

黏性不可压缩流体流动前沿的数值模拟

曹 伟

(郑州大学模具研究所, 郑州 450002)

摘要 提出了模拟注射成型中黏性、不可压缩流体流动前沿的新方法, 将 Hele-Shaw 流动应用于非等温条件下的黏性、不可压缩流体, 建立了流动分析模型, 用充填因子的输运方程描述流动前沿, 应用高阶 Taylor 展开式计算每一时间步长的充填因子, 用 Galerkin 方法导出了计算充填因子各阶导数的递推公式, 给出了时间增量的选取方法, 证明了它的稳定性. 针对 Han 设计的试验模具, 用相同的材料及工艺条件模拟充填过程, 比较了传统方法和该方法的模拟结果与实验结果的差异. 算例分析表明, 该方法可以有效地提高注射成型中流动前沿的模拟精度和计算效率.

关键词 黏性、不可压缩流体, 控制体积, 流动前沿, Hele-Shaw 流动

引 言

模拟流动前沿可以预测注射成型中熔接线、气穴的位置, 判断是否出现胀模、短射及其它产品缺陷. 模拟流动前沿需要求解非稳态的黏性、不可压缩流体的流动问题, 最常见的方法有拉格朗日法和欧拉法. 拉格朗日法使用移动网格, 只在流体已充填区域划分网格, 流动前沿位置由移动着的网格来描述, 流体每次向前推进, 网格都需要重新划分. 拉格朗日法虽然能较准确地预测流动前沿的位置, 但计算量大, 而且当几何模型复杂时网格易于划出模型之外. 欧拉法使用固定网格, 先将模型全部网格划分, 用数值方法计算流体前沿所占据的网格, 这种方法不需要重新划分网格, 易于处理复杂模型以及多股流体的聚集和分离, 是目前普遍使用的方法.

自 Hieber 和 Shen^[1] 基于 Hele-Shaw 流动假定^[2] 提出用混合有限元、有限差分 and 移动网格法模拟流动过程中的压力场、温度场、流动前沿以来, 出现了很多有价值的工作^[3~9], Wang 等^[3] 使用控制体积法模拟充填过程中的流动前沿, 取得了很好的效果. 结点的控制体积 (control volume, CV) 由包围该结点的连接单元中心和两边中点所构成的子体积 (sub-volume, SV) 的和, 如图 1 所示. 控制体积法先根据连续性方程、动量方程和能量方程求出压力场、温度场和速度场, 计算各前沿结点的流率、充填因子和完全充满所需要的时间, 将最小的充满时间

作为时间步长增量, 相应结点作为充满结点, 更新其余前沿结点的充填因子, 进入下一循环, 直至整个型腔完全充满. 这种方法将每一个时间步长上的速度场看作常数, 是拟稳态过程^[10]. 控制体积法能够有效地处理如三角形单元、柱状单元和矩形单元, 节省计算时间, 易于处理复杂型腔里的流体流动, 所以被后来大多数学者及商业公司使用. 但这种方法在时间增量的选取上缺乏科学依据, 当网格划得很密时计算量大; 当网格划得过粗时模拟结果不准确.

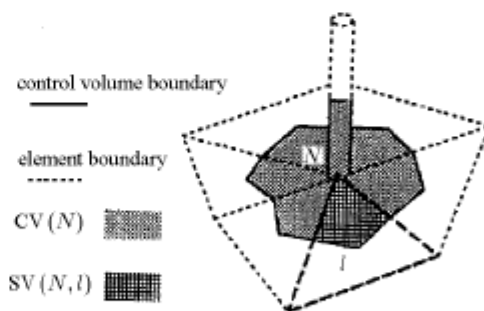


图 1 控制体积示意图

Fig.1 Schematic diagram of the control volume

本文根据质量守恒原理, 建立充填因子的输运方程, 将充填因子作 Taylor 展开, 用 Galerkin 方法^[11] 求出各阶导数, 进而求得下一时间步长的充填因子. 时间步长是根据求解精度和截断误差项的导数计算, 可根据网格密度自适应调整, 并证明了这种方法的稳定性. 依据上述原理开发了模拟程序,

针对 Han^[12] 设计的试验模具分别采用 Wang 方法和本文方法模拟流动前沿, 并与实验结果比较.

