



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

⑪ Número de publicación: **2 206 303**

⑤① Int. Cl.7: **B29C 45/76**
G06F 17/50

⑫

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- ⑧⑥ Número de solicitud: **00963592 .1**
⑧⑥ Fecha de presentación: **18.09.2000**
⑧⑦ Número de presentación de la solicitud: **1218163**
⑧⑦ Fecha de publicación de la solicitud: **03.07.2002**

⑤④ Título: **Método y aparato para modelar la inyección de un fluido en la cavidad de un molde.**

③⑩ Prioridad: **24.09.1999 US 404932**

④⑤ Fecha de publicación de la mención BOPI:
16.05.2004

④⑤ Fecha de la publicación del folleto de la patente:
16.05.2004

⑦③ Titular/es: **Moldflow Corporation**
430 Boston Post Road
Wayland, Massachusetts 01778, US

⑦② Inventor/es: **Friedl, Christian;**
Costa, Franco, Stephen;
Cook, Peter, Shane;
Talwar, Kapil y
Antanovskii, Leonid, K.

⑦④ Agente: **Manzano Cantos, Gregorio**

ES 2 206 303 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

ES 2 206 303 T3

DESCRIPCIÓN

Método y aparato para modelar la inyección de un fluido en la cavidad de un molde.

5 **Campo técnico**

La invención se refiere a un método para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional y a un aparato de hardware informático para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional.

10 **Antecedentes**

El uso de componentes plásticos moldeados por inyección ha aumentado espectacularmente en muchas industrias en los últimos años. Los fabricantes de equipo electrónico, bienes de consumo, equipo médico y piezas de automóvil están produciendo cada vez más sus productos y los componentes utilizados en sus productos a partir de plásticos que nunca antes. Al mismo tiempo, las presiones competitivas están llevando a los fabricantes de la industria de moldeo por inyección de plásticos a encontrar nuevos métodos para optimizar los diseños, con el fin de ajustar mejor los diseños al proceso de producción. Si se descubre tarde la necesidad de modificaciones en la configuración del molde o componentes en el proceso de desarrollo de diseños, aumentan rápidamente el retraso y los costes asociados para poner en práctica los cambios necesarios. Las compañías que quieren garantizar que sus componentes se pueden producir y que rendirán de forma óptima, han empezado a utilizar técnicas de ingeniería asistidas por ordenador para simular o modelar los flujos complejos en un molde de inyección, con el fin de entender mejor el proceso de fabricación e integrar este conocimiento al diseño de componentes, inicialmente en la fase de diseño.

Existen varios factores que deben considerarse cuando se diseña un molde de inyección y el componente que se va a producir en él. Unos cuantos son parámetros tales como la geometría global del componente, los espesores de pared máximo y mínimo, el número y la localización de entradas en el molde a través de las que se inyecta el polímero líquido, el número y la localización de respiraderos en el molde a través de los que escapa el gas en la cavidad, la composición y las propiedades del polímero y las tolerancias de contracción. Debido a la relación estrechamente interrelacionada, el diseño del molde y el componente no pueden basarse de manera fiable meramente en la forma y función del componente final, sino que también deben considerarse los efectos del proceso de fabricación.

Puede utilizarse ventajosamente la simulación de ingeniería asistida por ordenador para proporcionar a los ingenieros de diseño y fabricación retroalimentación visual y numérica de lo que es más probable que suceda dentro de la cavidad del molde durante el proceso de moldeo por inyección, permitiéndoles entender y predecir mejor el comportamiento de los diseños de componente considerados, de modo que puede eliminarse sustancialmente el enfoque de fabricación tradicional y costoso de ensayo y error. El uso de simulación de ingeniería asistida por ordenador facilita la optimización de los diseños de componente, diseños de molde y parámetros del proceso de fabricación durante la fase de diseño, en la que se pueden poner en práctica fácilmente los cambios necesarios, con el menor coste y efecto sobre el programa.

Una discusión básica del proceso de moldeo por inyección y los retos asociados con producir componentes de moldeo de inyección de calidad y con rendimiento elevado, se trata en el manual "Moldflow Design Principles: Quality and Productivity by Design", distribuido por Moldflow Pty. Ltd., Kilsyth, Victoria, Australia, el cesionario de la presente solicitud de patente.

Brevemente, el proceso de moldeo por inyección es un proceso complejo, de dos etapas. En la primera etapa, denominada fase de llenado, el material polimérico se fuerza a presión dentro de la cavidad del molde hasta que la cavidad se llena volumétricamente. Posteriormente, en la segunda etapa, denominada fase de relleno, se mantiene la presión sobre el polímero para permitir un flujo adicional de polímero dentro de la cavidad para compensar la contracción, puesto que el material solidifica y se contrae. Cuando el componente es lo suficientemente sólido, el componente se puede extraer del molde. Se pueden moldear por inyección tanto polímeros termoplásticos como termoendurecibles.

Cuando se moldean termoplásticos, la temperatura del molde en la superficie o pared de la cavidad se mantiene a una temperatura inferior a la temperatura de fusión del material que se va a inyectar. Puesto que el material fluye dentro de la cavidad, el material líquido forma una capa solidificada a lo largo de la pared de la cavidad. Esta capa se puede denominar capa congelada y, dependiendo de las condiciones del proceso y el material utilizado, el espesor de la misma puede variar durante el llenado. El espesor de la capa congelada es importante, puesto que la capa congelada reduce la anchura de canal eficaz para el flujo en la cavidad y, debido a las características termorreológicas de los termoplásticos, afecta normalmente a la viscosidad del material que fluye por ella.

Las técnicas de simulación analítica anteriores se basaban en modelos bidimensionales de elemento finito, que se encontró que eran beneficiosos para simular el moldeo por inyección de componentes de pared delgada, relativamente sencillos. Por ejemplo, en la solicitud de patente internacional número PCT/AU98/00130, cedida al cesionario de la presente invención, se tratan técnicas de simulación más avanzadas. Sin embargo, en componentes complejos o gruesos, en los que el plástico fundido puede fluir en todas direcciones, las suposiciones analíticas tradicionales de pared delgada que se basan en regiones planas de espesor especificado no son capaces normalmente de predecir este tipo de flujo. Para conseguir una exactitud y predictibilidad elevadas, es deseable establecer una simulación

ES 2 206 303 T3

tridimensional completa, por ejemplo, en la que se formarán líneas de soldadura, se producirán bolsas de aire y se conducirá o rezagará el flujo.

5 Con el fin de analizar los diseños de componente moldeado por inyección en tres dimensiones, generalmente es deseable empezar con un paquete informatizado de modelización de sólidos, tal como Pro-Engineer^{MR}, CATIA^{MR}, I-DEAS^{MR}, Solid Works^{MR}, Solid Edge^{MR} u otros, que se utilizan comúnmente en el diseño mecánico y las aplicaciones de dibujo. El paquete de modelización puede utilizarse para generar descripciones tridimensionales fotorreales de la geometría del componente, denominado modelo sólido. Actualmente, los códigos de análisis de elemento finito basados directamente en modelos sólidos utilizan nodos para definir elementos sólidos tales como tetraedros y hexaedros.

10 Con el fin de explicar la física implicada en el moldeo por inyección, generalmente es deseable calcular cinco magnitudes por nodo del modelo de elemento finito, a saber, presión, las tres componentes ortogonales de la velocidad y temperatura. Dado que un modelo adecuado puede contener cientos de miles de nodos, es difícil la resolución de tal problema numérico complejo y requiere recursos informáticos considerables.

15 La patente de los EE.UU. número 5.835.379, concedida a Nakano, y la solicitud de patente europea relacionada número EP 0 698 476 A1 sugieren un método para reducir el número de variables que han de determinarse en un modelo de moldeo por inyección de elemento finito durante la fase de llenado, con el fin de permitir los cálculos utilizando menos recursos informáticos que los que se requerirían en caso contrario. La descripción de Nakano se ha utilizado como la base del preámbulo de las reivindicaciones independientes y como tal se considera que representa la técnica anterior más próxima. Nakano trata el concepto de conductancia de flujo, κ , para reducir el número de variables a dos, a saber, presión y conductancia de flujo. Tal como se utiliza en el presente documento, los términos conductancia de flujo, conductancia de fluido y fluidez se utilizan de manera intercambiable y deben considerarse sinónimos. El efecto de variar la viscosidad del material se incorpora a los cálculos por medio de la variable conductancia de flujo.

20 Esto implica necesariamente la extrapolación de los datos de viscosidad y se considera que esto conduce a un error considerable en el cálculo de la viscosidad. Además, durante las fases de llenado y relleno, el material próximo a las paredes de la cavidad comienza a congelarse y el espesor de la capa aumenta con el tiempo hasta que se extrae la pieza, lo que se cree que conduce a un error adicional cuando se aplica el método de Nakano.

La viscosidad, η , de un fundido polimérico se mide frecuentemente como una función de la temperatura y la velocidad de cizallamiento. Cuando se hace una medida, no es posible medir la viscosidad a bajas temperaturas que se aproximan a la temperatura a la que solidifica el material, porque a estas bajas temperaturas, la viscosidad es relativamente elevada y, a velocidades de cizallamiento razonables, se ha descubierto que la disipación térmica viscosa es importante. En consecuencia, las medidas de viscosidad se toman generalmente en el intervalo de temperaturas en las que el fundido fluye considerablemente rápido. Tras la medida, se ajusta una función a los datos medidos. Las funciones de ajuste de los datos disponibles son generalmente razonables a temperaturas elevadas y se mantienen durante un amplio intervalo de cizallamiento; sin embargo, cuando se considera material en la pared que está por debajo o cerca de la temperatura de solidificación, es necesario extrapolar la viscosidad bastante más allá del intervalo experimental. Esto da como resultado errores en el valor de la viscosidad, lo que a su vez produce error en la conductancia de flujo, porque la viscosidad y la conductancia de flujo se relacionan mediante la siguiente relación:

$$\nabla^2 \kappa = \frac{1}{\eta} \quad (1)$$

45 que también se puede representar en la forma de:

$$\nabla \cdot (\eta \nabla \kappa) = -1 \quad (2)$$

50 Además, tal como observó Nakano, el valor de la conductancia de flujo tiene un valor pequeño en la pared de la cavidad y aumenta con la distancia fuera de la pared. En la pared, el valor de la conductancia de flujo es próximo o igual a cero, debido a la viscosidad muy elevada ahí. Una condición de contorno común de velocidad en el flujo de fluido es una velocidad cero en la pared. Esto es igual a una condición de no deslizamiento. Si se produce deslizamiento, la velocidad en la pared no es cero y se puede tratar de varias maneras. Utilizando el enfoque de la conductancia de flujo, la conductancia de flujo se puede fijar en un valor pequeño, no nulo. Sin embargo, como resultado existen, en realidad, variaciones de la conductancia de flujo en la capa congelada que son órdenes de magnitud inferiores que en el fundido. Tal amplia varianza en los valores conduce a errores en el esquema numérico de Nakano y a otros en el cálculo de la conductancia de flujo.

60 Durante la fase de relleno, también se pueden obtener los valores de presión despejando primero la conductancia de flujo. En el relleno, se ha determinado que la capa congelada se vuelve muy importante, hasta el grado de que finalmente la mayoría de los nodos están por debajo de la temperatura de solidificación. Por tanto, los problemas aludidos anteriormente se acentúan en la fase de relleno.

Sumario de la invención

Las técnicas convencionales de modelización tridimensional se basan, principalmente, en las leyes subyacentes de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento para predecir el flujo de fluido en una cavidad de molde de inyección. Sin embargo, con el fin de conseguir elevada exactitud y elevada predictibilidad en una simulación tridimensional completa del proceso de moldeo por inyección, se ha determinado que también deben tratarse los principios de conservación de la energía. Con el fin de satisfacer todos estos tres requisitos simultáneamente, sin consumir recursos computacionales desmesurados, se han desarrollado métodos creativos según la invención, basados en una variedad de nuevas suposiciones y metodologías de modelización.

En consecuencia, es un objeto de la invención emplear los principios de conservación de la energía en la modelización del flujo de fluido en una cavidad. El fluido puede ser un líquido viscoso, tal como un fundido polimérico en un proceso de moldeo por inyección, o un metal fundido o semisólido utilizado en un proceso de colada. Debido a que el material también experimenta un cambio de fase desde el estado líquido hasta un estado sólido, se ha encontrado que es importante considerar los efectos térmicos subyacentes a los principios de conservación de la energía tanto durante el flujo inicial como durante la solidificación.

Por ejemplo, se ha reconocido que durante las fases de llenado y relleno, existen tres mecanismos principales de transferencia de calor a considerar: la convección desde el fundido entrante, la conducción hacia fuera hasta la pared del molde y la disipación viscosa, que se relaciona con la energía térmica producida mediante cizallamiento dentro del polímero fluyente. Adicionalmente, pueden existir otros mecanismos, tales como efectos de calentamiento por compresión, debidos al calor generado mediante compresión y al enfriamiento resultante de la descompresión. Todos estos tres mecanismos principales contribuyen significativamente al balance energético durante el llenado. En consecuencia, la simulación exacta del moldeo por inyección requiere normalmente un análisis anisotérmico de este polímero fundido según fluye dentro del molde. Sin embargo, durante la fase de relleno se reduce significativamente el flujo de material y los mecanismos principales de transferencia de calor son la conducción hasta la pared del molde y la convección de fundido desde regiones de presión elevada hasta regiones de presión inferior. La convección funciona de manera bastante importante en las fases iniciales del relleno, cuando se aplica presión por primera vez. Obsérvese también que las presiones de relleno pueden ser inferiores o superiores a la presión de llenado y se pueden perfilar, esto es, se puede hacer que varíen con el tiempo. Por consiguiente, el material puede fluir dentro del molde y también fuera del molde por medio de un sistema de alimentación, dependiendo de la diferencia entre la presión dentro de la cavidad y la presión aplicada en el sistema de alimentación. El análisis de la fase de relleno normalmente también requiere que se considere el fundido como un fluido compresible.

Mientras que los métodos convencionales determinan la conductancia de flujo en una pluralidad de elementos pequeños que dividen la región en la que fluye el fluido, según una realización de la presente invención, se calcula la conductancia de flujo en cada uno de los nodos de cada elemento. Esta técnica permite que se defina un valor más preciso de la conductancia de flujo, puesto que la conductancia de flujo puede variar de cualquiera de una variedad de maneras deseadas de nodo a nodo. La variación dependerá del tipo de elemento finito utilizado para discretizar el problema. El uso de un valor nodal es más deseable que el uso de un valor elemental, puesto que otras magnitudes tales como la temperatura, presión y velocidad se definen de manera más precisa como valores puntuales y, de nuevo, se pueden interpolar de nodo a nodo de cualquier manera. Esta capacidad de interpolación también permite que se determine exactamente la localización de la interfase entre el polímero fundido y el sólido, que se ha encontrado que es particularmente relevante en la exactitud predictiva de la simulación.

Según un primer aspecto, la invención proporciona un método para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional, comprendiendo el método las etapas de:

(a) proporcionar un modelo informático sólido tridimensional que define la cavidad;

(b) discretizar un dominio de soluciones basado en el modelo sólido;

(c) especificar las condiciones de contorno; y despejar una o ambas de

(d) las variables del proceso de la fase de llenado en al menos una primera parte del dominio de soluciones para proporcionar las soluciones de llenado respectivas, por tanto, para al menos la primera parte del dominio de soluciones; y

(e) las variables del proceso de la fase de relleno en al menos alguna de la primera parte del dominio de soluciones basado, en parte, en los estados respectivos de las variables del proceso en la terminación del llenado, para proporcionar las soluciones de la fase de relleno respectivas, por tanto, para al menos alguna de la primera parte del dominio de soluciones; y

(f) determinar si al menos una de las soluciones de la fase de llenado respectivas es aceptable, en la que al menos una de las etapas (d) y (e) comprende las subetapas de:

utilizar una primera descripción de una distribución de una variable del proceso alrededor de cada uno de una primera pluralidad de nodos o elementos interiores dentro de la parte respectiva del dominio de soluciones; y

ES 2 206 303 T3

utilizar una segunda descripción de la distribución de la variable del proceso en al menos una segunda parte del dominio de soluciones que contiene la primera pluralidad de nodos o elementos interiores, utilizando la segunda descripción las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía.

5

Según un segundo aspecto, la invención proporciona un método para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional, comprendiendo el método las etapas de:

(a) proporcionar un modelo informático tridimensional que define la cavidad;

10

(b) discretizar un dominio de soluciones basado en el modelo;

(c) especificar las condiciones de contorno; y

15

(d) despejar las variables del proceso utilizando las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía para al menos una parte del dominio de soluciones, en la que la etapa (d) comprende las subetapa de utilizar un esquema explícito en la resolución de la ecuación de conservación de la energía.

20

Según un tercer aspecto, la invención proporciona un aparato de hardware informático tal como se define en la reivindicación 37.

Realizaciones particulares de la invención son el objeto de las respectivas reivindicaciones dependientes.

25

El método puede utilizar una función analítica unidimensional para describir la distribución de temperatura local en un nodo. Alternativa o adicionalmente, se puede definir la variación de una función analítica unidimensional, con el tiempo, para explicar la convección calorífica. Aún en otra disposición de la invención, se define la variación de una función analítica unidimensional para explicar la generación de calor viscoso. Todavía en otra disposición, se define un esquema explícito de convección de temperatura utilizando la función analítica unidimensional. En otra disposición, se proporciona una mejora de malla anisotrópica de elementos finitos, que incluye algoritmo de cálculo de la distancia hasta la pared de la cavidad.

30

Además, según una realización, la presente invención incorpora el concepto de capa congelada para remediar algunos de los problemas con respecto a las técnicas de simulación convencionales mencionadas anteriormente. Se utiliza un criterio para definir la interfase entre el polímero fundido y el polímero solidificado en la pared de la cavidad del molde. Este criterio puede ser una temperatura, un valor mínimo de velocidad, una combinación de los dos o alguna otra magnitud física. En la región congelada, no existe movimiento significativo del polímero y así no es necesario calcular la conductancia de flujo ahí. Los nodos que se determinan que están en la región congelada se pueden eliminar del proceso de resolución para la velocidad, presión y conductancia de flujo. Sólo necesita calcularse la temperatura en la capa congelada. Sin embargo, obsérvese que se pueden calcular también propiedades distintas a la temperatura en la capa congelada. Por ejemplo, la morfología del material cambiará con el cambio de estado. La cristalinidad de los polímeros semicristalinos cambia con la temperatura y sólo se puede decir que los cristales se forman una vez que el fundido se ha enfriado suficientemente a partir del estado fundido. El estado de tensiones depende también de la temperatura y difiere entre las fases líquida y sólida. Los polímeros son viscoelásticos, de modo que su estado de tensiones, incluso en el sólido, cambia con el tiempo y la temperatura.

45

En efecto, sólo calculando la temperatura, esto reduce el número de variables que han de determinarse a una en la capa congelada y, de ese modo, aumenta de manera espectacular la velocidad de cálculo mientras que se reduce la memoria requerida. Eliminando los nódulos congelados, se elimina la necesidad de extrapolación de la viscosidad y así, también se eliminan los errores asociados con ella. Además, eliminando los nodos de la capa congelada del análisis, se eliminan valores muy pequeños de conductancia de flujo y las ecuaciones que han de resolverse están mejor condicionadas que en los métodos convencionales. Todavía además, no calculando la conductancia de fluido en estas regiones, se ha encontrado que no sólo se reduce considerablemente el tamaño del problema, sino que también se mejora la estabilidad de los métodos numéricos.

55

Las variables del proceso de las fases de llenado y relleno pueden incluir densidad, fluidez, tiempo de llenado de la cavidad del molde, tiempo de relleno de la cavidad del molde, presión, velocidad de cizallamiento, tensión de cizallamiento, temperatura, velocidad, viscosidad y contracción volumétrica. En el caso de que las soluciones de la fase de llenado y/o relleno sean inaceptables, se pueden modificar las condiciones de contorno y/o el dominio de soluciones discretizado y repetir el análisis hasta que se consiga un resultado aceptable. Para facilitar a un usuario la determinación de si los resultados son aceptables, se puede visualizar gráficamente una variedad de soluciones de la fase de llenado y relleno, tales como el tiempo de llenado, tiempo de relleno, densidad, presión, velocidad de cizallamiento, tensión de cizallamiento, temperatura, velocidad, viscosidad y contracción volumétrica.

60

La etapa de discretización puede incluir la subetapa de generar una malla de elementos finitos basada en el modelo sólido, subdividiendo el modelo en una pluralidad de elementos conectados definidos mediante una pluralidad de nodos. La subetapa de generación de la malla puede incluir generar una malla anisotrópica en espesor y zonas delgadas

65

ES 2 206 303 T3

del modelo, de modo que la mejora de malla proporcione un aumento de resolución en la dirección del espesor sin aumentar sustancialmente la mejora de malla en una dirección longitudinal.

5 Las condiciones de contorno pueden incluir parámetros tales como la composición del fluido, localización de la inyección de fluido, temperatura de inyección de fluido, presión de inyección de fluido, velocidad volumétrica de flujo de inyección de fluido, temperatura del molde, dimensiones de la cavidad, configuración de la cavidad y plano de separación del molde, y variaciones de los mismos.

10 Despejar las variables del proceso de la fase de llenado puede incluir las subetapas de despejar la fluidez, presión, velocidad y viscosidad para al menos alguna del dominio de soluciones, en el que la viscosidad se basa en la temperatura. La temperatura, a su vez, se puede basar en las contribuciones de transferencia de calor convectivo, conductivo y/o por disipación viscosa. La velocidad y/o la viscosidad pueden calcularse iterativamente, hasta que converja la presión.

15 Este método también puede incluir la subetapa de determinar la evolución de la superficie libre del fluido en la cavidad basado en la velocidad, en un incremento de tiempo dado, en el que la evolución de la superficie libre se determina iterativamente, hasta que se llena la cavidad.

