



注塑成型模拟理论与数值算法发展综述

曹伟¹, 任梦柯², 刘春太¹, 阮诗伦², 申长雨^{1,2*}

1. 郑州大学橡塑模具国家工程研究中心, 郑州 450002;

2. 大连理工大学工程力学系, 大连 116024

* E-mail: shency@dlut.edu.cn

收稿日期: 2019-11-05; 接受日期: 2019-12-24; 网络版发表日期: 2020-04-30

国家自然科学基金(批准号: 11672271, 11432003)资助项目

摘要 注塑成型数值模拟近20年取得了长足的发展, 应用日益广泛, 也面临模拟结果不准确、新方法与商业软件集成困难、微观机理考虑不足等问题与挑战。本文系统回顾注塑成型理论模型的发展历程和各阶段主要成果, 简要介绍多尺度模拟方法, 分析材料本构模型的特点及适用范围, 阐明结晶对状态方程、本构模型的影响, 评价求解注塑成型问题的数值方法的特点, 指出黏性、黏弹性方法的差异, 分析流动前沿追踪方法的优点与缺点, 介绍一些特殊物理现象如喷泉流效应的模拟方法, 以及充填流动的无网格法。基于现有理论、算法的分析与评价, 结合塑料加工行业的实际需求, 指出了注塑成型模拟的发展趋势和亟需解决的问题。

关键词 注塑成型, 本构模型, 数值方法, 有限元法, 边界元法, 多尺度模拟, 无网格法

1 引言

注塑成型因加工产品的多样性及尺寸稳定性而大规模应用于塑料制品生产, 但注塑成型也易于产生飞边、流痕、收缩不均及翘曲变形等问题, 需要反复修模、试模才能解决, 耗费大量人力、物力。根据科学计算发展的计算机辅助工程(CAE)技术可以在实际试模之前对设计、加工方案进行仿真分析, 预测可能出现的成型问题和制品质量缺陷, 辅助工程师发现方案不足, 优化出可行的模具设计及成型工艺。CAE技术应用于注塑成型可以显著减少设计周期、提高加工效率, 日益成为塑料加工行业的重要辅助设计工具。

注塑成型CAE技术始于20世纪70年代, 澳大利亚Colin提出了复杂几何模型的简化方法及计算原理, 经过近50年发展, 材料表征、理论模型、数值方法等各方面均取得了长足的进步, 开发的商业软件也广泛应用于塑料加工企业。随着计算机技术的进步及数值算法的快速发展, 现在像汽车仪表盘这样的复杂制品只需几分钟就能完成一次成型分析, 加快了注塑成型CAE技术在塑料行业的推广应用速度, 国内的很多中小企业也开始应用CAE软件进行方案可行性分析。

虽然注塑成型模拟技术得到了工业界的普遍认可与应用, 但还存在模拟准确性不足、结果单一、指导性建议缺失等问题, 致使CAE技术没有成为塑料加工

引用格式: 曹伟, 任梦柯, 刘春太, 等. 注塑成型模拟理论与数值算法发展综述. 中国科学: 技术科学, 2020, 50: 667~692

Cao W, Ren M K, Liu C T, et al. A review on the theories and numerical methods for injection molding simulations (in Chinese). Sci Sin Tech, 2020, 50: 667~692, doi: 10.1360/SST-2019-0389

行业标准。CAE技术的核心是准确的理论建模和数值方法，然而，塑料在注塑成型过程中经历了复杂的热、力作用历史和形态变化，结晶型塑料还要经历相态转变，完整描述这些变化理论上很难实现，因此，需要对几何模型、理论模型进行假设与简化，简化的模型自然产生模拟误差。此外，为了提高计算效率，常常用低阶方法离散求解物理问题，精度不足的数值方法放大了理论建模误差，致使模拟结果与实际成型有显著差异。为进一步推动注塑成型CAE技术发展，本文全面总结注塑成型数值模拟的理论、算法、材料表征等发展历程与成果，提出今后的发展方向和建议，借此启发同行的创造性思维，促进注塑成型数值模拟的进步。

本文在第2节系统总结注塑成型的理论演化过程及各阶段成果，包括流动、纤维取向、收缩与翘曲变形的理论模型，并简要介绍塑件-模具一体化分析和多尺度模拟方法。第3节介绍聚合物材料特征，分析材料本构模型的特点及适用范围，阐明状态方程、结晶动力学模型。第4节总结数值模拟方法的发展历程及适用对象，包括中面流动、三维流动、黏弹性流动模拟方法，流动前沿追踪方法和喷泉流模拟方法，冷却分析的边界元方法，收缩与翘曲变形模拟以及充填流动的无网格法。第5节预测注塑成型模拟今后的发展趋势和亟需解决的问题。

2 注塑成型理论模型

注塑成型的理论模型随计算机运算能力的提高不断发展，日益接近多材料体系、复杂几何型腔中塑料变化的本质特征，从早期的展平法(layflat method)、中面、双面到真三维方法，假设与简化越来越少，计算物理场越来越完备，能够预测的物理现象及制品性

能也越来越多，模拟的塑料成型日益逼近实际塑料加工过程。

2.1 流动理论模型

2.1.1 平面展平法

展平法是Moldflow创始人Colin在20世纪70年代提出的一种近似方法。先将一个三维的薄壁制件(图1(a))展开成平面，将充模流动分解成若干“流径”(flow path)，然后在各个“流径”上进行非定常流动分析，再将流场按拓扑关系从浇口开始由近及远组装，形成图1(b)所示的流动。由于黏度依赖于剪切速率和温度，而且各流径之间需要耦合，计算过程必须多次迭代。这个方法计算精度虽然不高，但解决了复杂几何形状的流动分析问题，开辟了实际塑料制品成型分析可行性路径，奠定了注塑成型科学分析的理论与技术基础，以该方法为基础开发的Moldflow软件是世界上首款注塑成型分析软件。

2.1.2 中面流动方法

(1) Hele-Shaw假设及流动控制方程

流体在厚度很小的区域中的缓慢流动称之为润滑近似(lubrication approximation)，也称之为Hele-Shaw流动。若 x 和 y 为流动方向， z 为厚度方向， h 代表厚度， L 代表流动长度，则 $\partial h / \partial x \ll 1$ ， $\partial h / \partial y \ll 1$ 。Hele-Shaw流动具有以下特征：流动方向上的速度变化 $\partial u / \partial x$ 和 $\partial u / \partial y$ 与厚度方向 $\partial u / \partial z$ 相比可以忽略；忽略厚度方向的压力变化，即 $\partial p / \partial z = 0$ ；忽略正应力；雷诺数小，流动为层流。

注塑成型制品一般是薄壁制品，厚度与另两个方向尺寸相比很小，成型中的充填过程符合Hele-Shaw流动特征。充填过程中塑料熔体可看作不可压缩流体，惯性力、质量力与黏性力相比可以忽略，因此，黏性流动的二维控制方程可简化为

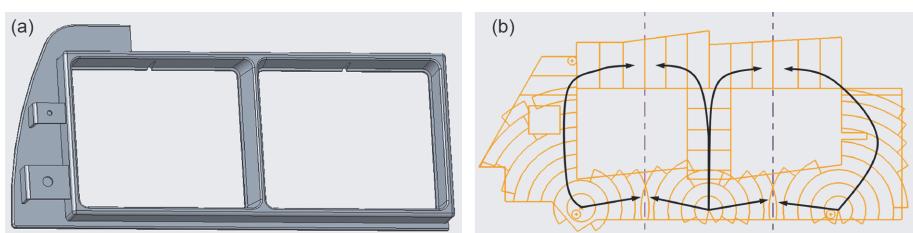


图 1 (网络版彩图)展平法示意图. (a) 塑料产品; (b) 平面展平图

Figure 1 (Color online) The diagram of layflat method. (a) Plastic part; (b) corresponding layflat.

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

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

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

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

式中, u 和 v 表示 x 和 y 方向上的速度, p 和 T 表示压力和温度, η , ρ , C_p , k 分别表示熔体的黏度、密度、比热和热传导率, $\dot{\gamma}$ ($= \partial u / \partial z + \partial v / \partial z$) 为剪切速率, $\eta \dot{\gamma}^2$ 为剪切热.

Hieber 和 Shen^[1] 对动量方程(2) 和 (3) 积分求出速度场的形式表达式:

$$u = - \frac{\partial p}{\partial x} \int_z^h \frac{z}{\eta} dz, \quad (2a)$$

$$v = - \frac{\partial p}{\partial y} \int_z^h \frac{z}{\eta} dz. \quad (3a)$$

然后代入连续方程(1), 得到关于压力 p 的拟 Laplace 方程:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(S \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 0, \quad (5)$$

式中, $S = \int_0^h \frac{z^2}{\eta} dz$ 为流动率.

用有限元求解二维流动问题的压力场方程(5), 代入速度场形式表达式(2a) 和 (3a) 求出厚度方向的速度场. 然后, 用有限差分法离散求解热传导方程(4), 得到厚度方向的温度场. 最后, 用速度场、温度场更新黏度, 重新求解流动问题, 直到收敛为止. 由于该方法是在平面上用有限元计算压力场, 然后以压力场为基础分层计算厚度上的速度场和温度场, 所以中面方法也称为 2.5 维方法.

中面方法不需要将产品展开成平面, 适用于任何形状的薄壁制品成型. 同时, 中面方法建立在科学计算的基础上, 结果可靠. 王国金领导的康奈尔大学 CIMP 团队将中面方法应用于塑料注射成型模拟, 建立了很多奠基性的工作, 其中王文伟等人^[2] 将中面方法推广到三维几何制品流动模拟; Chiang 等人^[3] 进一步将其推广到可压缩熔体流动, 提出了后充填中面理论和算法; Himasekhar 等人^[4] 建立了边界元冷却分析模

型与算法. 此外, Isayev^[5] 建立了体积收缩模型, Batoz 和 Lardeur^[6] 提出了塑件的翘曲变形模型. AC Technology 公司以这些理论为基础开发了流动、保压、冷却、收缩、翘曲变形等功能并集成在 C-Mold 软件中, 实现了成型过程全周期分析.

(2) 双面流理论

双面流是 20 世纪 90 年代发展的便捷注塑成型模拟方法. 到 20 世纪末期, 计算机辅助设计(CAD) 技术已经普及, 工程师希望直接使用制品的 CAD 模型进行注塑成型分析, 而不是再建一套中面模型. 双面流方法是将三维制件表面全部划分为平面网格, 并将结点在厚度方向上配对, 然后用中面方法计算一个面的流场, 再根据流动方向和几何形状强迫一对或多对配对点压力相等实现上下面一致充填的效果^[7].

双面方法看起来是在实体上进行成型分析, 但理论基础还是中面方法, 只是采用特殊技巧实现了制件表面一致充填的效果, 但这种结点配对、耦合方法也会引起新的问题, 申长雨团队^[8] 指出配对点上质量不守恒, 并提出了质量自然平衡方法. 虽然双面方法解决了与 CAD 的接口问题, 但也产生了额外的误差, 计算准确度较中面方法低.

2.1.3 三维流动理论

Hele-Shaw 模型虽然计算简单、有效, 但模拟的流场不完整, 也无法考虑重力效应, 此外也不能实现与 CAD 软件的无缝集成, 因此, 精密的数值计算必须使用三维方法. 忽略 Hele-Shaw 假设, 依据流体力学理论建立不可压缩、非等温黏性流动的连续性方程、动量方程和能量方程^[9,10]:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \rho \mathbf{f} - \nabla p + \nabla \cdot (\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)), \quad (7)$$

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = - \nabla \cdot (k \nabla T) + \eta \dot{\gamma}^2, \quad (8)$$

式中, $\rho \mathbf{f}$ 为质量力. 当熔体黏度较大时, 惯性力、质量力也可以忽略, 动量方程简化为

$$-\nabla p + \nabla \cdot (\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) = 0. \quad (9)$$

因为黏度 η 依赖于温度和剪切速率, 所以上述流动问题是非线性问题.

三维方法预算的流场完整, 还可以计算惯性力、

质量力对流动的影响, 是比较完善的理论模型, 能够模拟复杂的物理现象, 图2为用真三维方法模拟的屈曲流动。但三维方法面临的最大挑战是指数级增加的计算量, 当塑件尺寸较大或局部尺寸相差较大时, 需要超千万级的三维单元, 普通计算机无法进行如此规模的计算仿真。因此, 真正适用于真三维方法成型分析是厚度均匀或超厚制品, 复杂制件不适合三维计算。随着计算机运算速度、内存等性能的提高, 真正意义上的全三维成型仿真也许不会太遥远。

2.2 纤维取向

纤维复合材料可以提高制品强度和刚度, 广泛应用于汽车、家电等制品生产, 纤维增强材料制品的热力学性能依赖于纤维密度和取向。一般假定注塑成型过程中纤维悬浮于熔体, 受流场剪切作用按一定方向排列, 形成取向, 因此, 纤维取向与流场密切相关。

纤维取向用概率密度函数 ψ 表示, $\psi(\mathbf{p}, t)$ 为 t 时刻纤维取向 \mathbf{p} 与 $d\mathbf{p}$ 范围内的概率, 因此, $\psi(\mathbf{p}, t)$ 满足

$$\int \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = 1. \quad (10)$$

在流场中 $\psi(\mathbf{p}, t)$ 随时间的变化可以用Fokker-Planck方程描述:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_i} \left[D_r (\delta_{ij} - p_i p_j) \frac{\partial \psi}{\partial p_j} - (L_{ij} p_j - L_{jk} p_i p_j p_k) \right]. \quad (11)$$

式中, δ_{ij} 为克罗内克函数, D_r 为耗散系数, L_{ij} 为有效速度梯度, $L_{ij} = l_{ij} - \xi D_{ij}$, 其中 $l_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, $D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$,

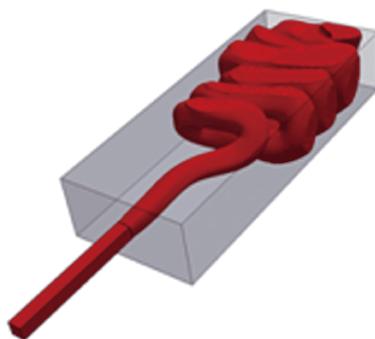


图2 (网络版彩图)真三维方法模拟的屈曲流

Figure 2 (Color online) The simulated buckling flow by the real 3D method.

$$\xi = \frac{2}{a_r^2 + 1} (a_r \text{为纤维的长径比}).$$

尽管Fokker-Planck模型具有很好的精度, 但需要计算所有方向的概率密度, 计算量太大。因此, Advani和Tucker III^[11]提出了改进模型, 引入取向张量:

$$a_{ij} \equiv \langle p_i p_j \rangle = \int p_i p_j \psi d\mathbf{p}, \quad (12)$$

$$a_{ijkl} \equiv \langle p_i p_j p_k p_l \rangle = \int p_i p_j p_k p_l \psi d\mathbf{p}. \quad (13)$$

在张量体系中, 二阶张量 a_{ij} 的特征向量表征了纤维取向, 而特征值大小代表了在该方向上的取向程度。

Folgar和Tucker III^[12]基于取向张量提出了Folgar-Tucker取向理论模型:

$$\frac{\partial a_{ij}}{\partial t} + 2L_{kl}a_{ijkl} - 2D_r(\delta_{ij} - 3a_{ij}) = 0, \quad (14)$$

式中, $\delta/\delta t$ 表示上随体导数, 耗散系数 $D_r = C_I \dot{\gamma}$ (C_I 为纤维-纤维之间的作用系数), C_I 可以用实验数据拟合^[7]。但耗散系数表达式不能表征各向异性特征, 因此范西俊等人^[13]提出了用二阶对称张量代替 C_I :

$$\mathbf{D}_r = \tilde{\mathbf{C}} \dot{\gamma}. \quad (15)$$

修改后的取向模型为

$$\frac{\partial a_{ij}}{\partial t} + 2\mathcal{L}_{kl}a_{ijkl} - 2\dot{\gamma}(\tilde{C}_{ij} - 3a_{ij}\tilde{C}_{kk}) = 0, \quad (16)$$

式中, $\mathcal{L}_{kl} = L_{ij} - 3a_{ij}\dot{\gamma}$, $\frac{\partial a_{ij}}{\partial t} = \frac{D a_{ij}}{D t} - \mathcal{L}_{ik}a_{kj} - \mathcal{L}_{jk}a_{ki}$, $\tilde{\mathbf{C}}$ 是应变率张量, 表示为

$$\tilde{C}_{ij} = c_0 \delta_{ij} + c_1 \frac{D_{ij}}{\dot{\gamma}} + c_2 \frac{D_{ik}D_{kj}}{\dot{\gamma}^2}. \quad (17)$$

Phelps和Tucker III^[14]进一步将其修正为

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{ij} = & c_0 \delta_{ij} + c_1 a_{ij} + c_2 a_{ik} a_{kj} \\ & + c_3 \frac{D_{ij}}{\dot{\gamma}} + c_4 \frac{D_{ik}D_{kj}}{\dot{\gamma}^2}. \end{aligned} \quad (18)$$

为了避免Folgar-Tucker模型预测的纤维取向过早问题, Tucker III等人^[15]和Wang等人^[16]及Phelps和Tucker III^[14]提出了缩减应变模型, 即在 $\dot{\gamma}(\tilde{C}_{ij} - 3a_{ij}\tilde{C}_{kk})$ 前加缩减因子, 延迟纤维定向排列。

用Folgar-Tucker模型计算二阶张量涉及四阶张量, 而计算四阶张量需要六阶张量, 以此类推。因此, 需要对四阶张量或高阶张量近似, 以使方程组封闭, 为此很

多学者提出了不同的近似方法实现封闭计算.

