

复杂型腔充模过程中分子构型演化的数值模拟

李强 邵水军 李世顺

Numerical simulation of molecular conformation evolution during mold filling process in a complex cavity

Li Qiang Shao Shui-Jun Li Shi-Shun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 244601 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.244601

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.244601>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

带嵌件型腔内熔接过程的数值模拟研究

Numerical simulation on weld line development of injection molding in mold cavity with inserts

物理学报.2016, 65(6): 064601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.064601>

加载应力幅值对高纯铜动态损伤演化特性研究

Study on the effect of peak stress on dynamic damage evolution of high pure copper

物理学报.2015, 64(5): 054601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.054601>

延性金属层裂自由面速度曲线物理涵义解读

Discussion on the physical meaning of free surface velocity curve in ductile spallation

物理学报.2015, 64(3): 034601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.034601>

黏弹性流体充模过程中凝固现象的数值模拟

Simulation of solidification with phase-change in viscoelastic moldfilling process

物理学报.2014, 63(8): 084601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.084601>

黏弹性熔体充模流动诱导残余应力模拟

Simulation of residual stress in viscoelastic mold filling process

物理学报.2012, 61(23): 234602 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.234602>

复杂型腔充模过程中分子构型演化的数值模拟*

李强¹⁾ 邵水军^{2)†} 李世顺¹⁾

1) (河南理工大学数学与信息科学学院, 焦作 454000)

2) (河南理工大学机械与动力工程学院, 焦作 454000)

(2016年5月19日收到; 2016年7月21日收到修改稿)

基于充模过程的两相黏弹性流体模型, 采用有限体积、浸入边界和复合水平集流体体积方法, 数值模拟了聚合熔体在复杂型腔中的充模过程. 首先, 借助一类特殊函数 (R -functions) 将基于基本几何体的水平集函数组合成描述复杂型腔的形状水平集函数. 然后, 采用浸入边界法处理复杂型腔问题, 有限体积方法求解熔体控制方程, 利用复合水平集流体体积方法对熔体前沿界面进行隐式追踪. 基于有限伸展非线性弹性哑铃本构方程模型, 计算熔体分子构型张量, 通过取向椭圆描述分子的取向及拉伸行为, 实现了充模过程中分子构型的可视化. 最后, 对带有两个圆形嵌件的环状型腔内的充模过程进行数值模拟研究, 得到了充模过程中型腔内的温度、应力及分子构型的变化情况, 并重点分析了充模速度、熔体温度和模具温度等对分子构型的影响. 数值结果表明: 本文提出的耦合模型可以成功模拟复杂型腔内充模过程中的温度、应力和分子取向等物理量的动态变化; 适当提高注射速度可以增大熔接痕的强度; 提升熔体温度和模具温度, 可以有效改善甚至消除熔接痕.

关键词: 形状水平集函数, 复合水平集流体体积方法, 熔接痕, 分子构型

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

DOI: 10.7498/aps.65.244601

1 引言

目前, 塑料制品已成为人们工作和生活中不可或缺的一部分. 注塑成型作为塑料成型中最主要的成型方式之一, 已广泛应用于国民生产中的各个领域. 注塑成型过程主要包括充模、保压和冷却等几个阶段. 充模过程是注塑成型的初始阶段, 也是最复杂、最重要的阶段. 在充模过程中, 熔体分子受到剪切、拉伸等流场作用, 聚合物分子构型发生拉伸和取向行为, 从而对最终塑料制品的力学性能和表面质量产生重要影响^[1,2].

聚合物充模过程是一个复杂的物理过程, 其中的数学问题主要包括网格剖分^[3,4]、黏弹性流体控

制方程建模^[5,6]、运动界面追踪^[7-9]以及相应模型的数值算法^[9-11]. 另外, 还包括宏观-微观相耦合的多尺度建模与计算等. 在充模过程中, 宏观尺度上所观测到的复杂流动现象, 主要由黏弹性流体本身的介观结构所决定; 反之, 以高分子取向结构和结晶形态为代表的介观结构受流场、温度场等宏观因素的影响最大^[1,12]. 因此, 对于熔体介观分子构型演化的数值模拟研究具有重要的科学意义和实用价值. 阮春蕾^[5]基于有限伸展非线性弹性哑铃 (finitely extensible nonlinear elastic dumbbell with Peterlin closure, FENE-P) 本构方程模型, 采用取向椭圆描述分子取向与拉伸的行为, 数值模拟了聚合物大分子在圆柱绕流中的构型演化, 得到了与实验相符合的结果. 任金莲等^[11]采用光滑粒子

* 国家自然科学基金 (批准号: 11401177)、河南省科技攻关项目 (批准号: 162102210230)、河南省教育厅基础 Research 计划 (批准号: 15A110001) 和河南理工大学博士基金 (批准号: B2013-057, B2012-030) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: shaosj@hpu.edu.cn

动力学方法模拟和预测了黏弹性 FENE-P 熔体充模过程, 采用构型张量实现了聚合物分子形态演变的可视化. Mu 等^[13]对聚丙烯挤压过程进行数值模拟研究, 发现流动及热力学历史对分子取向有重要影响, 进而影响了结晶行为乃至最终的制品性能.

另外, 塑料制品的多样性导致型腔的复杂性. 在充模过程中, 由于型腔中的嵌件、孔洞以及壁厚的变化而引起分流的熔体再熔合时极易形成熔合线或熔接痕. 熔接痕的存在不仅影响了制品的外观和质量, 而且大大降低了制品的力学性能^[2]. 因此, 如何消除或减少熔接痕一直是国内外塑料产品制造业关注的重要问题, 其数值模拟研究仍是一个极具挑战性的问题^[14]. 任金莲等^[11]采用光滑粒子动力学方法对带有嵌件的环形腔内充模过程中的熔接痕进行了模拟和预测. Zheng 等^[14]基于水平集 (level-set) 函数提出了熔接痕追踪的自适应算法. 我们^[15]基于该算法, 并采用水平集函数描述型腔边界, 成功实现了复杂型腔充模过程中熔接痕的自动追踪, 并分析了熔体温度和模具温度对熔接痕的影响. 但是, 熔接痕产生的原因十分复杂, 一方面, 与宏观注塑条件以及介观分子构型的关系还有待进一步研究; 另一方面, 型腔的复杂性是诱导熔接痕产生的另一个重要因素, 如何简便高效地构建复杂型腔, 也是有待解决的一个问题.

基于上述问题, 本文主要采用有限体积、浸入边界和复合水平集流体体积 (coupled level-set and volume-of-fluid, CLSVOF) 方法模拟复杂型腔内充模过程, 通过宏观注塑条件和介观分子构型来分析充模过程中的熔接痕产生的原因. 首先, 采用一种更具普适性的特殊函数—— R 函数, 将描述基本几何体的符号距离函数组合成代表复杂型腔的形状水平集函数. 然后, 采用有限体积耦合浸入边界法求解熔体控制方程, 利用改进的 CLSVOF 方法追踪熔体前沿界面. 基于 FENE-P 分子本构方程模型, 计算分子构型张量, 通过取向椭圆描述熔体分子的拉伸及取向行为, 实现了分子构型演变的可视化, 并通过圆柱绕流问题进行了数值验证. 最后, 对带有两个圆柱的环状型腔内的充模过程进行数值模拟研究, 得到了充模过程中型腔内的温度、应力及分子构型的演化情况; 重点分析了注射速度、熔体温度和模具温度等对分子构型以及熔接痕的影响. 数值结果表明, 提高注射速度能够增加熔接

痕强度, 提升熔体和模具温度能够改善或消除充模过程中的熔接痕.

