

黏弹性熔体充模流动诱导残余应力模拟*

杨斌鑫¹⁾ 欧阳洁^{2)†}

1) (太原科技大学应用科学学院, 太原 030024)

2) (西北工业大学理学院应用数学系, 西安 710129)

(2012年5月29日收到; 2012年7月2日收到修改稿)

流动诱导残余应力是塑料制品产生应力开裂以及翘曲变形等现象的重要原因, 对成型过程中流动诱导残余应力研究具有重要意义. 推导了基于黏弹性 eXtended Pom-Pom 本构关系的能量方程, 进而建立了描述黏弹性流体非等温充模流动的气-液两相模型. 用同位网格有限体积法进行了求解, 得到了凝固层和剪切速率分布, 给出了充填结束时影响制品力学性能的流动诱导残余应力. 结果表明, 型腔中凝固层的厚度与注射速率有关, 注射速率越大, 充填时间越短, 凝固层越薄. 在制品表层紧邻模壁的地方, 剪切速率和残余应力几乎为零; 在制品次表层的位置, 制品内剪切速率和流动残余应力也较高; 而在远离模壁的地方, 剪切速率和流动残余应力也较小.

关键词: 黏弹性, 充模, 流动诱导残余应力, 有限体积法

PACS: 46.35.+z, 81.20.Hy, 85.50.Uv, 47.61.Jd

1 引言

流动诱导残余应力是指塑料熔体在充模流动和保压补料过程中受到不均衡的高剪切作用, 大分子链沿流动方向排列的定向构象被冻结而产生的一种内应力^[1]. 流动诱导残余应力产生的根本原因是大分子链在熔融加工过程中形成的不平衡构象, 在冷却固化时不能够立即恢复到与环境条件相适应的平衡构象. 该不平衡构象为一种可逆的高弹形变, 而冻结的高弹形变平时以位能形式存储在塑料制品中, 在适宜的条件下, 这种受约束的不稳定构象将向自由的稳定的构象转化, 位能转变为动能释放出来. 当大分子链间的作用力和相互缠结力承受不住这种释放的动能时, 内应力平衡即遭到破坏, 塑料制品就会产生应力开裂以及翘曲变形等现象^[1]. 因此对成型过程中流动诱导残余应力研究具有重要意义. 然而, 目前对残余应力的研究主要是采用实验的方法, 利用应力双折射效应观察制品的内应力. 目前鲜有文献对残余应力进行数值模拟研究, 同时, 尚无文献对带自由表面流的充填过程的流动诱导残余应力进行过数值研究.

实际注塑成型中的聚合物熔体都是黏弹性材料, 即熔体相(液相)的应力-应变关系具有非牛顿性质, 需要由反映黏弹性的本构方程来描述. 杨斌鑫等^[2]建立起黏弹性熔体充模过程的牛顿-黏弹两相等温模型. 将表征黏弹性熔体与牛顿气体的不同控制方程成功地统一为一个方程组, 成功模拟了黏弹性熔体等温充填过程. 本文在文献^[2]的基础上, 推导了基于 Extended Pom-Pom (XPP) 本构关系的能量方程, 并建立了牛顿-黏弹两相非等温模型. 用基于同位网格有限体积法的 SIMPLER 算法对黏弹性熔体非等温充填过程进行了模拟, 成功捕捉到了实验过程中观察到的凝固层现象, 并从数值上给出了充填过程结束时的流动诱导残余应力, 与实验结果一致.

2 黏弹性熔体充模流动的气-液两相非等温模型

2.1 界面捕捉方程

采用 Level Set 方法^[3-5]捕捉熔体前沿界面.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2012CB025903)、山西省自然科学基金(批准号: 2012011019-2)和太原科技大学博士基金(批准号: 20112011)资助的课题.

† E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn

传统的 Level Set 及其重新初始化方程如下:

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

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

其中 φ 是水平集函数, 它的零等值面即为界面位置, $\mathbf{u} = (u, v)$ 是速度矢量, t 是时间, t_r 是重新初始化的人工时间, $\text{sign}(\varphi_0)$ 是 φ 的符号函数, 定义为

$$\text{sign}(\varphi_0) = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\varphi_0^2 + [\min(\Delta x, \Delta y)]^2}}, \quad (3)$$

其中, Δx 与 Δy 分别是沿 x 与 y 方向的网格宽度, $[\min(\Delta x, \Delta y)]^2$ 用于避免分母被零除.

理论上, 重新初始化方程 (2) 不改变零水平集 (界面) 的位置. 然而在数值计算中, 由于数值精度及误差的影响, 使得界面位置往往会发生改变, 尤其是当界面有大拓扑变形的情况下, 界面位置的改变量会很大, 从而造成质量不守恒.