(1) 线性封闭

Hand^[17]提出了线性封闭模型:

$$\begin{aligned} a_{ijkl} \approx & -\frac{1}{35}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\ & + \frac{1}{7}(a_{ij}\delta_{kl} + a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} \\ & + a_{kl}\delta_{ij} + a_{jl}\delta_{ik} + a_{jk}\delta_{il}). \end{aligned} \quad (19)$$

对于二维流动, 上式中的两个系数分别换成 $-1/24$ 和 $1/6$. 线性封闭模型对随机分布的纤维取向预测比较准确, 但对于演化过程中取向度较高的分布预测不稳定.

(2) 二次封闭

二次封闭是Doi^[18]和Lipscomb II等人^[19]提出的四阶张量近似计算方法:

$$a_{ijkl} \approx a_{ij}a_{kl}. \quad (20)$$

二次封闭模型对稳态流场中纤维一致排列的分布预测比较准确, 但对瞬态流场或式(14)中 $D_r \neq 0$ 的纤维取向预测较差.

(3) 杂合封闭

Advani和Tucker III^[20]提出了将线性封闭与二次封闭加权平均的杂合封闭模型:

$$a_{ijkl} \approx (1-f)a_{ijkl}^{(\text{Linear})} + f a_{ijkl}^{(\text{Quad})}. \quad (21)$$

在三维、二维计算中加权系数分别取 $f=1-27\det(a_{ij})$ 和 $f=1-4\det(a_{ij})$. 杂合模型对随机分布或一致排列的纤维取向预测较准确, 对瞬态剪切流场预测不准确.

此外, Hinch和Leal^[21]提出了复合封闭模型, Cintra Jr.和Tucker III^[22]提出了正交逼近模型, Dupret和Verleye^[23]提出了自然封闭模型, Chung和Kwon^[24]提出了不变量近似模型, 均有各自的适用范围.

2.3 收缩与翘曲变形

收缩分为三类^[25,26]: (1) 材料的各向异性产生的不同方向收缩; (2) 非均匀的压力、温度分布导致的区域收缩; (3) 厚度方向上非均匀冷却产生的收缩. 收缩与 $p-v-T$ 状态方程密切相关, 对于各向异性材料收缩由三部分组成: 平行于流动方向收缩 S^{\parallel} , 垂直于流动方向收缩 S^{\perp} 和厚度方向收缩 S^h , 即

$$S_v = S^{\parallel} + S^{\perp} + S^h. \quad (22)$$

求解最终的收缩和翘曲需要制品的应变, 纤维增

强注塑制品应视为各向异性的复合材料, 求解应变需要材料的有效刚度、热膨胀系数以及热弹性和黏弹性模型.

2.3.1 复合材料的有效刚度张量

应变由弹性应变 ε_{ij} 与热应变 $\varepsilon_{ij}^{(\text{th})}$ 组成:

$$\varepsilon_{ij}^{(\text{Total})} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ij}^{(\text{th})}. \quad (23)$$

按经典弹性力学理论, 应力线性依赖于应变:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl}^{(\text{Total})} - \varepsilon_{kl}^{(\text{th})}), \quad (24)$$

式中, C_{ijkl} 为四阶弹性张量. 对于复合材料, 上式修正为

$$\bar{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{kl}, \quad (25)$$

式中, $\bar{\sigma}_{ij}$ 为平均应力, $\bar{\varepsilon}_{kl}$ 为平均应变, C_{ijkl} 可表示为

$$C_{ijkl} = C_{ijkl}^m + \varphi^f(C_{ijmn}^f - C_{ijnm}^m)A_{mnkl}, \quad (26)$$

式中, 上标 f 和 m 分别代表纤维和基体. C_{ijmn}^f , C_{ijnm}^m 和 φ^f 可根据材料特性确定, 因此, 应变集中张量 A_{mnkl} 决定了刚度张量, 选择不同的 A_{mnkl} 就确定了不同的模型, Tucker III和Liang^[27]系统地评价了已有的模型, 他们认为Mori-Tanaka模型^[28]是最好的复合材料模型, 表示为

$$A_{mnkl} = \left[I_{mnkl} + (1 - \varphi^f)E_{mnrs}(C_{rspq}^m)^{-1} \right. \\ \left. \times (C_{pqkl}^f - C_{pqkl}^m) \right]^{-1}, \quad (27)$$

式中, E_{mnrs} 为Eshelby张量. 对于各向异性材料Eshelby张量可表示为^[29]

$$E_{ijkl} = \frac{1}{8\pi}C_{pqkl}^m \int_{-1}^1 d\bar{\xi}_1 \int_0^{2\pi} [G_{ipjq}(\bar{\xi}) + G_{jpqi}(\bar{\xi})] d\theta. \quad (28)$$

Nguyen等人^[30]将这一理论推广到长纤维注塑成型, 用不同长度的四阶弹性张量 C_{ijkl} 加权平均计算刚度矩阵. 在此基础上, Schulenberg等人^[31]应用Hill横观各向同性屈服准则, 以二阶取向张量的三个特征值为权平均三个主方向张量, 描述长纤维产品塑性行为.

2.3.2 复合材料的有效热膨胀系数

有效热膨胀系数 α_{ij} 和平均应变 $\bar{\varepsilon}_{ij}$ 有如下关系:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = S_{ijkl}\bar{\sigma}_{kl} + \alpha_{ij}\Delta T, \quad (29)$$

式中, S_{ijkl} 为有效弹性柔度, 是四阶弹性张量 C_{ijkl} 的逆.

Rosen 和 Hashin^[32] 提出了膨胀系数的计算方法:

$$\alpha_{ij} = \bar{\alpha}_{ij} + P_{klmn}(S_{mnnj} - \bar{S}_{mnnj})(\alpha_{kl}^f - \alpha_{kl}^m), \quad (30)$$

其中上划线(-)代表体平均, 按如下公式计算:

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{ij} &= \varphi^f \alpha_{ij}^f + (1 - \varphi^f) \alpha_{ij}^m, \\ \bar{S}_{mnnj} &= \varphi^f S_{mnnj}^f + (1 - \varphi^f) S_{mnnj}^m. \end{aligned} \quad (31)$$

张量 P_{klmn} 由下式确定:

$$P_{klmn}(S_{mnnr} - \bar{S}_{mnnr}) = I_{klrs}. \quad (32)$$

2.3.3 热弹性和黏弹性模型

热弹性模型是由 Struik^[33] 提出的, 假定热弹性参数不依赖于固化温度, 应力只在低于固化温度时存在, 高于固化温度时应力为零, 即

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} 0, & T \geq T_s, \\ C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \alpha_{kl}\Delta T), & T < T_s, \end{cases} \quad (33)$$

若使用线性黏弹性本构模型, 则应力可以表示为

$$\sigma_{ij} = \int_0^t C_{ijkl}(\xi(t) - \xi(t')) \left(\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial t'} - \alpha_{kl} \frac{\partial T}{\partial t'} \right) dt', \quad (34)$$

式中, $\xi(t) = \int_0^t \frac{dt'}{a_T}$, a_T 为时-温等效因子. 对于各向同性材料四阶刚度张量表示为

$$C_{ijkl}(t) = \frac{2\nu G(t)}{1-2\nu} \delta_{ij} \delta_{kl} + G(t)(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (35)$$

$G(t)$ 可以写成离散形式:

$$G(t) = \sum_{i=1}^N G_i \exp(-t/\lambda_i). \quad (36)$$

2.4 塑件-模具一体化分析

一般塑料成型分析假定充填过程中模具型腔表面温度保持不变, 为一个常数, 但在塑料加工过程中, 受冷却水路分布不均匀、镀铜镶件等因素影响型腔温度是不同的, 这些温度差异影响后续的塑料流动速度和流动形态. 为了提高成型模拟精度, 申长雨团队^[34] 提出了塑件-模具一体化模拟方法, 即在界面上根据热量

平衡原理设置热交换条件, 分别对塑件和模具进行传热计算, 再根据边界条件确定模具型腔温度. 图3显示了该方法模拟的模具型腔、内部、外边界及塑件的温度场分布.

一体化分析可以确定热源、冷却管道位置及分布、多材料体系对充填过程的影响, 对塑料成型过程进行全周期的非稳态传热分析, 精确预测模具型腔温度变化, 建立精准控制产品质量的理论方法. 此外, 一体化分析还可以进一步预测模具的变形, 进而预测热效应对产品尺寸精度的影响.

2.5 多尺度模拟方法

塑料作为一种高分子聚合物, 具有典型的多尺度结构, 在宏观尺度上为连续介质, 介观尺度上具有结晶结构, 而在微观尺度上呈现为大量的高分子链相互缠结形成的复杂结构. 塑料在注塑成型加工过程中经历了复杂的热力历史, 形成了最终制品在不同尺度下的结构, 这些结构共同决定了最终制品的性能. 要得到最终制品在不同尺度下的结构, 就需要在不同的尺度下采用不同的模拟方法, 通过一定的耦合技术, 建立起多尺度模拟方法, 计算得到不同尺度下的结构信息.

2.5.1 微介观分子模拟方法

多尺度模拟方法中, 既需要宏观尺度下基于连续介质力学的理论模型, 也需要微观、介观尺度下基于高分子链结构的理论模型. 一类是基于全原子分子动力学及其粗粒度方法^[35-37], 以小到单个原子或联合原

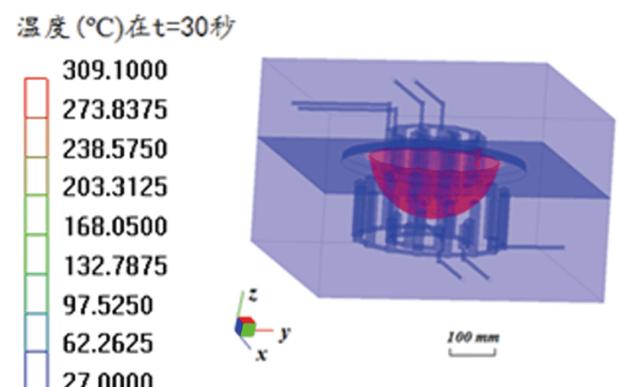


图 3 (网络版彩图)塑件-模具一体化分析模拟的温度场

Figure 3 (Color online) The simulated temperature distributions by the integral part-mold analysis.

子, 多到数个聚合物单体作为一个单元, 根据实际的链结构和原子间作用力以及粗粒化方法, 构造单元间的作用力, 包括同一高分子链内单元间的连接和不同高分子链单元间的相互作用, 建立微观分子链构象模型, 以经典牛顿力学建立控制方程, 得到微观分子构象在流场作用下的变化, 再通过统计力学得到应力、链取向、链缠结等微观结构信息。另一类是基于高分子链的蛇行蠕动方法。1971年, de Gennes^[38]提出了描述高分子链运动的蛇行模型, 即高分子链在周围分子链拓扑限制下的运动像蛇一样爬行。Doi 和 Edwards^[39-44]在此基础上提出了管道模型, 即将其他高分子链的拓扑限制描述成管道, 管道沿着自身的中心线运动, 由此发展为高分子浓溶液和熔体领域最为经典的微观模型。在经典管道模型的基础上, 许多学者对管道模型进行了改进, Masubuchi^[45]系统评价了各种模型, 认为目前比较完善的用于描述单分散线型高分子的管道模型为GLaMM模型^[46]。此外, 基于管道理论还发展了很多其他的理论模型, Kremer 和 Grest^[47]基于多链珠簧模型建立了分子链间缠结作用的粗粒度分子动力学描述方法; Masubuchi 等人^[48]使用多链滑移构造了原始链网络模型, 用于描述管道中轴线的蛇形运动; Schieber 等人^[49]建立了单链滑移链模型, 描述高分子链的蛇形运动, 且计算量远小于相应的管道模型。

2.5.2 不同尺度的耦合方法

按不同尺度的耦合方法可以将聚合物流动的多尺度模拟分为局部应力耦合、物性参数耦合、含微结构参数本构耦合三种方法。局部应力耦合是最简单直接的方法, 即将宏观流动模拟得到的某一时刻某一节点处的速度、压力等条件作为该处一个微介观模拟胞元的边界条件, 进行微介观模拟后通过统计力学得到该胞元的平均应力, 即局部应力, 作为该节点此时刻的宏观应力, 然后以同样的方法进行下一时间步的计算, 如此循环计算宏观应力。该方法相当于用微介观模拟代替了宏观本构方程, 与构造取向方程计算应力相比, 可以更充分地表现高分子链微介观结构特性对流场的贡献。De 等人^[50]使用FENE珠簧模型模拟了一维振荡剪切流动的历史依赖效应。Yasuda 等人^[51-53]使用Kremer-Grest珠簧模型作为微介观模拟方法、有限体积法作为宏观模拟方法, 并考虑温度变化, 研究了聚合物润滑油在平板之间剪切流动的应力响应以及黏性热问

