

doi:10.3969/j.issn.1001-3539.2021.09.016

基于 Polyflow 的反螺纹元件对粒子分散性仿真研究

陈峰峰¹, 李浩杰¹, 王一飞¹, 秦媛媛¹, 陈占春^{1,2}

(1. 太原理工大学机械与运载工程学院, 太原 030024; 2. 山西省塑料机械工程虚拟仿真实验教学中心, 太原 030024)

摘要: 为了研究双螺杆挤出机中反螺纹元件对无机粒子在聚丙烯基体材料中分散混合作用, 建立含有不同反螺纹元件的螺杆模型, 利用 Polyflow 软件模拟聚丙烯在等温条件下的挤出过程, 基于网格叠加技术和粒子示踪法, 采用后处理模块 Polystat 统计分析反螺纹元件对流场及混合效果的影响。结果显示: 在常规料筒中反螺纹元件对物料的剪切作用最大, 是啮合块元件的 2.25 倍; 当混合段的反螺纹数量为 2 组时, 示踪粒子的混合效果最好, 有利于纳米粒子在高聚物中的分散。

关键词: 反螺纹元件; 仿真分析; 剪切效率; 混合效果

中图分类号: TQ315 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3539(2021)09-0082-05

Simulation Study on Particle Dispersion of Anti-Thread Element Based on Polyflow

Chen Fengfeng¹, Li Haojie¹, Wang Yifei¹, Qin Yuanyuan¹, Chen Zhanchun^{1,2}

(1. College of Mechanical and Vehicle Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China; 2. Plastic Machinery Engineering Virtual Simulation Experiments Teaching Center of Shanxi Province, Taiyuan 030024, China)

Abstract: In order to study the effect of anti-thread elements on the dispersion and mixing of inorganic particles in polypropylene matrix materials in a twin-screw extruder, screw models with different anti-thread elements was established, and the extrusion process of polypropylene under isothermal conditions was simulated by Polyflow software. Based on Mesh superposition technique and particle tracer method, the post-processing module Polystat was used to analyze the influence of anti-thread elements on the flow field and mixing effect. The results show that in the conventional barrel, the shear effect of the reverse thread element on the material is the greatest, which is 2.25 times that of the meshing block element, and when the number of reverse threads in the mixing section is two groups, the mixing effect of tracer particles is the best, which is beneficial to the dispersion of nanoparticles in the polymer.

Keywords: reverse thread element; simulation analysis; shearing efficiency; mixing effect

随着科学技术不断发展, 高分子材料在生产生活中被广泛使用, 但单一聚合物往往无法满足使用要求, 需要复合不同聚合物和材料以提高性能^[1-2], 同向双螺杆挤出机作为常见的共混加工设备^[3], 在聚合物生产加工中起着至关重要的作用^[4], 因此研究双螺杆元件的作用有助于挤出机的合理设计。

随着计算机模拟仿真技术的不断发展, Polyflow 等软件弥补了实验的不足^[5-6], 极大地减少了实验流程。Yu Huiwen 等^[7-8]通过数值模拟研究了流场的挤出流动过程, 分析了剪切速率和压力等

变化情况。N. Domingues 等^[9]研究了导程和转速对混合效果的影响。韩海川等^[10]研究了螺杆元件与螺杆头数对挤出流场影响。张国才等^[11]通过研究不同料筒对剪切速率的影响, 发现开设内齿的料筒结构能明显提高物料的剪切速率。姚爱英等^[12]借鉴剪刀工作原理, 设计了剪刀式螺杆挤出机。

国内外学者对双螺杆挤出机的加工过程进行了较为深入的研究^[13-15], 但主要集中于对啮合块的混合和剪切研究, 并未深入探究反螺纹在挤出过程中的作用。笔者基于 Polyflow 的模拟仿真, 探究剪

基金项目: 山西省自然科学基金项目 (201801D121172)

通信作者: 陈占春, 副教授, 硕士生导师, 博士, 主要从事高聚物加工及形态结构的研究

收稿日期: 2021-07-05

引用格式: 陈峰峰, 李浩杰, 王一飞, 等. 基于 Polyflow 的反螺纹元件对粒子分散性仿真研究 [J]. 工程塑料应用, 2021, 49(9):82-86.

Chen Fengfeng, Li Haojie, Wang Yifei, et al. Simulation study on particle dispersion of anti-thread element based on Polyflow[J]. Engineering Plastics Application, 2021, 49(9):82-86.

