre 96,6 e 124,2 cm³/s no estudo de resistência de linhas de solda em peças de paredes finas a base de ABS. Também é importante que a máquina proporcione uma rápida aceleração de zero até a velocidade máxima necessária para o processo devido aos reduzidos tempos de preenchimento envolvidos. A velocidade máxima do material na cavidade também é influenciada pela compressão do material na frente da rosca, devido às altíssimas velocidades envolvidas, e a velocidade da frente de fluxo dentro da cavidade pode não acompanhar a velocidade da rosca (WENDER, 2011).

2.1.5 Características dos materiais recomendados para processos de paredes finas

Para processos de paredes finas, as resinas termoplásticas devem apresentar elevada fluidez (baixa viscosidade) combinada com bom desempenho mecânico e físico. O material deve apresentar elevada resistência a impacto e relativamente elevado módulo de tração. Entretanto, baixa viscosidade está relacionada com baixos pesos moleculares e, portanto, com resistências mecânicas inferiores às obtidas com materiais

convencionais. O material a ser utilizado resultará de um balanço entre características de processamento e propriedades mecânicas.

O índice de fluidez é um teste utilizado para controle de qualidade em baixas taxas de cisalhamento. Ele representa a fluidez do polímero. Entretanto, seu valor representa apenas uma parte do comportamento reológico do polímero não sendo uma boa medida para comparação da fluidez de diferentes polímeros especialmente de famílias diferentes. São disponíveis, no mercado, materiais indicados para processos de paredes finas com índices de fluidez relativamente baixos. São apresentados como exemplos o polietileno HA 7260, da Braskem, com índice de fluidez de 20,0 g/ 10 min (Método ASTM D 1238, 190°C/2,16 kg), as blendas PC/ABS *Cycloy C6840*, *CX7211* e *CX7240* da *Sabic Innovative Plastics IP BV*, com índices de fluidez iguais a 26,0, 15,5 e 18,0 g/10 min (260°C/2,16 kg, ASTM D 1238), respectivamente, e o poliestireno *Styron® 615 APR* produzido pela *Dow Chemical* com índice de fluidez 14,0 g/10 min (200°C/ 5,00 kg, ASTM D 1238). Por outro lado, são disponíveis materiais com maior fluidez como os polipropilenos *H107* e *H117*, da Braskem, com índices de fluidez de 80,0 e 45,0 g/ 10 min (Método ASTM D 1238, 230°C / 2,16 kg).

2.1.6 Projeto de peças e de moldes para processos de paredes finas

Peças de paredes finas requerem não apenas máquinas injetoras e matérias-primas especiais, mas, também, cuidados no projeto da peça e na fabricação dos moldes. Devido às elevadas velocidades e pressões envolvidas em processos de paredes finas há maior possibilidade de o molde flexionar gerando rebarbas ou partes com espessuras maiores do que o esperado. Portanto as placas dos moldes devem ser mais espessas e rígidas (FASSET, 1995).

Os sistemas de remoção do ar da cavidade durante o preenchimento, de resfriamento e de extração das peças produzidas, também devem ser adequados a processos de paredes finas. O sistema de remoção do ar das cavidades deve ser mais eficiente para permitir sua rápida eliminação durante o rápido preenchimento do molde. O sistema de resfriamento também deve ser cuidadosamente projetado devido ao reduzido tempo de ciclo esperado para processos de paredes finas. A extração deve ser realizada com pinos mais largos e em maior número e, em alguns casos, torna-se necessário o uso de tratamentos superficiais para facilitar a extração da peça. Além disso, os pontos de injeção devem ser grandes e, muitas vezes, maiores que a espessura da peça para permitir fluxo elevado para dentro da cavidade (FASSET, 1995).

Para obter uma boa resistência a impacto é muito importante desenvolver a geometria das peças seguindo regras estabelecidas. O modo com que é projetada a montagem de componentes de uma peça também influencia a rigidez da peça.

Em geral se deve trabalhar com poucas cavidades nas peças de paredes finas, por causa do difícil balanceamento das cavidades. O número de cavidades normalmente não é superior a oito em processos de paredes finas (WENDER, 2011). Exemplos são apresentados nas Figuras 2.1 a 2.3.



Figura 2.1 Molde para embalagem de queijo, com seis cavidades, em PP, tempo de ciclo 4,2 s.

<http://www.schoettli.com/en/products/packaging/thin-wall-parts/lid-for-cheese-spread-container/#c480>

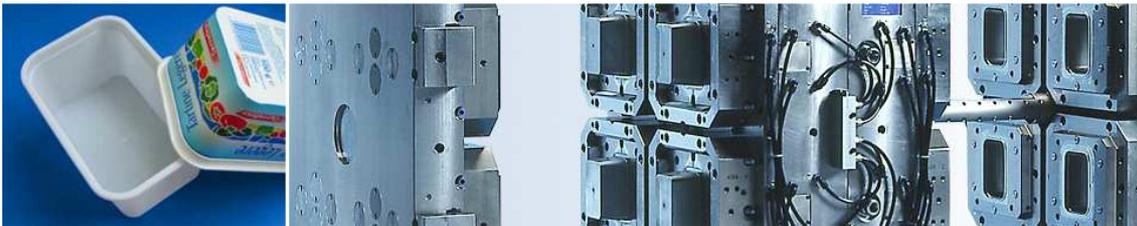


Figura 2.2 Molde para embalagem de margarina, com quatro cavidades, em PP, tempo de ciclo 5,2 s.

<http://www.schoettli.com/en/products/packaging/thin-wall-parts/margarine-tub-500-g/>



Figura 2.3 Molde para copos plásticos, com quatro cavidades, em PS, tempo de ciclo 4 s.

<http://www.schoettli.com/en/products/packaging/thin-wall-parts/drinking-glass-150-ml/>

2.2 Mecanismos propostos para o desenvolvimento de tensões residuais e orientação molecular em peças injetadas

Foi visto no Capítulo 1 que as tensões residuais são normalmente classificadas em tensões induzidas pelo fluxo e tensões induzidas pelo resfriamento.

As tensões residuais induzidas pelo fluxo têm sua origem na orientação molecular causada por tensões de cisalhamento (NEVES et al., 1998), as quais fazem as cadeias afastarem-se da conformação de novelo aleatório. Quando os tempos de relaxação da orientação dos segmentos de cadeia são maiores que o tempo no qual se efetua o processo de resfriamento, esta orientação é parcialmente congelada. A orientação congelada na peça causa uma pequena tensão entrópica no produto solidificado que é chamada tensão residual induzida pelo fluxo. Na Figura 2.4 é apresentada uma representação esquemática do surgimento de orientação molecular durante o preenchimento de uma cavidade.

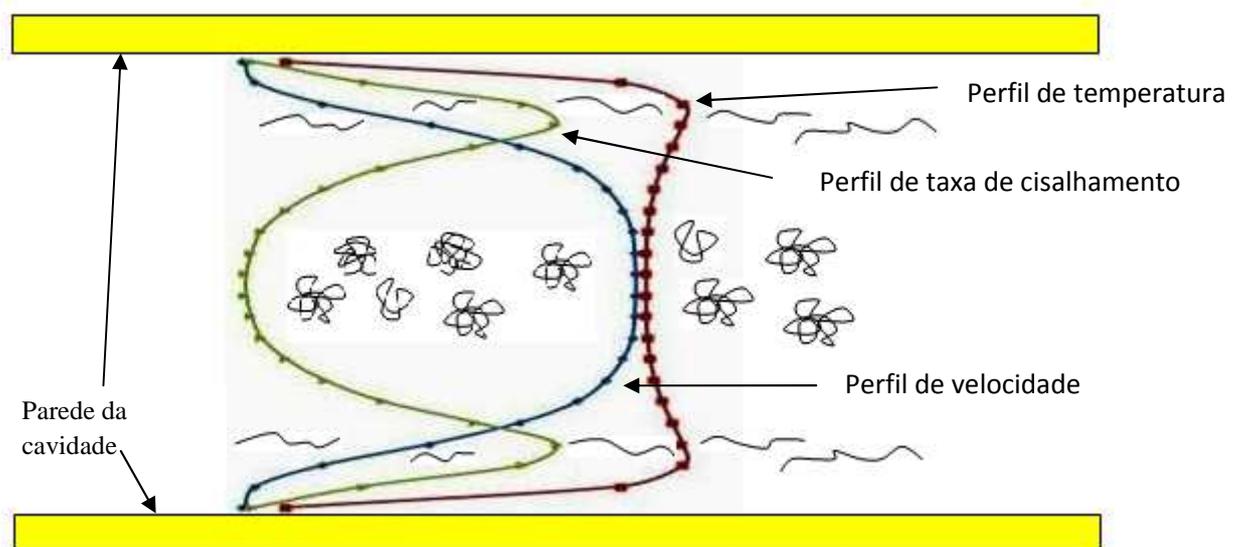


Figura 2.4 Representação esquemática dos perfis de velocidade, taxa de cisalhamento e temperatura, e da orientação molecular resultante das taxas de cisalhamento elevadas (figura adaptada de CAVALHEIRO, 2007).

Resultados de tensões induzidas pelo escoamento determinadas numericamente são apresentados na Figura 2.5 para um ponto situado dentro da cavidade e próximo ao

ponto de injeção. As tensões induzidas pelo escoamento devido ao preenchimento da cavidade são tensões de tração que se localizam próximo às paredes. Estas tensões crescem durante o preenchimento e diminuem com a relaxação após o final do preenchimento até que o resfriamento cause o congelamento das tensões residuais. Após o preenchimento ocorre a pressurização e o recalque, que são etapas caracterizadas pelo movimento lento do material para dentro da cavidade, mas que causa surgimento de tensões residuais induzidas pelo escoamento, pois as baixas temperaturas fazem com que a taxa de relaxação seja reduzida.

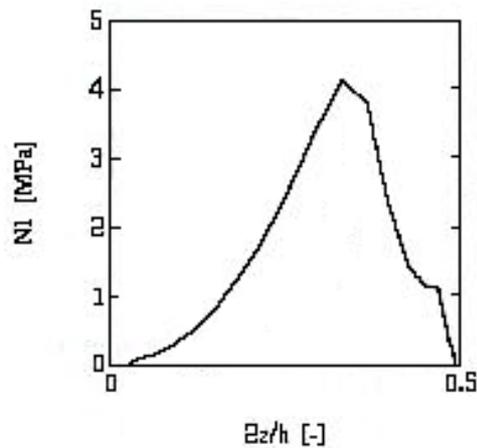


Figura 2.5 Variação da primeira diferença de tensões normais induzidas pelo escoamento em função da espessura adimensional, no fim da etapa de preenchimento, calculada com o modelo de Leonov (Figura adaptada de DOUVEN, 1991).

As tensões induzidas termicamente recebem esta denominação por se desenvolverem em função do resfriamento e solidificação da peça.

JANSEN (1994, 1999) apresentou uma classificação dos mecanismos de formação de tensões residuais induzidas termicamente, de forma simplificada, como *free* e *constrained quenching*. No *free quenching*, representado esquematicamente na Figura 2.6, mais comum em processos de extrusão, tem-se resfriamento brusco do polímero fundido em um escoamento ou movimento com superfícies livres, sem aplicação de forças externas e sob pressão atmosférica. O perfil de temperaturas é representado na Figura 2.6 (a). Neste mecanismo, cada camada, ao solidificar, sofre contração devido à diminuição do volume específico (aumento de densidade). A primeira camada que solidifica sofre contração livre e não contribui para a formação de tensões. Se as diferentes camadas pudessem escorregar umas em relação às outras o moldado apresentaria um perfil similar ao mostrado na Figura 2.6 (b) e o moldado não apresentaria tensões residuais. Entretanto, as camadas são mecanicamente ligadas entre

si e, assim, as que contraem subsequentemente são parcialmente impedidas devido à aderência com a camada solidificada anteriormente, resultando tensões residuais. O perfil de tensões é tal que haverá tensões de tração nas camadas centrais e tensões de compressão junto às paredes. Ver a Figura 2.6 (c). Estas tensões de tração e de compressão estão em equilíbrio. O *constrained quenching*, característico de processos de injeção, também é caracterizado pela contração diferencial de camadas induzida pelo resfriamento. Entretanto, com a diferença de que ocorre com o material confinado em uma cavidade de modo que as camadas que formam a superfície da peça estão imobilizadas pelo contato com as paredes do molde. Resulta um perfil de tensões com tensões de tração junto à superfície semelhante ao apresentado na Figura 2.7. A força motriz de tensões residuais para processo *free quenching* é predominantemente de natureza térmica enquanto que, no caso de contração restringida (*constrained quenching*), as tensões residuais são resultado da influência concomitante da pressão, variável ao longo do espaço, e dos gradientes de temperatura.

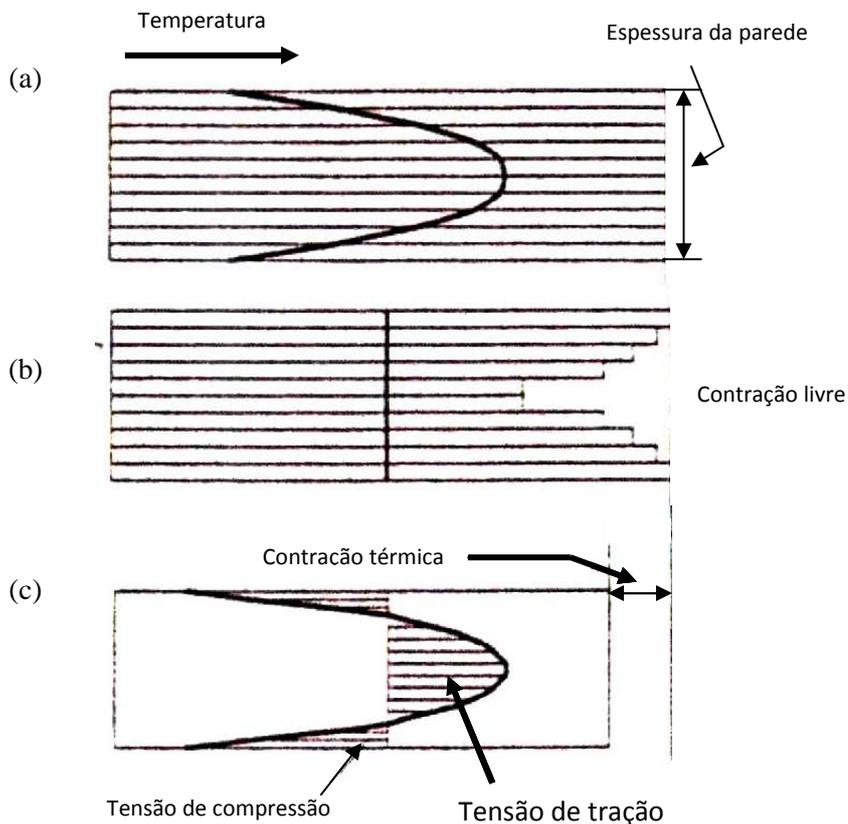


Figura 2.6 (a) Perfil de temperaturas durante o resfriamento. (b) Representação esquemática do perfil das diversas camadas caso não existisse restrição de contração entre as camadas resultando inexistência de tensões. (c) Perfil de tensões resultante da restrição de contração entre as camadas. (Figura adaptada de PÖTSCH & MICHAELI, 1995).

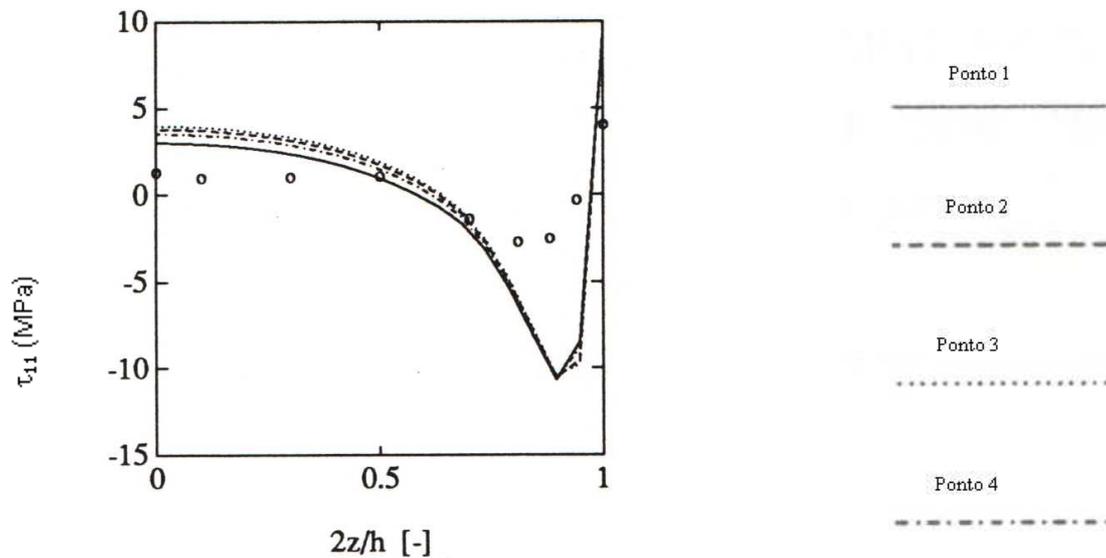


Figura 2.7 Componente τ_{11} em função da espessura adimensional calculada para quatro pontos da malha e comparada com resultados experimentais, representados por círculos, obtidos pelo método de remoção de camadas (Figura adaptada de DOUVEN, 1991).

Alguns pesquisadores calcularam tanto as tensões residuais induzidas pelo fluxo como as induzidas pelo resfriamento para polímeros termoplásticos amorfos em processos de injeção convencionais (BAAIJENS 1991, DOUVEN 1995, CHANG & CHIOU 1995). Os seus resultados indicaram que as tensões residuais induzidas durante o resfriamento são maiores do que as tensões residuais induzidas pelo fluxo por uma a duas ordens de magnitude. Devido a estes resultados, muitos pesquisadores desprezaram as tensões residuais induzidas pelo escoamento, ao calcularem as tensões residuais em peças injetadas, apesar de que estas tensões estão relacionadas com a orientação das cadeias moleculares. Esta orientação induz anisotropia em várias propriedades porque a orientação ocorre de maneira diferente nas direções paralelas e perpendiculares ao escoamento (JANSEN, 1994; BUSHKO & STOKES, 1995; ZOETELIEF et al., 1996; JANSEN & TITOMANLIO, 1996; TITOMANLIO & JANSEN, 1996; CHEN et al., 2000; KAMAL et al., 2002; SHEN & LI, 2003; YOUNG, 2004; ZHOU & LI, 2005; WANG & YOUNG, 2005; ZHOU et al., 2008).

2.3 Métodos para determinação de tensões residuais

Entre os trabalhos encontrados na literatura, relacionados ao desenvolvimento de métodos para a determinação experimental de tensões residuais em peças plásticas moldadas pelo processo de injeção, o método mais estudado é o de remoção de camadas (*layer-removal*) (RUSSEL & BEAUMONT, 1980; ISAYEV & CROUTHAMEL, 1984; PATERSON & WHITE, 1989; HASTENBERG et al., 1992; ZOETELIEF et al, 1996; JANSEN et al, 1999; MILLER & RAMANI, 1999; TURNBULL et al, 1999; MILLER & RAMANI, 1999; KAMAL et al, 2002; MAXWELL & TURNBULL, 2003; KIM et al., 2002; WANG & YANG, 2005; KIM et al., 2007). Nesta técnica, uma camada uniforme (de espessura conhecida) é removida, por usinagem, da superfície do corpo de prova. Isto causa uma perturbação do equilíbrio de tensões levando a um empenamento do corpo de prova. Camadas adicionais são removidas e as correspondentes variações em curvatura permitem construir uma avaliação quantitativa da distribuição de tensões residuais através da espessura do corpo de prova. Podem ser medidas as curvaturas resultantes paralelas aos dois eixos principais no plano da peça de onde foram removidos os corpos de prova. O método foi inicialmente apresentado por TREUTING & READ (1951), para determinação de tensões residuais em materiais metálicos.

Alguns problemas relacionados com esta técnica são o tempo necessário para sua execução, sua restrição a formas planas, necessidade de realização de medição precisa de curvatura, a suposição de propriedades elásticas constantes ao longo da espessura do corpo de prova e a incapacidade para medir tensões muito próximas à superfície (HEMSLEY & ROBINSON, 1992). Os resultados obtidos com esta técnica são consistentes com predições obtidas com modelos matemáticos.

WANG & YOUNG (2005) estudaram a utilização do método de remoção de camadas para determinação de tensões residuais em peças com paredes finas. As três primeiras camadas foram removidas com 20 μm e as demais camadas foram removidas com a espessura de 60 μm até próximo ao plano intermediário. No total foram removidas 10 camadas. Visando minimizar a tensão de corte, e efeitos de relaxação, diferentes amostras foram usadas para a remoção de diferentes espessuras de camadas. Foram utilizadas três amostras para cada profundidade. Os pesquisadores concluíram que o método de remoção de camadas é adequado para peças com paredes finas.

Outro método encontrado na literatura é o de perfuração (*hole-drilling*) (ISAYEV & CROUTHAMEL, 1984; KABANEMI et al, 1998; TURNBULL et al. 1999; MAXWELL & TURNBULL, 2003; KIM & YOUNG, 2007; KIM et al, 2007). Este método, também desenvolvido inicialmente para materiais metálicos (norma ASTM E 837) envolve a fixação de uma roseta de medidores de tensão de resistência elétrica (*strain gauges*) à superfície do corpo de prova seguido da perfuração de um orifício precisamente no centro. Resultam deformações na superfície que refletem a relaxação de tensão que ocorre durante a perfuração. As deformações medidas podem ser utilizadas para calcular as tensões para os dois eixos principais no plano do corpo de

prova. Esta técnica não é restrita a peças planas. Como o orifício é pequeno, a perturbação é pequena e, conseqüentemente, condições experimentais precisas são essenciais para medições bem sucedidas. Algumas peças podem, em alguns casos, serem aproveitadas após o ensaio, embora elas possuam um pequeno orifício e, por isso, a técnica pode ser considerada semi-destrutiva. A magnitude das deformações, resultantes das relaxações, depende das tensões residuais e do incremento da profundidade do orifício.

O método da perfuração é potencialmente mais flexível do que o de remoção de camadas, pois as medições podem ser realizadas em uma área pequena. Portanto pode ser aplicada a peças com geometrias complexas. É, também, menos trabalhosa que o método de remoção de camadas (TURNBULL et al., 1999). MAXWELL & TURNBULL (2003) compararam as duas técnicas usando corpos de prova contendo tensões equibiaxiais. Eles demonstraram que a técnica de remoção de camadas fornece resultados mais consistentes em medições de tensões residuais através da espessura.

TURNBULL et al (1999) apresentaram uma técnica de ataque químico (*chemical probe technique*) considerada uma abordagem mais especulativa e baseada no estabelecimento de dados de referência para a relação entre tensão e tempo necessário para o surgimento de fissuras para combinações específicas polímero – ambiente. Quando um plástico, com tensões residuais desconhecidas, é exposto por um período específico a um ambiente agressivo, a ocorrência de fissuras indicará que a tensão está acima ou abaixo de um valor de referência. Este exercício é então repetido para ambientes de variável agressividade de forma progressiva para estimar a magnitude das tensões de tração residuais. A faixa de ambientes é selecionada de acordo com a precisão requerida para a medição. Não são obtidas informações sobre distribuição de tensões e a técnica é mais bem aplicada a plásticos que apresentem tensões de tração próximas à superfície. Segundo TURNBULL et al. 1999, em peças moldadas por injeção existe uma fina camada superficial (< 50 μm) na qual as tensões residuais são de tração. Isto pode ser uma vantagem uma vez que outras técnicas podem não ser capazes de detectar tensões residuais próximas à superfície.

Outra técnica utilizada para determinação de tensões residuais é a medição de birrefringência em materiais anisotrópicos, ou seja, materiais que apresentam orientação molecular. Nestes materiais, a onda de luz incidente dá origem a duas ondas refratadas resultando dois índices de refração. Com o uso de um microscópio de luz polarizada pode-se determinar o grau de birrefringência de uma amostra que é a diferença entre os dois índices de refração presentes na amostra anisotrópica. Entretanto, esta técnica é considerada limitada para a determinação de tensões residuais, pois a birrefringência medida em um corpo de prova é o resultado da soma da contribuição da orientação molecular induzida pelo processamento com a contribuição das tensões residuais induzidas pelo resfriamento (WIMBERGER-FRIEDL, 1995; NEVES et al., 1998; TURNBULL et al., 1999; OLIVEIRA, 2004).

2.4 Cálculo de tensões residuais

Para o cálculo das tensões residuais decorrentes do processo de moldagem por injeção é necessário obter os campos de pressão, velocidade, temperatura e tensão através da resolução numérica das equações de conservação (massa, quantidade de movimento e energia). Nesta seção são apresentados os modelos constitutivos e as principais abordagens existentes na literatura para o cálculo das tensões residuais em peças plásticas produzidas pelo processo de moldagem por injeção.

2.4.1 Cálculo de tensões residuais induzidas pelo escoamento

Como durante a etapa de preenchimento de um molde de injeção efeitos de compressibilidade podem ser descartados (ao contrário que acontece nas etapas posteriores, onde a compressibilidade é um fenômeno muito importante), as tensões induzidas pelo escoamento dependem fundamentalmente da ação mecânica sofrida pelas cadeias do polímero no escoamento (BAAIJENS, 1991; KENNEDY, 1995; CAO et al., 2008). Assim sendo, elas devem ser calculadas a partir de equações constitutivas viscoelásticas com potencial para descrever adequadamente o estado de tensões resultante da história de deformação ou do estado de deformação instantâneo verificado em uma dada etapa do preenchimento.

Para conhecer o estado de deformação do polímero, visando o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento, é necessária a solução do problema do escoamento na cavidade do molde obtendo-se, desta maneira, a evolução dos perfis de velocidade, pressão, tensão e temperatura. Devido à complexidade dos escoamentos envolvidos esta resolução tem que ser feita pela utilização de métodos numéricos. Enquanto maiores detalhes sobre os métodos numéricos utilizados para a simulação da etapa de preenchimento de moldes de injeção serão discutidos na Seção 2.5, cabe aqui mencionar especificamente as metodologias utilizadas para o cálculo das tensões residuais induzidas pelo escoamento com base em equações constitutivas viscoelásticas.

Para o cálculo de tensões induzidas pelo escoamento o modelo de Leonov tem sido o mais utilizado (BAAIJENS, 1991, DOUVEN, 1991, FLAMAN 1993, SHYU & ISAYEV, 1995, LEE & KWON, 2001, SHYU et al, 2003, KIM et al, 2005). Segundo BAAIJENS (1991) este modelo apresenta boa capacidade para predição de tensões residuais induzidas pelo escoamento durante a etapa de preenchimento de uma cavidade com polímeros comerciais fundidos. DOUVEN et al. (1995) testaram ainda o modelo de Wagner, enquanto CHANG & CHIOU (1995) empregaram o modelo K-BKZ e CAO et al. (2008) utilizaram o modelo Phan-Thien-Tanner. Segundo BAAIJENS (1991), o comportamento mecânico em escoamentos dominados por cisalhamento (como em moldagem por injeção) pode ser descrito razoavelmente bem com o modelo de Leonov.

Duas abordagens podem ser utilizadas para o cálculo de tensões residuais induzidas por escoamento a partir de equações constitutivas viscoelásticas (DOUVEN et al., 1995): não acoplada e acoplada.

Na abordagem não acoplada considera-se que os campos de velocidade e pressão são governados principalmente por efeitos viscosos e que o comportamento elástico do polímero influencia muito pouco a cinemática do escoamento. Segundo BAAIJENS (1991), apesar de os polímeros apresentarem comportamento viscoelástico, muitas vezes seu escoamento pode ser simulado, de maneira aproximada, através de equações constitutivas de fluido newtoniano generalizado, em regiões mais distantes das paredes da cavidade, da frente de fluxo e de variações bruscas de geometria. Desta maneira, a natureza viscoelástica do polímero fundido é desconsiderada na resolução do problema de escoamento, utilizando-se uma equação constitutiva de fluido newtoniano generalizado para representar o fluido. Então, numa etapa posterior, uma equação constitutiva viscoelástica é utilizada para o cálculo explícito do campo de tensões desenvolvido a partir dos campos de velocidade.

Na abordagem acoplada a equação constitutiva viscoelástica é utilizada diretamente na resolução do problema de escoamento, sendo resolvida simultaneamente com as equações de conservação de movimento, massa e energia. A análise numérica, neste caso, apresenta dificuldade na obtenção de convergência devido aos elevados efeitos elásticos presentes. FAVERO et al. (2010) desenvolveram uma metodologia baseada na abordagem *split-stress tensor* e no conceito do tensor tensão de equilíbrio para escoamentos viscoelásticos isotérmicos e incompressíveis visando obtenção de boa convergência.

CHANG & CHIOU (1995), LEE & KWON (2001) e CAO et al. (2008) empregaram a abordagem acoplada para determinação das tensões induzidas pelo escoamento. BAAIJENS & DOUVEN (1990) compararam as duas abordagens e não observaram diferenças significativas entre os resultados obtidos. Observaram também que o custo computacional da abordagem não acoplada é significativamente inferior. Baseados neste resultado, DOUVEN et al. (1995) calcularam as tensões induzidas pelo escoamento, utilizando a abordagem não acoplada. Os perfis de tensões induzidas pelo escoamento, no final do preenchimento da cavidade, apresentam valores tendendo a zero no centro e na superfície da cavidade, com um ou mais máximos de tensões em regiões intermediárias (BAAIJENS, 1991; DOUVEN et al., 1995; CAO et al., 2008; SHYU & ISAYEV, 1995).

Um problema existente na avaliação da abordagem mais adequada é a dificuldade de validação dos resultados de simulação através de comparação com resultados experimentais. Os métodos utilizados para determinação experimental de tensões residuais não são capazes de quantificar separadamente a contribuição das tensões residuais induzidas pelo escoamento (NEVES et al., 1998; TURNBULL et al., 1999; JANSEN et al., 1999; CAO et al., 2008).

2.4.2 Cálculo de tensões residuais induzidas pelo resfriamento

Em geral, mesmo que o cálculo de tensões tenha se restringido às etapas de resfriamento, desprezando as tensões induzidas pelo escoamento, é necessária a simulação do ciclo de injeção completo para obtenção dos campos de velocidade, pressão e temperatura nas etapas após preenchimento.

Aqui, também, duas abordagens diferentes têm sido encontradas na literatura para o cálculo das tensões induzidas pelo resfriamento. Uma abordagem assume comportamento elástico linear na peça solidificada (modelo elástico), enquanto a outra considera comportamento viscoelástico linear (modelo viscoelástico).

Em situações práticas, efeitos viscoelásticos, como relaxação das tensões, apresentam alguma probabilidade de ocorrer. Entretanto, alguns pesquisadores acreditam que o modelo elástico dá uma descrição qualitativa boa do desenvolvimento de tensões residuais com menor custo computacional (JANSEN, 1994; TITOMANLIO & JANSEN, 1996; JANSEN & TITOMANLIO, 1996; ZOETELIEF et al., 1996; KAMAL et al., 2002; ZHANG et al., 2002).

ZOETELIEF et al. (1996) investigaram a influência da etapa de recalque sobre a distribuição de tensões térmicas residuais. Eles compararam os resultados de cálculos obtidos com uma lei constitutiva termo-viscoelástica linear e com um modelo constitutivo termoelástico linear, com resultados experimentais. Observaram que os três perfis de tensões residuais apresentaram a mesma forma: tensões de tração na superfície, seguida por uma região com tensões de compressão logo abaixo da superfície e novamente tensões de tração no núcleo. Os resultados de tensão calculados com os dois modelos ficaram próximos ao resultado experimental na parte central da espessura da peça enquanto que, na superfície, apenas os resultados de cálculo com o modelo viscoelástico concordaram relativamente bem com os resultados experimentais. As tensões de compressão calculadas em regiões próximas à superfície, com os dois modelos, resultaram muito maiores do que as tensões determinadas experimentalmente.

JANSEN et al. (1999) mostraram experimentalmente que o perfil de tensões residuais induzidas pelo resfriamento, ao longo da espessura de um moldado por injeção, depende das condições de processamento e da reologia do polímero, pois estas determinam a taxa de resfriamento e a pressão na cavidade nas etapas após preenchimento. Trabalhando com um polímero de elevada viscosidade, e com alta pressão de recalque, eles encontraram um perfil de tensões residuais semelhante ao encontrado por ZOETELIEF et al. (1996). Os resultados obtidos com um modelo termoelástico apresentaram concordância razoável com os resultados experimentais. Os autores não compararam seus resultados com resultados de modelo viscoelástico. Seus cálculos mostraram que considerável tensão de tração deve se desenvolver na superfície de produtos moldados por injeção, durante a etapa de recalque, devido a elevadas pressões na cavidade que ocorrem durante o processo. Os autores também observaram que, em contraste com experimentos *free quenching*, o material que está sob pressão durante solidificação apresentará tensões de tração na superfície. As tensões de tração

encontradas foram da ordem de 10 MPa e dependeram principalmente da magnitude e da duração da pressão de recalque. Concluíram que as tensões residuais térmicas são induzidas pela pressão hidrostática em combinação com um resfriamento rápido. Estes resultados sugerem que as diferenças entre os perfis de tensões residuais induzidas pelo resfriamento, encontrados por diferentes pesquisadores, poderiam ser atribuídas a diferentes condições de processamento.

