

Modelvorming van het spuitgietproces : toepassing van visco-elastische constitutieve vergelijkingen

Citation for published version (APA):

Douven, L. F. A. (1988). *Modelvorming van het spuitgietproces : toepassing van visco-elastische constitutieve vergelijkingen*. (DCT rapporten; Vol. 1988.043). Technische Universiteit Eindhoven.

Document status and date:

Gepubliceerd: 01/01/1988

Document Version:

Uitgevers PDF, ook bekend als Version of Record

Please check the document version of this publication:

- A submitted manuscript is the version of the article upon submission and before peer-review. There can be important differences between the submitted version and the official published version of record. People interested in the research are advised to contact the author for the final version of the publication, or visit the DOI to the publisher's website.
- The final author version and the galley proof are versions of the publication after peer review.
- The final published version features the final layout of the paper including the volume, issue and page numbers.

[Link to publication](#)

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal.

If the publication is distributed under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license above, please follow below link for the End User Agreement:

www.tue.nl/taverne

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us at:

openaccess@tue.nl

providing details and we will investigate your claim.

Modelvorming van het spuitgietproces,
toepassing van visco—elastische
constitutieve vergelijkingen

L.F.A. Douven April 1988

W.F.W. 88.043

Inhoudsopgave

Samenvatting	1
0. Inleiding	1
1. Spuitgieten	2
1.1 Stand van zaken betreffende modelvorming	3
1.2 Bespreking van enkele fenomenen die optreden tijdens spuitgieten.	7
2. Een visco-elastic model toegepast bij spuitgiet simulatie programmatuur	10
2.1 Visco-elastic model	11
2.2 Reconstructie van deeltjesbanen in spuitgiet simulatie programmatuur	12
2.3 De 'linear stress optical rule'	17
3. Berekeningen	17
4. Afsluiting en conclusies	21
5. Literatuur	22
Bijlage met figuren	
Appendix 1	Uitdrukkingen voor de relevante spanningscomponenten
Appendix 2	Een uitdrukking voor de spanning onder stationaire, isotherme afschuiving

Samenvatting

Dit rapport behandelt de toepassing van een visco-elastisch materiaalmodel bij de modelvorming van het spuitgietproces. Het doel hiervan is het voorspellen van oriëntatie in een spuitgietproduct.

In hoofdstuk 1 wordt een globaal overzicht gegeven van de modelvorming van het spuitgietproces, gebaseerd op de continuümsmechanica. De optredende problemen worden kort toegelicht. Een van de aspecten die aan de orde komt, is de oriëntatie van macromoleculen in een spuitgietproduct. Het verband hiervan met de optredende spanningen en de elastische eigenschappen van de polymeersmelt wordt genoemd.

In hoofdstuk 2 wordt een visco-elastisch materiaalmodel geïntroduceerd. De manier waarop dit model numeriek is uitgewerkt en in de bestaande spuitgiet simulatie programmatuur is ingebouwd, wordt behandeld. Tenslotte wordt m.b.v. de zgn. 'linear stress optical rule', het verband gelegd tussen spanningen en dubbele breking, die beiden het gevolg zijn van oriëntatie.

In hoofdstuk 3 worden enkele berekeningen gepresenteerd. De resultaten worden vergeleken met gemeten en berekende resultaten uit de literatuur.

In hoofdstuk 4 worden conclusies en aanbevelingen gegeven.

0. Inleiding

Dit rapport doet verslag van werkzaamheden die zijn verricht in het kader van het IOP-project spuitgieten.

Het spuitgietproces is een complex proces en kan via verschillende wegen worden bestudeerd.

- bv. * Machine georiënteerde aanpak:, hierbij wordt getracht door de sturing van de spuitgietmachine te verbeteren, de productkwaliteit te verhogen. Genoemd wordt het aanpassen van de voorgeschreven druk op het moment dat de nadrukfase begint, op basis van het signaal van een drukopnemer in de matrijs en een gestuurde afkoeling van het product door de matrijstemperatuur te regelen
- * Materiaal-georiënteerde aanpak:, hierbij wordt getracht de productkwaliteit te verbeteren d.m.v. het ontwikkelen van nieuwe

materialen, die minder de nadelen van het spuitgietproces ondervinden. Gewenst is dan bv. een lage viscositeit.

- * Modelvorming op basis van continuümsmechanica. Hierbij is één mogelijke weg, het gedrag van het polymeer in de matrijs te beschrijven, teneinde producteigenschappen te relateren aan procescondities en materiaaleigenschappen.
- * ...

Het voorafgaande geeft aan dat een multi-disciplinaire aanpak bij de bestudering van het spuitgietproces is vereist. Dit rapport zal aandacht besteden aan modelvorming van het SGP, de nadruk ligt op de toepassing van visco-elastische materiaalmodellen bij het voorspellen van oriëntatie in een product.

Er zijn twee soorten spanningen die bij spuitgieten optreden. Ten eerste stromingsgeïnduceerde spanningen (zgn. entropic stresses) en ten tweede krimpspanningen als gevolg van inhomogene afkoeling van het product (zgn. enthaplic stresses). Optredende krimpspanningen worden nog niet in het ontwikkelde model meegenomen.

M.b.v. een empirische wet de zgn. 'linear stress optical rule', kunnen de spanningen in een doorzichtig kunststof product, gekoppeld worden aan de brekingsindices in dit product. De evenredigheidsconstante, de zgn. spannings-optische coëfficiënt, is sterk temperatuurafhankelijk. Doorgaans kan gesteld worden dat de thermische spanningen absoluut groter zijn dan de stromingsgeïnduceerde spanningen. Daar beide soorten spanningen bij verschillende temperaturen ontstaan, is hun invloed op de brekingsindices verschillend van hun invloed op de totale spanningstoestand.

1. Spuitgieten

Spuitgieten is een van de belangrijkste productietechnieken ter vervaardiging van dunwandige producten uit kunststof. Tijdens het SGP van thermoplasten kunnen drie fasen worden onderscheiden:

1. injectiefase
2. nadrukfase
3. afkoelfase

Tijdens de injectiefase wordt de gekoelde matrijs (temp: ± 50 °C) gevuld met gesmolten polymeer (temp: ± 200 – 300 °C). De temperatuur van de matrijs ligt beneden de glasovergangs-temperatuur (bij amorfe materialen) c.q. kristallisatie-temperatuur (bij semi-kristallijne materialen). Dit betekent dat het polymeer stolt zodra het in contact komt met de matrijswand.

Tijdens de nadrukfase wordt het polymeer in de matrijs onder grote druk gebracht. Hierdoor kan de volumekrimp, die t.g.v. afkoeling ontstaat, via navoeding gecompenseerd worden.

De afkoelfase begint formeel als de aanspuiting dicht vriest. Nu kan geen polymeer meer worden nagevuld; de optredende krimp kan niet meer worden opgevangen. Als het product voldoende is afgekoeld, wordt de matrijs geopend en het product wordt uitgestoten.

1.1 Stand van zaken betreffende modelvorming.

Bij de modellering van het SGP wordt gebruik gemaakt van de continuüms-mechanica om achtereenvolgens de injectie-, nadruk-, en afkoelfase te beschrijven.

De behoudswetten vormen samen met de constitutieve vergelijkingen – deze laatsten beschrijven het materiaalgedrag – een stelsel partiële niet-lineaire gekoppelde differentiaalvergelijkingen. Van dit stelsel worden langs numerieke weg benaderingsoplossingen bepaald.

Een groot probleem bij de modelvorming van het SGP vormt de karakterisering van het materiaalgedrag onder de condities zoals die bij het spuitgieten optreden.

Er wordt nu, aan de hand van de relevante termen in de behoudswetten, nagegaan wat er in de verschillende stadia van het SGP gebeurt. Hierbij wordt ook de modellering van het materiaalgedrag behandeld. Er wordt uitgegaan van thermoplastisch materiaal. In eerste instantie wordt uitgegaan van eenvoudige

geometriën, waarbij de kanaalbenadering mag worden toegepast. In het geval van stroming tussen twee platen wordt een Carthesisch assenstelsel gedefinieerd:

- x : stromingsrichting,
 y : indifferente richting,
 z : gradiënricting.

Op deze wijze kan ook de stroming in een centraal aangespoten schijf en de stroming in een centraal aangespoten conus-wand worden beschreven (zie fig. 1 en Sitters, [1]).

Hieronder volgen de behoudswetten, met hierin de constitutieve relaties gesubstitueert, t.o.v. een Carthesisch coördinatenstelsel. Er is gebruik gemaakt van de kanaalbenadering. Deze houdt in dat de afmetingen in gradiënricting vele malen kleiner zijn dan de afmetingen in de andere coördinaatrichtingen (Sitters, [21]).

In de vloeistof (l):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = 0 \quad (\text{W.v.B.v.M.}) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \quad ; \quad \frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (\text{W.v.B.v.I.}) \quad (1.2)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) + \eta \dot{\gamma}^2 +$$

$$- \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial t} + v_x \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (\text{W.v.B.v.E.}) \quad (1.3)$$

in de vaste stof (s):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{W.v.B.v.M.}) \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (\text{W.v.B.v.I.}) \quad (1.5)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) - \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{W.v.B.v.E.}) \quad (1.6)$$

sprongrelaties (Deze gelden op het stolfront dat de vloeibare fase scheidt van de vaste fase.):

$$\rho^s (u_z - v_z^s) - \rho^l (u_z - v_z^l) = 0 \quad (1.7)$$

$$p^s - p^l = 0 \quad (1.8)$$

$$\left(\Gamma + \frac{\rho^s - \rho^l}{\rho^s \rho^l} p \right) \rho^s (u_z - v_z^s) + \left(-\lambda^s \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^s + \lambda^l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^l \right) = 0 \quad (1.9)$$

met :	ρ	: dichtheid	ML^{-3}
	v_i	: snelheidscomponent	MT^{-1}
	p	: druk	$ML^{-1}T^{-2}$
	$\dot{\gamma}$: afschuifsnelheid : $(2\mathbf{D}:\mathbf{D})^{1/2}$	T^{-1}
		met $\mathbf{D} = 1/2((\vec{\nabla} \vec{v}) + (\vec{\nabla} \vec{v})^c)$ (deformatiesnelheidstensor)	
	η	: viscositeit	$ML^{-1}T^{-1}$
	T	: temperatuur	K
	c_p	: specifieke warmtecapaciteit	
		bij constante druk	$L^2T^{-2}K^{-1}$
	λ	: warmtegeleidingscoëfficiënt	$MLT^{-3}K^{-1}$
	Γ	: specifieke stolwarmte	L^2T^{-2}
	u_z	: ruimtelijke snelheid van de stollaag in dikte-richting	LT^{-1}

N.B. $\dot{\gamma}$ is uitgeschreven t.o.v. een Carthesisch assenstelsel in het geval van

eenvoudige afschuifstroming als volgt gedefinieerd:

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial v_x}{\partial z} \quad (1.10)$$

Dit stelsel vergelijkingen wordt nu in onderstaande tekst toegelicht.

In de injectiefase vindt transport van massa, impuls en energie plaats. Het materiaal gedraagt zich hierbij i.h.a. compressibel; de dichtheid is een functie van temperatuur, druk en afkoelsnelheid. In modellen van de injectiefase rekent men doorgaans met incompressibel materiaalgedrag.

In de W.v.B.v.I (1.2&5) kunnen traagheidstermen en volumebelastingen verwaarloosd worden. Doorgaans wordt de elasticiteit van de polymeersmelt niet in de beschouwing meegenomen. Er wordt uitgegaan van zuiver visceus gedrag. (Voor een uitvoerige beschrijving van het (visco-) elastisch gedrag van polymeren wordt verwezen naar Bird et al. [2].) De viscositeit wordt afhankelijk verondersteld van druk, afschuifsnellheid en temperatuur. Dit is een voorbeeld van een gegeneraliseerd Newtons vloeistofmodel.

De W.v.B.v.E. (1.3&6) is instationair. Er vindt convectie in stromings- en in gradiënt- richting plaats. Voorts zijn er termen die de geleiding in gradiëntrichting resp. de warmte-effecten t.g.v. volumeveranderingen representeren. De thermische materiaaleigenschappen zijn in principe ook allen afhankelijk van druk en temperatuur.

Omdat de matrijswanden gekoeld worden beneden de 'stoltemperatuur' van het geïnjecteerde polymeer, zal er al tijdens het vullen van de matrijs, aan de wand, stolling optreden. In de gebiedjes vaste stof aan de wanden, wordt in het model de snelheid in stromingsrichting nul gesteld. Dit houdt in dat convectietermen in stromingsrichting alsmede de visceuse dissipatieterm uit de vergelijkingen wegvallen. Op de stollaag gelden overgangscondities voor de snelheid in gradiëntrichting v_z , de druk p en de temperatuur T .

Tijdens de injectiefase gelden de volgende randvoorwaarden. Bij de aanspuiting wordt de temperatuur en de volumestroom voorgeschreven. Tijdens het vullen kan de druk aan de injectieplaats gelijk worden aan de maximale machinedruk. In dat geval wordt bij de aanspuiting de maximale druk voorgeschreven. Aan de matrijswand wordt de temperatuur voorgeschreven. Op het stolfront is de temperatuur bekend. Aan het front van de stroming geldt de atmosferische druk.

De stroming in het frontgebied wordt niet exact bepaald, doch met een eenvoudig model beschreven.

Als de matrijs volledig gevuld is begint de nadrukfase. Tijdens deze fase wordt aan de aanspuiting niet meer de volumestroom maar de druk voorgeschreven. Krimp t.g.v. afkoeling wordt tijdens de nadrukfase geheel opgevangen door materiaal aan de matrijs toe te voegen.

De afkoelfase begint in een vloeibaar gebied zodra dit materiaal is afgesloten van de aanspuiting. Duidelijk is dat op het moment dat de aanspuiting dicht vriest, overal in de matrijs de nadrukfase voorbij is. Tijdens het nadrukken heerst er in het hele product een min of meer constante druk, die tijdens de afkoelfase t.g.v. krimp zeer snel daalt. Krimp t.g.v. afkoelen kan in de afkoelfase niet meer worden opgevangen door materiaaltoevoer, hierdoor ontstaan krimpspanningen. Als het product tenslotte uit de matrijs wordt gelost, zal het vervormen.

Bij modelvorming van het SGP beperkt men zich doorgaans tot de injectiefase. Het vulbeeld (en evt. vloeinaden) kan redelijk goed worden voorspeld. Voor het nadrukken en afkoelen worden doorgaans eenvoudige modellen toegepast met als doel meer inzicht te krijgen in de grootheden die een rol spelen.

Een groot probleem wordt gevormd door het feit dat metingen zeer moeilijk zijn uit te voeren. Bv. het bepalen van de dichtheid onder condities zoals die bij het SGP (zeer grote afkoelsnelheden) optreden is nog niet gedaan.

1.2 Bespreking van enkele fenomenen die optreden tijdens spuitgieten.

In deze paragraaf worden enkele belangrijke aspecten genoemd en nader toegelicht.

1. stroming aan het front

Tijdens het injecteren ondergaat het polymeer in hoofdzaak afschuiving. Bij radiale stroming zal in tangentiële richting ook zgn. rekstroming optreden. In het front van de stroming treedt ook een zeer sterke rekstroming op: het zgn. 'fonteinffect'. De stroming aan het vloeifront, daar waar geen volledig ontwikkelde afschuifstroming heerst, heeft een lengte van ongeveer twee maal de halve

kanaalhoogte. Het effect van de rekstroming in het vloeifront is in het algemeen vrij gering, aangezien de elastische spanningen vrij snel weg relaxeren. Alleen in het laagje dat direct tegen de koude matrijswand ingevroren wordt, zal een grote oriëntatie vertonen.

De vorm van het vloeifront is onbekend; deze wordt doorgaans als cirkelvormig beschouwd (zie figuur 2). Mavridis et al.[3], bevestigen deze aanname. Zij tonen m.b.v. FEM-berekeningen aan dat voor verschillende visceuse vloeistofmodellen (gegeneraliseerd Newtons), in het geval van isotherme stroming, bij vlakke plaatstroming en axisymmetrische stroming, het vloeifront een halve cirkel redelijk benaderd.