切速率在流场中的分布规律,分析反螺纹数量对粒子混合效果的影响。

1 基本控制方程

在挤出仿真过程中,根据物料的特性和流动情况作出如下假设:

- (1) 物料和壁面之间无相对滑动;
- (2) 流体为等温非牛顿流体,流体充满整个流道且不可压缩;
- (3) 忽略重力的影响,只考虑流体间的粘滞力。

1.1 连续性方程

不可压缩流体的连续性方程为:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

式中 u_x —— x 方向上的速度分量;

u_y —— y 方向上的速度分量;

u_z —— z 方向上的速度分量。

1.2 动量方程

流体在流道中流动的动量方程为:

$$\nabla \tau - \nabla P I = 0 \quad (2)$$

式中: τ 为应力张量, Pa; P 为压力, Pa; I 为单位张量。

1.3 本构方程

在挤出过程中存在与剪切速率有关的粘性行为,且剪切速率范围较广,因此选用 Bird-Carreau 模型来描述流体的剪切流动。

Bird-Carreau 本构方程为:

$$\eta = \eta_{\infty} + (\eta_0 + \eta_{\infty}) [1 + (\lambda \cdot \dot{\gamma})^2]^{\frac{n-1}{2}} \quad (3)$$

式中: η 为流体表观黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$; η_{∞} 为无穷剪切黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$; η_0 为零剪切黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$; λ 为时间常数, s; $\dot{\gamma}$ 为剪切速率, s^{-1} ; n 为非牛顿指数。

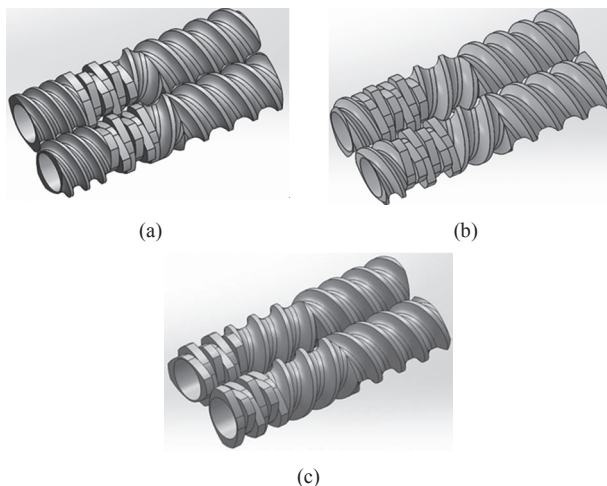
2 数值模拟

2.1 模型建立

根据双螺杆的螺杆几何学原理建立包含不同反螺纹数量的混合段螺杆模型, I, II, III 螺杆的反螺纹数量分别为 1 组、2 组、3 组,螺杆模型如图 1 所示。

螺杆的基本尺寸分别为: 螺杆外径 40 mm, 内径 29.8 mm, 中心距 36 mm, 导程 36 mm, 啮合块错列角 60° 。

选用常规料筒结构, 流体区域采用前置处理软件 Gambit 进行网格划分。啮合区域的物料流动较为复杂, 需要对该区域的网格进行细化, 细化后的网格模型如图 2 所示。



a—I 型; b—II 型; c—III 型

图 1 不同反螺纹混合段螺杆模型

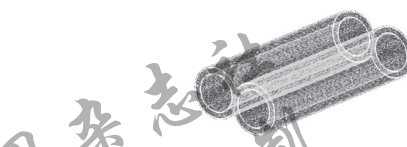


图 2 流体网格模型

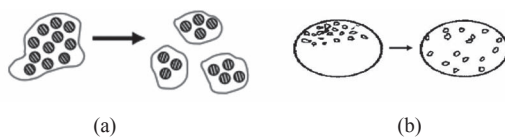
2.2 仿真参数

在仿真过程中流体区域随着螺杆转动处于变化之中, Polyflow 的网格重叠技术 (MST) 可以自动将重叠的流体网格转化为固体网格, 减小了计算资源的占用。

螺杆转速为 240 r/min, 螺杆每转动 18° 存取一次数值, 入口压力值为 0.1 MPa, 出口为自由出口, 该模拟中流体的幂律指数小于 0.7, 故采用 Picard (定点) 迭代插值法。

3 结果及分析

无机纳米粒子在聚合物中的混合分为两种, 一种是以粒径变化为主的分散混合, 如图 3a 所示, 另一种是以位置变化为主的分布混合, 如图 3b 所示。



a—分散混合; b—分布混合

图 3 分散和分布混合过程

3.1 分散混合

(1) 轴向剪切速率分布。

粒子在流场中受到的最大剪切力影响分散混合的效果, 流体受到的剪切应力为:

$$\tau = \eta \cdot \dot{\gamma} \quad (4)$$

式中: τ 为剪切应力, Pa; η 为流体黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$; γ 为剪切速率, s^{-1} 。

