

单螺杆挤出过程中界面拉伸脉冲效应*

徐百平^{1,2} 王玫瑰¹ 刘跃军³ 瞿金平²

(1. 广东轻工职业技术学院轻化工程系, 广州 510300; 2. 华南理工大学聚合物成型加工教育部重点实验室, 广州 510640;

3. 湖南工业大学包装新材料与技术重点实验室, 株洲 412008)

摘要 基于速度场量法, 推导出单螺杆挤出机内三维流动无因次控制方程, 提出一种求解非牛顿流的新方法。采用交错网格对挤出机内的幂律流体流动进行有限体积方法数值模拟, 得到了螺槽内的三维速度分布。借助 4 阶 Runge-Kutta 方法对流体质点运动轨迹进行数值积分追踪, 实现了螺槽内的层流混合过程界面形变的捕捉。发现界面演化过程中螺槽下部不同初始位置及取向的示踪剂界面拉伸总体表现出线性增长规律, 但伴随着周期性脉冲效应, 越靠近螺槽底部脉冲的幅度越大。当界面取向沿螺槽宽度方向时, 表现为等幅正弦脉冲, 周期与流体沿螺槽前进一个螺距周期相同。当界面取向沿螺槽高度方向时, 脉冲幅度出现了逐级放大现象。研究结果表明, 稳态挤出的混合过程存在着非稳态效应。

关键词 单螺杆 挤出 界面拉伸 脉冲效应 周期

单螺杆挤出机是广泛应用的塑料加工设备, 在挤出成型、反应挤出等方面扮演着重要的角色。目前, 对单螺杆挤出机的混合效果评价主要以二维假设为主^[1-5], 但对工程界特别关心的停留时间分布、界面行为特征还没有深入研究。虽然基于有限体积方法的挤出机三维流场模拟技术已经出现^[6], 但其螺槽的长高比只能达到 4, 离工程实际的 13 还有不少距离, 也没有涉及混合过程的描述。一般认为, 发生在螺槽内的混合是层流混合, 界面随时间增加呈线性增长, 但具体的定量描述还没有检索到。对于稳态的挤出过程, 界面的增长一般也应该是稳态的。

笔者基于速度场量法, 提出一种新的流场数值模拟方法, 得到了螺槽内非牛顿流体的三维速度场; 采用 4 阶 Runge-Kutta 方法对流体运动进行积分追踪, 实现了对单螺杆挤出机计量段流体混合过程的界面追踪, 发现界面沿螺槽前行过程中有脉冲效应, 说明界面在拉伸过程中存在着非稳态效应, 并对其机理进行了阐述分析, 以期为进一步强化螺槽内的混合效果提供理论指导。

1 模型建立及速度场求解

笔者采用单螺杆挤出机螺槽展开几何模型, 坐标系如图 1 所示 (W 为展开螺槽宽度, H 为螺槽高度, θ 为螺旋升角, z 方向为螺槽展开长度方向)。采用相对速度方法, 认为螺杆不动机筒反转。

为求解速度场, 作如下假设: ①由于流体粘度较高, 忽略流体惯性力作用; ②流动为等温、不可压缩流动; ③忽略机筒螺棱间隙漏流; ④流动沿 z 方向充分发展; ⑤边界无滑移; ⑥聚合物熔体为纯粘性熔

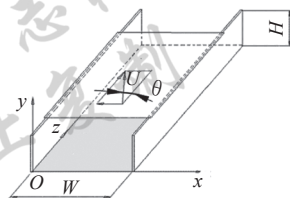


图 1 单螺杆螺槽展开模型

体, 符合幂律本构方程。

引入特征高度 H , 特征速度 $U \cos \theta$ 特征应力压力 $K (U \cos \theta H)^n$, 将控制方程无因次处理, 去掉无因次符号, 得到:

$$\frac{v_x}{x} + \frac{v_y}{y} = 0 \quad (1)$$

$$\beta \frac{v_x}{t} = -\frac{p}{x} + \frac{\tau_{xx}}{x} + \frac{\tau_{xy}}{y} \quad (2)$$

$$\beta \frac{v_y}{t} = -\frac{p}{y} + \frac{\tau_{xy}}{x} + \frac{\tau_{yy}}{y} \quad (3)$$

$$\beta \frac{v_z}{t} = -\frac{p}{z} + \frac{\tau_{xz}}{x} + \frac{\tau_{yz}}{y} \quad (4)$$

