

黏弹性流体充模过程中凝固现象的数值模拟*

王芳 李俊林[†] 杨斌鑫

(太原科技大学应用科学学院, 太原 030024)

(2013年10月11日收到; 2014年1月7日收到修改稿)

建立了黏弹性流体在充模过程中带有相变的气-液两相模型, 该模型分别由气、液两相的质量守恒方程、动量守恒方程、能量守恒方程描述, 并通过引入 Heaviside 函数将气-液两相的方程组统一为一个方程组; 建立了一个对型腔内熔体和气体都适用的修正的焓方法来描述充模过程中的相变. 采用基于同位网格的有限体积方法对模型进行求解, 水平集方法捕捉充模过程中的界面演化, 模拟出了黏弹性流体在充模过程中的凝固现象, 得出了充模过程中型腔内的温度、压力、第一法向应力差等随时间的变化; 并讨论了型腔壁面温度、熔体温度、注射速度对充模过程中凝固现象的影响. 研究表明: 型腔壁面温度越高, 凝固层越薄; 熔体温度越高, 凝固层越薄; 注射速度越高, 凝固层越薄, 故提高型腔壁面温度、熔体温度、注射速度可以减少或消除型腔壁面附近的凝固层.

关键词: 黏弹性流体, 充模过程, 相变, 焓方法

PACS: 46.35.+z, 81.20.Hy, 81.30.Fb, 47.61.Jd

DOI: 10.7498/aps.63.084601

1 引言

充模过程是注塑成型的主要阶段, 伴随相当复杂的物理过程. 一方面, 非牛顿的高温聚合物熔体在压力作用下, 注入温度较低的模具型腔; 另一方面, 熔体与模具型腔的温差导致注入的熔体快速冷却, 同时伴随固化、体积收缩及可能的结晶过程. 因此, 如果不借助复杂的计算机模拟技术, 很难对注塑成型的制品质量进行预测和控制. 迄今为止, 有许多学者对充模过程进行了数值模拟研究, 文献[1—10]利用 Hele-Shaw 模型或 Navier-Stokes (N-S) 方程对充模过程进行了数值模拟, 但是他们没有考虑充模过程中的界面运动. 文献[11—21]虽然考虑了充模过程中的界面运动, 但是他们忽略了充模过程中型腔内因温度变化引起的相变. 事实上, 在充模过程中, 模壁的温度比熔体的温度低得多, 这样在模壁的附近, 由于温度的降低, 黏度

增高, 使得聚合物开始固化, 这就是所谓的“相变”或者“凝固”层. 当熔体开始固化的同时, 会释放大量的热, 即潜热, 潜热将阻止熔体的固化. 由于充模过程中模壁附近的“凝固”层对模型制品的模压应变不利, 故研究充模过程中的凝固现象时, 一定需要考虑相变. 文献[22—24]研究了合金或陶瓷基材料的相变问题, 但是对黏弹性聚合物相变研究较少, 目前研究黏弹性流体以模型方程建立与数值求解方法为主, 如文献[14, 17, 18, 25, 26].

综上, 目前虽有不少文献建立了聚合物熔体充填过程的数学模型并进行了数值模拟, 但迄今为止, 还没有一个全面而准确的描述带有相变充填过程的数学模型. 鉴于此, 本文建立了黏弹性流体在充模过程中带有相变的气-液两相模型, 同时建立了一个对型腔内熔体和气体都适用的修正的焓方法来描述充模过程的相变; 采用基于同位网格的有限体积方法对模型进行求解, 用水平集 (LS) 方法捕捉充模过程中的界面演化, 模拟了黏弹性流体在

* 国家自然科学基金 (批准号: 51078250)、山西省自然科学基金 (批准号: 2012011019-2, 2011011021-3)、山西省研究生优秀创新项目 (批准号: 20133117) 和太原科技大学博士基金 (批准号: 20112011) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: lijunlin9726@163.com

充模过程中的凝固现象, 并对充模过程中型腔内的各个物理量随时间的变化, 以及型腔壁面温度、熔体温度、注射速度对凝固层的影响进行了研究.

2 黏弹性熔体充模过程的非等温模型

2.1 界面捕捉控制方程

本文采用 Sussman 等^[27]提出的修正的 LS 方法来捕捉熔体界面演化. LS 方程为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = 0, \quad (1)$$

重新初始化方程

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t_r} + \text{sgn}(\varphi_0)(|\nabla \varphi| - 1) \\ = \omega \delta_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|, \\ \varphi(x, y, 0) = \varphi_0(x, y), \end{cases} \quad (2)$$

其中 φ 为 LS 函数, \mathbf{u} 为速度矢量, t 为时间. t_r 是伪时间, $\text{sgn}(\varphi_0)$ 为点到界面的符号距离函数, 定义如下:

$$\text{sgn}(\varphi_0) = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\varphi_0^2 + [\min(\Delta x, \Delta y)]^2}},$$

其中 $\Delta x, \Delta y$ 分别表示网格在 x 方向与 y 方向的宽度, $[\min(\Delta x, \Delta y)]^2$ 用于避免分母被零除, ω 是局部校正系数. $\delta_\varepsilon(\varphi)$ 为 Dirac delta 函数, 其表达式如下:

$$\delta_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}(1 + \cos(\pi\varphi/\varepsilon)) & (|\varphi| < \varepsilon) \\ 0 & (\text{其他}) \end{cases},$$

其中 ε 为界面宽度, 通常取 $\varepsilon = \Delta x$.