题。Murashima 等人^[54-56]使用滑移链模型作为微介观模拟方法、光滑粒子动力学(SPH)作为宏观模拟方法, 模拟了二维绕柱流动, 并得到了圆柱障碍对于微结构参数如链长、取向程度、缠结点数目等微观统计量的影响。Feng 等人^[57]使用离散滑移链模型作为微介观模拟方法、SPH作为宏观模拟方法, 模拟了二维圆柱绕流和轴承润滑液流动, 和UCM黏弹性本构模拟结果一致。张小华等人^[58]使用珠簧哑铃模型作为微介观模拟方法, 使用径向基函数插值的无网格法作为宏观的模拟方法, 模拟了突然启动Couette流以及方腔驱动流。Guo 等人^[59]使用布朗构型场方法作为微介观模拟方法, 开源软件OpenFOAM作为宏观模拟工具, 模拟了两相黏弹性流动。

物性参数耦合即通过微观模拟得到宏观本构方程的参数(如黏度), 然后用该参数进行宏观数值模拟。Masubuchi 等人^[60]通过物性参数耦合模拟并比较了不同分子量的塑料注塑成型后的残余应力与翘曲变形。娄燕等人^[61]通过在Cross黏度模型中引入修正系数来考虑链段长度对黏度的影响, 成功地应用于微注塑成型。在宏观本构方程中引入能表征微观结构特性的参数, 模拟结果可用于分析聚合物的微介观结构特性。任金莲等人^[62]使用SPH和FENE-P流变本构, 模拟了非等温非牛顿流体的充模过程, 并使用流变本构自带的微结构参数描述了成型过程中分子取向变化及与熔接痕的关系。

3 聚合物材料特征

由长链高分子组成的聚合物有很多独特的性质, 如剪切变稀、结晶等, 准确用数学公式表征这些材料特征是数值模拟的关键。因此需要建立描述材料特征的物质函数, 包括本构方程、状态方程及结晶动力学方程。随着各种实验仪器精度的提高, 物质函数也越来越准确。

3.1 本构方程

本构方程描述了材料的应力-应变关系, 根据应力响应是否满足线性关系可将塑料熔体分为牛顿流体与非牛顿流体, 根据响应的延迟特性分为黏性流体和黏弹性流体, 大多数塑料熔体属于非牛顿流体, 商业软件及很多学者采用黏性模型描述塑料熔体流变行为。

3.1.1 黏性本构模型

常用的黏性模型有Power-law, Carreau及Cross模型等。Ostwald和de Waele发现高分子熔体剪切应力与剪切速率的非线性依赖关系，并提出了能够反映剪切变稀的幂率模型^[63]:

$$\eta = m\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (37)$$

式中， m 为材料常数， n 为牛顿指数，代表非线性水平。幂律模型也常称为指数模型(power-law)，因其形式简单和材料参数少而被大量应用，但当剪切速率逼近0时，黏度趋向于无穷大，不能正确表征低剪切黏度。于是Bird等人^[63]于1987提出了Carreau模型:

$$\frac{\eta - \eta_\infty}{\eta_0 - \eta_\infty} = (1 + (\lambda\dot{\gamma})^2)^{\frac{n-1}{2}}. \quad (38)$$

Carreau模型可以正确描述低剪切、高剪切下的黏度，而且与实验结果比较吻合。零剪切黏度依赖分子量 M_w , $\eta_0 \propto M_w^{3/4}$ 。

Cross^[64]提出了著名的Cross模型，它既能描述低剪切下牛顿流体特征又能描述高剪切下剪切变稀现象:

$$\eta(\dot{\gamma}, T, p) = \frac{\eta_0(T, p)}{1 + \left\{ \frac{\eta_0(T, p)}{\tau^*} \dot{\gamma} \right\}^{1-n}}, \quad (39)$$

其中， τ^* 表征了牛顿区向非牛顿区过渡的应力水平。Hieber和Chiang^[65]开展了Carreau模型与Cross模型的实验评价，发现Cross模型能更好地表征黏度对剪切速率的依赖性。为了描述黏度对温度的依赖关系，用WLF方程^[66]计算黏度随温度的变化，Cross模型变为Cross-WLF模型。

3.1.2 黏弹性本构模型

大部分塑料熔体兼具黏性和弹性特征，但很多时候弹性不显著，只考虑黏性贡献，但分子取向、折射率等与材料弹性密切相关，所以要预测复杂的物理现象及性能需要使用黏弹性本构模型，其中，线性模型是最基本的黏弹性本构模型:

$$\tau_{ij}(t) = \int_{-\infty}^t G(t-t')D_{ij}(t')dt'. \quad (40)$$

它描述了应力 τ 不仅与当前应变相关，还与历史相关。对于多模态的Maxwell模型，模量 $G(t)$ 可以表示为多松

弛时间谱 λ_i 的叠加:

$$G(t) = \sum_{i=1}^N G_i \exp(-t/\lambda_i). \quad (41)$$

其等价的微分形式:

$$\tau_i + \lambda_i \frac{\partial \tau_i}{\partial t} = \eta_i \mathbf{D}, \quad (42)$$

式中， $\eta_i = \lambda_i G_i$ 。若将式(42)中的偏导数换成上随体导数:

$$\nabla \tau = \frac{\partial \tau}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \tau - \nabla \mathbf{v} \cdot \tau - \tau \cdot (\nabla \mathbf{v})^T. \quad (43)$$

则Maxwell模型变为UCM(upper-convected Maxwell)模型。

Phan-Thien和Tanner^[67]于1977年提出了PTT模型:

$$\left[1 + \frac{\lambda c}{\eta} \text{tr}(\tau) \right] \tau + \lambda \nabla \tau = 2\eta \mathbf{D}. \quad (44)$$

由于 $\left[1 + \frac{\lambda c}{\eta} \text{tr}(\tau) \right]$ 关于应力是线性的，所以，该模型也称为线性PTT模型。随后该模型发展为指数型PTT模型^[68]:

$$\lambda \nabla \tau + \exp\left(\frac{\lambda c}{\eta} \text{tr}(\tau)\right) \tau + \lambda \zeta (2\mathbf{D} \cdot \tau + \tau \cdot 2\mathbf{D}) = 2\eta \mathbf{D}. \quad (45)$$

对于支链聚合物Verbeeten等人^[69]提出了XPP(eXtended Pom-Pom)模型:

$$\nabla \tau + \frac{1}{\lambda_b} \left[\frac{\alpha}{G} \tau \cdot \tau + F(\tau) \tau + G(F(\tau) - 1) \mathbf{I} \right] = 2G \mathbf{D}, \quad (46)$$

式中,

$$F(\tau) = 2r e^{\nu(\Lambda-1)} \left(1 - \frac{1}{\Lambda} \right) + \frac{1}{\Lambda^2} \left[1 - \frac{\alpha \text{Tr}(\tau \cdot \tau)}{3G^2} \right], \quad (47)$$

$$\Lambda = \sqrt{1 + \frac{\text{Tr}(\tau)}{3G}}, \quad r = \frac{\lambda_b}{\lambda_s}, \quad \nu = \frac{2}{q}, \quad \lambda_b = \lambda. \quad (48)$$

Tanner和Nasseri^[70]将PTT模型与XPP结合形成PTT-XPP模型:

$$\nabla \tau + \mathbf{f}_c(\tau, \mathbf{D}) + \frac{1}{\lambda_b} \mathbf{f}_d(\tau, \mathbf{D}) = 2G \mathbf{D}, \quad (49)$$

式中,

$$\mathbf{f}_c(\tau, \mathbf{D}) = \zeta (\mathbf{D} \cdot \tau + \tau \cdot \mathbf{D}^+),$$

$$\mathbf{f}_d(\tau, \mathbf{D}) = F_1 \tau + \frac{G}{1-\zeta} (F_1 - e^{\nu(\Lambda-1)}) \mathbf{I},$$

其中,

$$F = e^{v(\Lambda-1)}[2r(1-(1/\Lambda))+1/\Lambda^2],$$

$$r = \lambda_b / \lambda_s,$$

$$\Lambda = \sqrt{1+((1-\xi)/3G)\text{tr}(\tau)},$$

$$v = 2/q.$$

黏弹性本构模型很多, 如常用的Giesekus和Leonov等模型^[71], 但适用于高黏性聚合物熔体且应用较多主要有UCM, PTT, XPP, Giesekus等模型。Pivokonsky等人^[72]比较了XPP, PTT-XPP, mLeonov等模型在表征熔体黏度上的差异, 首先, 这三种模型均能描述剪切变稀和支链聚合物mLLDPE的拉伸变硬现象(strain harden); 其次, $\xi=0$ 时PTT-XPP模型预测的剪切黏度大于实验值, 只有PTT-XPP模型中参数 ξ 非零时才能更好表征剪切行为(0.7对应于支链聚合物mLLDPE, 0.2对应于线性聚合物HDPE); XPP模型预测支链聚合物mLLDPE的拉伸黏度的准确度优于XPP-PTT模型, 但不能较好地表征线性聚合物HDPE的黏度, 如图4所示。

3.1.3 纤维复合材料本构模型

在纤维复合材料体系中, 应力由熔体应力和纤维取向应力构成:

$$\tau = \tau^{(p)} + \tau^{(f)}. \quad (50)$$

纤维取向应力有多种描述方法, 形成了不同的本构

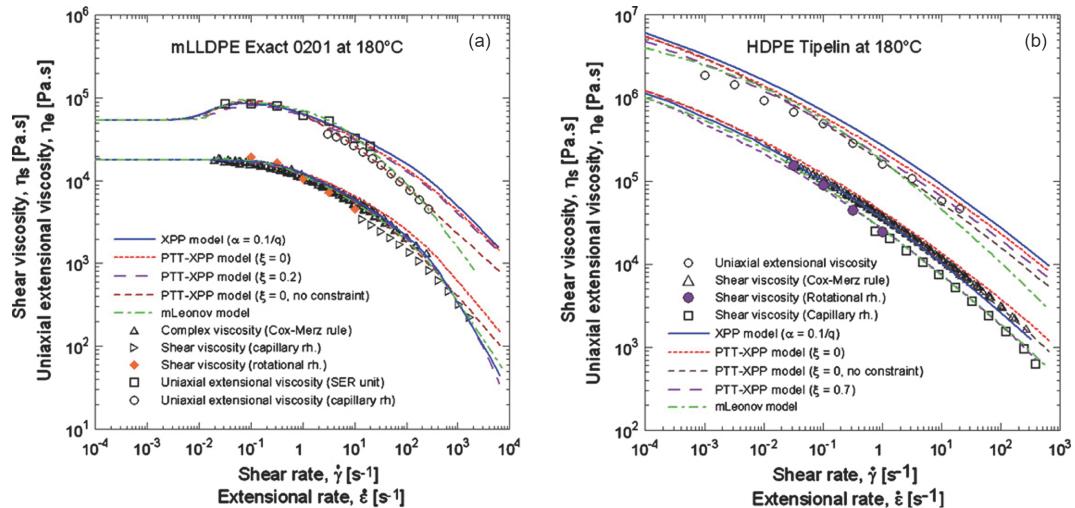


图 4 (网络版彩图)XPP, PTT-XPP, mLeonov模型预测的剪切黏度和拉伸黏度比较. (a) 支链聚合物mLLDPE Exact 0201; (b) 线性聚合物HDPE Tipelin FS 450-26

Figure 4 (Color online) The predicted shear and extensional viscosities by XPP, PTT-XPP and mLeonov models. (a) Branched polymer mLLDPE Exact 0201; (b) linear polymer HDPE Tipelin FS 450-26.

模型.

(1) 纤维横切各向同性(transversely isotropic fluid, TIF)模型

Erickson^[73]提出了横切各向同性模型描述纤维取向应力:

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^{(f)} = & 2\eta_s\varphi \left[A_1 D_{kl} a_{ijkl} + A_2 (D_{ik} a_{kj} + a_{ik} D_{kj} \right. \\ & \left. + A_3 D_{ij} + A_4 D_{ji}) a_{ij} \right], \end{aligned} \quad (51)$$

式中, η_s 为稀溶液黏度, φ 为纤维体积分数, D_r 为旋转扩散常数, A_1 ~ A_4 为材料常数. 横切各向同性模型仅适用于稀溶液纤维悬浮体系.

(2) Dinh-Armstrong模型

当纤维长径比无限大时, Dinh和Armstrong^[74]提出了齐次流场中纤维应力的计算模型:

$$\tau_{ij}^{(f)} = \eta_s\varphi \frac{\pi l^3 n^3}{6\ln(2H_f/d)} L_{kl} a_{ijkl}, \quad (52)$$

式中, n 为单位体积纤维的数量, H_f 为相邻纤维之间的距离. 该模型适用于半集中(semi-concentrated)纤维悬浮体系.

(3) Phan-Thien-Graham模型

Phan-Thien和Graham^[75]提出的另一种修正TIF模型:

$$\tau_{ij}^{(f)} = 2\eta_s f(\varphi, a_r) D_{kl} a_{ijkl}, \quad (53)$$

式中,

$$f(\varphi, a_r) = \frac{\varphi a_r^2 (2 - \varphi / \varphi_m)}{4(\ln 2 a_r - 1.5)(1 - \varphi / \varphi_m)},$$

φ_m 是最大压实体积, 可以近似表示为 $\varphi_m=0.53-0.013a_r$ ($5 < a_r < 30$). 图5是用该模型计算的不同长径比下的缩减黏度, 结果表明缩减黏度随着长径比的增大而增大.

3.2 状态方程($p-v-T$ 关系)

对于热塑性塑料, 其比体积 v 是压力和温度的函数, 即 $v=v(p,T)$, 可以用状态方程描述^[76-78]:

$$v(T,p) \equiv \frac{1}{\rho} = v_0(T) \left[1 - C \ln \left(1 + \frac{p}{B(T)} \right) \right] + v_t(T,p), \quad (54)$$

式中, C 是材料常数, 一般取 $C=0.0894$, $v_0(T)$ 和 $B(T)$ 分别表示为

$$v_0(T) = \begin{cases} b_{1,l} + b_{2,l}(T - b_5), & \text{if } T > T_t, \\ b_{1,s} + b_{2,s}(T - b_5), & \text{if } T \leq T_t, \end{cases} \quad (55)$$

$$B(T) = \begin{cases} b_{3,l} \exp(-b_{4,l}(T - b_5)), & \text{if } T > T_t, \\ b_{3,s} \exp(-b_{4,s}(T - b_5)), & \text{if } T \leq T_t. \end{cases} \quad (56)$$

对于无定型材料, $v_t(T,p)=0$; 对于半结晶型材料:

$$v_t(T,p) = \begin{cases} b_7 \exp(b_8(T - b_5) - b_9 p), & T \leq T_t, \\ 0, & T > T_t. \end{cases} \quad (57)$$

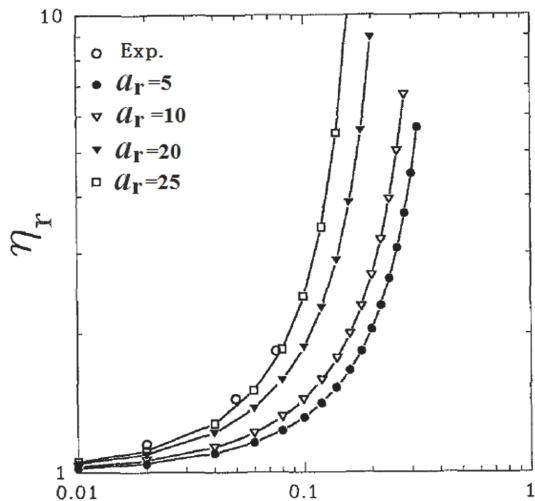


图 5 用修正TIF模型计算的不同纤维长径比对应的缩减黏度^[75]

Figure 5 The calculated reduced viscosities for various fiber aspect ratios by the modified TIF model [75].