20 Una vez que se ha modelado la simulación de que la cavidad está llena, entonces el método puede despejar las variables del proceso de la fase de relleno utilizando la conservación de la masa, cantidad de movimiento y energía para al menos una parte del dominio de soluciones, basándose en los estados respectivos de las variables del proceso en la terminación del llenado, para proporcionar las respectivas soluciones de la fase de relleno para al menos alguna del dominio de soluciones. Entonces, se puede hacer una determinación de si las soluciones de la fase de relleno son aceptables para la inyección del fluido durante el relleno de la cavidad del molde.

25 De nuevo, despejar las variables del proceso de la fase de relleno puede incluir despejar la fluidez, presión, velocidad y/o viscosidad para al menos alguna del dominio de soluciones, en el que la viscosidad se basa en la temperatura. La temperatura, a su vez, se puede basar en las contribuciones de transferencia de calor convectivo, conductivo y/o por disipación viscosa. La velocidad y/o la viscosidad pueden calcularse iterativamente, hasta que converja la presión. También se pueden determinar las propiedades másicas de un componente producido según las condiciones de contorno. Las propiedades másicas pueden incluir la densidad del componente, contracción volumétrica, masa del componente y volumen del componente y también pueden calcularse iterativamente, junto con la velocidad y la viscosidad, hasta que se completa un perfil de presión predeterminado.

35 **Breve descripción de los dibujos**

Los rasgos novedosos que se creen característicos de la invención se exponen y diferencian en las reivindicaciones adjuntas. La invención, según realizaciones preferidas y a título de ejemplo, junto con ventajas adicionales de las mismas, se describe más particularmente en la siguiente descripción detallada tomada junto con los dibujos adjuntos, en los que:

45 La figura 1 es una representación esquemática de un aparato de hardware informático adecuado para su uso con los métodos descritos para modelar la inyección de fluido en la cavidad de un molde, según una realización de la presente invención;

la figura 2 es una representación esquemática de un diagrama de flujo de un sistema de nivel superior que resume ciertas etapas del proceso, según una realización de la presente invención;

50 las figuras 3A y 3B son representaciones esquemáticas de un punto interior de la cavidad del molde y la distribución de temperatura relacionada a lo largo de una línea que une el punto interior y la pared del molde;

la figura 4 es una representación esquemática de la asociación de una función analítica unidimensional para la distribución de temperatura en cada punto, i , dentro de una cavidad de molde;

55 la figura 5 es una representación esquemática en forma de diagrama de flujo de las etapas implicadas en una solución de temperatura global durante un incremento de tiempo global, según una realización de la presente invención;

60 la figura 6 es una representación esquemática de la velocidad en un nodo y la relación de la misma con los elementos circundantes;

la figura 7 es una representación esquemática de la velocidad en una cara de un elemento;

65 la figura 8 es una representación esquemática de la velocidad en un nodo y la relación de la misma con un elemento tetraédrico conectado, aguas arriba;

la figura 9 es una representación esquemática de la velocidad en una cara de un elemento y la relación de la misma con un elemento tetraédrico conectado, aguas arriba;

ES 2 206 303 T3

las figuras 10A y 10B son representaciones esquemáticas de un punto interior de la cavidad del molde y la interpolación de la temperatura aguas arriba utilizando una función analítica unidimensional en los nodos de elementos aguas arriba;

- 5 la figura 11 es una representación esquemática de combinaciones para dividir la cara de un elemento tetraédrico;
- la figura 12 es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre una arista;
- 10 la figura 13A es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre dos aristas adyacentes;
- la figura 13B es una representación esquemática de un patrón para dividir una pirámide de base cuadrada;
- 15 la figura 13C es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre dos aristas opuestas;
- la figura 14A es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre tres aristas con una cara común compartida;
- 20 la figura 14B es una representación esquemática para dividir un elemento tetraédrico sobre tres aristas con un nodo común;
- la figura 14C es una representación esquemática de un patrón para dividir un prisma triangular;
- 25 la figura 14D es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre tres aristas en serie;
- la figura 15A es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre cuatro aristas opuestas;
- 30 la figura 15B es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre cuatro aristas adyacentes;
- 35 la figura 16 es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre cinco aristas;
- la figura 17 es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre seis aristas;
- 40 las figuras 18A y 18B son representaciones esquemáticas de árboles de conectividad y numeración de capas nodales utilizados en la determinación de la distancia hasta la pared de la cavidad para limitar el posible espacio de búsqueda;
- la figura 19 es una representación esquemática de un método para determinar la posición de la interfase sólido / líquido dentro de un elemento utilizando la temperatura de solidificación y una función analítica unidimensional para la distribución de temperatura en cada nodo líquido;
- 45 la figura 20 es una representación esquemática de la variación de viscosidad dentro de un elemento que contiene una interfase sólido / líquido;
- la figura 21 es una representación esquemática del flujo de fluido en las inmediaciones de una interfase sólido / líquido;
- 50 la figura 22 es una representación esquemática de un método para determinar un nodo central asociado con cada nodo de pared y cada nodo interno;
- 55 las figuras 23A a 23C son representaciones esquemáticas de la relación entre nodos de pared, internos y centrales y un método para determinar la presión en los nodos congelados;
- la figura 24 es una representación esquemática de un diagrama de flujo de la fase de llenado que resume ciertas etapas del proceso, según una realización de la presente invención; y
- 60 la figura 25 es una representación esquemática de un diagrama de flujo de la fase de relleno que resume ciertas etapas del proceso, según una realización de la presente invención.

Descripción detallada de la invención

- 65 La modelización del proceso de moldeo por inyección en una simulación tridimensional se puede describir mediante las ecuaciones de conservación para la masa, cantidad de movimiento y energía, respectivamente, tal como sigue:

ES 2 206 303 T3

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (3)$$

5 en la que ρ es densidad, v es velocidad, t es tiempo, ∇ significa el gradiente con respecto a un vector de posición y \rightarrow representa una magnitud vectorial.

$$10 \quad \rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} \right) + \nabla \cdot P \approx \rho \bar{g} \quad (4)$$

15 en la que P es el flujo de la cantidad de movimiento y g es la fuerza de la gravedad.

$$15 \quad \rho \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla \hat{U} \right) + P : D + \nabla \cdot \bar{q} = \rho Q \quad (5)$$

20 en la que U es la energía interna específica, D es el tensor de velocidad de deformación, q es el flujo térmico y Q es el consumo térmico específico, que expresa otras fuentes o disipadores de calor.

25 La ecuación (4) se expresa comúnmente en términos de temperatura y presión, y para el caso en el que $Q = 0$, es decir, sin fuentes o disipadores de calor adicionales, habitual para los termoplásticos, toma la forma de

$$30 \quad \rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla T \right) + \frac{T}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla p \right) = \eta \gamma^2 + \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \quad (6)$$

30 en la que C_p es calor específico, T es temperatura, p es presión, η es viscosidad, γ es velocidad de cizallamiento y κ es conductividad térmica. Esta κ no debe confundirse con la conductancia de flujo.

35 En general, estas ecuaciones son insolubles analíticamente, de modo que se resuelven mediante un procedimiento numérico discreto, tal como un método de elemento de contorno, un método de elemento finito, un método de diferencia finita, un método de volumen finito o un método sin malla. Según el método del elemento finito, la solución requiere la subdivisión del dominio de soluciones en un conjunto de subdominios más pequeños y la transformación de las ecuaciones en un conjunto de ecuaciones discretas que describen el colectivo de subdominios más pequeños. La aplicación del método del elemento finito a un dominio tridimensional da como resultado subdominios tridimensionales denominados elementos. Según un método, se pueden utilizar cuatro elementos tetraédricos, lineales, nodales, en los que los elementos se definen mediante nodos en los vértices de cada elemento tetraédrico, y el término lineal se refiere al orden polinómico de la interpolación del elemento o funciones de forma.

45 La práctica de elemento finito más común da como resultado una discretización del dominio, de modo que las variables de campo de interés se calculan en los puntos nodales, y las propiedades del material requeridas para el análisis son constantes dentro de un elemento. Para mejorar la exactitud, especialmente en regiones de gradiente elevado, se ha determinado que es deseable formular las ecuaciones de tal manera que tanto las variables de campo (tales como la presión, temperatura y velocidad) como las propiedades del material (tales como la viscosidad) se definan en los nodos y, a menos que se establezca lo contrario, se interpolen dentro de un elemento según la función de forma del elemento. De esta manera, se ha determinado que la discretización proporciona no sólo exactitud computacional adicional, sino que también facilita el uso de interpolaciones avanzadas de orden superior, que se van a describir más en detalle a continuación en el presente documento.

55 En última instancia, la exactitud de simulación de un proceso físico depende fuertemente de lo bien que puede describirse el modelo utilizado en la simulación fenómenos importantes que son característicos del proceso. Para el moldeo por inyección, existen varios fenómenos específicos que reflejan la naturaleza compleja del proceso y que necesitan modelarse bien para obtener resultados predictivos exactos de la simulación. Entre estos fenómenos están: gradientes muy grandes y de temperatura fuertemente variable cerca de la interfase sólido / líquido; variación de la posición del límite de la interfase sólido / líquido con el tiempo y localización en la cavidad del molde; grandes variaciones en las propiedades del material polimérico en todos los lugares y en todos los tiempos durante el moldeo; y un aumento de volumen del material sólido con el tiempo según solidifica el material líquido inyectado durante el moldeo.

65 Es posible capturar estos fenómenos específicos de varias maneras. Un método consiste en mejorar la malla. Esto es igual a reducir el tamaño del elemento suficientemente para garantizar que las interpolaciones lineales dentro de elementos vecinos puedan capturar adecuadamente rápidos cambios espaciales en las variables de campo. Sin embargo, un inconveniente de este enfoque es que el número de elementos y nodos aumenta enormemente, a menudo

haciendo prohibitivo el coste computacional. Esto se aplica en particular a la simulación del moldeo por inyección en la que las dimensiones de la pieza, tales como el espesor y la longitud, pueden diferenciarse en dos órdenes de magnitud o más y en la que los gradientes espaciales mayores de las variables de campo se encuentran a lo largo de la dimensión espacial más pequeña, a saber, el espesor.

5 Una alternativa es utilizar elementos con funciones de forma de orden superior, tales como funciones polinómicas. Las funciones de forma de orden superior permiten interpolaciones no lineales de las variables de campo dentro de un elemento, con la posibilidad de que se requieran menos elementos. Sin embargo, aumenta el número de nodos requeridos para definir las funciones de forma de orden superior dentro de estos elementos y, por consiguiente, el sistema de ecuaciones todavía es prohibitivamente grande.

10 En consecuencia, se ha determinado que ciertas suposiciones y funciones de modelización pueden emplearse solas, o en combinación, para aumentar significativamente la exactitud de la simulación, sin aumentar sustancialmente el número de nodos, con un efecto perjudicial concomitante sobre el tiempo o los recursos de cálculo.

15 En tanto que la simulación del proceso de moldeo por inyección conlleva un esfuerzo computacional importante, en la figura 1 se representa un aparato 10 de hardware informático adecuado para su uso con los métodos descritos para modelar la inyección de fluido en una cavidad de molde según esta invención. El aparato 10 puede ser un ordenador portátil, un miniordenador u otro ordenador adecuado que tenga la velocidad computacional necesaria y la capacidad para soportar la funcionalidad tratada más en detalle a continuación en el presente documento. El ordenador 20 10 normalmente incluye una o más unidades 12 centrales de tratamiento para ejecutar las instrucciones contenidas en el código del software que integra el modelo de simulación. Se proporciona una memoria 14, tal como una memoria de acceso aleatorio y una memoria de sólo lectura, para retener el código del modelo, o bien temporal o bien permanentemente, así como otro software operativo requerido por el ordenador 10. Normalmente se utiliza una memoria de lectura / escritura permanente, no volátil tal como discos duros para almacenar el código, tanto durante su uso como 25 en el tiempo inactivo, y para almacenar los datos generados por el software. El ordenador 10 también incluye una o más entradas 16, tales como un teclado y un lector de discos, para recibir entradas tales como los datos e instrucciones procedentes de un usuario, y una o más salidas 18, tales como un monitor o impresora para proporcionar los resultados de la simulación en formato gráfico u otros formatos. Adicionalmente, se proporcionan buses de comunicación y puertos E/S (entrada-salida) para unir todos los componentes entre sí y permitir la comunicación con otros ordenadores y 30 redes de ordenadores, según se desee.

La figura 2 es una representación esquemática de un diagrama de flujo, sumamente simplificado, de un sistema de nivel superior que resume ciertas etapas del proceso según una realización de la presente invención. En una primera 35 etapa 20, se genera o proporciona un modelo tridimensional sólido mediante diseño asistido por ordenador de la cavidad del molde, tal como se trató anteriormente. Entonces, en la etapa 30, se define el dominio de soluciones del modelo y se discretiza mediante cualquiera de una variedad de métodos, tales como un análisis de elemento finito en el que se produce un modelo de elemento finito generando una malla de elementos finitos basada en el modelo sólido. La malla consiste en una pluralidad de elementos sólidos contiguos definidos mediante nodos compartidos. 40 Con el modelo de elemento finito resultante u otro dominio de soluciones discretizado definido, en la etapa 40, un usuario especifica las condiciones de contorno para el análisis. Estas condiciones de contorno, a título de ejemplo, pueden incluir limitaciones geométricas y valores numéricos relativos a la composición del fluido, localización de la inyección de fluido, temperatura de inyección de fluido, presión de inyección de fluido, velocidad volumétrica de flujo de inyección de fluido, temperatura del molde, dimensiones de la cavidad, configuración de la cavidad, plano de 45 separación del molde, y otros datos iniciales de diseño. Además, estas condiciones pueden no ser valores constantes, sino en su lugar perfiles distribuidos o dependientes del tiempo. Por ejemplo, la presión de inyección puede variar con el tiempo o la temperatura del molde puede ser diferente en distintas zonas, como resultado de un análisis mediante enfriamiento o un enfriamiento activo anterior.

50 Una vez que se han introducido las condiciones de contorno, en la etapa 50, el ordenador 10 ejecuta las instrucciones según el modelo de simulación para calcular o resolver, en primer lugar, las variables del proceso de la fase de llenado relevantes para los nodos. Tal como se tratará en gran detalle a continuación en el presente documento, con respecto al diagrama de flujo de la fase de llenado representado en la figura 24, tales variables pueden incluir fluidez, tiempo de llenado de la cavidad del molde, presión, velocidad de cizallamiento, tensión, velocidad, viscosidad y temperatura. Además, lo que se puede calcular no se limita a estas variables; sin embargo, éstas son variables 55 básicas que se pueden utilizar para resolver otras variables incluidas en los cálculos de materias tales como la cinética de cristalización y las distribuciones de orientación de fibras. Además, el llenado se puede resolver también como un fluido compresible, en cuyo caso los términos másicos incluidos en los cálculos de la fase de relleno (por ejemplo, densidad, masa y contracción volumétrica) se pueden calcular también en la fase de llenado. Según una realización, la simulación se puede basar en la suposición de que el fluido es incompresible en la fase de llenado y compresible en la fase de relleno. Según otra realización, se puede suponer que el fluido es compresible en ambas fases de llenado y relleno. Además, tal como se tratará con más detalle a continuación con respecto a las figuras 24 y 25, no es obligatorio despejar la fluidez antes de la presión, velocidad y viscosidad, ni es necesario despejar la fluidez en absoluto. Generalmente, esto sólo se requiere cuando se utiliza un método tal como el que trata Nakano para resolver las ecuaciones 65 de conservación de la masa y la cantidad de movimiento. La conservación de la masa y la cantidad de movimiento se pueden resolver también utilizando formulaciones tales como las de Stokes y Navier-Stokes. En consecuencia, los principios presentados en el presente documento tienen aplicación en todas estas descripciones del proceso físico, tales como la de Nakano, Stokes y Navier-Stokes.

ES 2 206 303 T3

Una vez que la simulación alcanza la fase del análisis en la que se determina que se ha llenado la cavidad del molde, en la etapa 60, el ordenador 10 ejecuta las instrucciones según el modelo de simulación para calcular o resolver después las variables del proceso de la fase de relleno relevantes para los nodos. Tal como se tratará en gran detalle a continuación en el presente documento con respecto al diagrama de flujo de la fase de relleno representado en la figura 25, tales variables pueden incluir las propiedades másicas del componente producido según el modelo de simulación, tales como la densidad y contracción volumétrica, además de fluidez, tiempo de relleno, presión, velocidad de cizallamiento, tensión, velocidad, viscosidad y temperatura.

Tras la finalización del análisis, los resultados analíticos se pueden producir en la etapa 70 de una variedad de maneras. Por ejemplo, las variables relevantes se pueden visualizar en un formato gráfico, superponiéndolo al modelo sólido para la revisión visual por el usuario o se pueden producir electrónicamente para un tratamiento o análisis adicional. Si los resultados de la fase de llenado y la fase de relleno se consideran aceptables en la etapa 80, la simulación termina en la etapa 100 y el usuario puede continuar para liberar el diseño a la fabricación. Debido a que las condiciones de contorno especificadas incluyen información relacionada con la configuración del molde de inyección y los parámetros del proceso, el diseño se puede liberar para el mecanizado del molde de inyección y las hojas de operaciones del proceso de moldeo por inyección se generan directamente.

Sin embargo, si el usuario determina que los resultados de la simulación en la etapa 70 son inaceptables o menos que óptimos, el usuario tiene la opción en la etapa 90 de modificar una o más de las condiciones de contorno y/o la discretización del dominio de soluciones del modelo y posteriormente repetir las etapas 50 a 70 de la simulación iterativamente, hasta un momento tal en el que el usuario esté satisfecho con los resultados. Ejemplos de resultados inaceptables incluyen inestabilidad analítica del modelo o fallos del proceso, tales como cargas de inyección cortas, en las que la cavidad del molde se llena de manera incompleta, o generación de temperaturas, velocidades o presiones excesivas durante el llenado, que podrían degradar las propiedades del material polimérico del componente o introducir tensiones residuales excesivas en los componentes, que afectarían desfavorablemente a los rendimientos de producción y podrían conducir a un fallo prematuro del componente. Proporcionando esta capacidad de simulación analítica sumamente exacta inicialmente en el proceso de diseño, se pueden evitar costes y retrasos significativos aguas abajo durante las fases de producción iniciales.

Antes de observar las etapas del proceso de los diagramas de flujo de la fase de llenado y la fase de relleno de las figuras 24 y 25, puede ser ventajoso desarrollar la teoría y base subyacente para ciertos enfoques tomados en él.

Tal como se trató anteriormente en el presente documento, ciertas limitaciones de las técnicas convencionales de modelización tridimensional del moldeo por inyección se refieren a los grandes gradientes de temperatura, el movimiento de los límites de la interfase sólido / líquido, las grandes variaciones de las propiedades del material durante la solidificación y la solidificación de material fundido durante el moldeo. Agrupadas en términos generales, se han identificado aproximadamente cinco metodologías innovadoras relacionadas con la aplicación ventajosa de los principios de conservación de la energía, que ofrecen mejoras sustanciales en la exactitud y/o el tiempo de cálculo predictivos. La primera es el uso de una función analítica unidimensional para describir la distribución de temperatura local en un nodo. La siguiente es la definición de la variación de una función analítica unidimensional, con el tiempo, para explicar la convección calorífica. La tercera se refiere a la descripción de la variación de una función analítica unidimensional para explicar la generación de calor viscoso. La siguiente conlleva la descripción de un esquema explícito de convección de temperatura utilizando la función analítica unidimensional. Y la quinta trata de la mejora de la malla de elementos finitos, lo que incluye un algoritmo de cálculo de la distancia hasta de la pared de la cavidad. Aunque el reconocimiento y la aplicación de los principios de conservación de la energía a la modelización de la simulación del moldeo por inyección se han clasificado en el presente documento en cinco áreas generales, éstas no deben interpretarse como limitantes o no, y se están presentando de esta manera solamente con fines de claridad.

Observando primero el uso de una función analítica unidimensional para describir la distribución de temperatura local en un nodo, en cualquier punto de tiempo durante el llenado y relleno del molde, existe una distribución de temperatura entre cualquier punto interior dado dentro del material en la cavidad y esa parte de la pared del molde, en las inmediaciones del punto interior. En general, la distribución de temperatura se puede tomar a lo largo de una línea que es la distancia, d , más corta entre el punto interior y la pared del molde. Véase, por ejemplo, la figura 3A. La figura 3B es una representación esquemática del perfil de temperatura en el fluido a lo largo de una línea que une un punto interior de la cavidad del molde y la pared del molde, como una función de distancia, d , desde la pared del molde.

Se puede utilizar una variedad de funciones analíticas o funciones discretas para describir la distribución de temperatura. Según una realización, se puede utilizar una formulación de función de error, debido a su significación física en la solución de transferencia de calor por conducción en un sólido semiinfinito. Según la invención, cualquiera y cada punto interior se trata como si fuera parte del dominio de un sólido semiinfinito. Cada punto se trata independientemente de cada uno de los demás puntos. Se utiliza la ecuación para la conducción calorífica en un sólido semiinfinito, con modificación, para proporcionar un mejor cálculo aproximado de la distribución de temperatura local en un punto de la cavidad, en todas las localizaciones y tiempos durante el proceso de moldeo por inyección y con respecto a todos los mecanismos significativos de transferencia de calor.

La distribución de temperatura en un sólido semiinfinito varía con el tiempo y la distancia desde los límites finitos. En esta aplicación, los límites finitos se pueden definir como la pared de la cavidad del molde. Cuando la temperatura

ES 2 206 303 T3

en los límites finitos de un sólido semiinfinito, inicialmente a una temperatura uniforme, T_{∞} , cambia instantáneamente a otra temperatura, T_w , la distribución de temperatura en el sólido varía con la distancia desde la pared y con el tiempo de acuerdo con la siguiente función:

$$T = T_w + (T_{\infty} - T_w) \operatorname{erf} (d/2 \sqrt{\alpha t}) \quad (7)$$

en la que:

10 erf = función de error;
 d = distancia desde la pared;

15 t = tiempo;

T_{∞} = temperatura a distancia infinita desde la pared;

20 T_w = temperatura de la pared; y

α = difusividad térmica del sólido.