KAMAL et al. (2002) estudaram, experimentalmente e através de simulações numéricas com um modelo termoelástico, e um modelo termo-viscoelástico, o desenvolvimento de tensões residuais térmicas em peças de PS (amorfo) e de PEAD (semi-cristalino). Seus resultados confirmaram a relação entre os perfis de tensões residuais e os valores de pressão dentro da cavidade obtidos por JANSEN et al. (1999). Eles obtiveram tanto através de simulação, como experimentalmente, os perfis das tensões normais típicos encontrados na literatura para amostras retangulares moldadas por injeção com PS: uma região logo abaixo da superfície em compressão balanceada por duas regiões em tração na superfície e no núcleo. As predições apresentaram valores de tensões residuais maiores do que os resultados experimentais, mas as tendências ficaram muito próximas. O modelo termo-viscoelástico representou melhor os resultados experimentais.

KABANEMI & CROCHET (1992) e KABANEMI et al. (1998) avaliaram tensões residuais formadas na etapa de resfriamento sem considerar a influência da pressão. Os autores avaliaram as tensões residuais desenvolvidas na etapa de resfriamento bem como a forma final da peça (influenciada por contração e empenamento). KABANEMI & CROCHET (1992) desenvolveram um modelo material termo-viscoelástico, isotrópico e termorreologicamente simples que foi usado na determinação de tensões residuais induzidas pelo resfriamento. Eles obtiveram perfis de tensões residuais apresentando tensões de tração no núcleo e tensões de compressão na superfície. Este perfil é característico de modelos *free quenching*. Eles não compararam seus resultados com dados experimentais. KABANEMI et al. (1998), calcularam perfis de tensões ao longo da espessura utilizando tanto a abordagem elástica como a viscoelástica. Os resultados de predição com modelo viscoelástico ficaram diferentes dos resultados obtidos com modelo elástico. Estes resultados foram comparados com resultados de medidas de tensões através da técnica de perfuração. Observaram tensões de compressão na superfície e tensões de tração no núcleo. Os resultados experimentais ficaram na mesma ordem de grandeza dos resultados com modelo viscoelástico, mas com diferenças significativas nos perfis.

SHEN & LI (2003) estudaram através de simulação numérica, utilizando o modelo apresentado por KABANEMI & CROCHET (1992), a influência de diferentes taxas de resfriamento sobre as tensões residuais e a deformação de peças com forma de placas infinitas desprezando a influência dos efeitos do fluxo. Os autores consideraram a influência da temperatura e da pressão sobre as propriedades materiais. Eles concluíram que a eficiência do resfriamento influencia significativamente as tensões residuais e o empenamento das peças. Eles compararam seus resultados de predição da

curvatura com dados experimentais disponíveis na literatura. As previsões teóricas não concordaram bem com os resultados experimentais.

YOUNG (2004), utilizando um modelo termo-viscoelástico, calculou as tensões residuais desenvolvidas nas etapas após preenchimento. Através de simulação do processo de moldagem por injeção, o autor obteve as histórias de temperatura e pressão nas etapas após preenchimento que foram utilizadas para o cálculo das tensões residuais. O cálculo das tensões residuais foi realizado na região sólida enquanto a região líquida foi mantida na pressão do fundido local sem sofrer nenhuma deformação. Ele comparou seus resultados com dados experimentais apresentados por ZOETELIEF et al. (1996) e observou concordância com relação aos perfis: pequenas tensões de tração no núcleo, pressões elevadas de compressão próximo à superfície e tensões de tração na superfície. Entretanto, quantitativamente os resultados não ficaram satisfatórios. Os resultados das simulações apresentaram tensões de compressão muito elevadas próximo à superfície, em comparação com os resultados experimentais.

WANG & YOUNG (2005) estudaram, em processo de injeção de paredes finas, a importância de parâmetros de moldagem por injeção sobre as tensões residuais resultantes, por meio de simulações numéricas, usando um modelo viscoelástico e um modelo elástico. Foram realizadas simulações do ciclo completo de moldagem por injeção utilizando programa desenvolvido pelos autores para o modelo viscoelástico e o programa comercial *C-Mold* para o modelo elástico. Os perfis obtidos com ambos os modelos apresentaram diferenças significativas entre si. O modelo viscoelástico linear apresentou tensões de tração na superfície e pequenas tensões de compressão distribuídas ao longo da espessura. No caso do modelo elástico, observou-se uma fina camada sob tensão de tração na superfície seguida de uma camada logo abaixo da superfície que apresentou tensão de compressão. No núcleo aparecem novamente tensões de tração. Já os resultados experimentais apresentaram um perfil semelhante ao obtido com o modelo viscoelástico, mas com tensões de tração mais elevadas no interior da peça. Quantitativamente, o modelo viscoelástico linear apresentou resultados mais próximos dos valores experimentais enquanto os resultados com modelo elástico diferiram significativamente.

O *software* comercial *Moldflow* tem sido usado para simular o escoamento do polímero fundido na cavidade podendo prever tensões residuais na peça assumindo material isotrópico com comportamento elástico. KIM et al. (2007) compararam resultados experimentais (métodos de remoção de camadas e de perfuração) com resultados obtidos por simulação com o *Moldflow* em peças moldadas por injeção. Foram observadas diferenças entre os resultados de simulação e os resultados experimentais. Segundo os autores, programas de análise estrutural considerando propriedades viscoelásticas deveriam ser utilizados para melhor previsão das tensões residuais.

REZAYAT & STAFFORD (1991) mostraram qualitativamente, a necessidade de um modelo viscoelástico para a representação precisa do estado de tensões de uma

peça injetada. Eles apresentaram um modelo termo-viscoelástico anisotrópico (transversalmente isotrópico) linear que é específico para uma peça moldada por injeção.

Assim, em geral, as comparações de resultados obtidos pelas duas abordagens mostram que o uso de modelo viscoelástico linear gerou concordância levemente melhor com os resultados experimentais. O fato de que as predições não representaram muito bem os resultados experimentais pode estar relacionado, em parte, com possíveis erros nas determinações experimentais.

Uma grande parte de trabalhos de modelagem para análise de tensões residuais desenvolvidas nas etapas após preenchimento, em polímeros moldados por injeção, empregou modelo termo-viscoelástico linear (BAAIJENS, 1991; KABANEMI & CROCHET, 1992; BUSHKO & STOKES, 1995; DOUVEN et al., 1995; ZOETELIEF et al., 1996; GHONEIN & HIEBER, 1997; KAMAL et al., 2002; YOUNG, 2004; ZHOU & LI, 2005; WANG & YOUNG, 2005; ZHOU et al., 2008). DOUVEN et al. (1995) mostraram que a linearização dos modelos compressíveis de Wagner e de Leonov possibilita a obtenção de equações equivalentes ao modelo termo-viscoelástico linear. CHANG & CHIOU (1995) empregaram um modelo constitutivo viscoelástico K-BKZ unificado.

2.5 Simulação do processo de injeção

A maneira tradicional de simular o processo de injeção, muito comum em pacotes comerciais de CAE, é a utilização de modelos 2½ D baseados na aproximação Hele-Shaw (ARAÚJO et al., 2008; CHANG & YANG, 2001; HIEBER & SHEN, 1980; KENNEDY, 1995; SHEN et al., 2001; ZHOU et al., 2008). Os modelos mais conhecidos, que adotam a aproximação Hele-Shaw, são os *mid-plane models* e o *surface model* (CARDOZO, 2008). Nestes modelos, a velocidade e a variação da pressão na direção da espessura (direção z) são desprezadas, resultando um problema bidimensional, no plano de escoamento, de escoamento e fluxo de calor, acoplado a um problema adicional 1D de condução de calor, na direção da espessura.

Nos trabalhos de BAAIJENS & DOUVEN (1990), BAAIJENS (1991), CHANG & CHIOU (1995), DOUVEN et al. (1995), LEE & KWON (2001) e CAO et al. (2008) foi aplicada a aproximação de Hele-Shaw para a descrição do escoamento visando a determinação de tensões residuais induzidas pelo escoamento.

Na maioria dos casos, os modelos 2½D funcionam bem quando a peça tem geometria simples e paredes finas. Entretanto, com o desenvolvimento do processo de moldagem por injeção, as peças apresentam formas cada vez mais complexas e as variações de espessura são cada vez mais significativas. Vários fenômenos que ocorrem durante o preenchimento de moldes complexos não podem ser preditos com precisão através de modelos que utilizam a aproximação de Hele-Shaw. Exemplos importantes são: o comportamento do fluido na superfície livre (fluxo em fonte), os fenômenos que

ocorrem nas regiões de encontro entre duas ou mais frentes de fluxo, e a cinemática do escoamento em áreas onde cisalhamento e deformações extensionais contribuem significativamente para o campo de tensões (pontos de injeção, variações bruscas de espessura, etc.) (CHANG & YANG, 2001; CARDOZO, 2008). Como resultado, tanto a velocidade como a variação de pressão na direção da espessura devem ser considerados, e a aproximação Hele-Shaw deixa de ser válida. Nestes casos, faz-se necessária uma modelagem 3D para simulação da moldagem por injeção (CHANG & YANG, 2001; ZHOU et al., 2008). A realização de simulações 3D para a determinação de tensões induzidas pelo escoamento, de forma acoplada, requer recursos computacionais significativos.

Alguns estudos têm sido realizados visando a simulação tridimensional do processo de injeção utilizando diferentes métodos numéricos. Os métodos mais utilizados são o método de elementos finitos (FEM), utilizado por YAN et al. (2007), ZHOU et al. (2008) e HETU et al. (1998), e o método de volumes finitos (FVM), utilizado por MALISKA & VASCONCELLOS (2000), CHANG & YANG (2001), YANG et al. (2008) e ARAÚJO et al. (2008). Algumas vantagens e desvantagens destes métodos são apresentadas a seguir. O FEM apresenta boa estabilidade e precisão para problemas dominados pela difusão mesmo quando são utilizadas malhas não ortogonais. O FVM, por outro lado, assegura fluxos conservativos, que são essenciais para problemas dominados por convecção. O método FVM pode ser aplicado tanto para malhas estruturadas como para não-estruturadas (ARAÚJO et al., 2008). O FVM pode usar de maneira mais eficiente os recursos computacionais (tempo e memória) e é computacionalmente mais estável do que o FEM na modelagem do processamento de polímeros (CHANG & YANG, 2001). O método FVM co-localizado, para discretização das equações tridimensionais governantes do escoamento, é preciso e eficiente quando aplicado à simulação do processo de moldagem por injeção (ARAÚJO et al., 2008, CHANG & YANG, 2001).

Qualquer um destes métodos poderá dar bons resultados desde que o problema seja implementado adequadamente.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo é apresentada a metodologia empregada neste trabalho. Nas Seções 3.1 e 3.2 são apresentadas, respectivamente, as equações governantes do problema em estudo e a metodologia numérica para a solução deste sistema de equações. Na Seção 3.3 são mostradas as geometrias analisadas no trabalho, assim como as malhas utilizadas. Os parâmetros usados nos modelos reológicos e as propriedades termofísicas dos materiais estudados são apresentados na Seção 3.4.

3.1 Equações governantes para a simulação do processo de preenchimento de cavidades de moldes de injeção

Para obtenção dos campos de pressão, velocidade, temperatura e tensão, relacionados com o escoamento do polímero, são utilizadas as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia. Também são necessárias as equações constitutivas para o tensor das tensões e para o fluxo de calor. O escoamento do polímero, durante o preenchimento da cavidade, é considerado incompressível.

3.1.1 Equações de conservação

A equação de conservação da massa para fluidos incompressíveis pode ser escrita como:

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{u} = 0 \quad (3.1)$$

onde \underline{u} é o vetor velocidade.

A equação da conservação da quantidade de movimento é apresentada a seguir:

$$\frac{D(\rho \underline{u})}{Dt} - \underline{\nabla} \cdot \underline{\pi} = \rho \underline{g} \quad (3.2)$$

onde D/Dt é a derivada material (ou substantiva):

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \quad (3.3)$$

ρ é a massa específica, \underline{g} é o vetor aceleração da gravidade, t é o tempo, e $\underline{\pi}$ é o tensor das tensões totais. Este é dado por:

$$\underline{\pi} = -p \underline{\delta} + \underline{\tau} \quad (3.4)$$

Onde $\underline{\tau}$ é o tensor das tensões viscosas, p é a pressão e $\underline{\delta}$ é o tensor unitário.

Substituindo as Equações (3.3) e (3.4) em (3.2) resulta a seguinte forma da equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho \underline{u} \underline{u}) - \underline{\nabla} \cdot \underline{\tau} = -\underline{\nabla} p + \rho \underline{g} \quad (3.5)$$

Como será considerado sistema incompressível ao longo de todo o trabalho, a massa específica será sempre uma constante.

Devido à elevada contribuição das forças viscosas no escoamento por cisalhamento do polímero, no preenchimento da cavidade de um molde de injeção, é desconsiderada a contribuição da força da gravidade (KENNEDY, 1995).

Sob condições não isotérmicas, se torna necessário incluir a equação da conservação da energia no conjunto de equações governantes. Esta equação pode ser apresentada da seguinte maneira:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \underline{\nabla} T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \underline{u} \cdot \underline{\nabla} p \right) + p \underline{\nabla} \cdot \underline{u} - \underline{\nabla} \cdot \underline{q} + \underline{\pi} : (\underline{\nabla} \underline{u}) \quad (3.6)$$

onde c_p é o calor específico a pressão constante (assumido constante neste trabalho), T é a temperatura, β é o coeficiente de compressibilidade e \underline{q} é o vetor fluxo de calor.

Com a consideração de fluido incompressível ($\nabla \cdot \underline{u} = 0$), então a equação se resume a:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla p \right) - \nabla \cdot \underline{q} + \underline{\pi} : (\nabla \underline{u}) \quad (3.7)$$

Também com base na consideração de incompressibilidade, o termo $\underline{\pi} : (\nabla \underline{u})$ pode ser simplificado utilizando a Equação (3.4) (KENNEDY, 1995):

$$\underline{\pi} : (\nabla \underline{u}) = (-p \underline{\delta} + \underline{\tau}) : (\nabla \underline{u}) = \underline{\tau} : (\nabla \underline{u}) \quad (3.8)$$

O termo $\underline{\tau} : (\nabla \underline{u})$ é a contribuição da energia dissipada devido às tensões normais e de cisalhamento a que o polímero é submetido durante o escoamento.

E a equação da conservação da energia fica:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla p \right) - \nabla \cdot \underline{q} + \underline{\tau} : (\nabla \underline{u}) \quad (3.9)$$

Em modelagem de processos de injeção, para a etapa de preenchimento, o termo que envolve a variação de energia devido à expansão e compressão do fundido pode ser desconsiderado por apresentar valor insignificante em relação aos demais termos (KENNEDY, 1995). Então a equação da conservação da energia se reduz a:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \underline{q} + \underline{\tau} : (\nabla \underline{u}) \quad (3.10)$$

Considerando-se a predominância da parcela difusiva no fluxo de calor, o vetor fluxo de calor pode ser descrito pela lei de Fourier:

$$\underline{q} = -\kappa \nabla T \quad (3.11)$$

onde κ é a condutividade térmica. Então a equação da conservação da energia fica:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = \kappa \nabla^2 T + \underline{\tau} : (\nabla \underline{u}) \quad (3.12)$$

Sendo que a condutividade térmica pode ser assumida como constante nas faixas de temperatura utilizadas no processamento de polímeros (HASHMABADI & MIRNAJAFIZADEH, 2010).

Para completar a descrição matemática deste problema de escoamento são requeridas equações constitutivas mecânicas, as quais relacionam o tensor das tensões

viscosas com o campo de velocidades. Estas equações serão descritas separadamente na próxima seção.

3.1.2 Equações constitutivas mecânicas utilizadas

Neste trabalho foram utilizadas 5 equações constitutivas, incluindo a equação de fluido newtoniano (FN), dois modelos de fluido newtoniano generalizado (FNG), os modelos de Bird-Carreau e Cross, e duas equações constitutivas viscoelásticas: Leonov e Phan-Thien-Tanner. As equações de FN e FNG foram utilizadas como base de desenvolvimento, parâmetros de comparação e/ou caso limite de análise, sendo que o interesse principal está nos resultados com as equações constitutivas viscoelásticas. O modelo de Bird-Carreau foi utilizado inicialmente devido à sua disponibilidade no *solver interFoam*. Posteriormente, para a análise de sistemas não-isotérmicos foi implementado o modelo Cross-WLF devido à disponibilidade de parâmetros para os polímeros utilizados neste trabalho. Conforme comentado na seção 2.4.1 o modelo viscoelástico de Leonov é muito utilizado em simulação de preenchimento de cavidades e seus parâmetros são disponíveis para os polímeros utilizados neste trabalho. O modelo de Phan-Thien-Tanner, por outro lado, foi utilizado recentemente em um trabalho de simulação do preenchimento de cavidades (CAO et al, 2008).

3.1.2.1 Fluido Newtoniano

Para sistemas incompressíveis a equação constitutiva para um fluido newtoniano é dada pela lei de viscosidade de Newton (KENNEDY, 1995; DOUVEN, 1995):

$$\underline{\underline{\tau}} = 2\eta\underline{\underline{D}} \quad (3.13)$$

onde η é a viscosidade newtoniana (independente da taxa de cisalhamento), e $\underline{\underline{D}}$ é o tensor taxa de deformação definido por:

$$2\underline{\underline{D}} = \underline{\nabla} \underline{u} + (\underline{\nabla} \underline{u})^T \quad (3.14)$$

3.1.2.2 Fluido Newtoniano Generalizado

Equações para fluidos newtonianos generalizados são derivadas da equação constitutiva para fluidos newtonianos através da substituição da viscosidade newtoniana por uma função viscosidade que varia com o tensor taxa de deformação (MORRISON, 2001; MACOSKO, 1994).

No modelo de Bird-Carreau a dependência da viscosidade com a taxa de deformação é dada por (BIRD et al., 1987):

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \quad (3.15)$$

onde η_0 (viscosidade extrapolada a taxa de cisalhamento nula), η_∞ (viscosidade extrapolada a taxa de cisalhamento infinita), λ (constante do tempo) e n (índice adimensional da lei das potências) são os parâmetros do modelo, os quais devem ser ajustados a partir de dados experimentais. Frequentemente, o limite de viscosidade a elevadas taxas de cisalhamento não é observável na prática, sendo por este motivo atribuído o valor zero a η_∞ .

A taxa de cisalhamento, $\dot{\gamma}$, definida como a magnitude do tensor taxa de deformação, é apresentada como (BIRD et al., 1987; MACOSKO, 1994):

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2(\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{D}})} \quad (3.16)$$

Já no modelo de Cross a viscosidade é expressa como (MACOSKO, 1994):

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\eta_0}{1 + (\eta_0 \dot{\gamma} / \tau^*)^{1-n}} \quad (3.17)$$

sendo τ^* a tensão de cisalhamento na transição entre o comportamento Newtoniano e o comportamento representado pela lei das potências.

3.1.2.3 Fluidos viscoelásticos

Modelo de Leonov

O modelo viscoelástico de Leonov é derivado de uma abordagem termodinâmica e sua equação, em função do tensor das tensões, é apresentada a seguir (Larson, 1988):

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\sigma}}} + \frac{1}{2G\lambda} \left\{ \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - G^2 \underline{\underline{\delta}} - \frac{1}{3} \left[\text{tr} \underline{\underline{\sigma}} - G^2 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}^{-1}) \right] \underline{\underline{\sigma}} \right\} = \underline{\underline{0}} \quad (3.18)$$

onde $\overset{\nabla}{\underline{\underline{\sigma}}}$ é a derivada convectiva superior do tensor tensão $\underline{\underline{\sigma}}$ que difere de $\underline{\underline{\tau}}$ por uma constante isotrópica: $\underline{\underline{\tau}} \equiv \underline{\underline{\sigma}} - G \underline{\underline{\delta}}$. A constante G é definida como $G = \eta / \lambda$, onde η é a viscosidade a taxa de cisalhamento nula e λ representa o tempo de relaxação. As constantes η e λ são parâmetros viscoelásticos lineares obtidos no limite de deformações infinitesimais.

Em deformações planas incompressíveis $\text{tr} \underline{\underline{\sigma}} = G^2 \text{tr} \underline{\underline{\sigma}}^{-1}$ (LARSON, 1988). Neste caso, a equação de Leonov assume uma forma mais simples:

$$\lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\tau}} + \frac{1}{2G} \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{\tau}} = 2G\lambda \underline{\underline{D}} \quad (3.19)$$

Onde $\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}$ é a derivada convectiva superior do tensor $\underline{\underline{\tau}}$ dada por:

$$\underline{\underline{\underline{\tau}}} \equiv \frac{\nabla D \underline{\underline{\underline{\tau}}}}{Dt} - \underline{\underline{\underline{\tau}}} \cdot \underline{\underline{\underline{\nabla}}} \underline{\underline{\underline{u}}} - (\underline{\underline{\underline{\nabla}}} \underline{\underline{\underline{u}}})^T \cdot \underline{\underline{\underline{\tau}}} \quad (3.20)$$

onde $\frac{D}{Dt}$ representa a derivada substantiva ou material, dada pela Equação (3.3).

Esta forma da equação será utilizada, pois o objetivo principal deste trabalho é o estudo bidimensional das tensões induzidas por escoamento incompressível.

Para incluir um espectro de tempos de relaxação o modelo de Leonov é expresso como:

$$\lambda_k \frac{\nabla \underline{\underline{\underline{\tau}}}_k}{\underline{\underline{\underline{\tau}}}_k} + \underline{\underline{\underline{\tau}}}_k + \frac{1}{2G} \underline{\underline{\underline{\tau}}}_k \cdot \underline{\underline{\underline{\tau}}}_k = 2G_k \lambda_k \underline{\underline{\underline{D}}} \quad (3.21)$$

onde o subscrito k representa cada modo contribuinte.

Modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado

O modelo de Phan – Thien – Tanner (PTT) é um modelo de rede, definido a partir da expressão (PHAN-THIEN & TANNER, 1977; PETERS et al., 1999; COELHO et al., 2002; OLIVEIRA & PINHO, 1999; RAJAGOPALAN, 2000):

$$Y[T, tr(\underline{\underline{\underline{\tau}}})] \frac{\underline{\underline{\underline{\tau}}}}{\lambda} + \underline{\underline{\underline{\tau}}} + \xi \left(\underline{\underline{\underline{D}}} \cdot \underline{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\underline{\tau}}} \cdot \underline{\underline{\underline{D}}}^T \right) = 2G \underline{\underline{\underline{D}}} \quad (3.22)$$

O termo $\xi(\underline{\underline{\underline{D}}} \cdot \underline{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\underline{\tau}}} \cdot \underline{\underline{\underline{D}}}^T)$ introduz movimento não-afim dos segmentos da rede entre nós. O parâmetro ξ quantifica a velocidade de escorregamento entre os segmentos da rede molecular e o contínuo e assume valores no intervalo $0 \leq \xi \leq 2$ (PETERS et al., 1999).

A equação constitutiva simplificada de Phan-Thien-Tanner (SPTT) é uma versão reduzida do modelo completo, que considera somente movimento afim das moléculas de polímero em relação ao contínuo, com a consequência de que o parâmetro ξ deve ser igualado a zero (COELHO et al., 2002).

O termo $Y[T, tr(\underline{\underline{\underline{\tau}}})]$, chamado função coeficiente de tensão, está relacionado com a taxa de destruição dos nós na rede molecular e pode ser desacoplado obtendo-se o produto entre uma função dependente da temperatura e uma função dependente da tensão:

$$Y[tr(\underline{\underline{\underline{\tau}}}), T] = \phi(T) f[tr(\underline{\underline{\underline{\tau}}})] \quad (3.23)$$

onde T é a temperatura e $tr(\underline{\underline{\underline{\tau}}})$ é o traço do tensor das tensões viscosas $\underline{\underline{\underline{\tau}}}$.

A parte da função coeficiente de tensão dependente da tensão tem a forma exponencial:

$$f[tr(\underline{\tau})] = \exp\left[\frac{\varepsilon \lambda}{\eta} tr(\underline{\tau})\right] \quad (3.24)$$

Esta forma exponencial pode ser linearizada quando o fator dentro dos colchetes é pequeno (HASHEMABADI & MIRNAJAFIZADEH, 2010):

$$f[tr(\underline{\tau})] = 1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta} tr(\underline{\tau}) \quad (3.25)$$

Tanner definiu escoamentos viscosimétricos como **fracos** enquanto escoamentos alongacionais são denominados escoamentos **fortes** (PHAN-THIEN, 1978). A linearização da parte dependente da tensão, da função coeficiente de tensão, é adequada quando a deformação molecular é pequena como em escoamentos fracos (*weak flows*). De acordo com este critério, esta simplificação vale para escoamentos dominados por cisalhamento com parcela muito limitada de deformação molecular extensional.

Em escoamentos por cisalhamento (escoamentos fracos), as predições do modelo são insensíveis ao valor escolhido para o parâmetro adimensional ε (PHAN-THIEN, 1978).

Neste trabalho foi utilizada a equação simplificada do modelo Phan-Thien-Tanner (SPTT) que, com a função coeficiente da tensão linearizada, fica (PETERS & BAAIJENS, 1997):

$$\left[1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta} tr(\underline{\tau})\right] \frac{\underline{\tau}}{\lambda} + \frac{\nabla}{\underline{\tau}} = 2 \left(\frac{\eta}{\lambda}\right) \underline{\underline{D}} \quad (3.26)$$

3.1.3 Dependência dos parâmetros das equações constitutivas com a temperatura

Os parâmetros das equações constitutivas para fluidos viscoelásticos, tempo de relaxação (λ) e coeficiente de viscosidade (η), variam com a temperatura. Uma maneira muito utilizada para obter a dependência do tempo de relaxação e do coeficiente de viscosidade com a temperatura é o princípio da superposição tempo-temperatura (DOUVEN et al., 1995; CAO et al., 2008; PETERS & BAAIJENS, 1997).

De acordo com este princípio, a dependência do tempo de relaxação e da viscosidade com a temperatura é dada por (DOUVEN, 1995):

$$\lambda(T) = a(T, T_0) \lambda(T_0) = a_T \lambda_0 \quad (3.27)$$

$$\eta(T) = a(T, T_0) \frac{\rho T}{\rho(T_0) T_0} \eta(T_0) = a_T b_T \eta_0 \quad (3.28)$$

onde T_0 é a temperatura de referência. O termo $b_T = \rho T / \rho(T_0) T_0$ assume valor próximo da unidade sendo, normalmente, omitido.

A função deslocamento tempo-temperatura a_T é uma propriedade material e, na faixa compreendida entre a temperatura de transição vítrea (T_g) e $T_g + 100K$, pode ser calculada pela equação de Williams, Landel e Ferry (WLF):

$$\log a_T = - \frac{A_1(T - T_0)}{\tilde{A}_2 + T - T_0} \quad (3.29)$$

onde A_1 e \tilde{A}_2 são parâmetros que dependem do material (DOUVEN, 1995; WILLIAMS et al., 1955).

O espectro de relaxação pode também ser afetado por variações de pressão, caso estas sejam muito grandes (centenas de atmosferas). Assim como com a temperatura, um simples procedimento de deslocamento pode ser usado para levar em consideração os efeitos da pressão (DOUVEN et al., 1995). Neste trabalho foi desconsiderada a influência da pressão.

Para o cálculo dos campos de velocidade, temperatura e pressão, em estudos não isotérmicos, foi utilizado o modelo newtoniano generalizado Cross-WLF, para representar o comportamento reológico do polímero, com o qual a viscosidade é calculada em função de taxa de cisalhamento e da temperatura. Neste caso a viscosidade extrapolada a taxa de cisalhamento nula, η_0 , é substituída pela função $\eta_0(T, p)$ calculada da maneira apresentada a seguir.

$$\eta_0(T, p) = D_1 \exp \left\{ - \frac{A_1 [T - T^*(p)]}{\tilde{A}_2 + D_3 p + [T - T^*(p)]} \right\} \quad (3.30)$$

onde $T^*(p) = D_2 + D_3 p$

e D_1, D_2, D_3, A_1 e \tilde{A}_2 são parâmetros que dependem do material.

3.2 Metodologia numérica

A metodologia numérica empregada neste trabalho é baseada no método de volumes finitos (FVM), utilizando como ferramenta de discretização e análise numérica o pacote *OpenFOAM*, e o método VOF (*volume of fluid*) para análise do avanço da frente de fluxo durante o preenchimento. O estudo foi dividido em duas etapas principais. A primeira foi a análise do preenchimento do molde considerando condições isotérmicas usando os *solvers interFoam* e *viscoelasticInterFoam* (FAVERO et al, 2009 e 2010). O *interFoam* utiliza modelos constitutivos para fluidos newtoniano e newtoniano generalizado enquanto o *viscoelasticInterFoam* utiliza modelos constitutivos viscoelásticos. Apesar de um escoamento isotérmico não representar

adequadamente as condições reais de escoamento em processos de injeção de polímeros, esta etapa foi usada para facilitar o desenvolvimento e o teste da metodologia estabelecida para análise do preenchimento do molde. A segunda etapa consiste no estudo do problema em condições não isotérmicas, que envolveu o desenvolvimento de *solvers* específicos obtidos a partir de modificações dos dois *solvers* citados mais o *viscoelasticFluidFoam*. Foi usada a versão 1.5 do **OpenFOAM** à qual foi agregado o *solver viscoelasticInterFoam*, pois este não está presente nesta versão do pacote.

O **OpenFOAM** consiste em um pacote de ferramentas voltadas à análise de problemas através de dinâmica de fluidos computacional (CFD), escrita em C++, e de código aberto, que permite ao usuário criar novas aplicações ou modificar as existentes. É uma biblioteca usada para criar executáveis conhecidos como aplicações que são divididas em duas categorias: *solvers* e *utilidades*. Os *solvers* são códigos utilizados para resolver um problema específico em mecânica do contínuo computacional. As *utilidades* realizam tarefas que envolvem manipulação de dados e cálculos algébricos. Estas utilidades realizam tarefas de pré- e pós-processamento.

A discretização das equações governantes do escoamento é baseada no método de volumes finitos, formulado com arranjo co-localizado de variáveis (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007), onde pressão e velocidade são resolvidas com métodos segregados. Para o acoplamento pressão-velocidade são utilizados os algoritmos SIMPLE (*Semi-implicit Method for Pressure Linked Equations*) (PATANKAR, 1986) ou PISO (*Pressure Implicit Splitting of Operators*) (ISSA, 1986). O PISO é uma escolha adequada para escoamentos transientes onde soluções intermediárias mais precisas são requeridas. O SIMPLE é mais adequado para escoamentos em estado estacionário. Uma descrição mais detalhada da metodologia empregada no **OpenFOAM** pode ser encontrada em JASAK (1996).

O **OpenFOAM** possui uma utilidade, o *blockMesh*, para elaboração de geometrias e geração de malhas ortogonais com células hexaédricas. Entretanto, existe possibilidade de conversão de malhas, estruturadas ou não estruturadas, elaboradas em outros softwares para um formato que o **OpenFOAM** possa ler. Neste trabalho foram utilizadas geometrias e malhas elaboradas com o *blockMesh*.

Existe a possibilidade de processar aplicações em paralelo. Para isso é utilizado o método de computação paralela conhecido como decomposição de domínio. Neste método, a geometria e os campos associados são separados em partes (ou subdomínios) e alocados a diferentes processadores para a solução. Estão disponíveis quatro métodos de decomposição da malha e dos campos de dados iniciais: *simple geometric decomposition*, *hierarchical geometric decomposition*, *metis decomposition* e *manual decomposition*. O processamento é realizado com a implementação openMPI da interface MPI padrão (*standard message-passing interface MPI*) (**OpenFOAM User Guide**, 2008).

O equipamento utilizado nas simulações foi um computador com quatro processadores Intel® Core™2 Quad CPU Q6600 @ 2,40 GHz com sistema operacional Linux, Kernel Linux 2.6.24, Ubuntu 8.04.

3.2.1 Solvers para problemas isotérmicos utilizados neste trabalho

Os dois *solvers* utilizados para simulação isotérmica foram o *interFoam* e o *viscoelasticInterFoam*. Ambos *solvers*, já disponíveis dentro do ambiente do *OpenFOAM*, são utilizados para simular o escoamento transiente de dois fluidos separados por uma interface definida. Estes *solvers* são baseados no método de volume de fluido (VOF). Conforme visto na seção anterior, a diferença entre os dois *solvers* está relacionada com o modelo utilizado no cálculo da contribuição da tensão viscosa na equação da conservação da quantidade de movimento.

A utilização dos *solvers* envolveu a escolha das propriedades materiais do polímero, das condições iniciais e de contorno necessárias, dos esquemas de discretização das equações diferenciais e dos métodos iterativos usados na solução das equações resultantes da discretização das equações governantes e constitutivas.

3.2.2 Implementação do solver para problemas não-isotérmicos

Para o desenvolvimento de *solvers* não isotérmicos foi incluída a equação da conservação da energia para o cálculo do campo de temperaturas. Também foram implementados códigos para o cálculo dos valores de viscosidade ou de tensão, em função dos campos de temperatura, dependendo da abordagem utilizada: não acoplada ou acoplada. Na abordagem acoplada os campos de pressão e de velocidade são calculados com modelos viscoelásticos, enquanto na abordagem não acoplada estes campos são obtidos considerando comportamento Newtoniano generalizado. Embora estudos anteriores tenham sugerido que tensões induzidas pelo escoamento, calculadas pelos dois métodos, apresentem resultados satisfatoriamente próximos (BAAIJENS, 1991), desenvolvimentos recentes em tecnologia de computadores, e na análise de escoamentos viscoelásticos, tornam relevante desenvolver um estudo semelhante relacionado com a tecnologia de paredes finas. Por isso ambos os métodos estão sendo utilizados neste trabalho. Dois *solvers* estão em desenvolvimento para o cálculo do preenchimento de cavidades de moldes de injeção de termoplásticos em processos não isotérmicos: (1) acoplado e (2) não acoplado.

No *solver* não isotérmico acoplado, obtido a partir do *viscoelasticInterFoam*, a resolução dos sistemas de equações é feita iterativamente, da maneira descrita a seguir.