2.2 流体控制方程

本文气、液两相处理为不可压缩流体, 型腔内的气相为牛顿流体, 型腔内的液相为黏弹性熔体.

定义 Heaviside 函数^[27]

$$H_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 0 & (\varphi < -\varepsilon) \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varphi}{\varepsilon} + \sin(\pi\varphi/\varepsilon)/\pi \right] & (|\varphi| \leq \varepsilon) \\ 1 & (\varphi > \varepsilon) \end{cases},$$

并定义

$$\rho(\varphi) = \rho_g + (\rho_m - \rho_g)H_\varepsilon(\varphi),$$

$$\eta(\varphi) = \eta_g + (\eta_m - \eta_g)H_\varepsilon(\varphi),$$

$$C(\varphi) = C_g + (C_m - C_g)H_\varepsilon(\varphi),$$

$$K(\varphi) = K_g + (K_m - K_g)H_\varepsilon(\varphi),$$

其中下标 m, g 分别表示熔体相和气相.

通过 Heaviside 函数可将牛顿流体和黏弹性流体的控制方程统一为一个方程组^[28], 即连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0; \quad (3)$$

u -动量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} \\ & - \left(\frac{\partial^2(\eta u)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta u)}{\partial y^2} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial x} + (\beta - 1) \left(\frac{\partial^2(\eta u)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta u)}{\partial y^2} \right) H_\varepsilon(\varphi) \\ & + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi); \end{aligned} \quad (4)$$

v -动量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} \\ & - \left(\frac{\partial^2(\eta v)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta v)}{\partial y^2} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial y} + (\beta - 1) \left(\frac{\partial^2(\eta v)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta v)}{\partial y^2} \right) H_\varepsilon(\varphi) \\ & + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi); \end{aligned} \quad (5)$$

其中 u, v 分别是沿 x, y 方向的速度; ρ 是密度, η 是黏度, p 是压力, β 是牛顿黏度与总黏度的比值. 本文采用 Verbeeten 等^[29]建立的能够描述聚合物浓厚体系的剪切和拉伸行为的 SXPP (single extended pom-pom) 模型描述黏弹性熔体的本构关系, 其应力 τ_{xx}, τ_{xy} 及 τ_{yy} 满足如下张量形式:

$$\begin{aligned} & f(\lambda, \boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\tau} + \lambda_{0b} \overline{\boldsymbol{\tau}} + G_0(f(\lambda, \boldsymbol{\tau}) - 1) \mathbf{I} + \frac{\alpha}{G_0} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau} \\ & = 2\lambda_{0b} G_0 \mathbf{D}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$\begin{aligned} f(\lambda, \boldsymbol{\tau}) &= 2 \frac{\lambda_{0b}}{\lambda_{0s}} e^{\nu(\lambda-1)} \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right) \\ &+ \frac{1}{\lambda^2} \left[1 - \frac{\alpha \mathbf{I}_{\boldsymbol{\tau}} \cdot \boldsymbol{\tau}}{3G_0^2} \right], \end{aligned}$$

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{|\mathbf{I}_{\boldsymbol{\tau}}|}{3G_0}},$$

$$\nu = \frac{2}{q},$$

这里 λ 为主链拉伸量, 用于表示聚合物分子受拉伸的程度; λ_{0b} 和 λ_{0s} 分别表示聚合物分子链的取向和拉伸松弛时间; α 是材料各向异性参数, G_0 是线性松弛模量, q 是聚合物分子链的连接臂数, \mathbf{I} 是单位张量, \mathbf{D} 是应变张量; 上标 ∇ 表示上随体导数, 其定义为

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{u}),$$

能量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho C T) + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{u} T) \\ & = \nabla \cdot (K \nabla T) + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 C 是比热, T 是温度, K 是导热系数, $\boldsymbol{\sigma}$ 柯西应力张量, $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \eta\mathbf{D}$.

通过引入如下无量纲变量进行无量纲化:

$$\begin{aligned} x &= Lx', \quad y = Ly', \quad u = Uu', \quad v = Uv', \\ t &= (L/U)t', \quad p = p' \rho_m U^2, \\ \rho &= \rho_m \rho', \quad \eta = \eta_m \eta', \\ \tau_{ik} &= \eta_m U \tau'_{ik} / L, \quad C = C_m C', \\ K &= K_m K', \quad T = T_0 T', \end{aligned}$$

其中 $'$ 表示无量纲变量. 将这些变量代入方程组 (3)—(5) 和 (7) 式, 且仍用原变量表示无量纲变量, 可得连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0; \quad (8)$$

u -动量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} \\ & - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2(\eta u)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta u)}{\partial y^2} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{(\beta - 1)}{Re} \left(\frac{\partial^2(\eta u)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta u)}{\partial y^2} \right) H_\varepsilon(\varphi) \\ & + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi); \end{aligned} \quad (9)$$

v -动量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} \\ & - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2(\eta v)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta v)}{\partial y^2} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{(\beta - 1)}{Re} \\ & \times \left(\frac{\partial^2(\eta v)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\eta v)}{\partial y^2} \right) H_\varepsilon(\varphi) \\ & + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi); \end{aligned} \quad (10)$$

本构方程

$$m \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (m \mathbf{u} \psi) - \nabla \cdot (\Lambda \nabla \psi) = S_\psi; \quad (11)$$

