

# 三维非牛顿熔体前沿界面的 Level Set/Ghost/SIMPLEC 模拟

崔 鸱 欧阳洁 郑素佩 阮春蕾 张伟

(西北工业大学 710072 西安)

**摘要:** 建立了三维粘性不可压非牛顿流体流动的控制方程, 采用 Level Set/Ghost/SIMPLEC 方法模拟了注塑成型充模阶段的三维流动过程; 追踪到了不同时刻的熔体前沿界面, 预测并分析了流动过程中不同时刻的压力、速度等重要的流动特征参数, 并与牛顿流体相应的流动特征参数做了对比。研究表明: Level Set/Ghost/SIMPLEC 方法可以准确追踪非牛顿熔体前沿界面; 幂律熔体在流动过程中的压差明显大于牛顿熔体的压差, 沿横截面的速度分布也有明显的差别。

**关键词:** Level Set 方法; Ghost fluid 方法; SIMPLEC 方法; 非牛顿熔体; 三维前沿界面

**中图分类号:** TQ320.66; O373

**文献标识码:** A

## 1 引 言

过去二十多年来, 注塑成型流动模拟技术经历了从中面流技术到双面流技术的不断改进和发展, 其中以文献[1]提出的广义 Hele-Shaw 模型最为典型。基于该模型的注塑流动模拟软件能够成功地预测充模过程中的压力场、速度场、温度分布、熔接线位置等信息, 但由于忽略了熔体在厚度方向上速度分量和压力变化, 所得到的信息不够完整。

为了更加真实地反映注塑成型塑料熔体充模过程中的流动行为, 本文对聚合物熔体进行了三维流动分析, 并考虑了各物理量在厚度方向上的变化。三维流动模拟能够得到更加详细的关于流动特征的信息, 可以更加准确地预测充填行为, 目前在这方面的研究已经取得了一些进展<sup>[2-4]</sup>。然而, 与二

维模拟相比, 聚合物熔体充填过程的三维有限元模拟具有信息存储量大、计算耗时长缺点。因此本文采用具有存储少、耗时短等优点的同位网格有限体积法<sup>[5-6]</sup>对三维非牛顿流场进行数值模拟, 以便得到比牛顿流场更接近真实流动行为的流场特征。

在充填过程中, 准确地确定熔体前沿界面的位置可以更好地预测熔接线和气穴的位置, 并判断是否有胀模等缺陷存在。目前聚合物熔体前沿界面追踪方法中比较常用的是 VOF(volume of fluid)方法<sup>[3, 7-8]</sup>。该方法根据熔体体积比值将前沿界面控制在某个区域范围内, 因此其数值精度不高, 不能准确刻画前沿界面的特征。文献[9]提出的 Level Set 方法能够准确追踪产生拐点和尖角以及拓扑变化剧烈的前沿界面。本文采用 Level Set 方法追踪了三

基金项目: 国家自然科学基金重大项目(10590353); 国家自然科学基金(10871159); 国家重点基础研究发展计划(2005CB321704)

来稿日期: 2009-04-03 修回日期: 2010-05-08

第一作者简介: 崔鸱, 男, 1982年生, 西北工业大学理学院, 硕士生; 研究方向—自由界面追踪及其计算方法。

通讯作者: 欧阳洁, E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn

维非牛顿粘性熔体充填过程的前沿界面, 采用 Ghost fluid 方法实现了界面追踪与物理量控制方程的耦合, 并讨论了充填过程中不同时刻的压力、速度等重要流动特征参数。

## 2 数学模型

### 2.1 前沿界面追踪的数学模型

如图 1 所示, 设:  $W_1$ 、 $W_2$  分别为区域  $W$  内两种互不相溶的流体 A、B 在时刻  $t$  所在的区域;  $G(t)$  为两种流体的分界面。