本文采用 Sussman 等 [6] 提出的修正的 Level Set 方法捕捉熔体前沿界面, 即在重新初始化方程中加入质量修正项, 可以有效避免 Level Set 方法追踪运动界面过程中的质量不守恒问题.

定义 Heaviside 函数

$$H_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 0 & \varphi < -\varepsilon, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varphi}{\varepsilon} + \sin(\pi\varphi/\varepsilon)/\pi \right] & |\varphi| \leq \varepsilon, \\ 1 & \varphi > \varepsilon, \end{cases} \quad (4)$$

其中 ε 为界面宽度, 通常取 $\varepsilon = \Delta x$. Heaviside 函数的导数为 Dirac δ 函数 $\delta_\varepsilon(\varphi)$

$$\delta_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} (1 + \cos(\pi\varphi/\varepsilon)) & |\varphi| < \varepsilon, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (5)$$

定义水平集 φ 在每个网格区域 Ω_{ij} 上的面积为

$$A_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} H_\varepsilon(\varphi) d\Omega, \quad (6)$$

面积沿外法线方向 \mathbf{n} 的变化率为

$$\begin{aligned} \nabla H_\varepsilon(\varphi) \cdot \mathbf{n} &= H'_\varepsilon(\varphi) \nabla \varphi \cdot \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \\ &= H'_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi| \\ &= \delta_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|. \end{aligned} \quad (7)$$

重新初始化时, 由于数值误差, 会使得网格 Ω_{ij} 中的面积产生改变量 $\omega_{ij} \delta_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|$, 其中 ω_{ij} 是待定

系数, 因此可将重新初始化方程 (2) 改写为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t_r} + \text{sign}(\varphi_0)(|\nabla \varphi| - 1) \\ = \omega \delta_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|. \end{aligned} \quad (8)$$

下面确定 ω_{ij} 的值. 由于重新初始化后, 理论上不改变零等值线, 故界面上网格 Ω_{ij} 的面积随伪时间 t_r 的变化率应为 0, 即有

$$\frac{\partial A_{ij}}{\partial t_r} = \int_{\Omega_{ij}} H'(\varphi) \varphi_{t_r} d\Omega = 0, \quad (9)$$

将方程 (5), (8) 代入方程 (9), 可得

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{ij}} \delta_\varepsilon(\varphi) (-\text{sign}(\varphi_0)(|\nabla \varphi| - 1) \\ + \omega_{ij} \delta_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|) d\Omega = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

可解得

$$\omega_{ij} = \frac{\int_{\Omega_{ij}} \delta_\varepsilon(\varphi) (-\text{sign}(\varphi_0)(|\nabla \varphi| - 1)) d\Omega}{\int_{\Omega_{ij}} \delta_\varepsilon^2(\varphi) |\nabla \varphi| d\Omega}. \quad (11)$$

综上所述, 本文采用的 Level Set 及其重新初始化方程为 [6]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = 0, \quad (12)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t_r} + \text{sign}(\varphi_0)(|\nabla \varphi| - 1) \\ = \omega \delta_\varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|, \\ \varphi(x, y, 0) = \varphi_0(x, y). \end{cases} \quad (13)$$

2.2 流体控制方程

2.2.1 运动方程 [2]

气、液两相可以作为不可压缩流体来处理.

$$\text{连续方程} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (14)$$

u -动量方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} \\ - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2(\mu u)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\mu u)}{\partial y^2} \right) \\ = -\frac{\partial p}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{(\beta - 1)}{Re} \\ \times \left(\frac{\partial^2(\mu u)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\mu u)}{\partial y^2} \right) H_\varepsilon(\varphi) \\ + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi), \end{aligned} \quad (15)$$

v -动量方程

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2(\mu v)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\mu v)}{\partial y^2} \right) \\
 & = -\frac{\partial p}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{(\beta-1)}{Re} \\
 & \quad \times \left(\frac{\partial^2(\mu v)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\mu v)}{\partial y^2} \right) H_\varepsilon(\varphi) \\
 & \quad + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} H_\varepsilon(\varphi) + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} H_\varepsilon(\varphi), \quad (16)
 \end{aligned}$$

其中 Reynolds 数 $Re = \rho_1 LU / \mu_1$, $\rho(\varphi) = \xi + (1 - \xi) H_\varepsilon(\varphi)$, $\mu(\varphi) = \eta + (1 - \eta) H_\varepsilon(\varphi)$, $\xi = \rho_g / \rho_l$,

$\eta = \mu_g / \mu_l$, β 为牛顿黏性与总黏性的比, 下标 l 与 g 分别表示液相与气相, L 与 U 为长度和速度的无量纲化参数.

$$\text{本构方程 } \varpi \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varpi \mathbf{u} \psi) - \nabla \cdot (\Lambda \nabla \psi) = S_\psi. \quad (17)$$

本文选取具有 XPP 本构关系的本构方程, 方程中各参数的定义由表 1^[7] 给出, 其中 Weissenberg 数定义为 $We = \lambda_{0b} U / L$, λ_{0b} 表示聚合物分子链的取向松弛时间.