式中: 无因次数 $\beta = \rho U \cos \theta^{1-n} H^{1+n} / K$, ρ 为熔体密度, K 为稠度系数, n 为幂律指数。

聚合物熔体符合如下幂律本构方程:

$$\vec{\tau} = 2(\vec{D} : \vec{D})^{\frac{n-1}{2}} \vec{D} \quad (5)$$

式中: $\vec{\tau}$ 为偏应力张量, $\vec{D} = \frac{1}{2}(\vec{v} + \vec{v}^T)$, 为形变速率张量, $\vec{v}$ 为速度矢量。

* 国家自然科学基金项目 (10672197)

收稿日期: 2008-10-23

速度边界条件为:

$$v_x = \tan \theta, y = 1 \quad (6)$$

$$v_x = 0, y = 0; x = 0, W/H \quad (7)$$

$$v_y = 0, y = 0; x = 0, W/H \quad (8)$$

$$v_z = 1, y = 1 \quad (9)$$

$$v_z = 0, y = 0; x = 0, W/H \quad (10)$$

给定如下压力边界条件:

$$p/z = c \quad (11)$$

式中: c 为常数, 代表螺槽纵向无因次压力梯度。

为避免求解压力方程, 引入 xOy 平面内涡量 ω , 将方程 (2)、(3) 分别对 y 、 x 求导后相减, 得到:

$$\beta \frac{\omega}{t} = \frac{\tau_{xy}}{x} - \frac{\tau_{yx}}{y} + \frac{\tau_{xx}}{y^2} - \frac{\tau_{yy}}{x^2} \quad (12)$$

$$\omega = \frac{v_x}{y} - \frac{v_y}{x} \quad (13)$$

进一步将 ω 分别对 x 、 y 求偏导, 结合连续性方程 (1), 构造 x 、 y 方向求解方程:

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} = \frac{\omega}{y} \quad (14)$$

$$\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} = -\frac{\omega}{x} \quad (15)$$

这样, 将求解原始方程组 (1) ~ (5) 转化为求解方程组 (12)、(14)、(15)、(4) 和 (5), 结合边界条件 (6) ~ (11), 可以对挤出机内的三维流动进行有限体积数值模拟。采用交错网格, 速度、应力及涡量的布置如图 2 所示。图 2 中, v_z 与 ω 、 τ 位于同一节点, 计算区域网格划分为 4×4 , v_x 在上下边界和 v_y 在左右边界需要外插虚节点来逼近。这样, 图 2 中 v_x 的节点数为 5×6 , v_y 的节点数为 6×5 , v_z 与 ω 、 τ 的节点数均为 5×5 。当网格加密时, 以此类推。

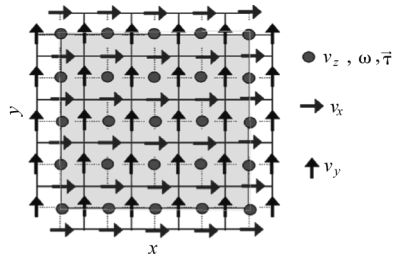


图 2 各变量在有限体积网格中的位置

将方程组时间导数项采用二阶精度格式, 空间导数项采用具有二阶精度的中心差分格式离散, 边界条件处理如下: 不在边界结点的速度边界条件采用外插虚节点来逼近。采用双精度进行计算, 对方程组依次迭代, 直到上下两次各量的误差小于 $1 \times$