由上式可知剪切速率的分布特征可以表征剪切应力的分布特点,图4为螺杆I的轴向剪切应力分布特点。轴向距离在0.06~0.08 m处为反螺纹,其他为正螺纹和啮合块。

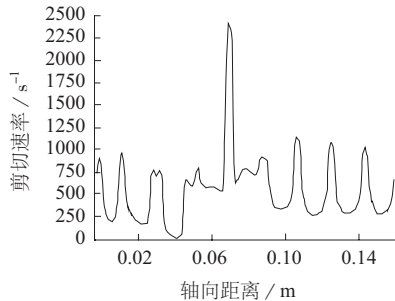


图4 轴向剪切应力分布

图4中0.075 m处最大剪切速率出现在反螺纹螺棱上,达到 2250 s^{-1} ,是啮合块 1000 s^{-1} 的2.25倍,并非啮合块区域。这说明在常规料筒中反螺纹的剪切作用要明显优于其他元件的剪切作用,反螺纹在反流物料时会产生很大的剪切应力,有助于粒子的分散混合,与之相比,啮合块元件在常规料筒中的剪切作用并不明显,主要起分散作用。

(2) 剪切应力分布。

剪切应力分布反映粒子在整个挤出过程中的受剪切情况,经历最大剪切应力的粒子越多,越利于其分散混合。不同螺杆中粒子的最大剪切应力分布如图5所示。

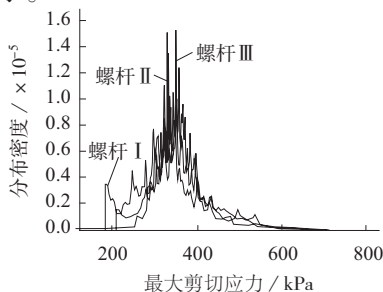


图5 最大剪切应力分布密度

由图5可知,绝大多数粒子经历的最大剪切应力为250~400 kPa。螺杆I中粒子经历的最大剪切应力分布较宽,对提高剪切作用效果不大;螺杆III中粒子受到的最大剪切应力更大,但经历大剪切应力的粒子分布与螺杆II的分布相似,且剪切应力仅大25 kPa左右。说明反螺纹元件的增加有助于提高粒子受到的剪切应力,有助于粒子的分散混合,但是2组反螺纹和3组反螺纹对剪切应力的影响差

别不大。

(3) 出口粒径分布。

粒子分散混合的实质是粒径在剪切作用下的破碎变小。粒径变化的控制方程为:

$$\frac{\Delta S}{\Delta t} = \frac{8\alpha(\sigma - \sigma_{\text{crit}}^{\text{erosion}})\gamma}{3S^2} \quad (5)$$

式中 S 为粒子大小, μm ; γ 为剪切速率, s^{-1} ; σ 为粒子经受剪切应力, Pa; $\sigma_{\text{crit}}^{\text{erosion}}$ 为临界剪切应力, Pa。

在入口处放置直径为500 μm 的球形粒子,分别计算在经过螺杆剪切之后出口处的粒径分布,粒径分布曲线如图6所示。

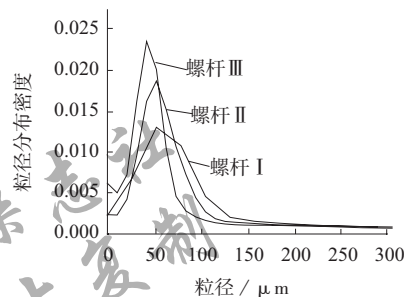


图6 出口粒径分布密度图

由图6可以看出,经过螺杆的剪切作用,粒径明显变小,螺杆I出口处的粒径布在25~100 μm ,粒径峰值密度仅为0.01左右;随着反螺纹数量的增加,螺杆II的出口粒径集中在50 μm ,且峰值密度达到0.02,是螺杆I的两倍;但是螺杆III的出口粒径分布集中在40 μm ,峰值密度只有0.0225,提升仅有0.0025。

因此反螺纹的增加可以改善分散混合效果,但是过多对分散效果的提高并不明显。

3.2 分布混合

粒子的分布混合效果主要是通过分布指数和分离尺度决定的。

(1) 分布指数。

分布指数表示粒子的真实距离分布和最优距离分布的差值随时间的变化情况,粒子分布越均匀,分布指数就越小。

分布指数的控制方程如下:

$$\delta(t) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} |f(l) - f^{\text{opt}}(l)| dl \quad (6)$$

式中: $\delta(t)$ 为分布指数; $f(l)$ 为真实距离分布; $f^{\text{opt}}(l)$ 为最优距离分布。

分布指数的变化曲线如图7所示。由图7可知,随着挤出的进行,粒子分布逐渐均匀,分布指数开始

下降。对比不同螺杆的分布指数曲线,随着反螺纹元件的增加分布指数下降变慢,说明反螺纹元件的增加阻碍粒子的均匀分布,反螺纹少于两组时影响不大,在 200 时间切片时已基本混合均匀,但三组反螺纹需要 600 时间切片。