表 1 本构方程中的参数^[7]

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

2.2.2 能量方程

在许多情况下, 充模过程是非等温的, 因此, 本文建立黏弹性熔体充模过程的非等温两相模型.

2.2.2.1. 基于 XPP 本构关系的能量方程推导

Peters 等推导出了一般黏弹性流体的能量方程为^[8]

$$\begin{aligned}
 \rho C \frac{\nabla T}{T} = & -\nabla \mathbf{q} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - \left(1 - TH_T + \frac{T}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \\
 & \times \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{D} - \mathbf{A}), \quad (18)
 \end{aligned}$$

其中 C 是比热容, T 是温度, \mathbf{q} 是热通量, $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Cauchy 应力张量, H_T 是材料性能参数, \mathbf{A} 是滑移张量. 对于不同的本构方程, 由于滑移张量不同, 方程 (18) 的具体表达式不同. 本文推导出了基于 XPP 本构关系的能量方程.

注意到方程 (18) 中, 对于 XPP 本构方程有

$$H_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} + \frac{\zeta}{T}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} = & \frac{\alpha}{2G_0\lambda_{0b}} \boldsymbol{\sigma} + \left[\frac{1 - \alpha - 3\alpha\lambda^4 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S})}{2\lambda_{0b}\lambda^2} \right. \\
 & \left. + \frac{e^{\nu(\lambda-1)}}{\lambda_{0s}} \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right) \right] \mathbf{I} - \frac{G_0(1-\alpha)}{2\lambda_{0b}} \boldsymbol{\sigma}^{-1}, \quad (20)
 \end{aligned}$$

其中 \mathbf{S} 是主链段定向张量, 满足关系式 $\boldsymbol{\sigma} = 3G_0\lambda^2\mathbf{S}$.

同时, 由 Fourier 热传导定律, 有

$$\mathbf{q} = -K\nabla T, \quad (21)$$

其中 K 为热传导系数.

将方程 (19)–(21) 代入方程 (18), 可得基于 XPP 本构关系的能量方程为

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 C_1 T) + \nabla \cdot (\rho_1 C_1 \mathbf{u} T) \\
 & = \nabla \cdot (K_1 \nabla T) + \zeta \boldsymbol{\sigma}_1 : \mathbf{D} + (1 - \zeta) \left\{ \frac{\alpha}{2G_0\lambda_{0b}} \boldsymbol{\sigma}_1 : \boldsymbol{\sigma}_1 \right. \\
 & \quad \left. + \left[\frac{1 - \alpha - 3\alpha\lambda^4 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S})}{2\lambda_{0b}\lambda^2} + \frac{e^{\nu(\lambda-1)}}{\lambda_{0s}} \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right) \right] \right. \\
 & \quad \left. \times \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}_1) - \frac{G_0(1-\alpha)}{2\lambda_{0b}} \text{tr}(\mathbf{I}) \right\}, \quad (22)
 \end{aligned}$$

上式中右端含 σ_1 的第一项反映熵弹性 (高弹性) 的贡献, 最后一项反映能量弹性 (普弹性) 的贡献, 式中 $\zeta \in [0, 1]$.

2.2.2.2. 气、液两相能量方程的统一

对型腔中的气体, 其温度方程为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g C_g T) + \nabla \cdot (\rho_g C_g \mathbf{u} T) \\ &= \nabla \cdot (K_g \nabla T) + \sigma_g : \mathbf{D}. \end{aligned} \quad (23)$$

方程 (23) 中 $\sigma_g : \mathbf{D}$ 的计算一般纳入源项中, 因此方程 (23) 可表示为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g C_g T) + \nabla \cdot (\rho_g C_g \mathbf{u} T) \\ &= \nabla \cdot (K_g \nabla T) + S_{Tg}, \end{aligned} \quad (24)$$