10^{-9} 为止。算法如下: ①假设初始速度分布; ②由式 (13) 求解边界涡量; ③由式 (5) 求得剪切应力; ④由式 (12) 结合步骤②所得的边界涡量求解涡量; ⑤由式 (14) 结合边界条件 (6)、(7) 求解 x 方向速度; ⑥由式 (15) 结合边界条件 (8) 求解 y 方向速度; ⑦由式 (4) 结合边界条件 (9)、(10)、(11) 求得 z 方向速度; ⑧判断 x 、 y 、 z 方向速度、涡量前后两次求解是否满足精度条件, 否则重新进行步骤② ~ ⑦。

本螺槽的几何参数如下: $H = 2 \text{ mm}$, $W = 26 \text{ mm}$, 螺杆直径 $d = 30 \text{ mm}$, $\theta = 17.65^\circ$, 转速 $N = 60 \text{ r/min}$, 材料为低密度聚乙烯 (LDPE); 物性参数为: $\rho = 810 \text{ kg/m}^3$, $n = 0.473$, $K = 8700 \text{ N} \cdot \text{s}^n / \text{m}^2$ 。螺槽内纵向无因次压力梯度 c 取 1.0。计算网格尺度 $\Delta x = \Delta y = 1/6 \sim 1/20$, 计算时间步长 $\Delta t = 1 \times 10^{-10} \sim 1 \times 10^{-13} \text{ s}$ 。

图 3 为不同网格划分得到的螺槽横截面内中垂线水平 (x 方向) 速度分布。由图 3 可见, 当网格数大于 130×10 时, 速度场就不再变化, 从而达到稳定解。实际计算时采用的网格为 260×20 。

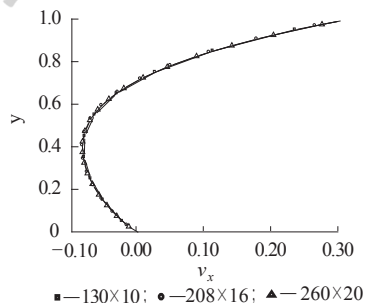


图 3 螺槽横截面内中垂线水平速度分布对比

2 质点轨迹追踪

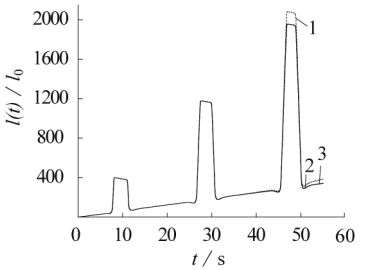
螺槽内流体质点的运动由式 (16) 确定^[6-7]:

$$\text{St} \frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}(x, y) \quad (16)$$

式中: 上标 $\rightarrow$ 代表矢量, 比如, $\vec{x} = (x, y, z)$ 代表一个点; $\vec{v}(x, y)$ 为螺槽内速度矢量, 有 x 、 y 、 z 三个方向分量; St 为 Strouhal 准数, $\text{St} = H/(U \cos \theta)$ 。

给定 $t = 0$ 时刻流体质点的位置, 采用 4 阶 Runge-Kutta 方法对流体质点运动进行数值积分追踪, 则可获得流体质点在螺槽内的运动轨迹, 速度场采用二次插值获得。给定 $t = 0$ 时刻示踪界面初始分布: $x = 6.5$, $0.2 \leq y \leq 0.21$, $z = 0$, 即示踪剂的初始长度为 $l_0 = 0.01$, 对示踪界面的形变进行数值积分追踪, 得到 t 时刻的界面长度 $l(t)$ 。计算方法如下: 将初始示踪界面分成 50 等份, 得到不同分点 $\vec{x}_i$, 然