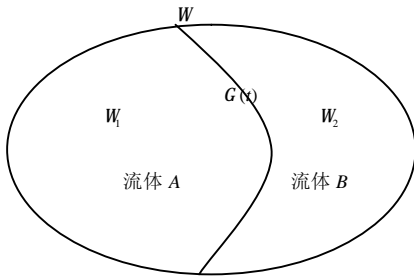


图 1 Level Set 追踪界面示意图

Level Set 方法把随时间运动的熔体前沿界面  $G(t)$  定义为 Level Set 函数  $j$  的零等值面。在初始状态, 将  $j$  定义为点到初始熔体前沿界面的符号距离函数<sup>[10]</sup>, 且有

$$j(x, y, z, 0) = \begin{cases} r, & (x, y, z) \in W_1 \\ 0, & (x, y, z) \in G(0) \\ -r, & (x, y, z) \in W_2 \end{cases} \quad (1)$$

其中  $r$  表示区域  $W$  内任意点  $(x, y, z)$  到  $G(0)$  的距离。

为了保证在任意时刻该函数的零等值面(即前沿界面),  $j$  要满足  $j(x, y, z, t) = 0$ , 从而有

$$\frac{dj}{dt} = \frac{\partial j}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla j = 0 \quad (2)$$

其中流体速度矢量  $\mathbf{V} = \{u, v, w\}$ 。通常该类控制方程有多种形式, 本文主场物理量控制方程是 N-S 方程, 故采用的具体形式为

$$j_t + uj_x + vj_y + wj_z = 0 \quad (3)$$

但由于数值方法的内在效应, 在进行几步甚至一个时间步的求解后, Level Set 函数将不再满足点到界面的符号距离。为了使它继续保持点到界面的符号距离这一良好性质, 需要进行“重新初始化”。这可以通过求解如下偏微分方程初值问题的稳定解来实现<sup>[10]</sup>

$$\frac{\partial j}{\partial t} = \text{sign}(j_0)(1 - |\nabla j|),$$

$$j(x, y, z, 0) = j_0(x, y, z) \quad (4)$$

其中  $\text{sign}(\cdot)$  为符号函数。

### 2.2 注射充模流动数学模型

按照研究聚合物熔体流动时通常采用的简化条件<sup>[11]</sup>, 假设注射过程中熔体是粘性不可压层流且壁面无滑移的非牛顿流体, 并忽略熔体的重力。由此可得到注射充模流动的数学模型。

#### 2.2.1 控制方程

连续性方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5)$$

其中  $\mathbf{u}$  为速度矢量。

动量方程为

$$\mathbf{r}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (2\mathbf{h}\mathbf{e}(\mathbf{u})) - \nabla p \quad (6)$$

其中:  $\mathbf{r}$  为密度;  $p$  为压力;  $\mathbf{e}(\mathbf{u})$  为剪切应变速率, 且满足

$$\mathbf{e}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (7)$$

因聚合物熔体属假塑性流体, 具有剪切变稀的特性, 在成型加工中许多聚合物的流变性质与幂律模型非常吻合, 故用幂律模型描述剪切粘度, 即

$$\mathbf{h} = m \cdot I_2^{(n-1)/2} \quad (8)$$

其中:  $m$  为粘度系数;  $n$  为幂律指数;  $I_2$  为应变张量的第二不变量, 且满足

$$I_2 = 2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 \quad (9)$$

为了便于计算, 对控制方程中的变量进行量纲一化, 可以得到

$$\bar{x} = \frac{x}{H}, \quad \bar{y} = \frac{y}{H}, \quad \bar{z} = \frac{z}{H}, \quad \bar{U} = \frac{U}{\langle U \rangle},$$

$$\bar{p} = \frac{p}{\mathbf{r} \langle U \rangle^2}, \quad \bar{\nabla} = H \nabla, \quad \bar{\mathbf{h}} = \frac{\mathbf{h}}{\mathbf{h}_0} \quad (10)$$

其中:  $H$  为特征长度;  $\langle U \rangle$  为特征速度;  $\mathbf{h}_0$  为零剪切粘度。因此连续性方程(5)、动量方程(6)、幂律粘度模型(8)量纲一化的分量形式分别为(为便于书写, 在不引起歧义的情况下, 取消量纲一化标记)