De snelheid in stromingsrichting varieert met de z -coördinaat. Aan de wand (of aan het stolfront) wordt ervan uitgegaan dat er geen slip optreedt. Men kan de z -coördinaat h_1 bepalen, waar de snelheid gelijk is aan de gemiddelde snelheid (zie figuur 3):

$$\bar{v} = (1/h) \int_{z=0}^h v_x(x, z) dz \quad (1.11)$$

$$v_x(x, h_1) = \bar{v}$$

Deze gemiddelde snelheid is de snelheid waarmee het vloeifront zich door de matrijs beweegt, als gemakshalve uitgegaan wordt van incompressibel materiaalgedrag. Alle deeltjes met $z < h_1$ hebben een snelheid die groter is dan die van het front. Deze deeltjes halen het front dus op den duur in. Als deze deeltjes in de frontstroming zitten, worden ze uit het centrum van de stroming, naar buiten gedrongen. Hierna verlaat zo' n deeltje het frontgebied met een snelheid die kleiner is dan de gemiddelde snelheid; het deeltje heeft nu een snelheid die lager is dan die van het front. Deeltjes die zich in het centrum van de stroming voortbewegen worden in het front direct tegen de wand aangelegd en vriezen terstond in. Zij worden ingevroren in een niet-evenwichtstoestand. Figuur 4 toont de snelheidsverdeling en het stroomlijnenpatroon in het front van de stroming, t.o.v. een met het vloeifront meebewegend stelsel.

De stroming in het frontgebied wordt op een eenvoudige manier in het numerieke model meegenomen.

2. oriëntatie

De bindingshoek θ ('bond angle'), is de hoek tussen twee ketensegmenten. φ , de zgn. 'internal angle of rotation of the bond', is de hoek waarover BC geroteerd is t.o.v. AB (zie figuur 5). De hoek φ wordt zo bepaald dat de potentiële energie van de binding minimaal is. Het is bij een gegeven aantal monomeer-moleculen, lengte van het monomeer-molecuul, θ en de gemiddelde waarde van φ , mogelijk om te voorspellen wat de gemiddelde lengte tussen begin- en eindpunt van zo' n keten is.

Polymeermoleculen bezitten onder evenwichtscondities (o.a. spanningsloos) de zgn. 'random coil'-configuratie, d.w.z. dat de relatief lange moleculen ($O(\mu\text{m})$) geen voorkeursrichting hebben. Tijdens het spuitgieten worden de macromoleculen in stromingsrichting gestrekt; er wordt een zekere oriëntatie geïntroduceerd. Als gevolg hiervan, vertoont het gesputgiete product anisotrope eigenschappen. De genoemde anisotropie van mechanische, optische en thermische eigenschappen is doorgaans ongewenst.

Er is een effect op moleculair niveau, de zgn. 'Brownse beweging' die ernaar streeft om moleculen een random oriëntatie te geven. Dit elastische gedrag van het polymeer werkt de door stroming geïntroduceerde oriëntatie tegen. Tijdens het spuitgieten is de tijd echter te kort om volledige relaxatie van de oriëntatie te laten plaatsvinden.

In doorzichtige producten heeft de oriëntatie van de polymeermoleculen dikwijls dubbele breking tot gevolg. Deze dubbele breking kan experimenteel nauwkeurig worden bepaald. De dubbele breking kan ook worden berekend. Via een visco-elastische constitutieve vergelijking kunnen de optredende spanningen in de vloeistof worden bepaald. Vervolgens kan m.b.v. een empirische wet, de zgn. 'linear stress optical rule', de dubbele breking bepaald worden en geconfronteerd worden met de gemeten waarden. De 'linear stress-optical relation' stelt een lineair verband tussen de deviatorische spanningstensor en de deviatorische brekingsindextensor. De door de stroming veroorzaakte spanning en het optreden van dubbele breking, worden veroorzaakt door hetzelfde fysische proces, nl. oriëntatie van macromoleculen. M.b.v. dit verband is het mogelijk om mechanische spanningen en dubbele breking in elkaar uit te drukken.

3. inhomogene afkoeling en krimp.

De polymeersmelt die in de koude matrix wordt gespoten koelt af onder grote temperatuurgradiënten ($\partial T/\partial z$) t.g.v. de slechte warmtegeleiding van het polymeer. De aan de wand gelegen lagen koelen het eerst af en stollen, terwijl de bulk nog een

temperatuur heeft die boven de 'stoltemperatuur' ligt. Tijdens de nadruk- en afkoelfase zal het polymeer verder in temperatuur afnemen. Hierbij komt de bulk onder trek en de buitenlagen onder druk te staan, er ontstaan krimpspanningen. Absoluut gezien zijn de krimpspanningen veel groter dan de stromingsgeïnduceerde spanningen. De bijdrage van de krimpspanningen aan de dubbele breking is echter kleiner dan die van de stromingsgeïnduceerde spanningen, daar de spannings-optische coëfficiënt beneden T_g sterk daalt.

In eenvoudige beschouwingen gaat men ervan uit dat het materiaal in dikte-richting vrij kan krimpen (geen spanningsopbouw in deze richting), terwijl het materiaal in het vlak loodrecht op de dikte-richting ingeklemd is en dus in deze richting spanning opbouwt.

De dichtheid van een polymeer hangt o.a. af van druk en temperatuur. Aangezien druk en temperatuur in de gevulde matrijs per punt verschillen, zal ook de dichtheid per punt verschillend zijn. In figuur 6 wordt een $P-\nu-T$ -diagram voor een amorf en een semi-kristallijn polymeer getoond ($\rho = 1/\nu$). Deze diagrammen zijn zgn. evenwichtsdiagrammen, ze gelden voor langzame afkoel- c.q. opwarmsnelheden. In het geval van een snelle afkoeling zoals bij het spuitgieten optreedt, is de dichtheid van het materiaal dat wordt ingevroren kleiner dan in het geval van afkoeling volgens een evenwichtslijn. Er ontstaat dus een niet-evenwichts situatie. Als gevolg hiervan zal er nakristallisatie en fysische veroudering optreden.

2. Een visco-elastisch materiaalmodel toegepast bij spuitgietsimulatie programmatuur.

Het inbouwen van een visco-elastische constitutieve vergelijking in de bestaande programmatuur, brengt een aantal problemen mee. De rekentijd zal aanzienlijk stijgen en als de invloed van de elastische eigenschappen van de polymeersmelt te groot wordt, zullen numerieke problemen optreden (Crochet, [4]).

Er is derhalve voor een alternatieve werkwijze gekozen, waarbij ervan uit wordt gegaan dat de invloed van de elasticiteit van het polymeer op de impulsbalans te verwaarlozen is! Deze werkwijze houdt in dat het snelheidsveld met een visceuze constitutieve vergelijking bepaald wordt en vervolgens ingevuld wordt in de visco-elastische constitutieve vergelijking.

2.1 Visco-elastic materiaalmodel.

Er is gekozen voor een visco-elastiche constitutieve vergelijking die aangeduid wordt als Codeformational/Type A. Dit is een niet-lineair integraalmodel waarin de covariante tijdsafgeleide wordt gebruikt (Walters, [5], Fredrickson, [6]). De relaxatiefunctie hoort bij n parallel geschakelde Maxwell modellen (Zie figuur 7). en hangt af van temperatuur, druk en de afschuifsnelheid (Matsui & Bogue, [20], Lamers, [7]).

$$\sigma(t) = (1/2) \int_{-\infty}^t G(t-t', T, p, \dot{\gamma}) \dot{C}_t(t') dt' \quad (2.1)$$

$$\text{met } G(t-t', T, p, \dot{\gamma}) = \sum_{j=1}^n 2(\eta_j(t')/\lambda_j(t')) \exp\left(-\int_{t'}^t dt''/\lambda_j(t'')\right)$$

Hierin is σ de Cauchy spanningstensor, C_t de relatieve rechtse Cauchy-Green rektensor, gedefinieerd als $F_t^c \cdot F_t$ (F_t is de relatieve deformatietensor) en G de relaxatiefunctie. λ_j en η_j zijn de relaxatietijd respectievelijk de viscositeit van het j^e Maxwell-element (zie figuur 7). Partiële integratie levert:

$$\sigma(t) = (1/2)G(0) I + (1/2) \int_{-\infty}^t M(t-t') C_t(t') dt' \quad (2.2)$$

$$\text{met } M(t-t') = -dG(t-t')/dt' : \text{ de 'memory'-functie}$$

$$\begin{aligned} \text{met } M(t-t', T, p, \dot{\gamma}) &= \sum_{j=1}^n -2 \exp\left(-\int_{t'}^t dt''/\lambda_j(t'')\right) \cdot \\ &\quad \cdot ((\eta_j(1-\lambda_j) + \dot{\eta}_j \lambda_j)/\lambda_j^2) . \end{aligned}$$

De rekstroming die bij radiale stroming optreedt, wordt niet meegenomen, evenals de rekstroming in het front van de stroming. De materiaalfuncties voor

rekstroming zijn schaars en de deformatie in het front is moeilijk te beschrijven. Zoals eerder genoemd, zal de bijdrage van de frontstroming slechts in het buitenste laagje van het product belangrijk zijn. Oriëntatie t.g.v. de deformatie in het front wordt beschreven door Tadmor [8]. In C_t wordt dus alleen afschuifstroming beschouwd. De gebruikte materiaalfuncties hebben steeds betrekking op stationaire afschuifstroming.

Het oplosproces wordt in de tijd gediscetiseerd. Veronderstel dat het oplosproces tot tijdstip t_i is gevorderd. De spanningen op de tijdstippen t_1 tot en met t_{i-1} zijn dan bekend. Vergelijking (2.1) kan worden omgewerkt tot:

$$\begin{aligned} \sigma_j(t_i) = & (\eta_j(t_i)/\lambda_j(t_i)) \mathbf{I} - \exp\left(-\int_t^{t_i} dt''/\lambda(t'')\right) & (2.3) \\ & \mathbf{F}_{t_i}^c(t_{i-1}) \cdot (-\sigma_j(t_{i-1}) + (\eta_j(t_{i-1})/\lambda_j(t_{i-1})) \mathbf{I}) \cdot \mathbf{F}_{t_i}(t_{i-1}) + \\ & - \int_{t_{i-1}}^{t_i} \exp\left(-\int_t^{t_i} dt''/\lambda(t'')\right) ((\eta_j(1-\lambda_j) + \dot{\eta}_j \lambda_j)/\lambda_j^2) \mathbf{C}_{t_i}(t') dt' \\ \text{met } \sigma(t_i) = & \sum_{j=1}^n \sigma_j(t_i) . \end{aligned}$$

2.2 Reconstructie van deeltjesbanen in spuitgiet simulatie programmatuur.

Vergelijking (2.3) geeft de spanning in materiële punten (voor het gemak zijn in het voorgaande de materiële coördinaten als onafhankelijke variabelen weggelaten). Aangezien het spuitgiet simulatie programma waarin het visco-elastische materiaalmodel wordt ingebouwd, uitgaat van een 'Eulerse' (ruimtelijke) beschrijvingswijze, moet de baan van een materieel deeltje in de stroming worden gereconstrueerd teneinde de spanning in dit deeltje te kunnen bepalen.

De tweedimensionale geometriën (zie figuur 1) worden gediscetiseerd m.b.v. de Eindige Differentie Methode (EDM). Het vullen van de matrijsholte wordt in een aantal discrete tijdstappen doorgerekend. De volumestroom aan de aanspuiting is constant. Voor ieder tijdstip tijdens het vullen is de plaats van het front van de

stroming bekend. Bij stroming in de hier beschouwde geometriën is er immers maar één stromingsrichting; met compressibiliteit wordt geen rekening gehouden. Op een afstand, die gelijk is aan de kanaalhoogte, van het front nemen we een volledig ontwikkelde afschuifstroming aan (zie ook figuur 2). Op deze x -coördinaat die het gebied van de frontstroming op een zeker tijdstip begrensd, wordt een gridlijn aangebracht. Deze wordt in gradiëntrichting verdeeld door een vast aantal gridpunten in zowel vloeistof- als gestold domein. Dit resulteert in een grid zoals in figuur 8.; elke tijdstap komt er dus een gridlijn bij.

Het stelsel vergelijkingen (1.1 t/m 9) met bijbehorende begin- en randvoorwaarden wordt per gridlijn opgelost voor een zeker tijdstip.

In principe moet bepaald worden waar de materiële deeltjes die zich op het huidige tijdstip in de gridpunten bevinden vandaan komen. Vergelijking (2.3) toont dat de baan van zo'n deeltje slechts tot een tijdstip terug moet worden gevolgd. Zie figuur 9. Hierin is de baan aangegeven voor een griddeeltje met een grote snelheid (baan 1-2-3-4) en voor een griddeeltje met een kleine snelheid (baan 1-2'). Aangezien het oplosproces op een bepaald tijdstip per gridlijn wordt uitgevoerd, kan in het eerste geval worden volstaan met het terugzoeken tot punt 2. De toestand in dit punt (gridlijn $k-1$) is immers bekend op het moment dat de toestand op gridlijn k wordt bepaald.

Voordat wordt ingegaan op de techniek van het reconstrueren van de baan van deeltjes, wordt kort de bepaling van $F_{t_i}(t')$ behandeld.

$$\vec{x}_{t'} = \vec{x}_{t_i} - \vec{v}_{t_i}(t_i - t') \quad \text{voor } t_{i-1} \leq t' \leq t_i \quad (2.4)$$

$$F_{t_i}(t') = I - (\vec{\nabla} \vec{v})_{t_i}^c(t_i - t') \quad (2.5)$$

De matrixrepresentatie ziet er voor een eenvoudige afschuifstroming als volgt uit:

$$F_{t_i}(t') = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -(\partial v_x / \partial z)_{t_i}(t_i - t') \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Er wordt dus een impliciete werkwijze gehanteerd. Dit houdt in dat m.b.v. de huidige snelheid, die tijdens een tijdsinterval constant wordt verondersteld, wordt teruggezocht. Met (2.3&6) kunnen nu de relevante componenten van σ (σ_{xz} en σ_{zz}) worden bepaald (zie Appendix 1).

Er worden nu eerst enkele begrippen geïntroduceerd.
 het huidig tijdstip wordt aangeduid met: k , $1 \leq k \leq nt$.
 gridlijnummer (strom. rich.) wordt aangeduid met: l , $1 \leq l \leq k$.
 gridpuntnummer (grad. rich.) wordt aangeduid met: j , $1 \leq j \leq nm$ (vloeistof);
 $nm+1 \leq j \leq nz$ (vaste stof).

Een eigenschap a in een gridpunt op het huidig tijdstip wordt aangeduid met: $a_{l,j}^k$.
 N.B. In gradiëntrichting wordt de matrijsholte slechts over de halve dikte doorgerekend (symmetrische koeling). Gridpunt 1 : centrum ; gridpunt nz : wand.

Opgemerkt wordt dat bij de aanspuiting wordt verondersteld dat het polymeer stationaire isotherme afschuiving heeft ondergaan (zie Appendix 2).