T_t 表示玻璃化转变温度(无定型材料)或熔化温度(半结晶型材料), T_t 与压力相关:

$$T_t(p) = b_5 + b_6 p, \quad (58)$$

$b_{i,l}$, $b_{i,s}$ ($i=1, \dots, 4$), b_k ($k=5, \dots, 9$)为材料常数.

对状态方程(54)分别关于压力 p 和温度 T 求偏导可得等温压缩率 κ 和体积膨胀系数 α_v :

$$\kappa = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right) = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right), \quad (59)$$

$$\alpha_v = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right). \quad (60)$$

3.3 结晶动力学

大多数工程塑料是半结晶型材料, 结晶分为成核和生长两个过程. 注塑成型制品中的结晶一般有静态生长的球晶和流动诱导的shish-kebab晶. 注塑制品的性能依赖于流动诱导结晶的结晶度、形态、取向等结构, 这些结构影响熔体的流变性能、 $p-v-T$ 关系和热传导率, 并最终影响制品的各向异性行为.

3.3.1 结晶度模型

Eder和Janeschitz-Kriegel^[79]认为晶体体积由晶核和晶边两部分组成, 晶核体积 $v_1(s,t) = \frac{4\pi}{3} \left[\int_s^t G(u) du \right]^3$ ($G(u)$ 代表晶核半径生长速度), 晶边体积 $v_2(s,t) = \pi I_s^t \left[\int_s^t G(u) du \right]^2$ (I_s 代表shish结构的长度), 因此, t 时刻晶体的体积为两项之和:

$$\varphi(t) = \int_0^t \dot{N}_q(s) v_1(s,t) ds + \int_0^t \dot{N}_f(s) [\omega v_1(s,t) + (1 - \omega) v_2(s,t)] ds, \quad (61)$$

式中, \dot{N}_q 和 \dot{N}_f 分别表示静态晶核数量密度和流动诱导晶核数量密度, ω 为权函数, 郑荣等人^[7]给出了权函数的计算公式:

$$\omega = \begin{cases} 0, & \text{若 } \dot{\gamma} > 1 / \lambda_R, \text{ 并且 } \int_0^t \eta \dot{\gamma}^2 dt / w_c, \\ 1, & \text{其他,} \end{cases} \quad (62)$$

式中, λ_R 为最长的Rouse时间, w_c 为临界比功. van Meer-

veld等人^[80]认为存在最小剪切速率 $\dot{\gamma} \sim 1/\lambda_R$, 低于该剪切速率, 不能形成shish-kebab结构晶体. Janeschitz-Kriegl等人^[81]认为由于剪切做功才导致了这种现象, 随后, Mykhaylyk等人^[82]用实验验证了这种理论.

Kolmogoroff^[83]和Avrami^[84]提出了相对结晶度 α 的计算公式:

$$\alpha = 1 - e^{-\varphi(t)}. \quad (63)$$

3.3.2 晶体生长模型

Lauritzen Jr. 和 Hoffman^[85]提出了球晶半径生长速度 G 的 Hoffman-Lauritzen 模型:

$$G(T) = G_0 \exp \left[-\frac{U^*}{R_g(T-T_\infty)} \right] \exp \left[-\frac{K_g(T+T_m^0)}{2T^2 \Delta T} \right], \quad (64)$$

式中, U^* 为活化能, 一般取 $U^*=6270 \text{ J/mol}$, R_g 是气体常数, K_g 为成核参数, T_∞ 表示结晶温度, $T_\infty=T_g-30$ (T_g 为玻璃化转变温度), T_m^0 表示平衡态温度. Fulchiron 等人^[86]认为, 平衡态温度与压力之间存在如下关系:

$$T_m^0(p) = T_m^0(0) + a_1 p + a_2 p^2, \quad (65)$$

式中, a_1 和 a_2 为常数, 可以用 $p-v-T$ 曲线确定.

Shish-kebab 结构是由侧向 kebab 晶和中间 shish 晶组成, kebab 晶可以按球晶生长模型计算, 而 shish 晶生长率一般用 Liedauer 方法^[87]计算:

$$L_{\text{tot}} = \int_0^t \dot{N}_f(s) l_s(t-s) ds, \quad (64a)$$

式中, $l_s(t) = g_l(\lambda_R \dot{\gamma})^2 t$.

3.3.3 晶核密度模型

对于等温瞬时成核的聚合物, 其静态晶核密度的 Avrami 方程变为

$$\alpha = 1 - \exp \left(-\frac{4\pi}{3} N_0 G^3 t^3 \right), \quad (66)$$

式中, N_0 为常数, 可用 $N_0 = 3 \ln 2 / (4\pi G^3 t_{1/2}^3)$ ($t_{1/2}$ 为半结晶时间, 可用示差扫描量热仪(DSC)实验数据确定)计算或公式 $\ln N_0 = a_n \Delta T + b_n$ 拟合.

对于等温结晶过程中晶核密度随时间线性增长的聚合物, 其晶核密度的 Avrami 方程为

$$\alpha = 1 - \exp \left(-\frac{\pi}{3} N_q G^3 t^3 \right). \quad (67)$$

流动诱导结晶的晶体数量增长率可用 Janeschitz-Kriegl 模型^[79]计算:

$$\dot{N}_f + \frac{1}{\lambda_N} N_f = f, \quad (68)$$

式中, f 是密度增长的驱动力, 与温度、剪切速率、第一法向应力差、自由能变化等密切相关, 很多学者提出了不同的计算模型. Eder 和 Janeschitz-Kriegl^[79]认为 f 是剪切速率的函数:

$$f = g_N(T) \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_c} \right)^2. \quad (69)$$

该公式是依据流体力学建立的, 没有考虑高分子的力学变化历程, 因此, Zuidema 等人^[88,89]用可回复偏应变张量的第二不变量代替剪切速率, Koscher 和 Fulchiron^[90]用第一法向应力差作为驱动力 f . Coppola 等人^[91]提出了以流动诱导的自由能变化作为驱动力, 建立了晶体密度增长模型:

$$\begin{aligned} \dot{N} &= C_0 k_B T (\Delta F_q + \Delta F_f) \exp \left(-\frac{E_a}{k_B T} \right) \\ &\times \exp \left(-\frac{K_n}{T (\Delta F_q + \Delta F_f)^n} \right). \end{aligned} \quad (70)$$

Zheng 和 Kennedy^[92]随后在该公式中加入了潜热的贡献, Tanner 和 Qi^[93]以 FENE-P 本构模型为基础提出了低剪切速率和高剪切速率下的流动诱导自由能的计算公式. Tanner^[94,95]还提出了计算流动诱导结晶驱动力 f 的简化公式:

$$f = A |\dot{\gamma}|^p \gamma. \quad (71)$$

3.3.4 结晶对流变性能的影响

聚合物结晶对材料的本构关系产生影响, 描述结晶对应力的贡献是极富挑战的工作. Doufas 等人^[96,97]将应力分为无定形应力与半结晶应力之和, 其中无定形应力用 Giesekus 模型计算, 但松弛时间需用相对结晶度 α 加入修正:

$$\lambda(\alpha, T) = \lambda(0, T)(1 - \alpha)^2. \quad (72)$$

而半结晶应力用刚性双珠模型计算. 这种分解方法可以预测封存(locking-in)应力及晶体取向. Tanner 和 Qi^[93]提出了黏度修正公式:

$$\frac{\eta}{\eta_a} = \left(1 - \frac{\alpha}{A}\right)^{-2}, \quad \alpha < A, \quad (73)$$

式中, η_a 是熔体无定形状态下的黏度, A 是依赖于晶体几何形状的常数, 一般取值在0.4~0.68之间. Zheng和Kennedy^[92]提出了类似的黏度模型. Pantani等人^[98]提出另一种黏度模型:

$$\frac{\eta}{\eta_a} = 1 + \beta \exp\left(-\frac{\beta_1}{\alpha \beta_2}\right). \quad (74)$$

计算的黏度随结晶度的变化如图6所示, 当结晶度从0增加到15%时, 黏度从1增加到100, 比结晶度增长速度快快1个量级. 此外, Zuidema等人^[89]和Hieber^[99]提出了更简单的黏度模型 $\eta / \eta_a = \exp(\beta \alpha^{\beta_1})$.

3.3.5 结晶对 $p-v-T$ 的影响

在常压力作用下, 熔体结晶后体积由质量守恒定律确定为

$$\frac{1}{v} = \frac{1 - \alpha \chi_\infty}{v_a} + \frac{\alpha \chi_\infty}{v_c}, \quad (75)$$

式中, v_a 和 v_c 分别代表无定型态和结晶态的比体积, χ_∞ 为最大的实际结晶度. 在固体状态下(亦即结晶度达到 χ_∞)相对结晶度变为1, 方程(75)简化为

$$\frac{1}{v_s} = \frac{1 - \chi_\infty}{v_a} + \frac{\chi_\infty}{v_c}. \quad (76)$$

从以上两个方程消除 v_c 后得

$$\frac{1}{v} = \frac{1 - \alpha}{v_a} + \frac{\alpha}{v_s}. \quad (77)$$

这样就可以用无定形态比体积与固态比体积加权平均得到结晶态的比体积. 将上述比体积公式与状态方程结

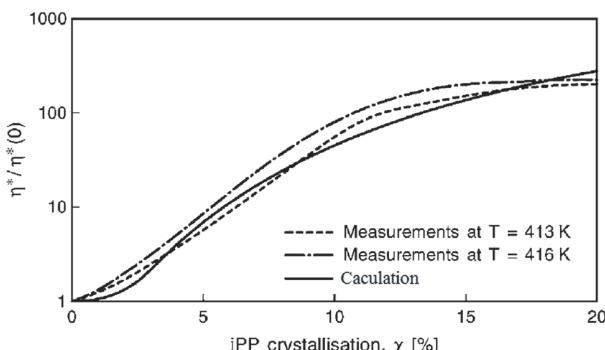


图 6 模拟的黏度与实验值对比

Figure 6 The comparison between simulated and experimental viscosities.

合可计算结晶过程中任意时刻的温度、压力与体积.

3.3.6 结晶对热传导的影响

按经典的Fourier传热理论, 热传导在各个方向上是相同的, 热传导率为常数. 然而, van den Brule等人^[100~102]认为高分子主链方向比其他方向更容易传热, 因此, 流动诱导的分子取向导致了各向异性热传导率. Huilgol等人^[103]提出了各向异性传热的计算公式:

$$q_i = k_{ij} \frac{\partial T}{x_j}. \quad (78)$$

van den Brule^[101]建立了传导率张量与应力张量之间的联系:

$$k_{ij} - \frac{1}{3} k_{kk} \delta_{ij} = C_t k_0 \left(\sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij} \right). \quad (79)$$

直接测量流动诱导热传率是比较困难的, 但Venerus等人^[104]和Schieber等人^[105]仍对无定形聚合物开展了传热实验, 验证了van den Brule公式, 并且发现应力-热系数与熔体平台区模量之积接近一个常数, 即 $C_t G_N \approx 0.03$.

对于半结晶型聚合物Dai和Tanner^[106]认为只要提高应力-热系数van den Brule公式仍然可以使用, Zheng等人^[107,108]用相对结晶度 α 进一步修正了公式中的平衡态热传导系数:

$$k_0 \left(\frac{1}{k_0(\alpha, T)} = \frac{\alpha}{k_0^{(s)}(T)} + \frac{1-\alpha}{k_0^{(a)}(T)} \right).$$

4 数值计算方法

随着计算机技术的发展, 数值计算方法取得了长足的进步, 传统的有限元、有限差分、有限体积、边界元方法日臻完善, 工程应用日益广泛, 无网格法、多尺度模拟等新方法也取得了显著进展, 并应用于一些实际工程模拟. 在塑料成型模拟中有限元、有限体积等传统方法仍然是主要的分析工具.

4.1 中面流动分析有限元方法

中面流动问题主要是求解关于压力场的拟Laplace方程. 对方程(5)分部积分可得压力场的变分方程:

$$\iint_{\Omega} S \nabla p \cdot \nabla q d\Omega = \dot{Q}. \quad (80)$$

用有限元离散该变分方程得压力场的代数方程:

$$[\mathbf{K}] \cdot \{\mathbf{p}\} = \{\mathbf{q}\}. \quad (81)$$

刚度矩阵 $[\mathbf{K}]$ 包含黏度 η , 而 η 随剪切速率、温度、压力变化, 因此方程(81)是非线性方程。求出压力 p 后, 代入方程(2a)和(3a)求出速度, 然后用黏度模型计算新的黏度值并更新刚度矩阵 $[\mathbf{K}]$, 重新求解方程(81)。如此循环, 直到压力场、速度场都收敛。由于方程(5)是拟Laplace方程, 离散后的代数方程(81)具有对称、对角占优的特点, 因此, 数值求解稳定性好, 收敛速度快, 避免了整体求解需要反复计算、存储Jacobi逆矩阵的不足, 节略了计算资源, 提高了计算效率。

上述过程是在给定温度下求解Navier-Stokes方程, 但实际成型过程中塑料熔体不断向模具传热, 并伴有剪切生热, 熔体的温度在不断变化。因此, 需要解热传导方程(4)以确定流动过程中的温度变化。

应用有限差分求解热传导方程。先用隐式方法离散对流项 $\frac{\partial T}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right)$, 再用“上风”格式(即只计入“流入”

单元贡献)离散对流项 $u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y}$, 并移至右端项。这样, 离散的代数方程同样具有对称、对角占优特征, 数值求解收敛性好, 稳定性高。

用求解的温度场与之前的温度场进行平均, 再用平均后的温度场更新黏度, 重新求解Navier-Stokes方程。如此循环, 直到所有流场均收敛。数值方法涉及两重循环: (1) 内循环, 求解Navier-Stokes方程; (2) 外循环, 温度场求解与黏度计算, 由于两重循环均是以对称、对角占优代数方程为基础, 数值求解具有很好的收敛性与稳定性, 因此被大多数学者及商业软件采用^[2,3,7~9,106~108]。

4.2 三维流动有限元方法

基于三维流动控制方程(6)和(7)可推导出对应的变分方程:

$$\iiint_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} q d\Omega = 0, \quad (82)$$

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega} \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \iiint_{\Omega} \eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) : \nabla \mathbf{v} d\Omega \\ & - \iiint_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega \\ & = \iiint_{\Omega} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + 2 \iint_{\partial\Omega} \eta \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} \cdot \mathbf{v} dS. \end{aligned} \quad (83)$$

有限元方法离散变分方程(82)和(83)可得关于向

量 \mathbf{u} 和标量 p 的代数方程, 求解代数方程得到速度场和压力场。值得注意的是, \mathbf{u} 的插值精度一般要比 p 高一阶, 以满足Brezzi-Babuska条件, 保证数值方法的收敛性与稳定性。此外, 在中面方法中, 可以从动量方程直接导出速度的形式解, 进而得到关于压力场 p 的拟Laplace方程, 但三维方法无法实现, 于是Cao等人^[109]提出基于变分形式的动量方程(83)导出单元内速度场的形式表达式:

$$a_P^u \mathbf{u}_P + \sum_{N \neq P} a_N^u \mathbf{u}_N = \mathbf{b}_P^u - \sum_E c_E (\nabla p)_E. \quad (84)$$

再代入连续方程的变分方程(82), 整理得

$$\iiint_{\Omega_t} \rho c' \nabla p \cdot \nabla q d\Omega = \iiint_{\Omega_t} \rho \mathbf{b}_P^u \cdot \nabla q d\Omega. \quad (85)$$