2 充模过程熔体流动的气液两相流模型

在文献^[9]中, 我们提出一种新的 CLSVOF 方法, 在 CLSVOF 方法中只需进行流体体积 (VOF) 输运, 熔体前沿界面通过 VOF 方法中的 PLIC (piecewise linear interface construction) 格式重建, 然后基于重构界面建立水平集函数, 而界面法向和曲率均由水平集函数计算得到, 最后通过基于局部曲率的质量修正公式进行质量校正以确保熔体质量守恒^[9]. 该方法耦合了 VOF 和水平集两者的优点——既具有水平集方法的灵活性, 又具有 VOF 方法的质量守恒性. VOF 输运方程如下:

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

其中 F 为 VOF 函数.

2.1 流体控制方程

在笛卡尔直角坐标系下, 采用浸入边界法处理复杂型腔问题. 常见的浸入边界法通常使用标记点来实现^[16]. 本文采用形状水平集函数来描述型腔, 即采用形状水平集函数表示每个网格节点到型腔表面的符号距离函数. 这为进一步采用浸入边界法求解 Navier-Stokes 控制方程带来方便^[9].

由于熔体的黏性较大, 故熔体表面张力可忽略不计, 则黏弹性熔体控制方程可表述如下:

连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0; \quad (2)$$

动量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \\ &= -\nabla p + \frac{\nabla \cdot (\nabla \eta \mathbf{u})}{Re} + \frac{(\beta - 1) H_\varepsilon(\phi)}{Re} \nabla \cdot (\nabla \eta \mathbf{u}) \\ & \quad + \frac{H_\varepsilon(\phi)}{Re} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mu \mathbf{f}; \end{aligned} \quad (3)$$

能量方程

$$\begin{aligned} & Pe \left[\frac{\partial (\rho c T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c \mathbf{u} T) \right] \\ &= \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Br(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}); \end{aligned} \quad (4)$$

式中 Reynolds 数 $Re = \rho_m UL/\eta_m$; Peclet 数 $Pe = \rho_m c_m \cdot UL/\kappa_m$; Brinkman 数 $Br = \eta_m U^2/(\kappa_m T_0)$. \mathbf{u} 为速度; 密度 $\rho = \rho(\phi) = \rho_a + (\rho_m - \rho_a) H_\varepsilon(\phi)$; 黏度 $\eta = \eta(\phi) = \eta_a + (\eta_m - \eta_a) H_\varepsilon(\phi)$; 比热容 $c = c(\phi) = c_a + (c_m - c_a) H_\varepsilon(\phi)$; 导热系数 $\kappa = \kappa(\phi) = \kappa_a + (\kappa_m - \kappa_a) H_\varepsilon(\phi)$; β 为牛顿黏性与总黏性之比; 下标 m 与 a 分别表示熔体与气体; L 与 U 分别为特征长度和特征速度; ϕ 为描述充模过程中熔体-气体前沿界面的水平集函数, 在 CLSVOF 方法中可由 VOF 函数得到^[9]; f 是浸入边界法中直接施加在笛卡尔网格上的体积力; μ 为浸入流体中的固体体积分, 即在流体区域 $\mu = 0$, 在固体区域 $\mu = 1$, 对于含有固液界面的网格单元 $0 < \mu < 1$. 而体积分 μ 可由形状水平集函数 ψ 求出, 具体公式见文献^[15].

(3) 式中 $H_\varepsilon(\phi)$ 为光滑 Heaviside 函数, 其表达式为

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

其中 $\varepsilon = 1.5\Delta x$.

本文选取 FENE-P 本构方程模型描述聚合物熔体黏弹性, 其定义如下^[5]:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1-\beta}{De} \left(\frac{\mathbf{C}}{1-\text{tr}(\mathbf{C})/b} - \boldsymbol{\delta} \right), \quad (5)$$

$$De \overset{\nabla}{\mathbf{C}} = -\frac{\mathbf{C}}{1-\text{tr}(\mathbf{C})/b} + \boldsymbol{\delta}, \quad (6)$$

其中 $De = \lambda_{0b} U/L$ 为 Denorah 数, λ_{0b} 表示聚合物分子链的取向松弛时间; $\mathbf{C} = H_0 \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle / (kT_1)$ 为构型张量, H_0 为特征弹簧常数, \mathbf{Q} 为哑铃末端距, T_1 为绝对温度, k 为参数, $\langle \cdot \rangle$ 为函数的系综平均; $b = HQ_0^2 / (kT_1)$ 为哑铃的最大拉伸量; $\boldsymbol{\delta}$ 为单位张量; $\overset{\nabla}{\mathbf{C}}$ 为 \mathbf{C} 的上随体导数: $\overset{\nabla}{\mathbf{C}} = d\mathbf{C}/dt - \mathbf{C} \cdot (\nabla \mathbf{u}) - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{C}$.

本文采用浸入边界法中的“直接力源法”结合有限体积离散格式, 然后在统一计算构架下对黏弹性两相流控制方程进行求解^[9]. 另外, 在计算过程中还需对控制方程给定合适的边界条件: 1) 对于型腔内的熔体和气体, 在型腔边界 Γ 上分别采用无滑移边界条件 $\mathbf{u} = 0$ 和流出边界条件 $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{n} = 0$; 2) 在气体区域压力 $p = 0$, 在熔体区域压力采用无

渗透边界条件 $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0$; 3) 温度采用固壁边界条件 $T_{\text{wall}} = \text{常数}$.

2.2 Cross-WLF 黏度模型与 Tait 状态方程

在注塑成型过程中, 聚合物熔体的黏度一般是温度、剪切速率以及压力的函数. 本文采用最常见的 Cross-WLF 来描述聚合物熔体的黏性^[17].

Cross-WLF 模型的表达式为

$$\eta(T, \dot{\gamma}, p) = \frac{\eta_0(T, p)}{1 + (\eta_0 \dot{\gamma} / \tau^*)^{1-n}}, \quad (7)$$

其中, τ^* 剪切应变速率常数, n 为非牛顿指数, $\dot{\gamma}$ 为剪切应变速率. $\eta_0(T, p)$ 为熔体的零剪切黏度, 它描述了剪切速率趋近于零时熔体的流动特性, 其表达式为

$$\eta_0 = D_1 \exp \left[\frac{-A_1 (T - T^*)}{A_2 + (T - T^*)} \right], \quad (8)$$

式中 $T^* = D_2 + D_3 \cdot P$; $A_2 = \tilde{A}_2 + D_3 \cdot P$; D_1 为聚合物在玻璃化温度下的零剪切黏度系数; D_2 为玻璃化转变温度; D_3 取值范围很小, 可以忽略不计; A_1 和 \tilde{A}_2 为与温度相关的量.