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (11)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{h}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (12)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{h}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (13)$$

$$u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{h}{Re} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (14)$$

$$h = \frac{m}{h_0} \left( \frac{\langle U \rangle}{H} \right)^{n-1} \cdot I_2^{(n-1)/2} \quad (15)$$

### 2.2.2 边界条件

在入口边界处分别给定  $u$ 、 $v$ 、 $w$ ，并以  $y$  方向为主流动方向；在模壁上速度采用无滑移边界条件，即  $u = v = w = 0$ ，压力采用无渗透边界条件，即  $\frac{\partial p}{\partial n} = 0$ ；熔体前沿界面  $p = 0$ 。

### 2.3 界面附近物理量计算的数学模型

在用 Level Set 方法追踪不同时刻聚合物熔体前沿界面时，界面附近物理量的求解是一个关键问题。因为在求解前沿界面内部的物理量时要用到前沿界面外部物理量的函数值，而前沿界面是两相分割的间断面。假设  $k$  时间层上的函数值已知，在求解  $k+1$  时间层的函数值时，不可以直接利用前沿界面外面的函数值，所以需要先得那些位于前沿界面以外而事实上不存在但又要用到的网格上的函数值。基于 Ghost fluid 方法<sup>[12]</sup>，只需求解如下方程即可。

$$I_t + \mathbf{N} \cdot \nabla I = 0 \quad (16)$$

其中： $I$  为要插值扩展的变量； $\mathbf{N}$  为运动界面的单位外法向量，且  $\mathbf{N} = \frac{\nabla j}{|\nabla j|}$ 。根据式(1)及  $\mathbf{N}$  的定义

可知， $\mathbf{N}$  总是由  $j > 0$  的区域指向  $j < 0$  的区域<sup>[10]</sup>。

在三维情况下，速度有多个方向，将其分解到界面的法线方向  $\mathbf{N}$  和界面的切线方向  $\mathbf{N}^\perp$ ，即

$$\mathbf{v}^n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{N}, \quad \mathbf{v}^t = \mathbf{u} - \mathbf{v}^n \mathbf{N} \quad (17)$$

将方程(16)作用到速度的切向分量  $\mathbf{v}^t$  上，得到“Ghost”网格上速度的切向分量，然后再与真实网格上速度的法向分量合成为“Ghost”网格的整体速度。

## 3 数值方法

Level Set 方程(3)、式(4)及 Ghost 方程(16)均属于 H-J(Hamilton-Jacobi)型方程。对于这类方程的求解，即使在初值条件充分光滑的情况下，虽然可以得到 H-J 方程初值问题的连续解，但其解的导数却是间断的。为实现此类方程的准确求解，许多计算工作者致力于该问题的研究，以寻求具有高分辨率、无振荡等良好性质的算法。基于此，本文选用高精度、高分辨率且数值稳定无振荡的五阶 WENO(weighted essentially non-oscillatory)格式<sup>[13-14]</sup>来进行求解。具体实施方法为：空间方向上采用五阶 WENO 格式进行离散；时间方向上采用三阶 TVD-RK(total variation diminishing-Runge-Kutta)格式进行离散。

### 3.1 物理量控制方程的求解

在本文三维流动数值模拟中，流场物理量的控制方程采用具有存储少、耗时短等诸多优点的同位网格控制体积法进行离散，即计算中将速度、压力等变量置于同一套网格。因为 SIMPLEC 算法比 SIMPLE 算法更加完善，而且实施起来更加方便，故为了提高程序运行的效率，在求解压力与速度的耦合问题时，采用了 SIMPLEC 算法<sup>[15]</sup>。