1. Atualização dos campos da fração de volume utilizando, de forma explícita, os campos de velocidade obtidos no passo de tempo anterior.

2. Cálculo dos campos de velocidade e pressão utilizando de forma explícita, com o algoritmo PISO, valores de tensões obtidos no passo de tempo anterior.
3. Cálculo dos campos de temperatura através da solução da equação da energia utilizando, de forma explícita, os campos de velocidade obtidos no item anterior junto com os campos de tensão obtidos no passo de tempo anterior.
4. Cálculo dos novos campos de tensão utilizando, explicitamente, os campos de velocidade (item 2) e de temperatura (item 3) na resolução da equação constitutiva viscoelástica para o tensor das tensões.
5. Iterar algumas vezes os passos 2, 3 e 4 dentro de um mesmo passo de tempo, utilizando valores de tensão atualizados.

No desenvolvimento do *solver* não isotérmico não acoplado, o ponto de partida foi o *interFoam*. Para isso, além da introdução do código para o cálculo da equação do balanço de energia, duas modificações principais foram realizadas: (1) a introdução de um modelo para cálculo da viscosidade em função da taxa de cisalhamento e da temperatura e (2) cálculo das tensões viscoelásticas, com o modelo de Leonov ou de Phan-Thien-Tanner, utilizando explicitamente os campos de velocidade e temperatura obtidos anteriormente. Os códigos para execução destes dois modelos viscoelásticos foram desenvolvidos a partir dos *solvers* *viscoelasticFluidFoam* e *viscoelasticInterFoam*, respectivamente. O algoritmo básico usado para este *solver* é apresentado a seguir.

1. Atualização dos campos da fração de volume utilizando, de forma explícita, os campos de velocidade obtidos no passo de tempo anterior.
2. Cálculo dos campos de velocidade e pressão utilizando, de forma explícita, valores de viscosidade calculados com campos de velocidade e de temperatura do passo de tempo anterior (algoritmo PISO).
3. Atualização dos valores de temperatura utilizando os mesmos valores de viscosidade utilizados no item 2, junto com os campos de velocidade obtidos neste item.
4. Cálculo dos campos de viscosidade com os valores atualizados de velocidade (item 2), e de temperatura (item 3). Para isso é utilizado um modelo Newtoniano generalizado (Cross-WLF) com o qual a viscosidade é calculada em função de taxa de cisalhamento e da temperatura.
5. Iterar algumas vezes os itens 2, 3 e 4 dentro de um mesmo passo de tempo utilizando valores de velocidade e de temperatura atualizados.
6. Finalmente, os campos de velocidade resultantes são utilizados explicitamente na atualização dos valores de tensão viscoelástica e inicia um novo passo de tempo.

As equações governantes são resolvidas de maneira segregada o que significa que elas são resolvidas uma de cada vez e o acoplamento entre as equações é tratado de forma explícita. Desta maneira, as equações de quantidade de movimento, da

continuidade, da temperatura, da fração volumétrica, da viscosidade e da tensão viscoelástica são resolvidas sequencialmente requerendo, portanto, menos memória computacional.

As principais modificações realizadas no *viscoelasticInterFoam* para a obtenção do *solver* utilizado neste trabalho, chamado provisoriamente de *viscoelasticThermalFoam* são apresentadas no Apêndice.

3.2.3 Esquemas de discretização e solução dos sistemas de equações discretizados

Os esquemas empregados na discretização das equações governantes são apresentados a seguir. Para os gradientes foi utilizada a integração Gaussiana com interpolação linear (diferenças centrais). Para o termo Laplaciano foi utilizada a integração Gaussiana com o esquema de interpolação linear *corrected*. Para os gradientes normais às superfícies foi usado o esquema de correção não-ortogonal explícito. Para discretização temporal foi escolhido o esquema implícito de Euler. Os esquemas de interpolação utilizados para os divergentes foram a integração de Gauss com os esquemas de interpolação apresentados a seguir para cada membro. Para a velocidade foi utilizada a diferença linear limitada. Para a fração de fase foram empregados dois esquemas: o esquema van Leer limitado e o *upwind*. Para o divergente da tensão de cisalhamento, foram usados os esquemas linear e *upwind*. Para o termo divergente da temperatura também foi escolhido o esquema *upwind* (JASAK, 1996).

Para a resolução do sistema de equações algébricas lineares resultante da discretização das equações diferenciais, os seguintes métodos iterativos foram utilizados: gradiente conjugado (PCG) com pré-condicionador Choleski-incompleto diagonal (DIC) para a pressão e gradiente bi-conjugado (PBiCG) com pré-condicionador incompleto LU para a tensão, para a velocidade e para a temperatura.

Os métodos iterativos são indicados para a solução de grandes sistemas de equações, resultantes da utilização de malhas altamente refinadas, devido à menor quantidade de memória utilizada em relação aos métodos diretos. Entretanto, a velocidade de convergência de métodos iterativos reduz rapidamente à medida que a malha é refinada. Os métodos *multigrid* proporcionam maior velocidade de convergência através da exploração das diferenças de comportamento do erro em malhas de diferentes tamanhos (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007). Portanto, para simulações empregando malhas com número elevado de células, foram utilizadas técnicas *multigrid* (GAMG-*geometric-algebraic multi-grid*) para aumentar a velocidade de processamento nas simulações realizadas com o *interFoam* visando analisar a qualidade da frente de fluxo. Nas simulações para validação através da comparação das pressões no ponto de injeção e com o *solvers* viscoelásticos as técnicas *multigrid* não foram utilizadas e o gradiente conjugado (PCG) com pré-condicionador Choleski-

incompleto diagonal (DIC) foi utilizado para a pressão. Observou-se que em alguns casos as técnicas *multigrid* trouxeram problemas de estabilidade para a simulação.

Uma completa descrição destes esquemas de discretização e *solvers* para resolução dos sistemas de equações algébricas está apresentada em JASAK (1996).

3.2.4 Condições de contorno e iniciais

Como condições iniciais foram escolhidos campos nulos para todas as variáveis estudadas com exceção da temperatura:

$$\underline{u} = 0, p = 0, f = 0, \underline{\underline{\tau}} = 0$$

Para a temperatura a condição inicial escolhida foi igual à temperatura fixada para as paredes do molde.

Durante o preenchimento da cavidade foi assumida uma velocidade constante na entrada, velocidade nula nas paredes da cavidade e gradiente zero na saída. Na entrada, e nas paredes da cavidade, foi considerado gradiente de pressão nulo. Na saída foi assumida pressão nula. Para a fração volumétrica foi fixado valor um na entrada e gradiente nulo nas paredes e na saída. Para o tensor das tensões de cisalhamento considerou-se valor nulo na entrada e gradiente de tensão nulo nas paredes da cavidade e na saída. Para a temperatura foi utilizado um valor fixo na entrada e nas paredes da cavidade. Na saída foi considerado gradiente nulo.

3.3 Definição dos casos de estudo: geometrias e malhas

Foram utilizadas cinco diferentes geometrias para os testes realizados neste trabalho. Estas geometrias, junto com as malhas utilizadas em cada caso, são apresentadas a seguir. Foram elaboradas malhas com células hexaédricas usando o gerador de malhas do *OpenFOAM*, o *blockMesh*.

3.3.1 Caso I: testes preliminares em problemas isotérmicos

O objetivo desta primeira etapa do trabalho é verificar a influência da razão de aspecto dos volumes de controle e refinamento da malha sobre a qualidade dos resultados. Nesta etapa do trabalho foram utilizadas duas geometrias tridimensionais.

Inicialmente foram realizadas simulações com a geometria de uma placa de paredes planas paralelas, apresentada na Figura 3.1, com dimensões 140 x 40 x 0,9 mm (razão [caminho de fluxo] / [espessura] = 155,5). É uma geometria simples, que não apresenta desvios do fluxo nem variação da área de fluxo, permitindo realizar uma avaliação do *solver* minimizando problemas relacionados com a geometria. Conforme

discutido na seção 2.1.2, espessura inferior a 1 mm, e relação entre o caminho de fluxo e espessura da placa superior a 100, caracterizam uma peça de paredes finas. A pequena espessura da cavidade gera problemas na elaboração da malha que serão abordados posteriormente.

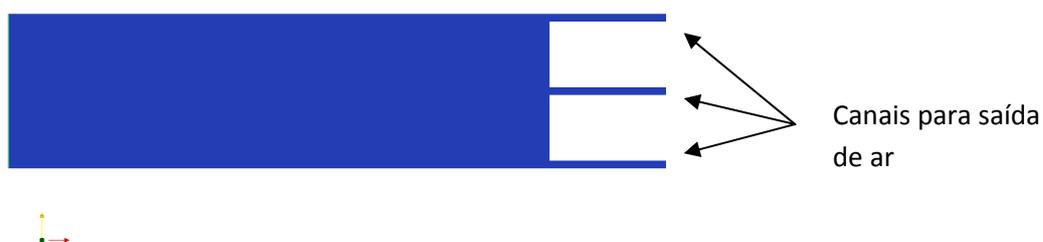


Figura 3.1 Placa plana de paredes finas mostrando o plano xy e os canais para saída de ar

Uma questão importante que deve ser levada em consideração é que o ar deve sair da cavidade para que o polímero preencha o espaço desejado. Alguns autores assumem uma condição de contorno em que o ar passa através das paredes da cavidade enquanto o polímero não (condição de contorno mista: parede / saída), mas, desta maneira, a formação de linhas de solda (união de frentes de fluxo) não é afetada pelo ar existente na cavidade (ARAÚJO et al, 2008). Além disso, não se pode verificar a localização de pontos de retenção de ar. Esta informação é importante para o projeto do molde (localização de ponto de injeção e de canais de saída de ar). Canais de saída de ar são canais de pequenas dimensões, usinados no molde, para permitir a saída do ar. Neste trabalho, utilizaram-se duas abordagens: (1) simular preenchimento de cavidades contendo canais de saída de ar ou (2) considerar a parede no final da cavidade como sendo uma saída, pois está sendo simulado apenas o preenchimento da cavidade. O uso de geometrias com canais de saída de ar leva em consideração que o ar é um gás que pode sair por canais de pequenas dimensões enquanto o polímero plastificado é um fluido que, sob ação do resfriamento, tem sua viscosidade elevada e solidifica. Isto impede sua passagem pelos canais e, por isso, ele se mantém dentro da cavidade. Isto é o que ocorre em processos de injeção utilizados na indústria. Este procedimento poderá ser testado em simulações não isotérmicas, com a viscosidade variando em função da temperatura, de etapas após preenchimento. Esta etapa não será realizada neste trabalho. A localização dos canais não foi otimizada.

Foram realizadas simulações com quatro diferentes malhas para observar a influência da razão de aspecto dos volumes de controle e do refinamento da malha sobre a qualidade dos resultados. O número de volumes em cada malha utilizada é apresentado na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 Tamanhos das malhas utilizadas nas simulações referentes ao caso de estudo I

Malha	Número de células hexaédricas
1	13880
2	27760
3	111040
4	194494

Com o objetivo de verificar a possibilidade de redução do tempo de processamento, foi realizado um estudo de processamento em paralelo do caso 4 (Tabela 3.1). Foi utilizado o método de computação em paralelo conhecido como decomposição de domínio, disponível no *OpenFOAM*. Neste método, a geometria e os campos associados são separados em partes (ou subdomínios) e alocados a diferentes processadores para a solução. Neste trabalho o método de decomposição utilizado foi o *METIS*, com o qual o processamento foi distribuído por até 4 processadores. O processamento é realizado com a implementação openMPI da MPI padrão (*standard message-passing interface MPI*) (*OpenFOAM User Guide*, 2008).

Outra tentativa de reduzir o tempo de processamento, realizada neste trabalho, foi através de seleção de um *solver*, para a solução dos sistemas de equações discretizadas, que proporcione maior velocidade de processamento. Para isso foi realizada uma comparação entre os tempos de processamento para simulações com diferentes *solvers* para a resolução do sistema de equações resultantes da discretização para a pressão e para a velocidade. A avaliação limitou-se aos *solvers* disponíveis na versão 1.5 do *OpenFOAM*.

A metodologia isotérmica baseada no *interFoam* também foi avaliada através de simulação em uma geometria mais complexa. A geometria apresentada na Figura 3.2 usada previamente por CHANG & YANG (2001), apresenta as dimensões 150 x 100 x 2 mm na área maior, com uma abertura retangular com dimensões 40 x 20 x 2 mm, e 26,7 x 20 x 2 mm na área menor. Foi utilizada uma cavidade convencional, pois não havia disponibilidade de um estudo em cavidade de paredes finas. No meio da face voltada para a esquerda, pertencente à região com área menor, é localizado um canal de

injeção restrito (*point gate*) por onde o material penetra na cavidade. Junto com a geometria é apresentada a malha utilizada neste trabalho.

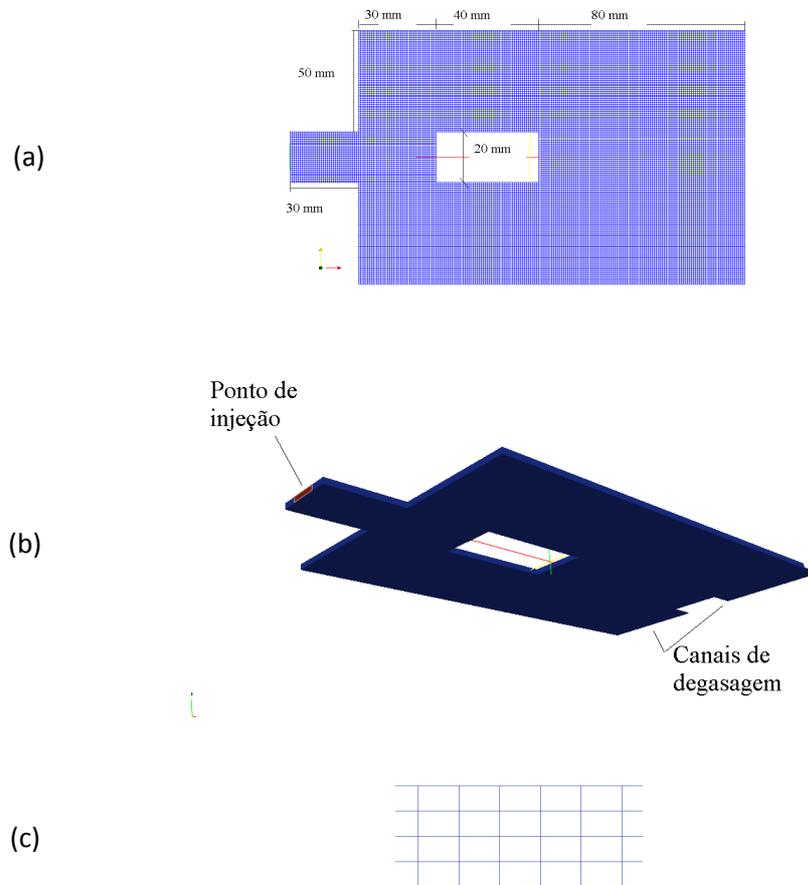


Figura 3.2 (a) Geometria e malha usados na análise da qualidade dos resultados. (b) Vista tridimensional mostrando detalhe do ponto de injeção e dos canais de saída de ar. (c) Volumes de controle no plano xz (espessura).

Esta geometria também foi utilizada para avaliar a qualidade dos resultados em função das propriedades da malha (tamanho e razão de aspecto dos volumes de controle) e do tipo de modelo utilizado para simular o comportamento reológico do material. Os resultados deste trabalho foram comparados com os apresentados por CHANG & YANG (2001) no qual os autores desenvolveram um método de cálculo tridimensional utilizando volumes finitos e compararam seus resultados com outro método que utiliza a aproximação Hele–Shaw.

Nesta geometria o escoamento é mais complexo: a frente de fluxo sofre aumento da área de escoamento (escoamento radial), separação, desvio, diminuição da área de escoamento, e encontro com outra frente de fluxo (com possibilidade de formação de

linhas de solda). A malha utilizada nas simulações para estudo da variação da pressão de preenchimento tem quatro volumes de controle na direção z (ver Figura 3.2c).

3.3.2 Caso II: validação da metodologia desenvolvida para escoamento isotérmico

A geometria apresentada na Figura 3.3, junto com a malha, apresenta mesmas dimensões da geometria apresentada na Figura 3.2. A única diferença é a inexistência do orifício. A área do ponto de injeção é $2,68 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ ($0,00134\text{m} \times 0,002\text{m}$). Foram utilizadas quatro malhas de diferentes tamanhos conforme será mostrado na Tabela 3.2.

Esta geometria foi utilizada para validar a metodologia implementada através da determinação dos valores de pressão, no ponto de injeção, em função do tempo de preenchimento. Os resultados obtidos neste trabalho foram comparados com resultados apresentados na literatura (CHANG & YANG, 2001; ARAÚJO et al., 2008).

Nas geometrias estudadas nesta etapa do trabalho a parede do fim da cavidade não foi fechada tendo em vista que foi simulada apenas a etapa de preenchimento da cavidade. Observou-se que as pressões de preenchimento não foram influenciadas significativamente pela condição de parede aberta ou com canais de degasagem.

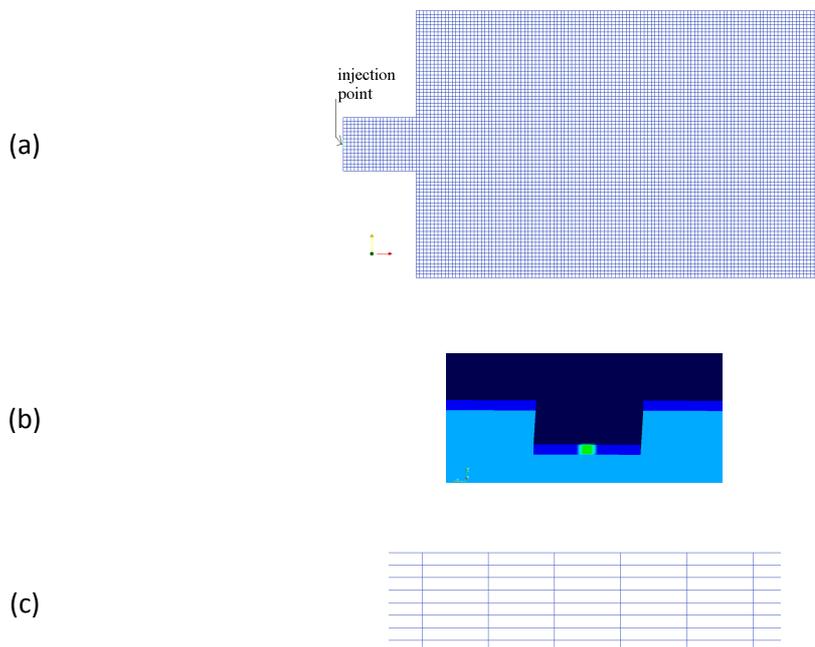


Figura 3.3 (a) Geometria e malha para estudo da evolução da pressão no preenchimento da cavidade. (b) Detalhe do ponto de injeção. (c) Malha no plano xz (espessura).

Inicialmente foram realizadas simulações com quatro tamanhos diferentes de malhas para verificar a convergência de malha. Os tamanhos das malhas são apresentados na Tabela 3.2

Tabela 3.2 Malhas utilizadas no teste de convergência para o caso de estudo II

Malha	Número de volumes de controle
1	29742
2	47718
3	70200
4	90848

3.3.3 Caso III: cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos

No estudo da influência da espessura da cavidade, e da velocidade de injeção, sobre as tensões viscoelásticas induzidas por escoamento isotérmico foram utilizadas geometrias bidimensionais. O uso de geometrias tridimensionais causa um aumento significativo do custo computacional das simulações impedindo um maior refinamento da malha, ao longo da espessura, onde se deseja conhecer os campos de tensões.

Foram utilizadas geometrias de placas paralelas com comprimentos de 20 a 150 mm. Para cobrir a faixa de espessuras de peças injetadas desde paredes finas até paredes convencionais foram utilizadas espessuras de 0,4 a 2 mm. As geometrias utilizadas nesta etapa possuem aspecto e malha mostrados na Figura 3.4.

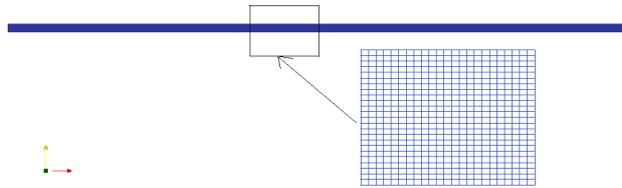


Figura 3.4 Geometria e malha usadas na análise das tensões induzidas pelo escoamento.

3.3.4 Caso IV: cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos – testes preliminares

No desenvolvimento do *solver* não isotérmico para o cálculo de tensões, as simulações foram realizadas com uma malha mais refinada junto às paredes semelhante à apresentada na Figura 3.5. Esta modificação visa melhorar a precisão do cálculo nesta região onde existem elevados gradientes de temperatura e de velocidade. Entretanto, este refinamento junto às paredes faz com que os elementos da malha apresentem-se heterogêneos e os elementos situados junto às paredes apresentam razão de aspecto muito elevada. A representação da frente de fluxo perde a qualidade.

Nos testes preliminares usando o método não acoplado para escoamento não-isotérmico, uma geometria com 20 mm de comprimento e 1 mm de espessura foi utilizada.

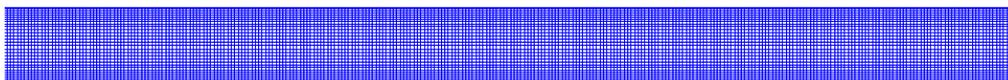


Figura 3.5 Malha utilizada no teste não isotérmico.

3.3.5 Caso V: comparação dos resultados obtidos com a metodologia desenvolvida para escoamento não isotérmico com resultados da literatura

Para comparação dos resultados obtidos com a metodologia desenvolvida neste trabalho, com resultados da literatura, visando cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em sistemas não isotérmicos, foi simulado o preenchimento da geometria apresentada na Figura 3.6 (DOUVEN, 1991). A geometria usada nesta simulação tem dois planos de simetria e a malha possui 197.400 células hexaédricas. A necessidade de refinar a malha ao longo da espessura para obter uma representação razoável das tensões ao longo do plano xz faz com que a peça apresente, no total, um número muito elevado de células devido à necessidade de aumentar o número de células no plano xy de forma a minimizar o valor da razão de aspecto.

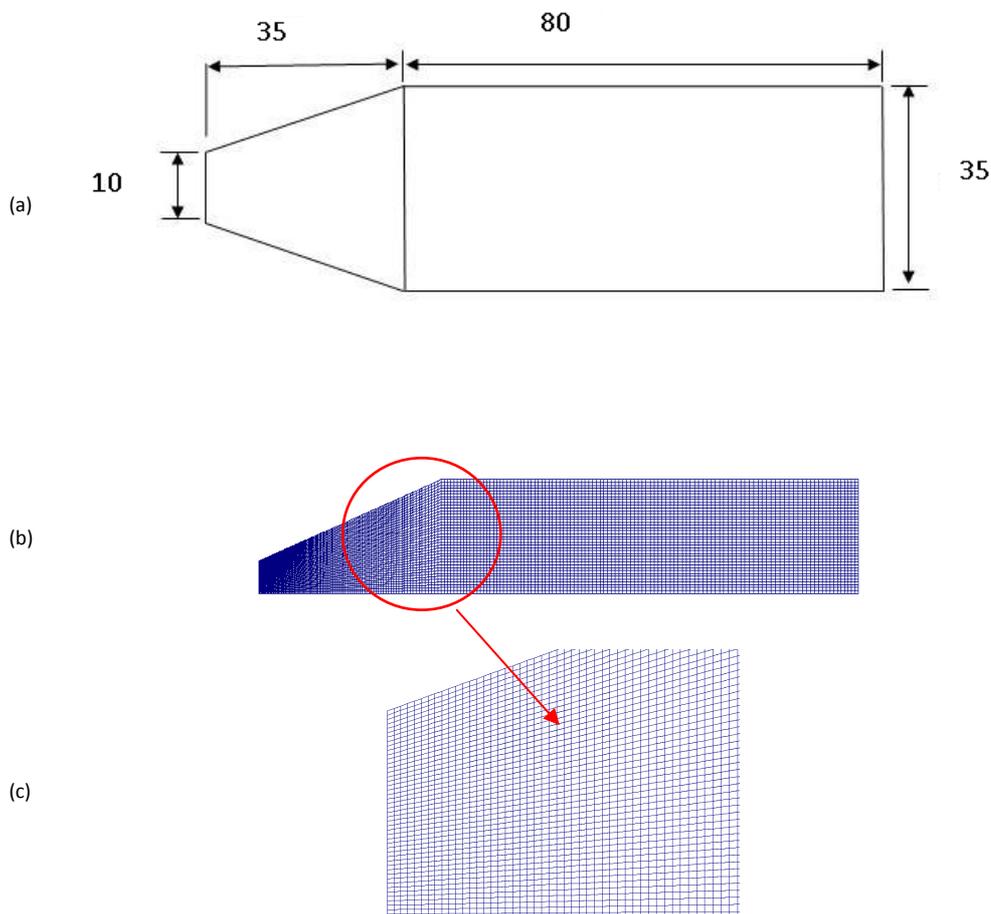


Figura 3.6 Geometria e malha usada na análise de tensões induzidas pelo escoamento para uma placa com 2 mm de espessura colocada na direção z (DOUVEN, 1991). (a) Geometria completa em um plano xy (dimensões em mm). (b) Metade da peça no plano xy . (c) Detalhe da malha refinada na entrada da cavidade no plano xy .

3.3.6 Caso VI: cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas em comparação com condições convencionais

Para o estudo da influência da espessura da cavidade, e da velocidade do polímero, sobre as tensões induzidas pelo escoamento, foram utilizadas geometrias planares bidimensionais com comprimentos de 120 mm e espessuras de 0,3 a 2 mm. Esta variação de espessuras cobre a faixa de espessuras desde processos de paredes finas até processos convencionais. As características das malhas utilizadas são apresentadas na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 Características das malhas utilizadas no caso de estudo VI

Espessura das cavidades (mm)	Número de volumes de controle ao longo do comprimento	Número de volumes de controle ao longo da espessura
0,3; 0,5 e 0,7	2.000	18
0,9	1.300	30
2,0	1.300	44

A geometria de placas paralelas, junto com a malha usada para a espessura de 0,7 mm, é representada na Figura 3.7.

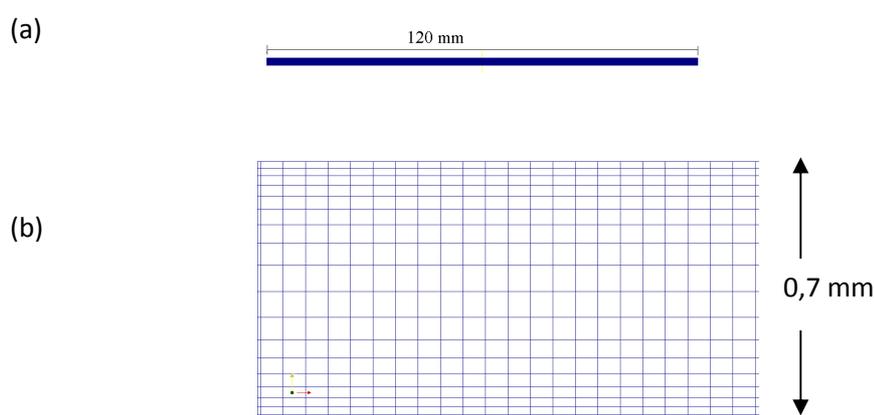


Figura 3.7 (a) Geometria e (b) malha usada na análise das tensões induzidas pelo escoamento para geometria de placas paralelas com 0,7 mm de espessura.

3.3.7 Caso VII: estudo da aplicabilidade da metodologia não isotérmica desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com resultados experimentais

Foi realizado um estudo da aplicabilidade da metodologia desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com dados experimentais. Foi utilizada uma geometria baseada em um molde padrão para produção de corpos de prova (norma ASTM D638 – 03). Este molde possui três cavidades para produção simultânea de corpos de prova para ensaios de tração, flexão e impacto. A Figura 3.8 mostra a peça produzida e o desenho da cavidade do molde estudado. A geometria e a malha, com 26.615 elementos hexagonais, foram obtidas com o *software ANSYS 13 ICEM CFD*.

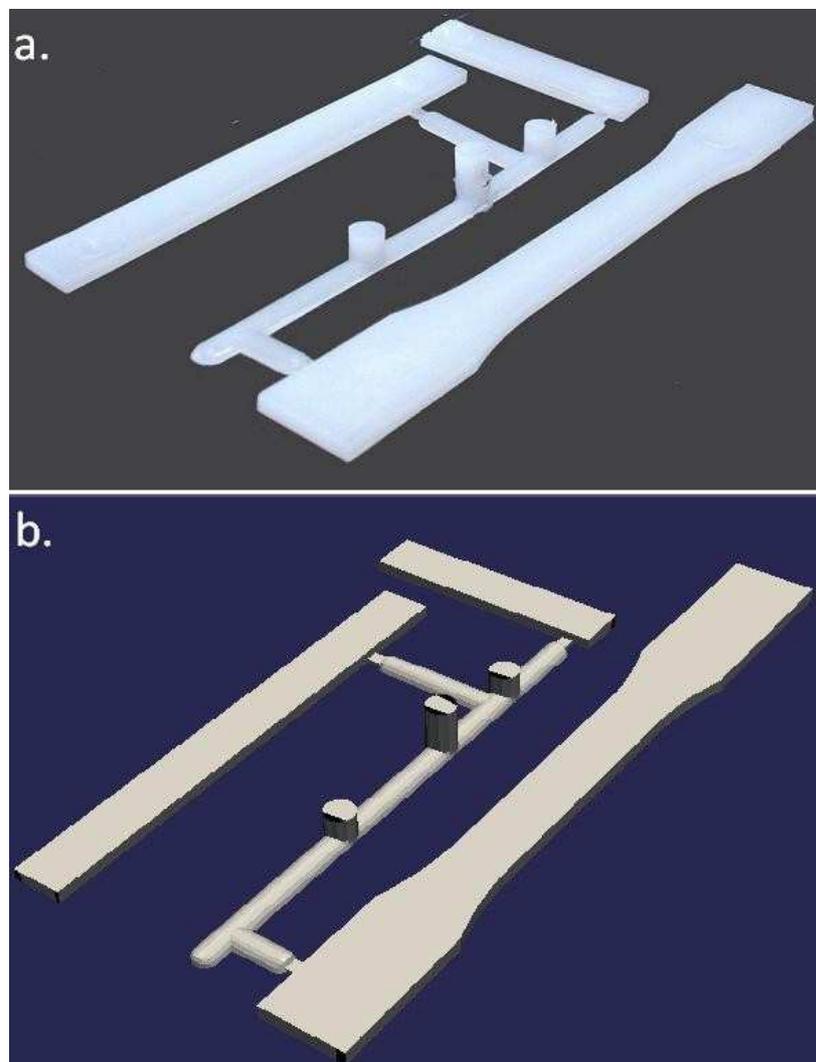


Figura 3.8 (a) Peça moldada por injeção. (b) Geometria digitalizada.

Os experimentos de moldagem por injeção foram realizados em uma injetora Arburg Allrounder 420C 1000 – 350, utilizando o poliestireno cristal Poliestireno N1921 produzido pela Innova. Detalhes sobre a resina podem ser vistos no Anexo. O objetivo da parte experimental neste trabalho foi gerar peças incompletas, para observação da posição da frente de fluxo durante o preenchimento do molde.

Nos experimentos de injeção foi mantida constante a vazão volumétrica de entrada, temperatura da massa de polímero na entrada e temperatura no molde. A partir do molde completo foram realizadas injeções diminuindo-se o volume de material dosado. A pressão de recalque foi mantida nula durante o experimento. Os volumes de dosagem utilizados foram 28, 25, 22, 19, 16, 13, 10, 7 e 5 cm³ enquanto a vazão utilizada foi de 40 cm³/s. A temperatura do molde foi 40 °C e a temperatura da massa polimérica foi 230 °C.

3.4 Propriedades termofísicas e reológicas empregadas nas simulações

3.4.1 Caso I: valores dos parâmetros para os testes preliminares em problemas isotérmicos

Para a avaliação da qualidade dos resultados, em função da razão de aspecto dos volumes de controle e do grau de refinamento da malha, foi utilizado o modelo de Bird-Carreau no cálculo da viscosidade. Foi considerado um sistema isotérmico e as propriedades dos fluidos para este trabalho são apresentadas na Tabela 3.4.

Para a tensão superficial entre PS e ar, foi utilizado o valor de 0,0271 N/m (BRANDRUP et al., 1998) para todos os cálculos com exceção da avaliação do *solver viscoelasticInterFoam* no limite Newtoniano.

Tabela 3.4 Propriedades para o trabalho de avaliação da qualidade dos resultados em função das características da malha

Material	Propriedades	Unidades	Valor	
	Massa específica (a 503K)*	(kg/m ³)	892	
PS	Parâmetros do modelo Bird-Carreau*	η_0	m ² /s	4,22
		η_∞	m ² /s	0
		k	s	0,15
		n	-	0,23
Ar	Massa específica	(kg/m ³)	1**	
	Viscosidade dinâmica	m ² /s	1,48×10 ⁻⁵ **	

* Nguyen-Chung (2004) ** Valores utilizados no **OpenFOAM**

Quando o polímero entra na cavidade, que está a temperaturas muito mais baixas (diferenças em torno de 180^oC), ele é resfriado rapidamente. O resfriamento do polímero causa elevação significativa de sua viscosidade principalmente em camadas próximas às paredes. Como nesta etapa do trabalho não foram considerados efeitos de troca térmica, foi realizada uma simulação utilizando fluido Newtoniano Generalizado (Bird-Carreau) de viscosidade arbitrariamente elevada ($\eta = 42152$ m²/s), a fim de verificar como o *solver* se comporta nestas condições. Duas simulações com diferentes valores de viscosidade são apresentadas na Tabela 3.5.

