

知识介绍

聚合物挤出过程中的数值模拟技术^{*}张 敏¹, 孙 胜², 贾玉玺^{2,3}, 宫晓峰²

(1 山东大学机械工程学院, 济南 250061; 2 山东大学模具工程技术研究中心, 济南 250061;

3 中国科学院长春应用化学研究所, 长春 130022)

摘要:介绍了计算流体力学中常用的数值计算方法, 并从螺杆挤出过程、口模的设计以及挤出胀大等方面综述了数值模拟技术在聚合物挤出过程中的应用, 最后针对聚合物挤出过程数值模拟发展的方向作了简要论述。

关键词:聚合物挤出; 数值模拟技术; 计算流体力学

引言

聚合物挤出过程是一个连续成型的过程。如图 1 所示, 物料从料斗加入后, 在机筒中经压缩、加热、混合成熔融态流体, 被螺杆输送到挤出流道中, 物料在旋转螺杆与料筒之间进行输送、压缩、熔融塑化。模塑料在挤出模中的成型过程包括稳流、分流、成型、冷却和定型等, 是在挤出模的不同部位连续不断地进行的, 聚合物在整个挤出模内始终处于运动状态, 具有很强的动态特性。将计算流体力学应用于聚合物成型过程的模拟, 可以优化加工过程, 调控产品的结构和性质, 有助于实现加工的自动化控制, 提高劳动生产率^[1]。

对聚合物流体流动的研究是复杂流体研究领域中最活跃的分支之一。其主要研究内容包括两个方面: 一是如何描述聚合物的流动性质, 聚合物的流动性质是用本构方程描述的, 即如何建立其本构方程; 二是确立本构方程后, 在加工机械的复杂边界条件下, 如何精确求解高度非线性、非局域的流体力学控制方程。考虑到聚合物熔体流变性质、螺杆形状及流道几何形状的复杂性, 数值计算往往是一件十分艰巨的工作。而数值方法的选择是决定计算成败和质量的关键, 因此长期以来人们一直在求索经济、方便而又可靠的数值方法。

1 常用数值计算方法简介

控制流体流动的基本定律是质量守恒定律、动量守恒定律和能量守恒定律。由它们可以分别导出连续性方程、动量方程(又称纳维尔-斯托克斯方程)和能量方程, 三者联立得到 Navier Stokes 方程组, 简称为 N-S 方程组。对聚合物流体进行数值模拟的最终目的是求解 Navier Stokes 方程组。这是一个偏微分方程组, 在通常情况下, 它需要通过模拟手段得到在容许误差范围内的数值近似解。常用的数值计算方法包括有限差分方法、边界元方法、有限体积方法、有限元方法等^[2]。这些方法的基本出发点是一致的, 即对整个求解空间作离散处理, 通过划分网格作局部线性化近似, 把求解非线性偏微分方程约化成为求解每一时刻的线性方程组, 之后再依照一定的初始条件或边界条件进行求解^[3]。

基金项目:国家杰出青年科学基金(50425517), 国家自然科学基金(50403009);

作者简介:张敏(1971—), 山东大学机械工程学院, 讲师, 在职博士生, 主要从事材料成型过程的计算机辅助设计与数值模拟研究。E-mail: zhangmin2616@sdu.edu.cn.

通讯联系人:孙胜, 贾玉玺 jia-yuxi@sdu.edu.cn.

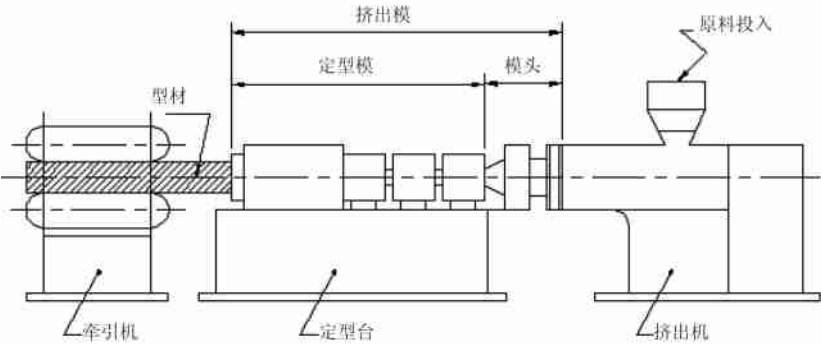


图 1 塑料型材挤出成型机组示意图
Figure 1 Sketch map of plastic profile extruding processes

- (1) 有限差分方法:是一种直接将微分问题转变为代数问题的近似数值解法。有限差分法曾经是一种在计算流体中用来求解物体运动时占主导地位的数值方法。但用此方法求解边界条件复杂、尤其是椭圆型问题不如有限元方法方便^[3]。
- (2) 有限元方法:在计算流体力学方面,有限元方法约从 20 世纪 60 年代中期开始使用。有限元法的基础是极值原理和剖分差值。它吸收了有限差分法中离散处理的内核,又采用了变分计算中选择逼近函数并对区域进行积分的合理方法,具有广泛的适应性,特别适合于几何、物理条件复杂的问题,而且便于程序的标准化,在粘弹流体流动模拟中应用广泛^[3]。
- (3) 边界元方法:边界元法的优点是将全域的求解化为区域边界上的求解,简化了计算;另外由于有限元法的近似范围在整个区域上,边界元法的近似范围仅在区域边界处,因此边界元法的精度高于有限元法。边界元法的缺点在于,其方程组的系数矩阵不对称且为满阵,有时是近似的奇异矩阵,因此对复杂形状的流场,计算效率较低,而且计算时需要采用解析函数的基本解,所以目前只适用于线性问题及基本解已知的问题^[3]。
- (4) 有限体积方法:有限体积法的最大优点是即使在粗网格下也能得到准确的积分守恒,从而在实际计算中将大大节省内存的占用,提高计算效率^[2,3]。
- 总之,以上各种数值解法各有特点,在聚合物流体数值模拟中都有应用。具体选用何种数值方法需根据问题的复杂程度决定,如求解线性问题可以考虑选择简便快捷的有限差分法和边界元法;对于非线性问题选用有限元方法和有限体积法,一般地,对椭圆型问题使用有限元法,对抛物型问题和双曲线问题则使用有限体积法^[2,3]。

2 螺杆运动过程的数值模拟

任何一根(组)螺杆都必须完成加料、输送、压缩、熔融、混合和排气等六大基本功能。物料在螺杆上停留的时间至多几分钟,在这样短的时间内,发生了大量的物理及化学过程。螺杆挤出理论研究的目的一就是如何确保塑化质量的前提下尽可能提高产量。在螺杆挤出过程数值模拟的发展历程中,在以下几个方面逐渐完善:

- (1) 聚合物的描述从等温牛顿流体模型到纯粘性幂律流体模型进而发展到非等温非牛顿流体模型。1980 年,Denson 等忽略啮合区的影响,用有限元法对牛顿流体在不同几何形状螺纹元件中的流动作了初步分析和计算,分析了轴向压力分布对流体流动的影响^[4]。同年,Booy 讨论了宽浅和窄深两种螺槽中牛顿流体的等温流动,建立了拖曳流、压力流和啮合区漏流的方程,分析了螺槽的非充满现象^[5]。1987 年,Szydlowski 等忽略横向剪切力和啮合区正位移输送作用,提出了新的熔体输送物理模型,并应用流体润滑近似理论求解了矩形槽中牛顿流体的二维等温流场^[6]。但聚合物在机筒中流动受到温度、压力变化的影响,若假设为等温状态,与实际情况有很大差距。一方面,由于成型工艺或制品性能的要求,对机筒须加

热或用冷却剂制冷,这使得机筒内各处温度分布不均匀;另一方面,聚合物熔体在流动过程中以粘滞性方式形变,所损耗的能量转变为热,从而使熔体温度上升。而温度的变化会引起聚合物粘度的显著变化,从而对聚合物的流动产生影响。实验测定,即使模具壁与芯部温差在 $1\sim 2^{\circ}\text{C}$,粘度的变化亦十分明显。因此,为更精确地描述聚合物的流动,聚合物熔体采用非等温非牛顿模型来模拟^[1]。彭炯等建立了非牛顿粘性聚合物熔体在同向旋转双螺杆挤出机中的三维非等温流动模型,利用流体动力学分析软件 PolyFLOW,给出了螺杆区内速度场、温度场、压力场以及粘性耗散热的分布^[7]。

(2)随着挤塑机的发展,螺杆挤出的数值模拟逐渐由简单的挤出传递现象模拟转向双螺杆复杂挤出流动模拟。马秀清对双螺杆挤出过程熔体输送段常规螺纹元件流道和引入轴向循环段的组合流道的流场进行了分析。建立了非啮合、啮合同向及啮合异向常规螺纹元件流道和引入轴向循环段的组合流道的物理模型与有限元模型,利用 ANSYS 软件对所建立的模型进行了数值模拟,得到了压力场、速度场及粘度场,并分析了几何参数、物性参数及操作参数对引入轴向循环段的非啮合、啮合同向及啮合异向双螺杆挤出过程输送特性和混合能力的影响^[8]。

(3)几何模型由二维发展为三维流动的模拟。Yoshinaga 等用有限元方法对紧密啮合同向双螺杆挤出机啮合段三维流动进行数值模拟,对双螺杆的分散及分布性混合进行了量化^[9]。李鹏等用 ANSYS 软件对全充满状态下的六棱柱元件熔体输送段的流场进行了三维等温非牛顿模拟,得出了流场中的压力、速度和粘度,通过后处理程序计算出流场的流量、回流系数、剪切速率和剪切应力^[10]。Moysey 等用三维离散单元法(Discrete Element Method)模拟了单螺杆固体输送段的粒子运动情况^[11]。Hu 等考虑挤出机的壁面滑移因素,分析了双螺杆挤出机啮合区的速度场和剪切速率场,得到了聚合物在螺杆啮合区的压力降、平均剪切速率以及混合度系数^[12]。Convas 等运用优化算法和数值模拟相结合的技术,对挤出机螺杆的几何形状进行了优化设计^[13]。

(4)由仅研究螺杆挤出过程到研究螺杆——模具整个体系的模拟。Chiu 等以螺杆速度为输入值,聚合物粘度为输出值,由实验得到动态模型,利用约束最小化差异控制理论(Constrained Minimum Variance, CMV)控制螺杆与模具之间聚合物粘度的变化^[14]。

3 挤出模设计中的数值模拟

聚合物在模具中的流变学和热力学过程以及在模头和定形模之间或与两者有关的任何拉伸过程都将对型材制品的力学特征和表面质量有决定性的影响。现代新型挤出机挤出能力越来越大,在提高挤出量的时候,塑料熔体在模头中的稳定流动易被破坏,塑料的临界剪切速率也易被超越,其结果往往造成型材制品的表面出现毛糙、螺旋形和波浪形等不规则现象(即鲨鱼皮症和熔体破碎)。由于挤出量及挤出速度的提高,型材型坯在定形模和水箱中的停留时间缩短,因此,在模具设计中,必须精确分析和计算塑料熔体和型坯在模具中流动、形变和温度的关系,以及流道的几何形状、操作条件、流变和热力学性能等。

1985年,Bush 首次将边界元法应用于牛顿和广义牛顿流体的数值模拟中^[15]。近来,以高斯离散理论为基础的有限体积法在粘弹流体流动模拟中有一些应用,Sasmal 对 K-BKZ 流体的 4:1 突缩流动进行了数值模拟^[16]。但有限体积法中边界条件的加入较有限元法复杂,因此仅限于简单几何流场中的粘弹流动模拟。

如前所述,有限元法在粘弹流体流动模拟中也有广泛的应用。Feng 等采用 Oldroyd-B 本构方程,用有限元方法开展了聚合物熔体在口模内的二维动态等温模拟,研究了模壁一粒子、粒子一粒子相互作用的流动机制^[17]。Matallah 等考虑不同的流道几何形状,考虑聚合物的弹性,模拟熔体在口模内的流动^[18]。Sun 等采用 PTT 本构方程,用有限元方法分析了聚合物在模具内收敛区流动时的拉长效应对流体的压力分布和聚合物制品形状的影响^[19]。Arda 等研究了模具出口形状、模具表面质量和含氟聚合物添加剂对制品表面质量(主要针对鲨鱼皮现象)的影响^[20]。Michaeli 等将有限元分析(Finite-Element-Analysis)与流动分析网络(Flow Analysis Network)技术相结合,利用一种优化方法得到较理想的流道几何形状^[21]。

在有限元求解方法中,压力—速度混合有限元法是一种历史较长的传统方法,但它在求解粘性流体,

尤其是非牛顿流体的流动时存在的一些固有不足常常困扰着求解过程。罚函数法最初在有限差分法中得到广泛运用,1976年,Hughes等将罚函数有限元方法用于不可压缩粘性流的计算中^[22]。罚函数有限元法与混合有限元法的最大区别是将压力项作为连续方程的一个罚项代入到动量方程中,从而避免了直接对压力项的求解。但其罚数的选择有一定的技巧,而且计算精度较低。文献^[23]用一个算例比较了罚函数有限元法与混合有限元法的不同,得出以下结论:

(1)混合有限元法同时对速度和压力进行求解,节点自由度既含速度项又含压力项,未知数总量大,而罚函数有限元法将速度和压力的求解分成两步,降低了单元刚度矩阵的阶数;

(2)采用混合有限元法时,有些节点上只含有速度或压力自由度,而另一些节点上却两者都有,给单元刚度矩阵集成成总体刚度矩阵这一过程带来不便,而在罚函数有限元法里节点只有三个速度自由度,因此软件编制所需工作量少,软件简单可靠;

(3)应用混合有限元法产生的总体广义刚度矩阵因对角线上含有零元素而失去正定性,在刚度矩阵非正定时,总体广义力一位移方程的求解比较困难。而罚函数有限元法导出的是正定的总体广义刚度矩阵;

(4)应用混合有限元法,压力项的求解对网格划分的疏密程度和初始压力点的选取很敏感,网格划分不当或初始压力点选择不合适都有可能产生错误的压力解;

(5)对同一问题,网格划分相同时,混合有限元法得到的解较罚函数有限元法得到的解精度高。

4 聚合物挤出胀大的数值模拟

挤出胀大是挤出成型中常见的现象。挤出胀大通常与聚合物物性、生产工艺、口模构形和挤出设备等因素有关,而且最终的形状、尺寸和停放、冷却等后续工序有关。数值预测挤出胀大程度并指导挤出工艺和模具设计有重要的工程应用价值。但自由胀大表面的存在又增加了粘弹流动问题的非线性特性。二维情况下,自由表面可以采用流线法和流率守恒法,但三维流场中自由表面的计算变得更为复杂。

由于边界元法和有限体积法的计算量低于有限元法,这有利于这两种方法在三维粘弹流动模拟中的应用。1988年,Tran-Cong应用边界元法第一次研究了粘弹流体的三维挤出胀大,用修正的单模式PIT本构方程描述粘弹流体的流变特性^[24]。

在有限元方法中,针对聚物流体的高Weissenberg数问题,也发展了许多有效的方法。如在经典的有限元方法中,通过选用更好的本构方程,合理的确定边界条件(如使用滑移边界条件)可以提高临界Weissenberg数。Wambersie等利用有限元法研究了非牛顿幂率流体的出模膨胀^[25]。Mitsoulis等对三维挤出胀大进行了数值模拟,用粘性、粘塑性及粘弹性模型对此方法进行了测试,并对三维口模的设计进行了研究^[26]。李勇等采用K-BKZ积分型本构方程描述聚合物熔体,用有限元方法分析三维挤出胀大,通过沿流线积分计算应力,经迭代得到出口处的自由面,最终得到挤出物的形状、速度、压力分布^[27]。黄树新等应用Luo提出的基于常规有限单元的应力计算方法^[28]和范毓润处理自由胀大表面的方法^[29],模拟了积分型Maxwell粘弹性流体在矩形流道内的挤出胀大,得到了Weissenberg数达1.0以下的解^[30]。近年来,发展了一些有限元方法也使临界Weissenberg数提高很多。有代表性的如1987年Marchal等发展了SUPG(Streamline-Upwind/Petriv-Galerkin)方法^[31]和1995年Guénette提出的DEVSS(Discrete EVSS)方法^[32]等。

5 展望

要提高聚合物挤出制品的质量,挤出模的设计是关键。挤出模设计要解决模塑料流动的非牛顿特性以及模塑料坯出模膨胀、牵引变形和冷却收缩等综合作用的问题,并受到挤出机组(主要为螺杆、机筒)、模塑料配方(包括配方组分和混合状况)和操作工艺(温度、速度、冷却水和真空度)等多方面的影响。基于上述,作者认为聚合物挤出过程数值模拟有以下几个重要方向:

(1)深入研究复合材料挤出成型数值模拟技术,从而对新型挤出工艺的工艺参数、模具结构等方面进行有针对性的指导。

随着聚合物材料应用范围的不断扩大,出现了许多先进的挤出工艺,如多组分聚合物挤出技术、钢塑共挤技术等,这些新型的挤出工艺为聚合物成型技术的数值模拟技术提出了更高的要求。例如:对于多组分聚合物挤出模具,流变性质不同的两种聚合物熔体通过一共同流道时,我们所关注的是这一共同流道中所产生的压力损失、速度和温度分布,以及熔体停留时间及热应力和机械应力状况。各组分之间的粘度比、流量比以及模具结构参数(如长径比)都会对相界面产生影响。计算这些问题可以采用与单层流动相同的方法进行处理。但是对共挤塑流动所特有的不同边界条件必须予以考虑:作为边界线的界面及自由表面,事先是未知的,采用有限元方法求解时,求解区域是不确定的;界面两侧的压力不相等。而这些会使方程求解显得更加困难。

(2)将挤出理论与高分子材料科学相结合进行研究。

在配方、加工条件、螺杆结构变化时,研究高分子材料在挤出过程中的物理化学变化规律(如分散相的分散速度与分散质量、相界面的形成过程及其结构特征、微观结构形态的形成和变化规律等)。例如对反应挤出工艺过程进行数值模拟从而得到较合理的挤出工艺参数、物料配方、螺杆结构等。

(3)定型模内型材的冷却状况直接影响型材的成型质量,对有些挤塑型材甚至是非常关键的,而且定型模的冷却方式也是多样化的。应用数值模拟技术进一步研究型材在定型模内冷却过程的瞬态温度场,对定型模设计乃至型材最终的截面尺寸精度都有着重要意义。

(4)任何一个物理过程数值模拟结果的准确度首先取决于物理问题的数学模型是否正确,如果所用的数学模型本身不合适,那么即使在数值模拟方法上做了努力,仍然不能提高求解的准确度^[2]。因此如何利用实验验证对数值模拟结果的准确度进行评价并修正数学模型,这是一个十分重要而有意义的工作。

如前所述,对流道的几何形状及数学模型进行简化是研究人员为了计算简单而采用的一种主要方法,如果主要目的是预测流动的整体特性如流率、压降等,则可能得到比较合理的结果。但是如果聚合物挤出过程模拟的目的是预测熔体流动的重要的细微之处,如熔接线的准确位置,那么流道简化是不可取的。从上世纪60年代开始,国际上开始借助可视化技术建立和完善挤出理论,并为建立可靠的物理模型以及验证数学模型的计算精度提供技术手段。另外将快速制造技术应用于挤出模,在已有的金属模内衬入通过激光固化快速成型技术(Stereolithography)生产的环氧树脂,通过改变环氧树脂模的形状可以快速改变挤出型材的形状,而不需制造昂贵的金属模。

(5)将优化理论及算法与数值模拟技术相结合,从根本上解决单纯依赖经验和技巧的设计方法,建立完善的聚合物挤出过程CAE(Computer Aided Engineering)系统。目前国外已逐渐深入开展这方面的研究^[13, 21, 33]。

现有的聚合物挤出CAE系统建立在数值模拟的基础上,但仅仅是校验设计方案的合理性,所谓“优化”,仅是反复的校验、试凑,最终的设计方案仍需设计者丰富的经验和技巧,通过对多个方案的反复计算、比较、分析和判断来确定,这样使设计和分析过程仍带有盲目性和随机性。如何利用现有的模拟结果,借助于优化理论构造有效的反问题算法,给出明确的改进方向和尺度,对优化模具设计参数和成型工艺参数十分重要。

参考文献:

- [1] 唐志玉. 塑料模流变学设计. 北京: 国防工业出版社, 1990.
- [2] 陶文铨. 数值传热学. 西安: 西安交通大学出版社, 2001.
- [3] 瞿金平, 胡汉杰. 聚合物成型原理及成型技术. 北京: 化学工业出版社, 2001.
- [4] Denson C D, Huang B K. Polym Eng Sci, 1980, 20(14): 965~971.
- [5] Booy M L. Polym Eng Sci, 1980, 20(18): 1220~1228.
- [6] Szydlowski W, White J L. Adv Polym Technol, 1987, 7(2): 177~183.
- [7] Peng J, Chen J N. J Beijing Inst Technol, 2002, 11(2): 189~192.
- [8] 马秀清. 双螺杆挤出过程轴向循环理论分析及实验研究[博士论文], 北京化工大学, 2001.
- [9] Yoshinaga M, Katsuki S, et al. Polym Eng Sci, 2000, 40(1): 168~178.

- [10] 李鹏,耿孝正,马秀清. 中国塑料, 2001, 15(6):73~77.
- [11] Moysey P A, Thompson M R. Polym Eng Sci, 2004, 44:2203~2215.
- [12] Hu D D, Chen J N. Mater Sci Forum, 2003, 423~425:759~762.
- [13] Convas J A, Gasps C A. Plast, Rubber Compos, 2004, 33:416~425.
- [14] Chiu S H, Lin C C. J Polym Res, 1998, 5(3): 171~175.
- [15] Bush M B, Thien N P. J Non-Newton Fluid Mech, 1985, 18(2):211~218.
- [16] Sasnal G P. J Non-Newton Fluid Mech, 1995, 56:15~47.
- [17] Feng J, Huang P Y, et al. J Non-Newton Fluid Mech, 1996, 63:63~88.
- [18] Matallah H, Townsend P, Webster M F. J Non-Newton Fluid Mech, 2000, 90:217~241.
- [19] Sun J, Waucquez C, Rubin Y. J Reinf Plast Compos, 2002, 21:431~440.
- [20] Arda D R, Mackley M R, J Non-Newton Fluid Mech, 2005, 126:47~61.
- [21] Michaeli W, Kaul S. J Polym Eng, 2004, 24:123~136.
- [22] Hughes T, Taylor J R, Levy J F. Proceedings of the second international symposium on finite element methods in flow problems, Italy, 1976.
- [23] 柳和生,胡海明. 青岛化工学院学报, 1995, 16(4):376~381.
- [24] Tran-Cong T, Phan-Thien N. Rheol Acta, 1988, 27:21~30.
- [25] Wambersie O, Crochet M J. Int J Numer Methods Fluids, 1992, 14(3):343~360.
- [26] Mitsoulis E. Comput Methods Appl Mech Eng, 1999, 180(3):333~344.
- [27] 李勇,江体乾. 力学学报, 2002, 34(6):856~862.
- [28] Luo X L, Mitsoulis E. J Rheol, 1989, 33(8):1307~1327.
- [29] 范毓润. 挤出胀大的有限元分析和实验[博士学位], 浙江大学, 1988.
- [30] 黄树新,江体乾. 力学与实践, 2001, 23(6):18~21.
- [31] Marchal J M, Crochet M J. J Non-Newton Fluid Mech, 1987, 26:77~114.
- [32] Guénette R, Fortin M. J Non-Newton Fluid Mech, 1995, 60: 27~52.
- [33] Vaddiraju S R, Kostic M, Reifschneider L, et al. ANTEC, 2004: 76~80.

Numerical Simulation Techniques in Polymer Extrusion Processes

ZHANG Min¹, SUN Sheng², JIA Yu-xi^{2,3}, GONG Xiao-feng²

(¹ School of Mechanical Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China;

² Mould & Die Engineering Research Center, Shandong University, Jinan 250061, China;

³ State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Changchun Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022, China)

Abstract: The numerical calculation techniques in CFD (Computational Fluid Dynamics) were summarized. Recent advances in numerical simulations of polymer extrusion processes, including screw extruding procedure, extrusion die design and extrudate swell, were reviewed in details. Future developments of the numerical simulation were also discussed accordingly.

Key words: Polymer extrusion; Numerical simulation technique; Computational fluid dynamics