1 理论基础

Hieber 将广义 Hele-Shaw 流动推广到薄壁型腔中的非等温条件下黏性、不可压缩熔体的流动, 如图 2 所示 (C_e 表示塑料入口轮廓, C_m 表示流体流动前沿, C_i 表示内镶件边界, C_o 表示型腔的外边界, h 是型腔半厚度). 由于熔体黏度大, 相对于黏

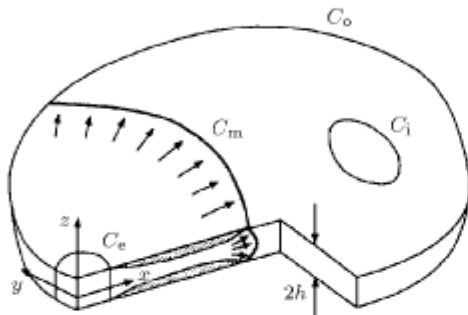


图 2 聚合物在模具型腔中流动示意图

Fig.2 Schematic diagram of polymer flow in the die cavity

性剪切力而言, 惯性力和质量力都很小 (雷诺数 $Re < 10^{-2}$), 可忽略不计. 此外, 在充填阶段熔体的弹性与黏性相比也很小, 忽略不计^[1]. 所以可得到以下控制方程

$$\frac{\partial}{\partial x}(h\bar{u}) + \frac{\partial}{\partial y}(h\bar{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\eta \frac{\partial u}{\partial z}\right) - \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\eta \frac{\partial v}{\partial z}\right) - \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = k_{th} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \eta \dot{\gamma} \quad (4)$$

式中 x 和 y 表示平面方向; u, v 为平面方向的速度分量; z 表示厚度方向; $(-)$ 表示厚度方向 z 上的平均; ρ, C_p, k_{th} 分别为密度、比热和热传导率; p 为压力; $\dot{\gamma}$ 为剪切速率; $\eta(\dot{\gamma}, T, p)$ 为剪切黏度. 本文使用五参数 Cross 黏度模型, 即

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

其中 n 为非牛顿指数, τ^* 为材料常数, η_0 为零剪切黏度. 在注射过程中, 熔体温度变化范围不大, 因此采用 Arrhenius 型表达式^[13]

$$\eta_0(T, p) = B e^{T_b/T} e^{\beta p}$$

其中 B, T_b, β 为材料常数.

假定速度场、温度场关于中心对称及熔体在模壁上无滑移, 即

$$u = v = 0, \quad T = T_w, \quad \text{在模壁上}$$

$$\partial u / \partial z = \partial v / \partial z = \partial T / \partial z = 0, \quad \text{在中心层上}$$

由以上方程及边界条件得

$$u = A_x \int_z^h \frac{z}{\eta} dz, \quad v = A_y \int_z^h \frac{z}{\eta} dz \quad (5)$$

及

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0 \quad (6)$$

其中 $A_x = -\partial p / \partial x$, $A_y = -\partial p / \partial y$, $S = \int_0^h \frac{z^2}{\eta} dz$.

为了描述流动前沿, 引入充填因子. 充填因子 $F(0 \leq F \leq 1)$ 表示每个结点的控制体积的充满程度, $F = 0$, 空结点; $F = 1$, 充满结点; $0 < F < 1$, 前沿结点. 由质量守恒原理得输运方程^[9]

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0 \quad (7)$$

F 依赖于空间位置 $\mathbf{x}$ 与时间 t . 为了求下一时间步长的 $F(\mathbf{x}, t)$, 将它在 t 处展开成 Taylor 级数

$$F(\mathbf{x}, t + \Delta t) = F(\mathbf{x}, t) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{x}, t) + \cdots + \Delta t^p \frac{\partial^p}{p! \partial t^p} F(\mathbf{x}, t) + O(\Delta t^{p+1}) \quad (8)$$

上式表明, Taylor 展开式的阶数越高, 充填因子的计算越准确, 应用时一般不低于三阶. 模拟结果的准确性很大程度上依赖如何选取适当的 Δt . Δt 过大, 可以用较少的步数充满型腔, 提高计算效率, 但可能是不稳定的; Δt 过小, 计算量大, 累计误差相应增大. 关于 Δt 的选取本文提出以下定理:

定理 1 当

$$\Delta t \leq \left((p+1)! / \max \left(\left| \frac{\partial^{p+1}}{\partial t^{p+1}} F(\mathbf{x}, t) \right| \right) \right)^{1/(p+1)} \varepsilon^{1/p} \quad (9)$$

时, 使用式 (8) 计算充填因子是稳定的. 其中 $\varepsilon \ll 1$ 是给定的初始误差.