其中

$$S_{Tg} = \sigma_g : \mathbf{D}. \quad (25)$$

类似地, 对型腔中的熔体, 其温度方程可表示为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_l C_l T) + \nabla \cdot (\rho_l C_l \mathbf{u} T) \\ &= \nabla \cdot (K_l \nabla T) + S_{Tl}, \end{aligned} \quad (26)$$

其中

$$\begin{aligned} S_{Tl} = \zeta \sigma_l : \mathbf{D} + (1 - \zeta) & \left\{ \frac{\alpha}{2G_0 \lambda_{0b}} \sigma_l : \sigma_l \right. \\ & + \left[\frac{1 - \alpha - 3\alpha \lambda^4 \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S})}{2\lambda_{0b} \lambda^2} \right. \\ & + \left. \frac{e^{\nu(\lambda-1)}}{\lambda_{0s}} \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right) \right] \text{tr}(\sigma_l) \\ & \left. - \frac{G_0(1-\alpha)}{2\lambda_{0b}} \text{tr}(\mathbf{I}) \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

与动量方程的统一类似, 可以将黏弹性流体与牛顿流体的能量方程统一表达为如下形式:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho C T) + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{u} T) \\ &= \nabla \cdot (K \nabla T) + S_{Tl} H_\varepsilon(\varphi) + S_{Tg} T_\varepsilon(\varphi), \end{aligned} \quad (28)$$

其中, $C(\varphi) = C_g + (C_l - C_g) H_\varepsilon(\varphi)$, $K(\varphi) = K_g + (K_l - K_g) H_\varepsilon(\varphi)$, $H_\varepsilon(\varphi)$ 的表达式同 (4), $T_\varepsilon(\varphi)$ 的表达式为

$$T_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 1 & \varphi < -\varepsilon, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varphi}{\varepsilon} + \sin(\pi\varphi/\varepsilon)/\pi \right] & |\varphi| \leq \varepsilon, \\ 0 & \varphi > \varepsilon. \end{cases} \quad (29)$$

文献 [9] 指出, (27) 式中参数 ζ 的变化不足以影响到各流变参量. 因此, 为将方程 (28) 无量纲化, 令 (27) 式中 $\zeta = 1$. 令 $K = K_1 K'$, $C = C_1 C'$, $T = T_0 T'$, 则方程 (28) 的无量纲化形式为 (仍用原变量表示无量纲量)

$$\begin{aligned} & Pe \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho C T) + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{u} T) \right) \\ &= \nabla \cdot (K \nabla T) + Br (S_{Tl} H_\varepsilon(\varphi) + S_{Tg} T_\varepsilon(\varphi)), \end{aligned} \quad (30)$$

其中, Peclet 数 $Pe = \rho_l C_l U L / \lambda_l$, Brinkman 数 $Br = \eta U^2 / K_l T_0$ 且

$$\begin{aligned} \rho(\varphi) &= \rho_g / \rho_l + (1 - \rho_g / \rho_l) H_\varepsilon(\varphi), \\ C(\varphi) &= C_g / C_l + (1 - C_g / C_l) H_\varepsilon(\varphi), \\ K(\varphi) &= K_g / K_l + (1 - K_g / K_l) H_\varepsilon(\varphi). \end{aligned}$$

2.2.2.3. 黏度模型

能量方程中不仅要考虑弹性的作用, 同时要有反映熔体黏度变化的黏度模型. 本文选取熔体黏度满足七参数 Cross-WLF 的黏度模型 [1]

$$\eta(T, \dot{\gamma}, p) = \frac{\eta_0(T, p)}{1 + (\eta_0 \dot{\gamma} / \tau^*)^{1-n_0}}, \quad (31)$$

式中 n_0 为非牛顿指数, η_0 为零剪切黏度, τ^* 为材料常数, 描述了由牛顿黏度过渡到幂律黏度的剪切应力水平. 零剪切黏度 η_0 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

$$\eta_0 = W_1 \exp \left(\frac{-J_1(T - T^*)}{J_2 + (T - T^*)} \right), \quad (32)$$

其中 $T^* = W_2 + W_3 p$, $J_2 = \hat{J}_2 + W_3 p$, J_1 是材料常数, 表示零剪切黏度下的玻璃化转变温度的温度相关性. W_1 是材料常数, 表征在零剪切黏度、玻璃化转变温度以及大气压强下的熔体黏度; T^* 是熔体的玻璃化转变温度, 通常与压力有关. W_2 是材料的玻璃化转变温度; W_3 是材料常数, 表示熔体的玻璃化转变温度随压力的变化量; \hat{J}_2 是与选取的聚合物熔体材料相关的参数.

综上所述, 则方程组 (12)—(17), (30)—(32) 共同构成了黏弹性流体充模过程的非等温模型.