在充模过程中, 由于模具温度较低, 在模壁附近的熔体会冷却固化. 为了更好地刻画黏弹性熔体随温度和压力的变化, 我们采用双域 Tait 状态方程描述熔体密度的变化^[18]:

$$\frac{1}{\rho_m} = V_0(T) \left[1 - C_0 \ln \left(1 + \frac{p}{B(T)} \right) \right] + V_t(p, T), \quad (9)$$

式中相关项为

$$V_0(T) = \begin{cases} b_{1,m} + b_{2,m}(T - b_5), & \text{if } T > T_t, \\ b_{1,s} + b_{2,s}(T - b_5), & \text{if } T < T_t, \end{cases} \quad (10)$$

$$B(T) = \begin{cases} \beta_{3,m} \exp[-b_{4,m}(T - b_5)], & \text{if } T > T_t, \\ \beta_{3,s} \exp[-b_{4,s}(T - b_5)], & \text{if } T < T_t, \end{cases} \quad (11)$$

$$V_t(p, T) = \begin{cases} 0, & \text{if } T > T_t, \\ b_7 \exp[b_8(T - b_5) - b_9 p], & \text{if } T < T_t. \end{cases} \quad (12)$$

这里 $C_0 = 0.0894$ 是普适常数; $b_{1,m}, b_{1,s}, b_{2,m}, b_{2,s}, b_{3,m}, b_{3,s}, b_{4,m}, b_{4,s}, b_5, b_6, b_7, b_8, b_9$ 是材料常数; 下标 m 和 s 分别表示熔体和固体; $T_t(P) = b_5 + b_6 P$ 是

玻璃化转变温度; $V_0(T)$ 是零压力时的比容; $B(T)$ 表示压力对比容的影响程度; $V_t(p, T)$ 表示聚合物结晶时比容的减少量.

2.3 隐式型腔构建方法

在文献 [15] 中, 我们采用形状水平集函数来描述与刻画型腔, 即基于一些简单几何体的符号距离函数, 通过布尔运算组合成为描述复杂几何体(型腔)的形状水平集函数. 由于型腔往往比较复杂, 直接计算每个网格点到型腔表面的最短距离比较困难, 因此, 为了更简便地构建型腔, 本文采用一种优秀的隐式建模工具—— R 函数来精确地构建型腔的隐式模型 [19]. R 函数的功能与构建实体几何 (constructive solid geometry) 方法中的布尔操作是一一对应且是精确的, 它可以将多个基本几何体组合成为描述复杂几何体的隐函数. 下面给出 R_α 系中的 R 函数定义 [19]:

$$\begin{cases} \Phi_1 \wedge_\alpha \Phi_2 \\ \equiv \frac{1}{1+\alpha} \left(\Phi_1 + \Phi_2 - \sqrt{\Phi_1^2 + \Phi_2^2 - 2\alpha\Phi_1\Phi_2} \right), \\ \Phi_1 \vee_\alpha \Phi_2 \\ \equiv \frac{1}{1+\alpha} \left(\Phi_1 + \Phi_2 + \sqrt{\Phi_1^2 + \Phi_2^2 - 2\alpha\Phi_1\Phi_2} \right), \end{cases} \quad (13)$$

式中, $-1 < \alpha \leq 1$, Φ_1 和 Φ_2 为两个几何体的隐函数, “ \wedge_α ” 和 “ \vee_α ” 分别为 R 合取和 R 析取运算符, 它们分别与布尔交 “ \cap ” 和布尔并 “ \cup ” 操作相对应. 根据 α 的不同取值可以得到不同的 R_α 系. 为简便起见, α 通常取 1 或 0. 当 α 取 1 时,

$$\begin{cases} \Phi_1 \wedge_1 \Phi_2 \equiv \frac{1}{2} (\Phi_1 + \Phi_2 - |\Phi_1 - \Phi_2|) \\ \quad = \min(\Phi_1, \Phi_2), \\ \Phi_1 \vee_1 \Phi_2 \equiv \frac{1}{2} (\Phi_1 + \Phi_2 + |\Phi_1 - \Phi_2|) \\ \quad = \max(\Phi_1, \Phi_2). \end{cases} \quad (14)$$

(14) 式与我们之前采用的构造形状水平集函数的方法完全一致 [15], 但该函数在 $\Phi_1 = \Phi_2$ 时不可微. 当 α 取 0 时, 就得到了另一种格式简单的 R_0 系:

$$\begin{cases} \Phi_1 \wedge_0 \Phi_2 \equiv \Phi_1 + \Phi_2 - \sqrt{\Phi_1^2 + \Phi_2^2}, \\ \Phi_1 \vee_0 \Phi_2 \equiv \Phi_1 + \Phi_2 + \sqrt{\Phi_1^2 + \Phi_2^2}, \end{cases} \quad (15)$$

该 R 函数仅在 $\Phi_1 = \Phi_2 = 0$ 时不可微, 即只在几何体边界交点处才不可微 [19]. 因此, 为了使得形状水

平集函数具有更好的微分性质, 本文采用 (15) 式来构建描述型腔的隐函数. 下面以构建一环状型腔为例来说明其具体过程. 图 1 给出了 4 个基本几何体——1 个矩形 Ω_1 (图 1 (a)) 和 3 个圆形 Ω_2, Ω_3 和 Ω_4 (图 1 (b)—(d)), 通过 R 函数组合成如图 1 (e) 所示的环状型腔. 其中, 阴影区域 $\Phi > 0$, 空白区域 $\Phi < 0$; 矩形的长和宽分别为 9 cm 和 4 cm. 3 个圆的半径依次为 4, 1.5 和 0.8 cm. 则最终形成环状型腔 Ω 的组合运算为: $\Omega = \Omega_1 \vee_0 \Omega_2 \wedge_0 (-\Omega_3) \wedge_0 (-\Omega_4)$. 其中, 型腔的左下顶点坐标为 (0, 2), 3 个圆的圆心位置 (对应于 Ω_2, Ω_3 和 Ω_4) 依次为 (12, 4), (12, 4) 和 (7.5, 4).

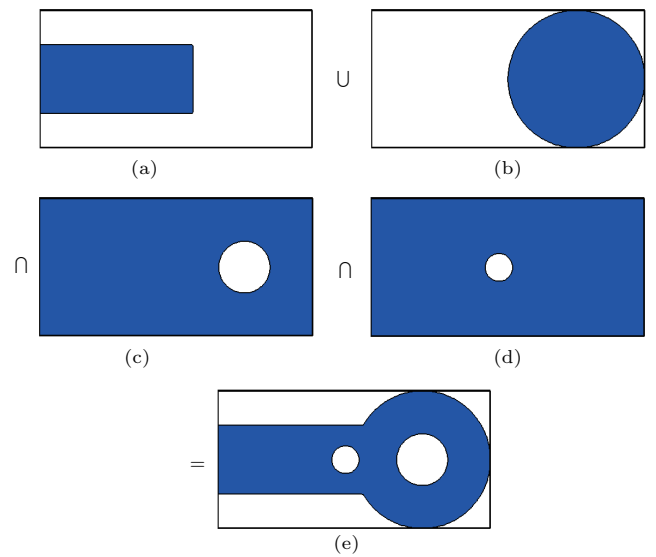


图 1 (网刊彩色) 四个基本几何体及其组合而成的环状型腔 (a) Ω_1 ; (b) Ω_2 ; (c) $-\Omega_3$; (d) $-\Omega_4$; (e) Ω
 Fig. 1. (color online) Four basic geometries and the combination of ring mold cavity: (a) Ω_1 ; (b) Ω_2 ; (c) $-\Omega_3$; (d) $-\Omega_4$; (e) Ω .