Véase, por ejemplo, Transport Phenomena, de R.B. Bird, W.E. Stewart y E.N. Lightfoot, publicado por John Wiley & Sons, 1960.

25 Se ha encontrado que esta función tiene varias propiedades útiles en la aplicación a la simulación del moldeo por inyección. Por ejemplo, puede capturar la variación espacial y temporal de la temperatura a distancias y tiempos tanto cortos como largos. Es una forma sencilla y se calcula fácilmente. Hay pocos parámetros ajustables. Tiene significación física, puesto que la conducción calorífica es un mecanismo principal de la transferencia de calor, y en tiempos de contacto cortos, la ecuación es una aproximación próxima a la solución para un bloque finito, esto es, para un sólido encerrado entre paredes en ambos lados, similar a la situación en la cavidad del molde.

30 Esta función se puede utilizar ventajosamente para mejorar la exactitud en la temperatura local, porque durante periodos de tiempo cortos, la distribución de temperatura es sumamente no lineal sobre una distancia relativamente grande durante el moldeo por inyección. Puesto que generalmente es deseable mantener relativamente bajo el número de nodos y elementos, con el fin de reducir los costes computacionales, las dimensiones del elemento son relativamente grandes comparado con la geometría de la cavidad local que se está modelando. Además, los elementos tienen funciones de formas lineales. Por consiguiente, no pueden describir adecuadamente la variación de temperatura en circunstancias en las que la distribución de temperatura es sumamente no lineal. Esta formulación de función de error puede describir tal distribución no lineal de temperatura.

35 En su aplicación, esta función se puede definir para cada y todo nodo interior en el dominio tridimensional. Los parámetros de la ecuación para cada nodo se definen por separado para cada nodo. Véase, por ejemplo, la figura 4, que muestra esquemáticamente la asociación de una función analítica unidimensional para la distribución de temperatura en cada punto, i , dentro de una cavidad de molde. Se muestran tres puntos.

40 La siguiente metodología innovadora se refiere a la definición de la variación de una función analítica unidimensional, con el tiempo, para explicar la convección calorífica. El uso de la ecuación de la función de error en la forma presentada anteriormente en el presente documento, en ciertas circunstancias puede no ser suficiente para modelar adecuadamente la variación única de la temperatura de un fluido durante el moldeo por inyección. En un sentido estricto, se pretende que se aplique la ecuación de la función de error a un fluido que es semiinfinito en extensión y estacionario. Sin embargo, en una aplicación real de moldeo por inyección, el fluido es finito en extensión, estando encerrado entre paredes de cavidad, y el fluido está en movimiento durante la mayor parte del proceso. En particular, el movimiento del fluido introduce otro mecanismo significativo de transferencia de calor, a saber, la convección, cuya contribución debe incluirse en el análisis global de la conservación de la energía para mejorar la exactitud predictiva de la simulación.

45 Se considera el proceso físico de moldeo por inyección. El contacto material permite que continúe la conducción calorífica, que, en ausencia de otros mecanismos de transferencia de calor, se describe adecuadamente mediante la ecuación de la función de error a tiempos cortos. Sin embargo, la transferencia de calor convectivo se superpone a este mecanismo. La transferencia de calor convectivo tiene el efecto de retrasar la pérdida de calor por conducción, puesto que el moldeo por inyección lleva continuamente material caliente desde aguas arriba hasta cualquier punto en consideración durante la fase de llenado.

65 Obsérvese que la ecuación de la función de error incluye un término para el tiempo. En consecuencia, se ha determinado que una manera de tratar la entrada térmica es considerar que la transferencia convectiva de calor tiene el efecto de retrasar el paso de tiempo para la conducción en cualquier punto en consideración. Así que mientras que el tiempo de reloj global real avanza a una velocidad constante, que describe el paso del tiempo de inyección desde el

ES 2 206 303 T3

llenado hasta el relleno, puede considerarse que cada nodo porta su propio reloj térmico nodal, que varía localmente y no avanza normalmente a la misma velocidad que el reloj global.

5 Por ejemplo, si el fluido en un punto interior de la cavidad es estacionario, entonces mientras que esto sea cierto, el reloj térmico nodal marca el tiempo a la misma velocidad que el reloj global. Sin embargo, si el fluido en un nodo interior se mueve muy rápidamente de modo que domina la transferencia de calor por convección, entonces cualquier pérdida de calor local por conducción se contrarresta totalmente mediante la entrada de calor debida a la convección. En este caso, el reloj térmico nodal es estacionario, no avanza en absoluto, incluso cuando el reloj global ha avanzado.

10 En el caso en el que el flujo es intermedio, de modo que no domina ni la conducción ni la convección, entonces el reloj térmico nodal para un nodo arbitrario, i , puede incrementarse de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$t_i^k = t_i^{k-1} + \exp(-F_{pe} Pe_i) \Delta t \quad (8)$$

15 en la que:

t_i^k = tiempo del reloj térmico nodal utilizado en la ecuación de la función de error para el nodo i en una etapa k de tiempo;

20 t_i^{k-1} = tiempo del reloj térmico nodal utilizado en la ecuación de la función de error para el nodo i en una etapa $k-1$ de tiempo previa;

25 Pe_i = número de Peclet para el nodo i ;

F_{pe} = parámetro de sintonía; y

Δt = incremento del reloj de tiempo global.

30 y en la que además:

$$Pe_i = d_i \cdot v_i / \alpha_i \quad (9)$$

35 en la que:

d_i = distancia desde la pared del nodo i ;

40 v_i = velocidad local del nodo i ; y

α_i = difusividad térmica del nodo i .

45 Mientras que podrían utilizarse varias ecuaciones para describir el avance de tiempo del reloj térmico nodal, se seleccionó esta ecuación empírica debido a que tiene las propiedades deseadas. En particular:

Cuando $v \rightarrow 0$, $\exp(-F_{pe} Pe) \Delta t \rightarrow \Delta t$;

Cuando $v \rightarrow \infty$, $\exp(-F_{pe} Pe) \Delta t \rightarrow 0$;

50 Cuando $\alpha \rightarrow 0$, $\exp(-F_{pe} Pe) \Delta t \rightarrow 0$; y

Cuando $\alpha \rightarrow \infty$, $\exp(-F_{pe} Pe) \Delta t \rightarrow \Delta t$.

55 La constante de parámetro de sintonía F_{pe} se halla sintonizando los resultados de la simulación a los datos experimentales. Los datos pueden ser datos de distribución de temperatura explícita procedentes de los experimentos de moldeo por inyección o datos indirectos, tales como medidas de presión de inyección. Se ha determinado que la constante F_{pe} se puede fijar generalmente en el intervalo de entre aproximadamente cero y uno.

60 Aún otra metodología innovadora trata de la variación de una función analítica unidimensional para explicar la generación de calor viscoso. Puesto que el movimiento del fluido requiere trabajo mecánico, los principios termodinámicos requieren se añada también calor al sistema a través de este trabajo. En el caso de movimiento de fluido, este trabajo toma la forma de calor generado por fricción o disipación viscosa. El calor generado por fricción varía con el tiempo por todo el interior de la cavidad del molde durante el moldeo por inyección. En cualquier periodo de tiempo, esta contribución de energía térmica viene dada por el producto de la tensión de cizallamiento local por la velocidad de cizallamiento local durante ese periodo de tiempo. Se ha determinado que esta contribución térmica tiende a ser más significativa en las inmediaciones de límites sólido / fluido, en los que la viscosidad es elevada, debido a la temperatura relativamente baja próxima al material congelado, y la tensión es elevada, debido al movimiento de este fluido viscoso.

ES 2 206 303 T3

El calor generado por fricción debe considerarse como una fuente calorífica local, que varía con el tiempo, en cada punto de la cavidad. Esta adición local de calor no puede explicarse mediante la ecuación de la función de error referida anteriormente en su forma estándar. Hasta este punto, no existe ningún mecanismo que aumente la temperatura del fluido en la descripción funcional por encima del valor máximo definido mediante el valor de T_{∞} ; mientras, en los ensayos de inyección, se ha determinado que la temperatura del fluido próximo a los límites sólido / líquido puede sobrepasar no sólo T_{∞} , sino también la temperatura del fluido en el punto de inyección dentro de la cavidad del molde.

En consecuencia, para modelar exactamente la temperatura del fluido en la cavidad en una simulación, debe considerarse en el análisis el calor generado por fricción. Cuando se hace esto, puede suceder que la temperatura local, incluso tras la convección y la conducción, haya aumentado por encima de T_{∞} . Este cambio de temperatura se puede adaptar ajustando la temperatura de campo lejano, T_{∞} , en cada etapa de tiempo. El ajuste se realiza recalculando T_{∞} al final de cada etapa de tiempo en la simulación, por ejemplo, sustituyendo la temperatura nodal calculada tras la resolución de la ecuación de energía, en la ecuación de la función de error y derivando un nuevo valor de T_{∞} en cada nodo, i , en la cavidad, tal como sigue:

$$T_{\infty i} = T_{wi} + \frac{(T_i - T_{wi})}{\text{erf}(d_i/2 \sqrt{\alpha_i t_i})} \quad (10)$$

Por tanto, para cualquier nodo interior, existe un mecanismo para describir la distribución de temperatura local unidimensional y su variación en el espacio y en el tiempo. Esto permite el uso de una aproximación mejor que una simple interpolación lineal, o incluso una interpolación polinómica de orden superior permitida por la función de forma del elemento. La nueva función se puede utilizar para mejorar de manera espectacular la exactitud de los cálculos de transferencia de calor convectivo y para calcular la posición de la interfase sólido / líquido en cualquier tiempo durante el proceso de moldeo por inyección.

La figura 5 es una representación esquemática, en forma de diagrama de flujo, de las etapas implicadas en la solución de temperatura global durante un incremento de tiempo total, Δt , según una realización de la invención, cuyos detalles se tratarán de manera más completa a continuación en el presente documento. En una primera etapa se calcula la contribución de transferencia de calor convectivo durante el incremento de tiempo. Luego, en la etapa 25, se calcula la contribución de transferencia de calor por disipación viscosa. Posteriormente, en la etapa 35, se resuelve la ecuación de energía total, teniendo en cuenta la conducción calorífica durante el incremento de tiempo. Entonces, se actualiza la temperatura T_{α} para cada nodo y los resultados están disponibles para su uso en la resolución de la ecuación de la cantidad de movimiento, determinando la evolución del frente de flujo durante la fase de llenado y cuantificando la variación de la propiedad del material, tal como se tratará en mayor detalle a continuación en el presente documento.

Un área adicional a la que se ha dirigido mediante la invención actual se ocupa de la descripción de un esquema explícito de convección de temperatura utilizando una función analítica unidimensional. La resolución de la ecuación de conservación de la energía para el moldeo por inyección requiere, en parte, el cálculo de la contribución de la convección al proceso global de transferencia de calor. Mientras que se han considerado varios mecanismos para tratar la transferencia de calor convectivo, según una realización de la invención, se utiliza un esquema explícito en el que se calcula individualmente la contribución al cambio de temperatura en cada nodo.

Puesto que un esquema explícito conlleva el hallazgo del punto aguas arriba que fluirá hasta un nodo objetivo en un incremento de tiempo dado y la interpolación de la temperatura en ese punto aguas arriba, se puede utilizar la función analítica unidimensional descrita anteriormente para proporcionar una interpolación bastante más exacta de la temperatura en el punto aguas arriba que si no se utiliza. Se emplea una interpolación lagrangiana para determinar los términos aguas arriba, también conocidos como los términos de advección. Se puede utilizar el mismo mecanismo para resolver tanto la advección de temperatura (convección), requerida para la resolución de la ecuación de energía, y la advección de materia (concentración) requerida para la resolución de la posición de la superficie libre o el frente de flujo dentro de la cavidad del molde durante la fase de llenado.

Los números de Peclet para las ecuaciones de las funciones de energía y concentración son muy grandes e infinitos, respectivamente. Los métodos convencionales de elemento finito para simular esta característica o bien son inestables o bien tienden a incorporar un grado inaceptable de difusión que acaba con la exactitud. Esto es debido a que los métodos convencionales de cálculo por mínimos cuadrados son maneras poco naturales de tratar el problema. Se ha determinado que la manera natural de tratar las ecuaciones diferenciales hiperbólicas es seguir la función a lo largo de sus características. En el caso de flujo de fluido en el contexto de moldeo por inyección, esto se traduce en seguir la trayectoria de una "partícula" arbitraria en el continuo.

Otro objeto del algoritmo es, dado cualquier punto en un dominio tridimensional (en particular, un nodo), utilizar el campo de velocidad para rastrear el origen de la partícula que ahora ocupa el nodo, durante la última etapa de tiempo. En otras palabras, el concepto es mirar aguas arriba para observar dónde estaba la partícula, que ahora ocupa el nodo, un incremento de tiempo antes. Una vez que se ha determinado el origen, se puede realizar una interpolación para determinar el valor de la función de concentración o la temperatura allí, en el punto aguas arriba. Entonces, dado este

ES 2 206 303 T3

valor, se puede actualizar exactamente el valor en el nodo en consideración en el incremento de tiempo presente.

Ahora con referencia a la figura 6, empezando con un nodo, el vector de velocidad es tal como se muestra en el nodo A. Sin pérdida de generalidad, los elementos de las figuras se representan como triángulos, en lugar de tetraedros,
 5 de modo que se facilite la representación; sin embargo, tal como se estableció anteriormente en el presente documento, los elementos pueden comprender también hexaedros u otras formas de elemento adecuadas, dependiendo del método de malla utilizado y de la configuración del modelo.

Una revisión rápida de la figura sugiere que la partícula que actualmente ocupa el nodo A proviene del triángulo que
 10 tiene la cara L opuesta. Sin embargo, un algoritmo reconoce esto mediante pruebas para ver qué triángulo / tetraedro satisface todos los criterios requeridos. La prueba debe ser computacionalmente rápida. Esta parte de los cálculos, de determinar cuál de los triángulos / tetraedros circundantes es el correcto, se realiza en la subrutina *upwelm1.F*, tratada a continuación en el presente documento.

Una vez que se registra el triángulo / tetraedro correcto, puede ser que la partícula provenga de más allá de la
 15 cara L. Esto se puede confirmar comparando el tamaño de la etapa de tiempo actual con el tiempo requerido para que una partícula atravesase el triángulo / tetraedro partiendo de la cara L. Si se necesita que la búsqueda se extienda más allá de L en un triángulo / tetraedro contiguo, la subrutina *upwelm1.F*, también tratada a continuación en el presente documento, determina el triángulo / tetraedro vecino correcto y reorganiza en consecuencia los valores de la función
 20 de forma local. En un ejemplo de triángulo, se supone que el sistema de funciones de forma en L es [0,2, 0,8, 0,0]. Entonces, si el orden de los números nodales en L se invierten en el elemento contiguo, el sistema de funciones de forma se convierte en [0,8, 0,2, 0,0], suponiéndose que el tercer nodo y A son ambos los últimos nodos de los elementos, ergo el valor de 0,0 en la cara L.

El siguiente asunto se representa esquemáticamente en la figura 7. Se calcula la velocidad en la posición pertinente
 25 en L y se utiliza para determinar a partir de qué cara se podría originar una partícula con esa velocidad. Esto se calcula en la subrutina *upwelm2.F*, tratada a continuación. Debe observarse que la principal diferencia entre *upwelm1.F* y *upwelm2.F* es que en la primera la búsqueda es desde un nodo para el elemento aguas arriba de los elementos conectados, mientras, en ésta última, la búsqueda es desde una cara para la cara aguas arriba dentro del mismo elemento.
 30 Obsérvese también que si la partícula proviene de más allá de la cara opuesta, entonces tras reorganizar la numeración en *contig.F*, todas las búsquedas adicionales se pueden llevar a cabo en *upwelm2.F*.

Tanto la subrutina *upwelm1.F* como la *upwelm2.F* surgen de la relación fundamental entre las coordenadas locales
 35 y globales:

$$x - x_4 = J \bullet L \tag{11}$$

Las letras se resaltan en negrita para indicar un vector (x, L) o una matriz (J), en la que: x es cualquier vector de
 40 posición global (coordenadas); L es el vector de coordenadas local; J es el Jacobiano de la transformación entre dos sistemas de coordenadas; y x_4 es la localización del cuarto nodo del elemento en el sistema de coordenadas global.

La subrutina *upwelm1.F* se puede describir tal como sigue, con referencia a la figura 8. Partiendo del nodo A, es
 45 deseable hallar la primera interceptación corriente arriba con una faceta del elemento o la localización corriente arriba dentro del elemento si la etapa de tiempo no es suficiente para alcanzar la faceta. Se conoce la velocidad en A, tal como se representa en la figura 8.

En un primer caso, se supone que el nodo A es el cuarto nodo en el orden de nodos del elemento del tetraedro
 50 mostrado en la figura. Esto da como resultado:

$$L = J^{-1} \bullet (x - x_4) \tag{12}$$

La siguiente etapa es hallar donde intercepta la trayectoria de la partícula el plano (infinito) definido por la faceta
 55 opuesta al nodo A. Obsérvese que debe haber una interceptación en algún sitio, a menos que la velocidad sea paralela al plano. Una posición x está sobre la trayectoria de la partícula si

$$x = x_4 - kv \tag{13}$$

En esta fórmula, k es el tiempo aguas arriba de x_4 . Sustituyendo la ecuación (13) en la ecuación (12), las coordena-
 60 das locales de esta posición x son:

$$L = J^{-1} \bullet (-kv) \tag{14}$$

La trayectoria intercepta el plano donde $L_4 = 0$, por lo tanto:

ES 2 206 303 T3

$$\sum_{j=1}^3 L_j = 1 \quad (15)$$

5 Ampliando esto da como resultado:

$$10 \quad -K \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 J_{ij}^{-1} v_j = 1 \quad (16)$$

Haciendo k el objeto de la fórmula:

$$15 \quad K = \frac{-1}{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 J_{ij}^{-1} v_j} \quad (17)$$

20 Para que esta faceta sea un candidato, k debe ser positivo (es decir, una faceta aguas arriba del nodo A) y finito. Un valor infinito implica que la velocidad es paralela a la cara L opuesta. Si k es positivo y finito, la siguiente etapa es comprobar si la interceptación con el plano de la faceta está dentro de los límites de la faceta. Esto es cierto si y sólo si todos de los tres componentes de L asociados con los nodos de la faceta no son negativos. Entonces, se pueden calcular los componentes sustituyendo k de la ecuación (17) en la ecuación (14).

25 En un segundo caso, se supone que A no es el cuarto nodo, sino algún nodo m , en el que m es cualquiera de 1, 2 ó 3. Entonces, la interceptación de la trayectoria con el plano de la faceta opuesta A se produce donde $L_m = 0$. Se supone que esto es en alguna posición x de modo que:

$$30 \quad x = x_m - kv \quad (18)$$

35 Insertando la ecuación (18) en la ecuación (12) y considerando el m -ésimo nodo (la notación utiliza m para describir el número de nodo local y global), da como resultado:

$$40 \quad L_m = \sum_{j=1}^3 J_{mj}^{-1} (x_m^j - kv_j - x_4^j) = 0 \quad (19)$$

45 El superíndice en x indica la componente de las coordenadas (por ejemplo, $x^2 \equiv y$ y $x^3 \equiv z$). Haciendo k el objeto de la fórmula da como resultado:

$$50 \quad K = \frac{\sum_{j=1}^3 J_{mj}^{-1} (x_m^j - x_4^j)}{\sum_{j=1}^3 J_{mj}^{-1} v_j} \quad (20)$$

55 Para que esta faceta sea un candidato, k debe ser positivo (es decir, una faceta aguas arriba del nodo A) y finito. Un valor infinito implica que la velocidad es paralela a la cara L opuesta. Si k es positivo y finito, la siguiente etapa es comprobar si la interceptación con el plano de la faceta está dentro de los límites de la faceta. Esto es cierto si y sólo si todos de los tres componentes de L asociados con los nodos de la faceta no son negativos. Entonces, se pueden calcular los componentes sustituyendo k de la ecuación (20) en la ecuación (14).

60 Tras hallar la faceta correcta, la siguiente etapa es determinar si el punto corriente arriba está todavía más aguas arriba, comparando k en la interceptación con la etapa de tiempo Δt . Si se necesita estar más corriente arriba, se transfiere el control a la subrutina *contig.f* para que halle el elemento vecino a la nueva faceta de interceptación y se fija el *opface* lógico como verdadero, listo para transferir el control a la subrutina *upwel2.F*. Sin embargo, si el punto corriente arriba está dentro del elemento actual, se pueden determinar las coordenadas locales utilizando Δt en lugar de k en la ecuación (4), en cuyo caso el *opface* se deja como falso.

65 La subrutina *upwel2.F* se puede describir tal como sigue, con referencia a la figura 9. En primer lugar, se calcula la velocidad local, v , en la interceptación x_i actual, mediante interpolación en la faceta L. Debido a que se ha utilizado algo de tiempo en alcanzar L desde el nodo A original, sólo queda algún tiempo Δt_{rem} de la etapa de tiempo Δt original.

ES 2 206 303 T3

Hay tres facetas candidatas que se comprueban haciendo pruebas de la interceptación de la trayectoria con cada uno de sus planos. Esto se puede realizar fijando $L_i = 0$ para cada nodo de la faceta actual, nodos a, b y c en la figura 9.