能量方程

$$\begin{aligned} & Pe \left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho C T) + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{u} T) \right) \\ & = \nabla \cdot (K \nabla T) + Br(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}). \end{aligned} \quad (12)$$

本构方程 (11) 中的常数和函数 m , ψ , Λ , S_ψ 的定义由表 1 给出 [30]. 其中雷诺数 $Re = \rho_m L U / \eta_m$, Peclet 数 $Pe = \rho_m C_m U L / K_m$, Brinkman 数 $Br = \eta_m U^2 / K_m T_0$, Weissenberg 数 $We = \lambda_{0b} U / L$. 且

$$\begin{aligned} \rho(\varphi) &= \rho_g / \rho_m + (1 - \rho_g / \rho_m) H_\varepsilon(\varphi), \\ \eta(\varphi) &= \eta_g / \eta_m + (1 - \eta_g / \eta_m) H_\varepsilon(\varphi), \\ C(\varphi) &= C_g / C_m + (1 - C_g / C_m) H_\varepsilon(\varphi), \\ K(\varphi) &= K_g / K_m + (1 - K_g / K_m) H_\varepsilon(\varphi). \end{aligned}$$

表 1 本构方程中的常数和函数 [30]

方程	m	ψ	Λ	S_ψ
τ_{xx} 正应力	We	τ_{xx}	0	$2(1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial x} + 2We\tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + 2We\tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} - f(\lambda, \boldsymbol{\tau})\tau_{xx} - [f(\lambda, \boldsymbol{\tau}) - 1] \frac{1 - \beta}{We} - \alpha \frac{We}{1 - \beta} (\tau_{xx}^2 + \tau_{xy}^2)$
τ_{xy} 剪应力	We	τ_{xy}	0	$(1 - \beta) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + We\tau_{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + We\tau_{yy} \frac{\partial u}{\partial y} - f(\lambda, \boldsymbol{\tau})\tau_{xy} - \alpha \frac{We}{1 - \beta} \tau_{xy} (\tau_{xx} + \tau_{yy})$
τ_{yy} 正应力	We	τ_{yy}	0	$2(1 - \beta) \frac{\partial v}{\partial y} + 2We\tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + 2We\tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - f(\lambda, \boldsymbol{\tau})\tau_{yy} - [f(\lambda, \boldsymbol{\tau}) - 1] \frac{1 - \beta}{We} - \alpha \frac{We}{1 - \beta} (\tau_{yy}^2 + \tau_{xy}^2)$
τ_{zz} 应力	We	τ_{zz}	0	$-f(\lambda, \boldsymbol{\tau})\tau_{zz} - [f(\lambda, \boldsymbol{\tau}) - 1] \frac{1 - \beta}{We} - \alpha \frac{We}{1 - \beta} \tau_{zz}^2$

2.3 相变模型

目前已有的相变模型主要分为三类: Stefan 模型 [31,32]、相场模型 [33-35] 和焓模型 [36-40]. 焓模型是采用固定网格对焓进行计算, 并引入了一个窄的糊状区域代替突变界面模型中的界面, 不但避免了考虑界面处的热通量平衡以及对固-液界面的追踪,

而且消除了界面处的奇异性. 本文利用焓模型建立带有潜热的相变模型.

由于本文同时考虑型腔内的气体和熔体, 故焓模型中必须包括焓与气相温度、熔体相温度之间的关系. 鉴于此, 本文建立了如下修正的焓模型.

定义 $C(T) = \frac{\partial H}{\partial T}$, 焓 H 与温度 T 之间的关系为 [41]

$$T(H) = \begin{cases} T_s + \frac{H}{C_s} & (H \leq 0) \\ T_s + \frac{H(T_1 - T_s)}{L_H + C_f(T_1 - T_s)} & (0 < H < L_H + C_f(T_1 - T_s)), \\ T_s + \frac{H}{C_s} - \frac{L_H + (C_f - C_1)(T_1 - T_s)}{C_1} & (H \geq L_H + C_f(T_1 - T_s)) \end{cases} \quad (13)$$

且

$$\begin{aligned} T_s &= T_g + (T_{m,s} - T_g)H_\varepsilon(\varphi), \\ T_1 &= T_g + (T_{m,l} - T_g)H_\varepsilon(\varphi), \\ L_H &= L_g + (L_m - L_g)H_\varepsilon(\varphi), \\ C_s &= C_g + (C_{m,s} - C_g)H_\varepsilon(\varphi), \\ C_f &= C_g + (C_{m,f} - C_g)H_\varepsilon(\varphi), \\ C_1 &= C_g + (C_{m,l} - C_g)H_\varepsilon(\varphi), \end{aligned}$$

其中下标 m, g 分别表示型腔内熔体相和气相; 下标 s, f, l 分别表示熔体相的固体状、模糊状态、液体状态; T_g 表示气相的温度; $T_{m,s}, T_{m,l}$ 分别表示熔体相为固状、液状的温度临界值; L_H 为潜热, L_m, L_g 分别表示熔体相和气相的潜热值; C_g 表示气体的焓随温度的变化率, $C_{m,s}$ 为熔体固状时焓随温度的变化率; $C_{m,f}, C_{m,l}$ 含义类似. 当 $H_\varepsilon(\varphi) = 1$ 时, H 与 T 的关系为焓与熔体温度的关系, 当 $H_\varepsilon(\varphi) = 0$ 时, H 与 T 的关系为焓与气体温度的关系.