方程(85)是压力场 p 的拟Poisson方程的弱形式, 离散后同样具有对称、对角占优特性, 很好地解决了收敛性与稳定性问题。

对能量方程乘检验函数并分部积分得变分方程:

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega} \rho C_p \frac{dT}{dt} q d\Omega - \iiint_{\Omega} k \nabla T \cdot \nabla q d\Omega \\ & = - \iint_{\partial\Omega} k \frac{\partial T}{\partial n} ds + \iiint_{\Omega} \eta \dot{\gamma}^2 q d\Omega. \end{aligned} \quad (86)$$

用有限元离散求解该变分方程即可求出温度场。与中面方法类似, 温度场与黏度是耦合关系, 需要迭代求出最终的流场。

三维流场也有其他解法, 如耿铁等人^[110]基于有限元理论提出了全三维温度场的计算模型与数值方法, 周华民等人^[111]结合流线上风法(streamline-upwind/petrov-Galerkin, SUPG)和压力稳定法(pressure-stabilizing/petrov-Galerkin, PSPG)求解三维流动问题, 降低速度场的插值阶数, 避免了不稳定的振荡解。

除传统的有限元方法外, 赵朋等人^[112]采用改进的有限体积法对聚合物剪切诱导结晶行为进行了三维数值模拟, 花少震等^[113,114]用有限体积法模拟了三维喷射现象, 如图7所示。

4.3 黏弹性流动模拟方法

黏弹性流动问题复杂, 数值求解方法比较困难, 研究人员根据问题的特征提出了很多数值算法, 黏弹性求解方法一直在发展完善过程中。

以UCM模型求解为例, Brooks和Hughes^[115]提出

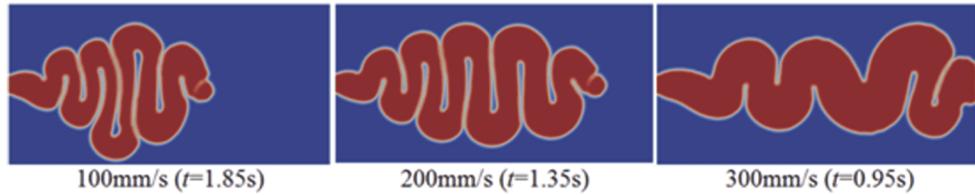
图 7 (网络版彩图)模拟不同注射速度下的喷射及蛇形流^[113]

Figure 7 (Color online) The simulated jetting and reptile flow for different injection speeds [113].

了流线上风法/伽辽金方法SUPG:

$$\left(\mathbf{S} + \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{S}, \lambda \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} - 2\eta \mathbf{D} \right) = 0, \quad (87)$$

其中, 上风项 $\alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{S}$ 中的 α 一般取为 $\alpha=h/U$ (h 和 U 分别为单元的特征长度和特征速度).

在应力变化剧烈的边界层或应力奇点附近, SUPG方法计算的应力出现振荡现象, 为了克服这个缺点, Marchal和Crochet^[116]提出了流线上风方法(streamline upwind, SU), 即将上风项直接与应力对流项作内积:

$$\left(\mathbf{S}, \lambda \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} - 2\eta \mathbf{D} \right) + (\alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{S}, \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}) = 0. \quad (88)$$

尽管SU方法对大Weissenberg数的黏弹性问题都具有好的收敛性, 但Crochet和Legat^[117]发现SU方法对基准问题只有一阶精度, 为此, Fortin和Fortin^[118]对其进行了改进得到

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{S}, \lambda \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} - 2\eta \mathbf{D} \right) \\ & - \sum_{e=1}^N \int_{\Gamma_e^{in}} \mathbf{S} : \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} (\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}^{ext}) d\Gamma = 0, \end{aligned} \quad (89)$$

式中, Γ_e^{in} 为流入单元边界, $\boldsymbol{\tau}^{ext}$ 为上游单元应力. 该方法不需要应力在边界上连续, 因此称之为不连续的迦辽金方法(discontinuous Galerkin, DG). 与SUPG方法相比, DG增加了应力在上游单元的边界积分, 给标准有限元离散求解带来了不便, Baaijens^[119]采用显式/隐式相结合的方法解决了这个问题.

为了保持弱形式动量方程中($\nabla \mathbf{v}^\top, \mathbf{D}$)的椭圆性质, 除去方程中黏性项是比较有效的方法, 为此引入 $\boldsymbol{\Xi} = \boldsymbol{\tau} - 2\eta \mathbf{D}$, 本构方程变为

$$\left(\mathbf{S}, \lambda \boldsymbol{\Xi} + \boldsymbol{\Xi} - 2\eta \lambda \mathbf{D} \right) = 0. \quad (90)$$

这种将黏性、弹性分开计算的方法就是弹黏分裂算法(elastic viscous stress splitting, EVSS)^[120,121]. 但EVSS对新引入的变量 $\boldsymbol{\Xi}$ 不封闭, 另外还需要对剪切速率求导, 增加了速度插值阶数, 这些问题可以通过分部积分或引入新的权函数加以解决. Guénette和Fortin^[122]进一步修改了EVSS算法, 他们引入稳定椭圆算子到离散动量方程消除了剪切速率的上随体导数, 称之为离散EVSS方法(discrete EVSS, DEVSS). Baaijens^[123]还将DEVSS与DG相结合形成DEVSS/DG方法. Wang等人^[124]在DEVSS算法中加入了压力稳定项, 消除了压力振荡现象.

由于有限体积方法具有良好的守恒性, Webster等人^[125~127]将其应用于本构方程求解, 而连续性方程、动量方程仍用有限元方法计算, 形成了混合有限元/有限体积方法. 随后, 他们修正了有限元法中的应力校正算法^[128]. Alves等人^[129~130]建立了迭代求解黏弹性流动问题的隐式方法, 先用有限体积法离散本构方程和动量方程, 得到结点应力和速度的形式表达式, 代入连续方程的变分方程, 得到关于压力场的Poisson方程弱形式, 求出压力场, 再用形式表达式计算应力场和速度场, 如此循环, 直到收敛. 曹伟等人^[131]将这种方法推广到非等温黏弹性流动问题, 并提出了双重迭代求解方法, 图8是用该方法模拟的与实验光弹条纹基本一致的第一法向应力差. Isayev和Lin^[132]提出了结合控制体积、有限元、有限差分求解黏弹性流动问题的方法, 有效节略了计算时间. Zhuang等人^[133]采用一阶格式离散对流项、二阶格式离散扩散项及修正正则化等方法改进求解黏弹性流动问题, 提高了模拟精度.

4.4 流动前沿追踪方法

追踪流动前沿有拉格朗日(Lagrangian)和欧拉(Eulerian)两类方法. 拉格朗日方法只对充填区域划分网

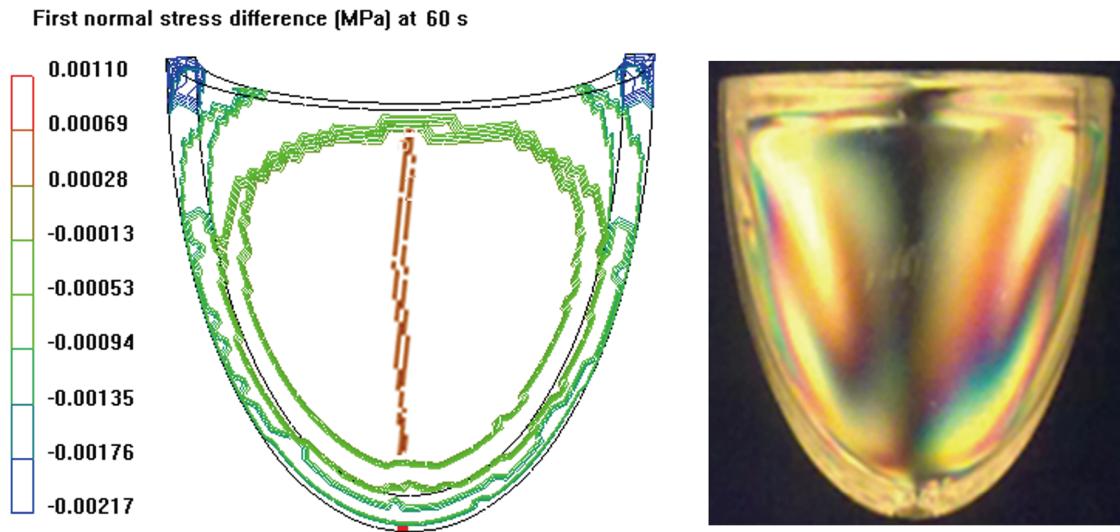


图 8 (网络版彩图)模拟的第一法向应力差与实验光弹条纹对比^[131]

Figure 8 (Color online) The comparison between the simulated first normal stress difference and the experimental photoelastic streaks [131].

格, 用前端的移动网格代表流动前沿, 前沿网格随流体一起移动, 而内部网格需要调整或重画以保持良好的网格形态, 这类方法一般称为任意边界拉格朗日-欧拉(arbitrary Lagrangian Eulerian, ALE)方法^[134]。欧拉方法则将全部区域划分网格, 在计算过程中保持不变, 用前沿网格充填百分比表示流动前沿, 追踪过程中只需关注该标量的变化, 计算简单, 称为固定网格法。拉格朗日法受网格变形及频繁的网格重划限制, 应用较少, 在少数特殊三维充填模拟偶见应用, 而欧拉方法使用较多, 商业软件广泛使用该方法。

(1) 中面控制体积方法

控制体积方法是Chiang等人^[3]基于网格分析法提出的流动前沿追踪方法。连接三角形中心与三条边中点将三角形按体积(面积×厚度)等分为三部分, 将结点周围所有单元的1/3体积连接形成的多边形即为该结点的控制体积, 如图9所示(箭头表示塑料入口, 虚线表示流动前沿)。定义充填因子 f 为熔体充填体积占该控制体积比例, 根据充填因子将结点分为三类: 1) 充满结点, $f=1$; 2) 空结点, $f=0$; 3) 前沿结点, $0 < f < 1$ 。

在每一时间步长上计算前沿结点及空结点的体积流率, 确定充填体积及充填因子, 更新流动前沿及充填区域, 开始下一时间步长的流场计算。该方法建立在固定网格上, 没考虑流动前沿的局部变化, 因此没有ALE方法精确, 但只要网格密度适中, 还是能够描述流动前

沿的位置、形态等特征。

(2) VOF (volume of fluid)方法

VOF方法是Hirt和Nichols^[135]引进的前沿追踪方法, 与控制体积方法类似, VOF方法也需要求解充填因子 f , 但通过求解输运方程确定:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = 0. \quad (91)$$

该方法可应用于两相流求解, 即假定空结点被另一流体占据, 而流动前沿即为两种流体的界面。在两相流计算时, 前沿的物理量如密度、黏度等需作加权平均处理。

(3) 水平集方法

水平集方法是由Osher和Sethian^[136]提出的用于界面演化问题的追踪方法。水平集方法用等值线等直观表征前沿距离, 可视化效果好。Dou等人^[137]、申长雨小组^[138]应用该方法模拟了充填流动前沿。

假设 Ω 为计算区域, $\partial\Omega$ 为界面(或前沿), 定义符号距离函数:

$$\Phi(x, t = 0)$$

$$= \begin{cases} -\min(|x - x_l|), & x \in \Omega_{in} \text{ (充填区域内)}, \\ 0, & x \in \partial\Omega, \\ \min(|x - x_l|), & x \in \Omega_{ou} \text{ (充填区域外)}. \end{cases} \quad (92)$$

这是一个连续函数, 并且满足 $|\nabla \Phi| = 1$ 。

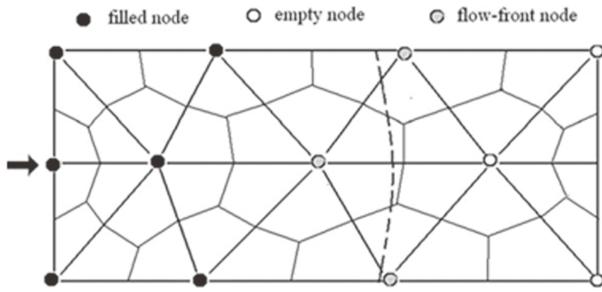


图 9 控制体积及其表征的流动前沿示意图

Figure 9 The diagram of the control volume and its represented meltfront.

用水平集方法表示的流动前沿为 $\Phi=0$ 的等值线, 由于前沿随流体移动, 因此, 距离函数 Φ 满足输运方程:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \Phi = 0. \quad (93)$$

求解输运方程可以确定下一时刻的流动前沿. 但经过多次计算或较大时间步长时计算的 Φ 不满足距离函数的特征, 需要重新初始化, 初始化函数为

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \text{sign}(\Phi)(1 - |\nabla \Phi|). \quad (94)$$

选取适当时间步长计算, 直到计算达到稳定状态, 即 $|\nabla \Phi| = 1$.

4.5 喷泉流现象模拟

受无滑移边界条件及剪切应力影响, 注射成型流动前沿以“喷泉”形式向前推进, 如图10所示, 箭头表示塑料熔体流动方向, 长度表示速度大小. 中心处熔体的流速高于前沿, 接近前沿时冲破新月型表面朝向两边偏转以“滚动”形式滑向模壁, 并在模壁处形成冷凝层. 若以模具边界作为参考框架建立坐标系, 则可将上游平行流动流体分为速度为正的核心区和速度为负的表层区, 在二者的界面上为速度为零的中性线面.

“喷泉”流动对表层的分子或纤维取向及分布有重要影响, 很多学者如Zheng等人^[139], Jin^[140], Sato和Richardson^[141], Bogaerds等人^[142], Baltussen等人^[143], Mitsuoulis^[144]研究了“喷泉”流动的理论模型、数值方法及对取向的影响. 蒋炳炎等人^[145]还研究了微流道中流体流动前沿的喷泉流动模拟方法, 发现微流体的本构特性对喷泉流动的影响较小.

“喷泉”流动一般用三维方法才能表征, 但通过一些特殊处理也可以用中面方法模拟这种现象, 如

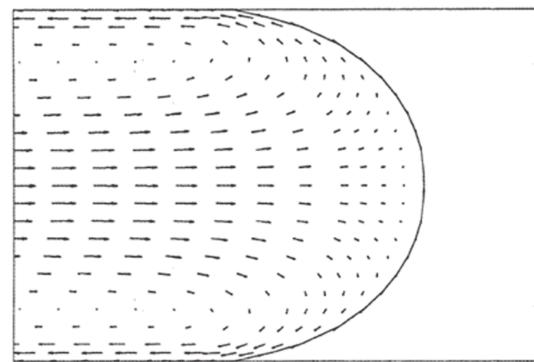


图 10 喷泉流动示意图

Figure 10 The diagram of fountain flow.

Dupret和Vanderschuren^[146]基于Hele-Shaw模型用移动表面粒子方法模拟了“喷泉”流动, Crochet等人^[147]还用这种方法预测了分子取向, Yokoi等人^[148]和Jong等人^[149]用可视化方法研究了喷泉效应.

4.6 冷却分析的边界元方法

注塑成型中塑料熔体热量主要由模具热扩散到空气或冷却介质中, 热量在模具内的变化由热传导方程确定:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T. \quad (95)$$

边界条件采用传统的第一、二、三类边界条件.