Tabela 3.5 Propriedades reológicas

Parâmetro	Unidades	Teste 1*	Teste com maior viscosidade	
Parâmetros do modelo Bird-Carreau	η_0	m ² /s	4,22	42152,5
	η_∞	m ² /s	0	0
	k	s	0,15	0,15
	n	-	0,23	0,23
ρ	kg/m ³	892	892	

* NGUYEN-CHUNG (2004)

3.4.2 Caso II: valores dos parâmetros para validação da metodologia implementada para processos isotérmicos

Na validação da metodologia, através da determinação da variação da pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento, em condições isotérmicas, foi necessário empregar o modelo Newtoniano para descrever o comportamento do material, para comparação com resultados da literatura (CHANG & YANG, 2001). O tempo de preenchimento foi de 2,0 s (CHANG & YANG, 2001). As propriedades dos fluidos utilizados nestas simulações são apresentadas na Tabela 3.6. Como os campos de velocidade e de pressão na fase ar não são relevantes para o trabalho, CHANG & YANG (2001) aumentaram o valor da viscosidade do ar para melhorar a convergência.

Tabela 3.6 Propriedades para comportamento Newtoniano (CHANG & YANG, 2001)

Material	Viscosidade dinâmica (Pa.s)	Viscosidade cinemática (m ² /s)	Massa específica (kg/m ³)
PS	200	0,2	1000
ar	0,1	0,0813	1,23

3.4.3 Caso III: valores dos parâmetros para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos

A metodologia para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos foi avaliada inicialmente no limite newtoniano e, posteriormente, considerando a influência da viscoelasticidade na comparação dos níveis de tensão induzida em peças convencionais e peças de paredes finas.

Para avaliação do *solver viscoelasticInterFoam*, no limite Newtoniano, utilizouse, para a massa específica, os valores 0,8039 g/cm³, para o polímero, e 10⁻³ g/cm³ para o ar. O valor utilizado para a tensão superficial entre PS e ar foi 0,02 N/m. Os valores de viscosidade Newtoniana utilizados para as simulações foi de 4673 Pa.s para o polímero e 1,48 x 10⁻⁵ Pa.s para o ar.

Para avaliação das tensões induzidas pelo escoamento em peças de paredes finas, os parâmetros do modelo SPTT (Phan-Thien-Tanner simplificado) são os mesmos utilizados em ROOZENDAAL (1994). Neste trabalho foram determinados os parâmetros para o *PS Styron 678E* da Dow Chemical, a 448 K, para um modo apenas. Dados técnicos deste material são apresentados no Anexo. Os valores utilizados foram $\lambda = 0,1652$ e $\eta = 1,321 \times 10^4$ Pas. Para o parâmetro de não-linearidade, ε , foi utilizado o valor de 0,3. Os valores utilizados para a massa específica foram 0,9593 g/cm³, para o polímero, e 10⁻³ g/cm³ para o ar.

3.4.4 Caso IV: valores dos parâmetros para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos – avaliação preliminar

Os valores da massa específica, das propriedades térmicas e dos parâmetros para o modelo Cross-WLF, utilizados no estudo do preenchimento não isotérmico para avaliação preliminar do *solver* não acoplado, em comparação com os resultados isotérmicos, são apresentados na Tabela 3.7. Os valores dos parâmetros do modelo SPTT utilizados neste trabalho são os mesmos empregados nos estudos isotérmicos. A viscosidade a taxa de cisalhamento zero (η_0) e o tempo de relaxação (λ) são corrigidos com a equação WLF conforme apresentado na seção 3.1.3.

Tabela 3.7 Propriedades térmicas e parâmetros para o Modelo Cross-WLF (NGUYEN-CHUNG, 2004)

Propriedades	Unidades	Polystyrene 165H BASF Ludwigshafen Germany
Massa específica (ρ)	kg/m ³	892
Calor específico (c_p)	J/(kg ^o .C)	1975
Condutividade térmica (κ)	J/(m.K.s)	0,155
n	-	0,1854
τ^*	kg/(m.s ²)	36.027
A_1	-	28,313
Parâmetros da equação Cross - WLF		
\tilde{A}_2	K	51,6
D_1	kg/(m.s)	$2,111 \times 10^{12}$
D_2	K	373,15
D_3	kg/(m.s ² .K)	0

3.4.5 Caso V: valores dos parâmetros para o cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos – comparação com resultados da literatura

Para avaliação do *solver* não isotérmico, não acoplado, foram comparados resultados de simulação deste trabalho com resultados apresentados em DOUVEN (1991). DOUVEN calculou as tensões induzidas pelo escoamento em geometrias unidimensionais com um método não acoplado utilizando o modelo compressível de Leonov para uma placa plana com 150 mm de comprimento, 60 mm de largura e 2 mm de espessura. Neste trabalho foi utilizada uma geometria tridimensional com as mesmas dimensões utilizando o modelo incompressível de Leonov.

Para as simulações realizadas neste trabalho foram utilizadas as mesmas condições de processamento e propriedades materiais usadas em DOUVEN (1991). O campo inicial interno de temperaturas e foi ajustado como 323 K. As temperaturas do fluido na entrada e nas paredes da cavidade foram fixadas, respectivamente, em 473 e 323 K. A vazão volumétrica do polímero foi fixada de modo a se obter um tempo de preenchimento de 0,95 s.

Os valores dos parâmetros utilizados nesta etapa do trabalho são correspondentes ao *Styron 678E*, pois este foi o material utilizado em Douven (1991). Dados técnicos deste material são apresentados no Anexo. As propriedades térmicas para este material são apresentadas na Tabela 3.8, enquanto os parâmetros para as equações de Cross-WLF são apresentados na Tabela 3.9. Os parâmetros viscoelásticos lineares para o modelo Leonov são apresentados na Tabela 3.10.

Tabela 3.8 Parâmetros térmicos para o PS (*Styron 678E* , DOUVEN, 1991)

Parâmetros	Unidades	Valores
Condutividade térmica	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	0,138
Calor específico	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	1811
Difusividade térmica	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$	$7,9 \times 10^{-8}$

**Tabela 3.9 Parâmetros para a equação Cross-WLF para o PS
(Styron 678E, DOUVEN, 1991)**

Parâmetros	Unidades	Valores
n	-	0,26
τ^*	Pa	25000
D_1	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$	$4,36 \times 10^{11}$
D_2	K	373
D_3	-	0
A_1	-	11,92
\tilde{A}_2	K	48

**Tabela 3.10 Parâmetros viscoelásticos lineares para o modelo
Leonov (Styron 678E, DOUVEN, 1991)**

Modo	λ (s)	η_P (Pa.s)
1	2,25	6011
2	0,1965	5639
3	$1,175 \times 10^{-2}$	740,2
4	$7,872 \times 10^{-4}$	64,99
5	$5,472 \times 10^{-5}$	8,616
6	$4,140 \times 10^{-6}$	2,335

3.4.6 Caso VI: valores dos parâmetros para o cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas em comparação com condições convencionais

Para a análise das tensões induzidas pelo escoamento, nesta etapa, o material considerado foi o Styron 615 APR. Este material é recomendado para processos de paredes finas e os valores dos parâmetros necessários para os cálculos com os modelos escolhidos são disponíveis na literatura. As propriedades térmicas deste material são apresentadas na Tabela 3.11, enquanto os parâmetros para os modelos Cross-WLF e de Leonov são apresentados nas tabelas 3.12 e 3.13 respectivamente. Dados técnicos deste material são apresentados no Anexo.

Tabela 3.11 Parâmetros térmicos para o PS (Styron 615APR, SHYU et al., 2003)

Parâmetros	Unidades	Valores
Condutividade térmica	$W.m^{-1}.K^{-1}$	0,122
Calor específico	$J.kg^{-1}.K^{-1}$	2050
Difusividade térmica	$m^2.s^{-1}$	6×10^{-8}

Tabela 3.12 Parâmetros para o modelo Cross-WLF (Styron 615APR, BRESS, 2009)

Parâmetros	Unidades	Valores
n	-	0,3775
τ^*	Pa	12.726
D_1	$Kg.m^{-1}.s^{-1}$	$7,44 \times 10^{10}$
D_2	K	373,15
D_3	-	0
A_1	-	25,391
\tilde{A}_2	K	51,6

Tabela 3.13 Parâmetros viscoelásticos lineares para o modelo de Leonov (Styron 615APR, SHYU et al., 2003)

Modo	λ (s)	η_P (Pa.s)
1	0,1466	2228
2	0,00489	446,8

3.4.7 Caso VII: valores dos parâmetros para o estudo da aplicabilidade da metodologia não isotérmica desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com resultados experimentais

Para o estudo qualitativo da aplicabilidade da metodologia desenvolvida, visando simulação do preenchimento de cavidades, o material considerado foi novamente o Styron 615 APR. As propriedades térmicas deste material foram apresentados na Tabela 3.10, enquanto os parâmetros para os modelos Cross-WLF e de Leonov são apresentados nas Tabelas 3.11 e 3.12 respectivamente, na seção anterior.

Já na parte experimental a resina usada foi o Poliestireno N1921 visto que esse era o polímero disponível com maior semelhança de propriedades reológicas em relação ao Poliestireno Styron 615 APR. Maiores detalhes sobre o Poliestireno N1921 podem ser vistos no Anexo.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Neste capítulo são apresentados resultados referentes à implementação da metodologia para a simulação do preenchimento de cavidades utilizando os *solvers* *interFoam*, *viscoelasticInterFoam* e do *solver* não isotérmico, não acoplado, desenvolvido a partir destes *solvers*. Na Seção 4.1 é avaliada a influência das características da malha sobre a qualidade dos resultados obtidos com o *solver* *interFoam*. Além disso, visando obtenção de tempos de processamento menores, foi realizada uma comparação do processamento sequencial com o processamento em paralelo, com até 4 processadores, bem como uma avaliação de *solvers* para resolução de equações discretizadas. Na Seção 4.2 é apresentada uma comparação entre os resultados obtidos e resultados de simulações isotérmicas disponíveis na literatura. Na Seção 4.3 são apresentados resultados de cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em processo isotérmico utilizando o *solver* *viscoelasticInterFoam*. Na Seção 4.4 são apresentados resultados da avaliação do *solver* para simulação não isotérmica. Na Seção 4.5, resultados obtidos com a metodologia desenvolvida para cálculo de tensões viscoelásticas com metodologia não acoplada, em condições não isotérmicas, são comparados com resultados da literatura. A comparação das predições de tensões induzidas pelo escoamento, em condições de paredes finas em relação a condições convencionais, é apresentada na Seção 4.6. Finalmente, na Seção 4.7, é apresentada uma comparação qualitativa de resultados de simulação com *solver* não acoplado em relação a resultados experimentais.

4.1 Caso I: testes preliminares em problemas isotérmicos

Estudos preliminares com geometrias tridimensionais foram realizados visando avaliar o potencial da metodologia apresentada para o estudo do preenchimento de cavidades.

4.1.1 Cavidade tridimensional de paredes finas

Inicialmente foi estudada a influência da razão de aspecto dos volumes de controle sobre a qualidade dos resultados. Em simulações realizadas em uma cavidade de paredes finas tridimensional (Figura 3.1), a velocidade de injeção empregada foi de $0,1 \text{ m.s}^{-1}$ na entrada da cavidade e o modelo reológico empregado foi o Bird-Carreau. Foram analisadas quatro malhas com diferentes graus de refinamento e razões de aspecto conforme apresentado na seção 3.3.1. Os resultados de visualização da frente do escoamento (interface polímero/ar), em função do grau de refinamento da malha bem como da geometria dos volumes de controle, são apresentados na Figura 4.1. Os resultados, obtidos com 4 malhas diferentes, indicam a influência do refinamento da malha na direção z (espessura) e da razão de aspecto sobre a qualidade da predição da frente de fluxo. São resultados parciais encontrados em qualquer tempo durante o preenchimento da cavidade. Vemos que a qualidade dos resultados melhora com o refinamento da malha e com a redução da razão de aspecto dos volumes de controle. A interface ocupa uma região do domínio que se espalha ao longo de um determinado número de células. Portanto, se as células se alongam em determinada direção, a interface acaba se alongando nesta direção.

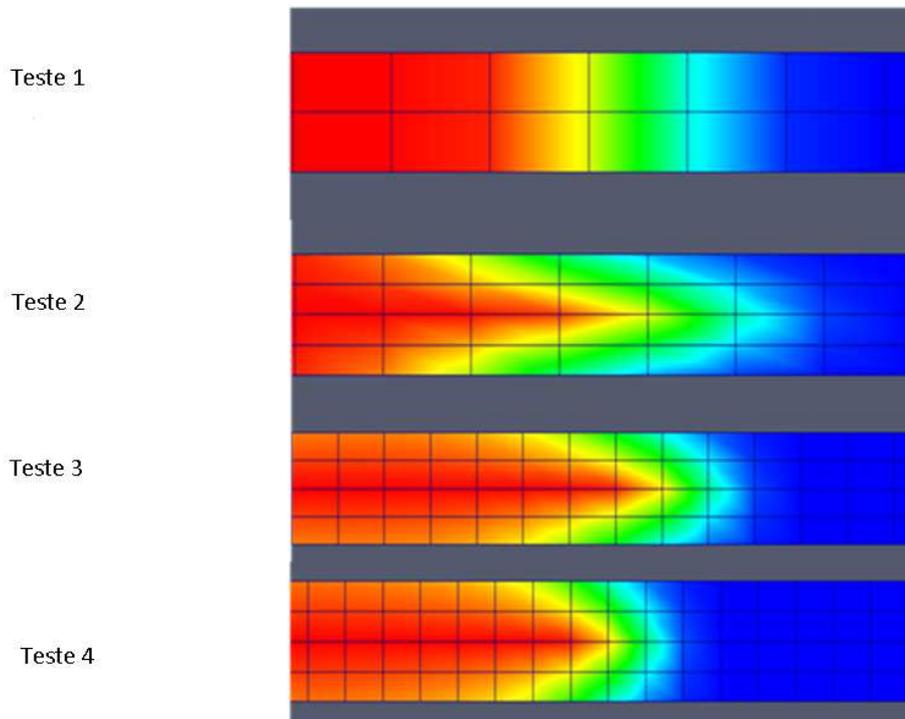


Figura 4.1 Influência do refinamento e da razão de aspecto da malha sobre a definição da interface ao longo da espessura (plano xz central). Nesta figura a cor vermelha representa a parte preenchida da cavidade enquanto a cor azul representa a região não preenchida. As demais cores representam a interface entre os dois fluidos.

Na Figura 4.2, que mostra o preenchimento no tempo 1,2 s, no plano xy , se observa que a definição da interface melhora com o refinamento da malha neste plano também.

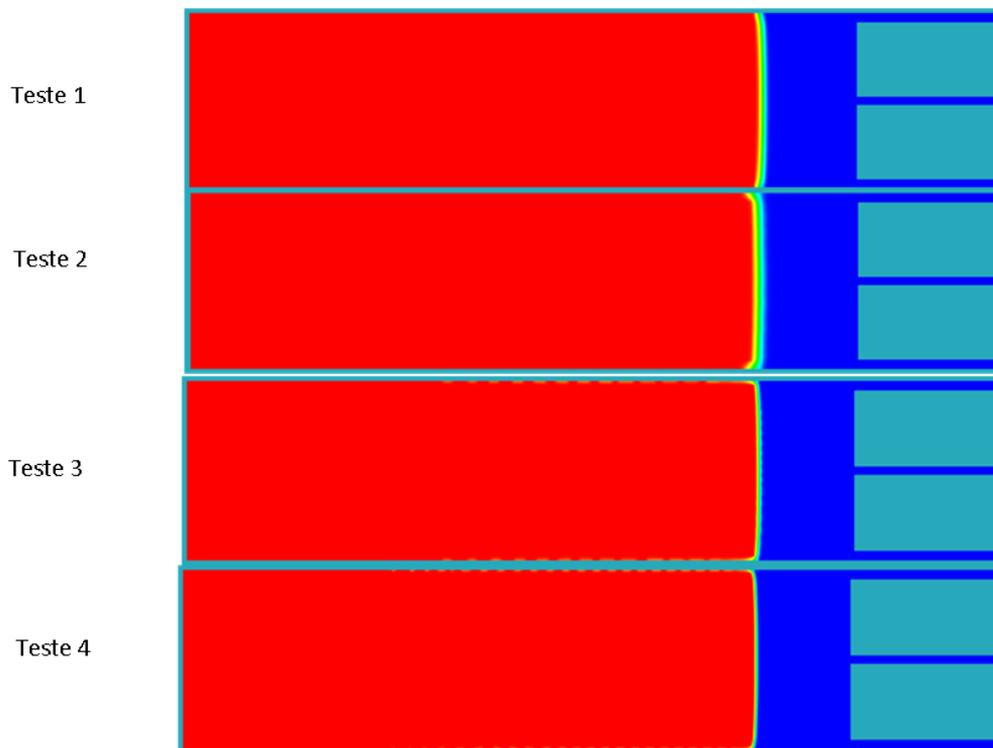


Figura 4.2 Posição da frente de fluxo no tempo 1,2 s (plano xy)

Devido às dimensões muito reduzidas na espessura da placa (direção z), em relação às dimensões nas direções x e y , o aumento do número de células na direção z causa um aumento muito grande do número de células total, da malha, para que se mantenham valores baixos das razões de aspecto em todas as direções. Isto limita o número de células na direção z causando uma baixa definição da interface no plano xz . Fica inviável a simulação com número de células elevadas na direção z , nestas malhas tridimensionais de paredes finas, pois o tamanho total da malha fica muito grande e o tempo de processamento se torna muito elevado. Em geral, geometrias tridimensionais apresentaram tempos de simulação que variaram em torno de 3 meses.

Para realizar teste de convergência de malha para a geometria tridimensional de paredes finas, foram realizadas simulações para malhas com diferentes graus de refinamento. Os valores de pressão na entrada da cavidade, para as malhas testadas, são apresentados na Figura 4.3.

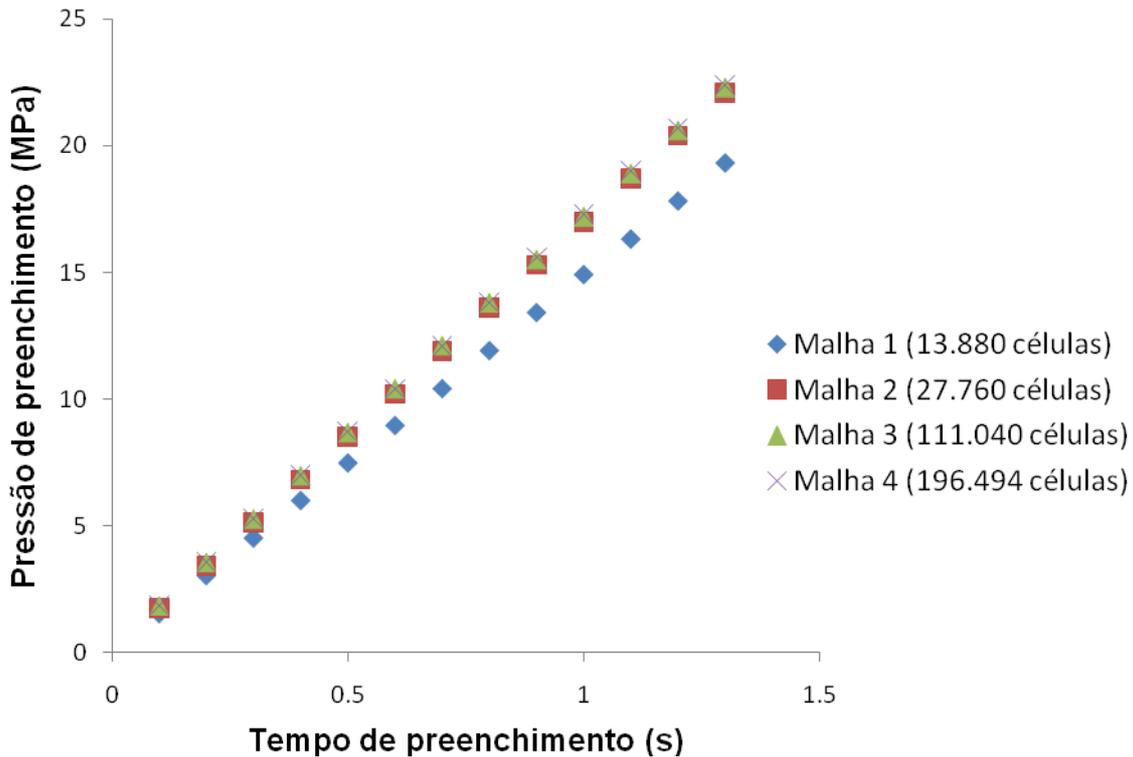


Figura 4.3 Resultados do teste de convergência

Observou-se que, para os testes com número de volumes de controle maiores (testes 2, 3 e 4), os resultados não variaram significativamente. Portanto, com relação aos resultados de pressão, o teste 2 apresenta resultados satisfatórios. Entretanto, quando outras variáveis são comparadas, observa-se que os resultados com as malhas 3 e 4 apresentaram-se relativamente melhores do que com a malha 2 (Figuras 4.1 e 4.2). Além disso, com a necessidade de se aumentar o número de volumes de controle na direção da espessura, para avaliar a variação de importantes propriedades nesta direção (temperatura e tensões, por exemplo), torna-se necessário trabalhar com malhas ainda mais refinadas do que a malha 4 requerendo maior tempo computacional.

Para avaliar o efeito da viscosidade sobre o desempenho do solver foi realizada uma comparação da variação das pressões de preenchimento, para dois fluidos com diferentes valores de viscosidade (valores apresentados na Figura 4.4). Os resultados são apresentados na Figura 4.4. Este teste teve o objetivo de avaliar o *solver* em situação de viscosidade elevada e os resultados não têm valor prático devido às pressões muito elevadas resultantes.

Não ficou evidenciado nenhum problema de convergência nestes testes. Entretanto, não foi realizado um teste de convergência de malha para o caso com maior viscosidade. Além disso, não foi verificado o efeito da variação brusca de viscosidade de célula para célula sobre a convergência.

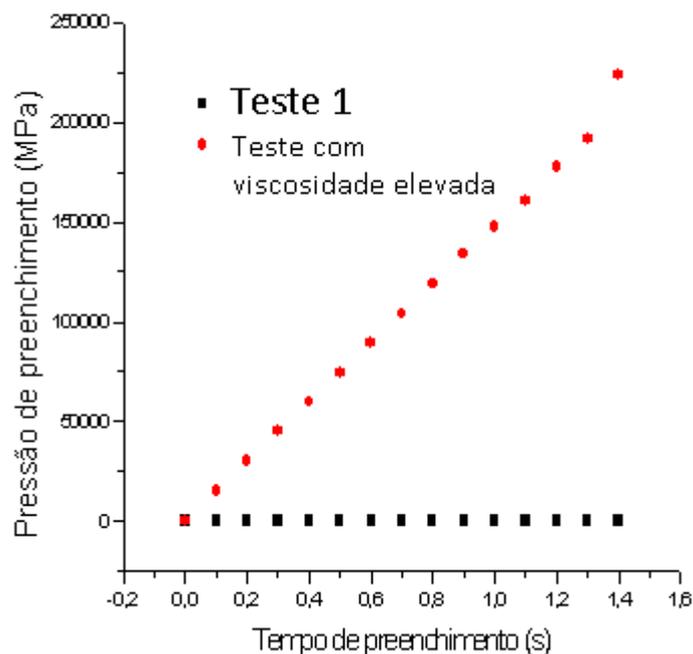


Figura 4.4 Resultados de pressão de preenchimento em função do tempo de preenchimento para dois polímeros: teste 1, baixa viscosidade ($\eta = 4,22 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$), e um com alta viscosidade ($\eta = 42152 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$).

Simulação com a malha 4 foi muito lenta devido ao elevado número de células. Visando minimizar este problema foram realizados alguns estudos visando redução dos tempos de processamento. Foram avaliadas duas alternativas para obtenção de maior velocidade de processamento neste trabalho: (a) processamento em paralelo, cujos resultados são apresentados nesta seção e (b) uso de diferentes *solvers* para a resolução das equações discretizadas para velocidade e pressão.

Foi realizado um estudo de comparação do processamento sequencial com processamento em paralelo em 2, 3 e 4 processadores. Cada teste foi realizado isoladamente (um por vez, no mesmo computador). Os resultados são apresentados na Tabela 4.1, onde t_P é o tempo de processamento com P processadores.

Tabela 4.1 *Speedup* e Eficiência (OpenMP/MPI) - Teste 4

Numero de processadores	Tempo *(s)	<i>Speedup</i> **	Eficiência*** $\eta = [t_1 / (t_p \times P)]$	Fração sequencial*** $\alpha = (1 - \eta) / [\eta \times (P - 1)]$
Em série	t_1	132.041	1	-
2	t_2	84.293	1,566	0,277
3	t_3	77.039	1,714	0,376
4	t_4	71.445	1,848	0,388

* tempo de execução

** ZHOU & TURNG, 2006; SECCHI, 1992;

*** SECCHI, 1992;

Observou-se um ganho significativo em velocidade de processamento como pode ser observado na coluna do *speedup*.

Teoricamente, o aumento de velocidade com o paralelismo deveria ser linear, de forma que um computador paralelo trabalhando com P processadores idênticos seria P vezes mais rápido do que apenas um processador. Na prática este valor não é atingido devido a diversos fatores, mas principalmente devido a existência de gargalos sequenciais. Segundo a lei de Amdahl, o aumento de velocidade potencial de um algoritmo em uma plataforma de computação paralela (o *speedup*) é limitado pela fração sequencial (α) inerente ao algoritmo (SECCHI, 1992).

Observa-se na Figura 4.5 que o valor de α parece tender a um valor inferior a 0,4. Para um $\alpha = 0,388$ ($P = 4$), o valor do *speedup* para um número infinito de

processadores poderia ser estimado como sendo o inverso de α , resultando um *speedup* de 2,577.

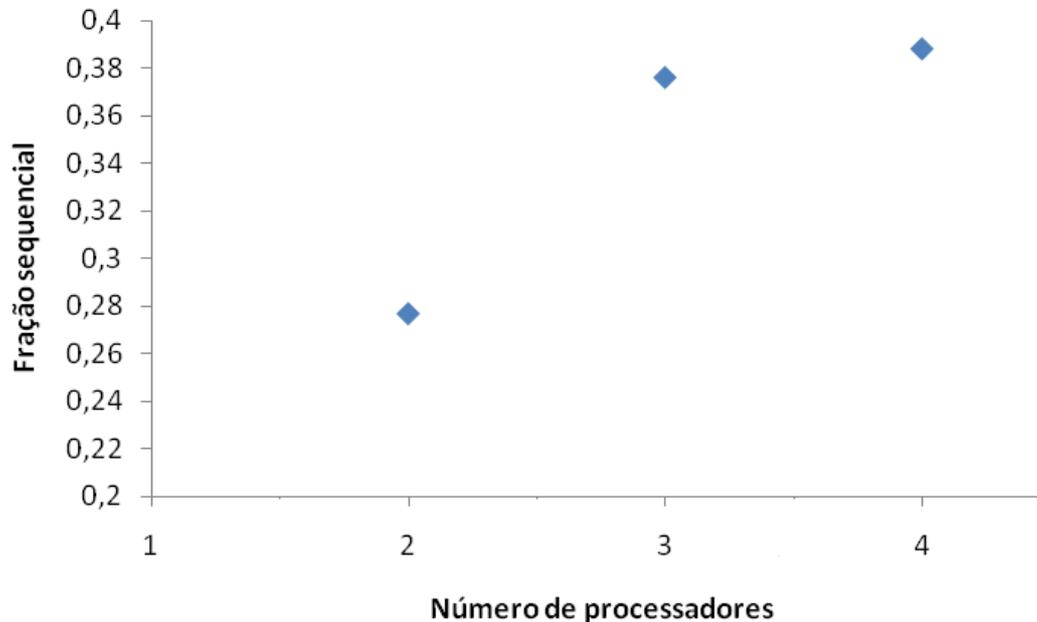


Figura 4.5 Fração sequencial em função do número de processadores em paralelo.

ARAÚJO et al. (2008) obtiveram valores de *speedup* de 1,7 – 1,89 usando dois processadores e de 2,95 – 3,69 para 4 processadores. Isto mostra que, apesar do ganho significativo em tempo de processamento obtido neste trabalho, existe a possibilidade de se obter melhor desempenho ainda com a utilização de computação paralela.

Também foram realizadas comparações de processamento em série e em paralelo, com 4 processadores, para duas malhas de tamanhos diferentes. Os resultados são apresentados na Tabela 4.2. Observou-se maior ganho em velocidade de processamento, com a utilização do processamento em paralelo, na simulação cujo tamanho de malha era superior.

Tabela 4.2 *Speedup* para processamento em paralelo com 4 processadores

Malha	Número de células	<i>Speedup</i>
malha 1	196.494	1,848
malha 2	501.723	2,074

São apresentados os resultados da avaliação de diferentes *solvers* para resolução das equações discretizadas, com o objetivo de se obter menores tempos de processamento. O caso utilizado como base para este estudo foi a malha 4 com processamento em paralelo em 4 processadores (malha 1 na Tabela 4.2).

Inicialmente foi avaliado o uso de técnicas *multigrid* na equação da pressão. Os resultados são apresentados na Tabela 4.3. Foi verificado um aumento significativo da velocidade de processamento através do uso destas técnicas.

Tabela 4.3 Influência do uso de técnicas *multigrid* sobre o desempenho computacional

<i>Solver</i> para cálculo da pressão	Tempo de processamento (s)
sem <i>solver multigrid</i>	145.301
com <i>solver multigrid</i>	70.976
Diminuição do tempo de processamento através do uso de técnica <i>multigrid</i>	51,15 %

Solver para a velocidade: PBiCG - gradiente bi-conjugado pré-condicionado com o LU incompleto diagonal

Foram avaliados tempos de processamento em simulações em que a equação para a pressão foi resolvida com *multigrid* combinando com diferentes *solvers* para a

equação da velocidade, com e sem relaxação. Os resultados são apresentados na Tabela 4.4 para simulação de um tempo de escoamento de 1,55 s. O *solver* utilizado na resolução da equação da velocidade não influenciou significativamente o tempo de processamento.

Tabela 4.4 Resultados de avaliação de diversos *solvers* para a equação da velocidade

<i>Solvers</i> para velocidade	Relaxação	Tempo de simulação (s)
PBiCG com pré-condicionador DILU	Não	68891
PBiCG com pré-condicionador DILU	Pressão: 0,1 Velocidade:0,3	70455
<i>smoothSolver</i> com <i>smoother</i> : GaussSeidel <i>nSweeps</i> : 1	Pressão: 0,1 Velocidade:0,3	70028

Obs: *solver* utilizado para a equação da pressão foi o multigrid

Observa-se que o uso de relaxação ou *smoothSolver* como *solver* para velocidade não resultou uma redução significativa do tempo de processamento.

Para verificar se a solução final não é afetada pelo método empregado, ou seja, se todas as soluções são equivalentes, variando somente o tempo o de processamento, foram realizadas algumas comparações de resultados que serão apresentadas a seguir.

Na Figura 4.6 são mostrados resultados de acompanhamento da pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento para simulações com e sem aplicação da técnica *multigrid*.

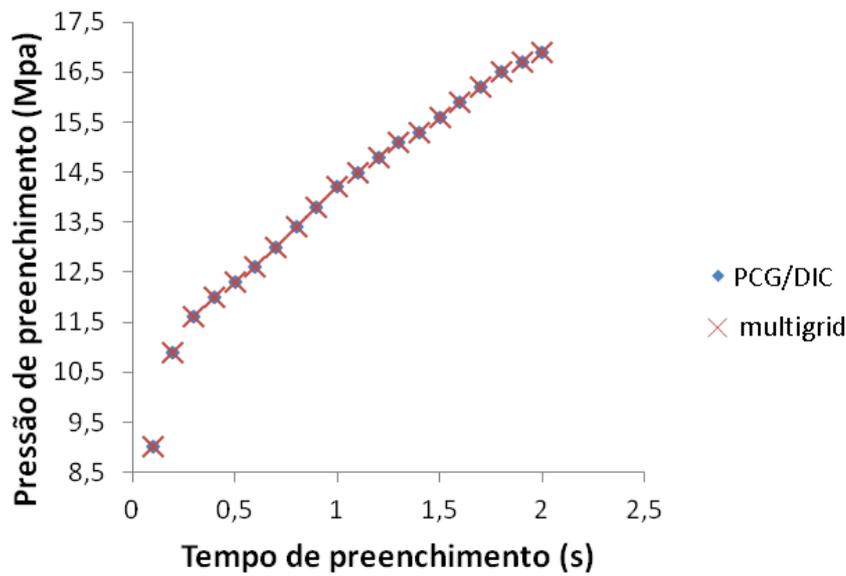


Figura 4.6 Comparação de resultados de pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento para uma simulação sem e outra com *multigrid*.

Na Figura 4.7 são mostrados resultados de acompanhamento da pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento para duas simulações, uma sem relaxação e outra com relaxação.