引入 Kirchhoff 温度 $T_{Kir} = \Gamma(H)H + S(H)$, 代入方程 (12) 得:

$$Pe \left(\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial \rho u H}{\partial x} + \frac{\partial \rho v H}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 \Gamma(H)H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Gamma(H)H}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S(H)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S(H)}{\partial y^2} + Br(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}), \quad (14)$$

其中

$$\Gamma(H) = \begin{cases} \frac{K_s}{C_s} & (H \leq 0) \\ \frac{k_f(T_1 - T_s)}{L_H + C_f(T_1 - T_s)} & (0 < H < L_H + C_f(T_1 - T_s)), \\ \frac{K_1}{C_1} & (H \geq L_H + C_f(T_1 - T_s)) \end{cases}$$

$$S(H) = \begin{cases} 0 & (H \leq 0) \\ 0 & (0 < H < L_H + C_f(T_1 - T_s)), \\ -K_1 \frac{L_H + (C_f - C_1)(T_1 - T_s)}{C_1} & (H \geq L_H + C_f(T_1 - T_s)) \end{cases}$$

$K_s = K_g + (K_{m,s} - K_g)H_\varepsilon(\varphi)$, $K_f = K_g + (K_{m,f} - K_g)H_\varepsilon(\varphi)$, $K_1 = K_g + (K_{m,l} - K_g)H_\varepsilon(\varphi)$; K_g 表示气体的导热系数; $K_{m,s}, K_{m,f}, K_{m,l}$ 分别表示熔体相为固状、糊状、液状时的导热系数.

2.4 Cross-WLF 黏度方程

本文的熔体为黏弹性流体, 故控制方程不仅要考虑弹性的作用, 同时要反映熔体黏度变化的黏度模型. 本文选取的黏度模型为七参数 Cross-WLF 黏度模型^[42]:

$$\eta(T, \dot{\gamma}, p) = \frac{\eta_0(T, p)}{1 + (\eta_0 \dot{\gamma} / \tau^*)^{1-n_0}}, \quad (15)$$

式中 $\dot{\gamma}$ 为剪切率, τ^* 表示熔体由牛顿流体区向剪切变稀流体区所受的剪切应力水平, n_0 是非牛顿指数; $\eta_0(T, p)$ 是熔体零剪切黏度, 是温度和压力的函数, 反映了温度、压力对熔体黏度的影响. 当采用 WLF 型表达式描述时, 有

$$\eta_0 = D_1 \exp \left[\frac{-A_1(T - T^*)}{A_2 + (T - T^*)} \right], \quad (16)$$

其中 $T^* = D_2 + D_3 p$, $A_2 = \hat{A}_2 + D_3 p$, A_1 表示零剪切黏度下的玻璃化转变温度的温度相关性, \hat{A}_2 是与选取的聚合物熔体材料相关的参数, D_1 表示在零剪切黏度、玻璃化转变温度以及大气压强下的熔体黏度, D_2 是材料的玻璃化转变温度, D_3 表示熔体的玻璃化转变温度随压力的变化量, T^* 是熔体的玻璃化转变温度, 通常与压力有关.

2.5 边界条件和时间步长

本文所采用的边界条件如下^[21]:

1) 在型腔壁上, 对型腔内的熔体, 速度采用无滑移边界条件, 即 $u = v = 0$; 对型腔内的气体, $\partial u / \partial n = \partial v / \partial n = 0$;

2) 在型腔壁上, 对型腔内的熔体, 压力采用无渗透边界条件 $\partial p / \partial n = 0$; 对型腔内的气体, 令 $p = 0$.

时间步长 Δt 的选取满足 CFL(Courant-Friedrichs-Lewy) 条件与黏度约束条件^[27]:

$$\Delta t_c = \min \left(\frac{\Delta x}{|u|} \right),$$

$$\Delta t_\eta = \min \left(\frac{3}{14} \frac{\rho Re \Delta x^2}{\eta} \right).$$

最终的时间步长 Δt 按下式选取:

$$\Delta t = \frac{1}{2} \min(\Delta t_c, \Delta t_\eta).$$

综上所述, 方程组 (1), (2), (8)—(11), (14)—(16) 及其边界条件共同构成了黏弹性流体在充模过程带有相变的气-液两相模型.

3 数值模拟与结果

利用基于同位网格的有限体积方法对动量方程、能量方程及本构方程求解, 采用高分辨率格式对 LS 方程及其重新初始化方程求解, 其中空间离散采用五阶 WENO (weighted essentially non-oscillatory) 格式, 时间离散采用三阶 TVD-Runge-Kutta 格式.

3.1 计算区域与参数设置

型腔如图 1 所示, 图中阴影部分即型腔垂直中面为本文的计算区域. 计算区域的长和宽分别为无量纲数 15, 4, 注射口半径为 1. 初始界面如图 2 所示, 选取充模熔体为高密度聚苯乙烯 (high density polyethylene, HDPE), 其固化温度为 377 K, 材料参数和热特性参数如表 2 和表 3 所示, 型腔内的气体热特性参数如表 4 所示.