证明 设充填时间为 T , 经过 N 次时间增量后整个型腔被完全充满, $F^n(\mathbf{x})$ 为式 (8) 的第 n 步的近似解, $F(\mathbf{x}, t_n)$ 为第 n 步的精确解, 则

$$\begin{aligned} F^{n+1}(\mathbf{x}) &= F^n(\mathbf{x}) + \Delta t_n \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{x}, t_n) + \cdots + \\ &\quad \Delta t_n^p \frac{\partial^p}{p! \partial t^p} F(\mathbf{x}, t_n) \\ F(\mathbf{x}, t_n + \Delta t_n) &= F(\mathbf{x}, t_n) + \Delta t_n \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{x}, t_n) + \cdots + \\ &\quad \Delta t_n^p \frac{\partial^p}{p! \partial t^p} F(\mathbf{x}, t_n) + \Delta t_n^{p+1} \frac{\partial^{p+1}}{(p+1)! \partial t^{p+1}} F(\mathbf{x}, \xi) \end{aligned}$$

其中, $t_n \leq \xi \leq t_n + \Delta t_n$. 因此

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} &= |F(\mathbf{x}, t_n + \Delta t_n) - F^{n+1}(\mathbf{x})| \leq \varepsilon_n + \\ &\quad \Delta t_n^{p+1} \frac{1}{(p+1)!} \max \left(\left| \frac{\partial^{p+1}}{\partial t^{p+1}} F(\mathbf{x}, \xi) \right| \right) \leq \\ &\quad \varepsilon_n + \varepsilon^{(p+1)/p} \leq N \varepsilon^{(p+1)/p} \end{aligned}$$

另一方面, 当材料、温度以及注射速率确定时, $\max \left(\left| \frac{\partial^{p+1}}{\partial t^{p+1}} F(\mathbf{x}, \xi) \right| \right)$ 也是确定的, 设为 M_0 , 对应的时间步长为 Δt_{k_0} . 对式 (9) 两边求和

$$\begin{aligned} T &= \sum_{k=1}^N \Delta t_k \geq N \Delta t_{k_0} \geq \\ &\quad N \left((p+1)! / M_0 \right)^{1/(p+1)} \varepsilon^{1/p} = NM \varepsilon^{1/p} \end{aligned}$$

其中, $M = ((p+1)! / M_0)^{1/(p+1)}$. 由此, $N \leq T \varepsilon^{-1/p} / M$. 所以, $\varepsilon_{n+1} \leq \frac{T}{M} \varepsilon$. 因此, 当 Δt 满足式 (9) 时, 该算法是稳定的.

2 数值方法

关于解式 (6) 和式 (4) 的混合有限元、有限差分方法, Hieber^[1] 已有详细描述, 本文着重讨论式 (8) 中充填因子的计算方法. 假定 $\mathbf{u}$ 在 $t_n \leq t \leq t_n + \Delta t_n$ 上为常数, 则式 (8) 中各阶导数是以下方程的解

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^k}{\partial t^k} F(\mathbf{x}, t) &= - \left(\mathbf{u} \cdot \nabla \frac{\partial^{k-1}}{\partial t^{k-1}} F(\mathbf{x}, t) \right) \\ k &= 1, 2, \cdots, p+1 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

用 Galerkin 方法^[10] 求式 (10) 中的各阶导数. 设 $W^1(\Omega)$ 为一阶可导的 Sobolev 空间, 则对于任意 $w \in W^1(\Omega)$ 乘式 (10), 分部积分并利用不可压缩

($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) 性质得

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial^k}{\partial t^k} F(\mathbf{x}, t) w d\Omega &= \\ \iint_{\Omega} \frac{\partial^{k-1}}{\partial t^{k-1}} F(\mathbf{x}, t) (\mathbf{u} \cdot \nabla w) d\Omega &- \\ \oint_S \left[\frac{\partial^{k-1}}{\partial t^{k-1}} F(\mathbf{x}, t) \right] w \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS &\quad (11) \end{aligned}$$

式中 $\mathbf{n}$ 为单位表面外法线向量.