3 圆柱绕流问题的数值验证

圆柱绕流问题是验证算法模拟 FENE 类流体有效性的经典算例. 图 2 给出了圆柱绕流问题的几何图形. 计算中流体密度 $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$, 黏度 $\eta = 0.1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, 松弛时间 $\lambda = 10 \text{ s}$, 此时 $De = 0.06$, 平均速度 $U_0 = 1.2 \times 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, 最大拉伸量 $b = 5.0$ [11]. 由于 C 对称正定, 因此可求出其对应的特征值和特征向量. 在二维情况下, 可以用取向椭圆来描述其形变和取向, 取向椭圆用 $C/\text{tr}(C)$ 绘制 [5]. 图 2 给出了圆柱绕流时 FENE-P 流体的分子取向与拉伸量, 分别与文献 [5] 中的结果进行对比. 从图 2 可以看出, 在圆柱左侧由于挤压作用, 分

子取向与流动方向垂直; 在流经圆柱后, 分子的拉伸形变较大. 在远离圆柱处, 由于流动达到充分发展, 分子取向不明显. 由于上下模壁处存在较大的剪切作用, 分子取向与流动方向平行. 图 2 (b) 给出了型腔内的拉伸量的分布, 这也与文献 [5] 中的结

果相一致. 图 3 (a) 给出了不同位置处沿 x 方向的速度 u 和偏应力 τ_{xy} . 由图 3 (b) 可知, 本文所采用的耦合方法求得的结果与文献 [6] 中实验结果符合较好.

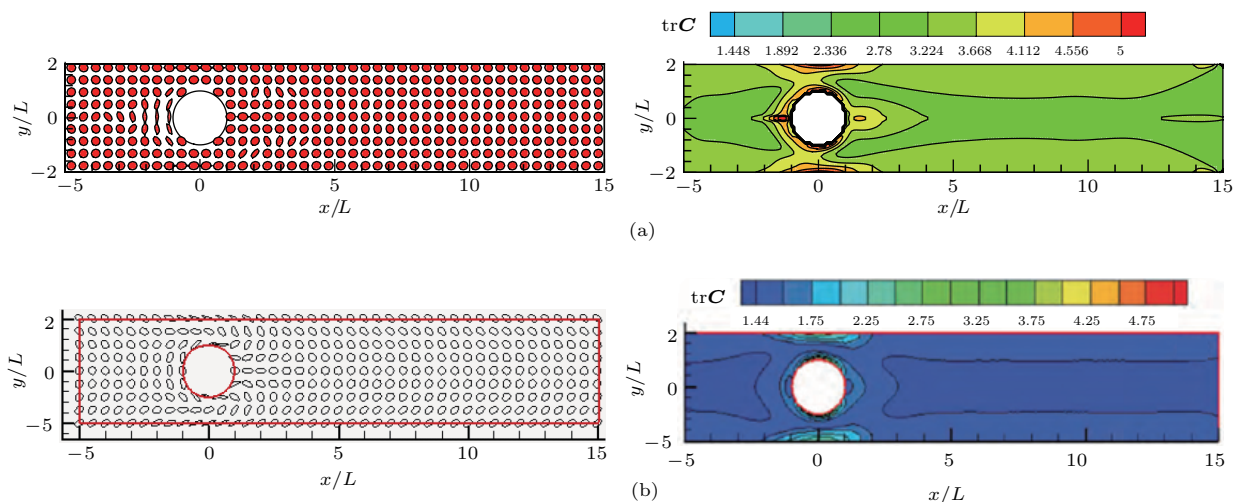


图 2 (网刊彩色) 圆柱绕流型腔内的分子构型及拉伸量分布 (a) 本文结果; (b) 文献 [5] 的结果

Fig. 2. (color online) Molecular conformation and stretch tensor in flow past a cylinder: (a) The results in this paper; (b) the results in Ref. [5].

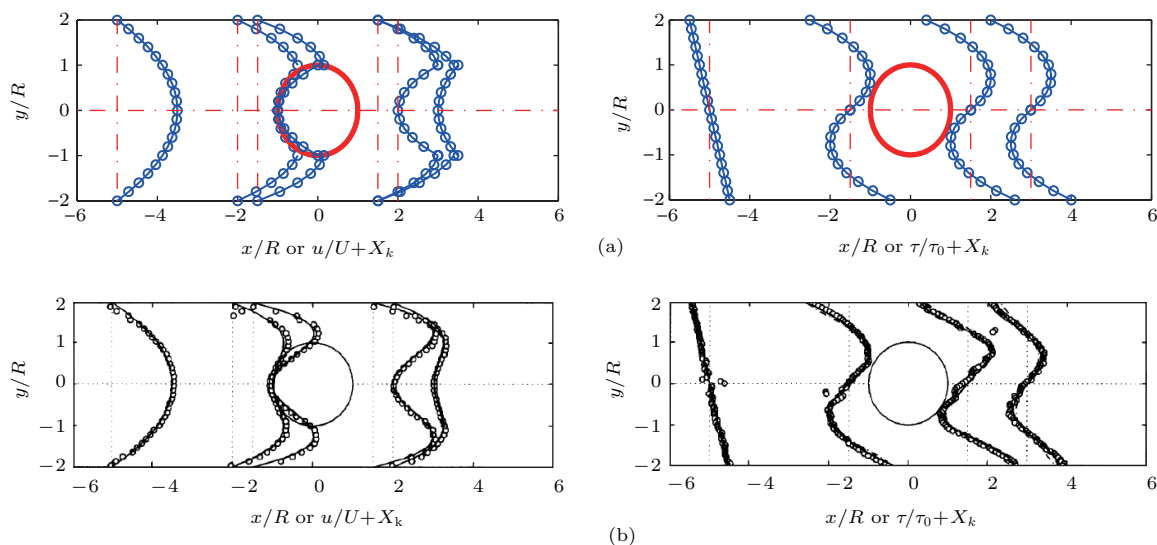


图 3 (网刊彩色) 不同位置处的速度 u 和偏应力 τ_{xy} (a) 本文结果; (b) 文献 [6] 的实验结果

Fig. 3. (color online) The velocity u and the extra stress force τ_{xy} at different positions: (a) The results in this paper; (b) the results in Ref. [6].

4 带嵌件环状型腔充模过程的数值模拟

为了更好地考察充模过程中温度、应力及分子构型演化情况, 尤其是进一步探析熔体相遇后的熔接痕形成机理, 下面考虑复杂型腔内的充模过程,

分析注射速度、熔体温度和模具温度对熔接痕的影响, 并讨论熔接痕的控制问题.

4.1 充模中温度、应力分布及分子构型演化

下面考虑一带嵌件环状型腔内的充模过程. 型腔尺寸如图 1 所示. 注射速度 $u = 0.2$ m/s, 熔体温度和模具温度分别为 533 K 和 323 K. 选取

充模熔体为ABS780. Cross-WLF黏度模型参数及双域Tait状态方程中的系数见表1和表2, 其中 β_7 (m^3/kg), β_8 ($1/\text{K}$) 和 β_9 ($1/\text{Pa}$) 均为0. 在充模过程中, 靠近模壁的部分熔体将冷却固化. 在整个计算区域对统一的流体控制方程进行求解, 由Cross-WLF模型可知, 低于聚合物玻璃化转变温度的熔体黏度 η 很大, 此时可将这部分熔体视为固体.