Una posición x está sobre la trayectoria si:

$$x = x_1 - kv \quad (21)$$

Por tanto, las coordenadas locales de los puntos sobre la trayectoria son:

$$L = J^{-1} \bullet (x_1 - kv - x_4) \quad (22)$$

Las ecuaciones de más adelante se utilizan para cada nodo a, b, c, por turnos. Por simplicidad, se supone que los siguientes casos son para probar la faceta solamente opuesta al nodo a. En un primer caso, se supone que el nodo a es el cuarto nodo en el orden de nodos del elemento del tetraedro mostrado en la figura F. Se fija $L_4=0$ para hallar la interceptación con el plano de la faceta. Esto implica la ecuación (15), que se amplía utilizando la ecuación (22) para dar:

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 J_{ij}^{-1} (x_1^j - kv_j - x_4^j) = 1 \quad (23)$$

Resolviendo esto para k da como resultado:

$$K = \frac{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 J_{ij}^{-1} (x_1^j - x_4^j) - 1}{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 J_{ij}^{-1} v_j} \quad (24)$$

En un segundo caso, se supone que a no es el cuarto nodo, sino algún nodo m , en el que m es cualquiera de 1, 2 ó 3. Entonces, la interceptación de la trayectoria con el plano de la faceta opuesta al nodo a se produce donde $L_m = 0$. Sustituyendo esto en la ecuación (22), da como resultado:

$$\sum_{j=1}^3 J_{mj}^{-1} (x_1^j - kv_j - x_4^j) = 0 \quad (25)$$

Resolviendo esto para k da como resultado:

$$k = \frac{\sum_{j=1}^3 J_{mj}^{-1} (x_1^j - x_4^j)}{\sum_{j=1}^3 J_{mj}^{-1} v_j} \quad (26)$$

Para determinar si esta faceta es válida, se pueden realizar las mismas comprobaciones que las descritas anteriormente para *upwelm1.F*. Tras hallar la faceta correcta, la siguiente etapa es determinar si el punto corriente arriba está todavía más aguas arriba comparando k en la interceptación con Δt_{rem} . Si se requiere estar más corriente arriba, se puede transferir el control a la subrutina *contig.f* para que halle el elemento vecino a la nueva faceta de interceptación y se puede repetir el procedimiento anterior. En este caso, Δt_{rem} se puede decrementar apropiadamente. Sin embargo, si el punto corriente arriba está dentro del elemento actual, se pueden determinar las coordenadas locales utilizando Δt_{rem} , en lugar de k , en la ecuación (12), y entonces se puede salir de *upwelm2.F*.

Una vez que se ha identificado el punto aguas arriba que fluirá hasta un nodo objetivo en un incremento de tiempo dado, según los métodos descritos anteriormente, se necesita determinar la temperatura en ese punto aguas arriba. Un método exacto de determinar la temperatura del punto aguas arriba emplea una función analítica unidimensional, tal como se representa en las figuras 10A y 10B. Como anteriormente, se muestran elementos triangulares para la facilidad de visualización, pero el concepto se aplica a elementos tridimensionales, sin pérdida de generalidad.

En general, para cada nodo, se determina el punto aguas arriba respectivo que “fluirá” o será transferido por

ES 2 206 303 T3

convección hasta ese nodo en el incremento de tiempo requerido. Éste puede ser un punto en el elemento del que forma parte el nodo o puede ser un punto dentro de otro elemento separado cierta distancia. El punto aguas arriba puede o puede no coincidir con un nodo aguas arriba. Si no, se requiere interpolación para calcular aproximadamente la temperatura en el punto aguas arriba. Según un método, se pueden utilizar dos etapas.

5 En la primera etapa, se calcula aproximadamente la distancia a la pared de la cavidad del punto aguas arriba. Mientras que en esta realización se utiliza la pared como la superficie de referencia, en otras realizaciones se podrían utilizar otras referencias, tales como la superficie de la capa congelada, localmente. En la determinación de la distancia a la pared se podrían utilizar una variedad de métodos. Puesto que, en general, el punto aguas arriba no coincidirá con un nodo, se puede determinar su distancia a la pared mediante interpolación lineal de las distancias a la pared de todos los nodos del elemento que encierran el punto aguas arriba. Esta interpolación hace uso de la función de forma del elemento.

15 En la segunda etapa, se utiliza la función analítica unidimensional en cada uno de los nodos del elemento para proporcionar cálculos aproximados de la temperatura en el punto aguas arriba, sustituyendo la distancia a la pared del punto aguas arriba. La temperatura final en el punto aguas arriba se obtiene mediante la interpolación de los cálculos aproximados para los cuatro nodos, según la función de forma del elemento. Entonces, éste es el valor de temperatura que, en un incremento de tiempo dado, se transfiere por convección hasta el nodo en consideración.

20 En otra realización, la distancia a la pared y la función analítica unidimensional que describe la distribución de temperatura del punto aguas arriba se toman como el nodo más próximo en el elemento aguas arriba.

Aunque hay casos específicos que tratar, por ejemplo, si el punto aguas arriba es la localización de inyección, estos casos no le restan valor a la idea fundamental o uso de la función analítica unidimensional para calcular aproximadamente la temperatura.

25 Todavía otra metodología innovadora se refiere a una mejora de malla anisotrópica, que incluye un algoritmo de cálculo de la distancia a la pared de la cavidad del molde. La mejora de malla anisotrópica es un medio poderoso de aumentar la resolución en una cavidad de molde sin un aumento innecesario de la carga computacional durante la mejora. El proceso de mejora realizado divide los elementos tetraédricos existentes en tetraedros más pequeños. Sin embargo, el procedimiento sólo se aplica si está presente un número insuficiente de capas. Si están presentes capas suficientes para conseguir con exactitud la resolución de las variables, entonces no tiene lugar ninguna mejora. El algoritmo se ejecuta tal como sigue, según una realización de la invención.

35 Una malla tetraédrica existente se etiqueta con números de capa. En primer lugar, se etiquetan todos los nodos de la pared de la cavidad como capa cero. Luego, se etiquetan todos los nodos adyacentes a la capa cero como capa uno. Después, se etiquetan todos los nodos adyacentes a la capa uno como capa dos, y se repite con números de capa que aumentan sucesivamente hasta que se ha asignado un número de capa a todos los nodos. El fin es establecer cuántas capas pueden existir en cada región de la cavidad del molde y mejorar el número de capas requerido, sólo en aquellas regiones que lo necesiten.

45 En cada región para la que el número de capas sea insuficiente, se dividen los elementos tetraédricos. El proceso de división da como resultado elementos de mayor relación entre dimensiones que el tetraedro original. Por consiguiente, la malla mejorada se vuelve anisotrópica porque la relación entre dimensiones se separa significativamente de la unidad. Puesto que el proceso de división se produce entre capas sucesivas, la mejora se orienta hacia el aumento de la densidad de elementos y nodos en la dirección del espesor. Precisamente esto es lo que se necesita para aumentar la exactitud en las simulaciones puesto que, tal como se describió antes, las variables de campo varían más significativamente a través del espesor de la pieza. Las figuras 11 a 17 muestran posibles maneras en las que se puede dividir un tetraedro.

50 Más específicamente, la figura 11 es una representación esquemática de combinaciones para dividir la cara de un elemento tetraédrico. Todos los patrones para dividir elementos de los siguientes dibujos producen uno de los tres diseños sobre las caras del elemento representados en la figura 11. Se pueden mejorar una, dos o tres aristas. Si esto no fuera cierto, entonces no sería posible la continuidad de cara de malla durante la mejora. La figura 12 es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre una arista. La figura 13A es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre dos aristas adyacentes, lo que conlleva una primera división en dos elementos, uno de los cuales es una pirámide de base cuadrada, luego una división posterior de la pirámide en dos elementos tetraédricos, según el patrón representado en la figura 13B. Como regla general cuando se divide una pirámide de base cuadrada, se elige para dividir la diagonal de la base en la que está contenido el nodo con el número inferior de los cuatro nodos de la base. La figura 13C es un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre dos aristas opuestas. La primera división da como resultado dos elementos tetraédricos que requieren, cada uno, una división sobre una arista, utilizando el patrón apropiado.

65 La figura 14A es una representación esquemática de un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre tres aristas con una cara común compartida y la figura 14B es una representación esquemática para dividir un elemento tetraédrico sobre tres aristas con un nodo común. Esto último da como resultado un elemento tetraédrico y un elemento de prisma triangular, que se puede dividir según el patrón representado en la figura 14C. Obsérvese que el nodo A será el nodo con el número de nodo inferior de los seis nodos presentes. Esto garantiza que los dos cuadriláteros divididos en la

primera etapa se dividen por la diagonal que incluye el nodo inferior. Además, la primera etapa produce un elemento tetraédrico y una pirámide de base cuadrangular, que se puede dividir posteriormente. La figura 14D es un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre tres aristas en serie, del cual resultan dos posibles combinaciones dependiendo de qué nodos tengan el número de nodo inferior.

La figura 15A es un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre cuatro aristas opuestas. Una primera división simétrica da como resultado dos prismas triangulares, que a su vez se dividen tal como se representa en la figura 14C. La figura 15B es un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre cuatro aristas adyacentes. La división produce dos elementos tetraédricos y dos pirámides de base cuadrangular, que se pueden dividir utilizando el patrón apropiado y las reglas tratadas anteriormente en el presente documento.

La figura 16 es un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre cinco aristas, que da como resultado dos elementos tetraédricos, y un prisma triangular y una pirámide de base cuadrangular, los cuales puede ambos dividirse utilizando los patrones apropiados tratados anteriormente en el presente documento. Por último, la figura 17 es un patrón para dividir un elemento tetraédrico sobre seis aristas. Cortar un elemento tetraédrico de cada esquina tiene como resultado un cuerpo central con ocho caras triangulares. Dividir el cuerpo central por la mitad sobre un plano cuadrangular da como resultado dos pirámides cuadrangulares, que se pueden dividir adicionalmente según el patrón tratado anteriormente en el presente documento.

En referencia de nuevo a las capas, se ha determinado que un número óptimo de capas es seis y una relación entre dimensiones óptima es quince. Se pueden utilizar valores fuera de este intervalo, pero si disminuye el número de capas y aumenta la relación entre dimensiones, generalmente se reduce la exactitud. Por el contrario, si el número de capas aumenta y la relación entre dimensiones disminuye, el número de capas crece rápidamente y el coste computacional tiende a convertirse en prohibitivo.

Para calcular la distancia a la pared para cada nodo interno, se numeran los nodos según su capa y se construye un árbol como ayuda para hallar la localización de pared más próxima. El algoritmo avanza tal como sigue, según una realización de la invención.

En primer lugar, se etiquetan todos los nodos de la pared de la cavidad como capa cero. Luego, se etiquetan todos los nodos adyacentes a la capa cero como capa uno. Después, se etiquetan todos los nodos adyacentes a la capa uno como capa dos, y se repite con números de capa que aumentan sucesivamente hasta que se ha asignado un número de capa a todos los nodos. Posteriormente, para cada nodo, se construye un árbol de asociaciones nodales para todos los nodos conectados que tienen un número de capa inferior bajo la capa número cero, esto es, los nodos de pared. Luego, se proyecta el nodo objetivo sobre todas las caras formadas por los nodos de capa cero en el árbol. Se registra la distancia a la pared como la distancia más corta en el conjunto de posibles distancias. Este método tiene la ventaja de limitar el posible espacio de búsqueda para la distancia más corta. En el caso de que el nodo no pueda proyectarse sobre una cara formada por nodos con número cero de capa en su árbol, entonces se toma la distancia como la distancia hasta el nodo de capa cero más próximo.

Este algoritmo presenta en forma de diagrama en las figuras 18A y 18B. En la figura 18A, la numeración de las capas nodales y el árbol de conectividad limitan el espacio de búsqueda para la proyección del nodo objetivo en las caras "A" y "B", que es un conjunto mucho más pequeño que todas las caras posibles en una cavidad y, por tanto, es sumamente eficaz. En el caso representado en la figura 18B, en el que el nodo objetivo no se puede proyectar sobre la cara "A" o "B" en su árbol de conectividad, la distancia d , se toma hasta el nodo de pared más próximo. Tal como se trató anteriormente en el presente documento, se han conseguido mejoras significativas en la exactitud predictiva de la simulación no sólo mediante la consideración y aplicación de los principios de conservación de la energía, sino también mediante el tratamiento de la capa congelada o en solidificación que se forma próxima a la pared de la cavidad del molde. Las limitaciones de las técnicas convencionales de modelización tridimensional del moldeo por inyección a menudo se refieren a los grandes gradientes de temperatura, el movimiento de los límites de la interfase sólido / líquido, las grandes variaciones de las propiedades del material durante la solidificación y la solidificación de material fundido durante el moldeo.

Agrupadas en términos generales, se han identificado aproximadamente cinco metodologías innovadoras relacionadas con el tratamiento ventajoso del material solidificado, que ofrecen mejoras sustanciales en la exactitud predictiva y/o el tiempo de cálculo sobre métodos de simulación convencionales. La primera se refiere a la determinación de la posición de la interfase sólido / líquido. La siguiente es la formulación de elementos con una variación lineal de las propiedades del material en su totalidad. La tercera se refiere a la determinación de una función de viscosidad eficaz en elementos que contienen la interfase sólido / líquido. La siguiente conlleva la eliminación de nodos y elementos congelados del dominio de soluciones. Y la quinta trata el cálculo de la presión eficaz en regiones que han solidificado.

Observando en primer lugar la determinación de la posición de la interfase sólido / líquido, en un elemento a través del cual existe una interfase sólido / líquido, es decir en un elemento que contiene tanto una región sólida como una región líquida, las propiedades del material normalmente varían en varios órdenes de magnitud a lo largo de los límites de la interfase. En particular, la viscosidad en la región sólida (si fuese apropiado utilizar el término viscosidad) es prácticamente infinita, mientras que en la región líquida, la viscosidad es finita y relativamente pequeña. En consecuencia, los procedimientos sencillos convencionales de unión de elementos utilizados en el método de elemento finito darán como resultado una sobrestimación eficaz de la resistencia elemental a fluir, debido a que la

ES 2 206 303 T3

rigidez del elemento se orientará fuertemente hacia el valor de viscosidad elevado. Esto es cierto independientemente de cuánto del elemento esté congelado realmente. El resultado neto es la sobrepredicción de la caída de presión durante el flujo.

5 Según una realización de la invención, este problema se puede resolver haciendo uso de la función analítica unidimensional para la temperatura, para calcular más exactamente la posición de la interfase sólido / líquido y, entonces, definir una viscosidad nodal eficaz relacionada con la cantidad de material congelado en un elemento. La posición de la interfase se elige examinando la intersección del perfil de temperatura y la temperatura de solidificación del material polimérico. La temperatura de solidificación, T_s , define la transición entre los estados sólido y líquido.

10 El proceso se representa esquemáticamente en la figura 19. De nuevo, para facilidad de representación, se utilizan dos elementos bidimensionales, pero se puede aplicar el concepto innovador, sin pérdida de generalidad, a elementos tridimensionales. El dibujo muestra la determinación de la interfase sólido / líquido dentro de un elemento utilizando tanto la temperatura de solidificación, T_s , como las funciones analíticas unidimensionales para la distribución de temperatura en cada uno de los nodos líquidos.

La siguiente metodología innovadora se ocupa de la formulación de elementos con una variación lineal de las propiedades del material en la totalidad de cada elemento. La mayor parte de la práctica con elemento finito común da como resultado una discretización del dominio, de tal manera que las variables de campo se calculan en los puntos nodales y las propiedades del material requeridas para el análisis son constantes dentro de un elemento. Aunque esta técnica puede proporcionar resultados aceptables en ciertas aplicaciones menos rigurosas, según la invención, aplicando el método de elemento finito al flujo de fluido en el moldeo por inyección, se formulan las ecuaciones de tal manera que tanto las variables de campo (tales como la presión, temperatura, conductancia de flujo y velocidad) como las propiedades del material (tales como la viscosidad) se definen en los nodos y, a menos que se establezca lo contrario, se interpolan dentro de un elemento según la función de forma del elemento. De esta manera, la discretización proporciona exactitud adicional de cálculo y se ha encontrado que es particularmente ventajosa para interpolaciones avanzadas, de orden superior.

Por ejemplo, la ecuación para la conductancia de flujo facilitada por Nakano, que hace uso de la propiedad del material viscosidad, se puede describir como:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta \frac{\partial k}{\partial x_k} \right) = -1 \quad (27)$$

en la que el subíndice k es un índice 1, 2 ó 3 que denota cada dirección de coordenadas x , y y z , respectivamente.

Aplicando la integración ponderada de Galerkin sobre el elemento da:

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\eta^e \frac{\partial k^e}{\partial x_k} \right) N_i d\Omega_e = - \int_{\Omega_e} N_i d\Omega_e \quad (28)$$

en la que la conductancia de flujo y la viscosidad elemental, respectivamente, vienen dadas por:

$$\kappa^e = \sum_{j=1}^4 \kappa_j N_j \quad (29)$$

$$\eta^e = \sum_{j=1}^4 \eta_j N_j \quad (30)$$

y en las que Ω_e se refiere al volumen de un elemento, N_i es la función de forma del elemento en cada nodo del elemento i y el superíndice e es un índice de elementos.

Aplicando el teorema de divergencia da:

$$- \int_{\Gamma_e} \eta^e \frac{\partial k^e}{\partial x_k} n_k N_i d\Gamma_e - \int_{\Omega_e} \eta^e \frac{\partial k^e}{\partial x_k} \frac{\partial N_i}{\partial x_k} d\Omega_e = - \int_{\Omega_e} N_i d\Omega_e \quad (31)$$

en la que n_k es el vector normal en los límites Γ del elemento.

Se supone que el primer término desaparece durante la unión de los elementos en las caras internas del elemento debido a la contribución igual y opuesta de elementos adyacentes. Esto es cierto, puesto que la viscosidad del elemento, que se basa en una interpolación de valores nodales, coincidirá a lo largo de los límites entre dos elementos adyacentes. Además, se supone que los gradientes de conductancia de flujo son iguales en cada lado de los límites del elemento. Sólo el vector normal tiene signo opuesto en elementos adyacentes, lo que da como resultado que las contribuciones de elementos adyacentes se igualen a cero. En los límites de la cavidad en la región de llenado, no se necesita la integral de contorno cuando se aplica una condición de contorno de valor conocido ($\kappa = 0$). Sin embargo en el caso en el que se requiera deslizamiento de pared, también lo será el término de integral de contorno. En cualquier caso, el término de integral de contorno necesita evaluarse en los límites de la superficie libre y en los límites de inyección.

Las ecuaciones (29) y (30), que demuestran la variación lineal de las propiedades dentro de un elemento, se pueden sustituir en la ecuación (31) dando:

$$-\int_{\Gamma_e} \eta_i N_i \frac{\partial N_j}{\partial x_k} n_k N_i \kappa_j d\Gamma_e + \int_{\Omega_e} \eta_i N_i \frac{\partial N_j}{\partial x_k} \frac{\partial N_i}{\partial x_k} \kappa_j d\Omega_e = \int_{\Omega_e} N_i d\Omega_e \quad (32)$$

Se conoce que la integral exacta para un tetraedro con funciones de forma en coordenadas naturales es:

$$\int_{\Omega_e} N_i^\alpha N_j^\beta N_k^\gamma N_l^\delta d\Omega_e = \frac{\alpha! \beta! \gamma! \delta!}{(\alpha + \beta + \gamma + \delta + 3)!} 6V \quad (33)$$

en la que:

N_i es la función de forma,

V es el volumen del elemento, y

α, β y γ son exponentes enteros

Utilizando esta relación de integración (33) con la ecuación (32) da:

$$\left(\sum_{j=1}^4 (\delta_{ji} - 1) \left[\frac{A \sum_{l=1}^3 (1 + \delta_{il}) \eta_l}{12} \frac{\partial N_j}{\partial x_k} n_k \right] + \left[\frac{\sum \eta_i V}{4} \frac{\partial N_j}{\partial x_k} \frac{\partial N_i}{\partial x_k} \right] \right) \kappa_j = \frac{V}{4} \quad (34)$$

en la que la suma de viscosidades en la integral de contorno es sólo sobre los tres nodos que forman cada cara. Para un estado completo, la integral se muestra aquí sobre cada cara, f . La numeración de las caras coincide con el número del vértice opuesto.

Así, se muestra cómo se puede formular la ecuación para la conductancia de flujo, que requiere la propiedad del material, viscosidad, como un sistema de elemento finito con viscosidad variable en la totalidad de cada elemento, según la función de forma del elemento.

Todavía otra área de innovación se ocupa de la determinación de una función de viscosidad eficaz en elementos que contienen la interfase sólido / líquido. Los elementos parcialmente congelados más comunes se producen adyacentes a la pared del molde, la que contiene tanto nodos de pared “fríos” como nodos de cavidad interna “calientes”. Una variación lineal de la viscosidad, que se basa en la suposición de una variación lineal de la viscosidad a través de los elementos, y que surge del uso de elementos con funciones de forma lineales, normalmente sobrestima la viscosidad eficaz de tales elementos, produciendo un error significativo en muchos casos, siendo los más comunes y más graves los elementos parcialmente congelados. Véase, por ejemplo, la figura 20, que compara un perfil de viscosidad lineal con un perfil sumamente no lineal, más realista. Esta suposición lineal conduce a una resistencia al flujo artificialmente elevada en la simulación, reflejada en presiones de inyección que pueden ser de más del 100% superior que la realidad. Por tanto, la aproximación de variación de viscosidad lineal es muy mala en elementos parcialmente congelados. Aunque el error tiende asintóticamente a cero para una malla suficientemente fina, esta solución generalmente no es práctica o eficaz computacionalmente. En consecuencia, en ausencia de puesta en práctica de una técnica de función de viscosidad eficaz, la exactitud de la simulación puede verse afectada enormemente.

Según una realización de la invención, una exactitud de simulación sumamente mejorada de la viscosidad en elementos parcialmente congelados conlleva calcular una viscosidad eficaz. Más específicamente, se puede calcular la viscosidad eficaz en cada nodo congelado en un elemento que contiene la interfase sólido / líquido y utilizarla localmente durante el procedimiento de unión de elementos. Como tal, estas viscosidades nodales son transitorias y no sustituyen los valores globales calculados a través de un conocimiento del estado de temperatura y velocidad de cizallamiento en cada nodo y la función material de viscosidad.

ES 2 206 303 T3

Etiquetando los nodos por encima y por debajo de una temperatura predeterminada de solidificación, T_s , como “calientes” y “fríos” respectivamente, los elementos parcialmente congelados se definen como aquellos que no son completamente “calientes” (es decir, todos los nodos designados como “calientes”) ni completamente “fríos” (es decir, todos los nodos designados como “fríos”). A los nodos fríos se les puede asignar una viscosidad grande arbitraria, esto es, un valor de viscosidad suficientemente grande como para garantizar que no se produce flujo en las partes congeladas. La viscosidad de estado sólido puede ser normalmente del orden de 10^6 MPas. Esta técnica facilita una viscosidad eficaz más realista en los elementos parcialmente congelados. Las viscosidades de los elementos completamente congelados o completamente calientes no necesitan modificarse.