1. $2 < l < k-1$ en $1 < j < nm-1$

Zie figuur 10. In het vervolg wordt ervan uitgegaan dat het rekenproces is evorderd tot tijdstip k . Voor gridpunt j wordt als volgt te werk gegaan:

$$\Delta x_1 = x_1 - v_{x_1}^k \Delta t_k \qquad \Delta x = x_1 - x_{l-1}$$

$$\Delta x_1 > \Delta x$$

ja (D) nee (E)

$$\Delta x_1 = \Delta x ; \Delta t_1 = \Delta x / v_{x_1}^k$$

$$\Delta z_1 = v_{z_1}^k \Delta t_1 \qquad \Delta z_1 = v_{z_1}^k \Delta t_k$$

interpoleren tussen A en B

interpoleren tussen B en C

2. $2 < l < k-1$ en $nm+1 < j < nz$

Er wordt uitgegaan van een continu aangroeiende stollaag. Op $t = t^k$ geldt voor

de griddeeltjes van gridlijn l dat zij die voldoen aan: $z_{1,nm}^{k-1} \leq z_{1,j}^k \leq h_1$, ook al op tijdstip $k-1$ in de stollaag lagen (zie figuur 11). Deze deeltjes zijn niet meer interessant om te volgen, ze zijn ingevroren. Materiaalgedrag beneden T_g wordt niet in beschouwing genomen. Van de deeltjes die gedurende het laatste tijdsinterval in de stollaag zijn gekomen moeten we nog de baan bepalen ($z_{1,nm}^k \leq z_{1,j}^k \leq z_{1,nm}^{k-1}$). Eerst wordt het tijdstip ($t^k - \Delta t_0$) bepaald waarop elk van deze deeltjes op de stollaag zat.

$$\Delta t_0 = ((z_{1,j}^k - z_{1,nm}^k) / (z_{1,nm}^{k-1} - z_{1,nm}^k)) \cdot \Delta t \quad (2.7)$$

Gedurende $t^{k-1} \leq t \leq t^k - \Delta t_0$ moet de baan bepaald worden. Deze deeltjes hebben een lage snelheid en zullen uit het 'gebied' tussen B en C vandaankomen (punt E : zie figuur 10). Probleem is nu dat we niet met de snelheid van dit deeltje op $t^k - \Delta t_0$ terug kunnen zoeken, want de snelheid op de stollaag is nul. Punt E wordt bepaald in een iteratieproces, waarbij E lineair wordt geïnterpoleerd tussen B en C.

3. l=k : de zgn. frontgridlijn

Alle deeltjes ($1 \text{ t/m } n_p$) die een snelheid in stromingsrichting bezitten die groter is dan de gemiddelde snelheid zijn op de standaardmanier 1. (punt D tussen A en B) te volgen. De deeltjes $n_p+1 \text{ t/m } n_z$ zijn gedurende het laatste tijdsinterval door het frontgebied gegaan.

Eerst worden de deeltjes $n_p+1 \text{ t/m } n_m-1$ beschouwd. M.b.v. de huidige snelheid wordt bepaald op welk tijdstip en op welke positie zij op het 'front' zaten (Zie figuur 12). Het 'front' bevindt zich in stromingsrichting op een afstand van de halve kanaalhoogte van de frontgridlijn.

$$\Delta x^* = x_1 - x_{1-1} + h_1 + h_{1-1} \quad (2.8.1)$$

$$\Delta t_1 = h_1 / ((\Delta x^* / \Delta t_k) - v_{x_{1,j}}^k) \quad (2.8.2)$$

$$\Delta x_1 = v_{x_{1,j}}^k \Delta t_1 \quad ; \quad \Delta z_1 = v_{z_{1,j}}^k \Delta t_1 \quad (2.8.3)$$

Deeltjes die in het midden van de stroming het front inhalen worden naar buiten

gedrongen (figuur 4). In het computerprogramma wordt het volgende model gebruikt om dit effect te beschrijven. Hierbij wordt aangenomen dat de tijd waarin het deeltje van binnen naar buiten gedrongen wordt te verwaarlozen is. Als het beschouwde deeltje zich op $t = t^k - \Delta t$ op het front bevindt, moet uit de z -coördinaat waarop dit deeltje het front verlaat (deze is bekend: z_{uit} , zie figuur 14), de z -coördinaat waarop dit deeltje het front binnenkwam, bepaald worden. Dit wordt gedaan door de in figuur 14 aangegeven volumefluxen aan elkaar gelijk te stellen:

$$b \int_0^{z_{\text{in}}} (v_x(z) - \bar{v}) dz = b \int_{z_{\text{uit}}}^h (\bar{v} - v_x(z)) dz . \quad (2.9)$$

Vanaf het tijdstip $t^k - \Delta t$ en vanuit de bijbehorende positie wordt het deeltje verder teruggevolgd. Het deeltje heeft nu een hoge snelheid ($> \bar{v}$) en zal ergens uit het 'gebied' tussen A en B (zie figuur 13) vandaankomen. Aangezien de snelheid op tijdstip $t^k - \Delta t$ niet bekend is wordt punt D in een iteratieproces bepaald en lineair geïnterpoleerd tussen A en B.

Van de gridpunten n_m t/m n_z wordt alleen van n_m en n_z de baan bepaald. Voor gridpunt n_m geldt dat het precies op tijdstip t^k is ingevroren. De tijd waarop dit deeltje op het front zat wordt bepaald d.m.v. extrapolatie uit de gegevens van de deeltjes n_{m-2} en n_{m-1} . Hierna wordt dit deeltje als de vorig beschreven groep behandeld.

Voor gridpunt n_z geldt dat het werd ingevroren toen het front zich op $x=x^k$ bevond. De tijd die het front nodig heeft om de frontgridlijn te passeren wordt contacttijd genoemd (zie Sitters, [1]). Dit deeltje zat dus op $t=t-t_{\text{contact}}$ op het front. Vanaf $t^k - t_{\text{contact}}$ kan dit deeltje dan vanuit het midden van het kanaal weer op de wijze die ook al voor de deeltjes $l=k$, $n_p+1 \leq j \leq n_m$ hierboven is beschreven, worden teruggevolgd.

2.3 De 'linear stress optical rule'.

Voor vloeistoffen zijn naast de afschuifspanningen slechts normaalspanningsverschillen van belang. De volgende grootheden worden daarom ingevoerd:

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{zz} \quad : \text{eerste normaalspanningsverschil,} \quad (2.10a)$$

$$N_2 = \sigma_{zz} - \sigma_{yy} \quad : \text{tweede normaalspanningsverschil.} \quad (2.10b)$$

(N.B. componenten uitgeschreven t.o.v. de Carthesische basis.) Met het in dit hoofdstuk geïntroduceerde integraalmodel is het niet mogelijk om het tweede normaalspanningsverschil nauwkeurig te beschrijven. In werkelijkheid geldt N_2/N_1 is ca. -0.1 , terwijl uit Appendix 1 volgt dat $N_2/N_1 = 0$.

De geldigheid van de 'linear stress optical rule' (zie par. 1.2 en Janeschitz-Kriegl [9]) in het geval van niet-stationaire en niet-isotherme stroming wordt aangenomen. De volgende relaties gelden dan:

$$n_{xx} - n_{zz} = C(T)N_1 \quad (2.11a)$$

$$\Delta n = C(T)(N_1^2 + 4\sigma_{xz}^2)^{1/2} \quad (2.11b)$$

$C(T)$ is de spannings-optische coëfficiënt, deze is in principe een functie van de temperatuur.

3. Berekeningen.

In dit hoofdstuk worden enkele berekeningen uitgevoerd. De resultaten worden vergeleken met metingen en berekeningen uit de literatuur (Isayev [10], Wales et. al. [11] en Dietz & White [12&13]). De injectiefase wordt numeriek gesimuleerd, waarbij op de bovenbeschreven wijze spanningen en dubbele breking worden bepaald. Het verloop van spanningen tijdens de nadruk en afkoelfase wordt in deze berekeningen niet beschouwd. De metingen werden verricht aan kant en klare producten die ook de nadruk- en afkoelfase ondergingen.

1. Materiaalgegevens

Als materiaal werd 'STYRON 678' van 'Dow' genomen. De thermische en reologische eigenschappen werden door Wales [14] beschreven:

$$\begin{aligned} \eta &= K \exp(-b(T-T_0)) \dot{\gamma}^{(n-1)/2} \\ \text{met: } K &= 6700 \quad \text{Pas} ; b = 0.017 \text{ K}^{-1} ; T_0 = 493 \text{ K} ; \\ &n = 0.356 \\ \rho &= 1060 \quad \text{kgm}^{-3} \\ \lambda &= 0.1295 \quad \text{J(Kms)}^{-1} \\ c_p &= 1733 \quad \text{J(Kkg)}^{-1} \\ T_g &= 373 \quad \text{K} \\ \Gamma &= 3400 \quad \text{Jkg}^{-1} \end{aligned}$$

Uitgaande van metingen van de opslagmodulus $G'(\omega)$ [14], wordt een discreet relaxatietijden-spectrum bepaald. Hierbij worden λ_i en η_i als functie van T en $\dot{\gamma}$ beschouwd volgens:

$$\begin{aligned} \lambda_i &= K_{\lambda_i} \exp(-b(T-T_0)) \dot{\gamma}^{(n-1)/2} \\ \eta_i &= K_{\eta_i} \exp(-b(T-T_0)) \dot{\gamma}^{(n-1)/2} \end{aligned}$$

De waardes voor b , T_0 en n zijn hetzelfde als boven; de waardes voor K staan in tabel 3.1.

K_{λ_i} s	K_{η_i} Pas
0.67	3820
$0.67 \cdot 10^{-1}$	2412
$0.67 \cdot 10^{-2}$	402
$0.67 \cdot 10^{-3}$	67

Tabel 3.1

De spannings-optische coëfficiënt wordt constant verondersteld: $C = 4.8 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$.

2. Procescondities

In tabel 3.2 worden de procescondities alsmede de geometrie van de matrijsholtes vermeld. Er worden in deze voorbeelden alleen strip-geometriën doorgerekend (zie figuur 15).

	L	H	W	Q	t_f	T_{inj}	T_w	reference
	$\text{m} \cdot 10^{-3}$			$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$	s	K	K	
A	300	2	75	$1.8 \cdot 10^{-4}$	2.5	523 (!)	323	Wales [11]
B	81	2.54	27	$1.1 \cdot 10^{-5}$	5.2	483	323	Dietz [12] Isayev [10]
C	81	2.54	27	$1.1 \cdot 10^{-5}$	5.2	483	358	Dietz [12] Isayev [10]

Tabel 3.2

De verkregen resultaten worden vergeleken met metingen van Wales [11] en Dietz & White [12] en met berekeningen van Isayev [10]. Isayev heeft een model ontwikkeld waarbij hij een visco-elastische constitutieve vergelijking op de gebruikelijke manier heeft gekoppeld aan de balanswetten. Hij gebruikt hiervoor het Leonov-model [15–17]. Isayev verwaarloost de convectie- en dissipatieterm in de energie-vergelijking.

Het uitroepteken in tabel 3.2 slaat op het feit dat Isayev als injectietemperatuur 503 K neemt. Uit gegevens van Sitters [21] en de resultaten van Isayev blijkt dat de injectietemperatuur 523 K moet zijn. Daarom worden de resultaten van Isayev in geval A niet beschouwd.

In geval C hebben Dietz & White de nadrukfase achterwege gelaten.

3. Resultaten

Om inzicht te krijgen in de wijze waarop grootheden als temperatuur, druk, snelheid en stollaagdikte verlopen tijdens het vulproces, worden deze voor

berekening A getoond. Indien niet anders vermeld hebben alle gegevens betrekking op het tijdstip dat de vulfase wordt beëindigd.

Figuur 16 toont het drukverloop als functie van de x -coördinaat. Ter vergelijking zijn in deze figuur ook de metingen van Wales [11] aangegeven.

Figuur 17 toont de temperatuur voor $z=0$ als functie van x .

Figuur 18 toont de snelheid als functie van de z -coördinaat voor verschillende doorsnedes $x=\text{constant}$.

Figuur 19 idem voor de temperatuur.

Figuur 20 toont het verloop van de stollaagdikte als functie van x met de tijd als parameter.

Nu worden de resultaten getoond die bepaald zijn m.b.v. het visco-elastische materiaalmodel. Alle figuren tonen grootheden als functie van z met x als parameter.

Figuur 21 toont het verloop van het eerste normaalspanningsverschil, figuur 22 toont het verloop van de schuifspanning en figuur 23a–c toont het verloop van de dubbele breking (allen voor geval A). In deze laatste figuur zijn ook de resultaten van de metingen van Wales [11] aangegeven. Figuur 24 en 25 tonen de dubbele breking voor geval B resp. C. In deze figuren zijn ook de resultaten van de berekeningen van Isayev [10] en de metingen van Dietz & White [12] aangegeven. In de figuren 23–25 is met 's' de berekende positie van de stollaag aangegeven.

Er volgt een bespreking van de resultaten uit figuur 23–25. De positie van het maximum wordt goed beschreven door de berekeningen. Duidelijk is dat deze niet samenvalt met de positie van de stollaag (s) op het moment dat de matrijs gevuld is, zoals o.a. Dietz & White [12] beweren.

De overeenkomst tussen metingen en de eigen berekeningen in het gebied tussen de wand en de positie van het maximum is slecht. Dit is een gevolg van het primitieve frontmodel, waarbij de optredende rekstroming wordt genegeerd. Voorts wordt hierin aangenomen dat griddeeltjes die aan de wand invriezen worden aangevoerd uit het midden van het kanaal in een oneindig klein tijdsinterval. Dit betekent dat de spanning aan de wand gelijk is aan die, die in het midden van het kanaal heerst. De schuifspanning en het eerste normaalspanningsverschil in het midden van het kanaal is in het geval van een afschuifstroming altijd nul. Daarom is de dubbele breking aan de wand bij ons model altijd nul.

In het midden van het kanaal voorspellen alle berekeningen een dubbele breking gelijk aan nul. De metingen geven hier een waarde ongelijk aan nul. De metingen voor geval C geven ook een dubbele breking gelijk aan nul; bij deze proef werd de

nadrukfase achterwege gelaten. De afwijking tussen meting en berekening in het midden van het kanaal kan dus aan de invloed van de nadrukfase worden geweten.

Afgezien van het gebied dicht bij de wand en van het gebied dicht bij het midden van kanaal overschatten de eigen berekeningen steeds de metingen. Hierbij moet worden bedacht dat de berekeningen alleen de invloed van de injectiefase beschrijven, terwijl de metingen zijn verricht aan producten die de gehele spuitgiet-cyclus hebben doorlopen. Tijdens de nadruk- en afkoelfase kan de tijdens de injectie geïntroduceerde oriëntatie boven T_g enigzins relaxeren.

Tenslotte wordt in tabel 3.3 de invloed van enkele parameters op de dubbele breking samengevat.

parameter		Δn
dikte	>	<
volumestroom	>	<
injectietemperatuur	>	<
wandtemperatuur	>	<

tabel 3.3

4. Afsluiting en conclusies

In dit verslag werd een visco-elastische constitutieve vergelijking toegepast bij de modelvorming van de injectiefase van het spuitgietproces van thermoplasten, teneinde stromingsgeïnduceerde oriëntatie van macromoleculen te voorspellen. De gevolgde werkwijze hield in dat het stelsel balansvergelijkingen, met bijbehorende begin- en randcondities opgelost werd voor een zich volledig visceus gedragende polymeersmelt. Het aldus verkregen snelheidsveld werd in de visco-elastische constitutieve vergelijking ingevuld. De verkregen spanningen zijn via een empirische wet, de zgn. 'linear stress optical rule' gekoppeld aan de dubbele breking in doorzichtige producten. De bepaalde dubbele brekingsverdeling is een maat voor de oriëntatie in het product. Deze werkwijze leverde resultaten op, die redelijk overeenkwamen met dubbele brekingsmetingen van Wales [11] en Dietz & White [12].

De met de visco-elastische constitutieve vergelijking bepaalde spanningen, kunnen in de impulsvergelijking in stromingsrichting worden ingevuld. Er wordt een relatieve afwijking t.o.v. de visceuze impulsbalans gedefinieerd:

$$\text{AFW} = \frac{((dp/dx)_v - (\partial\sigma_{xx}/\partial x + \partial\sigma_{xz}/\partial z)_{ve})}{(dp/dx)_v} * 100 \% \quad (4.1)$$

Voor geval A was de fout, voor die z-waardes die kleiner zijn dan die waarvoor de snelheid in stromingsrichting gelijk is aan de gemiddelde, steeds kleiner dan 10%. Bij geval B en C was deze fout kleiner dan 7%. Voor grotere z-waardes werd de fout steeds groter, mede als gevolg van het slechte frontmodel.

Ter verdere verificatie van de gevolgde werkwijze zijn er een aantal mogelijkheden. Ten eerste kan gedacht worden aan het uitvoeren van dubbele brekingsmetingen. Ten tweede kunnen de resultaten worden vergeleken met berekeningen die worden uitgevoerd met een software-pakket dat visco-elastische berekeningen kan uitvoeren.