图4给出了不同时刻充模过程中的熔体前沿界面及温度分布. 从图4可知, 靠近模壁以及前沿界面处熔体的温度较低. 当熔体流经第一个圆形嵌件后, 熔体分成两股继续向前流动, 从而在两个嵌件之间形成一个狭窄的带状低温区域(图4(c)). 图4(d)给出了充模结束时的温度分布. 从图4(d)可知, 在绕过大圆柱嵌件后形成一个较宽的低温区域. 为了更清晰地反映充模中熔体的温度变化, 图5给出了充模后期两个不同时刻的凝固层分布.

从图5可知, 当两股熔体相遇后将形成一个狭长的带状凝固层. 由于熔接痕将在相遇点位置处形成, 而当相遇角大于 150° 时消失^[14,15]. 根据该理论, 在此熔接区域熔体将极易冷却形成熔接痕, 使得最终制品的力学性能较差.

表1 ABS780的物性参数及Cross-WLF模型参数
Table 1. Cross-WLF viscosity model and thermal properties parameters of ABS780.

Parameters	Values	Parameters	Values
n	0.2890	$D_3/\text{K}\cdot\text{Pa}^{-1}$	0
τ^*/Pa	3.480×10^4	A_1	24.96
$D_1/\text{Pa}\cdot\text{s}$	8.62×10^{10}	\tilde{A}_2/K	51.6
D_2/K	373.15	$\kappa/\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$	0.192
$C_p/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$	1847		

表2 对应于ABS780的双域Tait状态方程中的材料参数
Table 2. Tait state equation parameters of ABS780.

Parameters	Values	Parameters	Values	Parameters	Values
$\beta_{1m}/\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}$	9.748×10^{-4}	$\beta_{1s}/\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}$	9.748×10^{-4}	β_5/K	3.6175×10^2
$\beta_{2m}/\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	6.274×10^{-7}	$\beta_{2s}/\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	3.102×10^{-7}	$\beta_6/\text{K}\cdot\text{Pa}^{-1}$	2.881×10^{-7}
β_{3m}/Pa	1.764×10^8	β_{3s}/Pa	2.417×10^8		
β_{4m}/K^{-1}	4.556×10^{-3}	β_{4s}/K^{-1}	4.575×10^{-3}		

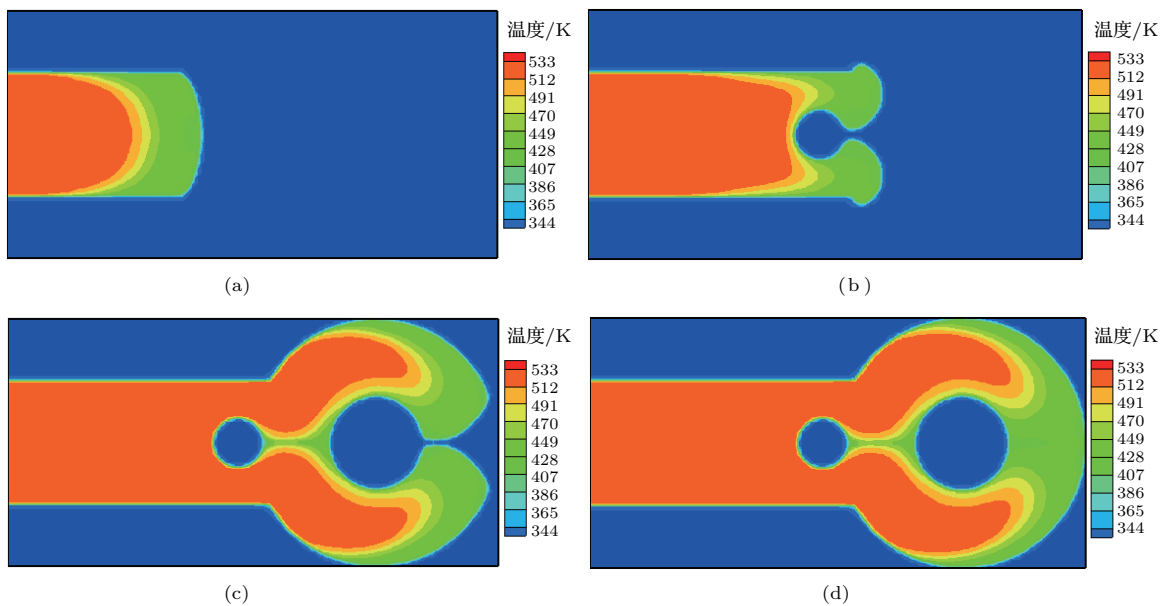


图4 (网刊彩色) 环状型腔内充模过程中不同时刻的温度分布 (a) $t = 0.14$ s; (b) $t = 0.25$ s; (c) $t = 0.43$ s; (d) $t = 0.45$ s

Fig. 4. (color online) Polymer temperature during filling process in ring cavity at different times: (a) $t = 0.14$ s; (b) $t = 0.25$ s; (c) $t = 0.43$ s; (d) $t = 0.45$ s.

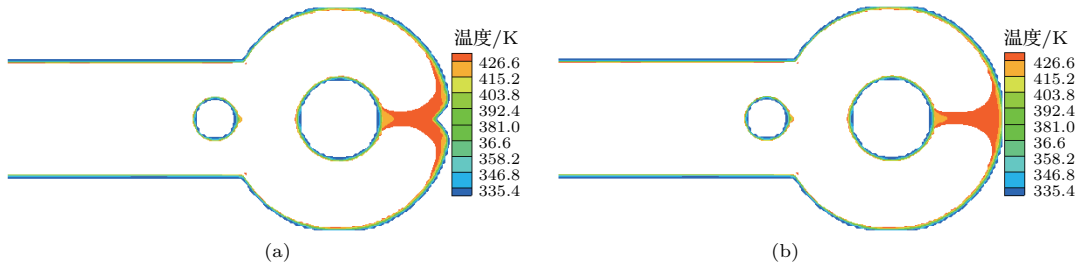


图5 (网刊彩色) 环状型腔内充模过程中熔接区域内的凝固层 (a) $t = 0.43$ s; (b) $t = 0.45$ s

Fig. 5. (color online) Frozen layer in ring cavity during filling process at different times: (a) $t = 0.43$ s; (b) $t = 0.45$ s.