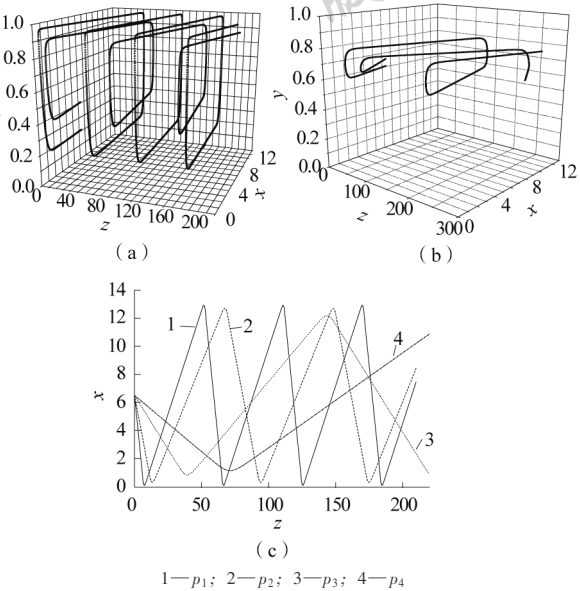
后进行时间积分追踪,当某边两个端点($\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}$) 的距离超过 0.001,则在 $\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}$ 之间插入中分点在进行追踪,这里, $\vec{x}_i$ 代表点的空间坐标(x_i, y_i, z_i),下标*i*代表第*i*个点。另一方面,为确保界面的光滑特性,如果相邻边($\vec{x}_{i-1}, \vec{x}_i$)与($\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}$)的夹角小于 135°,则将两边分别插入中分点再进行追踪。图 4 为不同时间步长得到的界面增长变化。由图 4 可见,为精确预测,时间步长要小于 2×10^{-4} s,笔者计算采用的时间步长为 5×10^{-5} s。



1— 5×10^{-4} ; 2— 2×10^{-4} ; 3— 1×10^{-4}
图 4 不同时间步长的界面增长变化

表 1 为出发于 $x_0 = 0.65, z_0 = 0$, 不同高度 y_0 的流体质点的高度坐标,其在螺槽内的运动轨迹见图 5。

表 1 流体质点的高度坐标				
质点编号	p_1	p_2	p_3	p_4
高度坐标	0.2	0.4	0.6	0.65



a— p_1, p_2 的三维运动轨迹; b— p_3, p_4 的三维运动轨迹;
c—粒子运动轨迹在 xz 平面内的投影
图 5 不同初始位置流体质点的运动轨迹

由图 5a、图 5b 可以看出,流体质点作类似螺旋运动,彼此没有机会相互混合,即流动过程存在着固

定壳层轨道;由图 5c 可看出,越靠近外围的质点螺距越小,越接近环流中心螺距越大。

图 6 为 p_1, p_4 点的 z 坐标随时间的变化。图 6 表明,外围的流体质点沿 z 方向运动速度随时间周期性变化,在螺槽底部运动时间相对较长,速度慢;靠近环流中心 p_4 点的 z 方向速度变化不明显,基本上表现为匀速运动。另一方面,外围流体质点沿 z 方向的推进速度慢,环流中心质点推进速度快,最先离开挤出机。

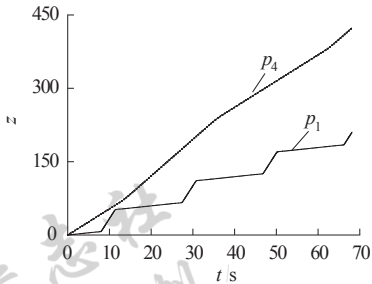
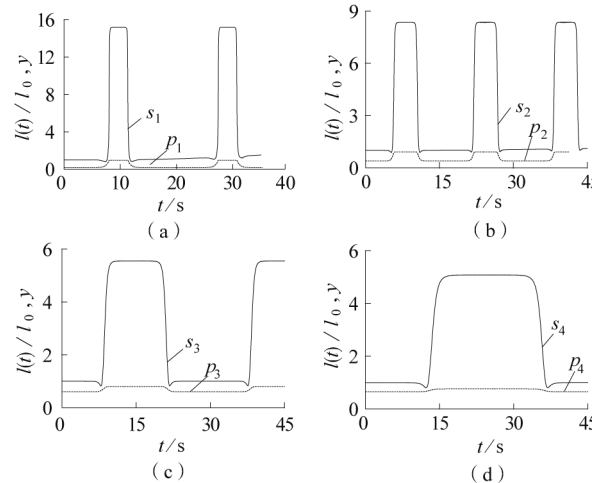