4.6.1 边界元方法基本解

对时间 t 离散后, 方程(95)可以简化为

$$\nabla^2 T^n(\mathbf{r}) - \frac{1}{\alpha_M \Delta t} T^n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\alpha_M \Delta t} T^{n-1}(\mathbf{r}). \quad (96)$$

两边乘以基本函数 $T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Delta t)$, 再利用Green公式积分得

$$\begin{aligned} c(\mathbf{r}_0) T^n(\mathbf{r}_0) + \alpha_M \int_{\Gamma} \left[T^n(\mathbf{r}) \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Delta t)}{\partial n} \right. \\ \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Delta t) \frac{\partial T^n(\mathbf{r})}{\partial n} \right] d\Gamma(\mathbf{r}) \\ = - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Delta t) T^{n-1}(\mathbf{r}) d\Omega(r), \end{aligned} \quad (97)$$

式中, \mathbf{r}_0 为载入点, $c(\mathbf{r}_0)$ 满足

$$c(\mathbf{r}_0) = \begin{cases} 0.5, & \mathbf{r}_0 \in \Gamma, \\ 1, & \mathbf{r}_0 \in \Omega / \Gamma. \end{cases} \quad (98)$$

$T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Delta t)$ 是以下方程的基本解:

$$\alpha_M \nabla^2 T^*(\mathbf{r}) - \frac{1}{\Delta t} T^*(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (99)$$

对于三维传热问题, 方程(99)有解析解:

$$T^*(\mathbf{r}) = \frac{(\alpha_M / \Delta t)^{1/4}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^{1/2} (2\pi\alpha_M)^{3/2}} K_{1/2} \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{(\alpha_M \Delta t)^{1/2}} \right), \quad (100)$$

式中, $K_{1/2}(x)$ 是第二类Bessel函数, 当 $x \rightarrow 0$ 时, $K_{1/2}(x) = [\pi/(2x)]^{1/2}$.

4.6.2 中面冷却问题边界元方法

薄壁组件的厚度与长度和宽度相比非常小, 受 $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$ 影响, 边界元离散时厚度方向对应结点系数远大于其他结点, 导致病态的代数方程, 需要对其进行修正。Rezayat和Burton^[150]提出将薄壁组件的上下两个面合并为一个中面, 将其作为模具的裂缝处理, 上下面的温度场分别记为 T^+ 和 T^- , 根据式(97)稳态热传导问题的解满足^[7,151]

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(T^+(\mathbf{r}_0) + T^-(\mathbf{r}_0)) \\ & + \int_{\Gamma_p} \left[[T^+(\mathbf{r}) - T^-(\mathbf{r})] \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{n}} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \left[\frac{\partial T^+(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} + \frac{\partial T^-(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right] \right] d\Gamma(\mathbf{r}) \\ & + \int_{\Gamma \setminus \Gamma_p} \left(T(\mathbf{r}) \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{n}} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \frac{\partial T(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right) d\Gamma(\mathbf{r}) = 0, \end{aligned} \quad (101)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial T^+(\mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{m}} - \frac{\partial T^-(\mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{m}} \right) \\ & + \int_{\Gamma_p} \left(\frac{\partial^2 T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{n} \partial \mathbf{m}} [T^+(\mathbf{r}) - T^-(\mathbf{r})] \right. \\ & \left. - \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{m}} \left[\frac{\partial T^+(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} + \frac{\partial T^-(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right] \right) d\Gamma(\mathbf{r}) \\ & + \int_{\Gamma \setminus \Gamma_p} \left(\frac{\partial^2 T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{n} \partial \mathbf{m}} T(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. - \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{m}} \frac{\partial T(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right) d\Gamma(\mathbf{r}) = 0. \end{aligned} \quad (102)$$

\mathbf{n} 为模具型腔及外轮廓边界上的单位法向量; \mathbf{m} 为 \mathbf{r}_0 处的单位外法向量。

若 \mathbf{r}_0 为模具外边界 Γ_c , 则只需求解一个方程:

$$\begin{aligned} & T(\mathbf{r}_0) + \int_{\Gamma_p} \left\{ [T^+(\mathbf{r}) - T^-(\mathbf{r})] \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial n} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \left[\frac{\partial T^+(\mathbf{r})}{\partial n} + \frac{\partial T^-(\mathbf{r})}{\partial n} \right] \right\} d\Gamma(\mathbf{r}) \\ & + \int_{\Gamma \setminus \Gamma_p} \left(T(\mathbf{r}) \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial n} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \frac{\partial T(\mathbf{r})}{\partial n} \right) d\Gamma(\mathbf{r}) = 0. \end{aligned} \quad (103)$$

冷却管道可划分为 N 个一维单元, 在第 j 个一维单元轴线上 \mathbf{r}_0 处有

$$\begin{aligned} & \int_{l_j} \int_{\Gamma_p} \left\{ [T^+(\mathbf{r}) - T^-(\mathbf{r})] \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial n} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \left[\frac{\partial T^+(\mathbf{r})}{\partial n} + \frac{\partial T^-(\mathbf{r})}{\partial n} \right] \right\} d\Gamma(\mathbf{r}) dl(\mathbf{r}_0) \\ & + \int_{l_j} \int_{\Gamma_e} \left(T(\mathbf{r}) \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial n} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \frac{\partial T(\mathbf{r})}{\partial n} \right) d\Gamma(\mathbf{r}) dl(\mathbf{r}_0) \\ & + \int_{l_j} \sum_{n=1}^N \int_0^{2\pi} \left(T(\mathbf{r}) \frac{\partial T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{\partial n} \right. \\ & \left. - T^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \frac{\partial T(\mathbf{r})}{\partial n} \right) R_j d\theta dl(\mathbf{r}_0) d\Gamma(\mathbf{r}) = 0. \end{aligned} \quad (104)$$

4.6.3 边界元离散方法及求解

离散上述冷却问题可得温度场的代数方程

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} T_i + \sum_{j=1}^{N_p} \int_{e_j} \frac{\partial T_{ij}^*}{\partial n} ds T_j + \sum_{j=N_p+1}^{N_p+N_c} \int_{e_j} \left(\frac{\partial T_{ij}^*}{\partial n} + \frac{h_c}{k_M} T_{ij}^* \right) ds T_j \\ & + \sum_{j=N_p+N_c+1}^N \int_{e_j} \left(\frac{\partial T_{ij}^*}{\partial n} + \frac{h_c}{k_M} T_{ij}^* \right) ds T_j \\ & + \sum_{j=1}^{N_p} \int_{e_j} \frac{h_c}{k_M} T_{ij}^* ds T_j - \sum_{j=N_p+1}^{N_p+N_c} \int_{e_j} \frac{h_c}{k_M} T_{ij}^* ds (T_b)_j \\ & - \sum_{j=N_p+N_c+1}^N \int_{e_j} T_{ij}^* ds \frac{h_c}{k_M} T_a = 0. \end{aligned} \quad (105)$$

代数方程可表示为^[7]

$$[\mathbf{A}]\{\mathbf{T}\} = \{\mathbf{B}\}. \quad (106)$$

系数矩阵 $[\mathbf{A}]$ 是满阵, 需要存储的信息多, 计算量

大, 为了简化计算, 根据与当前点 \mathbf{r}_0 的远近将 $[\mathbf{A}]$ 分为两部分: $[\mathbf{A}]=[\mathbf{A}_{\text{near}}]+[\mathbf{A}_{\text{far}}]$, 由于基本解 $T^*=O(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^{-1})$, $\partial T^*/\partial n=O(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^{-2})$, 因此, $[\mathbf{A}_{\text{far}}]$ 很小, 对计算结果影响没有 $[\mathbf{A}_{\text{near}}]$ 显著, 可以用前一时间步长结果代替, 因此, 方程(106)可以转化为

$$[\mathbf{A}_{\text{near}}]\{\mathbf{T}\} = \{\mathbf{B}\} - [\mathbf{A}_{\text{far}}]\{\mathbf{T}\}. \quad (107)$$

每次求解时, 对右端项中的温度用上一时间步的结果进行赋值, 求解未知量显著减少, 加快了计算速度, 减少了存储资源.

4.7 收缩与翘曲变形模拟

塑件脱模后, 在模具内积累的热应力和流动诱导应力将使制品产生变形, 根据弹性力学理论应力和应变之间满足

$$\sigma_{ij} = C_{ijk}\varepsilon_{kl} + \sigma_{ij}^0, \quad (108)$$

在每个单元上用有限元离散方程(108)可得

$$[\mathbf{K}_e]\{\mathbf{d}\} = \{\mathbf{R}\}. \quad (109)$$

在每个结点有6个自由度, 3个位移分量(u_1, u_2, u_3)和3个挠度分量($\theta_1, \theta_2, \theta_3$), 组装所有单元即可得到关于变形的代数方程, 求解代数方程得到翘曲变形量.

对于双面模型, 需要保持上下两个面的变形一致, 因此, 需要通过特殊方法将配对点的变形量有机联系起来, 郑荣等人^[7]提出用变换矩阵将二者一一对应, 并应用于Moldflow软件.

很多学者用壳单元求解变形问题, 壳单元对厚壁平板或壳状制品很有效, 但当制品变薄时, 结构响应太僵硬, 称之为“剪切锁闭(shear locking)”, 所以, 中面模型常用三角形单元求解翘曲变形问题.

三维翘曲变形求解相对复杂, 若用四面体的一阶插值离散应力-应变方程(108), 在形态比较大的单元将出现“剪切锁闭”现象, 而对于薄壁制品这种情况难以避免. Fan等人^[152]提出用杂交单元求解三维变形问题, 即厚壁区域用4结点四面体单元离散, 在薄壁区域用10结点四面体单元离散, 而在二者的过渡区域用5~9结点四面体单元离散.

注塑成型虽然还发展了诸如气辅成型、水辅成型、注压成型等新工艺, 但描述这些新工艺仍然使用上述的理论模型, 只需修改相应的边界条件, 数值计算时更新相关边界即可实现新工艺的成型模拟, 因此,

本文不专门介绍这些新工艺的理论与数值算法.

4.8 充填流动的无网格法

无网格法是近几十年来研究比较热门的一种新型的数值方法, 它不需要对求解区域划分网格, 只需要在求解域中布置一些结点即可求解^[153]. 由于网格对于大变形的限制, 基于欧拉或ALE描述的注塑充填流动模拟的有限元法难以实现拉格朗日模拟, 而无网格法则没有这种限制. 无网格法种类很多, 从早期的光滑粒子动力学方法(SPH)逐渐发展出无单元伽辽金法(EFG)、有限点法(FPM)、径向基函数无网格法(RPIM)和无网格局部Petrov-Galerkin法(MLPG). 一些模拟注塑成型充填流动的无网格法和经典有限元一样求解等效积分弱形式的控制方程, 并结合欧拉描述追踪流动前沿^[154,155]. 而更多的无网格法是纯拉格朗日描述, 使用随体坐标更容易追踪一个拉格朗日流体微团上各个物理量的变化, 实现物性追踪^[156,157], 对于大变形问题及自由面追踪有天然的优势, 因此, 很多学者将其应用于注塑成型模拟. 范西俊等人^[158]将Moldflow中的塑料熔体参数用于SPH模拟, 用隐式积分方法模拟了二维锥形浇口充填开始阶段的熔体流动. 蒋涛等人^[159]采用改进SPH格式模拟非牛顿黏性流动问题, 预测了环形腔和C形腔中非等温非牛顿黏性流体充填流动行为. Xu和Yu^[160]使用改进的SPH算法模拟了环形、F形、N形腔的非等温充填流动. 此外, 还有学者将无网格方法应用于纤维复合材料成型模拟. Yashiro等人^[161]在二维注塑充填模拟中将短纤维填充物视为刚性短棒, 用无网格方法模拟了短纤维增强注塑成型充填流动和纤维分布, 模拟结果和CT扫描结果吻合良好. He等人^[162]用类似的方法模拟了三维短纤维注塑充填流动和纤维分布, 如图11所示. 与有限元法相比用于注塑成型充填流动模拟的无网格方法存在着计算量大、数值稳定性差、算法通用性低、缺少保压冷却阶段模拟等问题, 垂待更深入的研究和发展.

5 结论与展望

近40年注塑成型模拟的理论和数值方法均取得了长足的进步, 开发了很多实用的商业软件, 对塑料产业的指导作用日益突出, 但塑料产业发展也日新月异, 精度越来越高, 加工周期越来越短, 对CAE的要求也越来

越高。为迎接塑料行业面临的挑战,解决关键技术难题,注塑成型CAE亟需解决以下问题。

(1) 黏弹性理论与算法

黏弹性理论模型能够表征材料的真实特征,使用黏弹性本构模型能够预测二次流、应力光学条纹等复杂物理现象,为复杂材料体系(如纤维复合材料)提供相容的分析模型与算法,还可以为后续的结构分析、光学分析等提供更完整的初始数据。黏弹性模拟面临的主要问题:一是模型的准确性不足,尤其是针对复合材料的精确黏弹性模型十分稀缺,现有模型均有一定的适用范围,线性材料模型难以适用带支链的材料,单一材料模型不适用于复合材料;二是数值求解精度不高,黏弹性求解本身的难度阻碍了数值方法的有效性,高精度的数值方法面临收敛性、稳定性等困难。

(2) 成型、成性一体化分析

注塑成型分析可以辅助工程师探索工艺的可行性、模具结构的合理性,预测制品的缺陷与外观质量,但难以预测脱模后制品的变形、寿命、装配精度以及制品服役性能,而这些性能与材料特征、成型工艺、模具结构密切相关,如流动过程中残余应力决定了成型制品的折射率,因此,需要开展一体化分析为制品的订制化设计与加工提供理论分析工具。一方面,一体化分析需要共享网格数据,开发接口程序提供下一分析软件需要的初始数据及必要的性能参数,如复合材料成型分析完成后需要根据材料特性、纤维取向计算结构分析需要的各向异性模量;另一方面,需要根据制品性能要求构造成型的反问题,即以CAE理论为基础用灵敏度分析方法建立制品性能与材料特征、模具结构与成型工艺之间的依赖关系,构造成型算法。

(3) 基于大数据的智能计算

塑料材料种类繁多,成型机也各有特点,模具结构更是千差万别,具体产品加工会出现飞边、流痕、翘曲变形等各种问题,依靠经验、分析软件一一解决会花费很多的时间与资源,而中国有多达15571家规模以上塑料加工企业,每天从事数以千万的塑料制品生

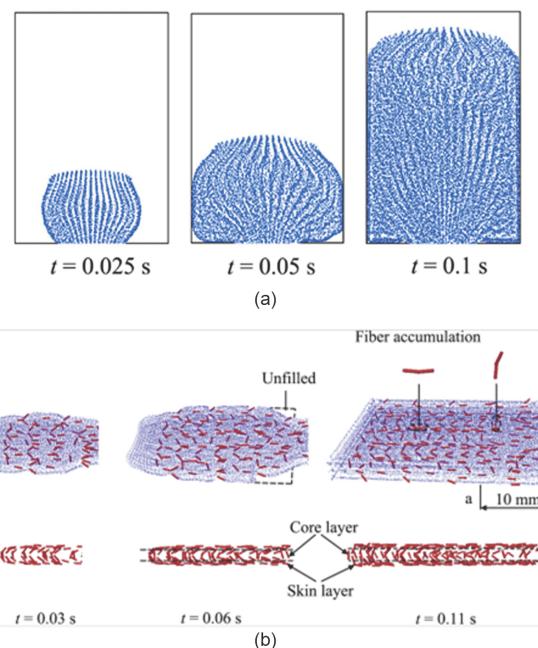


图 11 (网络版彩图)SPH方法模拟的充填流动。(a) 无纤维增强;^[162] (b) 有纤维增强^[162]

Figure 11 (Color online) The simulated filling flow with SPH methods for (a) pure polymer and (b) fiber reinforced polymer [162].