物理量控制方程的具体计算步骤如下：① 假定初始节点速度  $u^0$ 、 $v^0$ 、 $w^0$  和界面速度  $u_f^0$ 、 $v_f^0$ 、 $w_f^0$  以及  $p^*$ ；② 由假定或上一步的界面速度计算动量离散方程系数和常数项；③ 再根据上一层的  $p^*$ ，求出节点速度  $u^*$ 、 $v^*$ 、 $w^*$ ；④ 求出界面速度  $u_f^*$ 、 $v_f^*$ 、 $w_f^*$ ，从而计算压力校对方程中的源项；⑤ 计算压力修正方程中系数；⑥ 求解压力修正方程，求出节点改进压力；⑦ 计算界面速度修正值  $u_f'$ 、 $v_f'$ 、 $w_f'$ ，计算节点速度修正值  $u'$ 、 $v'$ 、 $w'$ ；⑧ 更新界面速度、节点速度、压力；⑨ 将改进后的压力代替  $p^*$ ，改进后的界面速度和节点速度分别代替  $u_f^0$ 、 $v_f^0$ 、 $w_f^0$  和  $u^0$ 、 $v^0$ 、 $w^0$ ，返回到②重新迭代，直到收敛。

### 3.2 聚合物熔体流动模拟的数值求解流程

用 Level Set/Ghost/SIMPLEC 方法进行非牛顿熔体流动模拟的流程如下。

#### 1) 初始化

初始化所要求的物理量及函数  $j(x, y, z, t)$  由式(1)给出。假设  $t_k$  时刻的物理量值和 Level Set 函

数  $j(x, y, z, t_k)$  已知。

## 2) 求解 Level Set 方程

求解方程(3), 得到下一时刻的 Level Set 函数  $j(x, y, z, t_{k+1})$  在整个求解区域中的值。此时新的运动界面  $G(t_{k+1})$  就是  $j(x, y, z, t_{k+1})$  的零等值面, 即  $G(t_{k+1}) = \{(x, y, z) \in W : j(x, y, z, t_{k+1}) = 0\}$ , 但此时的  $j(x, y, z, t_{k+1})$  已经不再是符号距离函数了。

## 3) 重新初始化

将  $j(x, y, z, t_{k+1})$  代替步骤 4) 中的  $j_0$ , 迭代求解步骤 4) 至稳定解, 仍记为  $j(x, y, z, t_{k+1})$ 。

## 4) 求解物理量的控制方程

结合  $j(x, y, z, t_{k+1})$  的值, 求解主场物理量的控制方程, 得到  $t_{k+1}$  时刻的物理量。在  $j(x, y, z, t_{k+1})$  变号的地方(即界面)采用 Ghost fluid 方法进行特殊处理。

5) 重复步骤 2)~步骤 4), 直至型腔被完全充满。

## 4 结果分析

算例中矩形型腔的长、宽、高分别为:  $10H$ 、 $4H$ 、 $1H$ (其中  $H$  为量纲为一的特征长度), 用内节点法对该型腔进行离散。数值模拟过程中取在  $170^\circ\text{C}$  时 HDPE(High Density Polyethylene) 的物性参数粘度系数  $m = 42000\text{Pa} \cdot \text{s}^n$  (其中幂律指数  $n = 0.4$ )。为了便于进行比较, 牛顿流体的数值模拟在相同的假设、初始条件及边界条件下进行。

图 2 和图 3 分别为不同时刻幂律熔体和牛顿熔体前沿界面的形状和位置(其中  $t$  为量纲为一的时间)。图中阴影区域表示熔体已充填, 白色区域表示未充填区域。由图可以看出: 熔体初始界面近似为球面的一部分; 随着时间的推移, 前沿界面的弯曲程度越来越小, 随着熔体向前流动, 前沿界面逐渐发展为较平滑的曲面, 最后几乎发展成一平面。从它们在初始时刻到  $t = 1$  时刻再到  $t = 14$  时刻之间的变化可以看出: 幂律熔体前沿界面的弯曲程度变化较快, 发展到平滑曲面所用时间较短; 但从充满整个型腔的最后时刻可以看出, 幂律熔体从初始时刻到充满整个型腔所需时间较长。