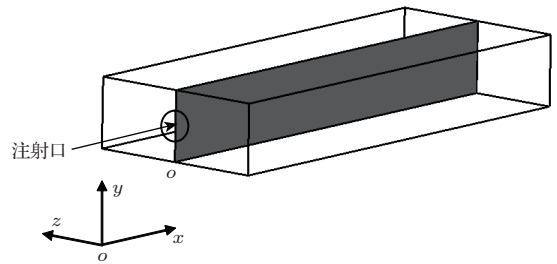


图 1 计算区域

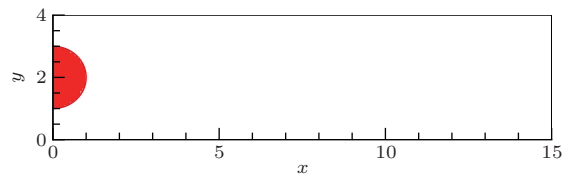


图 2 初始界面

3.2 型腔内的压力及温度分布随时间的变化

图 3 给出了 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, 注射速度 $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$ 时, 黏弹性熔体充模过程中不同时刻型腔内的温度分布. 由图可见: 随着时间的变化, 型腔内的温度不断升高, 但是靠近型腔壁面的温度最低, 温度由外到里, 依次递增.

图 4 给出了 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$,

$u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$ 时, 黏弹性熔体充模过程中不同时刻型腔内的压力分布. 由

图可见, 压力值从型腔口到末端依次递减, 型腔口的压力值始终保持最大.

表2 HDPE的材料参数^[43]

参数	$\rho_m/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	n_0	τ^*/Pa	$D_1/\text{Pa}\cdot\text{s}$	D_2/K	$D_3/\text{Pa}\cdot\text{K}^{-1}$	A_1	\bar{A}_2/K
数值	1.02	0.3794	105985	5.769×10^3	233.15	0.1	32.344	51.6

表3 HDPE的热特性参数^[43]

参数	$K_{m,s}$	$K_{m,f}$	$K_{m,l}$	$C_{m,s}$	$C_{m,f}$	$C_{m,l}$	L_m	$T_{m,s}$	$T_{m,l}$
	$/\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$/\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$/\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$	$/\text{K}$	$/\text{K}$
数值	0.316	0.298	0.238	2042	2516	2990	1.8×10^5	104	108

表4 型腔内气体的热特性参数^[43]

参数	$K_g/\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$C_g/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$L_g/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$	T_g/K
数值	0.023	1000	2260	0

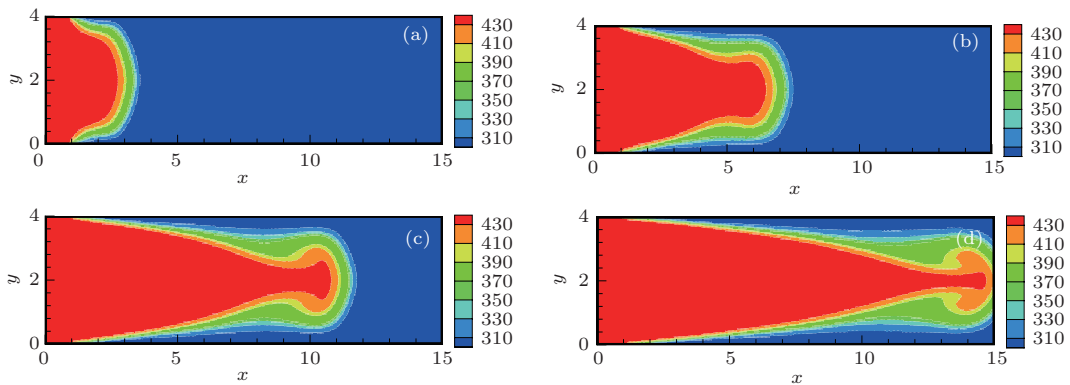


图3 (网刊彩色) 不同时刻型腔内的温度分布 ($T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$) (a) $t = 1800\Delta t$; (b) $t = 3600\Delta t$; (c) $t = 5400\Delta t$; (d) $t = 7004\Delta t$

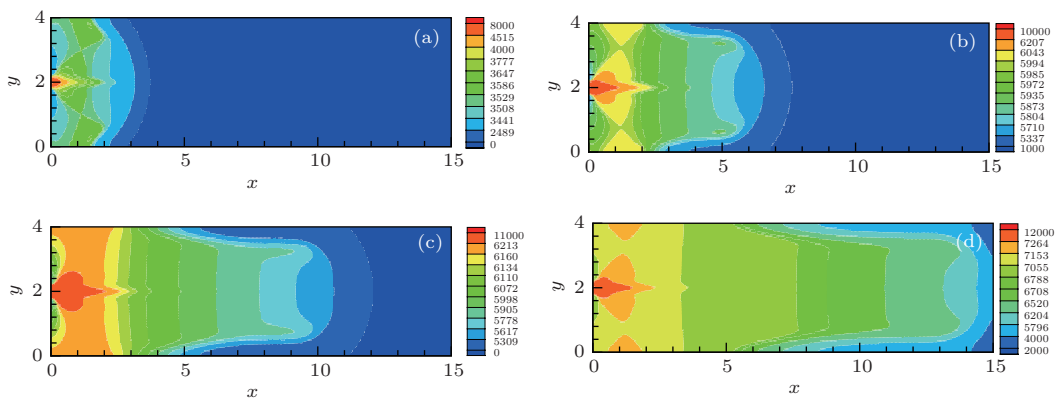


图4 (网刊彩色) 不同时刻型腔内的压力分布 ($T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$) (a) $t = 1800\Delta t$; (b) $t = 3600\Delta t$; (c) $t = 5400\Delta t$; (d) $t = 7004\Delta t$