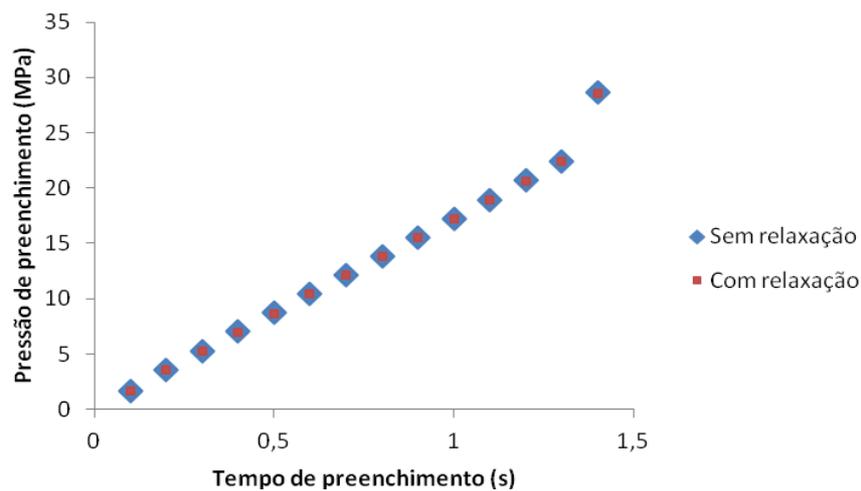


Figura 4.7 Comparação de resultados de pressão no ponto de injeção em função do tempo de preenchimento para uma simulação sem e outra com relaxação.

Não foram observadas diferenças nos resultados de acompanhamento de pressão de preenchimento, em função do tempo de preenchimento, para simulações que utilizaram diferentes *solvers*, com ou sem relaxação.

4.1.2 Caverna tridimensional de paredes finas com maior complexidade

Nesta etapa, analisando o preenchimento de um molde com uma geometria convencional e mais complexa conforme apresentado na Figura 3.2 (seção 3.1), buscou-se verificar a qualidade da predição da evolução da frente de fluxo durante o preenchimento da caverna, através da comparação com resultados obtidos por CHANG & YANG (2001), que são apresentados na Figura 4.8.

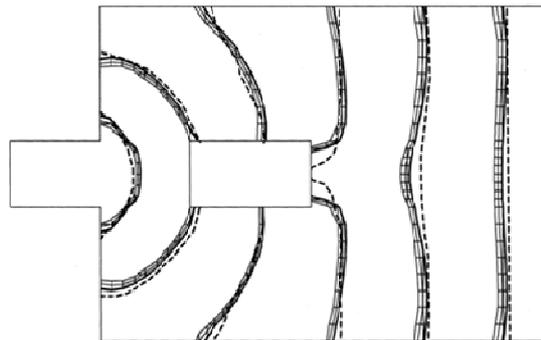


Figura 4.8 Deslocamento da frente de fluxo (CHANG & YANG, 2001)

Os resultados obtidos neste trabalho, para a malha mostrada na Figura 3.2, são apresentados na Figura 4.9. Observa-se que a evolução da frente de fluxo é semelhante à encontrada por CHANG & YANG (2001). Como os resultados da literatura não apresentam os tempos referentes a cada frente de fluxo, não pode ser realizada uma comparação para tempos correspondentes. Percebe-se a possibilidade de formação de uma linha de solda causada pelo encontro das frentes de fluxo, bem como pontos de retenção de ar. Esta possibilidade deve ser avaliada mais precisamente através do refinamento da malha nestas regiões.

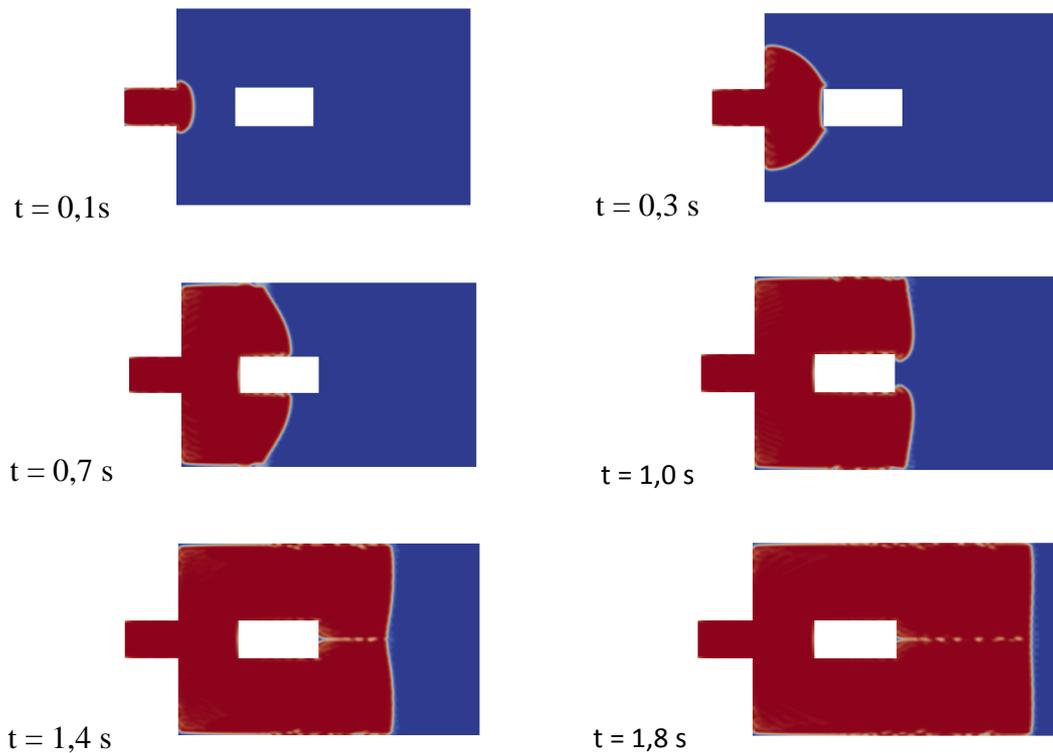


Figura 4.9 Evolução da frente de fluxo

Foram, novamente, observados problemas com a definição da frente de fluxo relacionados com tipos de malhas (tamanho e forma dos volumes de controle) e com o tipo de modelo reológico utilizado para o fluido que preenche a cavidade. O problema mostrou-se mais crítico na interface com as paredes da cavidade, como pode ser verificado na Figura 4.10, onde é mostrado um plano no contorno e um plano central para a simulação em uma malha menos refinada do que as utilizadas para obtenção dos resultados apresentados na Figura 4.9.

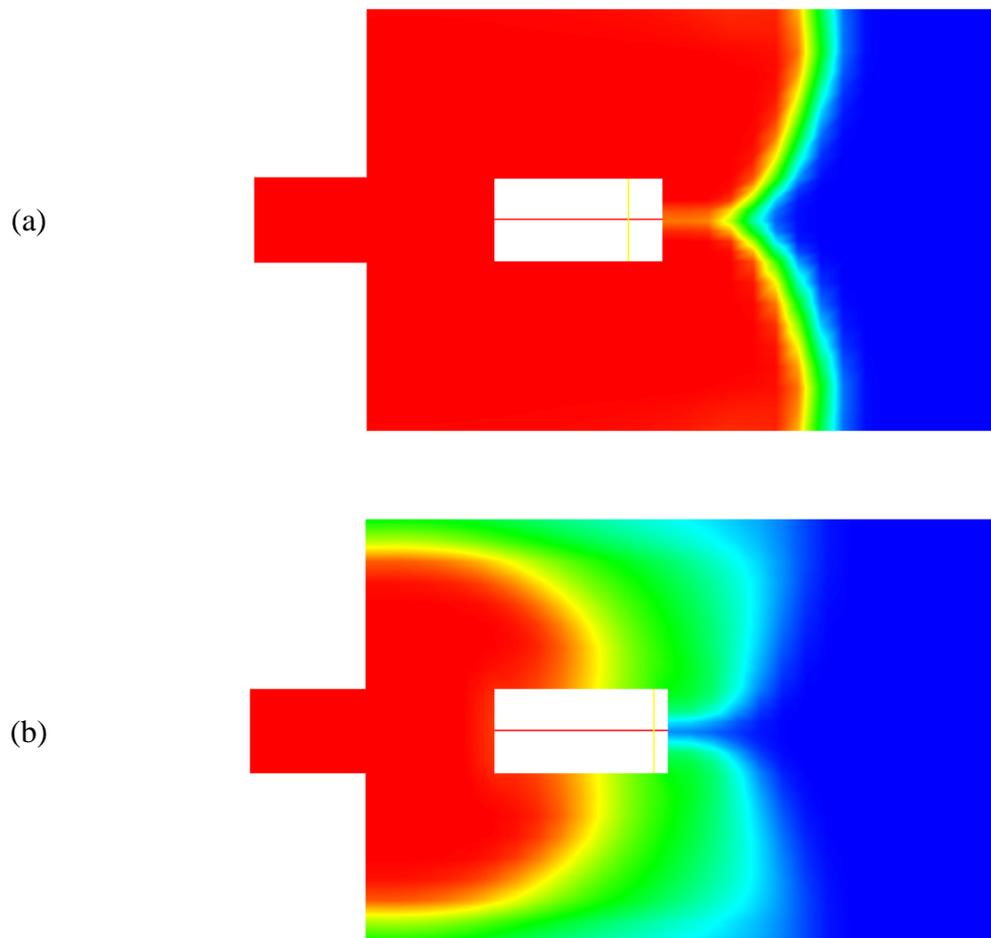


Figura 4.10 Frente de fluxo (6.048 células). (a) Plano central; (b) Plano da parede.

Resultados de simulações com malhas com diferentes números de volumes de controle e razões de aspecto são mostrados na Figura 4.11.

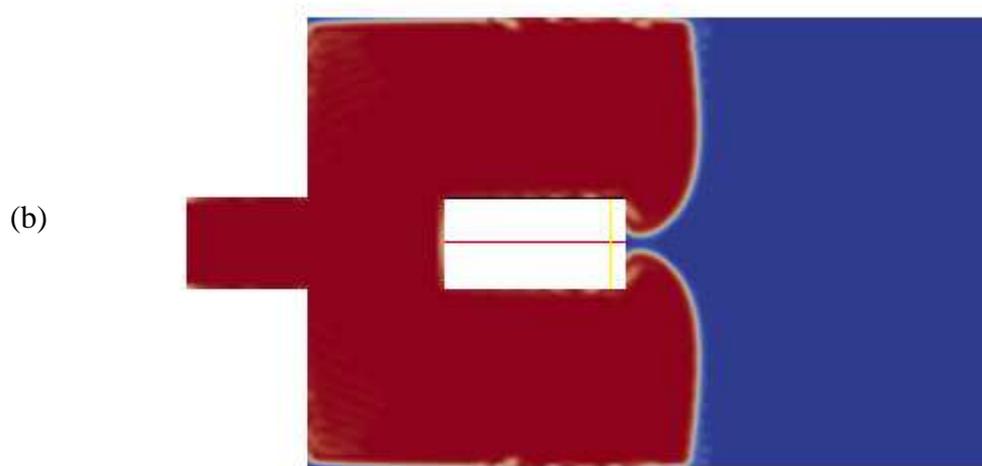
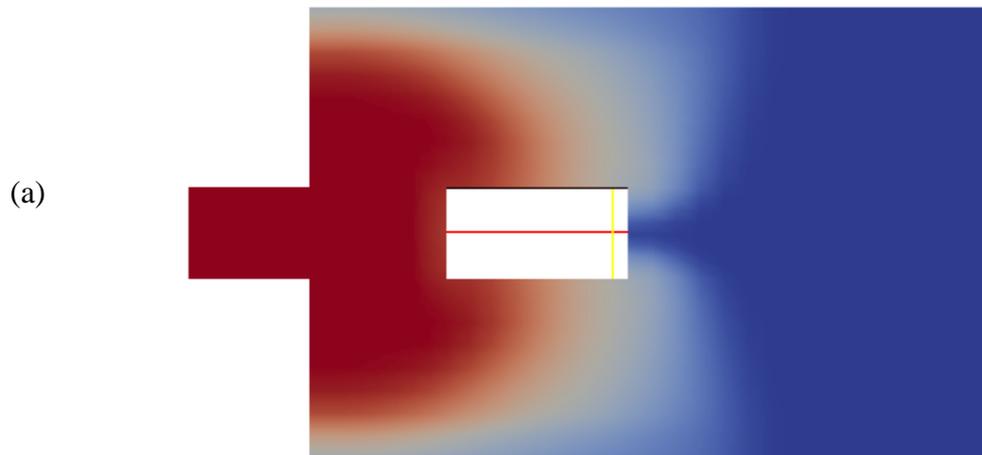


Figura 4.11 Comparação da definição da interface obtida com duas malhas distintas no mesmo tempo de escoamento (1,1 s): (a) 6.048 células com razão de aspecto máxima de 25 e (b) 101.282 células com razão de aspecto máxima de 5,8.

A utilização de uma malha mais refinada, com volumes de controle apresentando pequena razão de aspecto, proporcionou a obtenção de uma interface (frente de fluxo) com melhor definição (Figura 4.11b) se comparada com a interface obtida utilizando uma malha mais grossa com maior razão de aspecto (Figura 4.11a).

4.2 Caso II: resultados da validação da metodologia desenvolvida para escoamento isotérmico através de acompanhamento da pressão no ponto de injeção durante o preenchimento

Inicialmente, foram realizadas simulações com quatro tamanhos diferentes de malhas para verificar a convergência de malha. A geometria utilizada foi apresentada na Figura 3.3 (Caso II) e os resultados são apresentados na Figura 4.12.

Observou-se que, a partir da malha com 70.200 volumes de controle, os resultados não apresentaram diferenças significativas. Portanto, considerou-se que esta malha apresenta precisão suficiente.

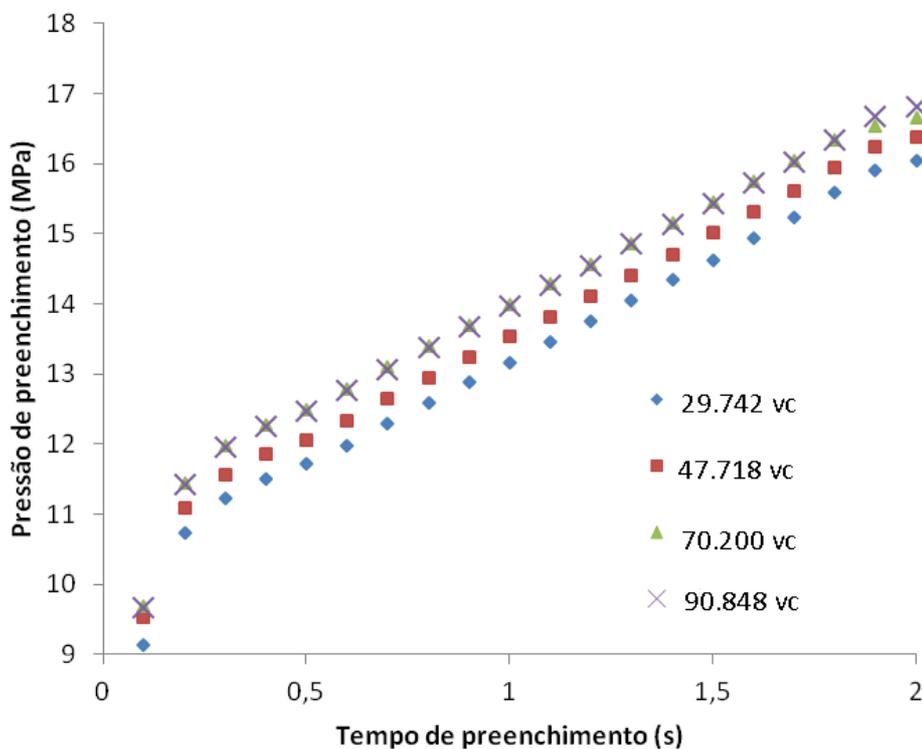


Figura 4.12 Comparação dos resultados de pressão no ponto de injeção durante o preenchimento da cavidade em função do tamanho da malha.

Os valores obtidos neste trabalho para a pressão no ponto de injeção no decorrer do preenchimento da cavidade são apresentados na Figura 4.13, junto com resultados obtidos por CHANG & YANG (2001) e por ARAÚJO et al. (2008). Observa-se boa concordância entre os três resultados (diferenças menores que 7%).

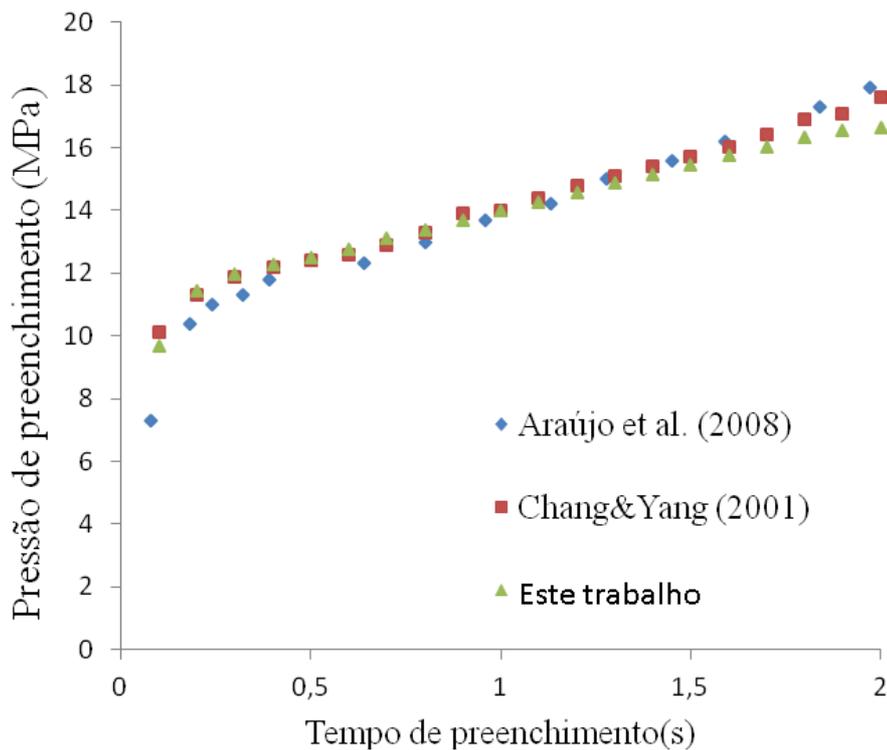


Figura 4.13 Evolução da pressão no ponto de injeção durante o preenchimento da cavidade para este trabalho junto com resultados da literatura (CHANG & YANG, 2005 e ARAÚJO et al., 2008).

4.3 Caso III: cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos

4.3.1 Avaliação do *solver viscoelasticInterFoam* no limite newtoniano

Nesta etapa do trabalho foi avaliado o *solver viscoelasticInterFoam* em comparação com o *interFoam* no limite newtoniano. Para isso foi introduzido o código para o cálculo de tensões, para fluidos newtonianos, no *solver interFoam*, e os resultados obtidos com este *solver* foram comparados com simulação realizada com o *solver viscoelasticInterFoam* no limite newtoniano. Os parâmetros λ e ε do modelo Phan-Thien-Tanner simplificado, foram iguados a zero obtendo-se, desta maneira, a equação correspondente ao comportamento Newtoniano no *viscoelasticInterFoam*. O

valor do coeficiente de viscosidade, η , usado para ambas as simulações foi igual a $4,673 \times 10^3$ Pa.s. Nesta simulação foi utilizada uma geometria bidimensional de placa plana com 20 mm de comprimento e 1 mm de espessura. Foi usada uma malha com 13.500 células hexaédricas de mesmas dimensões e baixa razão de aspecto.

Inicialmente foram obtidos valores da componente da velocidade na direção do escoamento, u_x , ao longo da linha central do canal, para uma velocidade na entrada da cavidade igual a $0,1 \text{ m.s}^{-1}$, e tempo de preenchimento de 0,2 s, com o *viscoelasticInterFoam* no limite newtoniano e com o *interFoam*. Estes resultados são apresentados na Figura 4.14.

Observa-se que a velocidade permanece aproximadamente constante na região situada entre os valores de x de 1 e 3 mm. Nesta região temos escoamento plenamente desenvolvido, ou seja, o perfil de velocidades é constante (a derivada da velocidade u_x em relação a x é nula).

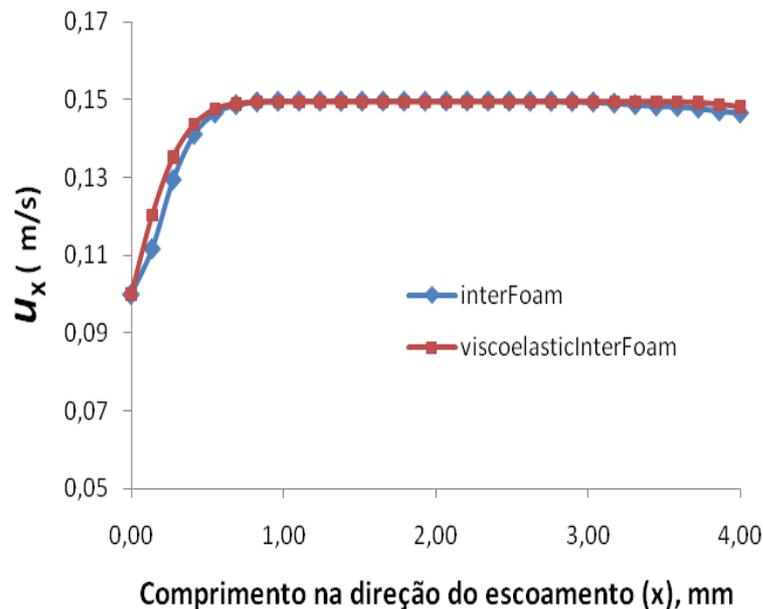


Figura 4.14 Evolução da velocidade (u_x) na linha central no tempo de preenchimento de 0,2s, com velocidade constante na entrada de 0,1 m/s, obtidos com os *solvers viscoelasticInterFoam e InterFoam*.

Os perfis de velocidade obtidos com *viscoelasticInterFoam* e com o *interFoam*, ao longo da espessura da cavidade, são apresentados na Figura 4.15. Foram escolhidos

os perfis nos pontos $x = 2,5$ mm, para as duas simulações, com o valor de y (direção da espessura) variando de 0 a 1 mm (entre as duas paredes). Os perfis das componentes da velocidade na direção x , obtidos com ambos os *solvers*, ficaram muito próximos conforme pode ser visto na Figura 4.15.

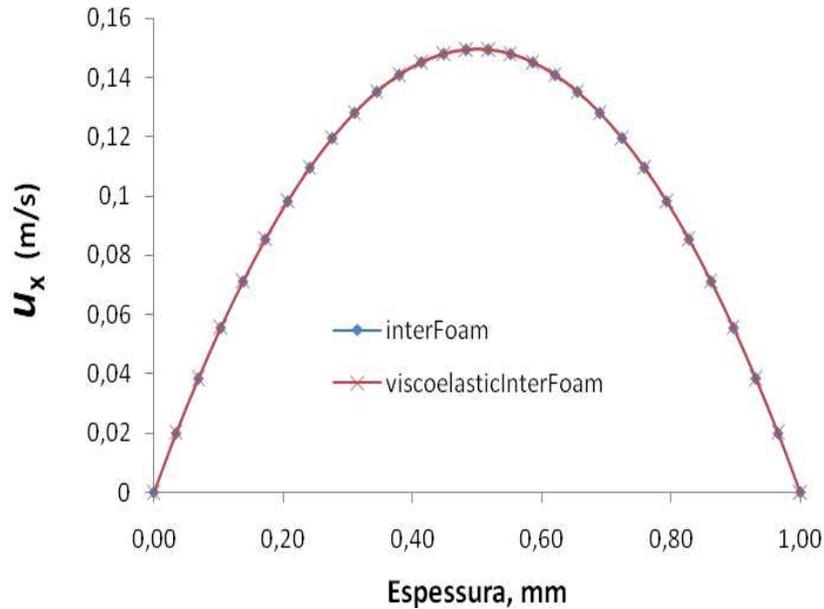


Figura 4.15 Perfil de velocidades na direção y , em $x = 2,5$ mm, no tempo de preenchimento de 0,1 s, com velocidade na entrada constante de 0,1 m/s, obtidos com os *solvers viscoelasticInterFoam* e *interFoam*.

São apresentados, na Figura 4.16, os perfis de tensão de cisalhamento (componente τ_{xy}), ao longo da espessura, em $x = 2,5$ mm, no tempo $t = 0,2$ s, com o valor de y variando de 0 a 1 mm, para os *solvers interFoam* e *viscoelasticInterFoam*. Observa-se que, nestas condições, os resultados de tensão de cisalhamento para os dois *solvers* estão em excelente concordância.

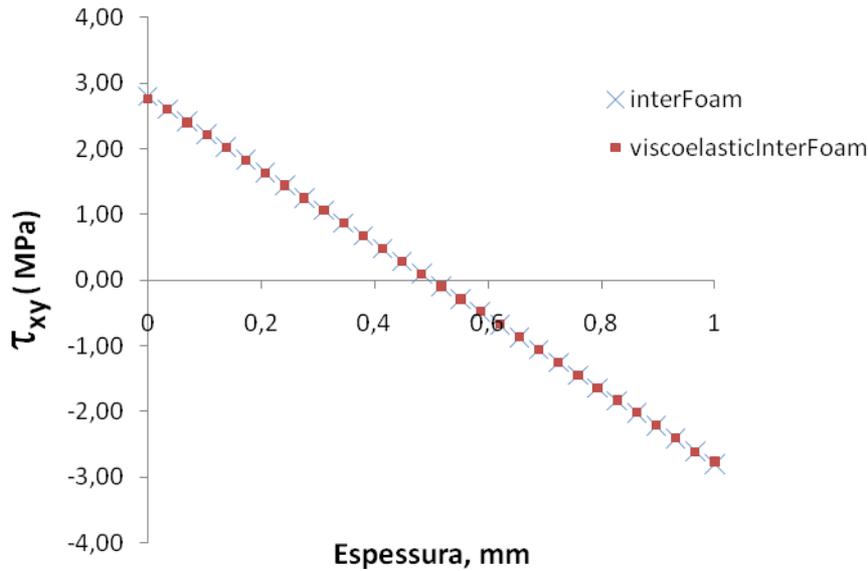


Figura 4.16 Perfil de tensão τ_{xy} em $x = 2,5$ mm, tempo = 0,2 s, com os *solvers* *interFoam* e *viscoelasticInterFoam*.

4.3.2 Comparação de tensões induzidas pelo escoamento isotérmico entre peças convencionais e de paredes finas

Em processos de injeção de peças de paredes finas ocorre uma elevação significativa da viscosidade, principalmente em regiões próximas às paredes, devido ao rápido resfriamento do material. Em processos de injeção convencional esta elevação da viscosidade é menos importante. Por isso, para se obter o preenchimento da cavidade, em processos de paredes finas, é necessário trabalhar com velocidades de injeção superiores. Estas duas características do processo de paredes finas, menor espessura de parede (resultando maior taxa de cisalhamento e maior velocidade de resfriamento) e maior velocidade de preenchimento (resultando maior taxa de cisalhamento), devem causar elevação significativa das tensões induzidas pelo escoamento. Nesta parte do trabalho é apresentada uma comparação de tensões induzidas pelo escoamento isotérmico entre peças convencionais e de paredes finas utilizando equação constitutiva viscoelástica. É importante ressaltar que está sendo examinada apenas a etapa de preenchimento em um processo isotérmico, ou seja, não é avaliada a influência do resfriamento do material.

Para a realização deste estudo foi utilizado o *solver* isotérmico e incompressível *viscoelasticInterFoam*. Foi estudado o escoamento de um fluido viscoelástico, descrito pelo modelo Phan-Thien-Tanner simplificado (SPTT), em uma geometria de placas

planas paralelas, com 60 mm de comprimento, obtendo-se resultados para diferentes espessuras e velocidades. A Figura 4.17 apresenta os perfis da primeira diferença de tensões normais para uma espessura de 2 mm com uma velocidade na entrada constante de $0,09 \text{ m.s}^{-1}$, que são parâmetros representativos de um processo de moldagem por injeção convencional.

Estes resultados estão na mesma ordem de magnitude dos valores apresentados na literatura para a primeira diferença de tensões normais em peças moldadas por processo de injeção convencional (CAO et al., 2008; DOUVEN et al., 1995; ZOETELIEF et al., 1996). Embora não seja possível realizar uma comparação quantitativa com os trabalhos referidos, devido a diferenças de geometria e efeitos térmicos, é possível o uso dos resultados apresentados na Figura 4.17 como sendo representativos de um processo de moldagem por injeção convencional para comparação com processos de paredes finas.

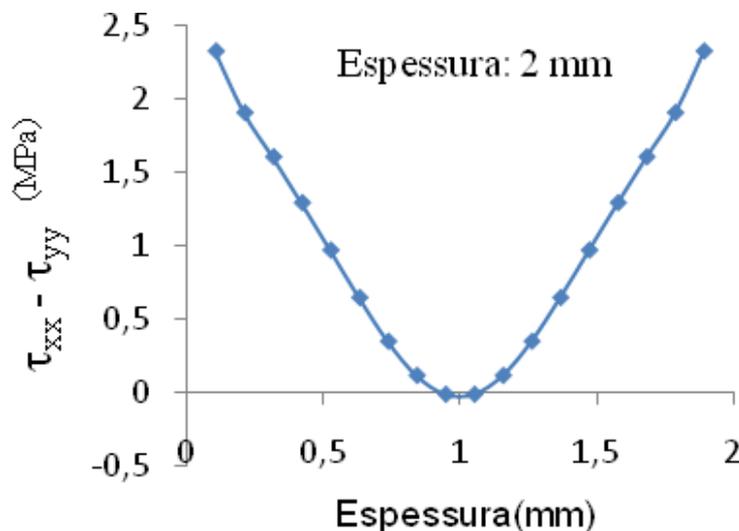


Figura 4.17 Perfil, ao longo da espessura, da primeira diferença de tensões normais em uma placa com espessura de 2 mm, com velocidade de escoamento de $0,0896 \text{ m.s}^{-1}$ em $x = 0,03\text{m}$. Placa com 60 mm de comprimento.

A Figura 4.18 apresenta perfis de primeira diferença de tensões normais, após um tempo de preenchimento de 0,05 s, com uma velocidade na entrada constante de $3,5 \text{ m.s}^{-1}$ para três diferentes espessuras com condições típicas de processos de paredes finas. Conforme esperado, quanto menor é a espessura da peça, maiores são os níveis de tensão observados. Isto ocorre porque a taxa de cisalhamento aumenta significativamente com a diminuição da espessura da peça para uma velocidade fixa. Entretanto, o aspecto mais relevante nestes resultados é o fato de que, em todos os casos, os valores das primeiras diferenças de tensões normais apresentam-se pelo menos

uma ordem de magnitude maior do que os valores correspondentes às condições de moldagem por injeção convencional observados nos resultados apresentados na Figura 4.17.

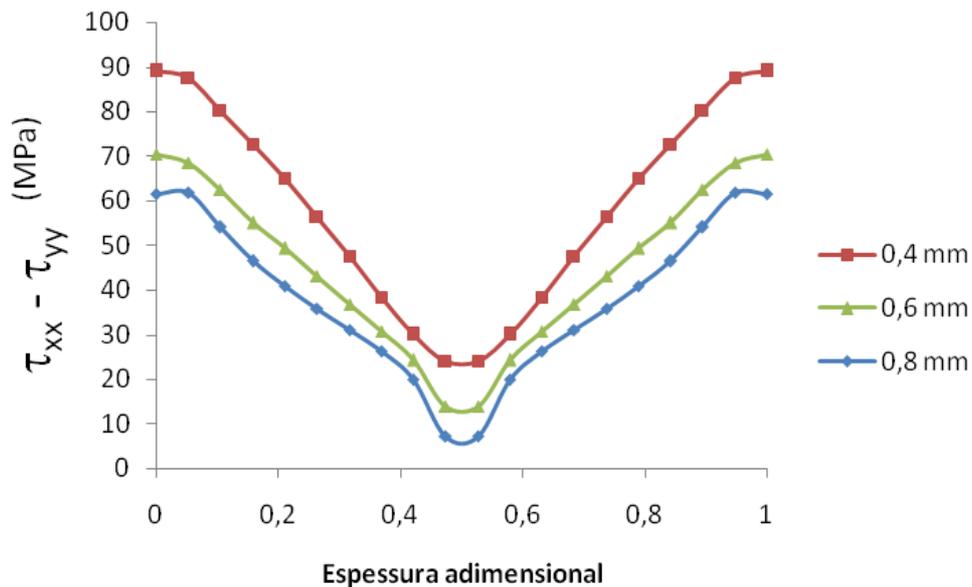


Figura 4.18 Perfis da primeira diferença de tensões normais, ao longo da espessura, em placas com espessuras de 0,4 mm, 0,6 mm e 0,8 mm, em $x = 0,03$ m, para o tempo $t = 0,05$ s.

Resultados similares foram encontrados ao variar a velocidade na entrada da cavidade, para uma espessura constante, com valores de velocidade típicos de processos de paredes finas. Estes resultados são apresentados na Figura 4.19.

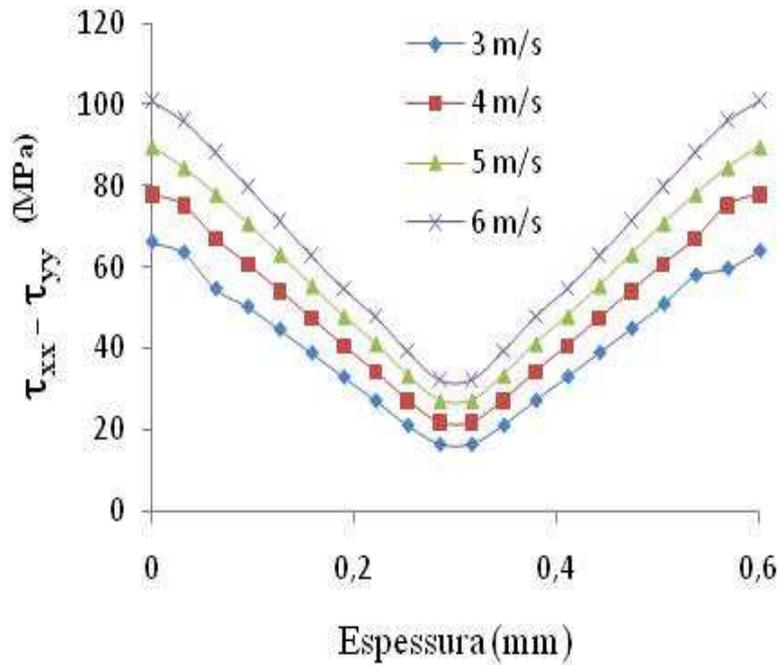


Figura 4.19 Perfis da primeira diferença de tensões normais, ao longo da espessura, em placas com espessura de 1 mm, em $x = 0,03$ m, para diferentes velocidades na entrada da cavidade.