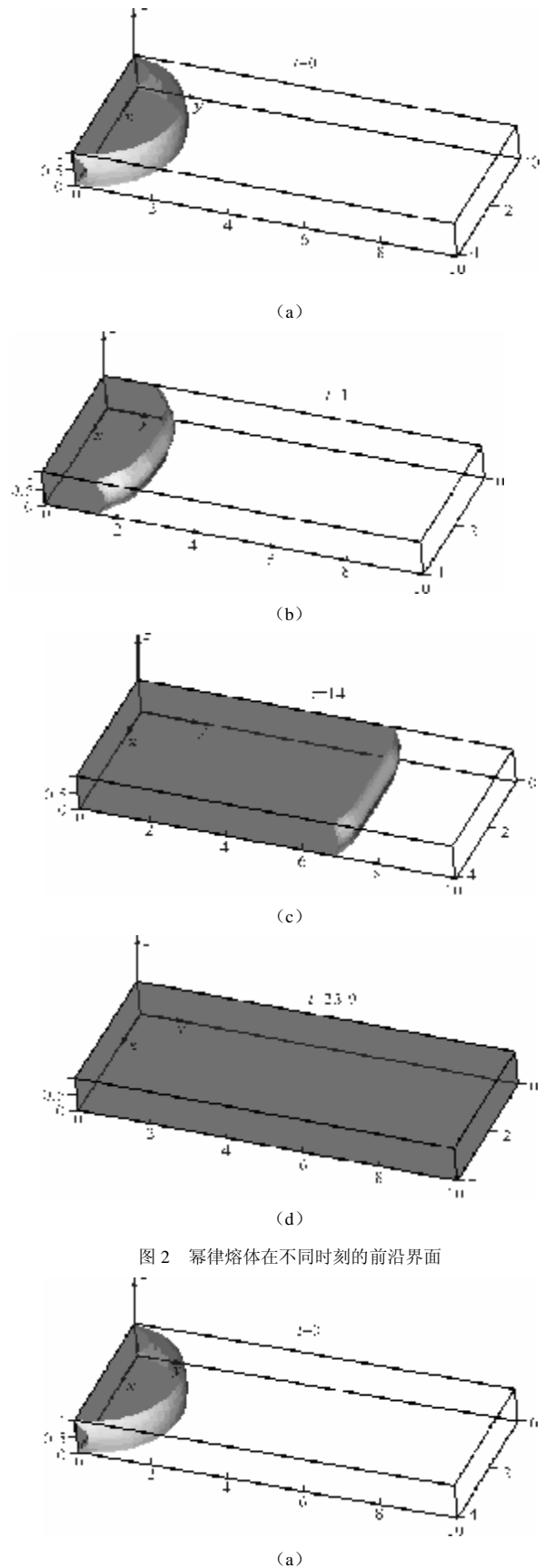


图 2 幂律熔体在不同时刻的前沿界面

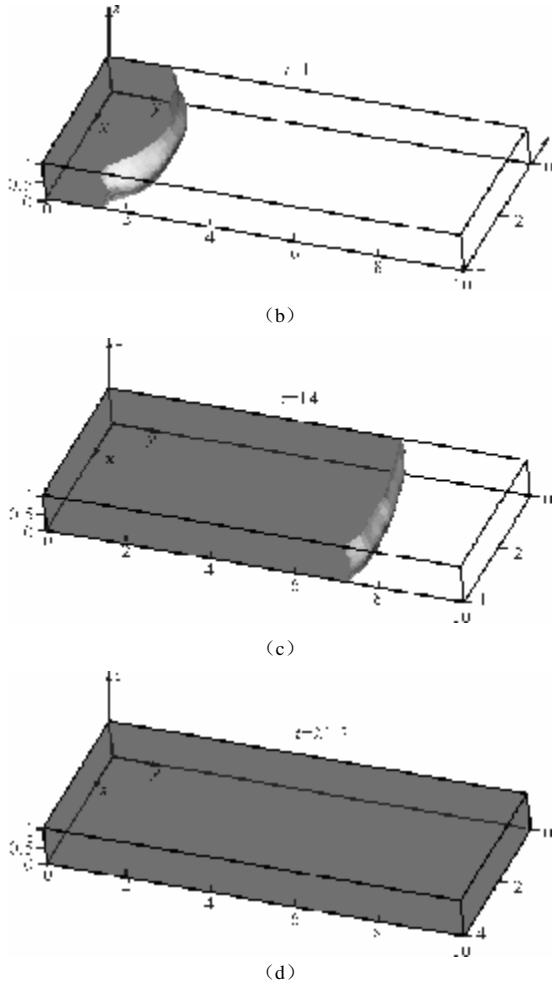


图3 牛顿熔体在不同时刻的前沿界面

图4和图5分别为 $x = 2.0$ 截面上对应时刻幂律熔体和牛顿熔体的压力等值线分布图。从图4可以看出,沿着流体流动方向,随着时间的推移,压力分布逐渐变得均匀;从图5可以看出,牛顿流体的压力分布走势和幂律流体类似。