Antes de tratar los detalles de una realización del método de viscosidad eficaz, puede ser de ayuda proporcionar una visión general de algunas de las principales características de la misma. Las modificaciones de las viscosidades se pueden realizar mediante cualquier método para resolver el flujo anisotérmico, incluyendo el método de Nakano, y las resoluciones más convencionales de Stokes y Navier-Stokes. Cuando es posible el calentamiento por cizallamiento, deben llevarse a cabo las modificaciones de la viscosidad apropiadas por medio de rutinas relacionadas.

Adicionalmente, las modificaciones se realizan durante la unión de los elementos. Para cada elemento, se modifican las cuatro viscosidades nodales locales. Las viscosidades nodales globales no se alteran. Las viscosidades de los elementos cuyos nodos son todos fríos o todos calientes no se modifican. La aproximación estándar de la variación de viscosidad lineal todavía se utiliza para estos elementos.

La fracción volumétrica de congelación en el elemento se utiliza para calcular una fracción volumétrica de congelación dentro de cada volumen nodal. En este contexto particular, “congelación” es la parte del volumen por debajo de T_s , y el volumen nodal se refiere sólo a esa parte dentro del elemento actual. Se calculan las viscosidades medias, vis_h y vis_c de los nodos calientes y fríos del elemento, respectivamente, y cada volumen nodal puede contener una parte congelada y una fundida, independientemente de si el propio nodo es caliente o frío. La viscosidad dentro de la parte congelada es la viscosidad nodal si el nodo es frío y vis_c si el nodo es caliente. De manera similar, la viscosidad dentro de la parte fundida es la viscosidad nodal si el nodo es caliente y vis_h si el nodo es frío. Por último, se determina entonces la viscosidad eficaz del volumen nodal completo y se aplica localmente al nodo. La expresión para la viscosidad eficaz se derivó determinando la resistencia al flujo en paralelo de las partes congelada y fundida del volumen nodal, basándose en la suposición de flujo paralelo a la superficie congelada local.

La tabla 1 enumera los términos utilizados en esta metodología, para facilidad de referencia.

TABLA 1

Variable	Definición
T_s	Temperatura de solidificación
nc	Número de nodos en el elemento por debajo de T_s
nh	Número de nodos en el elemento por encima de T_s
$tfroz$	Fracción volumétrica de congelación en el elemento (congelación significa por debajo de T_s)
$frzc$	Fracción volumétrica de congelación en el volumen nodal de cada nodo frío
$frzh$	Fracción volumétrica de congelación en el volumen nodal de cada nodo caliente
vis_i	Viscosidad de los nodos ($i=1$ a 4) del elemento-valores globales
$etet_i$	Viscosidad de los nodos ($i=1$ a 4) del elemento-valores locales utilizados para la unión de elementos.
vis_c	Media de las viscosidades globales de nc nodos fríos
vis_h	Media de las viscosidades globales de nh nodos calientes

Para cada elemento, se siguen las siguientes etapas para determinar las viscosidades nodales locales, $etet_i$. A continuación en el presente documento se describe la derivación de las ecuaciones. Según esta realización del método, en primer lugar se determina nc y nh . Si $nc = 0$ o $nh = 0$, éste no es un elemento parcialmente congelado. Se fija $etet_i = vis_i$ y se avanza al siguiente elemento. Después, se calcula vis_c y vis_h . Entonces, se calcula $frzc$ y $frzh$ según las siguientes ecuaciones:

ES 2 206 303 T3

$$frzc = \text{Min}\left(\frac{4 \cdot \text{froz}}{nc}, 1\right) \quad (35)$$

$$frzh = \frac{4 \cdot \text{tfroz} - nc \cdot frzc}{nh} \quad (36)$$

Finalmente, se ejecuta un bucle sobre los cuatro nodos i locales y se calcula la viscosidad $eteti$ para cada uno. Se utiliza la ecuación (37) si el nodo i es frío y la ecuación (38) si el nodo i es caliente.

$$eteti = \frac{vis_i vis_h}{(1-w)vis_i + w \cdot vis_h}, \quad w = \frac{frzc^{1/3}}{frzc^{1/3} + (1-frzc)^{1/3}} \quad (37)$$

$$eteti = \frac{vis_i vis_c}{(1-w)vis_c + w \cdot vis_i}, \quad w = \frac{frzh^{1/3}}{frzh^{1/3} + (1-frzh)^{1/3}} \quad (38)$$

Las cantidades $frzc$ y $frzh$ se derivan como sigue. En primer lugar, se deja que el volumen del elemento actual sea V , de modo que los cuatro volúmenes nodales son cada uno $V/4$. El volumen de congelación en el elemento es $V^* \text{tfroz}$. Aproximando que el volumen de congelación se distribuye uniformemente entre los nodos fríos, nc , hay un volumen $V^* \text{tfroz}/nc$ de congelación en cada volumen nodal. Puesto que este volumen de congelación no puede ser mayor que el volumen nodal, el volumen de congelación real es el mínimo de $V^* \text{tfroz}/nc$ y $V/4$, es decir, $\text{Min}(V^* \text{tfroz}/nc, V/4)$. Convirtiendo esto en una fracción volumétrica da como resultado la ecuación (35), a saber:

$$frzc = \text{Min}\left(\frac{4 \cdot \text{tfroz}}{nc}, 1\right) \quad (35)$$

Cualquier congelación “sobrante” o residual tras la distribución a los nodos fríos, se distribuye uniformemente a los nodos calientes, nh . El volumen de congelación asignado a los nodos fríos es $V^* nc \cdot frzc/4$, así que el volumen de congelación residual es $V^* \text{tfroz} - V^* nc \cdot frzc/4$. Dividiendo esto entre los nodos calientes, nh , y convirtiéndolo en una fracción volumétrica da como resultado la ecuación (36), a saber:

$$frzh = \frac{4 \cdot \text{tfroz} - nc \cdot frzc}{nh} \quad (36)$$

Las viscosidades nodales locales se derivan tal como sigue. Se deja que el volumen nodal sea V_i . Suponiendo que el volumen está parcialmente congelado, el volumen total se divide en un volumen frío, V_c , y un volumen caliente, V_h , con viscosidades respectivas η_c y η_h . Obviamente, $V_i = V_c + V_h$. Además, el flujo local debe ser paralelo a la superficie de congelación local en el volumen nodal. La figura 21 representa esta situación esquemáticamente. Aunque la figura es bidimensional, el dibujo es representativo de las tres dimensiones.

La siguiente etapa es determinar la viscosidad eficaz del volumen nodal completo, V_i , en la dirección de flujo. La viscosidad eficaz normal a este flujo no afecta a la resolución del flujo. A esta viscosidad eficaz se le llama η_i . El cálculo exacto de η_i tiende a no ser práctico para volúmenes de forma irregular en el modelo, que requieren integraciones volumétricas complejas. En su lugar, se puede utilizar un enfoque simplificado que proporciona el comportamiento correcto según se congela cada volumen nodal.

Ahora, la resistencia R al flujo de algún volumen con viscosidad η uniforme es proporcional a $\eta L/A$, en la que L es la longitud de la trayectoria a través del volumen en la dirección de flujo y A es el área de la sección transversal normal a la dirección de flujo. La resistencia al flujo del volumen nodal viene dada por $1/R_i = 1/R_c + 1/R_h$. Generalmente no es factible calcular L/A para cada volumen. En su lugar, obsérvese que L/A tiene las dimensiones de $1/\text{longitud}$, así que se aproxima que $1/A$ varía con el volumen $^{-1/3}$. Por tanto, se aplica la siguiente relación:

$$\frac{V_i^{1/3}}{\eta_i} = \frac{V_c^{1/3}}{\eta_c} + \frac{V_h^{1/3}}{\eta_h} \quad (39)$$

de la que se puede obtener:

ES 2 206 303 T3

$$\eta_t = \frac{\eta_c \eta_h V_t^{1/3}}{\eta_h V_c^{1/3} + \eta_c V_h^{1/3}} \quad (40)$$

5 Se deja que la fracción congelada en el volumen nodal sea F, en la que F es frzc o frzh dependiendo de si el nodo es frío o caliente. Entonces, $V_c = FV_t$ y $V_h = (1 - F)V_t$. Sustituyendo en la ecuación (40) da como resultado:

$$10 \quad \eta_t = \frac{\eta_c \eta_h}{\eta_h F^{1/3} + \eta_c (1 - F)^{1/3}} \quad (41)$$

La ecuación (41) se puede normalizar. Por ejemplo, si $\eta_c = \eta_h$, la ecuación (41) se reduciría a $\eta_t = \eta_c$. En consecuencia se modifica la ecuación (41) a:

$$15 \quad \eta_t = \frac{\eta_c \eta_h [F^{1/3}(1 - F)^{1/3}]}{\eta_h F^{1/3} + \eta_c (1 - F)^{1/3}} \quad (42)$$

20 La cuestión final es qué viscosidad utilizar en las dos partes del volumen nodal. Si el nodo i asociado con el volumen nodal es frío, se utiliza $\eta_c = \text{vis}_i$ y se aproxima que $\eta_h = \text{vis}_h$. De manera similar, si el nodo i es caliente, se utiliza $\eta_h = \text{vis}_i$ y se aproxima que $\eta_c = \text{vis}_c$. La ecuación final para η_t es entonces la ecuación (37) o la ecuación (38) según si el nodo i es frío o caliente.

25 El comportamiento de la ecuación (42) es correcto en casos límite. Por ejemplo, si $F = 0$, $\eta_t = \eta_h$, tal como se requiere. De manera similar, si $F = 1$, $\eta_t = \eta_c$, tal como se requiere. Además, la variación de η_t con F es suave y monótona. Si $\eta_c = \eta_h$, $\eta_t = \eta_c$, tal como se requiere. Por último, si $\eta_c \gg \eta_h$, $\eta_t \approx \eta_h [1 + (F/1-F)^{1/3}]$. Esto tiene la forma correcta, puesto que η_t aumenta con F desde un valor de η_h a $F = 0$.

30 Se pueden utilizar dos expresiones más sencillas en lugar de la ecuación (42), si se desea; sin embargo, pueden dar como resultado un comportamiento predictivo menos exacto. Una expresión es tal como sigue:

$$35 \quad \eta_t = \eta_c F + \eta_h (1 - F) \quad (43)$$

Un problema con la ecuación (43) es que en el caso habitual en el que $\eta_c \gg \eta_h$, la ecuación da como resultado $\eta_t \approx \eta_c F$. De hecho, puesto que η_c es muy grande, esta ecuación predice que no existe flujo a través del nodo, incluso si la mayor parte del volumen nodal está fundido. Por consiguiente, las presiones de inyección previstas tienden a ser mayores de lo esperado.

La segunda expresión es tal como sigue:

$$45 \quad \eta_t = \frac{\eta_c \eta_h}{\eta_h F + \eta_c (1 - F)} \quad (44)$$

Esta ecuación no proporciona el comportamiento correcto en casos límite, como la ecuación (42). A saber, si $F = 0$, $\eta_t = \eta_h$, tal como se requiere. Si $F = 1$, $\eta_t = \eta_c$, tal como se requiere. La variación de η_t con F es suave y monótona. Si $\eta_c = \eta_h$, $\eta_t = \eta_c$, tal como se requiere. Por último, cuando $\eta_c \gg \eta_h$, $\eta_t \approx \eta_h [1 + (F/1-F)]$. Esto tiene la forma correcta, puesto que η_t aumenta con F desde un valor de η_h a $F = 0$.

55 Sin embargo, existen dos problemas con la ecuación (44). En primer lugar, la ecuación (44) se deriva suponiendo que la resistencia al flujo es proporcional a η/V , en lugar de a $\eta/V^{1/3}$ como para la ecuación (42). Por tanto, la suposición subyacente es incorrecta dimensionalmente. En segundo lugar, en la práctica, se ha demostrado que la ecuación (42) predice presiones de inyección más próximas a los valores correctos. Para un caso de prueba de modelo tubular, con una presión de inyección esperada de 0,62 MPa, los modelos de Darcy de 6 capas proporcionaron presiones de 0,47 MPa utilizando la ecuación (44), comparado con 0,51 MPa utilizando la ecuación (42). Los modelos de dieciséis capas proporcionaron presiones de 0,56 MPa y 0,55 MPa, respectivamente. Una formulación de viscosidad lineal proporcionó presiones de 1,59 MPa y 0,63 MPa con la mejora de 6 y 16 capas.

65 Las pruebas de la metodología de viscosidad eficaz han demostrado que el valor de η es relativamente exacto. Además, mientras que el presente método emplea una distribución uniforme de η a los nodos "fríos", una aproximación alternativa sería ponderar la distribución mediante las temperaturas nodales del elemento. Aún otra sería calcular directamente frzc interpolando la superficie de T_s a través de cada volumen nodal y calculando los volúmenes. Una técnica similar podría emplearse para la distribución uniforme de la congelación residual a los nodos "calientes", aunque estas alternativas podrían consumir recursos de cálculo adicionales.

ES 2 206 303 T3

Aunque el uso de las ponderaciones de $F^{1/3}$ y $(1-F)^{1/3}$ para las viscosidades de la región fría y caliente se basa en ponderaciones empíricas, con apoyo teórico cualitativo adicional, se considera que las ponderaciones podrían basarse en la integración sobre volúmenes nodales parciales. Adicionalmente, el uso de la viscosidad media de nodo caliente para la región caliente de un nodo frío puede tender a subestimar la viscosidad de la región caliente, puesto que la viscosidad aumenta según se aproxima a la superficie de congelación. Esto, a su vez, puede dar como resultado una ligera subestimación de la presión de inyección, tal como se indicó anteriormente en el presente documento. Sin embargo, se ha determinado que el uso de la viscosidad media de nodo frío para la región fría de un nodo caliente produce un error insignificante, puesto que visc simplemente necesita ser lo suficientemente grande como para eliminar el flujo a través de la parte congelada.

Ahora, con respecto a la técnica de eliminación de los nodos y elementos congelados del dominio de soluciones, en alguna fase durante el llenado y/o el relleno, los elementos completos se hacen sustancialmente inmóviles en virtud del hecho de que la temperatura de todos los nodos del elemento ha caído por debajo de la temperatura de solidificación, T_s . La cuestión es cómo tratar estos elementos dentro del contexto del análisis de flujo de fluido. Un enfoque es continuar para tratar estos elementos como un fluido considerando la región sólida como una zona de viscosidad muy elevada. La viscosidad "sólida" puede obtenerse extrapolando la función de viscosidad del fluido o asignándole un valor arbitrariamente grande. Sin embargo, esto puede conducir a un mal acondicionamiento del sistema de ecuaciones. Se puede retrasar la convergencia, o pararla completamente, y así aumenta el coste computacional.

Según una realización de la invención, el dominio de soluciones para la conductancia de flujo y la presión se reduce para incluir sólo aquellos elementos que tienen algunos nodos por encima de la temperatura de solidificación. Eliminando completamente los elementos congelados del dominio de soluciones, se consigue facilidad de convergencia para un problema esencialmente fluido, mientras se obtiene también un ahorro en el tiempo computacional. Las condiciones de contorno útiles para flujo sin deslizamiento se aplican en los límites con la región congelada, en lugar de en la pared del molde. En las fases iniciales del proceso de moldeo, estos dos límites coinciden. Estas condiciones de contorno se aplican fijando que la función de conductancia de flujo sea cero en los límites. Obsérvese que el dominio de la cavidad completa se utiliza normalmente para los cálculos de campo de la temperatura.

Todavía otra metodología innovadora conlleva el cálculo de la presión eficaz en regiones que han solidificado. Habiendo elegido caracterizar el material en la cavidad del molde como sólido o líquido, generalmente todavía es deseable calcular la presión en el sólido. En realidad, el polímero congelado todavía experimenta una influencia de la presión, puesto que el polímero sólido puede transmitir tensiones compresivas y pequeñas flexiones desde el polímero fundido vecino sobre pequeñas distancias. Con el fin de asignar una presión a los nodos congelados, generalmente no es suficiente propagar presión desde los nodos fundidos, porque este método no permite el proceso de descongelación, en el que algunas secciones de la cavidad llenada pueden estar todavía fundidas y estar sometidas a la presión de inyección, mientras que al mismo tiempo otras regiones están congeladas y no tienen presión aplicada debido a que están a una distancia tal de las regiones fundidas que no se produce ninguna transmisión de presión significativa.

Además, es deseable conocer la presión con el fin de establecer el estado del material. La presión se utiliza junto con un conocimiento de la temperatura para establecer la densidad del material y, por consiguiente, la masa en cada nodo, sólido o líquido, dentro de la cavidad.

Además, es razonablemente común para los fabricantes montar detectores de presión empotrados dentro de las cavidades de molde reales con el fin de proporcionar alguna información por medio de la cual puedan controlar las máquinas y procesos de moldeo, y para intentar establecer los parámetros relacionados con la calidad de la pieza moldeada. La consideración de la física real del proceso conduce a que se concluya que una simulación precisa probablemente requeriría una simulación multifísica muy compleja y computacionalmente cara, combinando tanto la dinámica de fluidos como la mecánica de sólidos. Sin embargo, en este momento, las técnicas no están bien establecidas.

Una solución, según la invención, ha sido desarrollar una técnica para calcular aproximadamente la presión del sólido proyectando la presión central sobre la capa congelada de la cavidad externa. Más específicamente, en las regiones tanto congeladas como fundidas, la presión central se proyecta sobre cualquier nodo externo que esté congelado. A título de ejemplo, la presión central se puede determinar a partir de los cálculos del método de elemento finito de fluido normal, o puede hacerse a partir de la disminución de presión del material sólido congelado, que avanza según disminuye la temperatura del polímero debido al enfriamiento. Mediante un proceso de descomposición geométrica, a todos los nodos que no están en el centro de una pieza se les asigna un nodo central, cuya presión imitarán una vez congelados. Los únicos nodos para los que realmente se calcula entonces la disminución de presión durante el enfriamiento, son aquellos a los que se les da la característica central. A cada nodo externo se le puede asignar el nodo central que esté más próximo a él para que sea su nodo central. Sin embargo, el algoritmo para determinar qué nodos son nodos centrales se basa realmente en los nodos externos. Esto es, cada nodo central tiene al menos un nodo externo que depende de él, si no, al nodo central no se le habría dado la característica de nodo central.

El algoritmo para generar la característica de nodo central es tal como sigue. En primer lugar, se etiquetan todos los nodos de la pared de la cavidad como capa cero. Luego, se etiquetan todos los nodos adyacentes a la capa cero como capa uno. Después, se etiquetan todos los nodos adyacentes a la capa uno como capa dos y se repite con números de capa que aumentan sucesivamente hasta que se han asignado números de capa a todos los nodos. Posteriormente, se calcula la distancia a la pared de la cavidad más próxima para cada nodo. Además, se registra cuál es el nodo de pared

ES 2 206 303 T3

de la cavidad más próximo para cada nodo interno. Todos los números cuyo número de capa sea superior o igual a la mitad del número de capas garantizado a través del espesor se marcan como nodos centrales potenciales.

El número de capas garantizado a través del espesor es el resultado del proceso de mejora de malla descrito anteriormente. Ahora, se continúa partiendo de cada nodo de la pared de la cavidad, esto es, con número de capa cero. Se atraviesan los nodos conectados a cada uno por turnos, moviéndose a números de capas superiores sucesivamente, hasta un momento tal en que se alcanza un nodo central potencial. En general, habrá varios nodos centrales potenciales para cada nodo de pared de la cavidad. El nodo que se selecciona como nodo central asociado con el nodo de pared es el que maximiza la razón d_{cw}/d_{cn} , en la que:

d_{cw} es la distancia del nodo central a la pared de la cavidad, y

d_{cn} es la distancia del nodo central al nodo de pared.

A los nodos internos que no son nodos centrales se les asigna un nodo central que es el mismo más próximo al nodo de pared de la cavidad, determinado durante las etapas de numeración de capas anteriores.

Este algoritmo tiene la característica de que si una región delgada y una gruesa son adyacentes entre sí, los nodos congelados en la región delgada tendrán una presión central de la región gruesa asignada a ellos. Se ha encontrado que esto imita bien el proceso físico real. Por ejemplo, si se une una entrada estrecha a un sistema de alimentación de canal más grueso, tras haberse congelado la entrada, la presión relacionada con ella imita la del sistema de alimentación más grueso. Esto representa la transmisión de tensiones compresivas a través del polímero sólido.

La figura 22 muestra la numeración de capa de los nodos centrales, de pared e internos y la definición de las distancias utilizadas en la razón para establecer qué nodo central se asigna a cada nodo de pared.

Las figuras 23A a 23C muestran la relación entre los nodos centrales, los nodos de pared y los nodos internos y su cambio de presión con el aumento del tiempo y la congelación.

Habiendo descrito las diversas metodologías innovadoras y los algoritmos en detalle, ahora se puede volver la atención a las figuras 24 y 25 para el entendimiento de cómo se ponen en práctica las mejoras tanto en la fase de llenado como en la fase de relleno, según una realización de la invención. La figura 24 es una representación esquemática del análisis de la fase de llenado que resume ciertas subetapas de proceso de la etapa 50 de la figura 2. Recuérdese, que según el diagrama de flujo de nivel superior de la figura 2, una vez que se ha discretizado el modelo sólido tridimensional para proporcionar un dominio de soluciones modelo y se han fijado las condiciones de contorno, en la etapa 50, la simulación despeja en primer lugar las variables del proceso de la fase de llenado.

El análisis de la fase de llenado de la etapa 50 comienza con la suposición de que la cavidad está vacía en la etapa 110. Todas las variables de campo, tales como la presión, temperatura y velocidad, se inicializan en la etapa 120. Posteriormente, se aplican las ecuaciones de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento para despejar la fluidez, κ , en la etapa 130 y la presión en la etapa 140 y se calcula la velocidad en la etapa 150, para al menos una parte del dominio de soluciones. En el caso en el que se está utilizando un análisis de elemento finito, se determinan los valores de fluidez, presión y velocidad en cada uno de los nodos de la malla.