Tensões induzidas termicamente se desenvolvem no núcleo quente da cavidade durante o resfriamento da peça após cessar o escoamento do polímero. À medida que a espessura da cavidade diminui, entretanto, a contribuição do núcleo quente sobre o total das tensões residuais da peça tende a diminuir em relação às tensões induzidas pelo escoamento que se desenvolvem próximo às paredes da cavidade. Em combinação com o aumento significativo em ordem de magnitude das tensões induzidas pelo escoamento para processos de paredes finas, este fato indica que as tensões residuais induzidas pelo escoamento não podem ser desconsideradas na avaliação do total de tensões residuais de peças injetadas por processos com condições características de paredes finas.

Verificou-se que os valores de tensão nas paredes, nas simulações isotérmicas, não diminuiriam conforme se observa nas simulações não isotérmicas apresentadas em CAO et al. (2008) e DOUVEN et al. (1995). O ponto de máximo de tensões, nas simulações não isotérmicas, encontradas na literatura, desloca-se na direção do centro da peça em relação às simulações isotérmicas. Não foram encontrados, na literatura, resultados de tensões induzidas pelo escoamento em processos isotérmicos de preenchimento de cavidades sendo, portanto, para fins de validação da metodologia implementada, necessário estudar o desenvolvimento de tensões induzidas pelo escoamento em processos não isotérmicos. Resultados de simulações em condições não isotérmicas são apresentados na seção seguinte.

4.4 Caso IV: resultados para cálculo das tensões induzidas pelo escoamento em condições não isotérmicas e metodologia não acoplada – testes preliminares

Nesta etapa é utilizada a mesma metodologia empregada na etapa anterior, mas utilizando uma forma modificada do *viscoelasticInterFoam*, implementada neste trabalho. As principais diferenças são apresentadas a seguir: (1) utilização da abordagem não acoplada para o cálculo das tensões; (2) introdução da equação da conservação da energia para cálculo dos campos de temperatura e (3) introdução da equação Cross-WLF para cálculo da viscosidade em função da taxa de cisalhamento e da temperatura.

Foi realizada uma simulação prescrevendo uma velocidade constante na entrada igual a 0,1 m/s, característica de processos convencionais, com o *solver viscoelasticInterFoam* modificado (*viscoelasticThermalFoamC*). Os resultados de tensões induzidas pelo escoamento são apresentados na Figura 4.20 para três pontos situados em diferentes distâncias em relação ao ponto de injeção (3, 10 e 15 mm), em uma placa bidimensional com comprimento de 20 mm, para o tempo de preenchimento $t = 0,2$ s.

Quantitativamente, os resultados apresentados na Figura 4.20 estão na mesma ordem de grandeza dos valores encontrados na literatura, para tensões residuais em escoamento não-isotérmico (DOUVEN et al., 1995; ZOETELIEF et al., 1996; CAO et al., 2008). Coerentemente com os resultados apresentados na literatura, os valores de tensões induzidas pelo escoamento, na etapa de preenchimento, diminuem com o aumento da distância do ponto considerado em relação ao ponto de injeção (CAO et al., 2008).

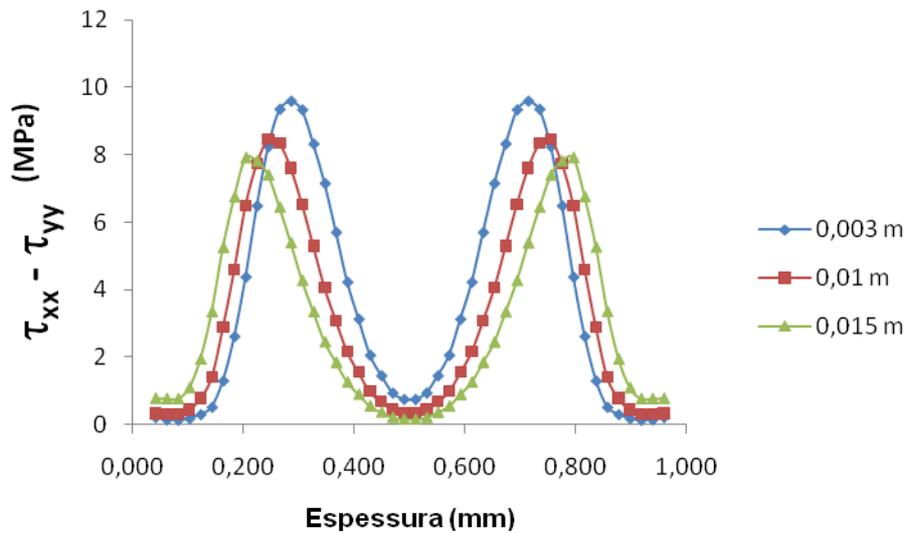


Figura 4.20 Tensões induzidas pelo escoamento em três pontos situados em diferentes distâncias em relação ao ponto de injeção (3, 10 e 15 mm) em uma placa com espessura de 1 mm para o tempo de preenchimento $t = 0,2$ s.

Qualitativamente, os perfis de tensões induzidas pelo escoamento apresentados na Figura 4.20 estão coerentes com os valores encontrados na literatura. Conforme CAO et al. (2008) e DOUVEN et al. (1995), as tensões induzidas pelo escoamento apresentam valores reduzidos no plano central da cavidade, algumas vezes apresentando valores negativos, e subindo a um valor máximo em regiões mais próximas às paredes, onde a taxa de cisalhamento atinge seu valor máximo, depois diminuindo nas paredes.

A Figura 4.21 mostra os perfis de primeira diferença de tensões normais, após 0,2 s de preenchimento com velocidade de $0,1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ na entrada, obtidos com o *solver* para escoamento não isotérmico, não acoplado, em comparação com o *solver* para escoamento isotérmico (*viscoelasticInterFoam*). Conforme já observado anteriormente o ponto de máximo de tensões, nas simulações não isotérmicas, desloca-se na direção do centro da peça em relação às simulações isotérmicas. Esta diferença ocorre porque, em processos não isotérmicos, existe uma camada junto às paredes, cuja velocidade tende a zero devido ao aumento significativo da viscosidade nesta região em função da diminuição da temperatura. Esta diferença nos perfis de velocidade pode ser observada na Figura 4.22. Esta camada com velocidade tendendo a zero nas paredes torna mais estreita a área efetiva disponível para o escoamento e desloca o máximo de taxa de cisalhamento na direção do centro da peça conforme se pode observar na Figura 4.23.

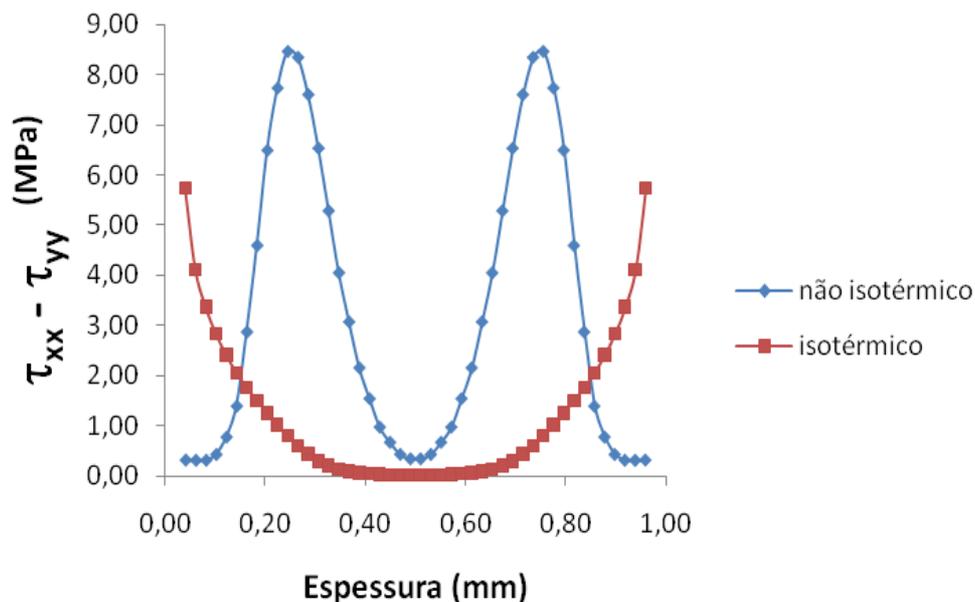


Figura 4.21 Perfis ao longo da espessura da primeira diferença de tensões normais em uma placa de 1 mm, calculada para um processo isotérmico e não isotérmico, a $x = 0,01$ m para o tempo $t = 0,2$ s.

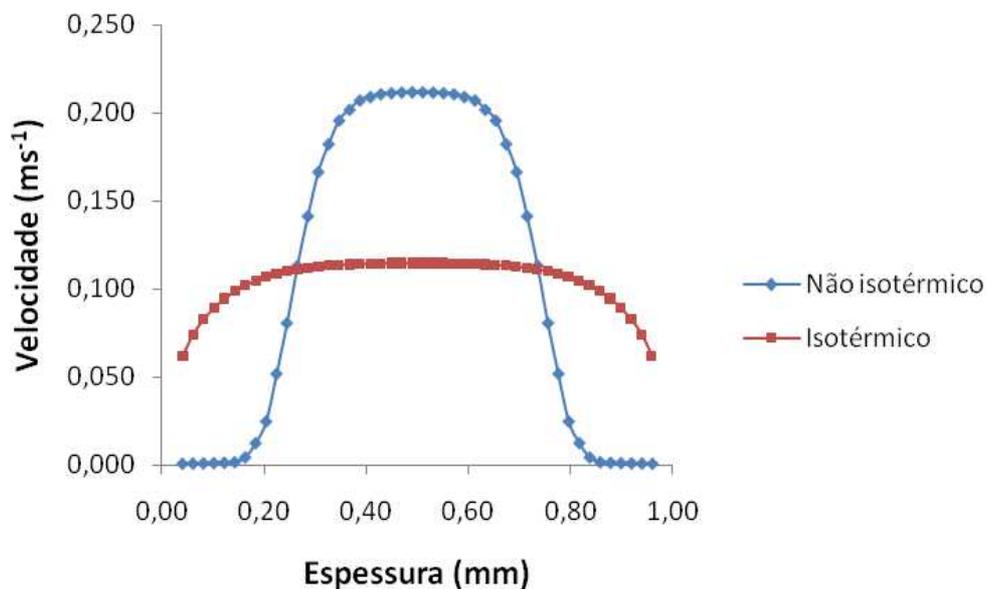


Figura 4.22 Perfis do componente da velocidade na direção x , ao longo da espessura, em uma placa com 1 mm de espessura, calculada para um processo isotérmico e não isotérmico, para o tempo $t = 0,2$ s.

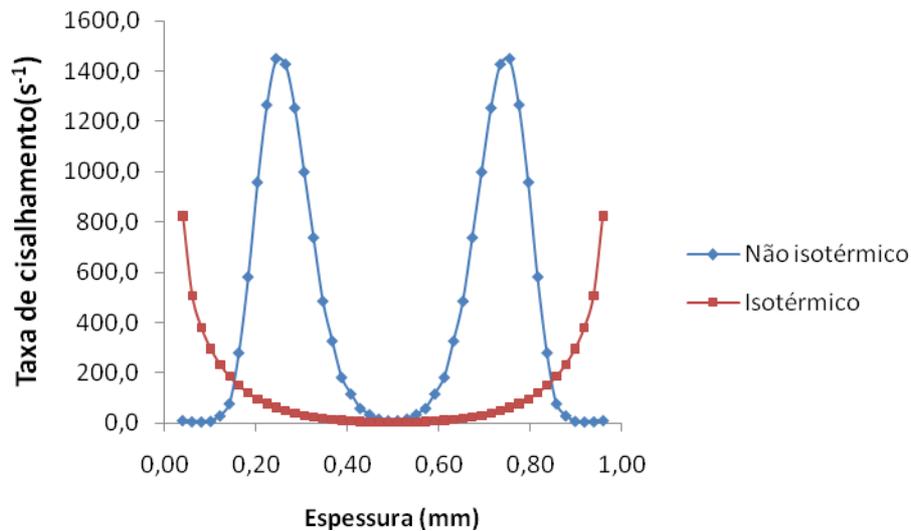


Figura 4.23 Perfis ao longo da espessura da taxa de cisalhamento, em uma placa com espessura de 1 mm, calculada para um processo isotérmico e um processo não isotérmico, para o tempo $t = 0,2$ s.

Estes estudos preliminares com *solver* não isotérmico, não acoplado, apresentaram resultados qualitativamente de acordo com a literatura. A próxima etapa é a comparação dos resultados obtidos com esta metodologia com resultados obtidos da literatura.

4.5 Caso V: comparação dos resultados obtidos com a metodologia desenvolvida para cálculo de tensões viscoelásticas, em condições não isotérmicas e metodologia não acoplada, com resultados da literatura

Nesta seção é apresentada uma comparação de resultados de simulação com a metodologia desenvolvida neste trabalho, em uma geometria tridimensional, com resultados de simulação numérica apresentados em DOUVEN (1991).

Inicialmente foi realizado um teste de convergência de malha cujos resultados são apresentados na Figura 4.24. Nesta figura, a primeira diferença de tensões normais, determinada em um ponto situado a 76 mm da entrada na linha de simetria do plano xy, é apresentada em função da espessura adimensional. Este teste foi realizado para tempos de simulação de apenas 0,23 s devido ao tempo muito elevado necessário para realizar as simulações até o tempo correspondente ao preenchimento final da cavidade (0,95 s). O número de volumes de controle foi variado nas três direções procurando modificar

minimamente as razões de aspecto dos volumes de controle no plano xy . O número de volumes de controle na direção da espessura (direção z) foi escolhido de modo a fornecer o máximo de informações nesta direção sem aumentar significativamente o tamanho da malha.

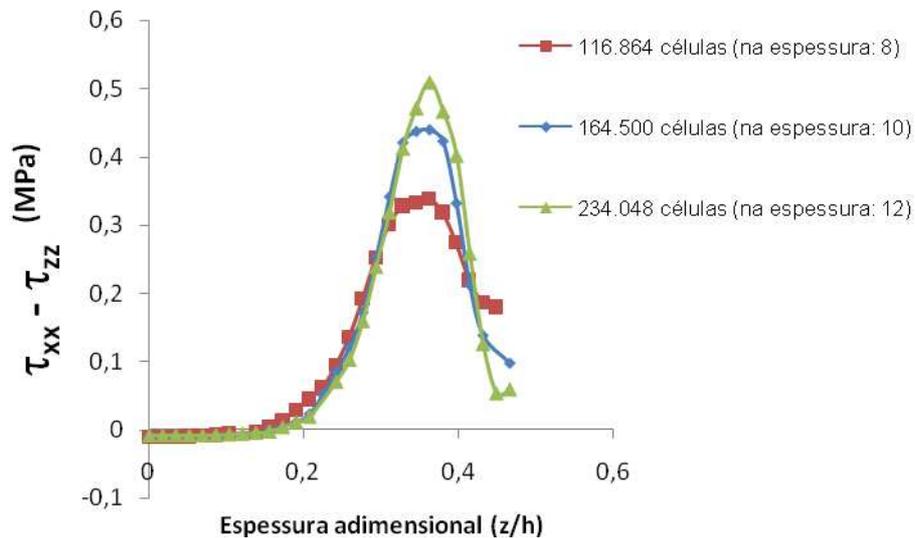


Figura 4.24 Resultados do teste de convergência de malha para simulação de 0,23s de preenchimento da cavidade.

Observa-se que a diferença entre os resultados justifica a utilização da malha mais refinada para a realização da simulação até preenchimento total da cavidade para comparação com os resultados da literatura.

Os resultados de comparação desta metodologia para simulação não isotérmica do preenchimento de cavidades, com resultados da literatura, são apresentados na Figura 4.25, onde a primeira diferença de tensões normais é apresentada em função da espessura adimensional. Foi realizada uma comparação dos resultados obtidos a 0,95s, com a malha de 234.048 células, com resultados obtidos na literatura (DOUVEN, 1991). Os resultados apresentaram boa concordância qualitativa, mas a diferença máxima entre os resultados ficou em aproximadamente 40%. Existem muitas diferenças entre as metodologias empregadas por DOUVEN (1991) e a empregada neste trabalho. Algumas diferenças importantes foram que neste trabalho foi utilizado o modelo incompressível de Leonov enquanto DOUVEN (1991) empregou o modelo de Leonov compressível. Neste trabalho foi utilizado um modelo tridimensional enquanto DOUVEN (1991) empregou o modelo Hele-Shaw. Não foram realizadas simulações com malha mais refinada devido aos elevados tempos de simulação necessários.

O objetivo deste trabalho é calcular tensões residuais induzidas pelo escoamento em peças de paredes finas para comparação com peças convencionais. Como ambos os resultados serão obtidos com a metodologia desenvolvida a comparação fornecerá resultados confiáveis.

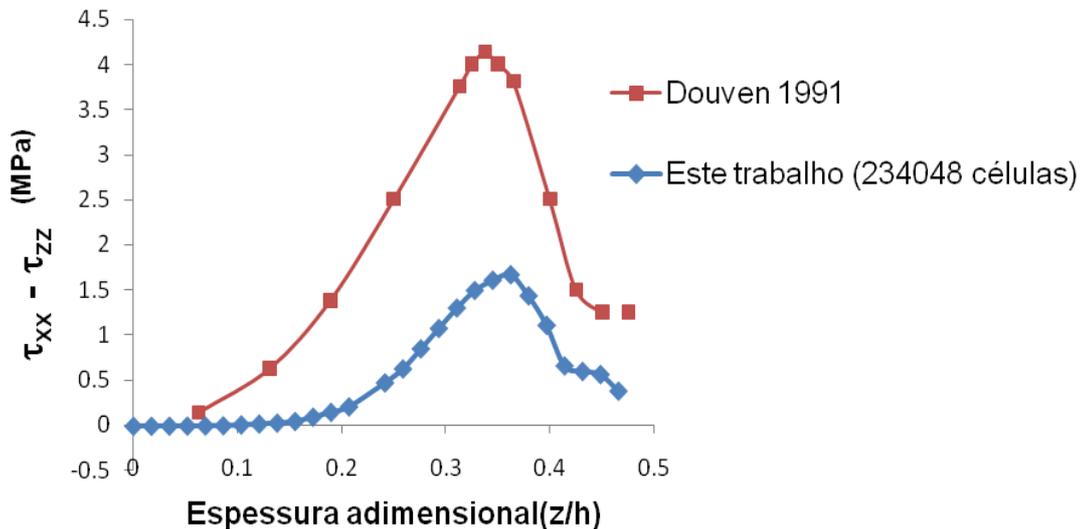


Figura 4.25 Resultados da primeira diferença de tensões normais em função da espessura adimensional obtidos neste trabalho comparado com os resultados apresentados em DOUVEN (1991) para tempo de preenchimento de 0,95 s.

Não existem resultados experimentais para validar os resultados da etapa de preenchimento. Os únicos resultados experimentais que podem ser obtidos são dados de birrefringência congelada após o resfriamento da peça, mas isto envolve a simulação completa do ciclo e isto está fora do escopo deste trabalho. DOUVEN (1991) comparou resultados numéricos com experimentais de birrefringência da peça resfriada e observou uma concordância relativamente boa entre os resultados. Entretanto os resultados numéricos apresentaram-se um pouco maiores do que os resultados experimentais próximo às paredes da cavidade.

4.6 Caso VI: resultados para o cálculo de tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas em comparação com condições convencionais

A metodologia desenvolvida neste trabalho, para condições não isotérmicas e cálculo de tensões com modelos viscoelásticos, com o método não acoplado, foi usada para estudar a influência da velocidade do fluido e da espessura da cavidade sobre as

tensões induzidas pelo escoamento durante o preenchimento da cavidade em um molde de injeção.

4.6.1 Influência da velocidade do fluido

As Figuras 4.26 e 4.27 apresentam, respectivamente, os perfis de velocidade e da taxa de cisalhamento, em $x = 0,03$, no final da etapa de preenchimento, para uma cavidade com espessura de 0,9 mm. Foram obtidos resultados para sete valores de velocidade na entrada da cavidade.

Observa-se a existência de camadas próximas às paredes da cavidade onde o polímero apresenta velocidade nula (Figura 4.26). Também se observa um acréscimo brusco da taxa de cisalhamento no final desta camada, quando as velocidades sofrem um aumento significativo (Figura 4.27). Este resultado é esperado devido ao aumento elevado da viscosidade resultante da diminuição da temperatura.

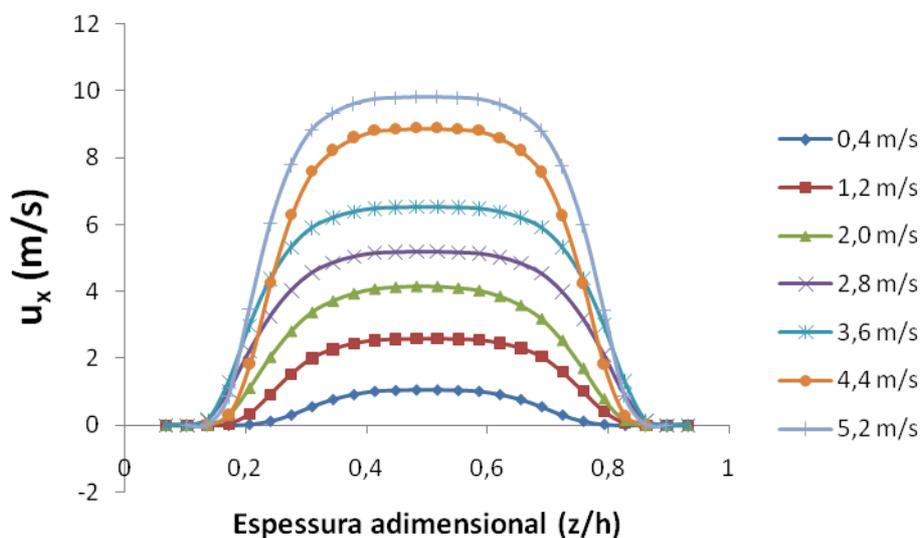


Figura 4.26 Perfis de velocidade a $x = 0,03$ m, para diversos valores de velocidade na entrada da cavidade (componente u_x), em uma cavidade de parede fina com 0,9 mm de espessura.

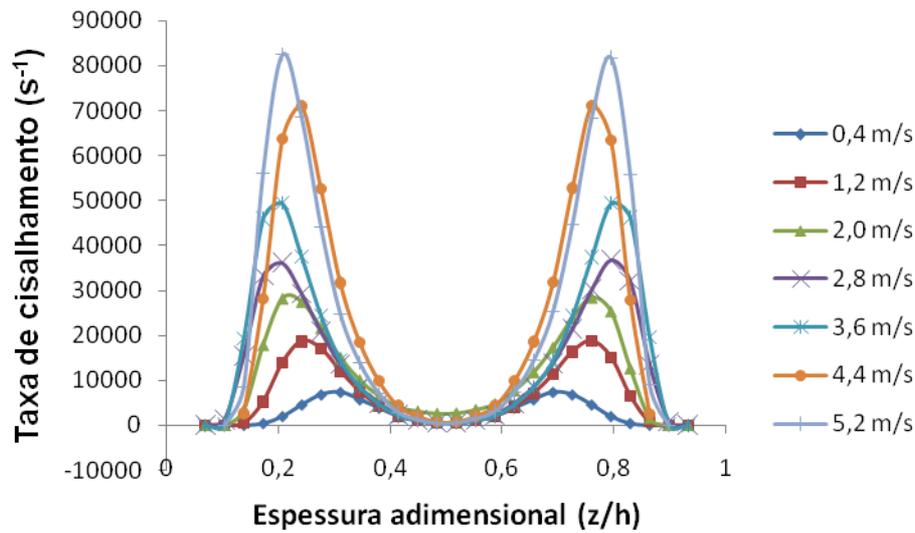


Figura 4.27 Perfis de taxa de cisalhamento ao longo da espessura em $x = 0,03$ m, para diferentes valores de velocidade na entrada da cavidade (componente u_x), em uma cavidade de parede fina com espessura de 0,9 mm.

A Figura 4.28 mostra os perfis de temperatura, ao longo da espessura, para alguns valores de velocidade do polímero na entrada da cavidade. É observado um aumento da temperatura próximo às paredes em função do aumento da velocidade para velocidades na entrada variando de 0,4 a 3,6 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, indicando que nestas condições ocorre um aumento significativo da dissipação viscosa. Entretanto, para velocidade na entrada de 5,2 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ observou-se uma diminuição da temperatura junto à parede, em relação ao observado com velocidade de 3,6 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, que pode ser atribuída ao efeito combinado da temperatura e da taxa de cisalhamento causando redução da viscosidade do material. A diminuição da viscosidade com o aumento da taxa de cisalhamento é um fenômeno comum para polímeros devido ao comportamento pseudoplástico.

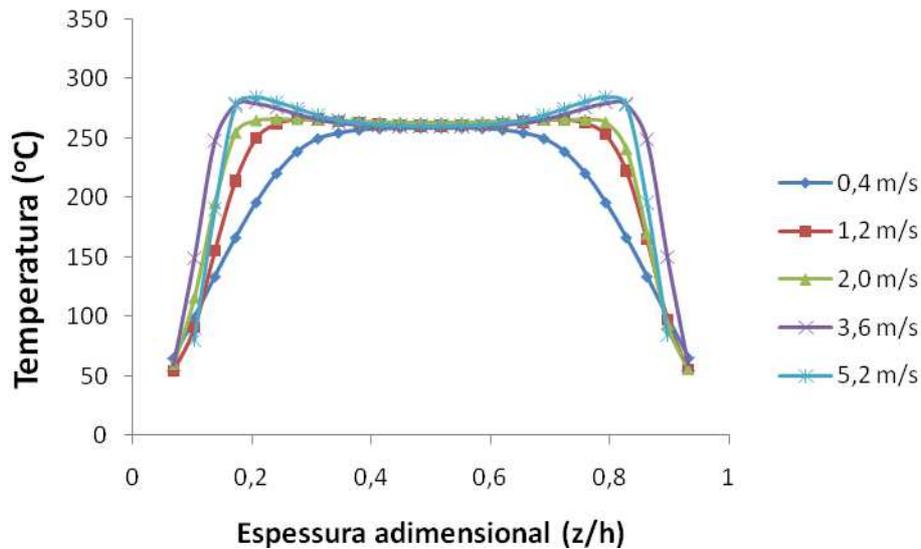


Figura 4.28 Perfis de temperatura ao longo da espessura a $x = 0.03\text{m}$, para cinco diferentes velocidades na entrada (componente u_x), em uma cavidade de paredes finas, com $0,9\text{ mm}$ de espessura.

Embora a temperatura do material possa atingir valores elevados, devido às elevadas taxas de cisalhamento, este pico de temperatura de menos que 1 segundo não causa degradação térmica significativa no material (FASSET, 1995). Em todos os casos o tempo de preenchimento esteve abaixo de 1s.

Para avaliar o efeito da velocidade do polímero sobre as tensões induzidas pelo escoamento, foram avaliados os efeitos da variação da velocidade na entrada da cavidade sobre as primeiras diferenças de tensões normais no final da etapa de preenchimento da cavidade. Estes resultados são apresentados nas Figuras 4.29 a 4.31. Observa-se que a primeira diferença de tensões normais aumenta até uma velocidade de entrada de $2,0\text{ m.s}^{-1}$ passando a diminuir para valores superiores a este. Acima de $3,6\text{ m.s}^{-1}$ a primeira diferença de tensões normais voltou a apresentar um pequeno acréscimo com a velocidade, mas seu valor pareceu estabilizar após $4,4\text{ m.s}^{-1}$. Embora estes resultados sejam específicos para o material considerado, eles indicam que não existe uma relação direta entre tensões induzidas pelo escoamento e a velocidade de injeção. Estes resultados mostram que existe a possibilidade de que as tensões induzidas pelo escoamento sejam somente moderadamente influenciadas por este parâmetro de processo, a despeito do seu elevado efeito sobre a taxa de cisalhamento. Provavelmente este resultado é consequência da diminuição da viscosidade devido ao aumento da temperatura e da taxa de cisalhamento. Além disso, espera-se que o aumento da temperatura induza uma relaxação de tensões mais rápida.

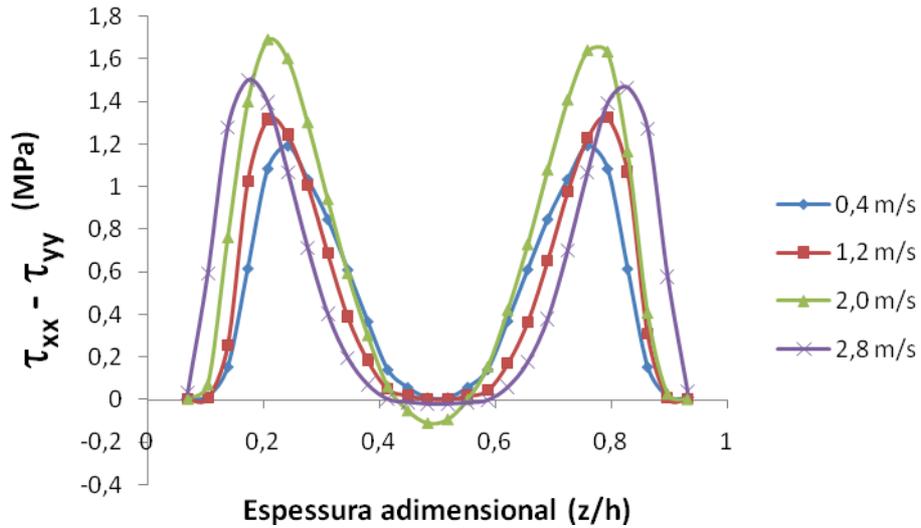


Figura 4.29 Primeira diferença de tensões normais para quatro diferentes velocidades na entrada na cavidade (componente u_x) em uma cavidade em condições de paredes finas com 0,9 mm de espessura.

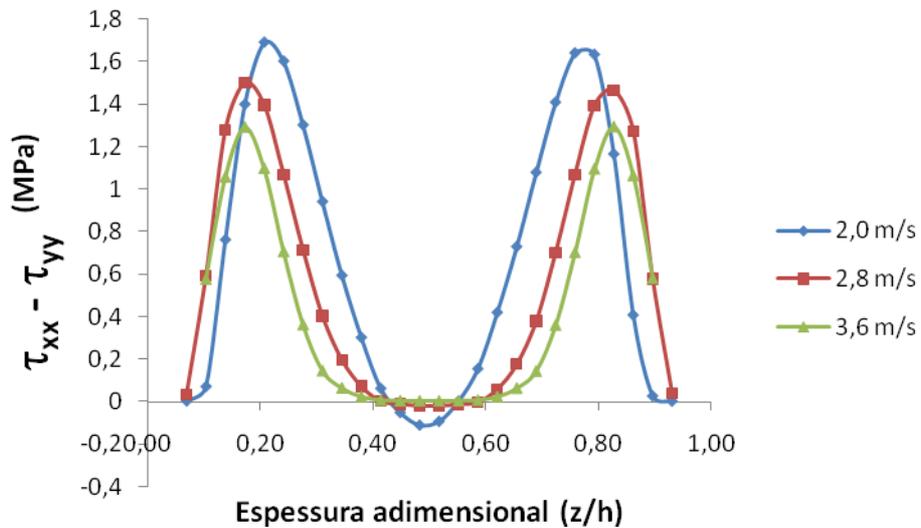


Figura 4.30 Primeira diferença de tensões normais para três diferentes velocidades na entrada na cavidade (componente u_x) em uma cavidade em condições de paredes finas com 0,9 mm de espessura.

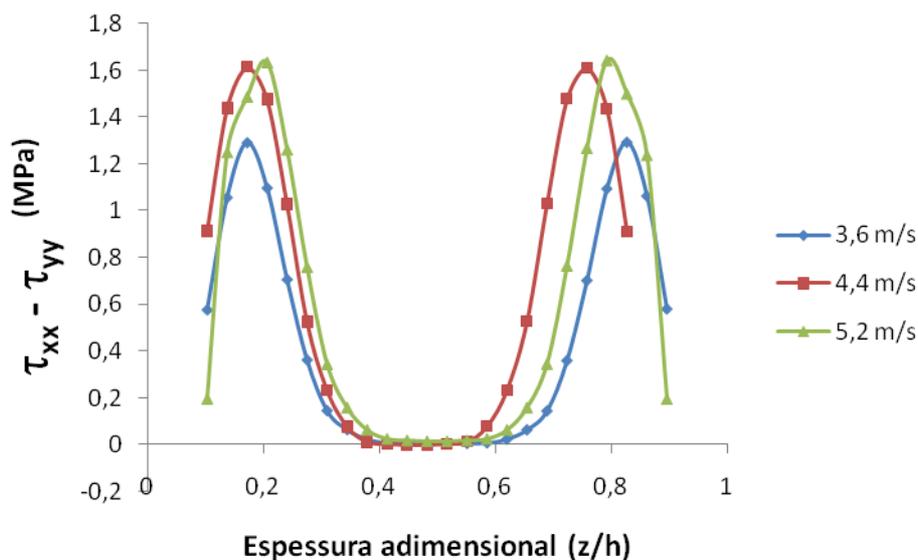


Figura 4.31 Primeira diferença de tensões normais para três diferentes velocidades na entrada na cavidade (componente u_x) em uma cavidade em condições de paredes finas com 0,9 mm de espessura.