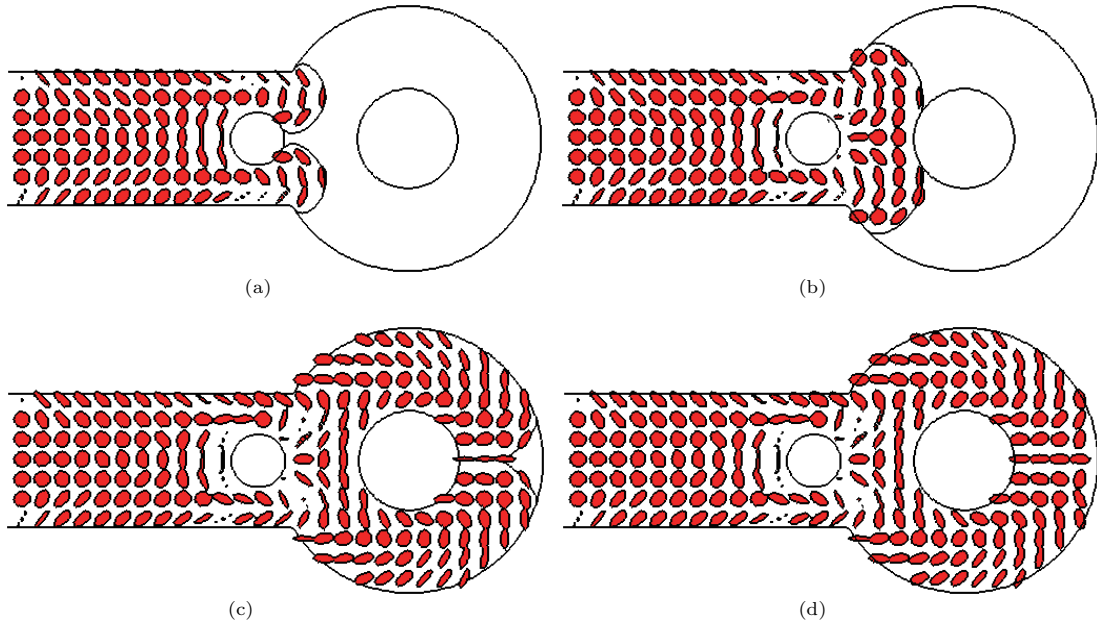


图6 (网刊彩色) 环状型腔内充模过程中不同时刻的分子构型 (a) $t = 0.25$ s; (b) $t = 0.29$ s; (c) $t = 0.43$ s; (d) $t = 0.45$ s

Fig. 6. (color online) Molecular conformation during filling process in ring mold at different times: (a) $t = 0.25$ s; (b) $t = 0.29$ s; (c) $t = 0.43$ s; (d) $t = 0.45$ s.

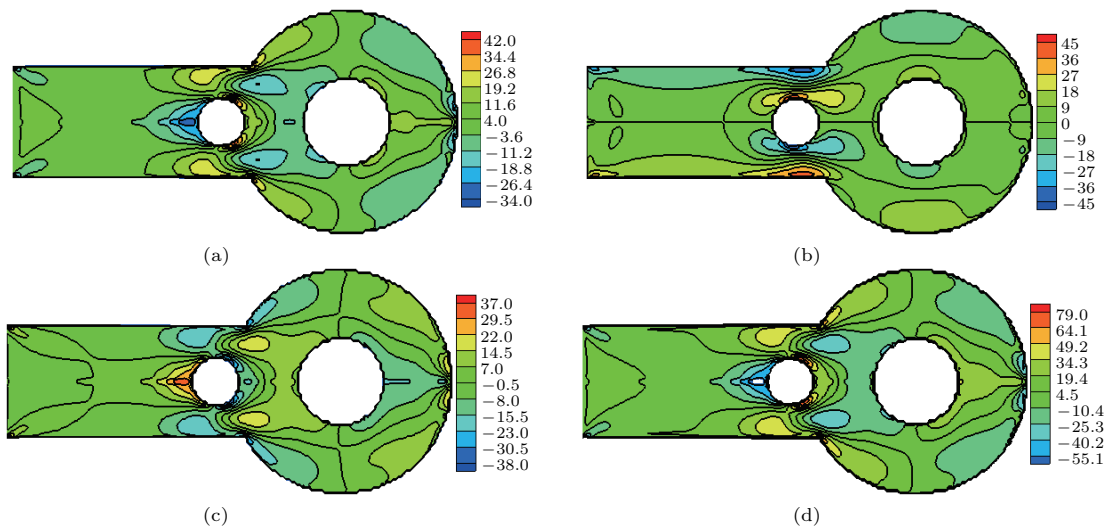


图7 (网刊彩色) 环状型腔内充模结束时的应力分布和第一法向应力差 (a) τ_{xx} ; (b) τ_{xy} ; (c) τ_{yy} ; (d) 第一法向应力差

Fig. 7. (color online) Stress and first normal stress difference at the end of mold filling: (a) τ_{xx} ; (b) τ_{xy} ; (c) τ_{yy} ; (d) the first normal stress difference.

图6给出了充模过程中不同时刻分子构型的变化情况. 在充模初始阶段, 靠近壁面附近的分子受到较大剪切作用, 分子构型沿流动方向取向. 此种情况容易造成制品中存在不同程度的表面流痕. 在熔体绕经第一个圆形嵌件时, 分子链受到嵌件左侧的挤压作用, 分子取向垂直于流动方向, 这与第3节圆柱绕流中的分子取向行为相一致. 当熔体绕过第一个圆形嵌件后熔体受到拉伸作用, 部分熔体分子沿流动方向取向(图6(b)). 熔体在环状型腔内流动时(图6(c)), 由于流道较窄, 靠近模壁的熔体分子沿流动方向取向, 而内部熔体分子基本不发生拉伸或取向. 当两股熔体绕过大圆形嵌件相遇后, 熔体前沿界面处的分子受到较大的挤压作用, 此时取向椭圆变形为取向管, 且分子取向垂直于流动方向(图6(c)和图6(d)). 由图5可知, 相遇后的熔体迅速冷凝而形成熔接痕.

图7给出了充模结束时的应力和第一法向应力差分布. 从图7可知, 在两个嵌件周围以及型腔末端处应力和第一法向应力差都变化较为剧烈, 这也与分子构型变化较大相一致.

4.2 注射速度、熔体温度和模具温度的影响

为了更好地探求注塑条件对充模过程的影响, 下面分别考察注射速度、熔体温度和模腔温度对介

观分子构型及凝固层的影响.

4.2.1 注射速度对分子取向的影响

图8给出了注射速度 $u = 0.3, 0.1$ m/s 条件下, 充模结束时的分子构型. 从图8可知, 提高注射速度使得熔体的剪切和拉伸作用增强, 分子构型的拉伸量增大、取向增强; 反之, 降低注射速度可使分子构型的取向和拉伸量均减弱. 另外, 较大的注射速度使得两股熔体在熔接区域处的分子拉伸量变大, 此时分子构型呈管状(图8(a)). 由此可见, 注射速度对熔体分子构型产生了重要影响. 这是由于注射速度越大, 聚合物熔体受到的剪切作用就越强烈, 摩擦生热就越大, 温度上升, 黏度下降, 制品熔接痕的强度会提高. 而降低注射速度, 一方面, 由于熔体分子在流动过程中得到充分松弛, 故分子构型形变较弱. 另一方面, 较小的充模速度使得熔体冷却时间延长, 产生了较厚的凝固层, 从而更有利于熔接痕的形成(图9).

4.2.2 熔体温度和模具温度对分子取向的影响

图10给出了熔体温度分别为513和543 K时, 充模结束时环状型腔内的分子构型图. 从图10可

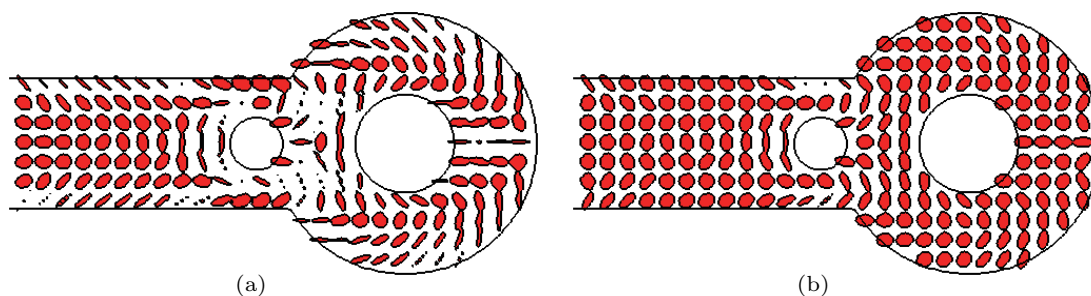


图8 (网刊彩色) 不同注射速度下充模结束时的分子构型 (a) $u = 0.3$ m/s; (b) $u = 0.1$ m/s

Fig. 8. (color online) Molecular conformation for different injection velocities at the end of mold filling: (a) $u = 0.3$ m/s; (b) $u = 0.1$ m/s.