Een eerste verbetering van het bestaande model moet bestaan uit het in rekening brengen van de rekstroming in het front van de stroming, want deze bepaald in grote mate de oriëntatie die aan de wand direct wordt ingevroren. Als eerste aanzet kan het frontmodel van Bhattacharji & Savic [18,19] worden gebruikt. Een mogelijke uitbreiding van de in dit verslag gerapporteerde werkzaamheden vormen het bepalen van de invloed van nadruk- en afkoelfase op de oriëntatie. Voorts kan gedacht worden om deze werkwijze ook toe te passen bij een centraal aangespoten schijf en conuswand. Hier moet dan ook rekening worden gehouden met rekstroming. Daarna kan een dergelijk model eventueel ingebouwd worden in 3D-programmatuur.

Het beschikbaar hebben van een relaxatietijden-spectrum is erg belangrijk.

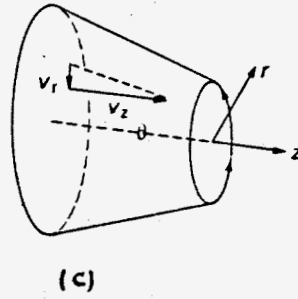
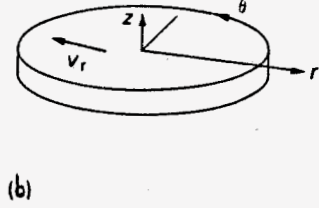
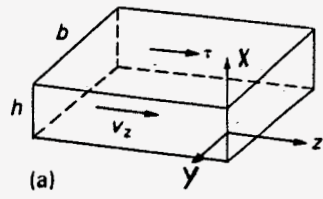
5. Literatuur

1. Sitters, C.W.M., Non-isothermal Flow of Molten Polymers in Narrow Cavities, Nat. Lab. Report Nr. 6012, (1984)

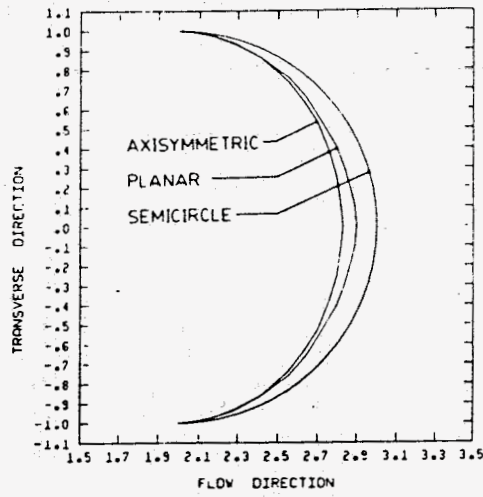
2. Bird, R.B., R.C. Armstrong, O. Hassager, Dynamics of Polymeric Liquids, Vol I, J. Wiley & Sons, New York, (1977)
3. Mavridis, H., A.N. Hrymak, J. Vlachopoulos, Polym. Eng. Sci., 26, 449–454, (1986)
4. Crochet, M.J., A.R. Davies, K. Walters, Numerical Simulation of non-Newtonian Flow, Elsevier, Amsterdam, (1984)
5. Walters, K., Quart. J. Mech. Appl. Math., 13, 444–461, (1960)
6. Fredrickson, A.G., Chem. Eng. Sci., 17, 155–166, (1962)
7. Lamers, H.M., Visco-elastische modelvorming m.b.t. het spuit-gietproces, Afstudeerverslag, Technische Universiteit Eindhoven, Netherlands (1986)
8. Tadmor, Z., J. Appl. Polym. Sci., 18, 1753– , (1974)
9. Janeschitz-Kriegl, H., Polymer Melt Rheology and Flow birefringence, Springer Verlag, Berlin, (1983)
10. Isayev, A.I., C.A. Hieber, Rheol. Acta 19, 168–182, (1980)
11. Wales, J.L.S., J. van Leeuwen, R. van der Vijgh, Polym. Eng. Sci., 12, 358–363, (1972)
12. Dietz, W., J.L. White, Rheol. Acta, 17, 676–692, (1978)
13. Dietz, W., J.L. White, E.S. Clark, Polym. Eng. Sci., 18, 273–281, (1978)
14. Wales, J.L.S., The Application of Flow Birefringence to Rheological Studies of Polymer Melts, Delft University Press, Delft, (1976)

15. Leonov, A.I., *Rheol. Acta*, 15, 85–98, (1976)
16. Leonov, A.I., E.H. Lipkina, E.D. Paskhin, A.N. Prokunin, *Rheol. Acta*, 15, 411–426, (1976)
17. Larson, R.G., *Rheol. Acta*, 22, 435–448, (1983)
18. Bhattacharji, S., P. Savic, *Proc. of the 1965 Heat Transfer and Fluid Mech. Inst.*, 248– (1965)
19. Manas–Zloczower, I., J.W. Blake, C.W. Macosko, *Polym. Eng. Sci.*, 27, 1229–1235, (1987)
20. Matsui, M., D.C. Bogue, *Trans. Soc. Rheol.*, 21, 133–148, (1977)
21. Sitters, C.W.M., *Numerical Simulation of Injection Moulding*, Ph.D. Thesis, Technical University Eindhoven, (1988)

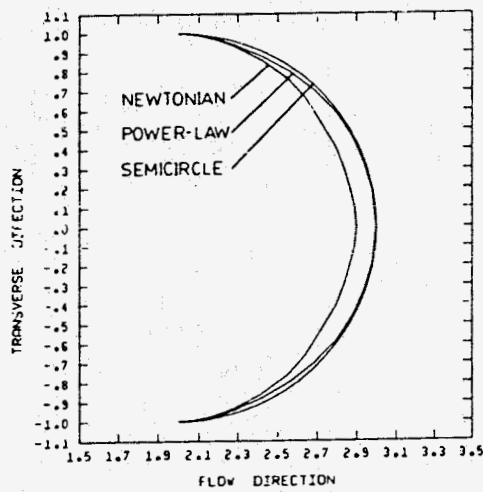
Bijlage met de figuren



1

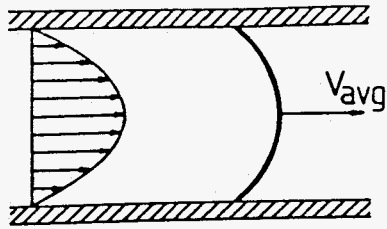


Comparison of advancing front shapes for planar and axisymmetric flow (Newtonian fluid).

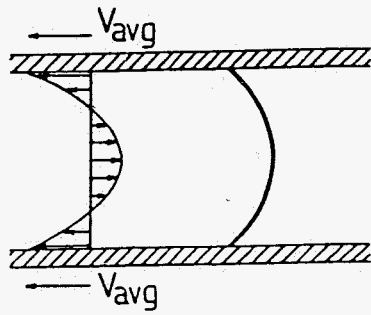


Comparison of advancing front shapes for Newtonian and power-law fluids (planar geometry). Power-law parameters: $m = 10,000 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$, $n = 0.5$, $\dot{\gamma}_w = 500 \text{ s}^{-1}$.

2

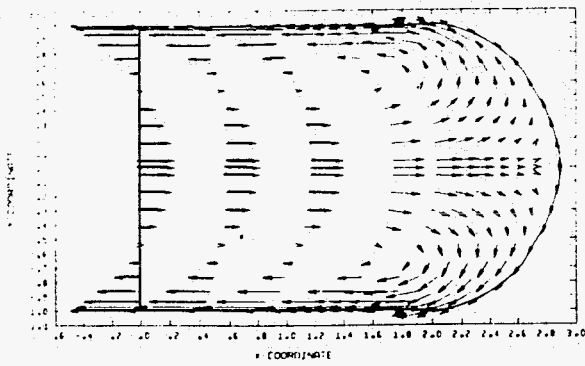


(a)

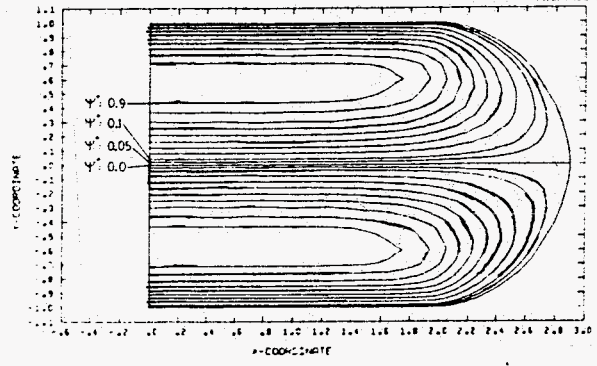


(b)

3

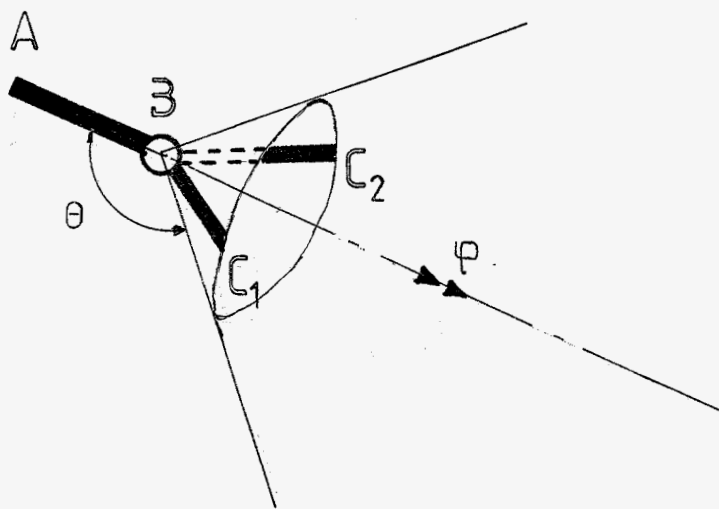


Velocity vectors.



Streamlines.

4



5. DEFENITIE VAN θ EN φ

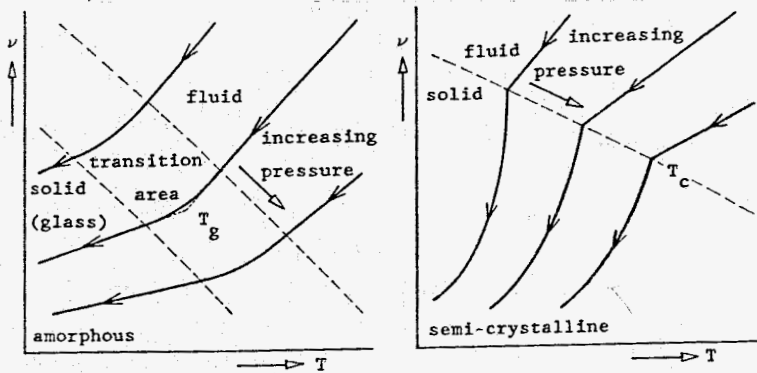
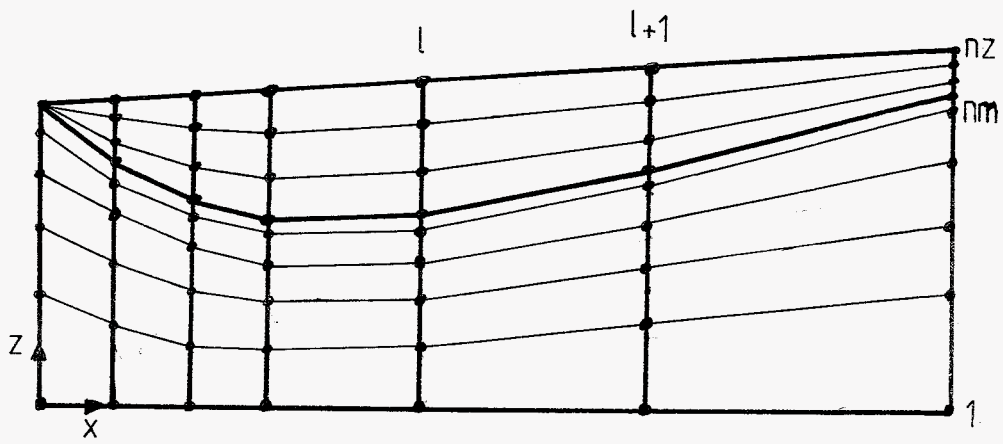


Fig 6 p- ν -T diagrams for amorphous and semi-crystalline polymers, at low cooling rates.