定义 $W_h = \{w^h; w^h \in P_k(K), \forall K \in \mathfrak{S}(\Omega)\}$. 其中 $\mathfrak{S}(\Omega)$ 为对应 Ω 上的任一有限元网格划分, K 为 $\mathfrak{S}(\Omega)$ 上的任一单元, P_k 为单元 K 上的 k 次多项式集合.

由于可以用非连续插值求解输运方程^[14], 本文选择控制体积上的特征函数作为分片插值多项式, 在每个单元上

$$\frac{\partial^p F(\mathbf{x}, t)}{\partial t^p} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^p F_j}{\partial t^p} l_j \quad (12)$$

l_j 为相应于结点 j 的控制体积的特征函数. 在每个结点 N 的控制体积上作插值函数

$$w = \sum_{j=1}^m l_j \quad (13)$$

m 为结点 N 周围的单元数. 将式 (12) 与式 (13) 代入式 (11) 得

$$\frac{\partial^p F}{\partial t^p} |V| = \oint_{\partial V^-} \left[\frac{\partial^{p-1} F}{\partial t^{p-1}} \right] \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (14)$$

这里, $|V|$ 是结点 N 的控制体积 V 的体积,

$$\partial V^- = \{\partial V; \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0\}$$

$$[F^{(p-1)}] = F^{(p-1)}|_V - F^{(p-1)}|_{V^-}$$

其中 $F^{(p-1)}|_{V^-}$ 表示 $F^{(p-1)}$ 在邻接控制体积 V^- 上的值.

从式 (14) 可以递推地解出式 (8) 中所需要的各阶导数, 再将它们代入式 (8) 即可求得下一时间步长的充填因子. 与 Wang 的方法相比, 本方法需要额外计算充填因子的各阶导数, 但它不会增加太多的计算量. 因为使用本方法只计算前沿结点的充填因子, 除了开始阶段前沿结点多于充满结点外, 大部分时间里前沿结点都大大少于充满结点. 另外, 方程 (6) 是非线性方程, 需要多次迭代才能解出压力场. 所以, 与迭代求解非线性方程 (6) 相比, 由计算导数所产生的额外计算量就微不足道了.

3 算例分析

Han^[12] 设计了一套实验模具, 由 4 个型腔和流道系统组成, 在流道和型腔中各置一个压力传感器, 如图 3 所示, 流道半径 3 mm. 在 4.6×10^4 kg 的注射机上将 PP BJ500 的聚丙烯注入型腔中, 料筒温度 180°C , 模壁温度 40°C , 注射时间 1.5 s, 压力传感器记录了注射过程中的一系列压力值. 在充填过程中, 对制品成型影响最大的过程参数是压力, 所以本文主要研究不同的模拟流动前沿方法所引起的压力差别以及和实验的吻合程度. 针对这副模具, 使用两种网格模型 (模型 A, 164 个结点, 212 个单元; 模型 B, 1041 个结点, 1771 个单元), 取 ε 为 0.001, 分别用 Wang 方法和本文方法 (使用四阶 Taylor 展开) 在 PIII 机器上计算充填过程中各时刻的压力, 并与 Han 的实验值比较, 结果见图 4, 图 5, 表 1.

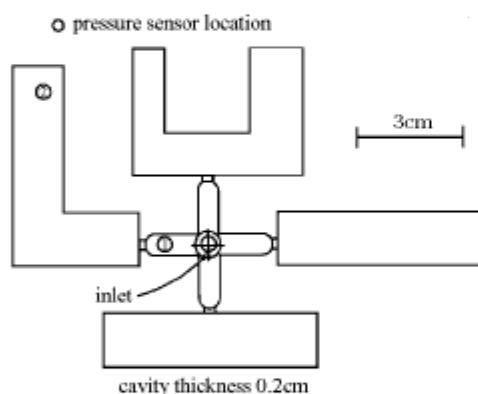
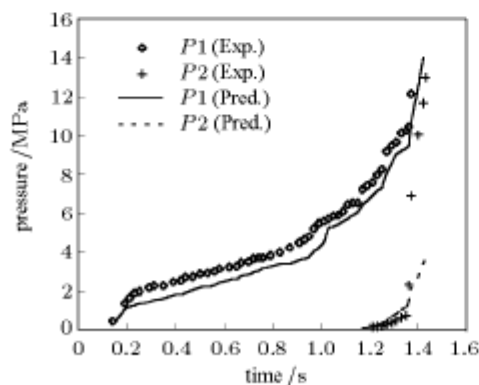