3 数值方法及有效性验证

动量方程及本构方程由同位网格有限体积法求解, 压力-速度与应力-速度失耦问题运用插值方法 [2,10,11] 得以解决. Level Set 及其重

新初始化方程采用高分辨率格式求解, 其中空间离散采用五阶 WENO (weighted essentially non-oscillatory) 格式^[12-14], 时间离散采用三阶 TVD-Runge-Kutta 格式^[15].

整个模拟由自编 Fortran 程序实现.

表 2 修正的 Level Set 方法求解二维 Zalesak 问题的误差与收敛阶

Δx	误差	收敛阶
1	3.66×10^{-2}	N/A
1/2	1.64×10^{-3}	4.5
1/3	9.66×10^{-4}	1.3

本文给出二维 Zalesak 问题来验证数值方法的有效性. 计算区域为 100×100 . 带缺口的圆盘位于 $(50, 75)$, 半径为 15. 圆盘缺口的宽度和深度分别是 6 和 24. 初始速度 \mathbf{u} 给定如下:

$$\begin{aligned} u_0 &= (\pi/314)(50 - y), \\ v_0 &= (\pi/314)(x - 50), \end{aligned} \quad (33)$$

计算时间 $t = 0-628$, 计算网格分别为 100×100 , 200×200 和 300×300 . 时间步长始终等于 Δx . 计算结果如图 1 所示. 误差与收敛阶由表 2 中给出, 可以看出本文采用的修正的 Level Set 方法能够精确捕捉运动界面, 避免传统的 Level Set 方法引起的质量不守恒问题.

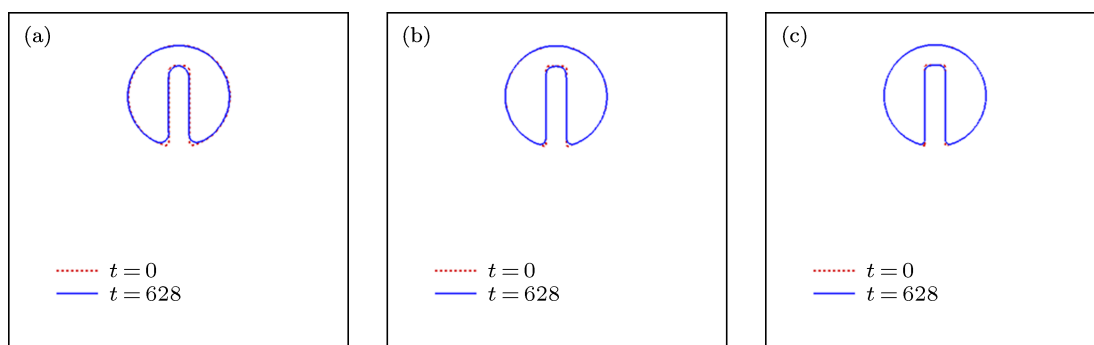


图 1 用修正的 Level Set 方法求解二维 Zalesak 问题的结果 (a) $\Delta x = \Delta t = 1$; (b) $\Delta x = \Delta t = 1/2$; (c) $\Delta x = \Delta t = 1/3$

4 模拟结果

充模材料采用聚碳酸酯 (polycarbonate, PC), 其物性参数如表 3 所示.

充模速度分别取 $u = 5.0$ 与 $u = 2.0$, 壁面与型腔内气体温度 323, 熔体温度 523. 型腔示意图及计算区域由图 2 所示.

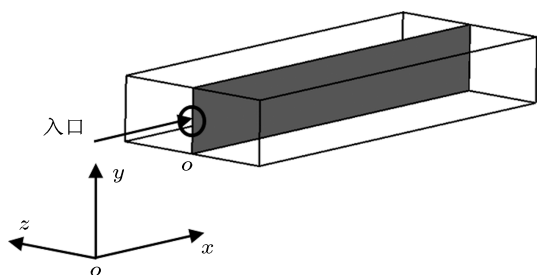


图 2 型腔示意图及计算区域 (阴影部分为计算区域)

图 3 给出了充模过程中不同注射速率下各个时刻前沿界面形状的比较. 可以看出 $u = 2.0$ 的前沿界面在 $y = 0.5$ 附近曲率大于 $u = 5.0$ 的情形. 熔体在充模过程中靠近壁面的熔体温度降低, 出现凝

固层, 使得流道变狭窄, 从而型腔中部的速度必然会增加. 注射速率越小, 凝固层越厚, 因此 $u = 2.0$ 的前沿界面在 $y = 0.5$ 附近曲率较大.