而拥有几乎相同间距的压力等值线间的压差却大不相同,例如在 $t = 1$ 时刻(图4(b)和图5(b)),幂律流体最前面的压差为2302.86,而牛顿流体在相同位置、相同间距上的压差仅为13.0825。

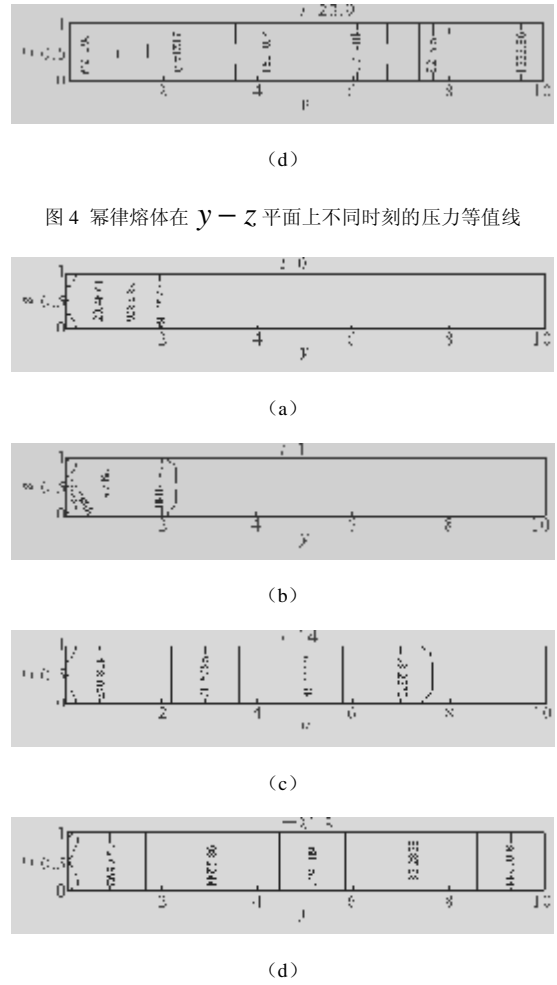
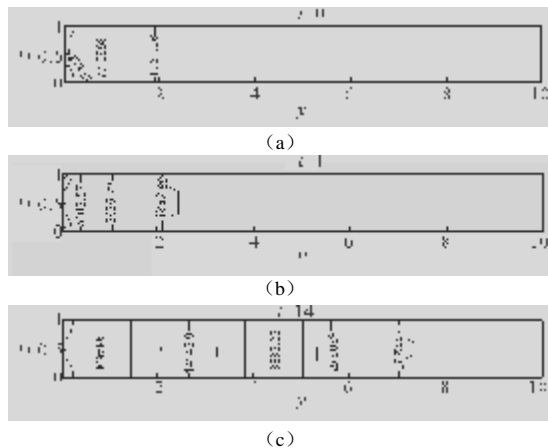
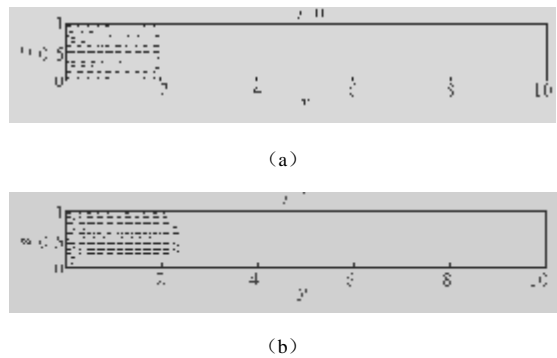