As curvas mostradas nas Figuras 4.29 – 4.31 apresentam alguns problemas relacionados com a precisão dos resultados. Além das curvas apresentarem assimetria em relação ao centro da cavidade, a curva correspondente à velocidade de $2,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ apresentou valores negativos na região central da cavidade. Os problemas de assimetria das curvas estão relacionados, provavelmente, com as malhas utilizadas neste trabalho. Estas malhas, obtidas com o *blockMesh*, são estruturadas e hexaédricas. Estas apresentaram maior refinamento junto às paredes visando representar com maior precisão as variações resultantes da diferença significativa de temperatura e velocidade entre o fluido e a parede. Com isto resultou uma malha grosseira no centro da cavidade e mais refinada, porém com elevada razão de aspecto, junto às paredes. A maior razão de aspecto é devido ao maior refinamento na direção z em relação à direção x . Para minimizar a razão de aspecto junto às paredes, se torna necessário maior refinamento na direção x o que, por outro lado, eleva a razão de aspecto nas células centrais. Células com elevada razão de aspecto causam assimetria nos resultados. As malhas mais adequadas para obter resultados precisos seriam malhas muito refinadas, mas com razão de aspecto próximo à unidade. Provavelmente, os valores negativos em regiões em que são esperados resultados nulos poderiam ser eliminados com o maior refinamento no centro da cavidade. Entretanto, baixa razão de aspecto com suficiente refinamento ao longo da espessura causa malhas muito grandes, mesmo em geometrias bidimensionais, fazendo com que o tempo de processamento aumente muito. Por exemplo, teste com malhas contendo em torno de 130.000 células resultaram em tempos de cômputo de cerca de 45 dias para atingir o tempo de processo requerido para o preenchimento da cavidade.

4.6.2 Influência da espessura da cavidade

Para estudar a influência da espessura da cavidade sobre as tensões induzidas pelo escoamento, foram realizadas simulações para quatro diferentes espessuras de cavidade na velocidade de $0,6 \text{ m.s}^{-1}$ na entrada. Esta velocidade corresponde à taxa de fluxo usada por WANG & YOUNG (2005) no seu trabalho em que estudou o preenchimento de cavidades de paredes finas. Para comparação, simulações foram realizadas com uma condição de processo de injeção convencional: espessura de 2,0 mm com uma velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$ (DOUVEN, 1991). Foi realizada outra simulação para a geometria com 2,0 mm de espessura, com velocidade de $0,6 \text{ m.s}^{-1}$, mas os resultados se sobrepuseram aos obtidos para a mesma geometria com velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$. Os resultados obtidos (Figura 4.32) confirmam a forte influência da espessura da parede sobre as tensões induzidas pelo escoamento. Pode ser observado que, comparadas com condições de moldagem por injeção convencional, as tensões induzidas pelo escoamento em condições de paredes finas podem ser superiores em uma ordem de magnitude.

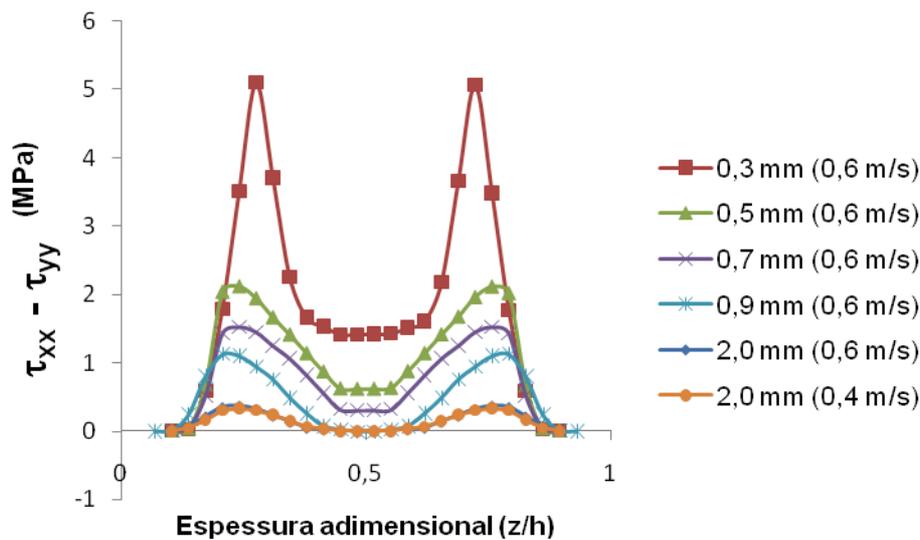


Figura 4.32 Primeira diferença de tensões normais, em $x = 0,03\text{m}$, para simulações com condições de paredes finas (placas com diferentes espessuras com velocidade $0,6 \text{ m.s}^{-1}$) em comparação com uma condição convencional (2,0 mm de espessura com velocidade de $0,4 \text{ m.s}^{-1}$).

Adicionalmente, a comparação dos resultados na Figura 4.32 com os resultados anteriores (Figuras 4.29 – 31) sugere que a influência da espessura da cavidade sobre as tensões induzidas pelo escoamento é significativamente maior do que a influência da velocidade de injeção. Os resultados obtidos com os testes nos quais foi observada a influência da velocidade do polímero sobre as primeiras diferenças de tensões normais, para espessuras de 0,9, 0,7 e 0,5 mm (Figuras 4.33, 4.34 e 4.35, respectivamente), confirmam esta hipótese quando se compara com os resultados obtidos em condições convencionais que estão apresentados nestas figuras com finalidade de comparação.

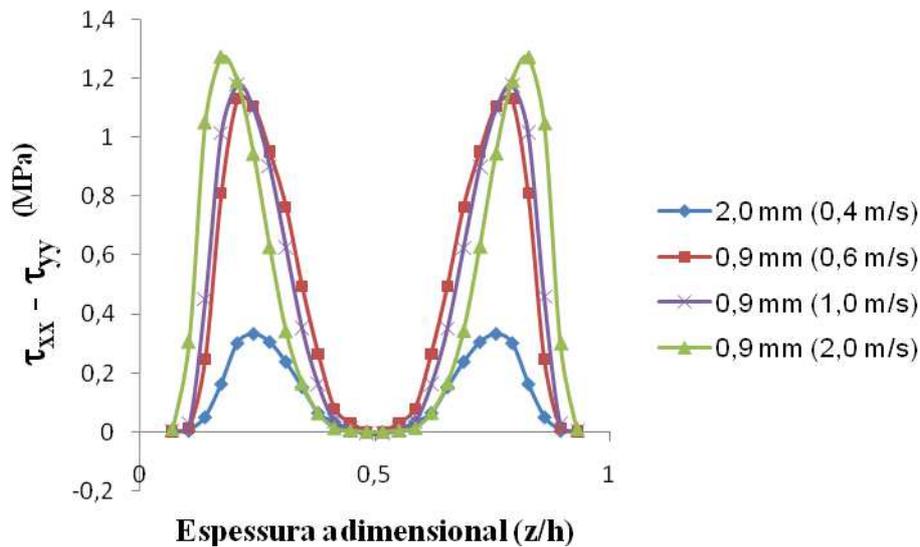


Figura 4.33 Primeira diferença de tensões normais para uma cavidade de paredes finas com espessura de 0,9 mm, com três velocidades diferentes, em comparação com um processo convencional: velocidade de 0,4 m.s⁻¹ e espessura de 2,0 mm.

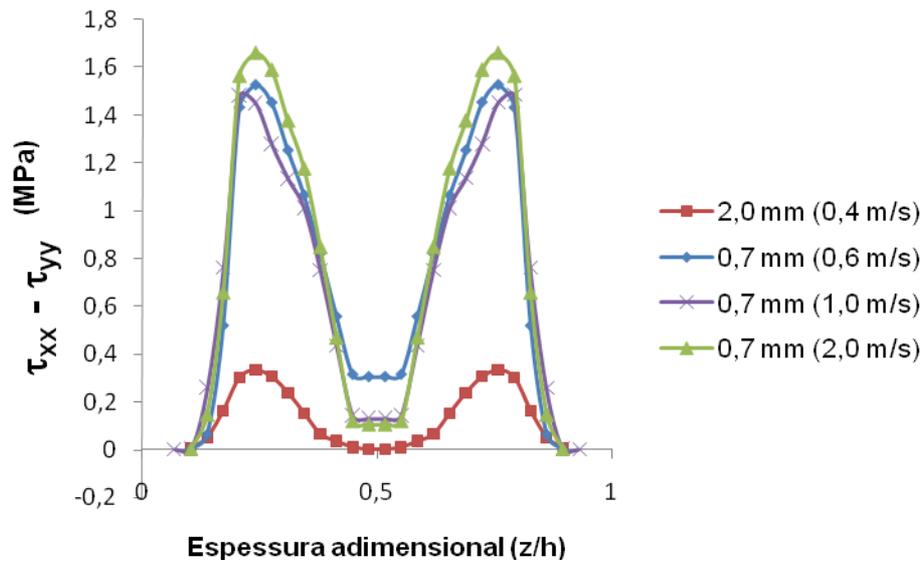


Figura 4.34 Primeira diferença de tensões normais para uma cavidade de paredes finas com espessura de 0,7 mm, com três velocidades diferentes, em comparação com um processo convencional: velocidade de $0,4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ e espessura de 2,0 mm.

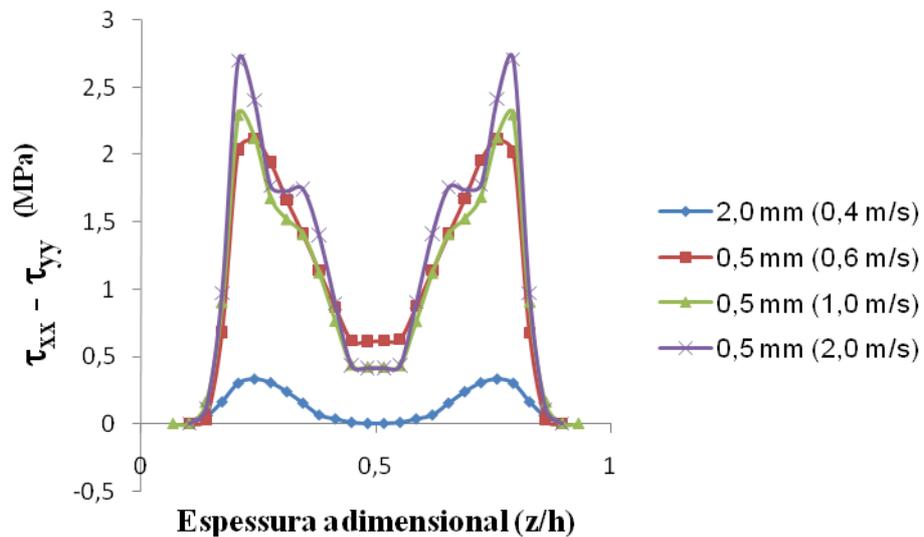


Figura 4.35 Primeira diferença de tensões normais para uma cavidade de paredes finas com espessura de 0,5 mm, com três velocidades diferentes, em comparação com um processo convencional: velocidade de $0,4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ e espessura de 2,0 mm.

Embora BAAIJENS (1991) tenha mostrado que as tensões induzidas pelo resfriamento normalmente estejam uma ordem de magnitude acima das tensões induzidas pelo escoamento, os resultados obtidos neste trabalho mostram que, em peças de paredes finas, as tensões induzidas pelo escoamento estão uma ordem de magnitude acima das encontradas em peças convencionais. Assim, os resultados deste trabalho indicam que as tensões induzidas pelo escoamento não podem ser desprezadas na análise de moldagem por paredes finas.

O software *Moldflow* assume que a taxa de cisalhamento máxima recomendada para o polímero Styron 615APR é de 40.000 s^{-1} . Como pode ser visto na Figura 4.36, no caso particular da simulação com cavidade de espessura de 0,3 mm, com velocidade de $2,0 \text{ m.s}^{-1}$, as taxas de cisalhamento apresentam valores superiores a 40.000 s^{-1} . Desta maneira, seria necessário, neste caso, verificar se estas elevadas taxas de cisalhamento podem influenciar significativamente as propriedades dos polímeros.

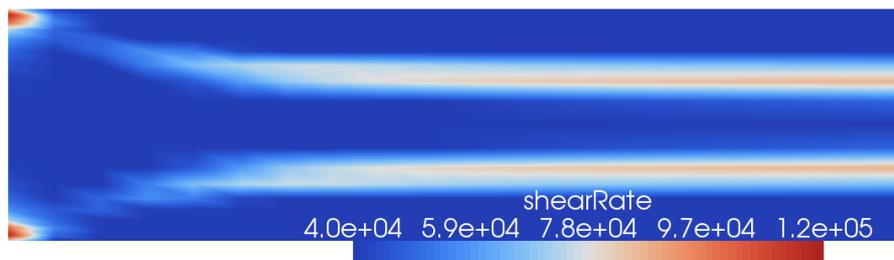


Figura 4.36 Taxas de cisalhamento no preenchimento de uma cavidade com espessura de 0,3 mm com velocidade de $2,0 \text{ m.s}^{-1}$. As áreas azuis representam taxas de cisalhamento inferiores a 40.000 s^{-1} .

4.7 Caso VII: resultados para o estudo da aplicabilidade da metodologia não isotérmica desenvolvida visando simulação do preenchimento de cavidades e comparação qualitativa com resultados experimentais

Na comparação qualitativa entre dados experimentais e resultados numéricos, o tempo de injeção a ser utilizado em cada caso foi selecionado de forma que a frente de fluxo mais se assemelhasse ao resultado experimental para certo volume de material injetado. Os resultados foram colocados lado a lado para que se possa observar melhor

as diferenças e similaridades da distribuição do material. A análise comparativa visual dos resultados da simulação pode ser feita observando-se as Figuras 4.37 a 4.41.

A comparação quantitativa não pode ser realizada devido às perdas de material pelos canais de remoção de ar ao longo do caminho de fluxo. Estes canais para remoção de ar antes do final da cavidade são necessários devido à complexidade da geometria adotada. Como foi utilizada uma malha grosseira neste trabalho, por necessidade de tempos de simulação viáveis, estes canais ficaram muito grandes e permitiram passagem de material. Estes problemas de perda podem, em princípio, ser resolvidos pelo refinamento da malha a um nível que permita trabalhar com dutos de saída de ar suficientemente pequenos para que não haja perda de material.

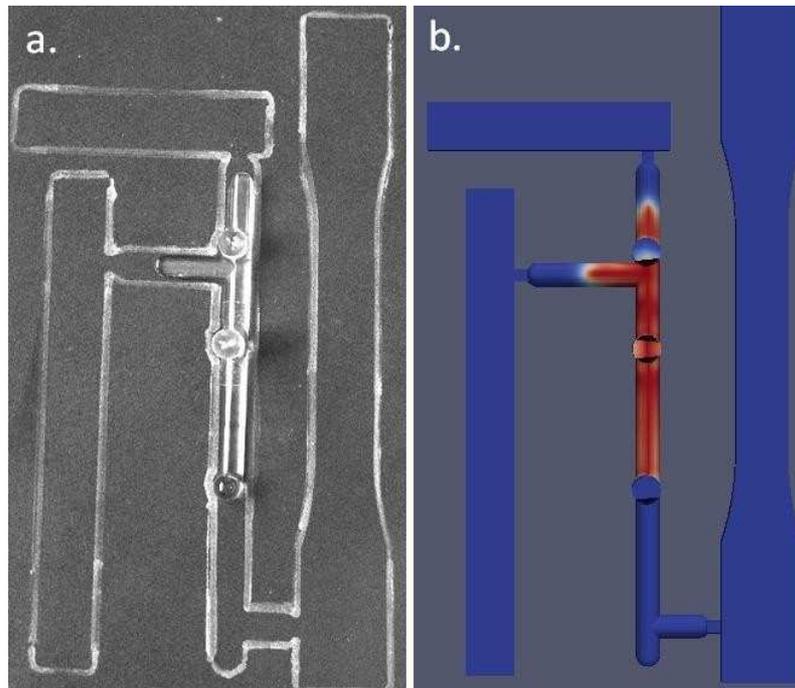


Figura 4.37 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 5 cm^3 . (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,04 s.

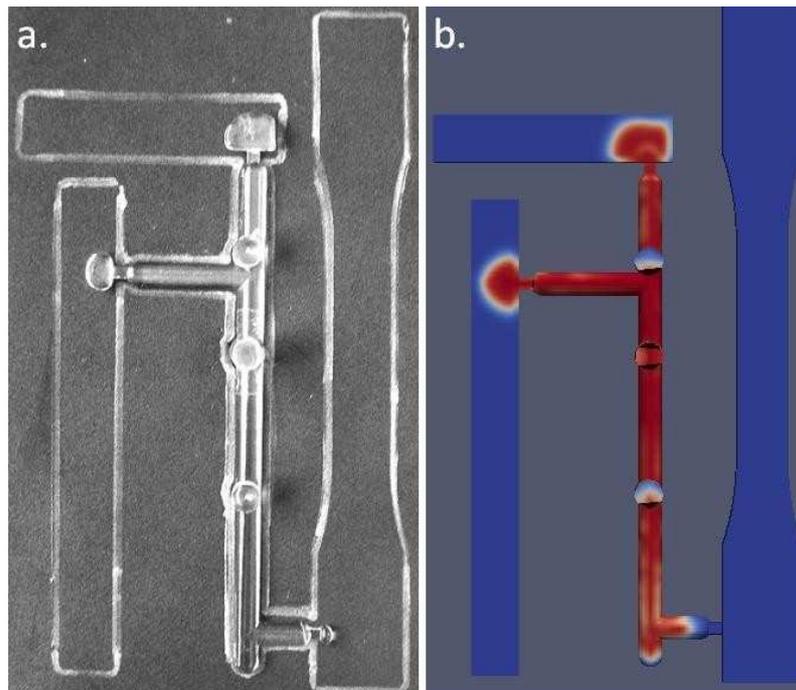


Figura 4.38 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 7 cm^3 . (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de $0,1 \text{ s}$.

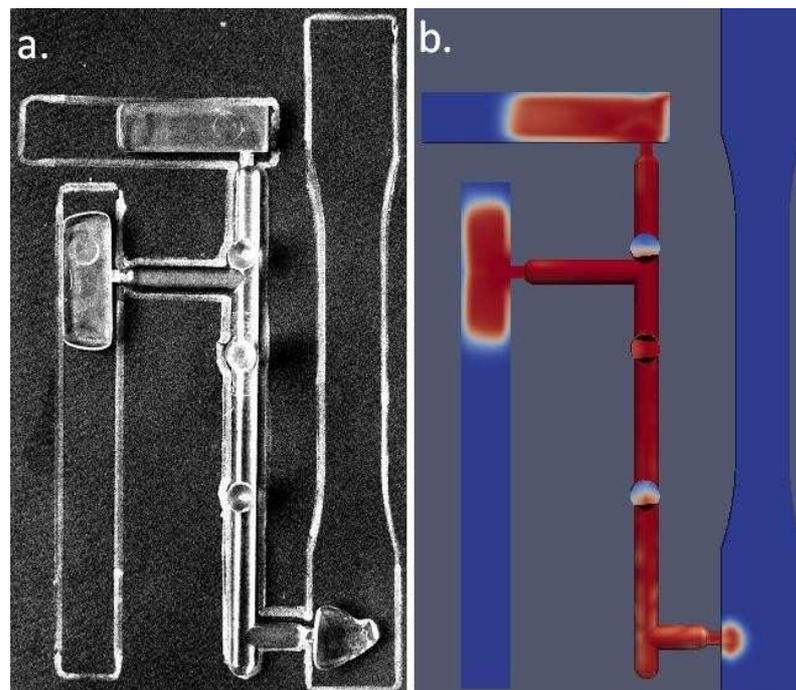


Figura 4.39 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 10 cm^3 . (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de $0,16 \text{ s}$.

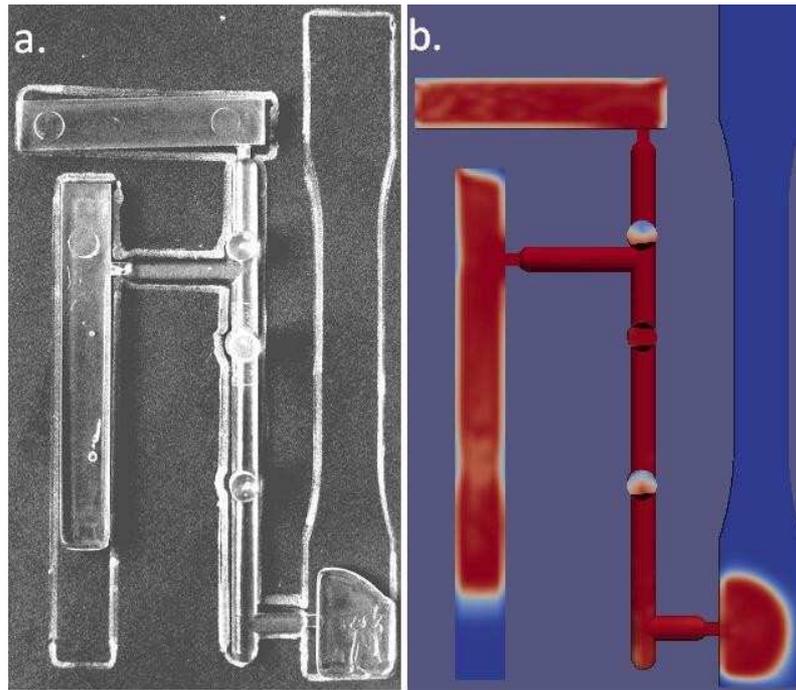


Figura 4.40 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 13 cm^3 . (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,35 s.

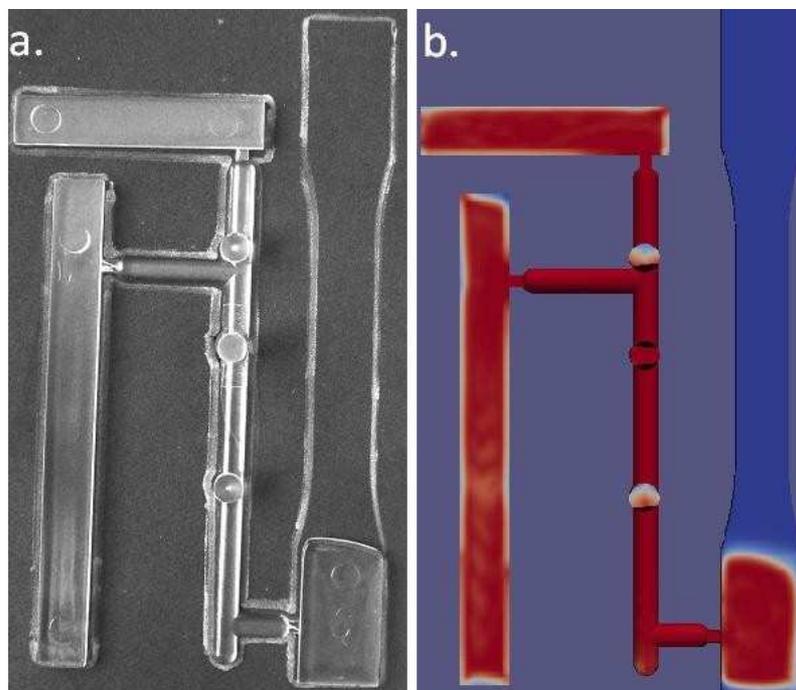


Figura 4.41 Comparação entre: (a) Peça Injetada usando-se um volume de material dosado de 16 cm^3 . (b) Resultado da simulação no tempo de injeção de 0,48 s.

Mesmo com o problema de perda de material durante o preenchimento, foi possível observar que os resultados da simulação mostraram que o *solver* tem potencial para acompanhamento do deslocamento da frente de fluxo durante o preenchimento da cavidade. Simulação do preenchimento do molde possibilita analisar se as diversas cavidades são preenchidas simultaneamente bem como se a frente de fluxo atinge todas as extremidades da cavidade simultaneamente. O preenchimento não uniforme das cavidades pode causar compactação excessiva em determinadas regiões com consequente possibilidade de surgimentos de problemas de empenamento nas peças. Outra vantagem de realizar a simulação do deslocamento das frentes de fluxo é observar pontos em que o ar fica retido nas cavidades onde deverão ser colocados pontos de saída de ar. Outra possibilidade é observar a ocorrência de linhas de solda conforme mostrado na Figura 4.9.

Capítulo 5

Conclusões

Foi verificada a possibilidade de utilização do *solver interFoam*, do pacote *OpenFOAM*, na simulação tridimensional do preenchimento de cavidades em processos isotérmicos de fluidos incompressíveis. As simulações apresentaram resultados satisfatórios com relação ao deslocamento da frente de fluxo. As predições obtidas para a variação da pressão de preenchimento da cavidade estiveram de acordo com os resultados da literatura. Uma limitação encontrada foram os tempos de cômputo muito elevados requeridos para a solução do problema em simulações tridimensionais, consequência do elevado número de volumes de controle requeridos para manter a razão de aspecto e o refinamento das malhas em níveis aceitáveis.

Foi feita uma análise preliminar da importância das tensões induzidas pelo escoamento no preenchimento de cavidades de paredes finas, considerando condições isotérmicas. Foi apresentada uma metodologia baseada no *solver viscoelasticInterFoam* para a análise do preenchimento de cavidades em processos isotérmicos. A aplicação desta metodologia na análise de tensões induzidas pelo escoamento obtidas com o modelo simplificado de Phan-Thien-Tanner indicou que estas tensões não podem ser desprezadas em processos de moldagem por injeção de paredes finas, contrariamente ao procedimento usual encontrado na literatura. Esta análise indicou que tais tensões são relevantes em processos de injeção de paredes finas, justificando a importância de desenvolver uma metodologia para confirmar o resultado em condição não isotérmica, que corresponde a descrição mais realística do processo.

Foi desenvolvido um *solver* não-isotérmico para o cálculo de tensões induzidas por escoamento. Este *solver* consistiu na inclusão da equação do balanço de energia diferencial ao *solver interFoam* para obtenção de perfis de velocidade e pressão, juntamente com um procedimento de cálculo desacoplado das tensões finais com base em equações constitutivas viscoelásticas. O referido procedimento para cálculo das tensões foi baseado na implementação dos modelos constitutivos viscoelásticos utilizada nos *solvers viscoelasticInterFoam* e *viscoelasticFluidFoam*. Os resultados obtidos utilizando o modelo incompressível de Leonov, em simulação com geometrias tridimensionais, mostraram concordância qualitativa com resultados existentes na literatura para processos de injeção convencional.

Observou-se que esta metodologia não acoplada tem potencial para o desenvolvimento de uma solução para o problema do preenchimento de cavidades de moldes de injeção de termoplásticos.

A metodologia implementada para aplicação deste *solver* foi utilizada na análise de tensões induzidas pelo escoamento em geometrias bidimensionais (placas planas retangulares), de paredes finas, utilizando o modelo viscoelástico não linear incompressível de Leonov. Os resultados indicaram que as tensões são influenciadas fortemente pela espessura da cavidade. Observou-se que a diminuição da espessura causa um aumento significativo das tensões induzidas pelo escoamento. Por outro lado, observou-se que a velocidade de escoamento causou pequena variação das tensões induzidas pelo escoamento e não foi considerada uma variável importante para a geração de tensões induzidas pelo escoamento. Além disso, embora tenha sido mostrado, na literatura, que as tensões induzidas pelo resfriamento apresentam valores superiores às tensões induzidas pelo escoamento, em pelo menos uma ordem de magnitude, este trabalho mostrou que as tensões induzidas pelo escoamento não podem ser desconsideradas na produção de peças moldadas por injeção pelo processo de paredes finas.

Referências bibliográficas

ARAÚJO, B. J.; TEIXEIRA, J.C.F.; CUNHA, A.M.; GROTH, C.P.T.. Parallel three-dimensional simulation of the injection molding process. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 59, p.801 – 815, 2008.

BAAIJENS, F.P.T. Calculation of residual stresses in injection molded products. *Rheologica Acta*, v. 30, p. 284 – 299, 1991.

BAAIJENS, F.P.T.; DOUVEN, L.F.A., Calculation of flow induced residual stresses in injection molded products. J.F. Dijkstra and F.T.M. Nieuwstadt (eds.), *Integration of Theory and Applications in Applied Mechanics*, 73 – 90. Kluwer Academic Publishers, 1990.

BIRD, R.B.; ARMSTRONG, R.C.; HASSAGER, O. *Dynamics of Polymeric Fluids*, 2a ed, John Wiley & Sons, New York, 1987.

BRANDRUP, J.; IMMERGUT, E.H.; GRULKE, E.A. *Polymer Handbook*. 4a. ed, 1998.

BRESS, T. J.; DOWLING, D. R. Particle image velocimetry in molten plastic. *Polymer Engineering and Science*, v.51, p. 730 - 745, 2011.

BRETAS, R. E. S.; D'AVILA, Marcos A. *Reologia de Polímeros Fundidos*. 2a ed, Editora da UFSCar, São Carlos, 2005.

BUSHKO, W.C.; STOKES, V. K. Solidification of thermoviscoelastic melts – part I – formulation of model problem. *Polymer Engineering and Science*, v. 35, p. 351-364, 1995.

BUSHKO, W.C.; STOKES, V.K. Solidification of thermoviscoelastic melts – part II – effects of process conditions on shrinkage and residual stresses. *Polymer Engineering and Science*. V.35, p.365-383, 1995.

CAO, W.; SHEN, C.; ZHANG, C.; WANG, L. Computing flow-induced stresses of injection molding based on the Phan-Thien-Tanner model. *Archive of Applied Mechanics*, v. 78, p. 363 – 377, 2008.

CARDOZO, D. Three models of the 3D filling simulation for injection molding: a brief review. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, v. 27, p. 1963 – 1974, 2008.

CAVALHEIRO, A. Z. Influência dos parâmetros de moldagem na estrutura e propriedades de peças de paredes espessas e finas de polipropileno isotático injetadas em moldes-protótipo fabricados por vazamento de resina epóxi. Tese de doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2007.

CHANG, R.Y.; CHIOU, S.Y. A unified K-BKZ model for residual stress analysis of injection molded three-dimensional thin shapes. *Polym. Eng. Sci.*, v.35, p. 1733-1747, 1995.

CHANG, R.; YANG, W. Numerical simulation of mold filling in injection molding using a three-dimensional finite volume approach. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 37, p. 125 – 148, 2001.

CHEN, C.-S.; CHEN, T.-J.; CHIEN, R. -D.; CHEN, S.-C. Investigation on the weldline strength of thin-wall injection molded ABS parts. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 34, p. 448 – 455, 2007.

CHEN, X.; LAM, Y.C.; LI, D.Q. Analysis of thermal residual stress in plastic injection molding. *Journal of Materials Processing Technology*, v.101, p.275-280, 2000.

COELHO, P.M.; PINHO, F.T.; OLIVEIRA, P.J. Fully developed forced convection of the Phan – Thien – Tanner fluid in ducts with a constant wall temperature. *Internacional Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, p. 1413 – 1423, 2002.

DOUVEN, L.F.A. Towards the computation of properties of injection moulded products: Flow and thermally induced stresses in amorphous thermoplastics. PhD thesis, Eindhoven Technical University, The Netherlands, 1991.

DOUVEN, L.F.A.; BAAIJENS, F.P.T.; MEIJER, H.E.H. The computation of properties of injection – moulded products. *Progress in Polymer Science*, v. 20, p. 403 – 457, 1995.

FASSETT, J. Thin wall molding: differences in processing over standard injection molding. *SPE-ANTEC, Conference Proceedings*, 1, p. 430, 1995.

FAVERO, J.L.; CARDOZO, N. S. M.; SECCHI, A. R.; JASAK, H. Simulação do inchamento de extrudado e do experimento rod-climbing usando o software OpenFOAM. *Anais do 10º Congresso Brasileiro de Polímeros – Foz do Iguaçu, PR – Outubro/2009*

FAVERO, J.L.; SECCHI, A.R.; CARDOZO, N.S.M.; JASAK, H. Viscoelastic flow analysis using the software OpenFOAM and differential constitutive equations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 165, 1625–1636, 2010.

- FLAMAN, A.A.M. Buildup and relaxation of molecular orientation in injection molding. Part I: formulation. *Polymer Engineering and Science*, v. 33, p. 193 – 201, 1993.
- GHONEIN, H.; HIEBER, C.A. Incorporation of density relaxation in the analysis of residual stresses in molded parts. *Polymer Engineering and Science*, v.37, p.219-227, 1997.
- HASHEMABADI, S.H.; MIRNAJAFIZADEH, S.M. Analysis of viscoelastic fluid flow with temperature dependent properties in plane Couette flow and thin annuli. *Applied Mathematical Modelling*, v. 34 p. 919–930, 2010
- HASTENBERG, C. H. V.; WILDERVANCK, P. C.; LEENEN, A. J. H.; SCHENNINK, G.G.J. The measurement of thermal stress distributions along the flow path in injection-molded flat plates. *Polymer Engineering and Science*, v.32, p. 506-515, 1992.
- HEMSLEY, A.H.; ROBINSON, A.M. A simple method for the assessment of molecular orientation in transparent plastics mouldings. *Polymer Testing*, 11, p. 373-385, 1992.
- HETU, J.-F.; GAO, D.M.; GARCIA-REJON, A.; SALLOUM, G. 3D finite element method for the simulation of the filling stage in injection molding. *Polymer Engineering and Science*, v. 38, p. 223 – 236, 1998.
- HIEBER, C.A.; SHEN, S.F. A finite-element/finite-difference simulation of the injection-molding filling process. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 7, p. 1 – 32, 1980.
- HUANG, M.C.; TAI, C.C. The effective factors in the warpage problem of an injection-molded part with a thin shell feature. *Journal of Materials Processing Technology* 110, p. 1–9, 2001.
- ISAYEV, A.I.; CROUTHAMEL, D. L. Residual stress development in the injection molding of polymers. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 22, p.177, 1984.
- ISSA, R.I. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting, *Journal of Computational Physics*, v. 62., p. 40-65, 1986.
- JANSEN, K.M.B. Residual stress in quenched and injection moulded products. *International Polymer Processing IX*, p. 82-89, 1994.
- JANSEN, K.M.B.; TITOMANLIO, G. Effect of pressure history on shrinkage and residual stresses – injection molding with constrained shrinkage. *Polymer Engineering and Science*, v.36, p. 2029-2040, 1996.
- JANSEN, K.M.B.; ORIJ, J.J.W.; MEIJER, C.Z.; VAN DIJK. Comparison of residual stress predictions and measurements using excimer laser layer removal. *Polymer Engineering and Science*, v.39, p. 2030-2041, 1999.