3.3 型腔内第一法向应力差随时间的变化

图5给出了 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$ 时, 黏弹性熔体充模过程中不同时刻的第一法向应力差分布. 由图可

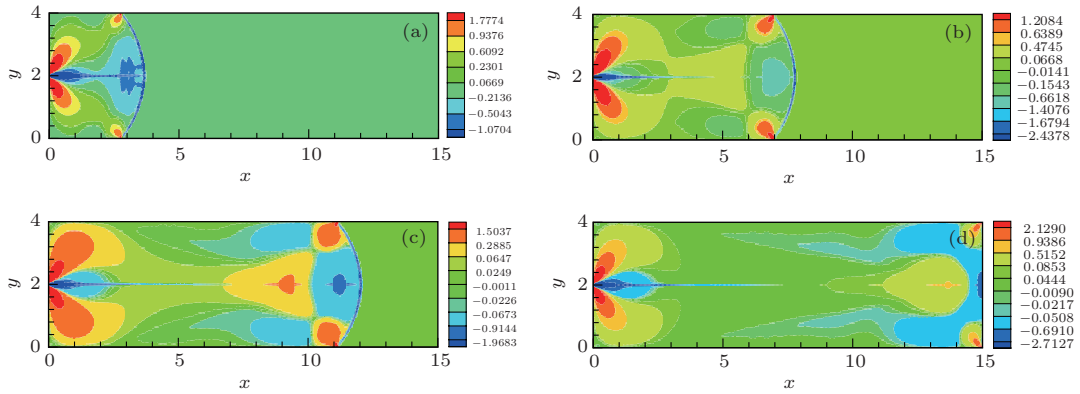


图5 (网刊彩色) 不同时刻型腔内的第一法向应力差分布 ($T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$) (a) $t = 1800\Delta t$; (b) $t = 3600\Delta t$; (c) $t = 5400\Delta t$; (d) $t = 7004\Delta t$

3.4 型腔充模过程中的凝固现象

在充模过程中, 影响型腔壁面附近凝固现象的因素很多, 本文主要讨论壁面温度、熔体温度、注射速度对凝固层的影响.

3.4.1 壁面温度对凝固层的影响

图6(a)给出了 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$ 时型腔内充模结束时的凝固层分布. 由图6(a)可见, 型腔在靠近壁面的地方出现凝固现象. 这是因为在充模过程中, 模壁的温度比熔体的温度低得多, 这样在模壁的附近, 由于温度的降低, 黏度增高, 使得聚合物开始固化, 形成凝固层. 图6(b)给出了 $T_{\text{wall}} = 338 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$ 时型腔内充模结束时的凝固层分布. 比较图6(a)和(b)发现: 图6(b)中的凝固层比图6(a)薄, 这是因为在熔体温度、注射速度等因素相同条件下, 图6(b)中的型腔壁面温度较高, 使得在型腔壁面附近形成的凝固层就较薄. 由此可见: 壁面温度对充模过程中的凝固层分布有影响, 壁面温度越高, 凝固层厚度越薄.

3.4.2 熔体温度对凝固层的影响

图7(a), (b)分给出了 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$; $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$,

以看出: 第一法向应力差关于直线 $y=2$ 对称, 入口处、界面与壁面接触处的第一法向应力差的值比较大, 远离入口、界面与壁面接触处的第一法向应力差的值较小. 原因是在入口处、界面与壁面接触处存在着复杂的剪切和拉伸现象.

$T_{\text{melt}} = 393 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$ 时型腔内充模结束时的凝固层分布, 比较图7(a)和(b)发现: 图7(b)中的凝固层比图7(a)的厚, 这是因为在壁面温度、注射速度等因素相同的条件下, 图7(a)的熔体温度较高, 使得在型腔壁面附近形成的凝固层就较薄. 由此可见熔体温度对充模过程中的凝固层分布有影响, 熔体温度越高, 凝固层厚度越薄.

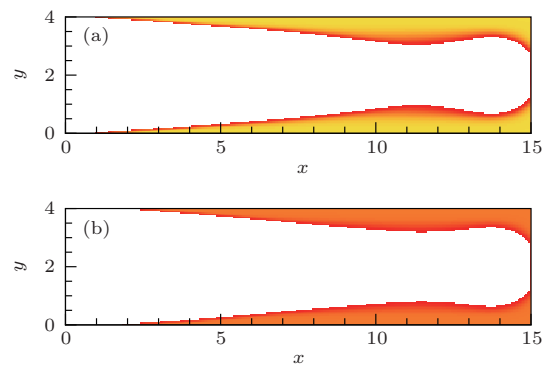


图6 (网刊彩色) 壁面温度对凝固层的影响 ($T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$) (a) $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$; (b) $T_{\text{wall}} = 338 \text{ K}$

3.4.3 注射速度对凝固层的影响

图8(a), (b)出了注射速度分别为 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$ 和 $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -0.25 \times (y - 2.0)^2 + 1$, $y \in [0, 4]$ 时熔体充满型腔时型腔中的凝固层分布. 比较图8(a)和(b)发现:

图8(b)中的凝固层比图8(a)的厚,这是因为在壁面温度和熔体温度相同的条件下,由于图8(b)注射速度较小,导致熔体在型腔内滞留时间较长,靠近型腔壁面的熔体温度下降较多,使得较多熔体温度降至熔点以下,从而形成的凝固层较厚.由此可见注射速度对充模过程中的凝固层分布有影响,注射速度越高,凝固层厚度越薄.