La fluidez se puede resolver mediante la aplicación de la ecuación de flujo de Darcy y entonces se resuelve la presión utilizando la ecuación de Laplace, porque la presión es una función de la fluidez. Alternativamente, se puede utilizar una técnica de Navier-Stokes para despejar la presión, basada en la conservación de la cantidad de movimiento. Una vez que se han resuelto la fluidez y la presión, se puede calcular directamente la velocidad. Después, basado en los principios de conservación de la energía, se utiliza la temperatura para calcular la viscosidad en la etapa 160. Entonces, en la etapa 170, el modelo comprueba para ver si la presión ha convergido, que probablemente no es el caso inicialmente. Si no, se repiten iterativamente las etapas 130 a 160, hasta que converja la presión.

Una vez que la presión ha convergido, la simulación avanza incrementalmente el frente de flujo de fluido en la etapa 180 de evolución de la superficie libre. La contribución de la transferencia de calor convectivo se considera a continuación en la etapa 190, en la que se completa un análisis de temperatura explícito langrangiano para explicar los efectos de energía térmica de la afluencia continua de polímero fundido en la cavidad. Entonces, los términos restantes en la ecuación de temperatura se resuelven en la etapa 200, para explicar la conducción, la disipación viscosa y cualquier otro efecto térmico deseado, tal como el calor de solidificación en termoplásticos y el calor de reacción en materiales termoendurecibles.

Una vez que todos los efectos de temperatura se han cuantificado e integrado en la simulación, el algoritmo comprueba para ver si la cavidad del molde está llena en la etapa 210. Si no, se repiten iterativamente las etapas 130 a 200, hasta un momento tal en el que la cavidad esté llena. En general, se puede ejecutar un bucle del algoritmo del orden de 100 a 200 veces para simular el llenado de la cavidad del molde. Tras su finalización, el modelo puede avanzar entonces a la etapa 60, representada en el diagrama de flujo de la figura 2, en el que se realiza el análisis de la fase de relleno.

Con referencia ahora a la figura 25, se describe una representación esquemática del análisis de la fase de relleno

ES 2 206 303 T3

que resume ciertas subetapas de proceso de la etapa 60 de la figura 2. El análisis de la fase de relleno de la etapa 60 comienza en la etapa 50, con el estado inicial de todas las variables resultantes de la fase de llenado. De nuevo, se aplican las ecuaciones de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento para despejar la fluidez, κ , en la etapa 220 y la presión en la etapa 230 y se calcula la velocidad en la etapa 240, para al menos una parte del dominio de soluciones. Una vez que se han resuelto la fluidez y la presión, se puede calcular directamente la velocidad. Después, basado en los principios de conservación de la energía, se utiliza la temperatura para calcular la viscosidad en la etapa 250. Entonces, en la etapa 260, el modelo comprueba para ver si la presión ha convergido, lo que probablemente no es el caso inicialmente. Si no, se repiten iterativamente las etapas 220 a 250, hasta que converja la presión.

Una vez que la presión ha convergido, se considera a continuación la contribución de transferencia de calor convectivo en la etapa 270, en la que se completa un análisis de temperatura lagrangiano explícito para explicar la afluencia reducida pero continua de polímero fundido en la cavidad. Entonces, en la etapa 280, se resuelven los términos restantes de la ecuación de temperatura para explicar la conducción, la disipación viscosa y cualquier otro efecto térmico.

Una vez que todos los efectos de temperatura se han cuantificado e integrado en la simulación, en la etapa 290, se calculan propiedades del componente tales como la densidad, contracción volumétrica, masa y volumen congelado y se actualizan. Posteriormente, en la etapa 300, el algoritmo comprueba para ver si se ha completado el perfil de presión recomendado. Si no, se repiten iterativamente las etapas 220 a 290, hasta un momento tal en el que se complete el perfil de presión. Tras su finalización, el modelo avanza entonces a la etapa 70, representada en el diagrama de flujo de la figura 2, en la que se producen los resultados de la simulación para su consideración por el ingeniero designado.

Aunque muchas de estas etapas de los diagramas de flujo de la fase de llenado y la fase de relleno son similares, las contribuciones respectivas a la exactitud predictiva de la simulación global varían, especialmente con respecto a la aplicación de los principios de conservación de la energía. Por ejemplo, durante la fase de llenado en la que existen velocidades de flujo relativamente elevadas, los efectos térmicos por disipación viscosa pueden ser significativos; mientras que durante la fase de relleno, en la que existen velocidades de flujo relativamente bajas, las contribuciones de conducción y convección dominan el análisis de transferencia de calor.

Con respecto a las numerosas metodologías, tratadas anteriormente en el presente documento, relacionadas con los principios de conservación de la energía para mejorar la exactitud predictiva del modelo, según una realización de la invención, se pueden poner en práctica las siguientes técnicas de manera ventajosa en la etapa 190 del diagrama de flujo de la fase de llenado: el uso de una función analítica unidimensional para describir la distribución de temperatura local en un nodo; la definición de la variación de una función analítica unidimensional, con el tiempo, para explicar la convección calorífica; la descripción de un esquema explícito de convección de temperatura que utiliza la función analítica unidimensional; y la mejora de la malla de elementos finitos, que incluye un algoritmo de cálculo de la distancia a la pared de la cavidad. La descripción de la variación de una función analítica unidimensional para explicar la generación de calor viscoso se puede poner en práctica en la etapa 200. Estas técnicas también podrían ponerse en práctica en las etapas correspondientes del diagrama de flujo de la fase de relleno; sin embargo, su influencia en los resultados de la simulación sería de un grado menor, debido a las diferentes condiciones.

De manera similar, con respecto a las metodologías innovadoras relacionadas con el tratamiento del material solidificado, se pueden poner en práctica las siguientes técnicas de manera ventajosa en la etapa 220 del diagrama de flujo de la fase de llenado para despejar la fluidez: la determinación de la posición de la interfase sólido / líquido; la formulación de elementos con una variación lineal de las propiedades del material en su totalidad; y la determinación de una función de viscosidad eficaz en elementos que contienen la interfase sólido / líquido. La eliminación de los nodos y elementos congelados del dominio de soluciones y el cálculo de la presión eficaz en regiones que han solidificado se pueden poner en práctica de manera eficaz en la etapa 200, para facilitar el despeje de la presión. Estas técnicas también podrían haberse puesto en práctica en las etapas correspondientes del diagrama de flujo de la fase de llenado; sin embargo, su influencia en los resultados de la simulación sería de un grado menor.

Mientras que se han descrito en el presente documento las que se consideran que son realizaciones a título de ejemplo y preferidas de la invención, serán evidentes otras modificaciones y alternativas de la invención para los expertos en la técnica a partir de las enseñanzas del presente documento. Todas de tales modificaciones y alternativas se consideran que están dentro del alcance de la invención. Por ejemplo, aunque la descripción se ha dirigido generalmente a la modelización del moldeo por inyección de termoplásticos, las enseñanzas de la invención son aplicables al moldeo por inyección de polímeros termoendurecibles. Tal como se mencionó anteriormente, en tales simulaciones, la contribución del calor de reacción se puede considerar en el análisis de conservación de la energía, tal como puede considerarse el calor de solidificación en el modelo termoplástico. Se pueden integrar en el análisis otras contribuciones de transferencia de calor y energía térmica en el análisis, tales como la capacitancia térmica del molde y el enfriamiento o calentamiento activo del molde.

Los principios generales subyacentes a las enseñanzas del presente documento también se pueden aplicar a la modelización de flujos de diferentes materiales de manera simultánea o secuencial en el mismo molde, así como a la modelización de otros materiales y fluidos. Por ejemplo, algunos o todos los principios de la invención presentados en el presente documento se podrían aplicar a otros procesos de moldeo. Esto podría incluir procesos poliméricos tales como la extrusión, moldeo por soplado, moldeo por compresión, termoconformado y variantes del moldeo por inyección tales como el moldeo por inyección asistida por gas, moldeo por inyección-compresión y moldeo por coin-

ES 2 206 303 T3

yección. Además, los principios podrían aplicarse también a procesos de fabricación en otras industrias tales como la fundición metálica no férrea y la elaboración de productos alimenticios, a saber, cualquiera en el que fluye un fluido, o una sustancia que se comporta como un fluido.

5 En consecuencia, lo que se desea asegurar mediante el título es la invención tal como se define en las siguientes reivindicaciones.

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

ES 2 206 303 T3

REIVINDICACIONES

5 1. Método para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional, comprendiendo el método las etapas de:

(a) proporcionar (20) un modelo informático sólido tridimensional que define la cavidad;

(b) discretizar (30) un dominio de soluciones basado en el modelo sólido;

10 (c) especificar (40) las condiciones de contorno; despejando una o ambas de:

(d) las variables (50) del proceso de la fase de llenado en al menos una primera parte del dominio de soluciones para proporcionar las soluciones de llenado respectivas, por tanto, para al menos la primera parte del dominio de soluciones; y

15 (e) las variables (60) del proceso de la fase de relleno en al menos alguna de la primera parte del dominio de soluciones basado, en parte, en los estados respectivos de las variables del proceso en la terminación del llenado, para proporcionar las soluciones de fase de relleno respectivas, por tanto, para al menos alguna de la primera parte del dominio de soluciones; y

(f) determinar (80) si al menos una de las soluciones de la fase de llenado y de las soluciones de fase de relleno respectivas es aceptable, **caracterizado** porque al menos una de las etapas (d) y (e) comprende las subetapas de:

25 utilizar una primera descripción de una distribución de una variable del proceso alrededor de cada uno de una primera pluralidad de nodos o elementos interiores dentro de la parte respectiva del dominio de soluciones; y

30 utilizar una segunda descripción de la distribución de la variable del proceso en al menos una segunda parte del dominio de soluciones que contiene la primera pluralidad de nodos o elementos interiores, utilizando la segunda descripción las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía.

2. Método según la reivindicación 1, en el que en una etapa de tiempo dada, la primera descripción trata cada uno de la primera pluralidad de nodos o elementos interiores independientemente de los demás.

35 3. Método según la reivindicación 1, en el que el valor de la variable del proceso en un primer punto proporcionado por la primera descripción de la variable del proceso alrededor de un primer nodo o elemento interior no es necesariamente igual al valor de la variable del proceso en un primer punto proporcionado por la primera descripción de la variable del proceso alrededor de un segundo nodo o elemento interior.

40 4. Método según la reivindicación 1, en el que el valor de la variable del proceso en un primer punto proporcionado por la primera descripción de la variable del proceso alrededor de un nodo o elemento se utiliza en la segunda descripción.

45 5. Método según la reivindicación 1, en el que la primera descripción es una función analítica unidimensional o es una función discreta.

6. Método según la reivindicación 1, en el que la primera descripción describe una distribución de temperatura o energía interna alrededor de un nodo o elemento.

50 7. Método según la reivindicación 6, en el que la primera descripción es o se aproxima a una solución para la conducción calorífica unidimensional en un sólido.

8. Método según la reivindicación 1, en el que la primera descripción contiene o se deriva de una función de error.

55 9. Método según la reivindicación 5, en el que la primera descripción es una descripción unidimensional de la distribución de temperatura alrededor de un nodo o elemento y contiene una función de error.

60 10. Método según la reivindicación 1, en el que las variables del proceso de la fase de llenado y las variables del proceso de la fase de relleno se seleccionan del grupo que consiste en densidad, fluidez, tiempo de llenado de la cavidad del molde, tiempo de relleno de la cavidad del molde, presión, velocidad de deformación, tensión de cizallamiento, temperatura, energía interna, velocidad, gradiente de velocidad, velocidad de flujo, viscosidad y contracción volumétrica.

65 11. Método según la reivindicación 1, que comprende además las etapas de:

ES 2 206 303 T3

(g) modificar (90) al menos una del dominio de soluciones discretizado y de las condiciones de contorno en el caso de que al menos una de las soluciones de la fase de llenado y de las soluciones de la fase de relleno respectivas se determine que es inaceptable; y

5 (h) repetir las etapas (d) a (h) hasta que las soluciones de la fase de llenado y las soluciones de la fase de relleno respectivas se determinen que son aceptables.

12. Método según la reivindicación 1, que comprende además las etapas de:

10 visualizar en formato gráfico una solución de la fase de llenado seleccionada del grupo que consiste en tiempo de llenado, presión, velocidad de deformación, tensión de cizallamiento, temperatura, velocidad y viscosidad.

13. Método según la reivindicación 1, que comprende además las etapas de:

15 visualizar en formato gráfico una solución de la fase de relleno seleccionada del grupo que consiste en densidad, tiempo de relleno, presión, velocidad de deformación, temperatura, velocidad, viscosidad y contracción volumétrica.

14. Método según la reivindicación 1, en el que la etapa (b) de discretización comprende la subetapa de generar una malla de elementos finitos basada en el modelo, subdividiendo el modelo en una pluralidad de elementos conectados
20 definidos por una pluralidad de nodos.

15. Método según la reivindicación 1, en el que las condiciones de contorno se seleccionan del grupo que consiste en composición de fluido, localización de la inyección de fluido, temperatura de inyección de fluido, presión de inyección de fluido, velocidad volumétrica de flujo de inyección de fluido, temperatura del molde, dimensiones de la
25 cavidad, configuración de la cavidad y plano de separación del molde, y variaciones de las mismas.

16. Método según la reivindicación 15, en el que al menos una de las etapas (d) y (e) de resolución, que utilizan las ecuaciones de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento, comprende las subetapas de:

30 (i) resolver la fluidez (130, 220) para al menos alguna de la parte del dominio de soluciones;

17. Método según la reivindicación 16, en el que la etapa (d) o (e) de resolución, que utiliza las ecuaciones de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento, comprende además las subetapas de:

35 (i) despejar la presión (140, 220) para al menos alguna de la parte del dominio de soluciones; y

(ii) calcular la velocidad (150, 240) para al menos alguna de la parte del dominio de soluciones.

18. Método según la reivindicación 1, en el que al menos una de las etapas (d) y (e) de resolución, que utilizan
40 las ecuaciones de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento, comprende la subetapa de calcular la viscosidad para al menos alguna de la parte del dominio de soluciones.

19. Método según la reivindicación 18, en el que la subetapa de calcular la viscosidad se basa en la temperatura.

45 20. Método según la reivindicación 1, en el que al menos una de las etapas (d) y (e) de resolución, comprende la subetapa de calcular iterativamente al menos una de la velocidad y la viscosidad, hasta que converja la presión.

21. Método según la reivindicación 15, en el que la etapa (d) de resolución comprende la subetapa de determinar
50 (180) la evolución de la superficie libre del fluido en la cavidad, basado en la velocidad.

22. Método según la reivindicación 1, en el que al menos una de las etapas (d) y (e) de resolución comprende la subetapa de calcular la temperatura basado en al menos una de una contribución de transferencia de calor convectivo, una contribución de transferencia de calor conductivo y una contribución de disipación viscosa.

55 23. Método según la reivindicación 1, en el que al menos una de las etapas (d) y (e) de resolución comprende la subetapa de calcular la temperatura basado en una contribución de transferencia de calor convectivo, una contribución de transferencia de calor conductivo y una contribución de disipación viscosa.

60 24. Método según la reivindicación 21, en el que la evolución de la superficie libre se determina hasta que se llena la cavidad.

25. Método según la reivindicación 1, que comprende además la etapa de:

(a) calcular las propiedades másicas de un componente.

65 26. Método según la reivindicación 25, en el que las propiedades másicas se seleccionan del grupo que consiste en densidad del componente, contracción volumétrica, masa del componente y volumen del componente.

ES 2 206 303 T3

27. Método según la reivindicación 25, en el que se calcula iterativamente al menos una de la velocidad, viscosidad y propiedades másicas, hasta que se completa un perfil de presión predeterminado.

5 28. Método según la reivindicación 14, en el que la subetapa de generar la malla comprende generar una malla anisotrópica en espesor y zonas delgadas de tal manera que la mejora de malla proporciona un aumento de resolución en la dirección del espesor sin aumentar sustancialmente la mejora de malla en una dirección longitudinal.

10 29. Método según la reivindicación 1, en el que la subetapa (d) o (e) incluye la subetapa de utilizar un esquema explícito en la resolución de la ecuación de conservación de la energía.

30. Método para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional, comprendiendo el método las etapas de:

15 (a) proporcionar (20) un modelo informático tridimensional que define la cavidad;

(b) discretizar (30) un dominio de soluciones basado en el modelo;

(c) especificar (40) las condiciones de contorno; y

20 (d) despejar (150, 260) las variables del proceso utilizando las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía para al menos una parte del dominio de soluciones, en el que la etapa (d) comprende la subetapa de utilizar un esquema explícito en la resolución de la ecuación de conservación de la energía.

25 31. Método según la reivindicación 30, en el que el esquema explícito de la etapa (d) comprende la subetapa de utilizar una función analítica unidimensional, los datos derivados de una función analítica unidimensional o una función discreta para describir la distribución de temperatura alrededor de un nodo.

30 32. Método según la reivindicación 30, en el que el esquema explícito de la etapa (d) comprende la subetapa de utilizar un reloj térmico que varía localmente y puede avanzar de manera diferente al reloj global.

33. Método según la reivindicación 32, en el que el reloj térmico es un reloj térmico nodal.

35 34. Método según la reivindicación 32, en el que el uso de un reloj térmico comprende la subetapa de calcular un número de Peclet para hacer un cálculo aproximado de las contribuciones relativas de convección y conducción a la transferencia de calor en un nodo.

40 35. Método según la reivindicación 30, en el que la etapa (d) comprende determinar la temperatura en una posición aguas arriba correspondiente a una localización de partícula en una etapa de tiempo previa.

36. Método según la reivindicación 30, en el que la etapa (d) comprende la subetapa de calcular la contribución a la transferencia de calor debida a al menos uno de la disipación viscosa, el calor de compresión, el calor de descompresión, el calor de solidificación y el calor de reacción.

45 37. Aparato (10) de hardware informático para modelar la inyección de un fluido dentro de un molde que define una cavidad tridimensional, que comprende:

(a) Una memoria que almacena el código de programa que define un conjunto de instrucciones; y

50 un procesador que se puede hacer funcionar para ejecutar las instrucciones proporcionadas por el código de programa, que hacen que el procesador:

(b) discretice un dominio de soluciones basado en un modelo informático sólido tridimensional que define una cavidad;

55 (c) especifique las condiciones de contorno;

(d) despeje las variables del proceso de la fase de llenado en al menos una primera parte del dominio de soluciones para proporcionar las soluciones de llenado respectivas, por tanto, para al menos la primera parte del dominio de soluciones; y/o

60 (e) despeje las variables del proceso de la fase de relleno en al menos alguna de la primera parte del dominio de soluciones basado, en parte, en los estados respectivos de las variables del proceso en la terminación del llenado para proporcionar las soluciones de la fase de relleno respectivas, por tanto, para al menos alguna de la primera parte del dominio de soluciones; y

65 (f) determine si al menos una de las soluciones de la fase de llenado y las soluciones de la fase de relleno respectivas es aceptable, **caracterizado** porque al menos una de las etapas (d) y (e) comprende las subetapas de:

ES 2 206 303 T3

utilizar una primera descripción de una distribución de una variable del proceso alrededor de cada uno de una pluralidad de nodos o elementos interiores dentro de la parte respectiva del dominio de soluciones; y

5 utilizar una segunda descripción de la distribución de la variable del proceso en al menos una segunda parte del dominio de soluciones que contiene la primera pluralidad de nodos o elementos interiores, utilizando la segunda descripción las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía.

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65 **NOTA INFORMATIVA:** Conforme a la reserva del art. 167.2 del Convenio de Patentes Europeas (CPE) y a la Disposición Transitoria del RD 2424/1986, de 10 de octubre, relativo a la aplicación del Convenio de Patente Europea, las patentes europeas que designen a España y solicitadas antes del 7-10-1992, no producirán ningún efecto en España en la medida en que confieran protección a productos químicos y farmacéuticos como tales.

Esta información no prejuzga que la patente esté o no incluida en la mencionada reserva.