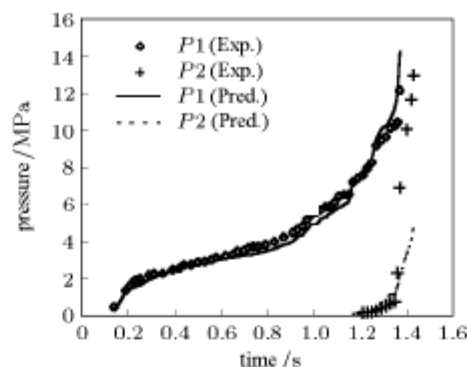
图 3 模具结构示意图

Fig.3 Schematic diagram of mold



(a) Wang^[3] 方法预测的压力

(a) Predicted pressures by Wang's method^[3]

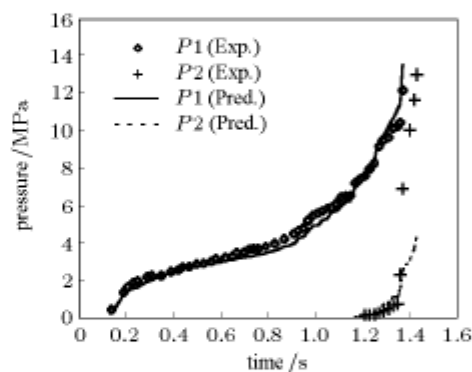


(b) 本文方法预测的压力

(b) Predicted pressures by this present method

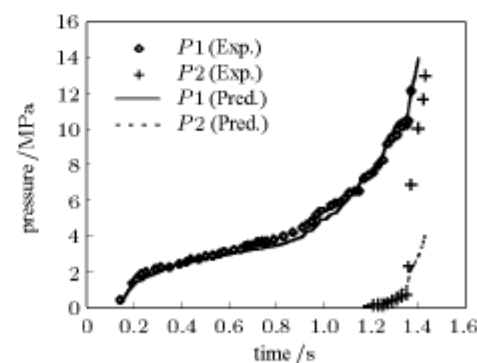
图 4 网格模型 A 上的预测结果

Fig.4 Predicted results of mesh model A



(a) Wang^[3] 方法预测的压力

(a) Predicted pressures by Wang's method^[3]



(b) 本文方法预测的压力

(b) Predicted pressures by this present method

图 5 网格模型 B 上的预测结果

Fig.5 Predicted results of mesh model B

表 1 计算效率比较

Table 1 Comparison of calculating efficiency

Mesh models	Methods	Average filling node number	CPU time/s
Model A	Wang's ^[3]	1	21
	present method	0.8	24
Model B	Wang's ^[3]	1	210
	present method	4	95

从上述图表可以看出:

(1) 不管使用较密的网格模型还是较粗的网格模型, 本文方法模拟的各时刻的压力值与实验值都比较接近, 网格越密吻合越好; 而 Wang 的方法只有在网格较密时才能得到较好的结果. 因为本文方法不需要一次必须充满一个结点, 当网格较粗时可以分几次充满一个结点, 所以提高了精度.

(2) 当网格较密时, 本文的方法可以提高计算效率. 因为在一个时间步长内充满了更多的控制体积, 所以能用较少的步数充满整个型腔, 计算量减少, 消耗的 CPU 时间就减少了.

(3) 从图 4, 图 5 可以看出, 两种方法都没能在第 2 个压力传感器位置预测到压力的激增. 因为第 2 个传感器的位置靠近熔体最后到达型腔的地方, 可能是模具没有设置排气孔以及数学模型中没有考虑流体的弹性效应. 此外, 在 $t_n \leq t \leq t_n + \Delta t_n$ 上速度场、压力场被假定为常数, 这种线性化的处理方法也是造成模拟不准确的原因.

4 结 论

基于输运方程用 Taylor 展开近似求解充填因子的方法为模拟注射成型流动前沿提供了新的解决方案, 这种方法可以根据求解精度和充填因子的高阶导数选择合适的时间步长, 避免了直接依靠网格信息选择时间增量的局限, 在网格较粗时可以提高模拟精度, 在网格较密时可以提高计算效率. 另外, 若使用黏弹本构关系建立数学模型, 模拟结果可能会更可靠.