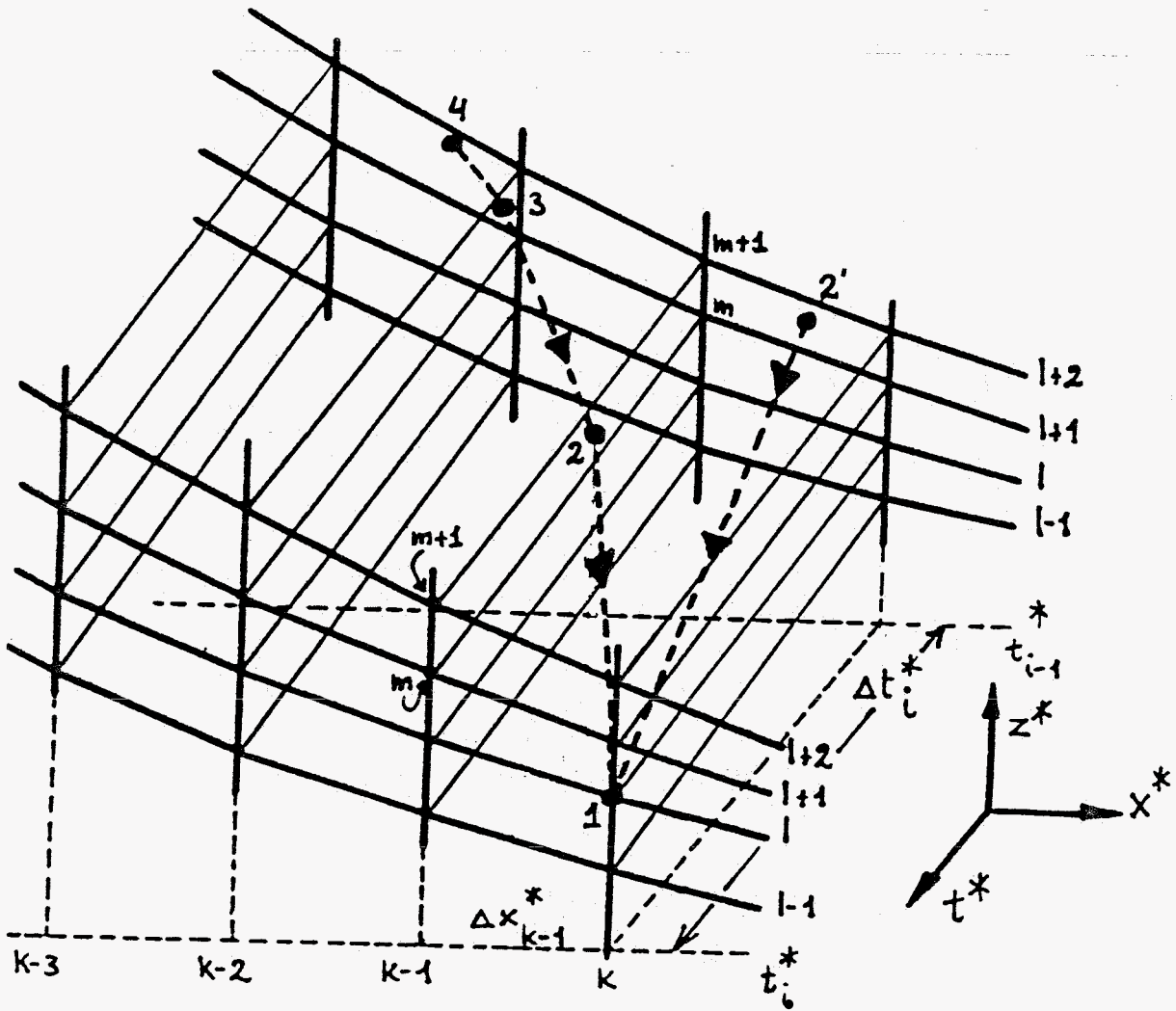


$$\lambda = \eta / G$$

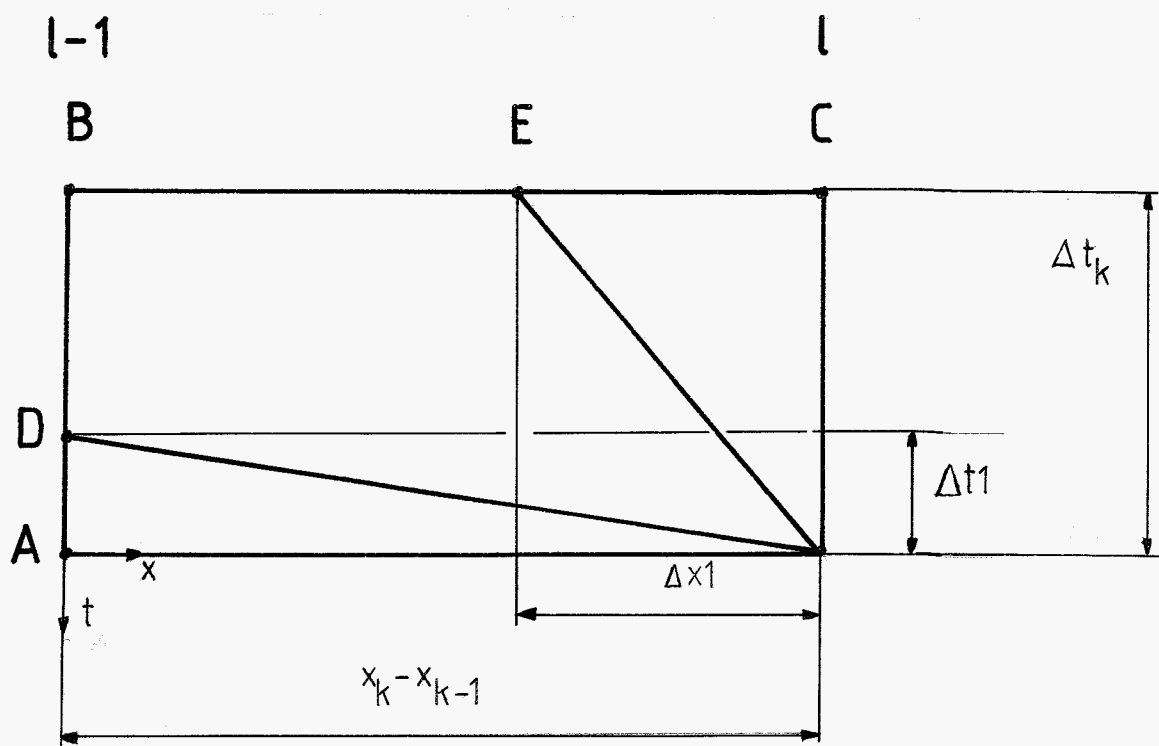
7. MAXWELL-MODEL



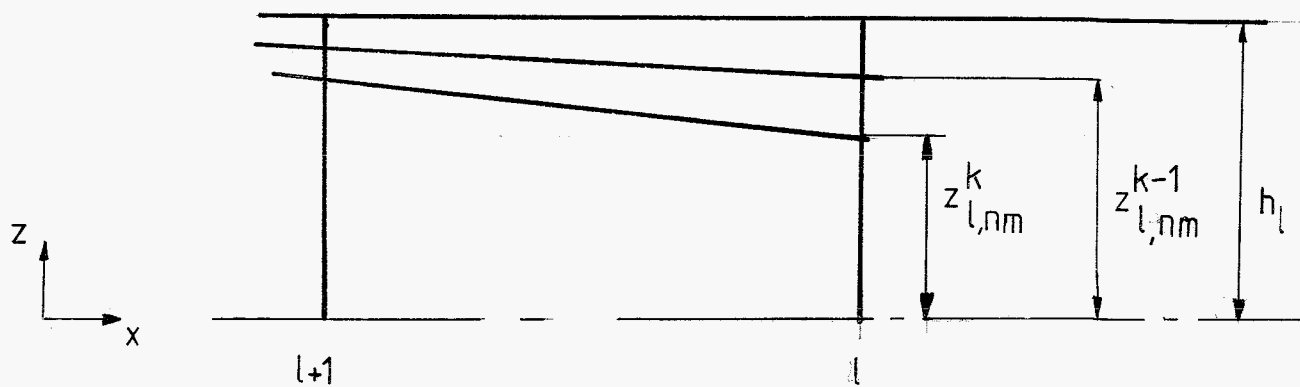
8. GRID



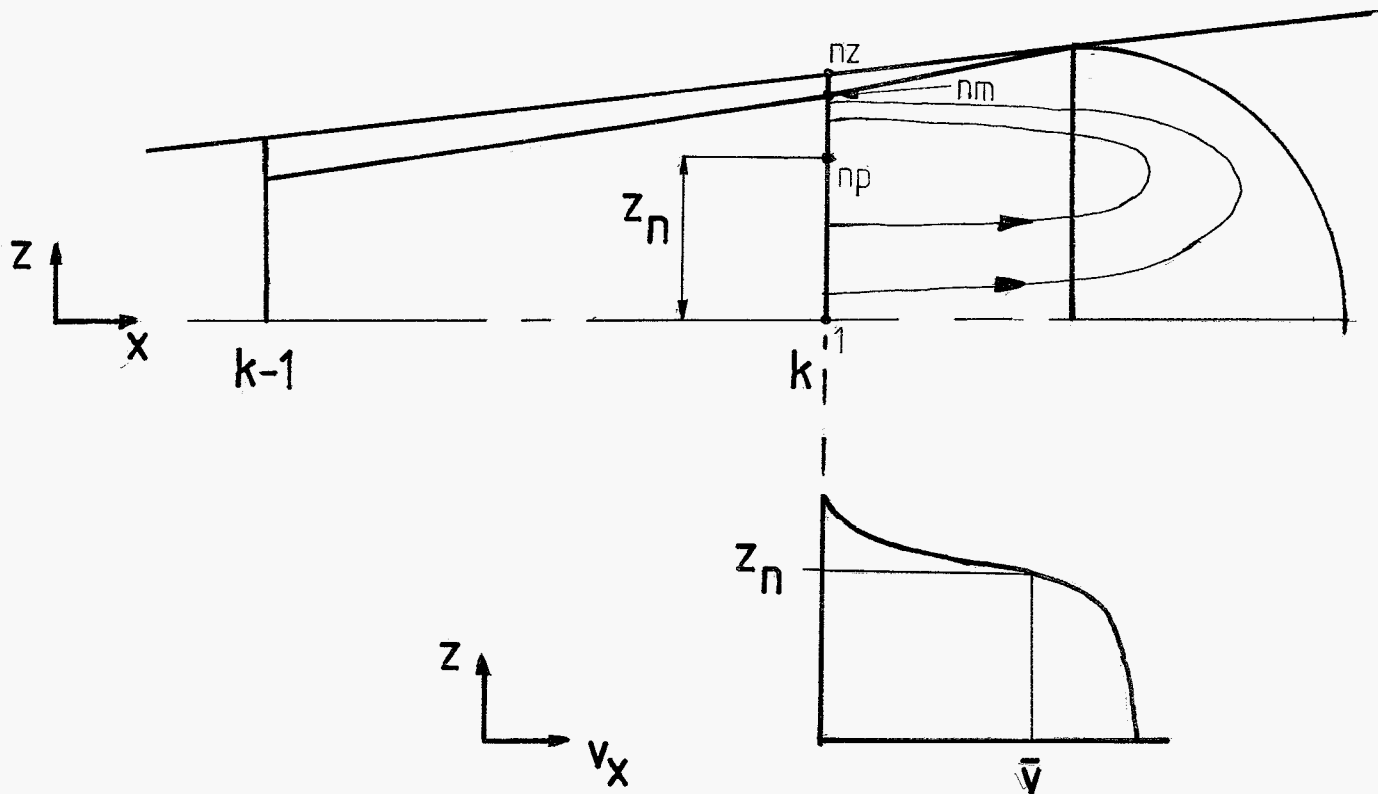
9.



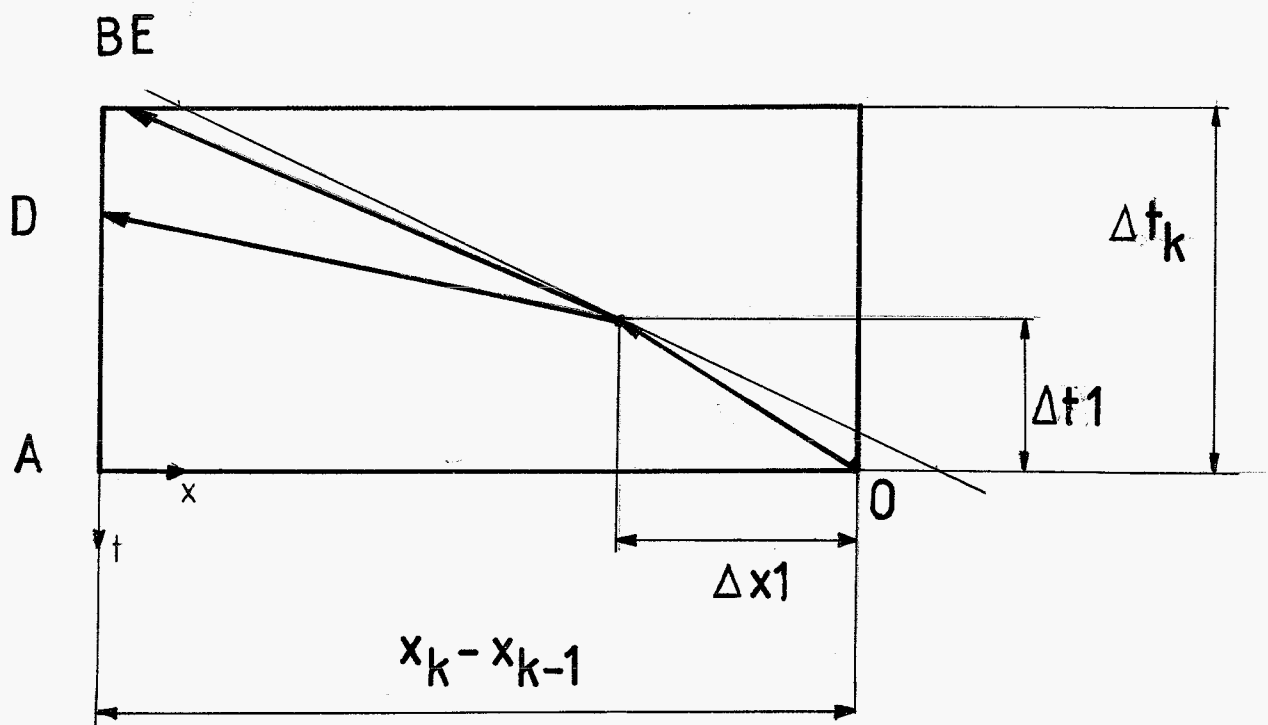
10.



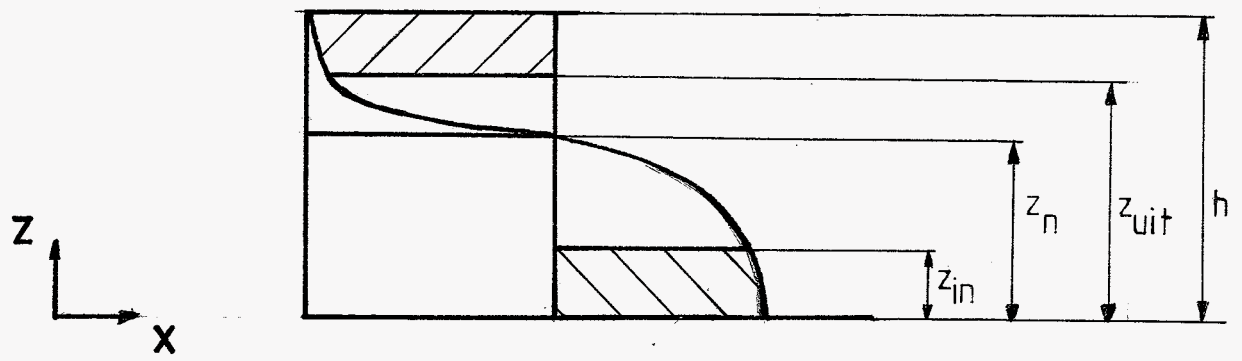
11. STOLLA AG-GROEI



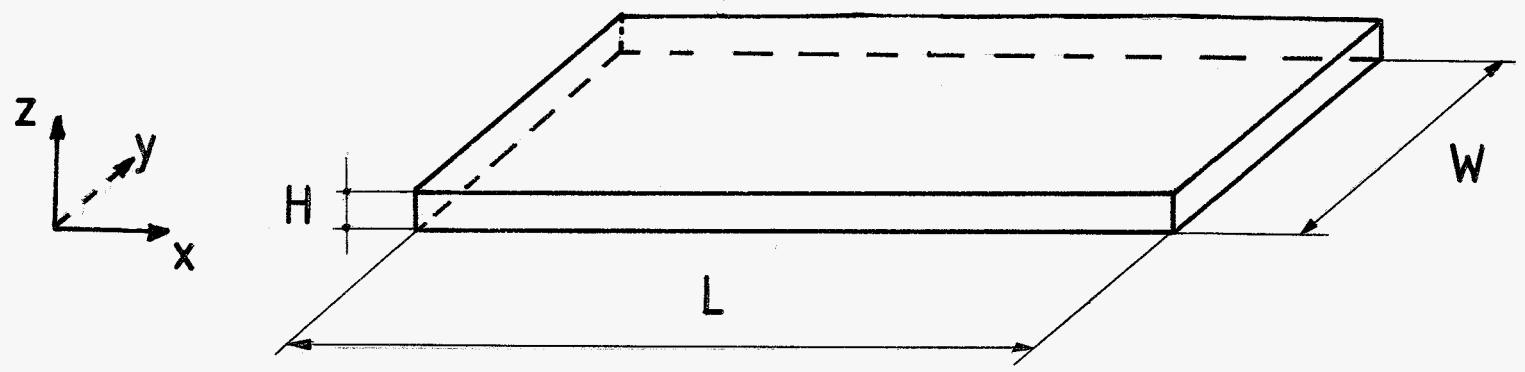
12. FRONT.



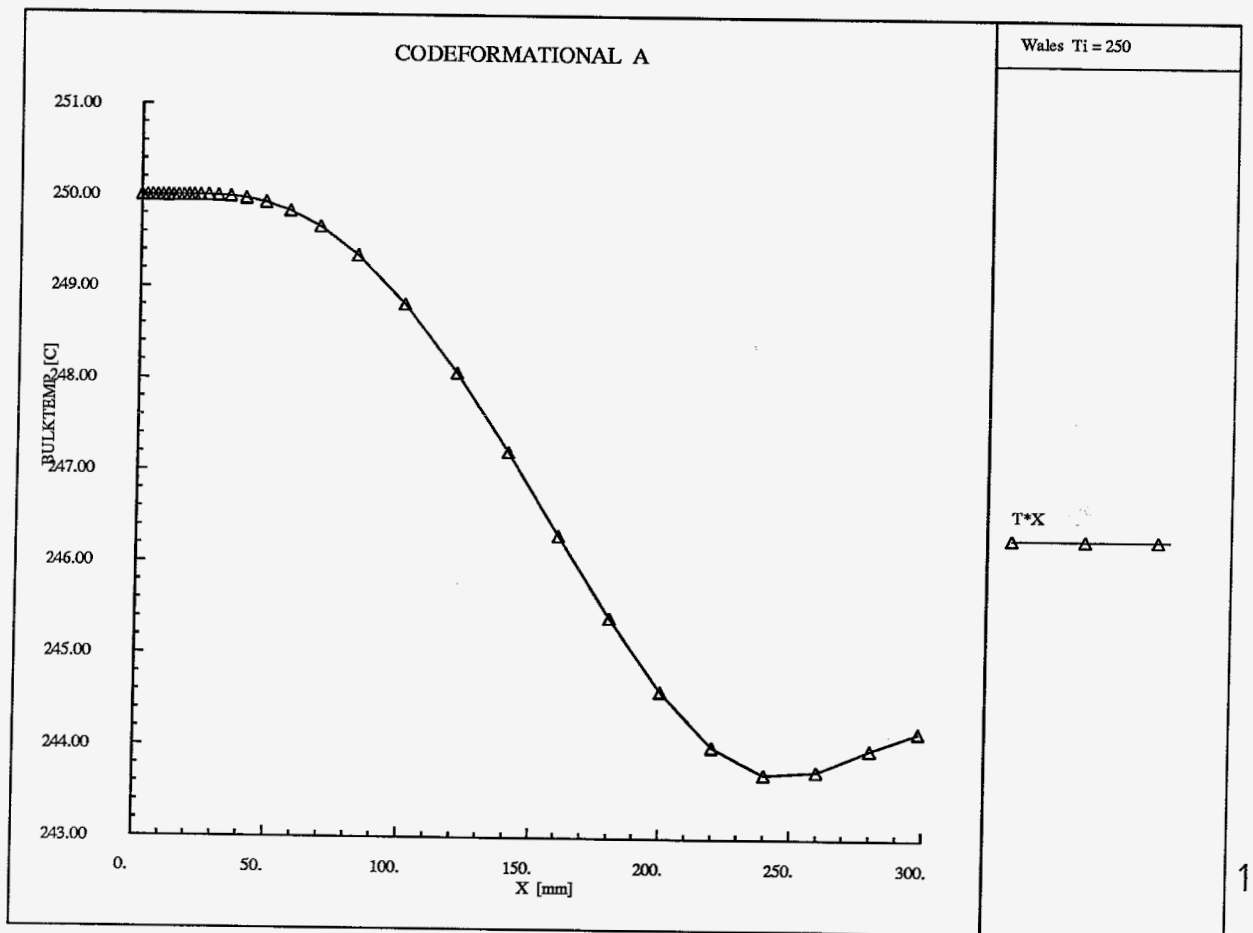
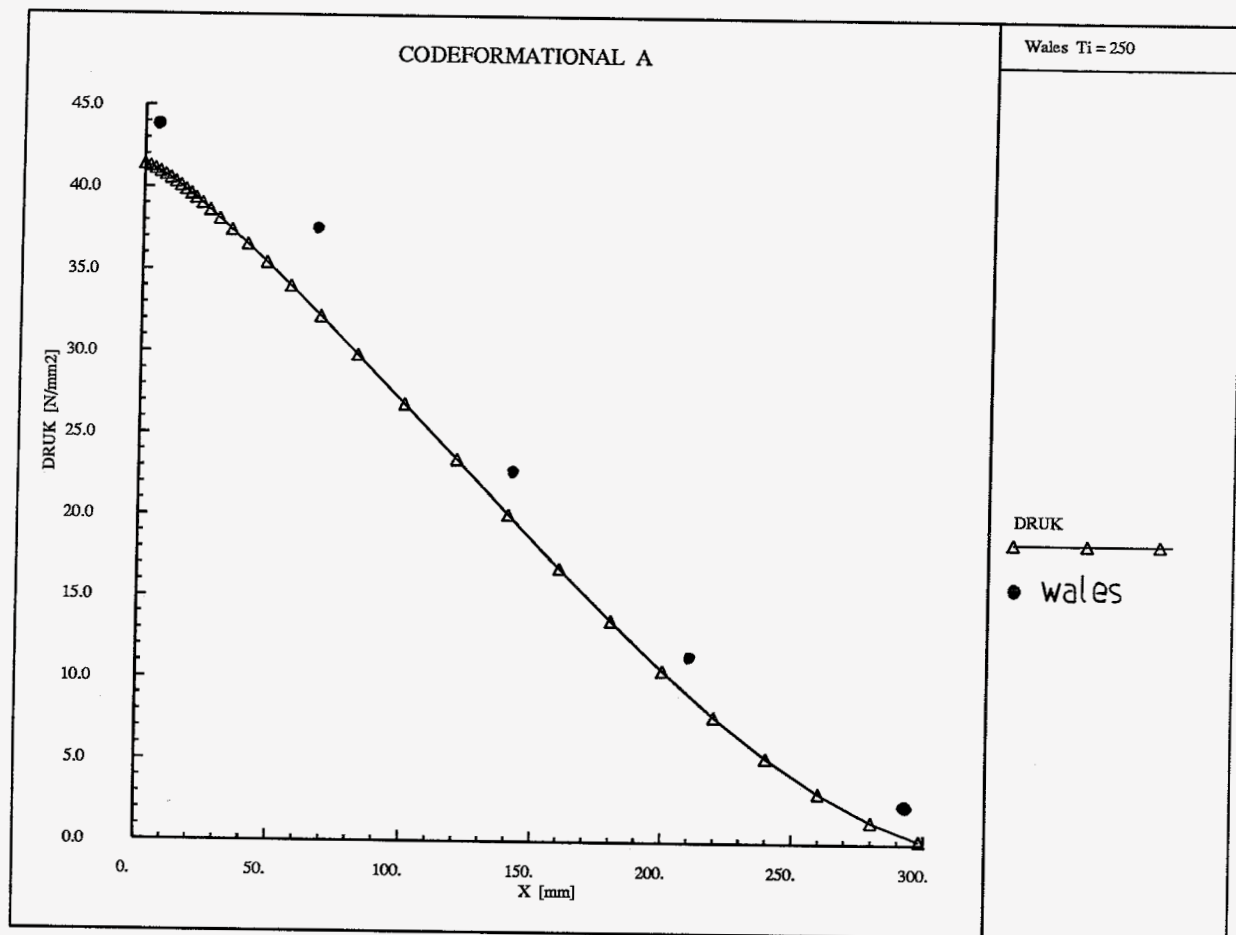
13.

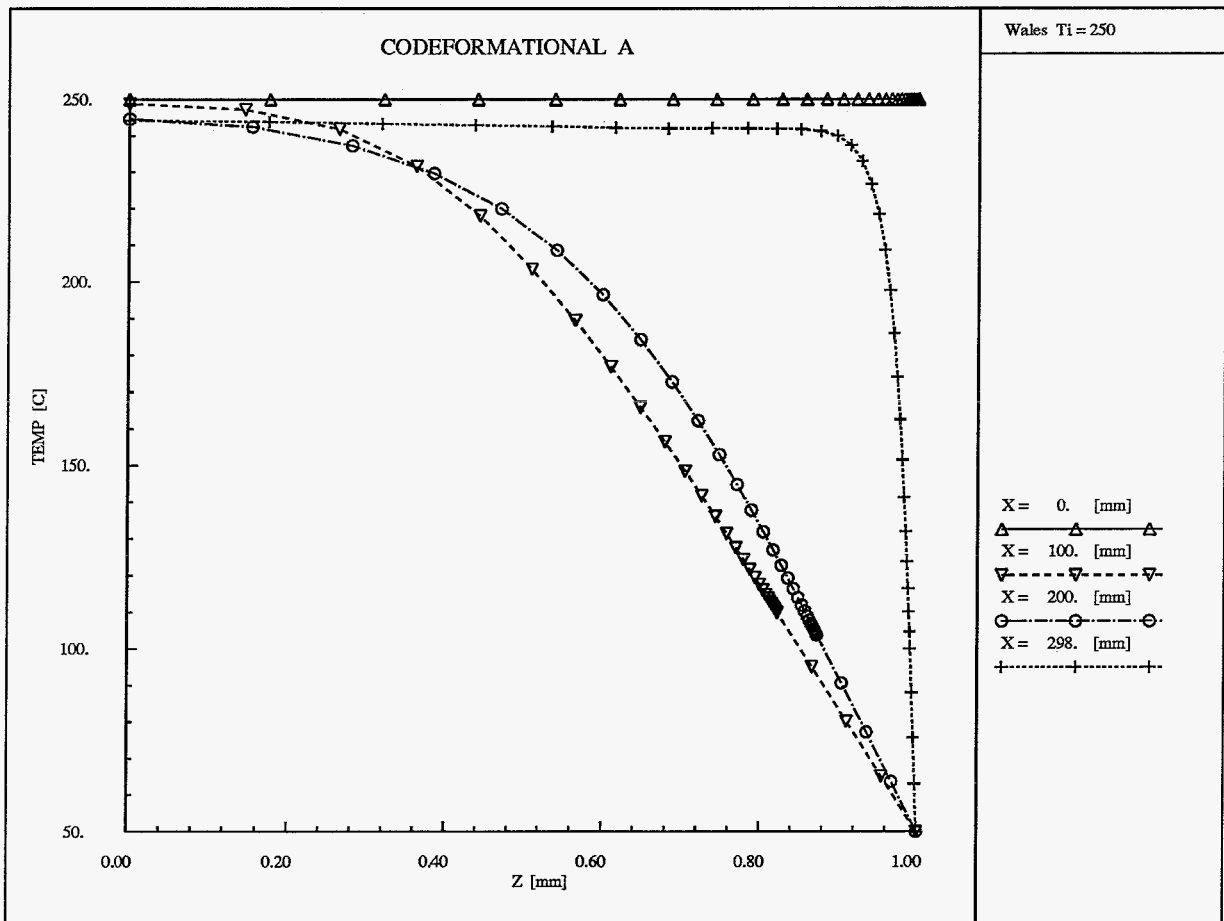
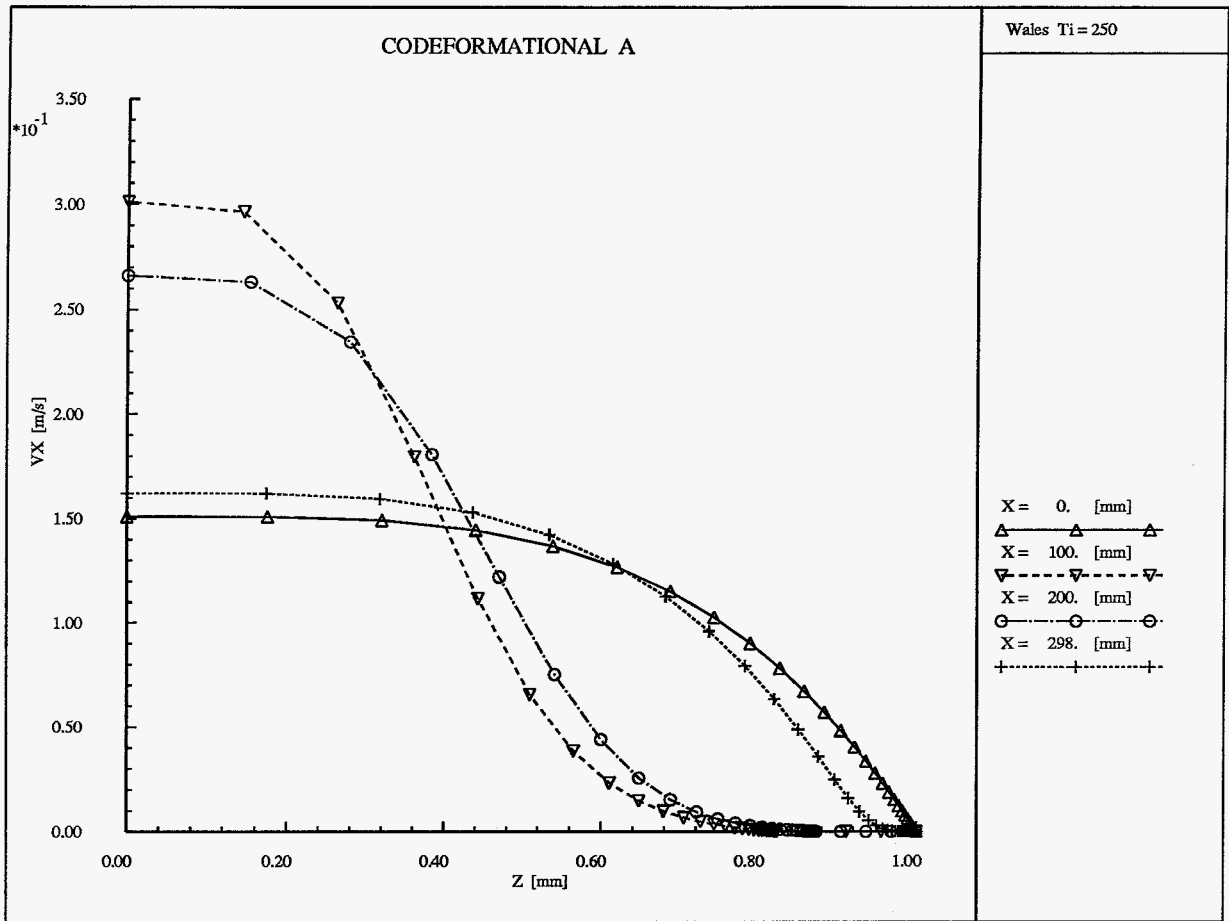


14.



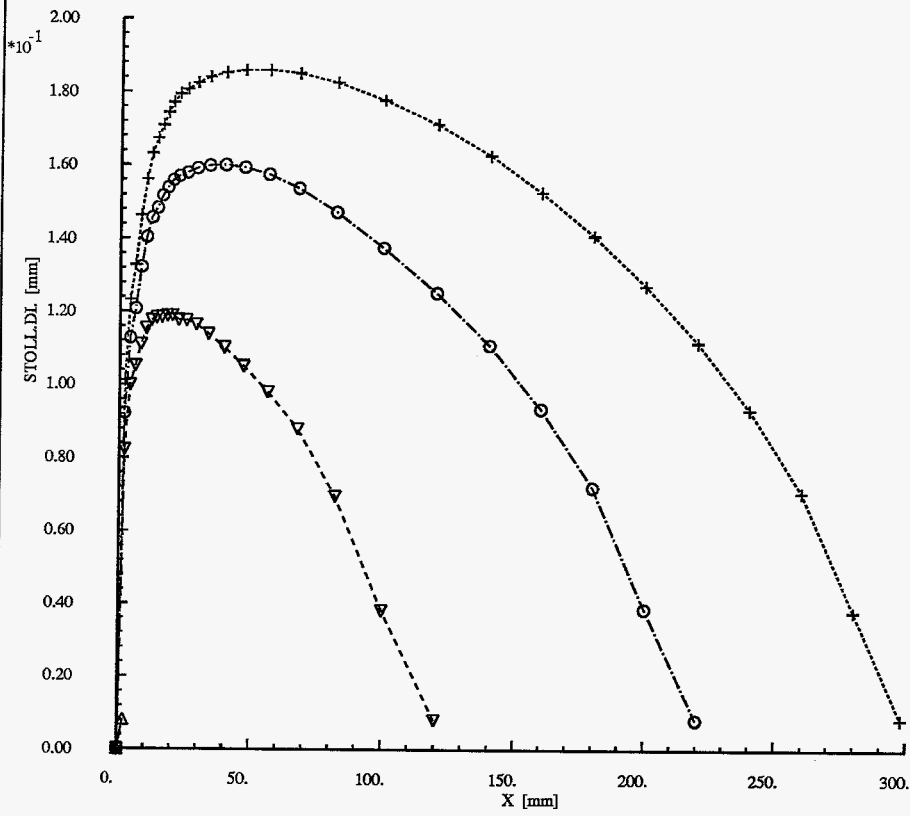
15. STRIP

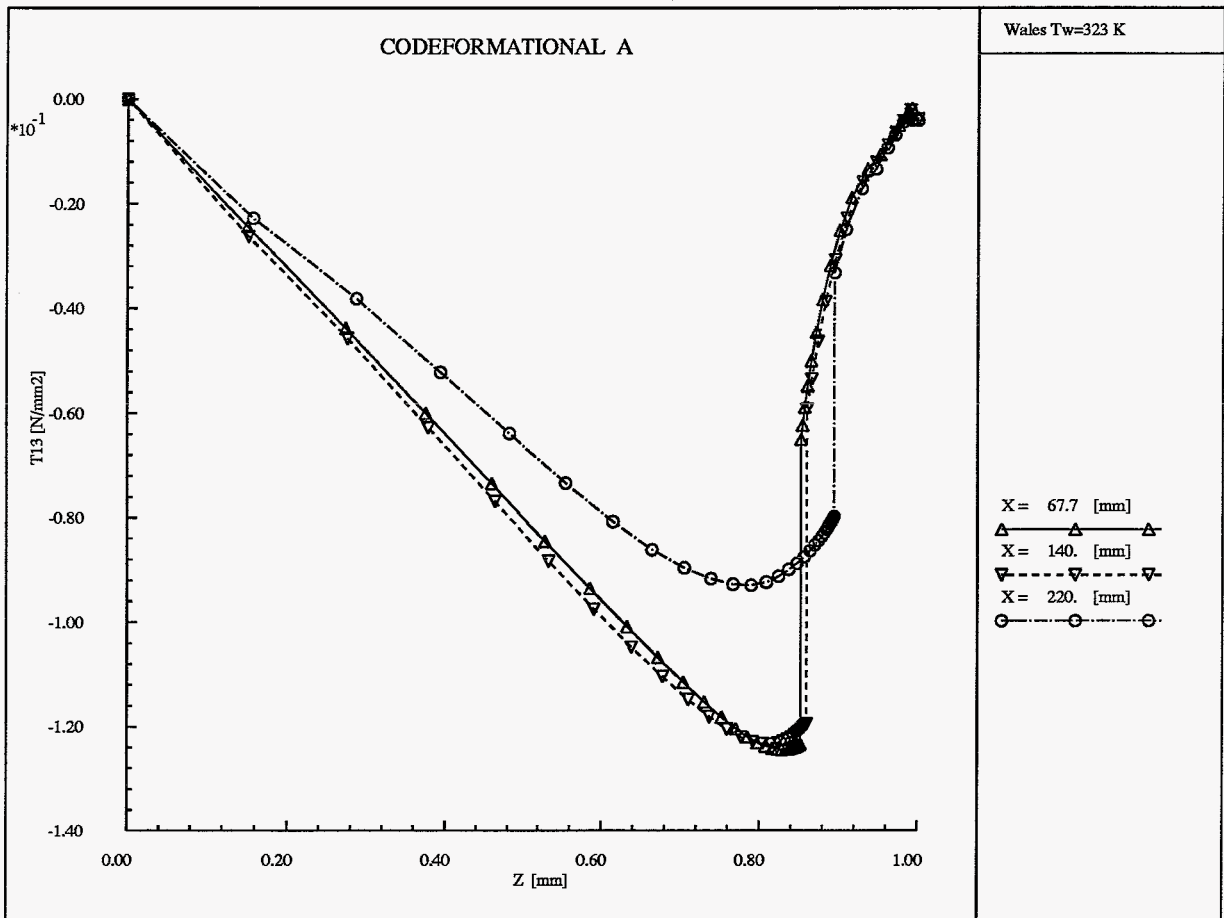
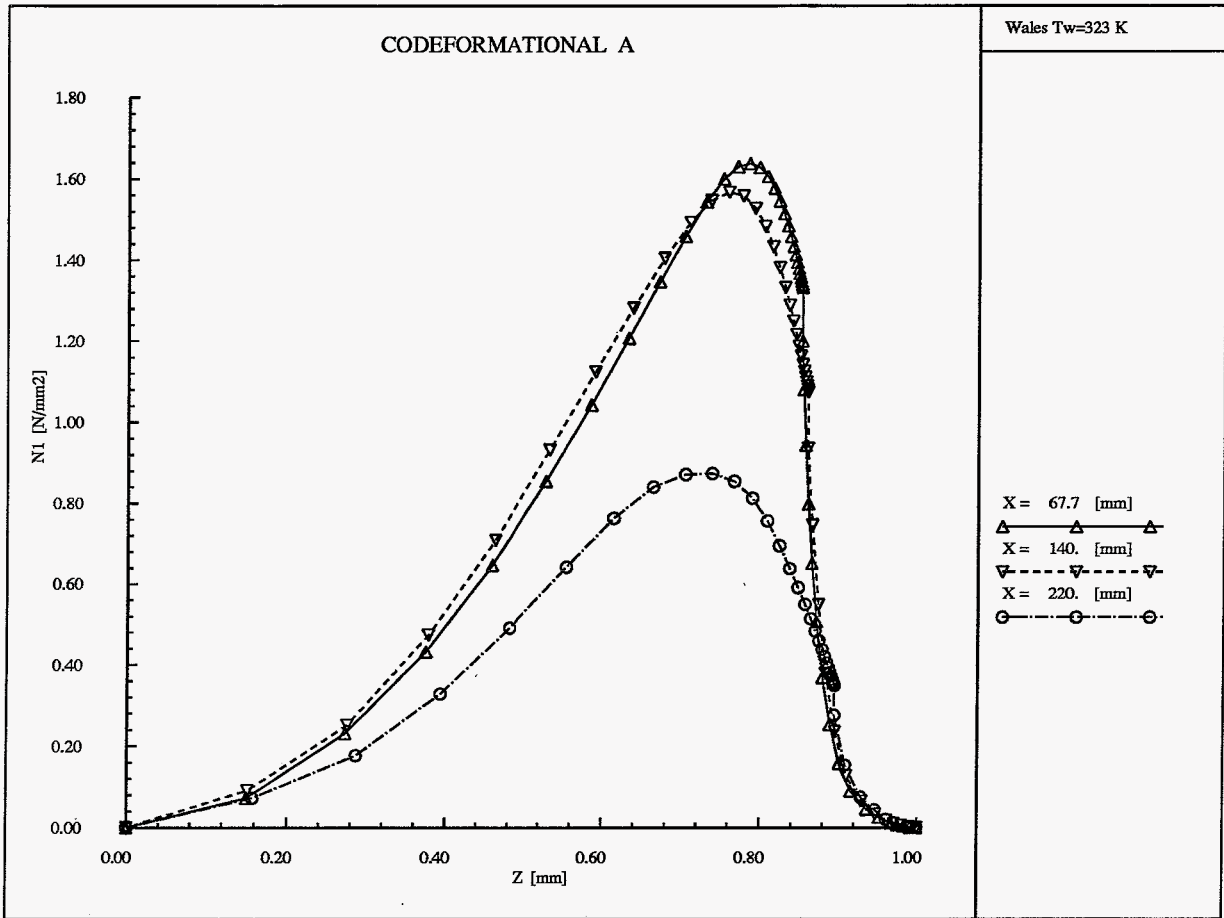


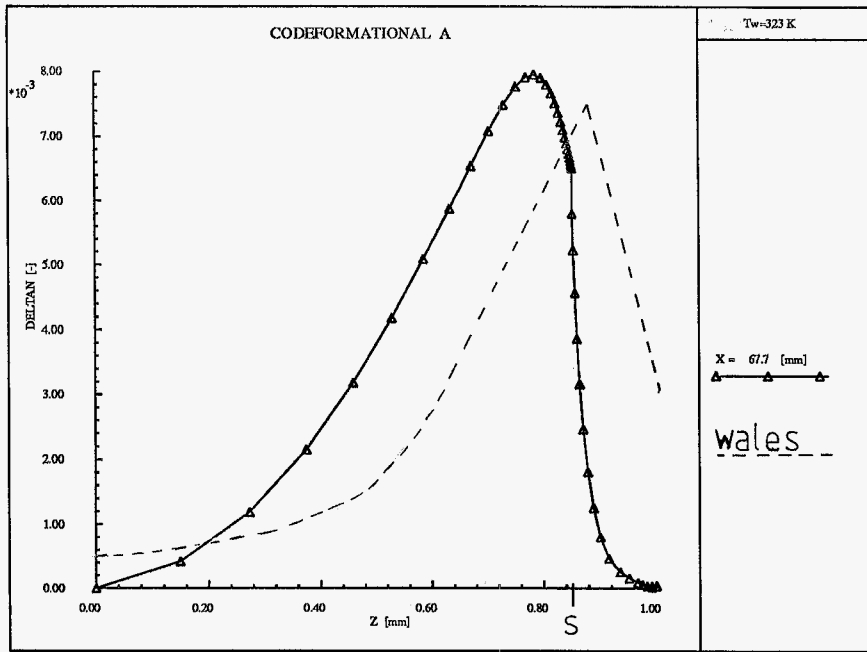


CODEFORMATIONAL A

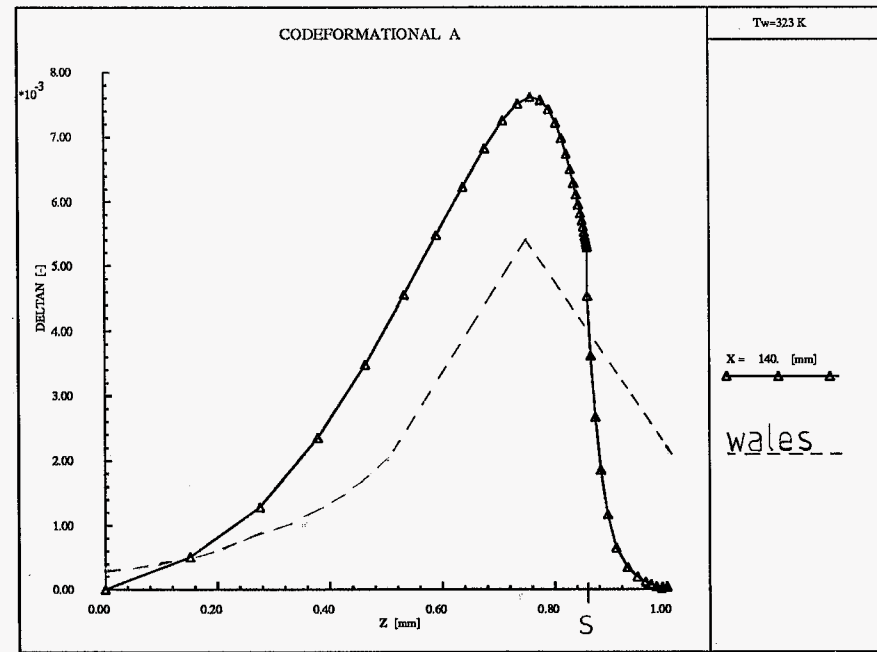
Wales $T_i = 250$



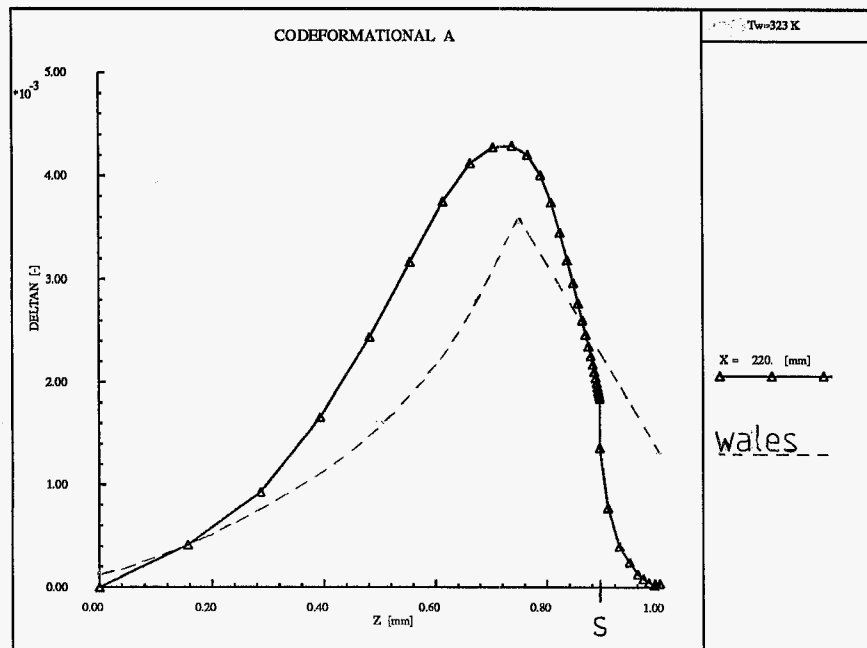




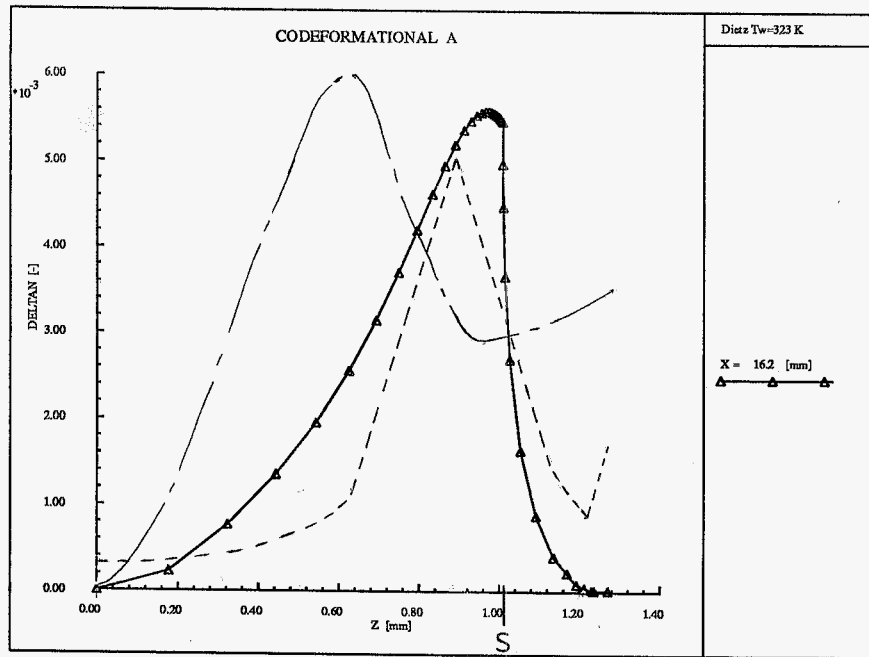
23a



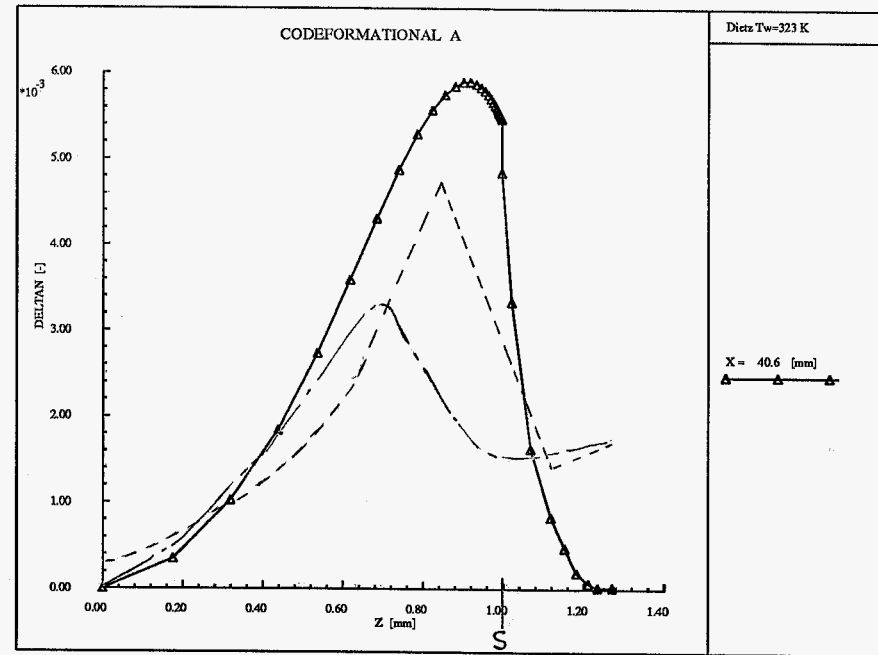
23b



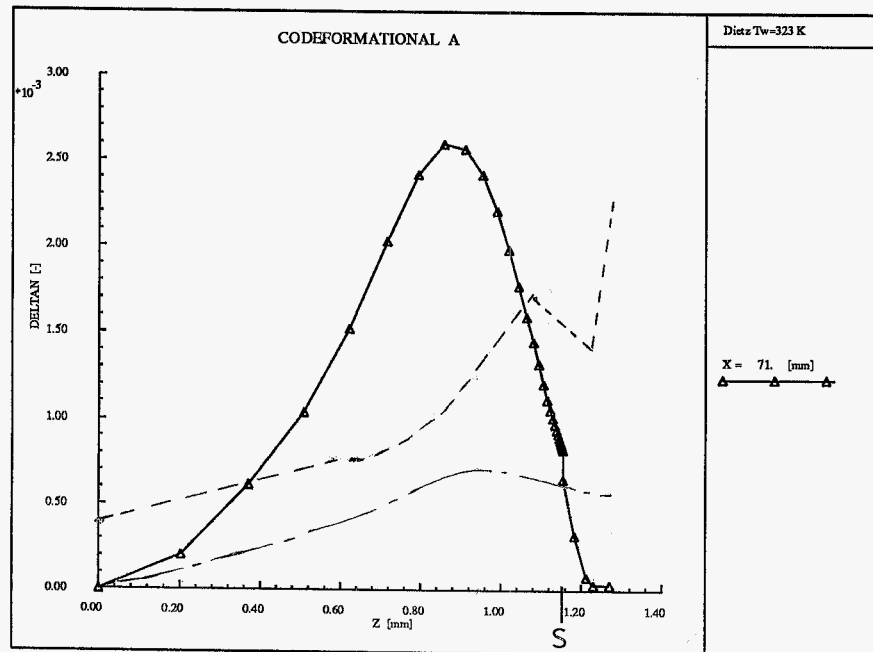
23c



24a



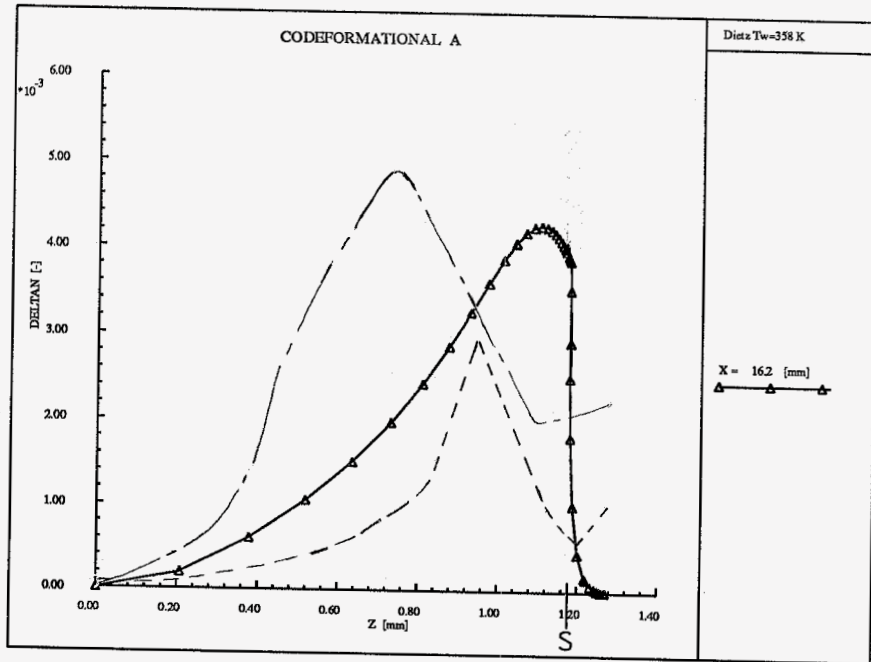
24b



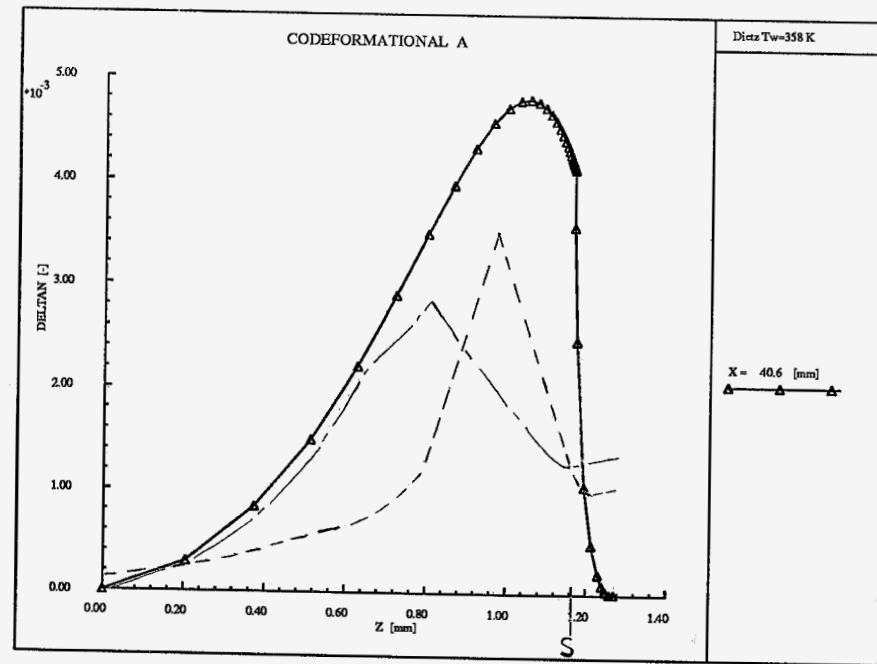
24c

Isayev (ber.)

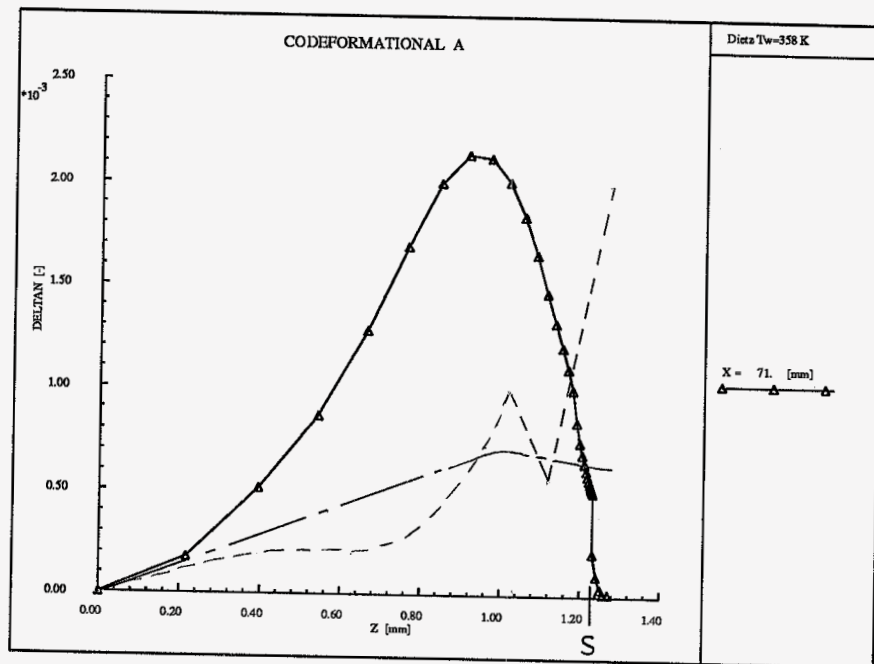
Dietz (met.)



25a



25b



25c

Isayev (ber.)

Dietz (met.)

Appendix 1. : Bepaling van $\tilde{\sigma}_{xz}$ en $\tilde{\sigma}_{zz}$.

Het uitgangspunt wordt gevormd door vergelijkingen (2.3 & 6). Uit (2.6) volgt voor de matrix-representatie van de relatieve rechtse Cauchy-Green rektensor:

$$\underline{C}_{t_i}(t) = \underline{F}_{t_i}(t) \cdot \underline{F}_{t_i}(t') = \begin{bmatrix} 1 & 0 & C'_{xz}(t_i-t') \\ 0 & 1 & 0 \\ C'_{xz}(t_i-t') & 0 & 1 + C'_{zz}(t_i-t')^2 \end{bmatrix} \quad (A1.1)$$

$$\text{met: } C'_{xz} = -\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)_{t_i} ; \quad C'_{zz} = \left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)_{t_i}^2$$

Voor de componenten $\tilde{\sigma}_{xz}$ en $\tilde{\sigma}_{zz}$ uit vergelijking (2.3) volgt m.b.v. (2.6) en (A1.1) na enig rekenwerk:

$$\tilde{\sigma}_{xz}(t_i) = -\exp\left[-\int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{dt''}{\lambda(t'')} \right] \left\{ -\tilde{\sigma}_{xz}(t_{i-1}) \right\} + \quad (A1.2a)$$

$$- \int_{t_{i-1}}^{t_i} \exp\left[-\int_{t'}^{t_i} \frac{dt''}{\lambda(t'')} \right] \frac{\eta(1-\dot{\lambda}) + \dot{\eta}\lambda}{\lambda^2} C'_{xz}(t_i-t') dt'$$

$$\tilde{\sigma}_{zz}(t_i) = \frac{\eta_i}{\lambda_i} - \exp\left[-\int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{dt''}{\lambda(t'')} \right] \left\{ -\tilde{\sigma}_{zz}(t_{i-1}) + \quad (A1.2b)$$

$$+ \frac{\eta_{i-1}}{\lambda_{i-1}} - 2 \tilde{\sigma}_{xz}(t_{i-1}) \cdot \left(-\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)_{t_i} \Delta t_i\right) \right\} +$$

$$- \int_{t_{i-1}}^{t_i} \exp\left[-\int_{t'}^{t_i} \frac{dt''}{\lambda(t'')} \right] \frac{\eta(1-\dot{\lambda}) + \dot{\eta}\lambda}{\lambda^2} (1 + C'_{zz}(t_i-t')^2) dt'$$

$$\begin{aligned} \text{met: } \quad \eta_i &= \eta(t_i) \quad ; \quad \lambda_i = \lambda(t_i) \quad ; \\ \eta_{i-1} &= \eta(t_{i-1}) \quad ; \quad \lambda_{i-1} = \lambda(t_{i-1}) \quad ; \\ \Delta t_i &= t_i - t_{i-1} \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \eta(t) &= \eta_i - \frac{t_i - t'}{\Delta t_i} (\eta_i - \eta_{i-1}) \\ \lambda(t) &= \lambda_i - \frac{t_i - t'}{\Delta t_i} (\lambda_i - \lambda_{i-1}) \end{aligned} \right\} t_{i-1} \leq t \leq t_i \quad (\text{A1.2c})$$

Er worden nu 2 integralen uit vergelijking (A1.2) uitgewerkt:

$$\begin{aligned} \exp \left[- \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{dt''}{\lambda(t'')} \right] &= \exp \left[- \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{1}{(d\lambda(t'')/dt'')} d(\ln \lambda(t'')) \right] = \quad (\text{A1.3a}) \\ &= \left(\frac{\lambda_{i-1}}{\lambda_i} \right)^{\Delta t_i / \Delta \lambda_i} \quad , \quad \text{met } \Delta \lambda_i = \lambda_i - \lambda_{i-1} \quad ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp \left[- \int_{t'}^{t_i} \frac{dt''}{\lambda(t'')} \right] &= \left(\frac{\lambda(t')}{\lambda_i} \right)^{\frac{t_i - t'}{\lambda_i - \lambda'}} \quad t_{i-1} \leq t' \leq t_i \quad (\text{A1.3b}) \\ &= \left(\frac{\lambda(t')}{\lambda_i} \right)^{\Delta t_i / \Delta \lambda_i} \end{aligned}$$

Hierbij is gebruik gemaakt van het lineaire verloop van λ tussen 2 opeenvolgende discrete tijdstippen volgen (A1.2c).

Vergelijkingen (A1.2a & b) worden na substitutie van (A1.3) verder uitgewerkt tot:

$$\sigma_{xz}(t_i) = + \left(\frac{\lambda_{i-1}}{\lambda_i} \right)^{\Delta t_i / \Delta \lambda_i} \sigma_{xz}(t_{i-1}) + \quad (A1.4a)$$

$$- (A \cdot INT2 + B \cdot INT3) C_{xz}^i$$

$$\sigma_{zz}(t_i) = \frac{\eta_i}{\lambda_i} - \left(\frac{\lambda_{i-1}}{\lambda_i} \right)^{\Delta t_i / \Delta \lambda_i} \cdot \left\{ -\sigma_{zz}(t_{i-1}) + \frac{\eta_{i-1}}{\lambda_{i-1}} + \quad (A1.4b)$$

$$- 2 \sigma_{xz}(t_{i-1}) \left(- \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} \right)_{t_i} \Delta t_i \right) \right\} +$$

$$- (A \cdot INT1 + B \cdot INT3) - (A \cdot INT3 + B \cdot INT4) C_{zz}^i$$

$$\text{met: } A = \eta_i + \frac{\eta_i - \eta_{i-1}}{\Delta t_i} \lambda_i - \frac{\lambda_i - \lambda_{i-1}}{\Delta t_i} \eta_i$$

$$B = - \frac{\eta_i - \eta_{i-1}}{\Delta t_i}$$

$$INT1 = \frac{\Delta t_i}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \left\{ \lambda_i^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) - 1} - \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) - 1} \right\}$$

$$INT2 = - \frac{\Delta t_i^2}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) - 1} +$$

$$+ \frac{\Delta t_i}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \left\{ \lambda_i^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i)} - \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i)} \right\}$$

$$INT3 = \frac{-\Delta t_i^3}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) - 1} - \frac{2 \Delta t_i^2}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i)} +$$

$$+ \frac{2 \Delta t_i^2}{\Delta t_i^2 - \Delta \lambda_i^2} \left\{ \lambda_i^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) + 1} - \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) + 1} \right\}$$

$$\begin{aligned}
 INT_4 = & \frac{-\Delta t_i^4}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) - 1} - \frac{3 \Delta t_i^3}{\Delta t_i - \Delta \lambda_i} \lambda_{i-1}^{\Delta t_i / \Delta \lambda_i} + \\
 & - \frac{6 \Delta t_i^3}{\Delta t_i^2 - \Delta \lambda_i^2} \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) + 1} + \\
 & + \frac{6 \Delta t_i^3}{(\Delta t_i^2 - \Delta \lambda_i^2)(\Delta t_i + 2 \Delta \lambda_i)} \left\{ \lambda_i^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) + 2} + \lambda_{i-1}^{(\Delta t_i / \Delta \lambda_i) + 2} \right\}
 \end{aligned}$$

~~_____~~

Appendix 2. : Bepaling van de spanningen bij de aansluiting.

Hierbij wordt ervan uitgegaan dat het in de matrix binnenkomende materiaal, stationaire isotherme afschuifstroming heeft ondergaan. De waarde voor de viscositeit en de relaxatietijd gedurende deze stroming, worden aangeduid met een index "0". Vergelijking (2.2) is nu als volgt te schrijven:

$$\begin{aligned}\sigma(t) &= \frac{\eta_0}{\lambda_0} \mathbb{I} - \int_{-\infty}^t \exp\left[-\frac{1}{\lambda_0} \int_{t'}^t dt''\right] \frac{\eta_0}{\lambda_0^2} \underline{\underline{C}}_t(t') dt' \quad (A2.1) \\ &= \frac{\eta_0}{\lambda_0} \mathbb{I} - \int_{-\infty}^t e^{-(t-t')/\lambda_0} \frac{\eta_0}{\lambda_0^2} \underline{\underline{C}}_t(t') dt'\end{aligned}$$

Deze vergelijking wordt nu in componentvorm uitgewerkt. Neem hiervoor $\underline{\underline{C}}_t(t')$ volgens (A1.1). Er wordt gebruik gemaakt van de volgende integralen:

$$\int_{-\infty}^t e^{-(t-t')/\lambda_0} dt' = \lambda_0 \quad (A2.2a)$$

$$\int_{-\infty}^t e^{-(t-t')/\lambda_0} (t-t') dt' = \lambda_0^2 \quad (A2.2b)$$

$$\int_{-\infty}^t e^{-(t-t')/\lambda_0} (t-t')^2 dt' = 2\lambda_0^3 \quad (A2.2c)$$

Voor σ_{22} en σ_{x2} kan dan geschreven worden:

$$\sigma_{22}(t) = -2\eta_0\lambda_0 \dot{\gamma}_s^2 \quad (A2.3a)$$

$$\sigma_{x2}(t) = \eta_0 \dot{\gamma} \quad (A2.3b)$$

met $\dot{\gamma}_s$ de stationaire afschuifnelheid.