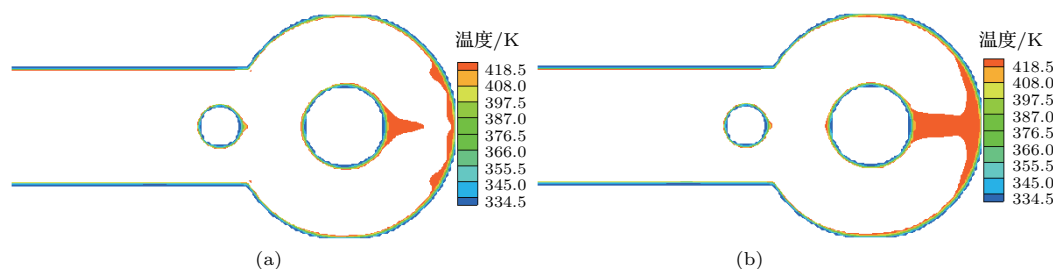


图9 (网刊彩色) 不同注射速度下充模结束时的凝固层 (a) $u = 0.3$ m/s; (b) $u = 0.1$ m/s

Fig. 9. (color online) Frozen layer for different injection velocities at the end of mold filling: (a) $u = 0.3$ m/s; (b) $u = 0.1$ m/s.

以看出, 熔体温度对最终的分子构型影响不太明显, 但较低的熔体温度会造成较大的分子取向, 尤其是在熔接区域. 图 11 给出了两种熔体温度下充

模结束时的凝固层分布. 从图 11 可知, 熔体温度过低会导致两个圆形嵌件前端均形成较厚的凝固层, 此时未及时松弛的熔体大分子会冻结形成熔接痕.

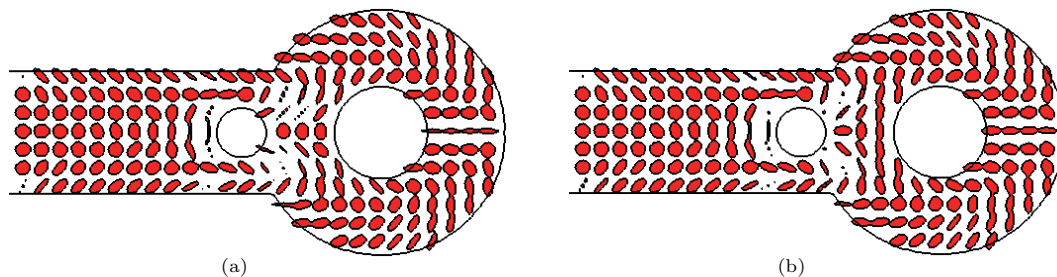


图 10 (网刊彩色) 不同熔体温度下充模结束时的分子构型 (a) $T_{\text{melt}} = 513 \text{ K}$; (b) $T_{\text{melt}} = 563 \text{ K}$

Fig. 10. (color online) Molecular conformation for different polymer temperatures at the end of mold filling: (a) $T_{\text{melt}} = 513 \text{ K}$; (b) $T_{\text{melt}} = 563 \text{ K}$.

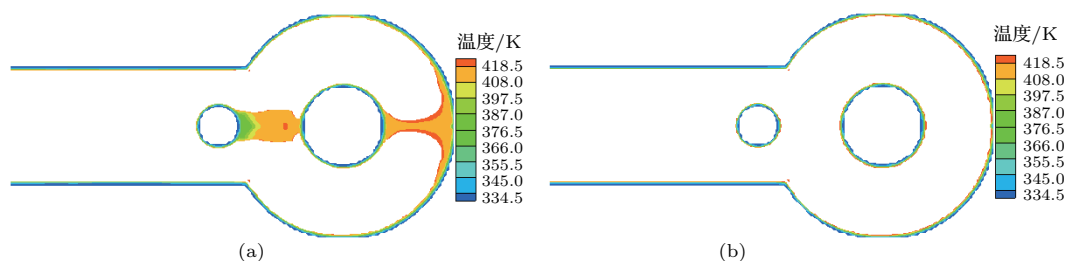


图 11 (网刊彩色) 不同熔体温度下充模结束时的凝固层 (a) $T_{\text{melt}} = 513 \text{ K}$; (b) $T_{\text{melt}} = 563 \text{ K}$

Fig. 11. (color online) Frozen layer for different polymer temperatures at the end of mold filling: (a) $T_{\text{melt}} = 513 \text{ K}$; (b) $T_{\text{melt}} = 563 \text{ K}$.

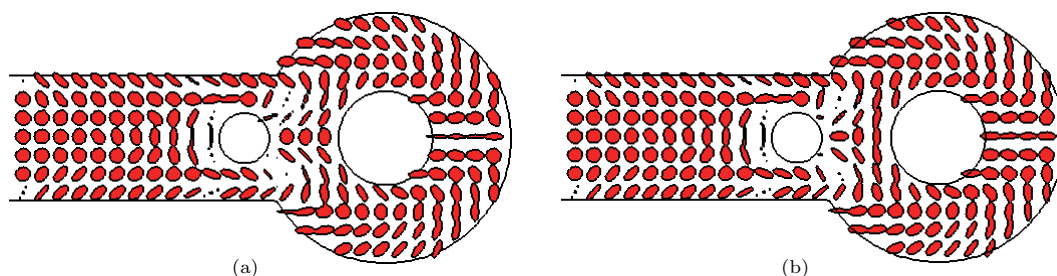


图 12 (网刊彩色) 不同模具温度下充模结束时的分子构型 (a) $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$; (b) $T_{\text{wall}} = 343 \text{ K}$

Fig. 12. (color online) Molecular conformation for different mold temperatures at the end of mold filling: (a) $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$; (b) $T_{\text{wall}} = 343 \text{ K}$.

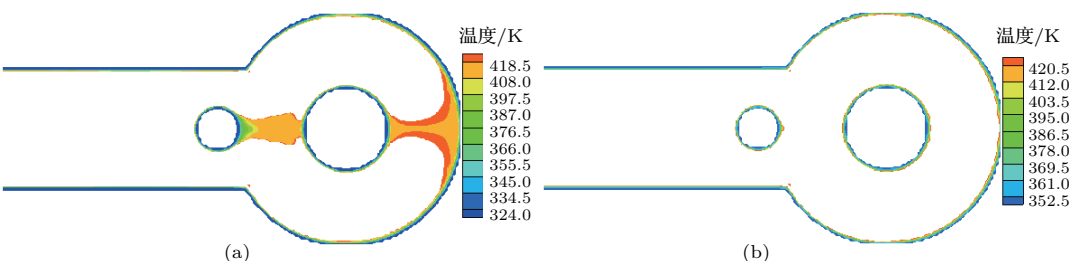


图 13 (网刊彩色) 不同模具温度下充模结束时的凝固层 (a) $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$; (b) $T_{\text{wall}} = 343 \text{ K}$

Fig. 13. (color online) Frozen layer for different mold temperatures at the end of mold filling: (a) $T_{\text{wall}} = 303 \text{ K}$; (b) $T_{\text{wall}} = 343 \text{ K}$.