- JASAK, H. Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. Tese de doutorado, Imperial College of Science, Technology & Medicine, University of London, Londres, Inglaterra, 1996.
- KABANEMI, K.K.; CROCHET, M.J. Thermoviscoelastic calculation of residual stresses and residual shapes of injection molded parts. *International Polymer Processing*, v.7, p.60-70, 1992.
- KABANEMI, K.K.; VAILLANCOURT, H.; WANG, H.; SALLOUM, G. Residual stresses, shrinkage, and warpage of complex injection molded products: numerical simulation and experimental validation. *Polymer Engineering and Science*, 38, p. 21, 1998.
- KAMAL, M.R.; LAI-FOOK, R.A.; HERNANDEZ-AGUILAR, J.R. Residual thermal stresses in injection molding of thermoplastics: a theoretical and experimental study. *Polymer Engineering and Science*, v. 42, p. 1098 – 1114, 2002.
- KENNEDY, P. Flow analysis of injection molds. Hanser Publishers, Munique, 1995.
- KIM, K.; ISAYEV, A.I.; KWON, K; VAN SWEDEN, C. Modeling and experimental study of birefringence in injection molding of semicrystalline polymers. *Polymer*, v. 46, p.4183–4203, 2005.
- KIM, C.H., KIM, S., OH, H. E YOUN, J.R. Measurement of residual stresses in injection molded polymeric part by applying layer-removal and incremental hole-drilling methods. *Fibers and Polymers*, v. 8, p. 443-446, 2007.
- KIM, K.K.; LEE, S.W.; YOUN, J.R. Measurement of residual stresses in injection molded short fiber composites considering anisotropy and modulus variation. *Korea-Australia Rheology Journal*, v.14, p.107-114, 2002.
- KIM, C.H.; YOUN, J.R. Determination of residual stresses in injection moulded flat plate: simulation and experiments *Polymer Testing*, v. 26, 2007.
- LARSON, R. G. Constitutive equations for polymer melts and solutions. Butterworth Publishers, Boston, 1988.
- LEE, Y.B.; KWON, T.H. Modeling and numerical simulation of residual stresses and birefringence in injection molded center-gated disks. *Journal of Materials Processing Technology* 111, p.214-218, 2001.
- LIAO, S.J.; CHANG, D.Y.; CHEN, H.J.; TSOU, L.S.; HO, J.R.; YAU, H.T.; HSIEH, W.H.; WANG, J.T.; SU, Y.C. Optimal process conditions of shrinkage *Polym. Eng. Sci.*, 44, p. 917, 2004.
- MACOSKO, C. W. RHEOLOGY Principles, Measurements and Applications. Wiley-VCH, Inc., New York, 1994.
- MALISKA, C.R.; VASCONCELLOS, J.F.V. An unstructured finite volume procedure for simulating flows with moving fronts. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 182, p. 401 – 420, 2000.

- MAXWELL, A.S.; TURNBULL, A. Chemical probe technique for assessing the susceptibility of polymeric mouldings to environment stress cracking. *Polymer Testing*, v. 22, p. 259–265, 2003.
- MILLER, T.A. Study of flow marks during thin-wall injection moulding. *SPE-ANTEC, Conference Proceedings*, p. 4267 - 4270, 1995.
- MILLER, K.; RAMANI, K. Process-induced residual stresses in compression molded UHMWPE. *Polymer and Engineering Science*, 39, p.110, 1999.
- MORRISON, F. A. *Understanding Rheology*. Oxford University Press, Oxford, 2001.
- NEVES, N.M.; POUZADA, A.S.; VOERMAN, J.H.D.; POWELL, P.C. The use of birefringence for predicting the stiffness of injection molded polycarbonate discs. *Polymer Engineering and Science*, v.38, p.1770-1777, 1998.
- NGUYEN-CHUNG, T. Flow analysis of the weld line formation during injection mold filling of thermoplastics. *Rheological Acta*, v. 43, p. 240–245, 2004.
- OpenFOAM User Guide (<http://sourceforge.net/projects/foam/files/>). Acesso em 9 de julho de 2008.
- OLIVEIRA, M.J. *Microscopia Ótica em Técnicas de Caracterização de Polímeros*, editor Sebastião V. Canevarolo Jr.. Editora Artliber Ltda, São Paulo, 2004.
- OLIVEIRA, P.J.;PINHO, F.T. Analytical solution for fully developed channel and pipe flow of Phan – Thien – Tanner fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, v.387, p. 271 – 280, 1999.
- PARK, K., KIM, B.; YAO, D. Numerical Simulation for Injection Molding with a Rapidly Heated Mold, Part I: Flow Simulation for Thin Wall Parts. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 45, p. 897 - 902, 2006 .
- PATERSON, M.W.A.; WHITE, J. R. Layer removal analysis of residual stress. *Journal of Materials Science*, v. 24, p.3521-3528, 1989.
- PATANKAR, S.V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- PETERS, G. W.M.; BAAIJENS, F. P.T. Modelling of non-isothermal viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 68, p. 205 – 224, 1997.
- PETERS, G. W.M.; SCHOONEN, J. F.M.; BAAIJENS, F. P.T.; MEIJER, H. E.H. On the performance of enhanced constitutive models for polymer melts in a cross-slot flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 82, p. 387 – 427, 1999.
- PHAN-THIEN, N. A Nonlinear Network Viscoelastic Model. *Journal of Rheology*, v. 22, p. 259 – 283, 1978.
- PHAN-THIEN, N.; TANNER, R.I. A new constitutive equation derived from network theory, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 2, p. 353 – 365, 1977.

- PÖTSCH, G; MICHAELI, W. Injection Molding – An introduction. Hanser Publishers, New York, 1995.
- RAJAGOPALAN, D. Computational analysis of techniques to determine extensional viscosity from entrance flows. *Rheologica Acta*, v. 39, p. 138 – 151, 2000.
- REZAYAT, M.; STAFFORD, R. O. A thermoviscoelastic model for residual stress in injection molded thermoplastics. *Polymer Engineering and Science*, v. 31, p. 393 – 398, 1991.
- ROOZENDAAL, R.A.J.G. Transient viscoelastic flow around a cylinder. Master's Thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Holanda, 1994.
- ROSATO, D.V.; ROSATO, D.V. Injection Molding Handbook. New York: Chapman & Hall, 1995.
- RUSSEL, D.P.; BEAUMONT, P.W.R. Structure and properties of injection-moulded nylon-6. *Journal of Materials Science*, v.15, p.208-215, 1980.
- SECCHI, A.R. Simulação dinâmica de processos químicos pelo método da relaxação em forma de onda em computadores paralelos. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1992.
- SHEN, C.; LI, H. Numerical simulation for effects of injection mold cooling on warpage and residual stresses. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, v. 42, p. 971-982, 2003.
- SHEN, Y.K.; YEH, P.H.; WU, J.S. Numerical simulation for thin wall injection molding of fiber-reinforced thermoplastics. *International Communications in heat and mass transfer*, vol. 28, p. 1035 – 1042, 2001.
- SCHOTT, N.R. Processing strategies for thin wall injection molding. *ANTEC*, p. 367 – 369, 1998.
- SHYU, G.D.; ISAYEV, A. I. Residual stresses and birefringence in injection molded disks. *ANTEC*, v. II, p.2911 – 2916, 1995.
- SHYU, G.D.; ISAYEV, A. I.; LEE, H. Numerical simulation of flow-induced birefringence in injection molded disk. *Korea-Australia Rheology Journal*, vol. 15, n. 4, p. 159 – 166, 2003
- SPINA, R. Injection moulding of automotive components: comparison between hot runner systems for a case study. *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 155 – 156, p. 1497 – 1504, 2004.
- TITOMANLIO, G.; JANSEN, K.M.B. In-mold shrinkage and stress prediction in injection molding. *Polymer Engineering and Science*, v.36, p. 2041-2049, 1996.
- TREUTING, R.G.; READ Jr., W.T. A mechanical determination of biaxial residual stress in sheet materials. *Journal of Applied Physics*, v.22, p.130-134, 1951.

- TURNBULL, A.; MAXWELL, A.S.; PILLAI, S. Residual stress in polymers – evaluation of measuring techniques. *Journal of Materials Science*, v. 34, p. 451-459, 1999.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, 2^a ed, Pearson Education Limited, Essex, 2007.
- WANG, T.; YOUNG, W. Study on residual stresses of thin-walled injection molding. *European Polymer Journal*, v. 41, p. 2511 – 2517, 2005.
- WEISS, K. Thinwall: reducing the weight, size and cost of portable electronics by reducing the wall thickness of enclosures. *Materials and Design*, vol. 21, p. 51 – 55, 2000.
- WENDER, Kai (Diretor da Arburg Ltda. Brasil). – comunicação pessoal em 2011.
- WILLIAMS, M.L.; LANDEL, R.F.; FERRY, J.D. The temperature dependence of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids. *Journal of the American Chemical Society*, v. 77, n. 14, p. 3701-3707, 1955.
- WIMBERGER-FRIEDL, R. *Progress in Polymer Science*, v.20, p. 369-401, 1995.
- YAN, B.; ZHOU, H.; LI, D. Numerical simulation of the filling stage for plastic injection moulding based on the Petrov – Galerkin methods. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Part B: Journal of Engineering manufacture*, v. 221, p. 1573 – 1577, 2007.
- YANG, W.; PENG, A.; LIU, L.; HSU, D.C.; CHANG, R. Integrated numerical simulation of injection molding using true 3D approach. (<http://www.moldex3d.com/download/papers/0402.pdf> em 03.08.2008)
- YOUNG, W. Residual stress induced by solidification of thermoviscoelastic melts in the postfilling stage. *Journal of Materials Processing Technology*, v. 145, p.317-324, 2004.
- ZHANG, X.; CHENG, X.; STELSON, K.A.; BHATTACHARYA, M.; SEN, A.; VOLLER, V.R. Approximate model of thermal residual stress in an injection molded part. *Journal of Thermal Stresses*, v. 25, p.523-538, 2002.
- ZHOU, H.; LI, D.; Residual stress analysis of the post – filling stage in injection moulding. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, v.25, p. 700 – 704, 2005.
- ZHOU H.; LI, D. Numerical simulation and experimental study of warpage of injection – molded parts. *Polymer – Plastics Technology and Engineering*, v. 44, p. 603 – 617, 2005.
- ZHOU, J.; TURNG, L. Three-dimensional numerical simulation of injection mold filling with a finite – volume method and parallel computing. *Advances in Polymer Technology*, v. 25, p. 247 – 258, 2006.

ZHOU H.; XI, G.; LIU, F. Residual stress simulation of injection molding. *Journal of Materials Engineering and Performance*, v. 17, p. 422 – 427, 2008.

ZHOU, H.; YAN, B.;ZHANG, Y. 3D filling simulation of injection molding based on the PG method. *Journal of Materials Processing Technology*, 204, p. 475 – 480, 2008.

ZOETELIEF, W.F.; DOUVEN, L.F.A.; INGEN-HOUSZ, A.J. Residual thermal stresses in injection molded products. *Polymer Engineering and Science*, v. 36, p. 1886 – 1896, 1996.

Apêndice

Alterações realizadas no código do ***viscoelasticInterFoamFoam*** para obtenção do ***viscoelasticThermalFoam***

As principais alterações realizadas no código do ***viscoelasticInterFoam*** para obtenção do ***viscoelasticThermalFoam*** foram as seguintes:

1. O arquivo ***viscoelasticInterFoam.C*** foi modificado pela adição da linha de comando `# include "TEqn.H"`, onde **TEqn.H** é o arquivo que possui o código para a discretização da equação de conservação da energia. Este código é apresentado a seguir (índices 1 and 2 referem-se às fases 1 e 2):

```
mU = twoPhaseProperties.mu(); // mU = viscosidade  
dT == gamma * dT1 + (scalar(1) - gamma) * dT2; // dT = difusividade térmica  
cP == gamma * cP1 + (scalar(1) - gamma) * cP2; // cP = capacidade térmica  
específica  
  
// gamma = fração de fase  
  
fvScalarMatrix TEqn  
(fvm::ddt(T) + fvm::div(phi,T) == fvm::laplacian(dT,T));
```

```

// phi = fluxo de velocidade volumétrica definido nas faces de cada célula
// T = temperatura

shearRate =
sqrt(floatScalar(0.5)) * mag(twoSymm(fvc::grad(U)));
solve( TEqn == (mU/(rho * cP)) * pow(shearRate,2) );
// rho = densidade

```

2. Para obter os campos de velocidade e de pressão sem considerar o comportamento elástico polimérico (abordagem não acoplada), o objeto *twoPhaseProperties* da classe *twoPhaseMixture*, foi copiado do **interFoam**, no arquivo **createFields.H**, e o código da equação da velocidade (*UEqn*) foi obtido do código do **interFoam**, que considera somente o comportamento Newtoniano Generalizado.

3. O modelo Cross-WLF foi implementado através do seguinte código:

```

tmp<volScalarField> CrossWLF::calcNu() const
{
    volScalarField nu0 = D1_ * (exp (((-A1_) * (T_ - D2_)) / (A2_ + T_ -
D2_))); //WLF equation
// A1_, A2_, D1_, e D2_ são parâmetros WLF que dependem do material
    {
        return
        (nu0/rho_)/(scalar(1)+pow((nu0/taoStar_)* strainRate(),(scalar(1)-n_)));
// nu0, taoStar, e n são parâmetros da equação de Cross
    }
}

```

4. Para o cálculo explícito dos campos de tensão viscoelástica, o modelo de Leonov, implementado no *solver viscoelasticFluidFoam*, foi introduzido com a correção dos parâmetros viscoelásticos, η e λ , com a equação WLF:

```

//Cálculo de aT para a equação WLF:
volScalarField aT = (exp (((-A1_) * (T_ - D2_)) / (A2_ + T_ - D2_)));
volScalarField etaP = alpha1f * (etaP1_ * aT) + (scalar(1) - alpha1f) * etaP2_;
volScalarField lambda = alpha1f * (lambda1_ * aT) + (scalar(1) - alpha1f) *
lambda2_;
// etaP e lambda são os parâmetros viscoelásticos  $\eta$  e  $\lambda$ 
// alpha1f é a fração de fase usada no modelo de Leonov

```

Anexos

Serão apresentadas, neste anexo, as folhas de dados das diversas matérias-primas utilizadas na realização deste trabalho.

BASF Polystyrol® 165 H Polystyrene (Europe)

Categories: [Polymer](#); [Thermoplastic](#); [Polystyrene \(PS\)](#); [Polystyrene, Molded, Unreinforced](#)

Material Notes: High molecular grades, often blended with high-impact extrusion grades (e.g. for dairy products).

Data was collected by ISO methods and provided by BASF.

Vendors: No vendors are listed for this material. Please [click here](#) if you are a supplier and would like information on how to add your listing to this material.

Physical Properties	Metric	English	Comments
Density	1.05 g/cc	0.0379 lb/in ³	
Water Absorption	0.100 %	0.100 %	
Moisture Absorption at Equilibrium	0.100 %	0.100 %	
Linear Mold Shrinkage, Flow	0.00450 cm/cm	0.00450 in/in	
Melt Flow	2.50 g/10 min @Load 5.00 kg, Temperature 200 °C	2.50 g/10 min @Load 11.0 lb, Temperature 392 °F	

Mechanical Properties	Metric	English	Comments
Tensile Strength, Ultimate	52.0 MPa	7540 psi	
Elongation at Break	2.00 %	2.00 %	
Tensile Modulus	3.30 GPa	479 ksi	
Charpy Impact Unnotched	2.30 J/cm ²	10.9 ft-lb/in ²	
Charpy Impact, Notched	0.300 J/cm ²	1.43 ft-lb/in ²	
Tensile Creep Modulus, 1 hour	3300 MPa	479000 psi	
Tensile Creep Modulus, 1000 hours	2600 MPa	377000 psi	

Electrical Properties	Metric	English	Comments
Electrical Resistivity	>= 1.00e+15 ohm-cm	>= 1.00e+15 ohm-cm	
Surface Resistance	1.00e+14 ohm	1.00e+14 ohm	
Dielectric Constant 	2.50 @Frequency 100 Hz	2.50 @Frequency 100 Hz	
	2.50 @Frequency 1e+6 Hz	2.50 @Frequency 1e+6 Hz	
Dissipation Factor 	0.0000700 @Frequency 1e+6 Hz	0.0000700 @Frequency 1e+6 Hz	
	0.0000900 @Frequency 100 Hz	0.0000900 @Frequency 100 Hz	
Comparative Tracking Index	375 V	375 V	

Thermal Properties	Metric	English	Comments
CTE, linear	80.0 µm/m-°C @Temperature 20.0 °C	44.4 µin/in-°F @Temperature 68.0 °F	Parallel
Deflection Temperature at 0.46 MPa (66 psi)	84.0 °C	183 °F	
Deflection Temperature at 1.8 MPa (264 psi)	76.0 °C	169 °F	
Vicat Softening Point	89.0 °C	192 °F	
Glass Transition Temp, Tg	90.0 °C	194 °F	
Flammability, UL94	HB @Thickness 3.18 mm	HB @Thickness 0.125 in	
Oxygen Index	18.0 %	18.0 %	

Some of the values displayed above may have been converted from their original units and/or rounded in order to display the information in a consistent format. Users requiring more precise data for scientific or engineering calculations can click on the property value to see the original value as well as raw conversions to equivalent units. We advise that you only use the original value or one of its raw conversions in your calculations to minimize rounding error. We also ask that you refer to MatWeb's [terms of use](#) regarding this information. [Click here](#) to view all the property values for this datasheet as they were originally entered into MatWeb.

Americas Styrenics STYRON® 678D High Heat Crystal Polystyrene

Categories: [Polymer](#); [Thermoplastic](#); [Polystyrene \(PS\)](#); [Polystyrene, Heat Resistant Grade](#)

Material Notes: Product Characteristics

- High heat resistance
- Excellent clarity
- Good moldability
- Food Contact Compliant

Typical Applications

- Disposable cutlery
- Housewares
- Compact disc and DVD jewel boxes
- Desk organizers

Information provided by AmericasStyrenics LLC.

Vendors: No vendors are listed for this material. Please [click here](#) if you are a supplier and would like information on how to add your listing to this material.

Physical Properties	Metric	English	Comments
Specific Gravity	1.04 g/cc	1.04 g/cc	ASTM D792
Linear Mold Shrinkage	0.00400 - 0.00800 cm/cm	0.00400 - 0.00800 in/in	ASTM D955
Melt Flow	10.0 g/10 min @Load 5.00 kg, Temperature 200 °C	10.0 g/10 min @Load 11.0 lb, Temperature 392 °F	ASTM D1238

Mechanical Properties	Metric	English	Comments
Hardness, Rockwell L	107	107	ASTM D785
Tensile Strength at Break	37.2 MPa	5400 psi	ASTM D638
Tensile Strength	37.2 MPa	5400 psi	ASTM D638
Elongation at Break	3.00 %	3.00 %	ASTM D638
Tensile Modulus	3.10 GPa	450 ksi	ASTM D638
Flexural Modulus	3.38 GPa	490 ksi	ASTM D790
Flexural Strength	57.9 MPa	8400 psi	ASTM D790
Izod Impact, Notched	0.214 J/cm	0.400 ft-lb/in	ASTM D256

Thermal Properties	Metric	English	Comments
CTE, linear	90.0 µm/m-°C	50.0 µin/in-°F	ASTM D696
Deflection Temperature at 0.46 MPa (66 psi)	86.1 °C	187 °F	ASTM D648
Deflection Temperature at 1.8 MPa (264 psi)	80.0 °C	176 °F	ASTM D648
Vicat Softening Point	97.2 °C	207 °F	ASTM D1525

Some of the values displayed above may have been converted from their original units and/or rounded in order to display the information in a consistent format. Users requiring more precise data for scientific or engineering calculations can click on the property value to see the original value as well as raw conversions to equivalent units. We advise that you only use the original value or one of its raw conversions in your calculations to minimize rounding error. We also ask that you refer to MatWeb's [terms of use](#) regarding this information. [Click here](#) to view all the property values for this datasheet as they were originally entered into MatWeb.

STYRON 678E

Polystyrene Resins

STYRON* 678E is a general purpose polystyrene with high flow and good toughness. It is designed for injection moulding cap coating and for use either pure or in a mixture with other

easy flowing high impact polymers in injection moulding applications.

Applications

- Thin-walled containers
- Coextrusion cap coating

Properties ^(1, 2)	Test Method			Value
	ISO	DIN	ASTM	
Physical				
Melt flow rate (200 °C/5 kg), g/10 min.	1133/8	53735	D-1238/G	10.5
Specific density (@ 23 °C), kg/m ³	1183		D-792	1050
Bulk density, kg/m ³	60			600
Mechanical				
Yield tensile strength ⁽³⁾ , 5 mm/min., MPa	527		D-638	43
Ultimate tensile elongation ⁽³⁾ , 5 mm/min., %	527		D-638	1–3
Flexural modulus ⁽³⁾ (3-points bending), MPa	178		D-790/1	3500
Flexural strength ⁽³⁾ (3-points bending), MPa	178		D-790/1	80
Thermal				
Vicat softening point (120 °C/h, 1 kg), °C (50 °C/h, 5 kg), °C	306A		D-1525/B	93
	306B	53460/B50		86
DTUL, annealed (120 °C/h, 1.82 MPa), °C (120 °C/h, 0.46 MPa), °C	75A		648	82
	75B		648	86
Generic Properties				
Thermal coefficient of linear expansion, 1/K		53752		8E-05
Thermal conductivity, W/mK		52612		0.17
Rockwell hardness, R-scale	2039/2		D-785-B	105.0
Ball indentation hardness, MPa	2039	53456		150.0
Dielectric constant (1 MHz)			D-150	2.5
Dissipation factor (1 MHz)			D-150	6E-05
Dielectric strength, kV/mm		53481		135

(1) Typical properties, not to be construed as specification limits.

(2) Compression moulded specimens.

(3) Injection moulded specimens.

Regulatory information

STYRON 678E should comply with the food contact regulations of the EU and its Member States as well as the US FDA. It is the responsibility of the manufacturers of food contact articles and industrial food packers to make sure the articles in their actual use are in compliance with the imposed migration requirements. The appropriate regulations should be consulted for more detailed information. Compliance letters can be obtained through the Dow sales representative.

Notice Regarding Medical Application Restrictions:

The Dow Chemical Company does not recommend any of its polystyrene resins, including samples, for use:

- (A) in any application which is intended for any internal contact with human body fluids or body tissues
- (B) as a critical component in any medical device that supports or sustains human life; and
- (C) specifically by pregnant women or
- (D) in any applications designed specifically to promote or interfere with human reproduction.

*Trademark of The Dow Chemical Company

See "Safety and Handling Considerations"

Safety and Handling Considerations

Material safety data sheets for STYRON polystyrene resins are available from Dow Plastics, a business group of The Dow Chemical Company and its subsidiaries. Safety data sheets are provided to help customers satisfy their own handling, safety and disposal needs, and those that may be required by locally applicable health and safety regulations such as OSHA (USA), MAK (Germany) or WHMIS (Canada). Safety data sheets are upgraded regularly, therefore, please request and review the most current Safety data sheets before handling or using any product.

The following comments are general and apply only to STYRON polystyrene resins as supplied. Various additives and processing aids used in fabrication and other materials used in finishing steps have their own safe use profile and must be investigated separately.

Hazards and Handling Precautions

STYRON polystyrene resins have a very low degree of toxicity and under normal conditions of use should pose no unusual problems from ingestion, eye or skin contact. However, caution is advised when handling, storing, using or disposing of these resins and good housekeeping and controlling of dusts are necessary for safe handling of product. Workers should be protected from the possibility of contact with molten resin during fabrication.

Handling and fabrication of plastic resins can result in the generation of vapours and dusts. Dusts resulting from sawing, filing and sanding of plastic parts in post-moulding operations may cause irritation to eyes and upper respiratory tract. In dusty atmospheres, use an approved dust respirator.

Granules or beads may present a slipping hazard. Good general ventilation of the polymer processing area is recommended. Processing may release fumes which may include polymer fragments and other decomposition products. Fumes can be irritating. At temperatures exceeding melt temperature, polymer fragments can occur. Good general ventilation should be sufficient for most conditions. Local exhaust ventilation may be necessary for some operations.

Use safety glasses. If there is a potential for exposure to particles which could cause mechanical injury to the eye, wear chemical goggles. If vapour exposure causes eye discomfort, use a full-face respirator. No other precautions other than clean body-covering clothing should be needed for handling STYRON polystyrene resins. Use gloves with insulation for thermal protection, when needed.

Combustibility

STYRON polystyrene resins will burn, and once ignited, may burn rapidly under the right conditions of heat and oxygen supply. Do not permit dust to accumulate. Dust layers can be ignited by spontaneous combustion or other ignition sources. When suspended in air, dust can pose an explosion hazard. Dense black smoke is produced when product burns. Toxic fumes are released in fire situations.

Fire fighters should wear positive-pressure, self-contained breathing apparatus and full protective equipment. Water or water fog are the preferred extinguishing media. Foam, alcohol resistant foam, carbon dioxide, or dry chemicals may also be used. Soak thoroughly with water to cool and prevent re-ignition.

Disposal

DO NOT DUMP INTO ANY SEWERS, ON THE GROUND, OR INTO ANY BODY OF WATER. For unused or uncontaminated material, the preferred options include sending to a licensed recycler, reclaimer, incinerator or other thermal destruction device. For used or contaminated material, the disposal options remain the same, although additional evaluation is required (see, for example, in the USA 40 CFR, Part 261, "Identification and Listing of Hazardous Waste"). All disposal methods must be in compliance with Federal, State/Provincial and local laws and regulations. As a service to its customers, Dow can provide lists of companies which recycle, re-process, or manage chemicals or plastics, and companies that manage used drums. Contact the nearest Dow sales office for further details.

Environment

Generally speaking, in the environment lost pellets are not a problem except under unusual circumstances – when they enter the marine environment. They are inert and benign in terms of their physical environmental impact, but if ingested by waterfowl or aquatic life, they may mechanically cause adverse effects. Spills should be minimised and they should be cleaned up when they happen. Plastics should not be discarded into the ocean or any other body of water.

Product Stewardship

The Dow Chemical Company has a fundamental concern for all who make, distribute and use its products, and for the environment in which we live. This concern is the basis of our Product Stewardship philosophy by which we assess the health and environmental information on our products and then take appropriate steps to protect employee and public health and the environment. Our Product Stewardship programme rests with every individual involved with Dow products from the initial concept and research to the manufacture, sale, distribution, and disposal of each product.

Customer Notice

Dow encourages its customers and potential users of Dow products to review their applications for such products from the standpoint of human health and environmental quality. To help ensure that Dow products are not used in ways for which they are not intended or tested, Dow personnel will assist customers in dealing with ecological and product safety considerations. Your Dow sales representative can arrange the proper contacts. Dow literature, including Material Safety Data sheets, should be consulted prior to the use of Dow products. These are available from the nearest Dow sales office. For further information contact the Dow Information Centre Amsterdam, The Netherlands: please call +31 20 691 62 68 or fax +31 20 691 64 18.

Notice: The information and data contained herein do not constitute sales specifications. The product properties may be changed without notice. No liability, warranty or guarantee of product performance is created by this document. It is the Buyer's responsibility to determine whether Dow products are appropriate for Buyer's use and to ensure that Buyer's workplace and disposal practices are in compliance with applicable laws and regulations. No freedom from any patents or other industrial or intellectual property rights is granted or to be inferred. (February 2000)



We don't succeed unless you do.

Americas Styrenics Styron® 615APR Polystyrene (discontinued **)

Categories: [Polymer](#); [Thermoplastic](#); [Polystyrene \(PS\)](#)

Material Notes: STYRON® 615 APR is a general purpose easy flow resin typically used for medical, pharmaceutical and thin-walled parts. It is an excellent resin for blending with K-Resin (K-Resin is a trademark of Phillips 66 Company). When used unmodified for the manufacture of food contact articles STYRON 615 APR complies with the US Food, Drug and Cosmetic Act and Food Additive Regulations 21 CFR 177.1640. The regulations should be consulted for complete details.

Data provided by Dow Chemical.

Americas Styrenics was formed in 2008 as a joint venture between Dow Chemical and Chevron Phillips Chemical Company. Styron was a Dow trade name before the JV formation.

Vendors: No vendors are listed for this material. Please [click here](#) if you are a supplier and would like information on how to add your listing to this material.

Physical Properties	Metric	English	Comments
Density	1.04 g/cc	0.0376 lb/in ³	ASTM Data
Linear Mold Shrinkage	0.00500 cm/cm	0.00500 in/in	
Melt Flow	14.0 g/10 min @Load 5.00 kg, Temperature 200 °C	14.0 g/10 min @Load 11.0 lb, Temperature 392 °F	ASTM Data

Mechanical Properties	Metric	English	Comments
Tensile Strength, Ultimate	44.1 MPa	6400 psi	ASTM Data
Tensile Strength, Yield	44.1 MPa	6400 psi	ASTM Data
Elongation at Break	1.50 %	1.50 %	ASTM Data
Tensile Modulus	2.87 GPa	416 ksi	ASTM Data
Izod Impact, Notched	0.160 J/cm	0.300 ft-lb/in	ASTM Data

Thermal Properties	Metric	English	Comments
CTE, linear	90.0 µm/m-°C @Temperature 20.0 °C	50.0 µin/in-°F @Temperature 68.0 °F	parallel to flow; ASTM data
Deflection Temperature at 0.46 MPa (66 psi)	88.3 °C	191 °F	Unannealed; ASTM Data
Deflection Temperature at 1.8 MPa (264 psi)	75.6 °C	168 °F	Unannealed; ASTM Data
	90.0 °C	194 °F	Annealed; ASTM Data
Vicat Softening Point	101 °C	214 °F	
Flammability, UL94	HB @Thickness 3.20 mm	HB @Thickness 0.126 in	

Optical Properties	Metric	English	Comments
Haze	1.00 %	1.00 %	
Transmission, Visible	90.0 %	90.0 %	

**

Materials flagged as discontinued (🚫) are no longer part of the manufacturer's standard product line according to our latest information. These materials may be available by special order, in distribution inventory, or reinstated as an active product. Data sheets from materials that are no longer available remain in MatWeb to assist users in finding replacement materials.

Users of our [Advanced Search](#) (registration required) may exclude discontinued materials from search results.

Some of the values displayed above may have been converted from their original units and/or rounded in order to display the information in a consistent format. Users requiring more precise data for scientific or engineering calculations can click on the property value to see the original value as well as raw conversions to equivalent units. We advise that you only use the original value or one of its raw conversions in your calculations to minimize rounding error. We also ask that you refer to MatWeb's [terms of use](#) regarding this information. [Click here](#) to view all the property values for this datasheet as they were originally entered into MatWeb.

I. Stern N1921 General Purpose Crystal Polystyrene

Categories: [Polymer](#); [Thermoplastic](#); [Polystyrene \(PS\)](#); [Polystyrene, Impact Modified](#)

Material Notes:

Features:

- Excellent Processability
- Easy Flow

Applications

- Disposable Packaging
- Housewares
- Cosmetics Packaging

Agency Ratings

- FDA Title 21 CFR 177.1640
- UL File E220962

Information provided by I. Stern & Co. Inc.

Vendors:

[Click here to view all available suppliers for this material.](#)

Please [click here](#) if you are a supplier and would like information on how to add your listing to this material.

Physical Properties	Metric	English	Comments
Melt Flow	20.0 g/10 min	20.0 g/10 min	ASTM D1238
Mechanical Properties	Metric	English	Comments
Tensile Strength, Yield	37.0 MPa	5370 psi	ASTM D638
Elongation at Yield	1.30 %	1.30 %	ASTM D638
Flexural Modulus	3.20 GPa	464 ksi	ASTM D790
Flexural Strength	89.6 MPa	13000 psi	ASTM D790
Izod Impact, Notched	0.0801 J/cm	0.150 ft-lb/in	ASTM D256
Thermal Properties	Metric	English	Comments
Deflection Temperature at 1.8 MPa (264 psi)	72.8 °C	163 °F	ISO
Vicat Softening Point	82.8 °C	181 °F	ISO
Flammability, UL94 	HB	HB	
	@Thickness 1.50 mm	@Thickness 0.0591 in	
	HB	HB	
	@Thickness 3.00 mm	@Thickness 0.118 in	

Some of the values displayed above may have been converted from their original units and/or rounded in order to display the information in a consistent format. Users requiring more precise data for scientific or engineering calculations can click on the property value to see the original value as well as raw conversions to equivalent units. We advise that you only use the original value or one of its raw conversions in your calculations to minimize rounding error. We also ask that you refer to MatWeb's [terms of use](#) regarding this information. [Click here](#) to view all the property values for this datasheet as they were originally entered into MatWeb.