图5 牛顿熔体在 $y-z$ 平面上不同时刻的压力等值线

图6和图7分别为 $z = 0.5$ 截面上不同时刻幂律熔体和牛顿熔体的速度矢量分布图。图中箭头的指向表示速度方向,箭头的长短表示速度的大小。从图中可以看出,与牛顿流体相比,幂律流体的速度分布有较大的不同:图7中牛顿流体沿横截面的速度分布比较均匀;而图6中幂律流体沿横截面的速度分布有着明显的差别,随着时间的推移,型腔中间的流速明显高于边沿处的流速(图6(b)和图6(c))。这就是熔体表现出来的非牛顿行为。



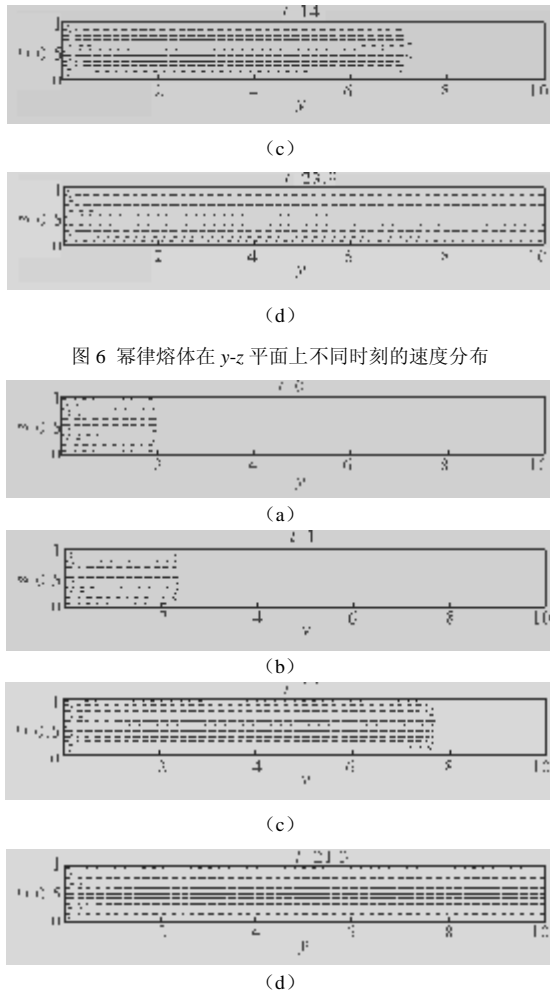
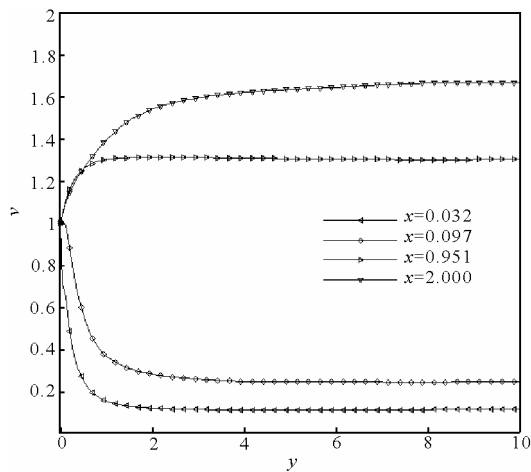