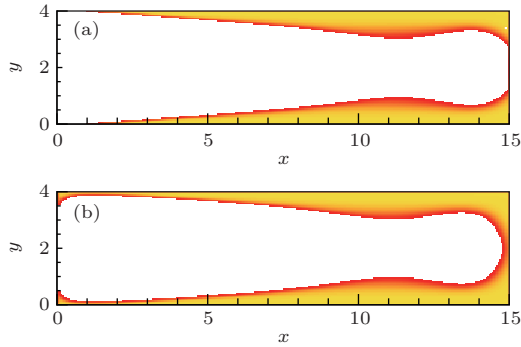


图7 (网刊彩色) 熔体温度对凝固层的影响 ($T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$) (a) $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$; (b) $T_{\text{melt}} = 393 \text{ K}$

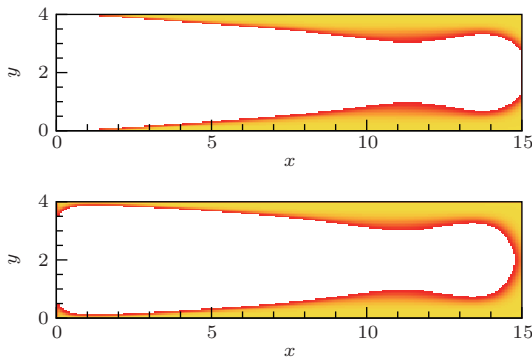


图8 (网刊彩色) 注射速度对凝固层的影响 ($T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$) (a) $u = -1.25 \times (y - 2.0)^2 + 5$, $y \in [0, 4]$; (b) $u = -0.25 \times (y - 2.0)^2 + 1$, $y \in [0, 4]$

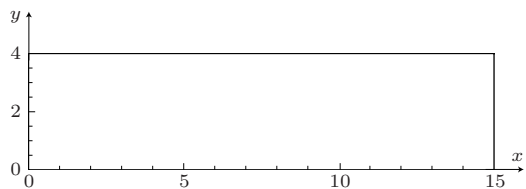


图9 (网刊彩色) 低于固化温度时型腔内的温度分布 ($T_{\text{wall}} = 373 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -2.5 \times (y - 2.0)^2 + 10$, $y \in [0, 4]$)

图9给出了当 $T_{\text{wall}} = 373 \text{ K}$, $T_{\text{melt}} = 433 \text{ K}$, $u = -2.5 \times (y - 2.0)^2 + 10$, $y \in [0, 4]$ 时, 充模结束时型腔内熔体温度低于固化温度的温度分布. 由图可见, 没有出现凝固层. 所以提高型腔壁面温度、熔体温度、注射速度可以减少或消除型腔壁面附近的

凝固层.

4 结 论

本文建立了黏弹性流体在充模过程中带有相变的气-液两相模型; 同时建立了一个对型腔内熔体和气体都适用的修正的焓方法来描述充模过程的相变; 采用基于同位网格的有限体积方法对模型进行求解, 水平集方法捕捉充模过程中的界面演化, 模拟出了黏弹性流体在充模过程中的凝固现象, 得出了充模过程中型腔内的温度、压力、第一法向应力差随时间的变化. 研究发现: 型腔壁面温度越高, 凝固层越薄; 熔体温度越高, 凝固层越薄; 注射速度越高, 凝固层越薄. 故提高型腔壁面温度、熔体温度、注射速度可以减少或消除型腔壁面附近的凝固层.

参考文献

- [1] Wang V W, Hieber C A, Wang K K 1986 *J. Polym. Eng.* **7** 21
- [2] Chiang H H, Hieber C A, Wang K K 1991 *Polym. Eng. Sci.* **31** 116
- [3] Kabanemi K K, Vaillancourt H, Wang H, Salloum G 1998 *Polym. Eng. Sci.* **38** 21
- [4] Smith D E, Tortorelli D A, Tucker C L 1998 *Comput. Method Appl. M.* **167** 325
- [5] Hetu J F, Gao D M, Garcia-Rejon A, Salloum G 1998 *Polym. Eng. Sci.* **38** 223
- [6] Pichelin E, Coupez T 1998 *Comput. Method Appl. M.* **163** 359
- [7] Kim S W, Turng L S 2006 *Polym. Eng. Sci.* **46** 1263
- [8] Zhou H M, Geng T, Li D Q 2005 *J. Reinf. Plast. Comp.* **24** 823
- [9] Chang R Y, Yang W H 2001 *Int. J. Numer. Meth. Fl.* **27** 125
- [10] Zhou J, Turng L S 2007 *Adv. Polym. Tech.* **25** 247
- [11] Khayat R E, Elsin W, Kim K 2000 *Int. J. Numer. Meth. Fl.* **33** 847
- [12] Holm E J, Langtangen H P 1999 *Comput. Method Appl. M.* **178** 413
- [13] Luoma J A, Voller V R 2000 *Appl. Math. Model.* **24** 575
- [14] Soukane S, Trochu F 2006 *Compos. Sci. Technol.* **66** 1067
- [15] Ayad R, Rigolot A 2002 *J. Mech. Design* **124** 813
- [16] Geng T, Li D Q, Zhou H M 2006 *Eng. Comput. Germany* **21** 289
- [17] Kim M S, Park J S, Lee W I 2003 *Int. J. Numer. Meth. Fl.* **42** 791
- [18] Zhou H M, Yan B, Zhang Y 2008 *J. Mater. Process. Tech.* **204** 475
- [19] Au C K 2005 *Int. J. Mach. Tool. Manu.* **45** 115