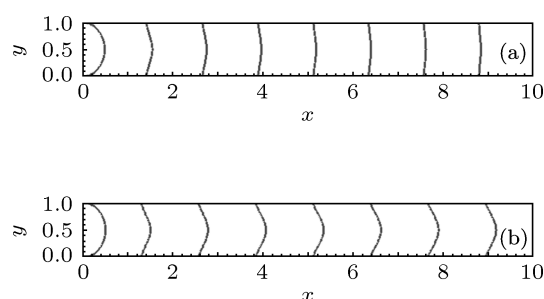


图 3 不同注射速率下各个时刻界面形状的比较 (a) $u = 5.0$; (b) $u = 2.0$

图 4 给出了注射速率分别为 $u = 2.0$ 和 $u = 5.0$ 时熔体充满型腔时型腔中的凝固层分布. 由于注射速度较小, 导致熔体在型腔内滞留时间过长, 靠近型腔壁面的熔体温度下降至熔点以下, 从而形成凝固层. 减少或消除凝固层的方法有提高注射速率或者适当提高模具温度等. 从图 4 可以看出,

表3 PC材料的物性参数^[1]

参数 (单位)	ρ_1 /kg·m ⁻³	C_1 /J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹	λ_1 /W·m ⁻¹ ·K ⁻¹	n_0	τ^* /Pa	W_1 /Pa·s	W_2 /K	W_3 /Pa·K ⁻¹	J_1	J_2 /K
值	1020	1700	0.173	0.574	182680	1.9×10^{11}	417.15	0.0	27.396	51.6

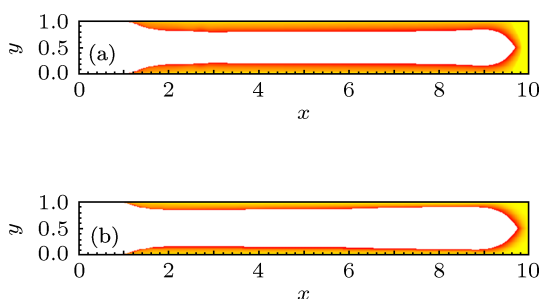


图4 不同注射速率下充填结束时型腔中凝固层分布 (a) $u = 2.0$; (b) $u = 5.0$

注射速率 $u = 5.0$ 的凝固层明显比 $u = 2.0$ 的凝固层薄。

图5给出了 $x = 2.5$ 处的剪切率分布情况, 可知熔体在靠近壁面附近凝固层处剪切率为零, 在型腔次壁面处剪切率最大, 而在远离壁面, 即型腔中部剪切率很小. 同时, 注射速率越大, 剪切率也越大. 这与文献 [16] 的结果一致。