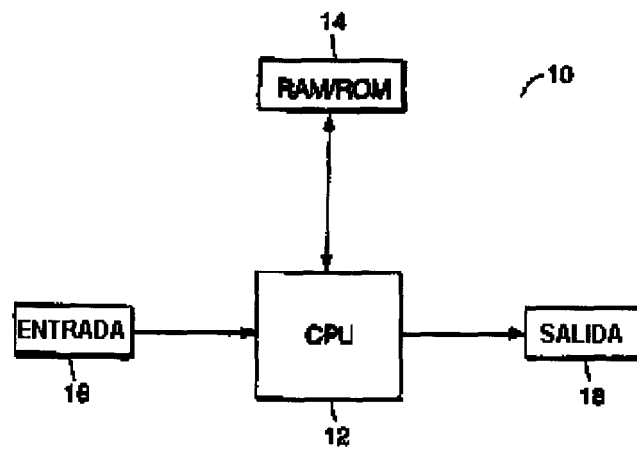


FIG. 1

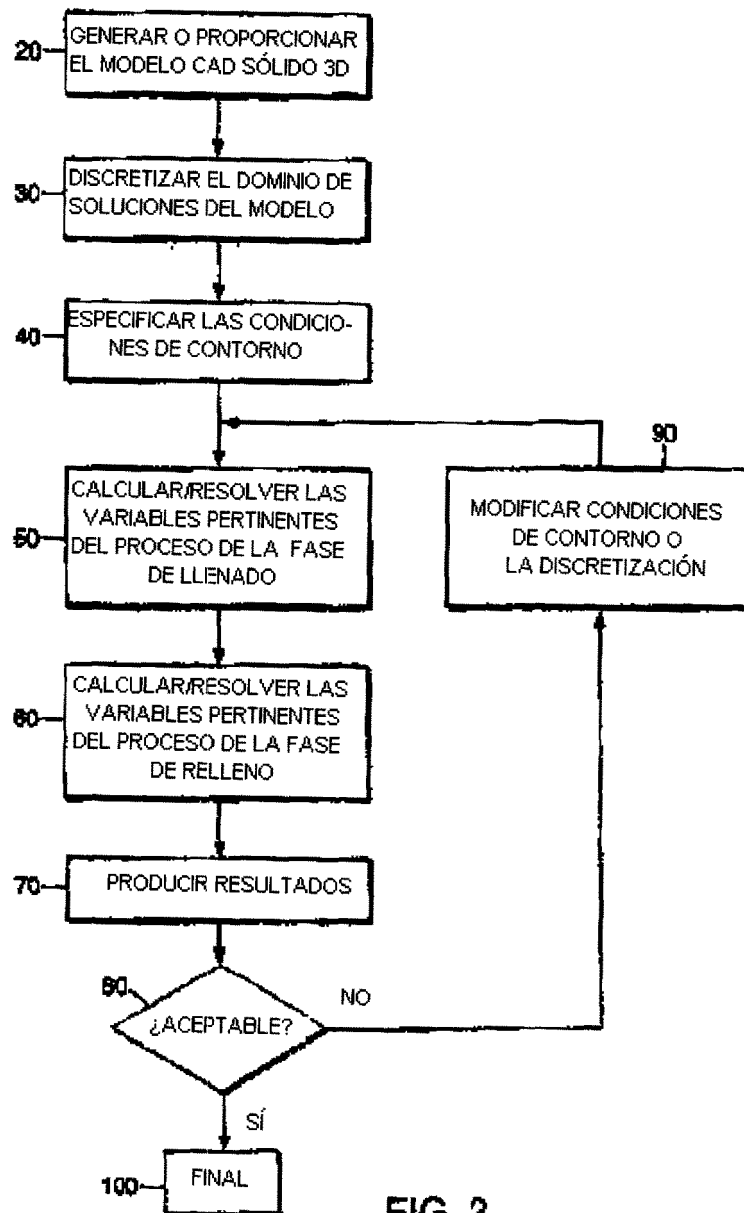


FIG. 2

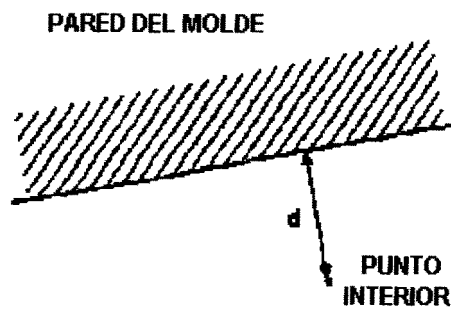


FIG. 3A

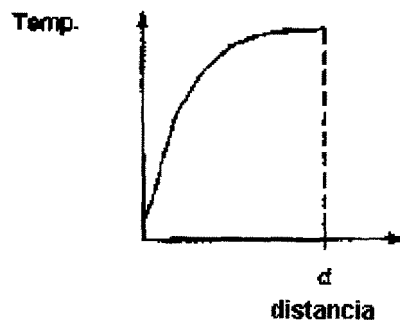


FIG. 3B

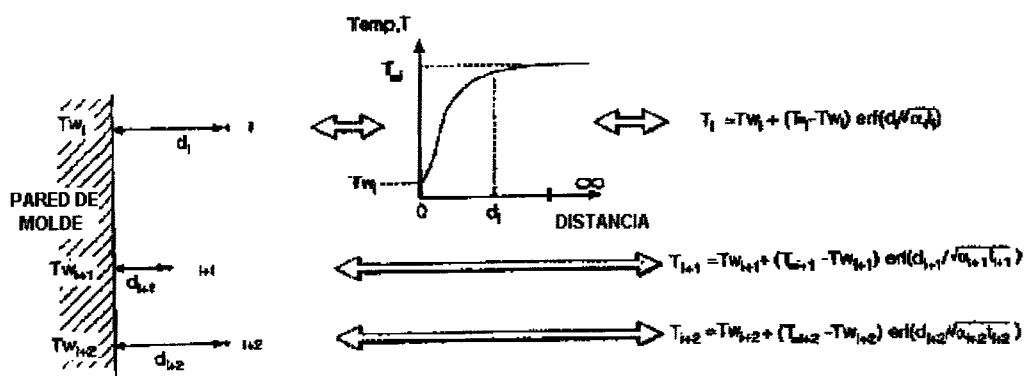


FIG. 4

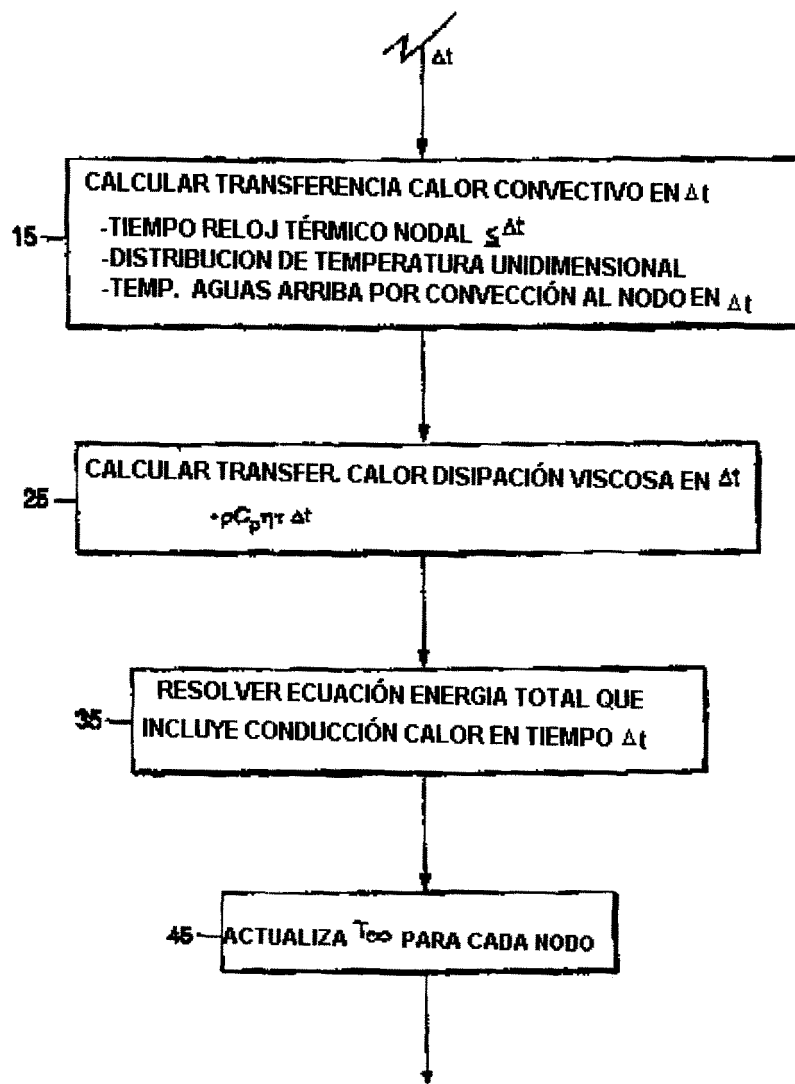


FIG. 5

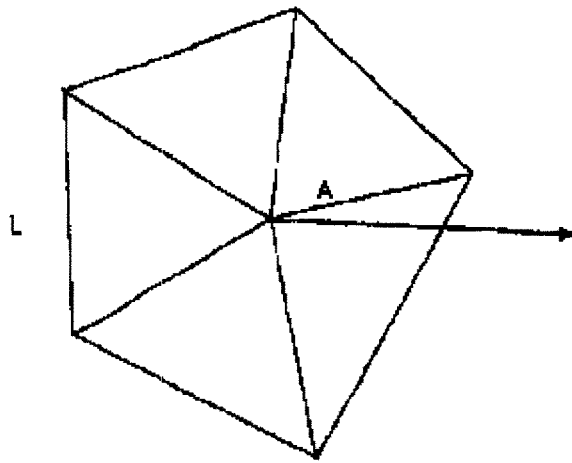


FIG. 6

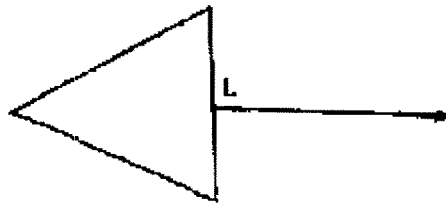


FIG. 7

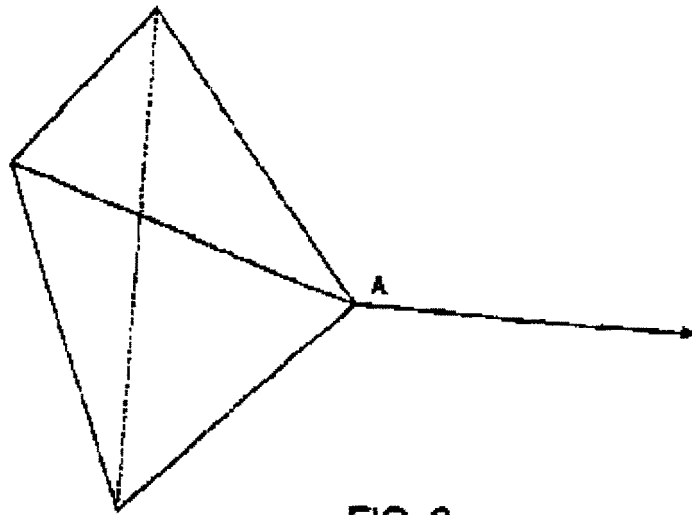


FIG. 8

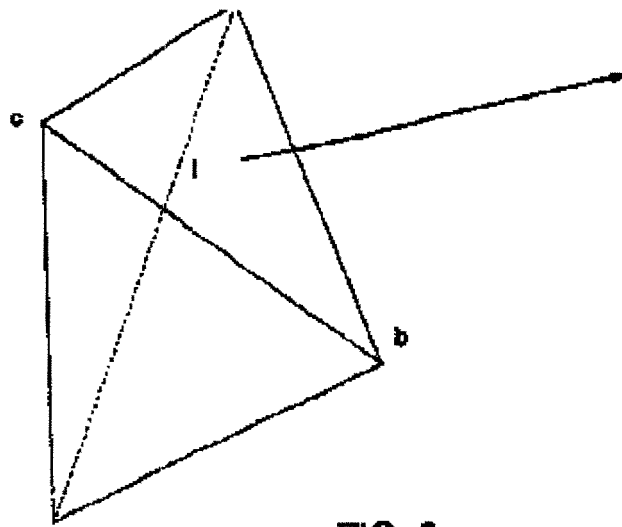
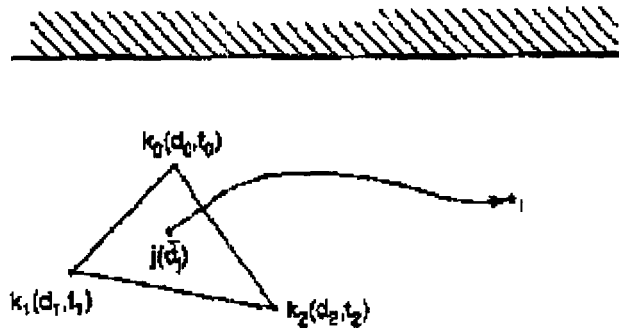


FIG. 9



i = NODO OBJETIVO
 j = PUNTO AGUAS ARRIBA
 k_0, k_1, k_2 = NODO DEL ELEMENTO QUE CONTIENE EL PUNTO AGUAS ABAJO
 $(d_0, t_0), (d_1, t_1), (d_2, t_2)$ SON LAS DISTANCIAS A LA PARED Y TIEMPOS DEL RELOJ TÉRMICO PARA CADA NODO AGUAS ARRIBA, RESPECTIV.
 \bar{d}_j = DISTANCIA INTERPOLADA A LA PARED DEL PUNTO AGUAS ARRIBA

FIG. 10A

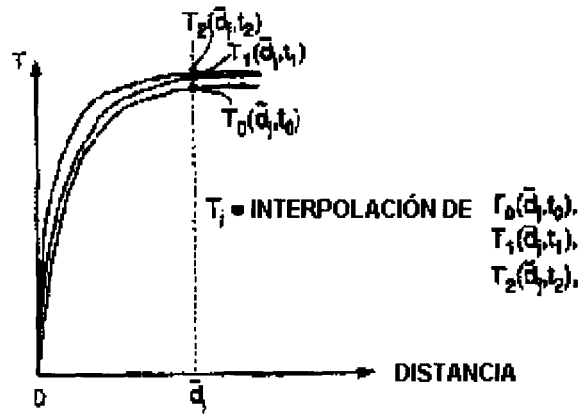
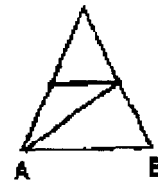


FIG. 10B

PARA UNA CARA CON UNA ARISTA MEJORADA:



PARA UNA CARA CON DOS ARISTAS MEJORADAS:
EN LA QUE $A < B$



PARA UNA CARA CON LAS TRES ARISTAS MEJORADAS

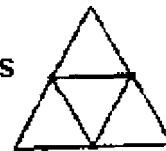


FIG. 11

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

1 ARISTA:

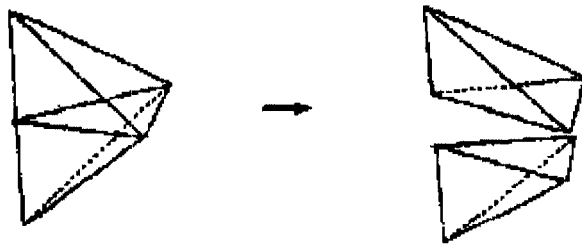
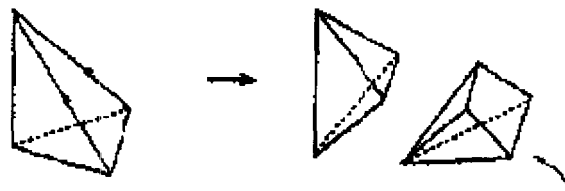


FIG. 12

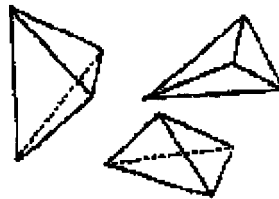
PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

2 ARISTAS



**OBSÉRVESE QUE HAY UN PATRÓN PARA DIVIDIR LA
PIRÁMIDE DE BASE CUADRADA**

ESTO DA COMO RESULTADO:



COMO UN GRUPO CERRADO CON NUEVAS MARCAS DE ARISTAS



FIG. 13A

PATRÓN PARA DIVIDIR UNA PIRÁMIDE DE "BASE CUADRADA"

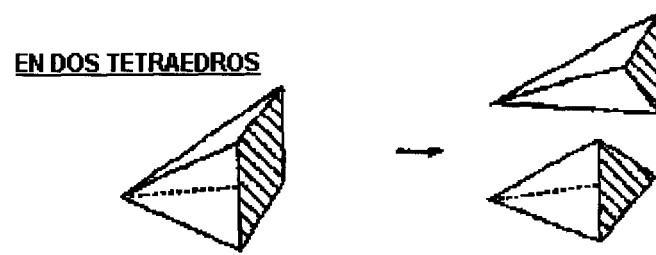
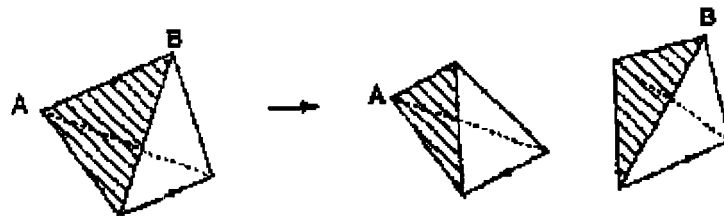


FIG. 13B

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE

2 ARISTAS (OPUESTAS)



EL RESULTADO COMPACTO FINAL SERÁ:

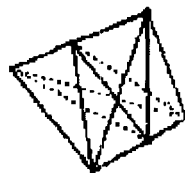
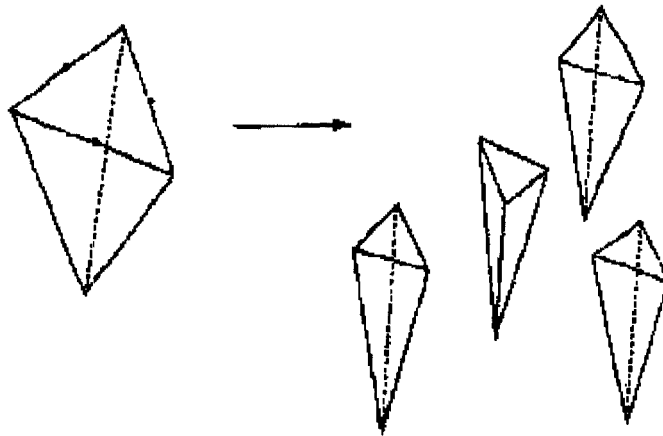


FIG. 13C

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

3 ARISTAS (CARA COMPARTIDA)



EN FORMA CERRADA

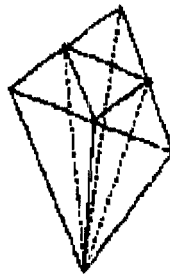
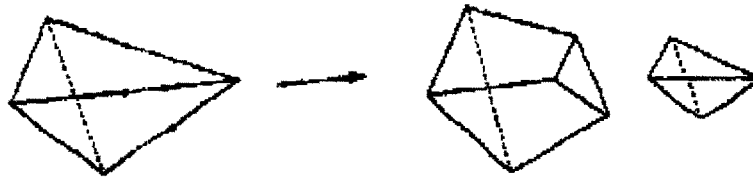


FIG. 14A

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

3 ARISTAS (SIN CARA COMPARTIDA)



EL RESULTADO FINAL SERÁ:

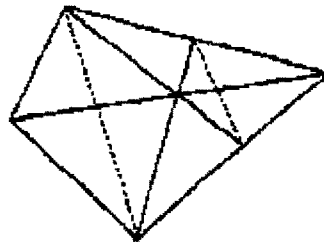


FIG. 14B

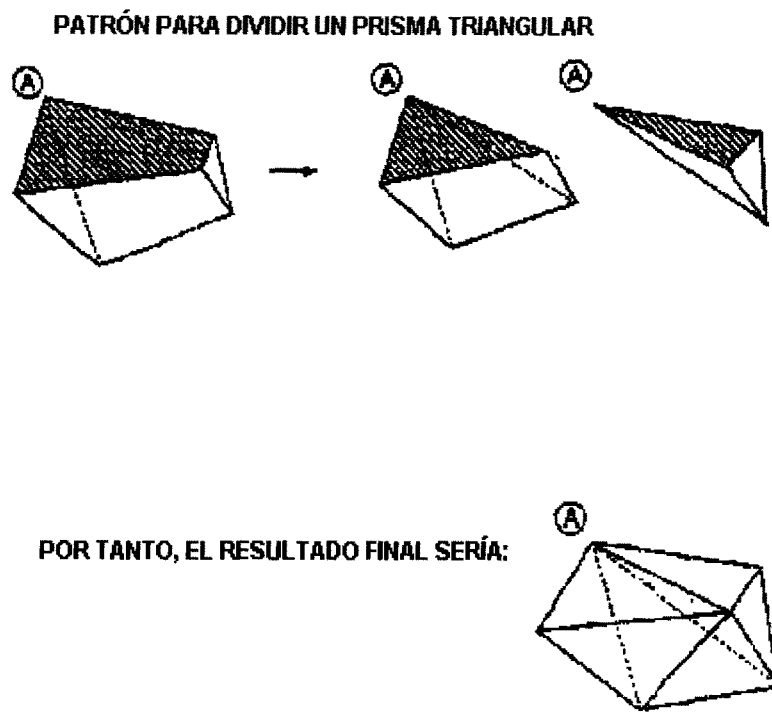


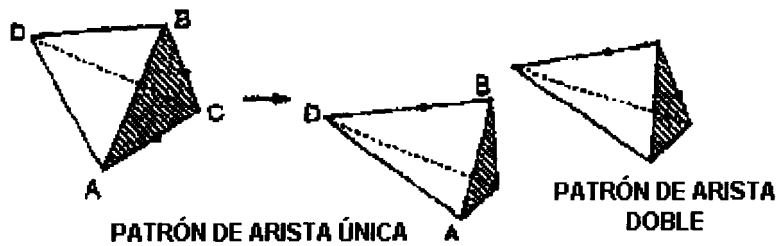
FIG. 14C

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

3 ARISTAS (EN SERIE)

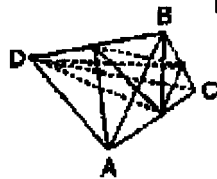
SIN CARA NI PUNTO COMPARTIDO

***SI B O C SON EL NÚMERO DE NODO INFERIOR (DIBUJO PARA B)**

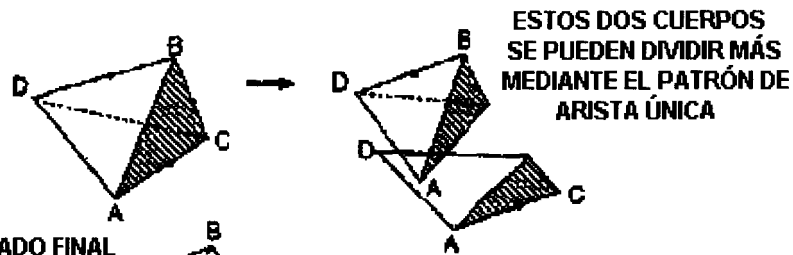


RESULTADO FINAL

TODAS LAS CARAS SON **O**



*** SI A O D SON EL ELEMENTO NODAL INFERIOR**



RESULTADO FINAL

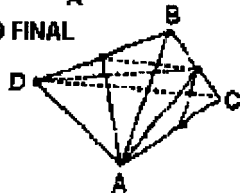
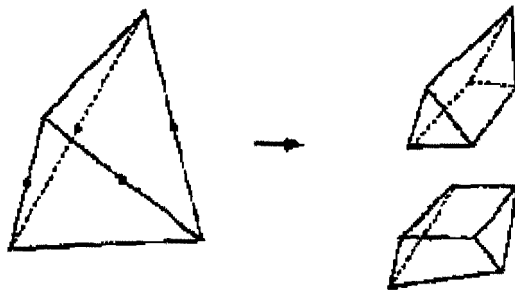