产,收集这些产品加工的成功经验、失败教训及解决方法,将其标准化、数字化,形成塑料成型加工的知识库、方案库、案例库,结合传感技术及CAE计算结果,应用优化设计、机器学习算法开发塑料成型模具结构、加工工艺的智能分析系统,辅助设计、成型工程师及时发现问题、找出解决方案,实现塑料注塑成型的智能化。

(4) 无网格与多尺度模拟

注塑制品质量与材料在不同尺度下的结构密切相关。无网格法配合拉格朗日描述可以更容易实现注塑过程中物性参数的追踪,而多尺度模拟可以同时得到不同尺度下的结构信息,两者的发展与结合可以更深入地了解注塑制品质量与性能的形成机理,进一步提升注塑制品的质量,拓宽注塑制品的使用场景和领域。

参考文献

- Hieber C A, Shen S F. A finite-element/finite-difference simulation of the injection-molding filling process. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1980, 7: 1–32
- Wang W W, Hieber C A, Wang K K. Dynamic simulation and graphics for the injection molding of three-dimensional thin parts. *J Polym Eng*,

- 1986, 7: 21–46
- 3 Chiang H H, Hieber C A, Wang K K. A unified simulation of the filling and postfilling stages in injection molding. Part I: Formulation. *Polym Eng Sci*, 1991, 31: 116–124
 - 4 Himasekhar K, Lotte J, Wang K K. CAE of mold cooling in injection molding using a three-dimensional numerical simulation. *J Manuf Sci Eng*, 1992, 114: 213–221
 - 5 Isayev A I. Orientation, residual stresses, and volumetric effect in injection molding. In: Isayev A I, ed. *Injection and Compression Molding Fundamentals*. New York: Marcel Dekker, 1987. 227–328
 - 6 Batoz J L, Lardeur P. A discrete shear triangular nine d.o.f. element for the analysis of thick to very thin plates. *Int J Numer Meth Engng*, 1989, 28: 533–560
 - 7 Zheng R, Tanner R I, Fan X J. *Injection Molding: Integration of Theory and Molding Methods*. Heidelberg: Springer, 2011
 - 8 Cao W, Wang R, Shen C. A dual domain method for 3-D flow simulation. *Polym-Plastics Tech Eng*, 2005, 43: 1471–1486
 - 9 Pichelin E, Coupez T. Finite element solution of the 3D mold filling problem for viscous incompressible fluid. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1998, 163: 359–371
 - 10 Pichelin E, Coupez T. A Taylor discontinuous Galerkin method for the thermal solution in 3D mold filling. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1999, 178: 153–169
 - 11 Advani S G, Tucker III C L. The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites. *J Rheol*, 1987, 31: 751–784
 - 12 Folgar F, Tucker III C L. Orientation behavior of fibers in concentrated suspensions. *J Reinf Plastics Compos*, 1984, 3: 98–119
 - 13 Fan X, Phan-Thien N, Zheng R. A direct simulation of fibre suspensions. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1998, 74: 113–135
 - 14 Phelps J H, Tucker III C L. An anisotropic rotary diffusion model for fiber orientation in short- and long-fiber thermoplastics. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2009, 156: 165–176
 - 15 Tucker III C L, Wang J, O’Gara J F. Method and article of manufacture for determining a rate of change of orientation of a plurality of fibers disposed in a fluid. US Patent, 7266469, 2007
 - 16 Wang J, O’Gara J F, Tucker III C L. An objective model for slow orientation kinetics in concentrated fiber suspensions: Theory and rheological evidence. *J Rheol*, 2008, 52: 1179–1200
 - 17 Hand G L. A theory of anisotropic fluids. *J Fluid Mech*, 1962, 13: 33–46
 - 18 Doi M. Molecular dynamics and rheological properties of concentrated solutions of rodlike polymers in isotropic and liquid crystalline phases. *J Polym Sci Polym Phys Ed*, 1981, 19: 229–243
 - 19 Lipscomb II G G, Denn M M, Hur D U, et al. The flow of fiber suspensions in complex geometries. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1988, 26: 297–325
 - 20 Advani S G, Tucker III C L. Closure approximations for three-dimensional structure tensors. *J Rheol*, 1990, 34: 367–386
 - 21 Hinch E J, Leal L G. Constitutive equations in suspension mechanics. Part 2. Approximate forms for a suspension of rigid particles affected by Brownian rotations. *J Fluid Mech*, 1976, 76: 187–208
 - 22 Cintra Jr. J S, Tucker III C L. Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. *J Rheol*, 1995, 39: 1095–1122
 - 23 Dupret F, Verleye V. Modelling the flow of fiber suspensions in narrow gaps. In: Siginer D A, De K D, Chhabra R P, eds. *Advances in the Flow and Rheology of Non-Newtonian Fluids*. New York: Elsevier, 1999. 1347–1398
 - 24 Chung D H, Kwon T H. Invariant-based optimal fitting closure approximation for the numerical prediction of flow-induced fiber orientation. *J Rheol*, 2002, 46: 169–194
 - 25 Austin C. *Warpage Design Principles*. Melbourne: Moldflow Pty Ltd., 1991
 - 26 Shoemaker J. *Moldflow Design Guide: A Reference for Plastics Engineers*. Munich: Hanser, 2006
 - 27 Tucker III C L, Liang E. Stiffness predictions for unidirectional short-fiber composites: Review and evaluation. *Compos Sci Tech*, 1999, 59: 655–671
 - 28 Mori T, Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall*, 1973, 21: 571–574
 - 29 Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids*. Boston: Martinus Nijhoff Publishers, 1987
 - 30 Nguyen B N, Bapanapalli S K, Holbery J D, et al. Fiber length and orientation in long-fiber injection-molded thermoplastics—Part I: Modeling of microstructure and elastic properties. *J Compos Mater*, 2008, 42: 1003–1029
 - 31 Schulenberg L, Seelig T, Andrieux F, et al. An anisotropic elasto-plastic material model for injection-molded long fiber-reinforced

- thermoplastics accounting for local fiber orientation distributions. *J Compos Mater*, 2017, 51: 2061–2078
- 32 Rosen B W, Hashin Z. Effective thermal expansion coefficients and specific heats of composite materials. *Int J Eng Sci*, 1970, 8: 157–173
- 33 Struik L C E. Internal Stresses, Dimensional Instabilities and Molecular Orientations in Plastics. Chichester: Wiley, 1990
- 34 Cao W, Shen C, Li H. Coupled part and mold temperature simulation for injection molding based on solid geometry. *Polym-Plastics Tech Eng*, 2006, 45: 741–749
- 35 Padding J T, Briels W J. Systematic coarse-graining of the dynamics of entangled polymer melts: The road from chemistry to rheology. *J Phys-Condens Matter*, 2011, 23: 233101
- 36 Brini E, Algaer E A, Ganguly P, et al. Systematic coarse-graining methods for soft matter simulations—A review. *Soft Matter*, 2013, 9: 2108–2119
- 37 Müller-Plathe F. Coarse-graining in polymer simulation: From the atomistic to the mesoscopic scale and back. *ChemPhysChem*, 2002, 3: 754–769
- 38 de Gennes P G. Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles. *J Chem Phys*, 1971, 55: 572–579
- 39 Doi M, Edwards S F. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 1.—Brownian motion in the equilibrium state. *J Chem Soc Faraday Trans 2*, 1978, 74: 1789–1801
- 40 Doi M, Edwards S F. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 2.—Molecular motion under flow. *J Chem Soc Faraday Trans 2*, 1978, 74: 1802–1817
- 41 Doi M, Edwards S F. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 3.—The constitutive equation. *J Chem Soc Faraday Trans 2*, 1978, 74: 1818–1832
- 42 Doi M, Edwards S F. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 4.—Rheological properties. *J Chem Soc Faraday Trans 2*, 1979, 75: 38–54
- 43 Doi M, Edwards S F. The Theory of Polymer Dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1988
- 44 Doi M. Soft Matter Physics. New York: Oxford University Press, 2013
- 45 Masubuchi Y. Simulating the flow of entangled polymers. *Annu Rev Chem Biomol Eng*, 2014, 5: 11–33
- 46 Graham R S, Likhtman A E, McLeish T C B, et al. Microscopic theory of linear, entangled polymer chains under rapid deformation including chain stretch and convective constraint release. *J Rheol*, 2003, 47: 1171–1200
- 47 Kremer K, Grest G S. Dynamics of entangled linear polymer melts: A molecular-dynamics simulation. *J Chem Phys*, 1990, 92: 5057–5086
- 48 Masubuchi Y, Takimoto J I, Koyama K, et al. Brownian simulations of a network of reptating primitive chains. *J Chem Phys*, 2001, 115: 4387–4394
- 49 Schieber J D, Neergaard J, Gupta S. A full-chain, temporary network model with sliplinks, chain-length fluctuations, chain connectivity and chain stretching. *J Rheol*, 2003, 47: 213–233
- 50 De S, Fish J, Shephard M S, et al. Multiscale modeling of polymer rheology. *Phys Rev E*, 2006, 74: 030801
- 51 Yasuda S, Yamamoto R. Multiscale simulation for thermo-hydrodynamic lubrication of a polymeric liquid between parallel plates. *Mol Simul*, 2015, 41: 1002–1005
- 52 Yasuda S, Yamamoto R. Synchronized molecular-dynamics simulation via macroscopic heat and momentum transfer: An application to polymer lubrication. *Phys Rev X*, 2014, 4: 041011
- 53 Yasuda S, Yamamoto R. Synchronized molecular-dynamics simulation for the thermal lubrication of a polymeric liquid between parallel plates. *Comput Fluids*, 2016, 124: 185–189
- 54 Murashima T, Taniguchi T. Flow-history-dependent behavior of entangled polymer melt flow analyzed by multiscale simulation. *J Phys Soc Jpn*, 2012, 81: SA013
- 55 Murashima T, Taniguchi T, Yamamoto R, et al. Multiscale simulations for polymeric flow. arXiv: 1101.1211
- 56 Murashima T, Yasuda S, Taniguchi T, et al. Multiscale modeling for polymeric flow: Particle-fluid bridging scale methods. *J Phys Soc Jpn*, 2012, 82: 012001
- 57 Feng H, Andreev M, Pilyugina E, et al. Smoothed particle hydrodynamics simulation of viscoelastic flows with the slip-link model. *Mol Syst Des Eng*, 2016, 1: 99–108
- 58 Zhang X H, Ouyang J, Kong Q. Micro-macro simulation of polymeric fluid flow (in Chinese). *J Chem Ind Eng*, 2007, 58: 1897–1904 [张小华, 欧阳洁, 孔倩. 聚合物流动的多尺度模拟. 化工学报, 2007, 58: 1897–1904]

- 59 Guo X, Cao Y, Wang M, et al. A multi-scale parallel numerical solver for modeling of two-phase viscoelastic fluids based on the OpenFOAM. In: Proceedings of the 2015 International Conference on Modeling, Simulation and Applied Mathematics. Phuket: Atlantis Press, 2015
- 60 Masubuchi Y, Uneyama T, Saito K. A multiscale simulation of polymer processing using parameter-based bridging in melt rheology. *J Appl Polym Sci*, 2012, 125: 2740–2747
- 61 Lou Y, Pei J L, He P Q. A micro-viscosity model based on the molecular chain length (in Chinese). *Polym Mater Sci Eng*, 2015, 1: 126–132 [娄燕, 裴九龙, 何培乾. 一种基于分子链段长度的微观黏度模型. 高分子材料科学与工程, 2015, 1: 126–132]
- 62 Ren J L, Lu W G, Jiang T. Simulation and prediction of the weld-line in the filling process using a corrected smoothed particle hydrodynamics method (in Chinese). *Acta Phys Sin-Ch Ed*, 2015, 64: 080202 [任金莲, 陆伟刚, 蒋涛. 充模过程中熔接痕的改进光滑粒子动力学方法模拟与预测. 物理学报, 2015, 64: 080202]
- 63 Bird R B, Armstrong R C, Hassager O. Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 1: Fluid Mechanics. New York: John Wiley and Sons, 1987
- 64 Cross M M. Rheology of non-Newtonian fluids: A new flow equation for pseudoplastic systems. *J Colloid Sci*, 1965, 20: 417–437
- 65 Hieber C A, Chiang H H. Shear-rate-dependence modeling of polymer melt viscosity. *Polym Eng Sci*, 1992, 32: 931–938
- 66 Williams M L, Landel R F, Ferry J D. The temperature dependence of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids. *J Am Chem Soc*, 1955, 77: 3701–3707
- 67 Phan-Thien N, Tanner R I. A new constitutive equation derived from network theory. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1977, 2: 353–365
- 68 Langouche F, Debbaut B. Rheological characterisation of a high-density polyethylene with a multi-mode differential viscoelastic model and numerical simulation of transient elongational recovery experiments. *Rheol Acta*, 1999, 38: 48–64
- 69 Verbeeten W M H, Peters G W M, Baaijens F P T. Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom-Pom model. *J Rheol*, 2001, 45: 823–843
- 70 Tanner R I, Nasseri S. Simple constitutive models for linear and branched polymers. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2003, 116: 1–17
- 71 Leonov A I. Nonequilibrium thermodynamics and rheology of viscoelastic polymer media. *Rheol Acta*, 1976, 15: 85–98
- 72 Pivokonsky R, Zatloukal M, Filip P. On the predictive/fitting capabilities of the advanced differential constitutive equations for linear polyethylene melts. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2008, 150: 56–64
- 73 Erickson J L. Anisotropic fluids. *Arch Rational Mech Anal*, 1959, 4: 231–237
- 74 Dinh S M, Armstrong R C. A rheological equation of state for semiconcentrated fiber suspensions. *J Rheol*, 1984, 28: 207–227
- 75 Phan-Thien N, Graham A L. A new constitutive model for fibre suspensions: Flow past a sphere. *Rheol Acta*, 1991, 30: 44–57
- 76 Van Krevelen D W, Hoflyzer P J. Properties of Polymers: Their Estimation and Correlation with Chemical Structure. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1976
- 77 Zoller P, Kehl T A, Starkweather H W, et al. The equation of state and heat of fusion of poly(ether ether ketone). *J Polym Sci B Polym Phys*, 1989, 27: 993–1007
- 78 Zoller P, Fakhreddine Y A. Pressure-volume-temperature studies of semi-crystalline polymers. *Thermochim Acta*, 1994, 238: 397–415
- 79 Eder G, Janeschitz-Kriegl H. Crystallization. In: Meijer H E H, ed. Processing of Polymers. New York: Wiley-VCH, 1997. 269–342
- 80 van Meerveld J, Peters G W M, Hütter M. Towards a rheological classification of flow induced crystallization experiments of polymer melts. *Rheol Acta*, 2004, 44: 119–134
- 81 Janeschitz-Kriegl H, Ratajski E, Stadlbauer M. Flow as an effective promotor of nucleation in polymer melts: A quantitative evaluation. *Rheol Acta*, 2003, 42: 355–364
- 82 Mykhaylyk O O, Chambon P, Graham R S, et al. The specific work of flow as a criterion for orientation in polymer crystallization. *Macromolecules*, 2008, 41: 1901–1904
- 83 Kolmogoroff A N. On a statistical theory of crystallization of metals. Isv Akad Nauk USSR, Ser Math, 1937, 1: 355–359
- 84 Avrami M. Kinetics of phase change. I General theory. *J Chem Phys*, 1939, 7: 1103–1112
- 85 Lauritzen Jr. J I, Hoffman J D. Formation of polymer crystals with folded chains from dilute solution. *J Chem Phys*, 1959, 31: 1680–1681
- 86 Fulchiron R, Koscher E, Poutot G, et al. Analysis of the pressure effect on the crystallization kinetics of polypropylene: Dilatometric measurements and thermal gradient modeling. *J Macromol Sci Part B*, 2001, 40: 297–314
- 87 Liedauer S, Eder G, Janeschitz-Kriegl H, et al. On the kinetics of shear induced crystallization in polypropylene. *Int Polym Proc*, 1993, 8: 236–244
- 88 Zuidema H. Flow induced crystallization of polymers: Application to injection moulding. Dissertation for Doctoral Degree. Eindhoven:

- Eindhoven University of Technology, 2000
- 89 Zuidema H, Peters G W M, Meijer H E H. Development and validation of a recoverable strain-based model for flow-induced crystallization of polymers. *Macromol Theor Simul*, 2001, 10: 447–460
- 90 Koscher E, Fulchiron R. Influence of shear on polypropylene crystallization: Morphology development and kinetics. *Polymer*, 2002, 43: 6931–6942
- 91 Coppola S, Grizzuti N, Maffettone P L. Microrheological modeling of flow-induced crystallization. *Macromolecules*, 2001, 34: 5030–5036
- 92 Zheng R, Kennedy P K. A model for post-flow induced crystallization: General equations and predictions. *J Rheol*, 2004, 48: 823–842
- 93 Tanner R I, Qi F. A comparison of some models for describing polymer crystallization at low deformation rates. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2005, 127: 131–141
- 94 Tanner R I. On the flow of crystallizing polymers. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2003, 112: 251–268
- 95 Tanner R I. The changing face of rheology. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2009, 157: 141–144
- 96 Doufas A K, Dairanieh I S, McHugh A J. A continuum model for flow-induced crystallization of polymer melts. *J Rheol*, 1999, 43: 85–109
- 97 Doufas A K, McHugh A J, Miller C. Simulation of melt spinning including flow-induced crystallization. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2000, 92: 27–66
- 98 Pantani R, Speranza V, Titomanlio G. Relevance of crystallisation kinetics in the simulation of the injection molding process. *Int Polym Proc*, 2001, 16: 61–71
- 99 Hieber C A. Modeling/simulating the injection molding of isotactic polypropylene. *Polym Eng Sci*, 2002, 42: 1387–1409
- 100 van den Brule B H A A. A network theory for the thermal conductivity of an amorphous polymeric material. *Rheol Acta*, 1989, 28: 257–266
- 101 van den Brule B H A A. The non-isothermal elastic dumbbell: A model for the thermal conductivity of a polymer solution. *Rheol Acta*, 1990, 29: 416–422
- 102 van den Brule B H A A, O'Brien S B G. Anisotropic conduction of heat in a flowing polymeric material. *Rheol Acta*, 1990, 29: 580–587
- 103 Huilgol R R, Phan-Thien N, Zheng R. A theoretical and numerical study of non-Fourier effects in viscometric and extensional flows of an incompressible simple fluid. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1992, 43: 83–102
- 104 Venerus D C, Schieber J D, Balasubramanian V, et al. Anisotropic thermal conduction in a polymer liquid subjected to shear flow. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 098301
- 105 Schieber J D, Venerus D C, Bush K, et al. Measurement of anisotropic energy transport in flowing polymers by using a holographic technique. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2004, 101: 13142–13146
- 106 Dai S C, Tanner R I. Anisotropic thermal conductivity in sheared polypropylene. *Rheol Acta*, 2006, 45: 228–238
- 107 Zheng R, Kennedy P K. Anisotropic thermal conduction in injection molding. In: Proceedings of the 22nd Annual Conference of the Polymer Processing Society. Yamagata, 2006
- 108 Zheng R, Tanner R I, Lee W D, et al. Modeling of flow-induced crystallization of colored polypropylene in injection molding. *Korea-Aust Rheol J*, 2010, 22: 151–162
- 109 Cao W, Shen C, Wang R. 3D flow simulation for viscous nonisothermal incompressible fluid in injection molding. *Polym-Plastics Tech Eng*, 2005, 44: 901–917
- 110 Geng T, Li D Q, Zhou H M, et al. Simulation of temperature field in filling stage of injection molding using three-dimensional model (in Chinese). *J Chem Ind Eng*, 2005, 56: 1612–1617 [耿铁, 李德群, 周华民, 等. 注塑充模过程中温度场的全三维数值模拟. 化工学报, 2005, 56: 1612–1617]
- 111 Zhou H, Yan B, Zhang Y. 3D filling simulation of injection molding based on the PG method. *J Mater Process Tech*, 2008, 204: 475–480
- 112 Zhao P, Zhao Y, Yan B, et al. Three-dimensional simulation of shear-induced crystallization for polymers during injection molding process (in Chinese). *J Chem Ind Eng*, 2017, 68: 4359–4366 [赵朋, 赵耀, 严波, 等. 注射成型中聚合物剪切诱导结晶行为的三维模拟. 化工学报, 2017, 68: 4359–4366]
- 113 Hua S, Zhang S, Cao W, et al. Simulation of jetting in injection molding using a finite volume method. *Polymers*, 2016, 8: 172
- 114 Zhang S, Hua S, Cao W, et al. 3D viscoelastic simulation of jetting in injection molding. *Polym Eng Sci*, 2019, 59: E397–E405
- 115 Brooks A N, Hughes T J R. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1982, 32: 199–259
- 116 Marchal J M, Crochet M J. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1987, 26: 77–114

- 117 Crochet M J, Legat V. The consistent streamline-upwind/Petrov-Galerkin method for viscoelastic flow revisited. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1992, 42: 283–299
- 118 Fortin M, Fortin A. A new approach for the fem simulation of viscoelastic flows. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1989, 32: 295–310
- 119 Baaijens F P T. Numerical experiments with a discontinuous Galerkin method including monotonicity enforcement on the stick-slip problem. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1994, 51: 141–159
- 120 Crochet M J, Davies A R, Walters K. Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow. Amsterdam: Elsevier, 1984
- 121 Mendelson M A, Yeh P W, Brown R A, et al. Approximation error in finite element calculation of viscoelastic fluid flows. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1982, 10: 31–54
- 122 Guénette R, Fortin M. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1995, 60: 27–52
- 123 Baaijens F P T. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: A review. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1998, 79: 361–385
- 124 Wang W, Li X, Han X. A numerical study of constitutive models endowed with Pom-Pom molecular attributes. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2010, 165: 1480–1493
- 125 Webster M F, Tamaddon-Jahromi H R, Aboubacar M. Time-dependent algorithms for viscoelastic flow: Finite element/volume schemes. *Numer Methods Partial Differ Eq*, 2005, 21: 272–296
- 126 Wapperom P, Webster M F. Simulation for viscoelastic flow by a finite volume/element method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1999, 180: 281–304
- 127 Tamaddon-Jahromi H R, Webster M F, Williams P R. Excess pressure drop and drag calculations for strain-hardening fluids with mild shear-thinning: Contraction and falling sphere problems. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2011, 166: 939–950
- 128 López-Aguilar J E, Webster M F, Tamaddon-Jahromi H R, et al. High-Weissenberg predictions for micellar fluids in contraction-expansion flows. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2015, 222: 190–208
- 129 Alves M A, Pinho F T, Oliveira P J. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2000, 93: 287–314
- 130 Alves M A, Oliveira P J, Pinho F T. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Int J Numer Meth Fluids*, 2003, 41: 47–75
- 131 Cao W, Hua S, Zhang S, et al. Three-dimensional viscoelastic simulation for injection/compression molding based on arbitrary lagrangian eulerian description. *J Comput Nonlinear Dyn*, 2016, 11: 051004
- 132 Isayev A I, Lin T H. Frozen-in birefringence and anisotropic shrinkage in optical moldings: I. Theory and simulation scheme. *Polymer*, 2010, 51: 316–327
- 133 Zhuang X, Ouyang J, Li Y, et al. A three-dimensional thermal model for viscoelastic polymer melt packing process in injection molding. *Appl Thermal Eng*, 2018, 128: 1391–1403
- 134 Hughes T J R, Liu W K, Zimmermann T K. Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1981, 29: 329–349
- 135 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comput Phys*, 1981, 39: 201–225
- 136 Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J Comput Phys*, 1988, 79: 12–49
- 137 Dou H S, Khoo B C, Phan-Thien N, et al. Simulations of fibre orientation in dilute suspensions with front moving in the filling process of a rectangular channel using level-set method. *Rheol Acta*, 2007, 46: 427–447
- 138 Zhang S X, Cao W, Ye S B, et al. Study on melt filling mode and trapping air mechanism in high speed micro-injection molding (in Chinese). China Plastics, 2012, 26: 65–70 [张世勋, 曹伟, 叶曙兵, 等. 高速微注射成型中熔体充填模式及裹气机理研究. 中国塑料, 2012, 26: 65–70]
- 139 Zheng R, Phan-Thien N, Tanner R I. The flow of a suspension fluid in injection molding. In: Yeow Y L, Uhlherr P H T, eds. Proceedings of the Fifth National Society of Rheology. Melbourne, 1990. 141–144
- 140 Jin X. Boundary element study on particle orientation caused by the fountain flow in injection molding. *Polym Eng Sci*, 1993, 33: 1238–1242
- 141 Sato T, Richardson S M. Numerical simulation of the fountain flow problem for viscoelastic fluids. *Polym Eng Sci*, 1995, 35: 805–812
- 142 Bogaerts A C B, Hulsen M A, Peters G W M, et al. Stability analysis of injection molding flows. *J Rheol*, 2004, 48: 765–785
- 143 Baltussen M G H M, Hulsen M A, Peters G W M. Numerical simulation of the fountain flow instability in injection molding. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2010, 165: 631–640

- 144 Mitsoulis E. Fountain flow of pseudoplastic and viscoplastic fluids. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2010, 165: 45–55
- 145 Jiang B Y, Xie L, Wu W Q, et al. Simulation of fountain flow for micro-channel fluid front (in Chinese). *Polym Mater Sci Eng*, 2006, 22: 5–9
[蒋炳炎, 谢磊, 吴旺青, 等. 微尺度流道中流体流动前沿的喷泉流动仿真. 高分子材料科学与工程, 2006, 22: 5–9]
- 146 Dupret F, Vanderschuren L. Calculation of the temperature field in injection molding. *AICHE J*, 1988, 34: 1959–1972
- 147 Crochet M J, Dupret F, Verleye V. Injection molding. In: Advani S G, ed. *Flow and Rheology in Polymer Composites Manufacturing*. Amsterdam: Elsevier, 1994. 442–444
- 148 Yokoi H, Masuda N, Mitsuhashita H. Visualization analysis of flow front behavior during filling process of injection mold cavity by two-axis tracking system. *J Mater Process Tech*, 2002, 130–131: 328–333
- 149 Jong W R, Hwang S S, Wu C C, et al. Using a visualization mold to discuss the influence of gas counter pressure and mold temperature on the fountain flow effect. *Int Polym Proc*, 2018, 33: 255–267
- 150 Rezayat M, Burton T E. A boundary-integral formulation for complex three-dimensional geometries. *Int J Numer Meth Engng*, 1990, 29: 263–273
- 151 Shen C Y. *Theory and Method of Injection Molding Simulation and Mold Optimization Design* (in Chinese). Beijing: Science Press, 2009 [申长雨. 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, 2009]
- 152 Fan Z, Costa F, Zheng R, et al. Three-dimensional warpage simulation for injection molding. In: ANTEC 2004 Conference Proceedings. Brookfield: Society of Plastics Engineers, 2004. 491–495
- 153 Zhang X, Liu Y. *Meshless Methods* (in Chinese). Beijing: Tsinghua University Press, 2004 [张雄, 刘岩. 无网格法. 北京: 清华大学出版社, 2004]
- 154 Bernal F, Kindelan M. An RBF meshless method for injection molding modelling. In: Griebel M, Schweitzer M A, eds. *Meshfree Methods for Partial Differential Equations III*. Berlin: Springer, 2007. 41–56
- 155 Zhang Z J. Meshless method and its application in numerical analysis of injection filling (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Guangzhou: South China University of Technology, 2010 [张祖军. 无网格法及其在注塑充填数值分析中的应用. 博士学位论文. 广州: 华南理工大学, 2010]
- 156 Gingold R A, Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars. *Mon Not R Astron Soc*, 1977, 181: 375–389
- 157 Liu G R, Liu M B. *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method*. New Jersey: World Scientific, 2003
- 158 Fan X J, Tanner R I, Zheng R. Smoothed particle hydrodynamics simulation of non-Newtonian moulding flow. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2010, 165: 219–226
- 159 Jiang T, Ren J L, Xu L, et al. A corrected smoothed particle hydrodynamics approach to solve the non-isothermal non-Newtonian viscous fluid flow problems (in Chinese). *Acta Phys Sin-Ch Ed*, 2014, 63: 210203 [蒋涛, 任金莲, 徐磊, 等. 非等温非牛顿黏性流体流动问题的修正光滑粒子动力学方法模拟. 物理学报, 2014, 63: 210203]
- 160 Xu X, Yu P. Extension of SPH to simulate non-isothermal free surface flows during the injection molding process. *Appl Math Model*, 2019, 73: 715–731
- 161 Yashiro S, Sasaki H, Sakaida Y. Particle simulation for predicting fiber motion in injection molding of short-fiber-reinforced composites. *Compos Part A-Appl Sci Manuf*, 2012, 43: 1754–1764
- 162 He L, Lu G, Chen D, et al. Three-dimensional smoothed particle hydrodynamics simulation for injection molding flow of short fiber-reinforced polymer composites. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2017, 25: 055007

A review on the theories and numerical methods for injection molding simulations

CAO Wei¹, REN MengKe², LIU ChunTai¹, RUAN ShiLun² & SHEN ChangYu^{1,2}

¹ National Engineering Research Center of Mold & Die, Zhengzhou University, Zhengzhou 450002, China;

² Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China

Over the past two decades, numerical simulation of injection molding has made great progress, not only with its increasingly widespread use, but also with problems and challenges such as unreliable simulated performance, difficulty integrating commercial software with new methods, and inadequate consideration of microscopic mechanisms. This paper thoroughly explores the historical development of injection molding theoretical models and the key results of each point, and briefly introduces multiscale simulation methods. The characteristics and spectrum of application of the substance constitutive models are studied, and the effects of crystallization on the state and constitutive equations are demonstrated. Therefore, the characteristics of numerical methods for solving problems with injection molding are analyzed, and the variations between viscous and viscoelastic methods are studied. Analysis of the advantages and disadvantages of methods of flow front monitoring was performed. Also, simulations were implemented with the meshless approach for filling flow for certain special physical phenomena such as the fountain flow. The paper also forecasts the growth patterns and urgent problems of simulating injection molding based on examining and testing existing theories, algorithms, and the real demands of the plastics processing industry.

injection molding, constitutive model, numerical simulation, finite element method, boundary element method, multiscale simulation, meshless method

doi: [10.1360/SST-2019-0389](https://doi.org/10.1360/SST-2019-0389)