5 流动诱导残余应力分析

图6给出了充模速度 $u = 5.0$, 充填结束时型

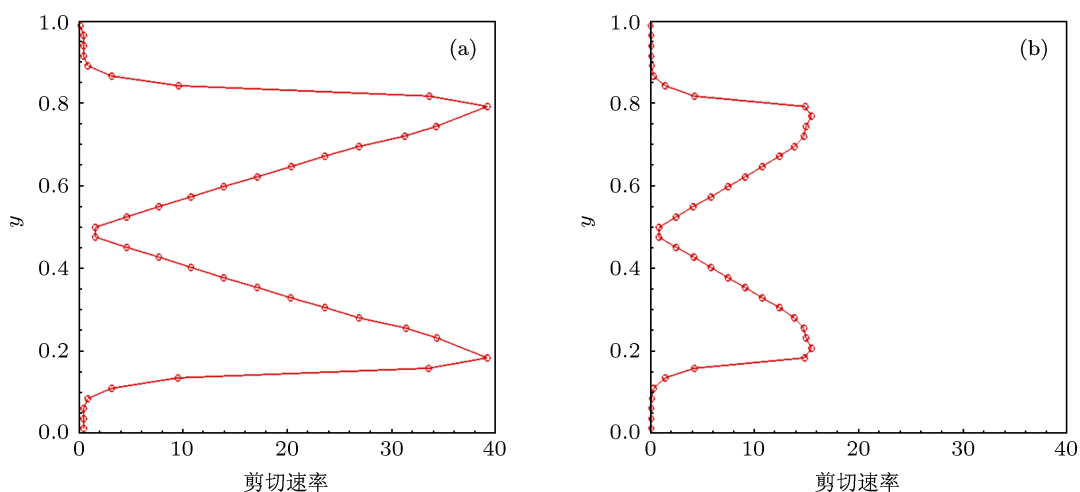


图5 $x = 2.5$ 处的剪切率分布 (a) $u = 5.0$; (b) $u = 2.0$

腔中应力沿 $x = 2.5$ 的分布情况, 与文献 [16] 的结果一致。

对于图6所示的应力分布情况可做如下解释^[1]: 注塑制品内流动残余应力的大小取决于大分子链内应力及其松弛的程度. 在制品表层紧邻模壁的地方, 熔体冷却速度很快, 大分子链来不及伸张取向即被冻结, 因此其流动取向度并不高. 在制品次表层的位置, 在剪切作用下, 大分子链逐渐沿流动方向伸直、进行取向, 此处的冷却速度较快, 可供大分子链松弛的时间很短, 其流动取向度较高, 分子链所受张力较高, 制品内流动残余应力也较高; 而在远离模壁的地方, 冷却速率较低, 大分子链有较长的时间松弛, 取向度较低, 流动残余应力也较小。

在实际生产中, 凡能减小制品中大分子链取向度的各种因素, 均有利于降低其流动残余应力. 实验结果表明, 提高熔体温度和模具温度, 降低充模压力和充模速率, 都会在不同程度上使制品的流动残余应力减小^[1]. 对此本文进行了数值验证, 充模速度 $u = 2.0$ 时的流动诱导残余应力如图7所示, 可以看出, 当充模速率减小时, 制品的流动残余应力减小, 从而从数值上验证了实验得到的结论。