图 6 不同初始位置质点 z 坐标随时间的变化

3 界面拉伸计算分析

图 4 揭示了流体界面增长表现出脉冲现象,说明稳态挤出过程存在着非稳态效应。为进一步分析,经过 $p_1 \sim p_4$ 点取平行于 x 坐标且关于 $x = 6.5$ 对称、微元长度为 0.01 的流体微元界面,记为 $s_1 \sim s_4$,分别进行界面追踪计算。图 7 为界面增长随时间的变化规律。



a— s_1, p_1 ; b— s_2, p_2 ; c— s_3, p_3 ; d— s_4, p_4
图 7 界面增长随时间的变化规律

由图 7 可看出,界面随时间推移同样出现了脉冲效应,对比流体微元中心的 y 坐标变化规律,发现两者变化具有某种一致性。平行于 x 坐标的流体微元随着时间推移以界面拉伸比等于 1 为基础反复出现等幅脉冲效应,呈现周期性变化,周期与流体质点

前进一个螺旋距离相同。当流体微元到达螺槽左侧壁上升过程中,界面拉伸比急剧增大,脉冲幅度分别为: s_1 达15.2, s_2 达8.5, s_3 为5.5, s_4 为5.08。流体微元越靠近侧壁,脉冲效应越显著。当流体位于螺槽环流中心上部时,界面拉伸维持较大;当流体运动到螺槽右侧下行过程中急剧下降,又回到脉冲起始点,在螺槽下部运动过程中维持为1,直到下一个脉冲开始。由于初始界面与流动方向平行,虽然出现了反复的等幅脉冲效应,但最小界面的拉伸比始终维持在1,说明此时混合过程缺乏纯拉伸流动。

进一步分析,这是由于螺槽的几何结构宽高比较大决定的,当流体微元到达左侧壁时,突然暴露在 z 方向速度梯度作用下,导致了界面拉伸的大幅度增长,界面两个端点 z 方向的距离一下子被拉大,当到达右侧壁时,界面又一次暴露在 z 方向速度梯度之下, z 方向最快点反而变得速度最慢,而最慢点反而在 z 方向速度最快,这样界面在 z 方向又回到了脉冲作用之前,此时界面拉伸比又回到了1。为此,计算界面 s_1 在 z 方向分量贡献: l_z/l_0 与脉冲的关系($l_z = \sum_{i=1}^k |z_{i+1} - z_i|$,表示界面长度 z 方向分量, k 为 t 时刻界面的分段数),结果如图8所示。

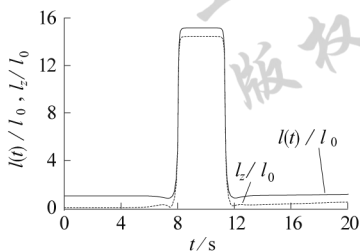


图8 s_1 界面拉伸脉冲与 z 方向分量的关系

从图8可以看出,确实是 z 方向速度梯度导致了界面拉伸过程中的脉冲效应。当流体微元界面垂直于流动方向即沿螺槽高度方向时,取初始界面中点分别位于 $p_1 \sim p_4$ 点,界面长度为0.004,分别记为 $s_5 \sim s_8$,再进行界面形变追踪,结果如图9所示。

图9表明流体界面在拉伸过程中总体呈现线性增长,如图中虚线 ab 所示,在此基础上同样存在着脉冲效应,但出现了逐级放大现象。从图9a可以发现, s_5 第一个脉冲为 ab 线上脉冲结束点的5.95倍,第二个脉冲为 ab 线上脉冲结束点的7.11倍;对比图7a,说明两种界面增长周期具有一致性, s_5 界面在螺槽上部的拉伸量维持较大的数值。图9b、9c、9d界面增长同样呈现出脉冲增长方式,但对比图7发现,虽然初始位置相同,但由于界面初始取向不同,

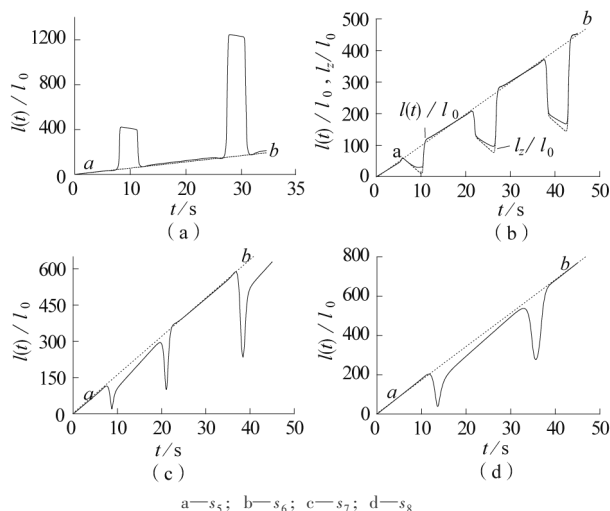


图9 初始界面垂直于流动方向的脉冲效应

界面的增长脉冲形式不再具有一致性,表现出负脉冲形式,图9b的脉冲周期与图7b一致,而图9c、9d则表明界面运动到左右两侧壁附近时就出现负脉冲,界面前进一个周期出现2次负脉冲。图9b同时给出了界面长度 z 方向分量的贡献,表明 z 方向的速度分布仍然对混合过程起主导作用,造成脉冲现象的原因还是由于 z 方向的速度场造成的。 s_6 界面在螺槽下部的拉伸量较大,在螺槽左右侧及螺槽上部的拉伸量维持较低的值。 s_7 、 s_8 虽然也表现出在螺槽下部界面的拉伸量较大,但螺槽上部和下部的界面拉伸量已经相当接近。

为进一步探索流体界面到达一定长度时的脉冲效应,取 s_9 界面($x=6.5, 0.2 \leq y \leq 0.6, z=0$)进行模拟追踪,结果见图10。

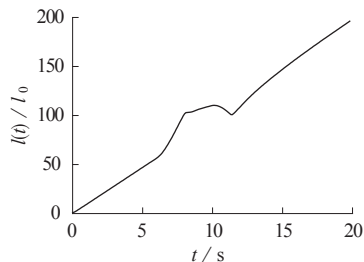


图10 s_9 界面的脉冲效应

图10表明,对于一定尺度的初始界面,其增长过程仍然表现出总体线性增长基础上的脉冲效应,但频率和幅度的变化是各个微元段综合作用的结果。对比图9,说明单螺杆挤出机混合过程界面的拉伸速率随着不同的 y 坐标表现出不均匀特性,远远没有达到均匀混合。图11给出了相应的示踪剂的空间构型变化,图12是示踪剂在 xOy 平面内投影,表明了单螺杆挤出机混合过程的界面构型变化

规律。

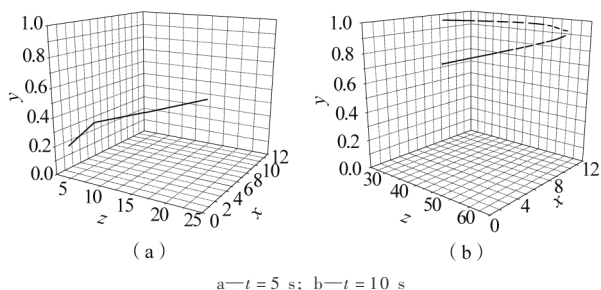


图 11 s_0 界面空间构型随时间变化

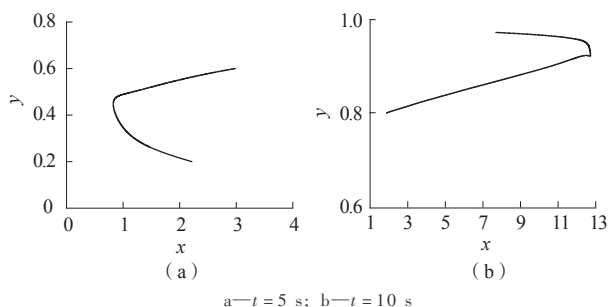


图 12 s_0 界面在 xOy 平面内投影随时间变化

4 结论

采用有限体积方法, 提出了一种基于速度涡量求解非牛顿流的新方法。在得到单螺杆展开螺槽内速度场的基础上, 借助 4 阶 Runge-Kutta 方法实现了对混合界面的追踪表征。发现螺槽内的示踪剂界面在拉伸过程中表现出了周期性脉冲效应: 示踪剂越接近螺槽底部, 脉冲效果越明显, 不同初始位置及界

面取向脉冲的表现形式也不相同, 单螺杆挤出虽然是稳态挤出过程, 但其界面的增长却存在非稳态效应。

参考文献

- [1] Niederkorn T C, Ottino J M. Chaotic mixing of shear-thinning fluids[J]. A. I. Ch. E. J., 1994, 40(11): 1782 - 1793.
- [2] Bigg D M, Middleman S. Laminar mixing of a fluid in a rectangular cavity[J]. Ind Eng Chem Fundam, 1974, 13: 66 - 74.
- [3] Wang Y, Tsay C C. Non-newtonian flow modeling in the mixing section of a single-screw extruder with flow analysis network method[J]. Polym Eng Sci, 1996, 36(5): 643 - 650.
- [4] Lai E, Yu D W. Modeling of the plasticating process in a single-screw extruder with flow analysis network: A fast-track approach [J]. Polym Eng Sci, 2000, 40(5): 1074 - 1084.
- [5] Rwei S P. Distributive mixing in a single-screw extruder. Evaluation in the flow direction with flow analysis network method[J]. Polym Eng Sci, 2001, 41(10): 1665 - 1673.
- [6] Khalifeh A, Clermont J R. Numerical simulations of non-isothermal three-dimensional flows in an extruder by finite - volume method [J]. J Non-Newtonian Fluids Mechanics, 2005, 126: 7 - 22.
- [7] Galaktionov O S, Anderson P D, Kruijt P G M, et al. A mapping approach for 3D distributive minxing analysis[J]. Comput Fluids, 2001, 30: 271 - 289.
- [8] Xu Baiping, Qu Jinping. Trace simulation and characterization of interfaces during three-dimensional dynamic mixing[J]. Chinese Journal of Applied Mechanics, 2006, 23(1): 1 - 6.
- [9] Vikhansky A. Enhancement of laminar mixing by optimal control methods[J]. Chem Eng Sci, 2002, 57: 2719 - 2725.

PULSE EFFECT OF INTERFACE STRETCH IN SINGLE SCREW EXTRUSION

Xu Baiping^{1,2}, Wang Meigui¹, Liu Yuejun³, Qu Jinping²

(1. Chemical Engineering Department of Guangdong Industry Technology Colloge, Guangzhou 510300, China;

2. The Key Laboratory of Polymer Processing Engineering, Ministry of Education, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China;

3. Key Laboratory of New Material and Technology for Package, Zhuzhou Institute of Technology, Zhuzhou 412008, China)

ABSTRACT The dimensionless control equations of three dimensional flow in single screw extruder is developed in terms of velocity and vorticity, and then a new method for solving the Non-newtonian flow based on the finite volume method is presented. A staggered grid arrangement is used in which the dependent variables are located at different mesh points in the computational domain. The simulation concerns the incompressible fluid obeying power law properties and the application of finite volume method to the geometrical configuration of channel with aspect ratio equal up to 13. The deformation of the tracer is numerically integrated by the fourth order Runge-Kutta scheme. The evolutions of tracers are captured when time is forward. The interface stretches of the tracers from different initial positions with different orientations reveal that growth of interfaces fall on the whole onto the linear relations accompanied by periodic pulse effect. The closer the tracer approaches the channel walls, the more obvious the pulse effect is. The positive pulse with the same amplitude appears when the tracer orientation is along the direction of the channel width, which has the same periods as that the tracer move forward one pitch. On the contrary, the pulse amplitude become larger and larger with time when the orientation is along the direction of the channel height. The result shows that non-steady effect occurs in the mixing process during the course of the steady extrusion.

KEYWORDS single screw, extrusion, interfaces stretch, pulse effect, periodicity