图 12 和图 13 分别给出了不同模具温度下充模结束时的分子构型和凝固层分布. 从图 12 和图 13 可知, 模具温度对分子构型及凝固层厚度影响模式相一致. 因此, 在充模过程中, 为了改善或消除熔接痕, 应适当提高熔体温度和模具温度, 尤其是熔接区域的温度. 否则, 过低的熔体温度或模具温度均可产生力学强度较差的熔接痕.

5 结 论

本文采用耦合浸入边界、有限体积和 CLSVOF 方法对复杂型腔内的充模过程进行了数值模拟研究. 其中, 聚合物熔体采用基于分子模型的 FENE-P 本构模型, 黏度变化采用 Cross-WLF 模型进行描述. 本文首先基于基本几何体的符号距离函数, 采用 R 函数构建描述复杂型腔的形状水平集函数. 然后, 通过计算分子构型张量 C , 构造取向椭圆来刻画充模过程中熔体分子受到的剪切和拉伸行为, 进而实现了分子构型演化过程的可视化. 最后, 重点分析了注射速度、熔体温度和模具温度对熔体分子构型的影响. 得到的主要结论如下: 1) 通过 R 函数可以简便、高效地建立描述型腔的形状水平集函数, 该方法易于推广应用至三维型腔的刻画; 2) 取向椭圆可以很好地揭示充模过程中熔体分子构型的变化, 即熔体分子的拉伸和取向行为; 3) 适当提高注射速度可以减少热损耗并增大熔接痕的强度; 提升熔体温度和模具温度, 可以有效改善甚至消除熔接痕.

参考文献

- [1] Kim S W, Turng L S 2006 *Polym. Eng. Sci.* **46** 1263
- [2] Shen C Y 2009 *Simulation of Injection Molding and Theories and Methods for Optimization of Moulds Designing* (Beijing: Science Press) p4 (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 4 页]
- [3] Yuan R F, Zhong C W, Zhang H 2015 *J. Comput. Phys.* **296** 184
- [4] Cai L, Gao H, Luo X Y, Nie Y F 2015 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **45** 024702 (in Chinese) [蔡力, 高昊, 罗小玉, 聂玉峰 2015 中国科学: 物理学 力学 天文学 **45** 024702]
- [5] Ruan C L 2011 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [阮春蕾 2011 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]
- [6] Baaijens H P W, Peters G W M, Baaijens F P T, Han E H M 1995 *J. Rheol.* **39** 1243
- [7] Jiang T, Ouyang J, Ren J L 2012 *Comp. Phys. Comm.* **183** 50
- [8] Dai J F, Fan X P, Meng B, Liu J F 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 094704 (in Chinese) [戴剑锋, 樊学萍, 蒙波, 刘骥飞 2015 物理学报 **64** 094704]
- [9] Li Q 2016 *Comput. Fluids* **132** 94
- [10] Li Q, Ouyang J, Yang B X, Li X J 2012 *Appl. Math. Model.* **36** 2262
- [11] Ren J L, Lu W G, Jiang T 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 080202 (in Chinese) [任金莲, 陆伟刚, 蒋涛 2015 物理学报 **64** 080202]
- [12] Hetu J F, Gao D M, Rejon A G, Salloum G 1998 *Polym. Eng. Sci.* **38** 223
- [13] Mu Y, Zhao G Q, Chen A, Dong G W, Li S 2014 *Comput. Chem. Eng.* **63** 91
- [14] Zheng S P, Ouyang J, Zhao Z F, Zhang L 2012 *Comput. Math. Appl.* **64** 2860
- [15] Li Q, Li W M 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 064601 (in Chinese) [李强, 李五明 2016 物理学报 **65** 064601]
- [16] Wang Y, Shu C, Yang L M 2016 *J. Comput. Phys.* **306** 237
- [17] Boronat T, Segui V J, Peydro M A, Reig M J 2009 *J. Mater. Process Tech.* **209** 2735
- [18] Isayev A I, Shyu G D, Li C T 2006 *J. Polym. Sci. Pol. Phys.* **44** 622
- [19] Cai S Y, Zhang W H 2015 *Comput. Method. Appl. M.* **289** 267

Numerical simulation of molecular conformation evolution during mold filling process in a complex cavity*

Li Qiang¹⁾ Shao Shui-Jun^{2)†} Li Shi-Shun¹⁾

1) (School of Mathematics and Information Science, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China)

2) (School of Mechanical and Power Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China)

(Received 19 May 2016; revised manuscript received 21 July 2016)

Abstract

In the mold filling process, polymer melt will suffer the shear stress and stretch, which has important influences on the mechanical properties and surface quality of the final plastic products. In this paper a gas-liquid two-phase flow model for a viscoelastic fluid is proposed and used to simulate the mold filling process, in which the finitely extensible nonlinear elastic dumbbell with Peterlin closure (FENE-P) model and cross-WLF viscosity model combined with Tait state equation are used to describe the constitutive relationship and viscosity change of the viscoelastic melt, respectively. Meanwhile, the improved coupled level-set and volume-of-fluid method is used to trace the melt front, and the finite volume method on non-staggered grid is used to solve the mass, momentum, and energy conservation equations. Firstly, the R -function, an excellent implicit modeling tool of constructive solid geometry, is employed to establish the shape level-set function to describe the complex mold cavities based on the signed distance functions that represent basic geometries. And the immersed boundary method is applied to dealing with the complex mold cavities by using the shape level-set function. The benchmark problem of the flow past a cylinder is simulated to verify the validity of the FENE-P model, where the orientational ellipses are used to describe the molecular orientation and deformation. Moreover, the visualization of polymer molecular deformation is achieved. Then, the non-isothermal filling process of the viscoelastic fluid is simulated in an annular mold cavity with two circular insets, and the behaviors of the molecular orientation, temperature and stress in the filling process are shown and analyzed in detail. Finally, the problems are also discussed that how the injection velocity, melt and mold temperatures influences on the molecular conformation and solidified layer thickness. Numerical results show that the computational framework proposed in this paper can be successfully used to simulate the non-isothermal mold filling process in the complex mold cavity. Increasing properly the injection velocity can reduce the heat loss and improve the strength of the weld line. The higher the melt or mold temperature, the thinner the solidified layer is. Thus, increasing the injection velocity, as well as raising the melt and the mold temperatures will improve or remove the weld line in melt filling process.

Keywords: shape level-set function, coupled level-set and volume-of-fluid method, weld line, molecular conformation

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

DOI: 10.7498/aps.65.244601

* Project supported by National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11401177), the Key Science and Technology Program of Henan Province, China (Grant No. 162102210230), the Henan Provincial Research Foundation for Basic Research, China (Grant No. 15A110001), and the Research Fund for the Doctoral Program of Henan Polytechnic University, China (Grant Nos. B2013-057, B2012-030).

† Corresponding author. E-mail: shaosj@hpu.edu.cn