参 考 文 献

- 1 Hieber CA, Shen SF. A finite-element/finite-difference simulation of the injection-molding filling process. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1980, 7: 1~32
- 2 Schlichting H. Boundary-Layer Theory. New York: McGraw Hill, 1968. 131~142
- 3 Wang VW, Hieber CA, Wang KK. Dynamic simulation and graphics for the injection molding of three-dimensional thin parts. *Journal of Polymer Engineering*, 1986, 7: 21~45
- 4 Chiang HH, Himasekhar K, Wang KK. Integrated simulation of fluid flow and heat transfer in injection molding for the prediction of shrinkage and warpage. *Journal of Engineering Material Technology*, 1993, 115: 37~47
- 5 Chen BS, Liu WH. Numerical simulation and experimental investigation of injection mold filling with melt solidification. *Polymer Engineer and Science*, 1989, 29: 1039~1050
- 6 Chiang HH, Hieber CA, Wang KK. A unified simulation of the filling and postfilling stages in injection molding. Part I: Formulation. *Polymer Engineer and Science*, 1991, 31: 116~124
- 7 Chiang HH, Hieber CA, Wang KK. A unified simulation of the filling and postfilling stages in injection molding. Part II: Experimental verification. *Polymer Engineer and Science*, 1991, 31: 125~139
- 8 Chen BS, Liu WH. Numerical simulation of the post-filling stage in injection molding with a two-phase model. *Polymer Engineer and Science*, 1994, 34: 835~846
- 9 Najmi LA, Lee DY. Modeling of mold filling process for powder injection molding. *Polymer Engineer and Science*, 1991, 31: 1137~1148
- 10 Mohanm RV, Ngo ND, Tamma KK. On a pure finite-element-based methodology for resin transfer mold filling simulations. *Polymer Engineer and Science*, 1999, 39(1): 26~54
- 11 Pichelin E, Coupez T. Finite element solution of the 3D filling problem for viscous incompressible fluid. *Computer Methods Applied Mechanic Engineer*, 1998, 163: 359~371
- 12 Han Kyeony-Hee, Im Yong-Taek. Compressible flow analysis of filling and post-filling in injection molding with phase-change effect. *Composite Structures*, 1997, 38(1-4): 179~190
- 13 Isayev AI. Injection and Compression Molding Fundamentals. New York: Marcel Dekker, 1987. 230~245
- 14 Fortin A, Zine A, Agassant JF. Computing viscoelastic fluid flow problem at low cost. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1992, 45: 209~229

NUMERICAL SIMULATION FOR THE FLOW FRONT OF VISCOUS INCOMPRESSIBLE FLUID

Cao Wei

(*Mold & Die Institute, Zhengzhou University, Zhengzhou 450002, China*)

Abstract In the past decade, Wang's control volume approach has been the dominated method to simulate the advancing front of melt in injection molding. It demands one and only one control volume be filled within one time step no matter how fine or rough the mesh is. The time step decision deduced from geometry is lack of theory support and difficult to test its stability. This limitation results in the loss of simulated precision for rough mesh and tedious calculation for fine mesh. This work presents a new method to simulate the advancing front of viscous incompressible fluid in injection molding. The governing equations are in terms of generalized Hele-Shaw flow for the viscous, incompressible, non-Newtonian fluid under non-isothermal conditions. The moving fluid description is transformed into a transport equation about fill factor in the whole domain to be filled. The fill factor at each time step is determined by Taylor expansion, while the derivatives in the expansion is calculated with the recursive formula derived by Galerkin method. Different from Wang's approach, the time step in this present method is determined by the pre-error and high order derivative of fill factor which involving velocity field and the previous conditions of neighboring control volumes. This work proves that the method is stable if the time step is carefully chosen. Based on this theory, a program was developed to simulate the advancing melt fronts in injection molding. For verification of the numerical results obtained from the developed program, the simulation results are compared with the experimental results obtained from the test mold set designed by Han in the current study using the same commercial-grade PP and process conditions. Comparisons are also carried out between this present method and the traditional method. Compared with Wang's approach, this present method can improve the simulated precision for rough mesh and reduce the calculation for fine mesh.

Key words viscous, incompressible fluid, control volume, advancing front, Hele-Shaw flow