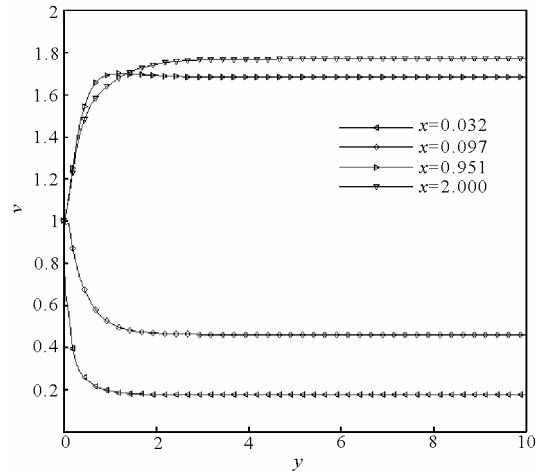
图6 幂律熔体在  $y-z$  平面上不同时刻的速度分布

图7 牛顿熔体在  $y-z$  平面上不同时刻的速度分布

图8为  $z=0.5$  截面上幂律熔体(图8(a))和牛顿熔体(图8(b))充满型腔时流场整体速度沿流动方向的变化趋势。由图中可以看出,与牛顿熔体相比,幂律熔体在  $x-y$  平面内横向速度的变化更加剧烈,这也验证了图6中幂律熔体所表现出来的非牛顿行为。



(a) 幂律熔体的速度分布



(b) 牛顿熔体的速度分布

图8 在  $x-y$  平面上沿流动方向的速度分布

## 5 结论

本文采用 Level Set/Ghost/SIMPLEC 方法对幂律熔体进行了三维流动模拟,准确追踪到了不同时刻的熔体前沿界面,并将幂律熔体在流动过程中的压力、速度等与牛顿熔体进行了比较,这些物理量信息对三维熔接线的研究有很大帮助。分析表明:Level Set/Ghost/SIMPLEC 方法可以准确追踪非牛顿熔体前沿界面;幂律熔体在流动过程中的压差明显大于牛顿熔体的压差;而沿横截面的速度分布也有明显的差别,即随着时间的推移,型腔中间的流速明显高于边沿处的流速,表现出了非牛顿流体的流动行为。

## 参考文献

- [1] Hiber C A, Shen S F. A finite-element/finite-difference simulation of injection molding filling process[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1980, 7(1): 1-32.
- [2] Hwang C J, Kwon T H. A full 3D finite element analysis of the powder injection molding filling process including slip phenomena[J]. Polymer Engineering and Science, 2002, 42 (1): 33-50.
- [3] 曹伟, 王蕊, 申长雨. 塑料熔体在注塑模中的三维流动模拟[J]. 化工学报, 2004, 55 (9): 1493-1498.
- [4] Geng Tie, Li Dequn, Zhou Huamin. Three-dimensional finite element method for the filling simulation of injection molding[J]. Engineering with Computers, 2006, 21(4): 289-295.
- [5] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安:西安交通大学出版社, 2004:

- 245-249.
- [6] 赵智峰, 欧阳洁, 张玲, 等. 嵌件平板收缩流支化聚合物粘弹行为的数值研究[J]. 化工学报, 2008, 59 (4): 843-850.
- [7] Shen Changyu, Zhai Ming. An improved algorithm for the simulation of injection-molding filling process[J]. Journal of Reinforced Plastics and Composites, 2005, 24 (7): 691-698.
- [8] Tavakoli R, Babaei R, Varahram N, et al. Numerical simulation of liquid/gas phase flow during mold filling[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2006, 196(1-3): 697-713.
- [9] Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations[J]. Journal of Computational Physics, 1988, 79 (1): 12-49.
- [10] 刘儒勋, 王志峰. 数值模拟方法和运动界面追踪[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2001: 196-200.
- [11] Kakouris A P. Nonisothermal flow of a generalized power-law fluid in converging sections for rubber extrusion[J]. Polym EngSci, 1987,27(18): 1371-1379.
- [12] Fedkiw R, Aslam T, Merriman B, et al. A non-oscillatory Eulerian approach to inter-faces in multi-material flows:the Ghost Fluid Method[J]. Journal of Computational Physics, 1999,152(2): 457-492.
- [13] 郑素佩, 欧阳洁, 张红平, 等. 带有矩形嵌件薄壁型腔内熔接过程动态模拟[J]. 化工学报, 2008, 59 (1): 232-238.
- [14] Jiang G S, Peng D P. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations[J]. SIAM J Sci Comput, 2000, 21(6):2126-2143.
- [15] 宋道云. 同位网格有限体积算法及其在粘弹性收缩流模拟中的应用研究[D]. 上海: 华东理工大学, 2002.