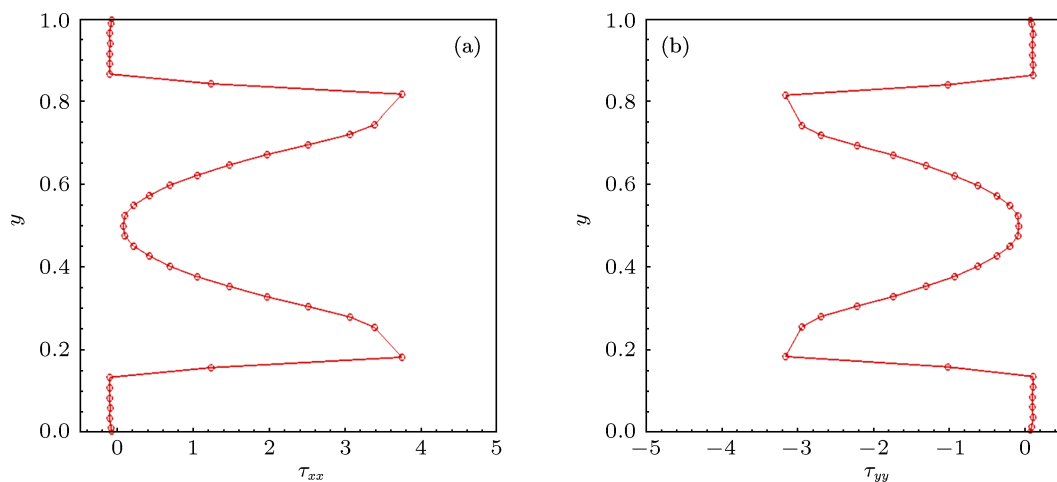


图6 充模速度 $u = 5.0$, 充填结束时应力沿 $x = 2.5$ 的分布情况

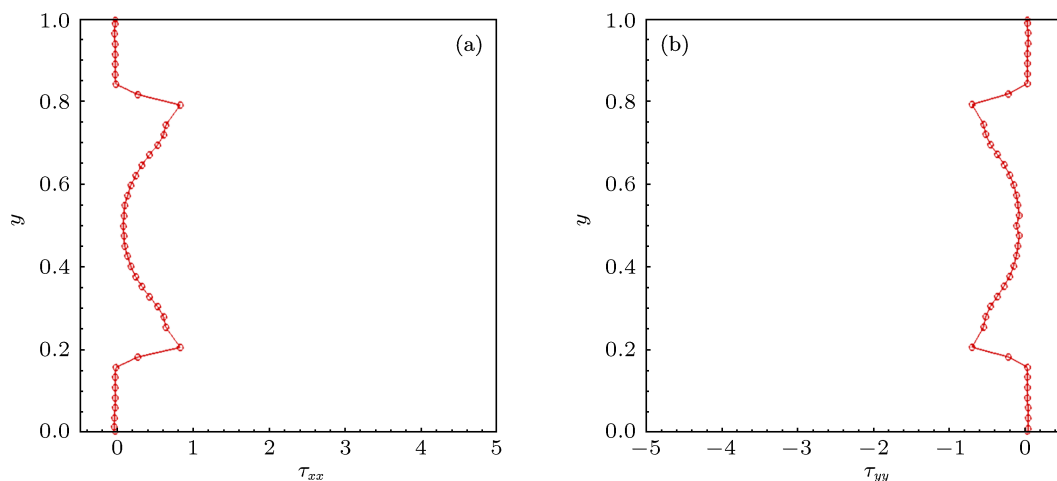


图7 充模速度 $u = 2.0$, 充填结束时应力沿 $x = 2.5$ 的分布情况

6 结论

推导了基于 XPP 本构关系的能量方程, 进而建立、求解了黏弹性流体非等温充模流动的气-液两相模型. 得到了影响制件力学性能的流动诱导残余应力, 并对影响残余应力的因素进行了分析. 结果表明, 本文建立的黏弹性流体非等温充模流动的两

相模型能够准确刻划黏弹性熔体充填过程, 并能准确捕捉到凝固层等物理现象及剪切速率和残余应力分布. 凝固层厚度随时间增加, 且与注射速率有关. 剪切速率与残余应力分布基本一致, 最大值出现在制品次表层位置, 凝固层内剪切速率和残余应力基本为零, 型腔中心位置剪切速率和残余应力值较小.

[1] Shen C Y 2009 *Simulation of Injection Molding and Theories and Methods for Optimization of Moulds Designing* (Beijing: Science Press) p1-23 (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 1—23 页]
 [2] Yang B X, Ouyang J, Li X J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 044701 [杨斌鑫, 欧阳洁, 栗雪娟 2012 物理学报 **61** 044701]
 [3] Sethian J A 1999 *SIAM Review* **41** 199
 [4] Osher S, Sethian J A 1988 *J. Comput. Phys.* **79** 12
 [5] Osher S, Fedkiw R P 2001 *J. Comput. Phys.* **169** 463
 [6] Sussman M, Fatemi E, Smereka P, Osher S 1998 *Computational Fluids* **27** 663
 [7] Aboubacar M, Aguayo J P, Phillips P M, Phillips T N, Tamaddon-Jahromi H R, Snigerev B A, Webster M F 2005 *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **126** 207
 [8] Peters G W M, Baaijens F P T 1997 *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **68** 205

- [9] Peters G W M 1993 *Thermorheological Modeling of Viscoelastic Materials* (Dordrecht: Kluwer Academic Publishers) p1–200
- [10] Oliveira P J, Pinho F T, Pinto G A 1998 *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **79** 1
- [11] Yang B X, Ouyang J, Jiang T, Liu C T 2010 *CMES-Computer Modeling in Engineering and Sciences* **63** 191
- [12] Harten A, Osher S 1987 *SIAM Journal Numerical Analysis* **24** 279
- [13] Liu X D, Osher S, Chan T 1994 *J. Comput. Phys.* **115** 217
- [14] Jiang G S, Peng D P 2000 *SIAM Journal on Scientific Computing* **21** 2126
- [15] Harten A 1983 *J. Comput. Phys.* **49** 357
- [16] Beaumont J P, Nagel R, Sherman R 2002 *Successful Injection Molding: Process, Design and Simulation* (Cincinnati: Hanser Publisher) p1–391

Simulation of residual stress in viscoelastic mold filling process*

Yang Bin-Xin¹⁾ Ouyang Jie^{2)†}

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

2) (Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China)

(Received 29 May 2012; revised manuscript received 2 July 2012)

Abstract

Flow induced residual stress is the major reason for stress cracking and warping of plastic products, the study on which is significant to overcome the flaws of products. In this paper, the energy equation based on Extended Pom-Pom constitutive relationship is deduced. A non-isothermal viscoelastic-Newtonian two-phase fluid model for mold filling process of viscoelastic materials is set up. The conservative interface capturing technique and the flow field solving method are coupled to perform a dynamic simulation. The distribution of the frozen skin layer and the shear rates are given. The flow induced residual stress is predicted and analyzed. The numerical results show that the thickness of the frozen skin layer is dependent on the injection velocity and a higher injection velocity corresponds to a thin frozen skin layer. Near the walls of the product, the shear rate and the residual stress are almost zero. At the position of subsurface, the shear rate and the residual stress reach their largest values. At the positions far away from the walls of the product, the shear rate and the residual stress are small.

Keywords: viscoelastic, mold filling, flow induced residual stress, finite volume method

PACS: 46.35.+z, 81.20.Hy, 85.50.Uv, 47.61.Jd

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2012CB025903), the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China (Grant No. 2012011019-2), and the Taiyuan University of Science and Technology Doctoral Sustentation Fund, China (Grant No. 20112011).

† E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn