

知识介绍

聚合物口模挤出流动分析方法

柳和生,涂志刚,孙燕萍,包忠诤

(南昌大学机电工程学院,南昌 330029)

摘要:综述挤出口模中聚合物熔体流动分析方法。着重讨论了包括有限差分法、有限元法和边界元法等在内的数值方法。并且对挤出口模流道几何形状简化和数学模型简化进行了评价。

关键词:聚合物挤出;流场;数值方法;有限元法

前言

在聚合物口模挤出研究中,熔体流动分析及其计算机模拟的目的在于:(1)获得挤出口模构型及挤出工艺与挤出结果之间的规律性关系,对口模进行优化设计;(2)提出挤出工艺设计的优化原则,对生产工艺过程进行自动控制,及时准确地解决生产中出现的产品质量问题。以往工业生产中挤出口模的设计往往采用“trial and error”的方法。由于反复修改口模设计和成型工艺条件而造成成本激增。目前,CAE/CAD 技术作为橡胶、塑料挤出口模设计的工具已被广泛接受,并逐渐引起重视。挤出成型 CAE/CAD 技术的研究起步较注塑成型要晚,主要因为挤出成型过程是动态的三维流动,从而使数值模拟的难度和工作量增大,计算时间增长。虽然对于截面形状简单的型材,可以采用现有的 CAE/CAD 技术进行口模设计,但异型材挤出口模比较复杂,设计难度很大,对其口模挤出还没有建立一套完整的系统理论,研究工作也较零散,尚未达到很好地指导工程实际的要求。

随着异型材等复杂截面的挤出制品剧增,“trial and error”方法的局限性日渐明显。把 CAE/CAD 技术运用于挤出口模设计,在设计阶段就可以模拟出流道几何形状、成型工艺条件对制品质量的影响、分析螺杆的熔化能力、流体在口模中的流动情况、预知流线分布是否均匀以及离模膨胀是否合理。这样,把试模过程放在计算机上进行,可以优化口模设计及成型工艺条件,大大提高试模一次成功率。目前,高分子材料挤出成型正朝着高速、高质、高效方向发展,不断提高生产的自动化程度有利于精确控制制品尺寸^[1]、提高原材料利用率、提高产品质量和降低成本^[2],并及时解决生产过程中出现的问题^[3,4]。而这两点都以对熔体流动状态的充分研究为前提。因此流动分析是挤出口模设计以及挤出过程自动控制的基础,流动分析方法直接关系到计算机模拟结果是否可靠,决定着能否较客观地反映熔体的流动状态。

1 分析途径

流动分析的关键是获得能反映口模内熔体流动和传热全貌的压力场、应力场、速度场、温度场和熔体在口模内停留时间分布等指标。总的来说这些指标的获得有如下几个途径。

基金项目:国家自然科学基金项目(项目号:59763002);

作者简介:柳和生(1965—),男,江西都昌人,南昌大学机电工程学院教授,博士后,博士生导师,主要从事塑料挤出和注塑成型研究,曾主持和参与完成国家及省部级项目 10 余项,发表论文 100 余篇。

(1)首先是实验决定的方法,这是最直接的手段,但是由于要进行大量的实验,这样做是非常耗时和昂贵的,仅用于验证计算结果的合理性,一般不采用。

(2)解析解,只有对于少数简单截面几何形状如圆形、狭缝形等的流道,而且采用非常简化的数学模型,才能得到解析解。

(3)数值解,在挤出成型研究中解析解的方法有很大的局限性,对于象异型材一类具有复杂截面几何形状,其口模中的熔体流动状态非常复杂,特别是在成型段之前的过渡区域中,熔体呈现三维流动,只能采取数值求解。尽管这样的过程是很耗时的,而且数值求解很大程度上还受到数值方法和计算机能力的限制,但无论如何,数值分析仍然是聚合物加工中流动分析强有力的工具。

2 数值方法

数值方法在流体力学中的应用是同计算机的发展相互联系的,近 30 多年来,计算流体力学方法发展迅速,有限差分、有限元、边界元等方法为聚合物口模挤出流动分析提供了强有力的计算工具。

2.1 有限差分法(Finite Difference Method)(FDM)

有限差分法是最早采用的数值方法。有限差分法包含三个部分,首先是流体力学问题的数学描述,其次是将流体力学问题离散化,最后是数值求解。第一部分归结为流体力学问题,第二部分简而言之就是以差商代替微商,从而建立代数方程形式的差分方程,进行近似求解。该方法简便,适合于一维问题和时间域的离散处理,但对复杂边界的适应性差^[5],所以,单独使用有限差分法对聚合物熔体流动进行数值模拟的研究较少^[6~12]。文献[11]提出了一种解变系数偏微分方程的任意差分精细积分法,它既保留了差分法的各种优点,又具备有限元法易于处理各类边界问题的特点,是高精度的显式差分格式。

2.2 有限元法(Finite Element Method)(FEM)

在 60 年代末至 70 年代初,有限元在非牛顿流体力学中应用得以深入发展。它是解大型非牛顿流体力学问题的数值方法中使用最广,最具有代表性的方法。有限元法的核心是根据变分原理或方程余量与权函数正交化原理建立积分表达式。它将在整个积分区域中的求解函数离散为若干单元区域的连续函数,再通过单元积分,总体合成为代数方程形式的有限元方程。与有限差分法相比,有限元法适合于复杂区域和边界条件的离散,而且对每个区域的近似解是连续的^[13]。

在聚合物加工研究中,有限元法的使用非常普遍,在挤出成型中,流动分析、挤出胀大、不稳定流动等的研究,大多采用有限元法,或与有限差分法结合使用。以下着重对以有限元为基础发展而来的一些方法进行讨论。

2.2.1 混合有限元法^[14,15] 压力-速度混合有限元法是一种历史较长的传统方法,它同时对速度和压力进行求解,速度与压力相互耦合。因此,节点自由度既含速度项又含压力项,未知数总量大。若求解区域较大或网格划分较细,则计算时未知量将占用大量的计算机内存。因此,其应用受到一定的限制。

2.2.2 FAN 方法(Flow Analysis Network)^[16,17] 这是 Tadmor 在 70 年代提出的一种有限元方法,能解决聚合物加工中经常遇到的熔体在复杂几何结构中的二维流动问题,可用于注塑模和挤出口模中熔体的流动分析,流体可以是任意不可压缩非牛顿流体,但是应是非弹性、与时间无关的、等温的流体。流场划分成一系列相同的正方形欧拉单元网络,每一个节点落在单元的中心,对局部的流场分析,得到一系列节点压力未知的线性代数方程,迭代求解这些方程的同时,可以得到压力分布和流量

分布。Tadmor 曾预言 FAN 方法将会发展成高分子材料加工研究中强有力的一种计算工具。

2.2.3 罚有限元法(“Penalty”Finite Element Method)^[15, 18~22] 采用罚有限元法,单元广义刚度矩阵的阶数比采用混合有限元法低^[19, 20],且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,压力场可用代数法求得,因此,罚有限元法可以节省计算机内存,提高计算机精度,允许划分较细的网络。作者建议在对聚合物成型加工过程中的熔体流动进行数值计算时,应将罚有限元法列入数值方法的优选范围。

2.2.4 富有限元法, (“Enriched”Finite Element Method)^[23, 24] 对于非牛顿流体,某些简单的流动用标准(“standard”)元 Q_1P_0 , 进行有限元模拟,能得到相当精确的速度场,通过相邻 Q_1P_0 元素的平均压力,可以获得一个合理的压力分布。但是,在聚合物加工中大部分的熔体流动相当复杂,必须进行三维流动分析,用 Q_1P_0 元无法解决一般的三维问题,因而,采用满足 Babuška-Brezzi 条件的“富”有限元法 $Q_1^+P_0$, 能解得精确的速度和压力分布, $Q_1^+P_0$ 元是在每一个 Q_1P_0 元的六个面中心,加上一个速度节点而得到,而在每边的中心再加上一个速度节点,又得到另一多变量 $R_2^+P_0$ 元。

2.2.5 控制体积法(Control-Volume Method)(CVM)^[25, 26] 控制体积法是 FAN 方法的拓展,多用于注塑充模过程的流动分析,也可以进行粘弹性熔体挤出的数值模拟。控制体积法采用交错网格划分,适用于等温粘弹性流体,这种方法的特点是:一个初始变量公式的使用,在不同交错网格上速度、压力和应力的分布,以及对本构方程离散的一个三阶迎风格式,在一定 We 数范围内,该方法可用于突变流道的粘弹性流动问题,而且,这种方法还可以考虑拉伸粘度的影响,尽管文献[25, 26]仅用该方法解决了一个二维问题,但这种去耦的算法很容易推广到三维问题,而且计算成本并不增加。

2.2.6 有限块法^[27, 28] 针对工程结构分析中许多具有一定规律的几何形状和边界条件的结构,有研究提出一种适用于分析计算窄流道中运动速度很慢、粘度极大的熔体流动问题的有限块法。具体做法是:用多项式位移函数,或用满足边界条件的已知级数来表达位移,利用分离变量可使未知数的个数减少,从而降低了问题的维数,使总体刚度矩阵大大降价。这种方法为塑料异型材挤出成型熔体流动分析提供了又一个有效工具。

2.2.7 修正的 Luo-Tanner 流线有限元^[29] 范毓润等对 Luo-Tanner 提出的流线有限元法作了重要的改进,使之更适宜于微分型本构和有奇点的流场计算,证明了在流函数用双二次插值的有限元中,单元节点在流线上导致自然坐标 (ξ, η) 中的等 η 线也是流线,把原来沿单元边界积分本构方程的方法,改为沿通过单元高斯点流线的积分,这样既回避了速度导数在单元边界上间断的困难,也缓和了自由面与壁面交线附近的应力奇性,同时又减少了计算量。

流线有限元方法已大量用于二维挤出及挤出胀大的研究。最近 Kihara^[30] 等成功地将流线的思想推广到三维挤出问题,同时结合粘弹性附加应力去耦和罚有限元方法,极大地降低了流动模拟对计算机内存的要求。这种数值技术的一大特点在于应力场的求解,迭代过程中解得速度场后,将 Maxwell 类粘弹性流体本构关系投影到流线上得到如下方程:

$$v_m \frac{\partial E}{\partial \eta} = f(v, E) \quad (1)$$

式中 v_m 是速度绝对值, E 是粘弹性附加应力, v 是速度, η 是流线, f 是 v 、 E 的函数。从熔体入口已知的 $E^{(0)}$ 出发,式(1)沿着流线积分,用 $E^{(n)}$ 和 $v^{(n)}$ 计算 $E^{(n+1)}$,可以得到流线上任一位置的应力

$$E^{(n+1)} = E^{(n)} + dE^{(n)} = E^{(n)} + \frac{\Delta \eta}{v_m} f(v^{(n)}, E^{(n)}) \quad (2)$$

$\Delta \eta$ 是两积分点之间的微长。如图 1 所示。该数值分析的关键在于三维挤出中流线的确定和网格

重划技术。

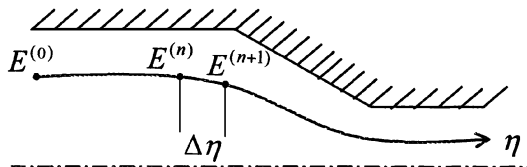


图 1 应力沿流线积分示意

2.3 边界元法^[31]

边界元法是 70 年代才发展起来的一种新的数值方法,其基本思想是通过格林(Green)公式,借助于基本解,将求解域上的偏微分方程转化为边界上的积分方程,吸收有限元的离散技术,把边界积分方程离散为代数方程,求得边界上的未知参数后,可以计算域内任一点的物理量。它与有限元法和有限差分法相比,由于降低了维数,节点数明显减少,所需计算存储量和计算工作量较少,而同时只对边界离散,误差来源于边界,计算精度较高,但存在奇异积分和离散后代数方程组系数阵非稀疏性的弱点。

边界元法较多地用于粘性流体的数值分析^[32],在聚合物加工中的应用还处于探索阶段,运用技术还不成熟^[14,33,34],但是,边界元法却是一种很有潜力的数值方法。Tanner 认为在线性和同样的精度下,尤其是在计算切应力时,边界元方法具有优势,在非线性情况下,有限元与边界元方法各有所长。

3 近似方法

由于求解过程中应力、压降、速度、温度等因素之间相互耦合,故口模挤出流动不可能有解析解,即便使用数值求解也是非常复杂的。因为需要编制大量的计算程序或购买相关的软件或使用这些软件,需要较多的投入。实际上为了降低成本可以在反复使用一些较小的程序的基础上,用大程序作为一个检验或微调的方法使结果接近于实际解,这种大小程序结合使用的方法会变得越来越普遍^[14],但运用小程序必须以简化几何结构和数学模型为基础。因此,便出现了许多简化、近似求解的方法,这些方法并不一定严格遵循经典的求解步骤,可能也仅能得到流动场中的几个物理指标,但却是非常有效,且很经济的。

3.1 几何组合法

把流道的复杂截面分解为一些简单几何截面如狭缝和圆形等的组合,环状流道简化成狭缝形^[35,36]。在早期的研究中这种分离流道的方法被经常使用。由于简单化,这种方法在处理挤出口模中流动时易导致失真是不言而喻的^[37]。如在文献^[36]中,对厚度均匀的异形流道就是采用了这样一种简化手段。

3.2 等效面积法

对于实心的异型材流道,其截面可以简化成面积相同的等效圆。但这样做会带来不小的误差^[38]。

3.3 修正因子法

首先用解析方法计算在简单等效截面流道中的压降,然后乘以一个修正因子 f_p 就得到了真正

几何截面流道中的压降,文献[37]综述了修正函数和修正因子的计算方法。

3.4 润滑近似法

以上三种方法一般是针对聚合物口模挤出过程中的一维流动的。润滑近似是用一维的方程解决二维的流动问题或用二维的方程解决三维的流动的问题。在聚合物加工中,经常碰到各种渐变流道如在挤出口模的过渡区中的流动,这时,通常的方法就是采取润滑近似。一般只有在渐变度很小($<15^\circ$)的情况下采用。

3.5 横截面/假想区域法

这是以润滑近似为基础的一种较新的方法,可以用求解二维问题的方法对三维流动进行分析,这个方法可以分解成以下几步^[39,40]:

- a. 在给定流率的条件下,计算不同截面的速度分布;
- b. 两个假想截面之间流域的近似;
- c. 流动区域中速度的计算;
- d. 计算两个假想截面之间的压力降。

以上采取的方法都有一个共同点,即对流道的几何形状及数学模型进行简化。目前,还没有一个严格的规则来确定何种情况下使用简化方法合理。但是如果对聚合物挤出过程的分析模拟的目的是预测熔体流动重要的细微之处,如熔接线的准确位置,那么,流道简化是不可取的。如果主要目的是预测流动的整个特性如流率、压降等,则可能得到比较合理的结果。如文献[41~48]对压力降的预测及文献[49~50]对停留时间的分析进行近似计算,就得到了与实验较接近的结果。由于能量方程与动量方程的耦合,温度分布的求解更加困难,因此,也产生了一些简化算法^[51~55]。如Wu^[55]等提出了一种简单的一维模型对挤出口模中的传热进行研究,并用三维有限元证实了这种模型的精确性。有关温度场方面的研究,由于牵涉到的因素太多,研究工作都不太深入^[56]。

在以上简化分析计算过程中,有些步骤也需要采取数值分析方法。但数值计算并不是主要的问题。

4 结束语

流动分析的近似方法的缺点在于几何模型或数学模型的简化造成无法详尽地了解熔体流动的信息。要对复杂截面流道中熔体流动进行全面系统的分析必须应用数值模拟研究。

对于聚合物熔体的粘弹性流动,用微分和积分本构模型进行数值分析是非常困难的。由于流体“记忆”而带给控制方程的一个特点当然是它的非线性特征,解决这个问题,我们用耦合和去耦两种方法。大多数耦合技术的发展应用是针对微分模型的,耦合技术的优点在于迭代过程本身,如果初值的选择足够地接近解值、Jacobian 矩阵是非奇异的、牛顿方法二次方地收敛,一般4~5次迭代就可获得充分收敛解。去耦技术已发展应用于微分和积分模型,在前面提到的有限元方法,大多采用了去耦技术。去耦方法一个显著的特点是把问题分解(例:守恒方程的粘弹性偏应力处理为已知的体力项),这样可以用传统的方法来离散守恒方程,大大减少计算机内存的要求。去耦技术的缺点在于迭代过程,Picard 方法常常减缓收敛,即使选择的初值非常接近解值,也不能确保收敛。也有耦合和去耦结合的方法,依据有限元、边界元、有限差分和谐法的离散技术,研究人员已在较广的领域中使用这种方法。笔者认为,采用更真实地反映聚合物熔体流动的多因素模型(如考虑三维、非等温、粘弹性等)进行流动场分析,应尽量应用去耦方法。

参考文献:

- [1] James F S, et al. Polym Eng Sci, 1986, 26(3): 233~238.
- [2] 解挺, 朱元吉, 等. 塑料科技, 1996, (6): 32~34.
- [3] Hassan G A, Parnaby J. Polym Eng Sci, 1981, 21(5): 276~284.
- [4] Jeeff A, et al. ANTEC '97, 127~134.
- [5] 顾尔祚. 流体力学有限差分法基础. 上海: 上海交通大学出版社, 1988.
- [6] 李萍, 合成树脂及塑料, 1996, 13(1): 23~27.
- [7] Echenagucia J, et al. Polym Eng Sci, 1980, 20(11): 769~772.
- [8] MAX L B. Polym Eng Sci, 1982, 22(7): 432~437.
- [9] Keren B, et al. Polym Eng Sci, 1984, 24(18): 1409~1416.
- [10] 何红. 橡胶工业, 1999, 46(2): 94~97.
- [11] 强士中, 等. 计算力学学报, 1997, 14(3): 293~297.
- [12] Kakouris A P, et al. Polym Eng Sci, 1987, 27(18): 1371~1379.
- [13] 章本照. 流体力学中的有限方法. 北京: 机械工业出版社, 1986.
- [14] Charles L T. III. Fundamentals of Computer Modeling for Polymer Processing, New York: Hanser Publishers, 1989.
- [15] 柳和生. 青岛化工学院学报, 1995, 16(4): 376~381.
- [16] Tadmor Z, et al. Polym Eng Sci, 1974, 14(9): 660~665.
- [17] Gutfinger C, Broye E, Tadmor Z. Polym Eng Sci, 1975, 15(5): 381~385.
- [18] David R. Polym Eng Sci, 1980, 20(15): 1029~1034.
- [19] 秦永法. 模具工业, 1998, (7): 10~13.
- [20] Wang Y. Polym Eng Sci, 1991, 31(3): 204~212.
- [21] James M M. Polym Eng Sci, 1971, 11(1): 258~263.
- [22] 杨卫民, 程源, 橡胶工业, 1991, 38(6): 324~327.
- [23] Mahesh G, Tai H K. Polym Eng Sci, 1990, 30(22): 1420~1430.
- [24] Mahesh G, et al. Polym Eng Sci, 1993, 33(7): 393~399.
- [25] Vlcek J, et al. ANTEC '94, 306~309.
- [26] Darwish M S, Whiteman J R. J Non-Newtonian Fluid Mech, 1992, (45): 311~337.
- [27] 杨临裕, 李勇, 张辉. 现代塑料加工应用, 1996, 8(5): 16~20.
- [28] 杨临裕, 张辉, 李勇. 模具工业, 1996, (8): 28~31.
- [29] 范毓润, 范西俊, 路甬祥. 力学学报, 1990, 22(3): 287~292.
- [30] Kihara S, et al. Polym Eng Sci, 1999, 39(1): 152~163.
- [31] 刘希云, 等. 流体力学中的有限元与边界元法. 上海: 上海交通大学出版社, 1993.
- [32] Proceedings of the 4TH China-Japan Symposium on Boundary Element Methods. 1992.
- [33] Proceedings of the China-Japan Symposium; Theory and Applications of the Boundary Element Methods, Pergamon Press. 1986.
- [34] Bush M B. Polym Eng Sci, 1993, 33(15): 950~958.
- [35] 唐志玉, 等. 挤塑模设计. 北京: 化学工业出版社, 1997.
- [36] 北京化工学院, 华南工学院编. 塑料机械设计. 北京: 轻工业出版社, 1979.
- [37] Lang U, Michaeli W. ANTEC '97, 315~319.
- [38] 柳和生. 塑料机械, 1998, (1): 12~16.
- [39] Huez P, Tanguy P A. Polym Eng Sci, 1993, 33(15): 971~979.
- [40] 王利霞, 申长雨, 等. 中国塑料, 1996, 10(4): 56~62.
- [41] Wei K H, et al. Poly Eng Sci, 1986, 26(14): 1012~1019.
- [42] Morton M D. Polym Eng Sci. 1981, 21(2): 65~68.
- [43] Tiu C. Polym Eng Sci, 1982, 22(16): 1049~1051.

- [44] 梁基照·橡胶工业, 1996, 43(10): 579~581.
[45] 王晓枫, 朱元吉·中国塑料, 1996, 10(4): 69~71.
[46] Carsten L L, et al·ANTEC '97, 1022~1027.
[47] 罗中华, 等·塑性工程学报, 1998, 5(1): 61~65.
[48] Ling F H, et al·ANTEC '97, 320~324.
[49] Kwon T H, et al·Polym Eng Sci, 1986, 26(3): 214~224.
[50] Yutaka M·Polym·Eng·Sci, 1980, 20(3): 212~214.
[51] 王晓枫, 朱元吉·塑料, 1996, 25(4): 16~19.
[52] Suckow W H, et al·Polym Eng Sci, 1971, 11(5): 401~404.
[53] Horst H W·Polym Eng Sci, 1975, 15(2): 84~89.
[54] 王晓枫, 朱元吉·塑料科技, 1995, 108(4): 34~36.
[55] Wu P Y, et al·Polym Eng Sci, 1995, 35(21): 1713~1724.
[56] 李志华·工程塑料应用, 1997, 25(3): 50~52.

Methods Used to Analyze Polymer Melt Flow in Extrusion Dies

LIU He-sheng, TU Zhi-gang SUN Yan-ping BAO Zhong-xu

(College of Mechanical & Electronic Engineering, Nanchang University, Nanchang 330029, China)

Abstract: The methods used to analyze polymer melt flow in extrusion dies are reviewed. The emphasis is placed upon the numerical methods, including finite difference method, finite element method, boundary element method and so on. Also the geometric and mathematic simplifications adopted in analysis of polymer melt flow in extrusion dies are evaluated.

Key words: Polymer extrusion; Flow field; Numerical method; Finite element method.

(上接第42页)

- [27] Drake A F, Ando D J, Mann S, Polymer, 1989, 30: 1063.
[28] Norris I D, Kane-Maguire L A P, Wallace G G·Macromolecules, 1998, 31: 6529.
[29] Ikkala O T, Pietila L O, Ahjopalo L, et al·J Chem Phys, 1995, 103(22): 9855.
[30] MacDiarmid A G, Epstein A J·Synth Met, 1999, 65: 103.
[31] MacDiarmid A G, Yao Z, Jing F·Synth Met, 1999, 100: 131.
[32] Guo H, Egan V, Charles, Kaner R B·Polymer Preprints, 1999, 40(1): 506.
[33] Guo H, Knobler C M, Kaner R B·Synth Met, 1999, 101: 44.

Chiral Conductive Polyaniline

TIAN Yong-hui, LIN Wei-wei, NAN Jun-yi

(Department of Polymer Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: In this paper, the recent advances of chiral conductive polyaniline in preparation, helical conformation, applications are reviewed.

Key words: Polyaniline; Chirality; Conductivity; Circular dichroism spectra