FIG. 14D

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

4 ARISTAS (ARISTAS OPUESTAS)



CUERPO DIVIDIDO FINAL EN FORMA CERRADA

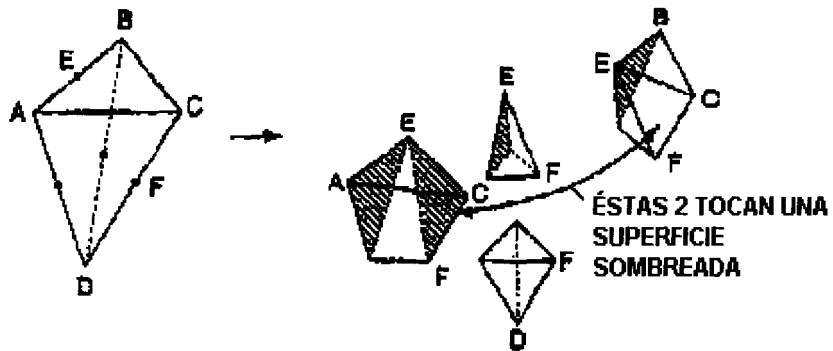
EL DISEÑO SOBRE CADA CARA TRIANGULAR ORIGINAL ES:



FIG. 15A

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

4 ARISTAS (ARISTAS ADYACENTES)



EL TETRAEDRO ORIGINAL COMPACTADO ES:

LAS CARAS APARECEN COMO

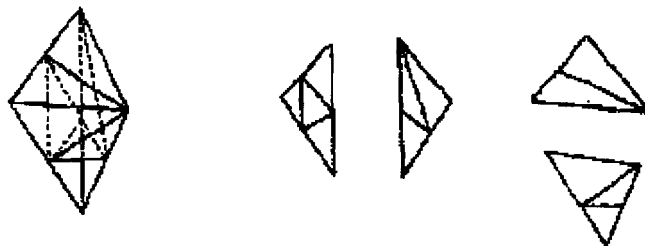
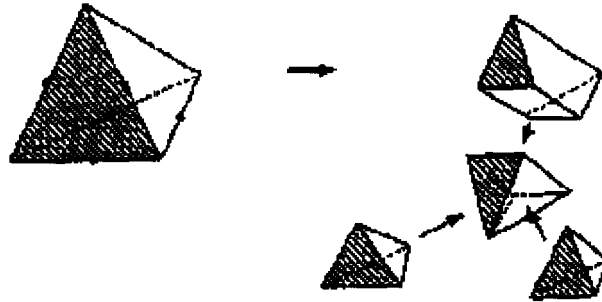


FIG. 15B

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:

5 ARISTAS



EL RESULTADO COMPACTADO FINAL ES:

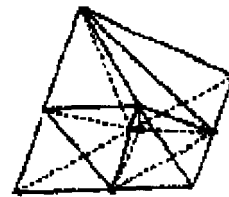
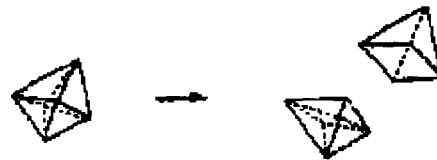
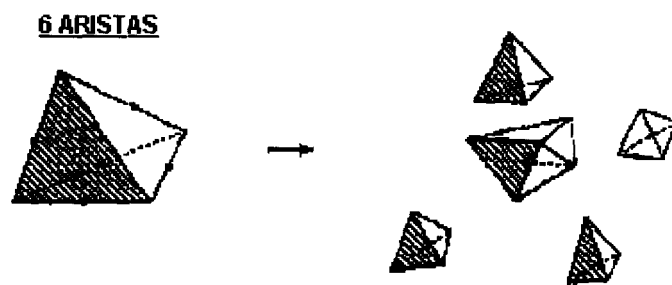


FIG. 16

PATRÓN PARA DIVIDIR UN TETRAEDRO SOBRE:



EL CUERPO COMPACTADO RESULTANTE ES:

TODAS LAS CARAS TIENEN EL SIGUIENTE DISEÑO DE DIVISIÓN



FIG. 17

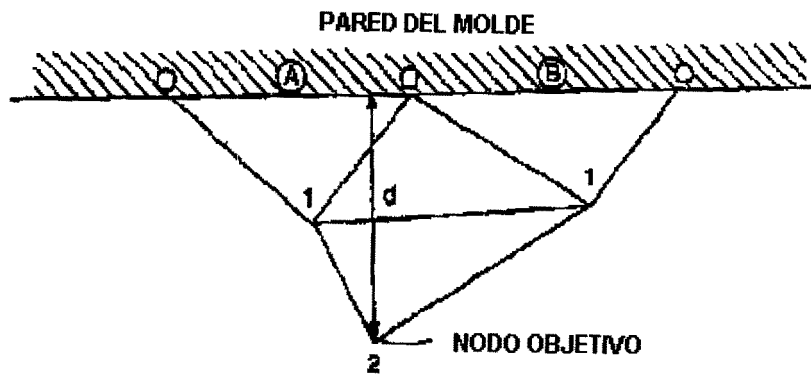


FIG. 18A

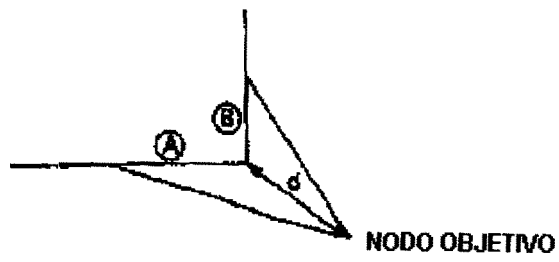


FIG. 18B

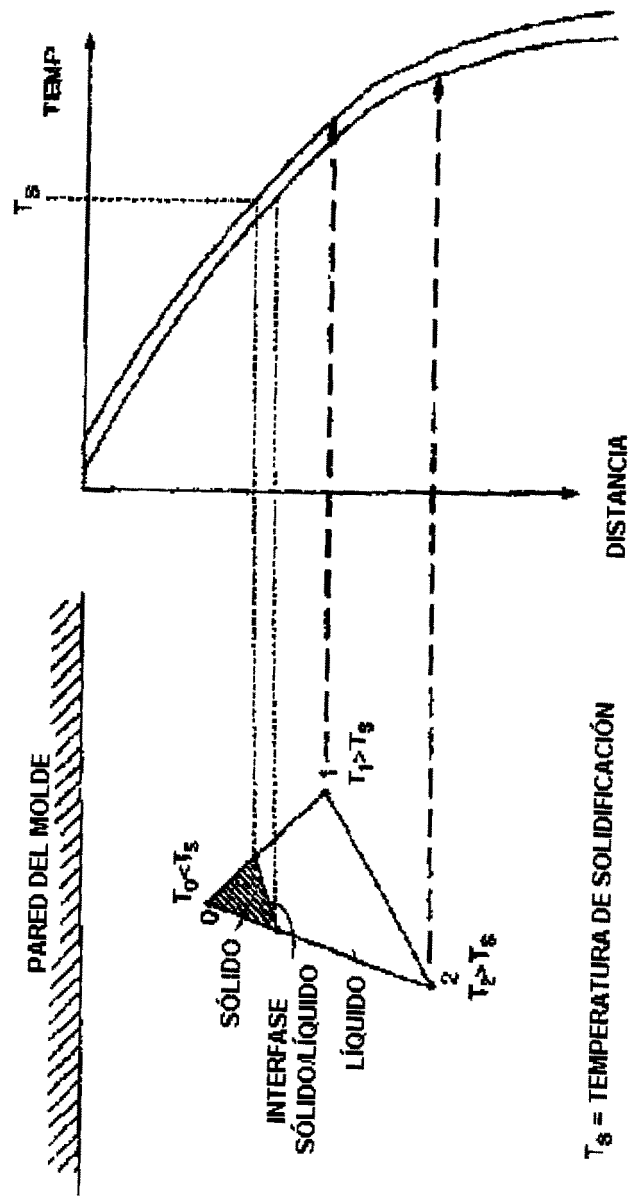


FIG. 19

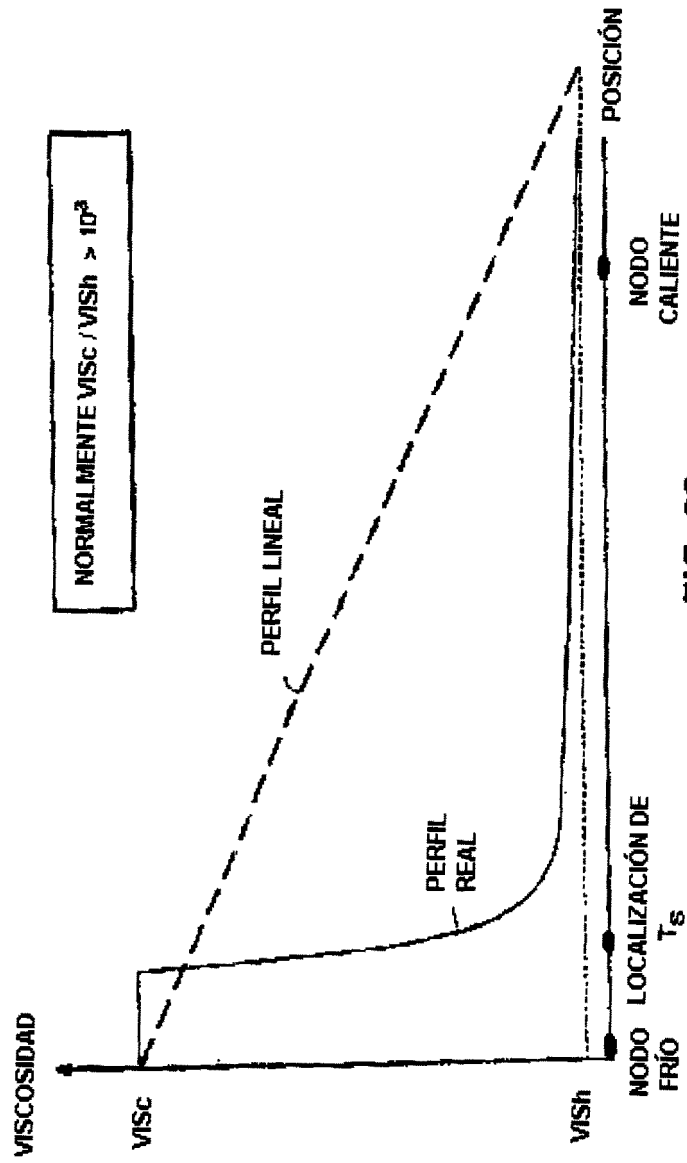


FIG. 20

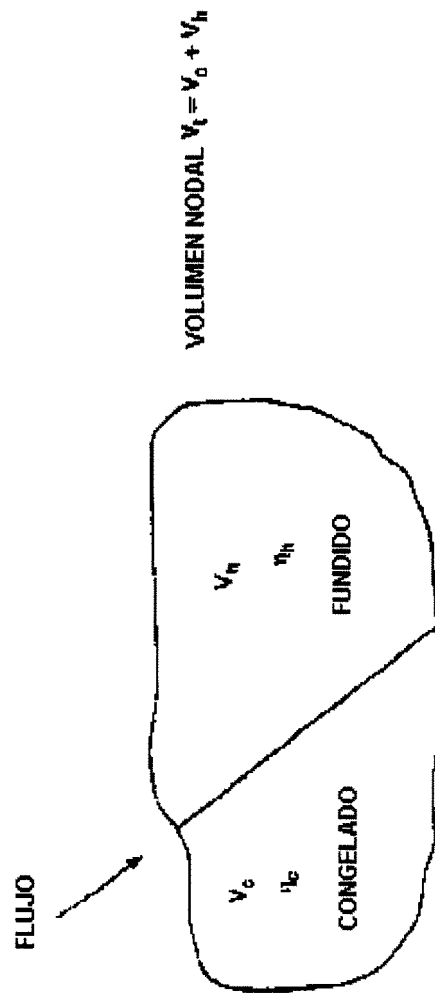


FIG. 21

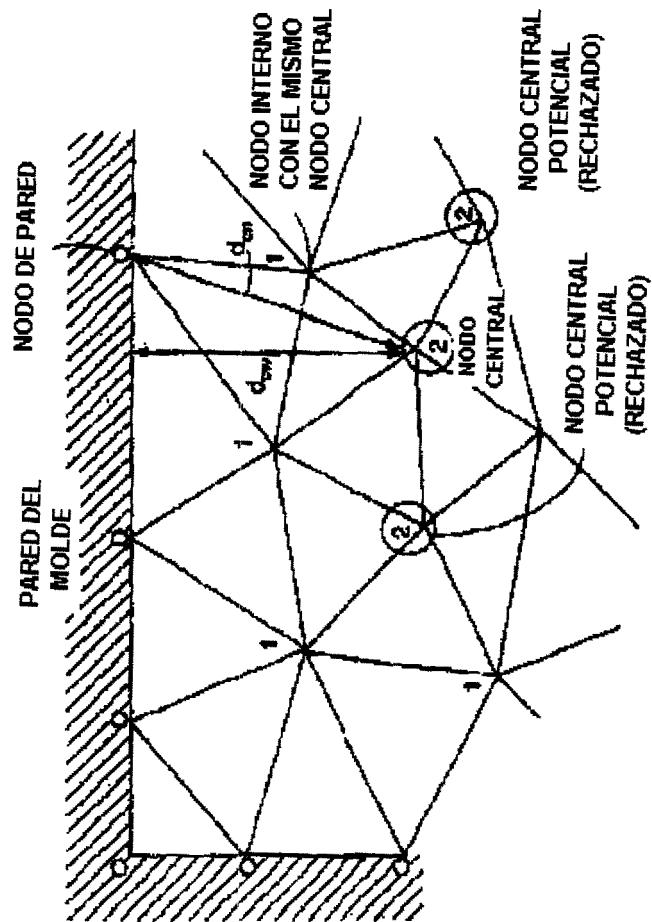


FIG. 22

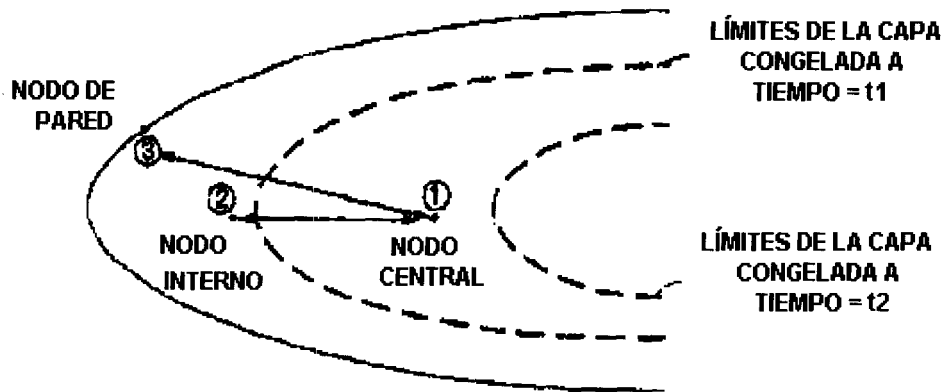


FIG. 23A

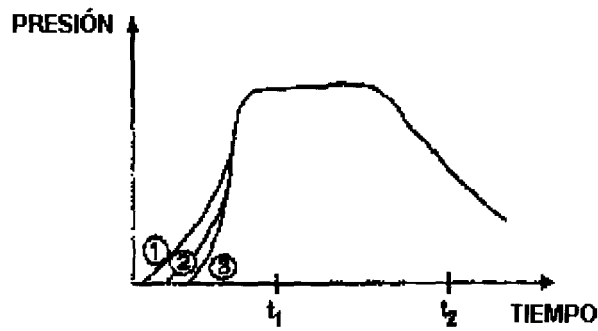


FIG. 23B

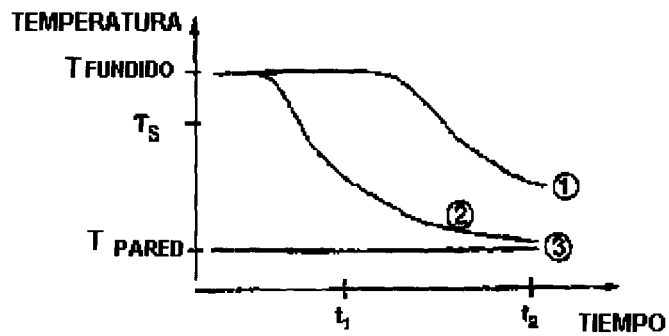
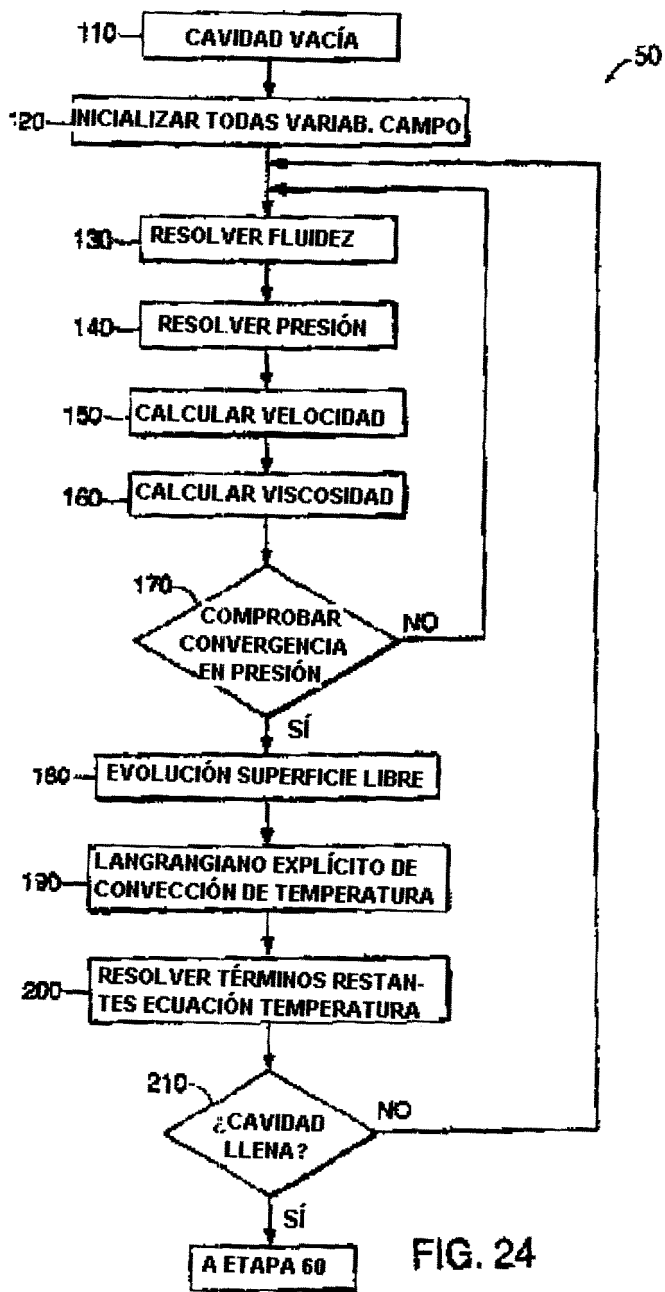


FIG. 23C



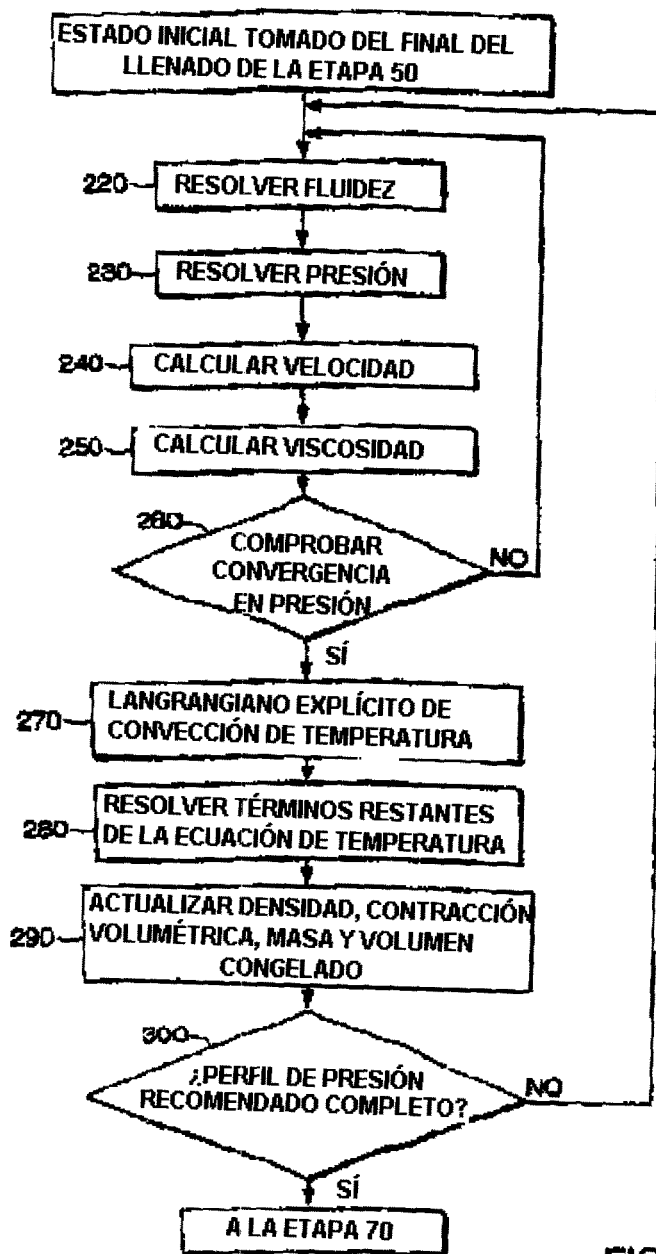


FIG. 25