- [20] Khor C Y, Ariff Z M, Che Ani F, Abdul Mujeebu M, Abdullah M K, Abdullah M Z, Joseph M A 2010 *Int. Commun. Heat Mass* **37** 131
- [21] Yang B X, Ouyang J, Liu C T, Li Q 2010 *Chinese J. Chem. Eng.* **18** 600 (in Chinese) [杨斌鑫, 欧阳洁, 刘春太, 李强 2010 化工学报 **18** 600]
- [22] Ao L, Wang W H, Chen J L, Gao S X, Wu G H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 793 (in Chinese) [敖玲, 王文洪, 陈京兰, 高淑侠, 吴光恒 2001 物理学报 **50** 793]
- [23] Zhang H Q 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 528 (in Chinese) [张红群 2001 物理学报 **50** 528]
- [24] Liu P, Yang T Q, Zhang L Y, Yao X 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2300 (in Chinese) [刘鹏, 杨同青, 张良莹, 姚熹 2000 物理学报 **49** 2300]
- [25] Li R X, Cheng Y M, Peng M J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 090205
- [26] Yang F, Zhu K Q 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 034601
- [27] Sussman M, Fatemi E, Smereka P, Osher S 1998 *Comput. Fluids* **27** 663
- [28] Yang B X, Ouyang J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 234602 (in Chinese) [杨斌鑫, 欧阳洁 2012 物理学报 **61** 234602]
- [29] Verbeeten W M H, Peters G W M, Baaijens F T P 2001 *J. Rheol.* **45** 823
- [30] Aboubacar M, Aguayo J P, Phillips P M, Phillips T N, Tamaddon-Jahromi H R, Snigerev B A, Webster M F 2005 *J. Non-Newton. Fluid* **126** 207
- [31] Rubinstein L I 1994 *The Stefan Problem* (Providence: Providence Press) p56
- [32] Carslaw H S, Jaeger J S 1959 *Conduction of Heat in Solids* (Oxford: Oxford University Press) p113
- [33] Cahn J W, Hilliard J E 1958 *J. Chem. Phys.* **28** 1015
- [34] Du L F, Zhang R, Xing H, Zhang L M, Zhang Y, Liu L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 106401 (in Chinese) [杜立飞, 张蓉, 邢辉, 张利民, 张洋, 刘林 2013 物理学报 **62** 106401]
- [35] Wang T, Li J J, Wang J C 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 106402 (in Chinese) [王陶, 李俊杰, 王锦程 2013 物理学报 **62** 106402]
- [36] Krabbenhoft K, Damkilde L, Nazem M 2007 *Int. Commun. Heat Mass* **43** 233
- [37] Kim S, Kim M C, Chun W G 2001 *Korean J. Chem. Eng.* **18** 40
- [38] Caldwell J, Date A W 2003 *Commun. Numer. Meth. En.* **19** 865
- [39] Luoma J A, Voller V R 2000 *Appl. Math. Model.* **24** 575
- [40] Cao Y, Faghri A, Chang W S 1989 *Int. Commun. Heat Mass* **32** 1289
- [41] Yang B, Fu X R, Yang W, Liang S P, Hu S, Yang M B 2009 *Polym. Eng. Sci.* **49** 1234
- [42] Boronat T, Segui V J, Peydro M A, Reig M J 2009 *J. Mater. Process Tech.* **209** 2735
- [43] Shen C Y 2009 *Simulation of Injection Molding and Mold Optimization Design Theory and Method* (Beijing: Science Press) p53 (in Chinese) [申长雨 2009 注塑成型模拟及模具优化设计理论与方法 (北京: 科学出版社) 第 53 页]
- 2009 注塑成型模拟及模具优化设计理论与方法 (北京: 科学出版社) 第 53 页]

Simulation of solidification with phase-change in viscoelastic moldfilling process*

Wang Fang Li Jun-Lin[†] Yang Bin-Xin

(School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

(Received 11 October 2013; revised manuscript received 7 January 2014)

Abstract

A gas-liquid two-phase model for the simulation of viscoelastic fluid mold filling process with the consideration of phase change is proposed, in which the governing equations for the melt and air in the cavity, including the mass conservation, momentum conservation and energy conservation equations, are unified into one system of equations. A revised enthalpy method, which can be used for both the melt and air in the mold cavity, is proposed to describe the phase change during the mold filling. Finite volume method on non-staggered grid is used to solve the system. The level set method is used to capture the interface evolution in the mold filling process. The distributions of physical quantities such as velocity, pressure and temperature and so on are given. The “frozen skin” layers under different temperatures and velocities are discussed in detail. Numerical results show that increasing the temperatures of the melt and cavity is a better way to get rid of the “frozen skin” layer than increasing the injection velocity.

Keywords: viscoelastic fluid, mold filling process, phase change, enthalpy method

PACS: 46.35.+z, 81.20.Hy, 81.30.Fb, 47.61.Jd

DOI: [10.7498/aps.63.084601](https://doi.org/10.7498/aps.63.084601)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51078250), the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China (Grant Nos. 2012011019-2, 2011011021-3), the Outstanding Graduate Innovation Project in Shanxi Province, China (Grant No. 20133117), and the Doctoral Sustentation Fund of Taiyuan University of Science and Technology, China (Grant No. 20112011).

† Corresponding author. E-mail: lijunlin9726@163.com