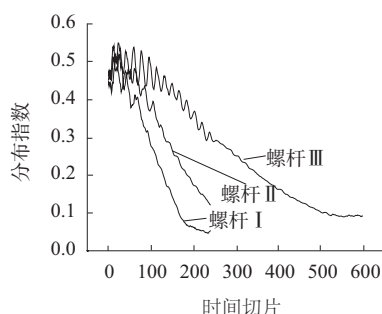


图 7 分布指数曲线图

(2) 分离尺度。

在入口界面放置不同的示踪粒子,分离尺度表示不同示踪粒子的距离分布,混合越均匀,不同粒子间的距离越小,因此分离尺度越小。分离尺度的控制方程如下:

$$S(t) = \int_0^{\xi} R(r, t) dr \quad (7)$$

$$\int_0^{\xi} R(r, t) = \frac{\sum_{j=1}^M (\bar{c}'_j - \bar{c})(\bar{c}''_j - \bar{c})}{M\sigma_c^2} \quad (8)$$

式中: S 为分离尺度; $\bar{c}$ 为平均分布密度; $\bar{c}'_j, \bar{c}''_j$ 为对位置上的浓度; M 为相对点的数量; σ_c^2 为粒子浓度分布方差。

分离尺度的变化图如图 8:

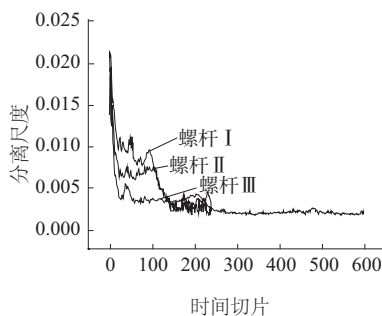


图 8 分离尺度曲线图

由图 8 可知,在 100 时间切片之前,分离尺度随着反螺纹数量的增加而减小,100 个时间切片后螺杆 I 和 II 的分离尺度迅速下降,在 150 个时间切片之后小于螺杆 III 的分离尺度,说明反螺纹的增加刚开始会加快粒子的分散,但是从整体看,混合效果逊于一组和两组反螺纹的螺杆。故混合段反螺纹为 2 组时分离尺度整体最好。

4 结论

基于 Polyflow 软件对不同螺杆的挤出过程进行模拟仿真,得到流场数据和剪切应力分布,利用粒子示踪法统计混合分布情况,分析不同螺杆模型的混合情况。

(1) 在常规料筒中,反螺纹元件的剪切效果最好,是啮合块和正螺纹的 2.25 倍,起剪切反流的作用;啮合块是混合元件,主要起混合作用,剪切效果不明显。

(2) 反螺纹增多会提升粒子受到的剪切应力,有利于粒子的破碎,但是过多的反螺纹对分散混合的提升效果并不明显,螺杆 III 相对于螺杆 II,最大剪切应力只提高了 25 kPa,粒径分布密度提高了 0.002 5。

(3) 反螺纹的增加阻碍粒子的分布混合,达到同样的分布指数,螺杆 III 需要的时间是螺杆 I 和螺杆 II 的三倍,且螺杆 II 的整体分布混合效果最好。

综上所述,螺杆元件的数量和种类对挤出过程的影响不同,通过仿真分析得知,反螺纹元件的剪切效果最为明显,且每个混合段中设置 2 组反螺纹元件时,粒子的分散和分布效果最好。

参考文献

- [1] 杨昆晓. 基于三螺杆挤出机的聚苯醚/聚酰胺 66 合金共混改性研究[D]. 北京:北京化工大学,2017.
Yang Kunxiao. Study on blending modification of poly(2,6-dimethyl-1,4-phenyleneoxide)/polyamide-66 with triangle-arrayed triple-screw extruder[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2017.
- [2] 余东泉,何亚东,杨昆晓,等. 三螺杆挤出机剪切-拉伸作用的理论分析[J]. 塑料,2018,47(2):119-121.
Yu Dongquan, He Yadong, Yang Kunxiao, et al. Theoretical analysis on shear-extensional effect of triple screw extruder[J]. Plastics, 2018, 47(2): 119-121.
- [3] 张宏建,黄志刚,李梦林,等. 啮合同向双螺杆挤出机不同螺杆流场仿真分析[J]. 工程塑料应用,2016,44(9):70-74.
Zhang Hongjian, Huang Zhigang, Li Menglin, et al. Intermeshing co-rotating twin-screw extruder with different screw of flow field simulation analysis[J]. Engineering Plastics Application, 2016, 44(9): 70-74.
- [4] 唐豪,宗原. 聚氨酯反应挤出过程的数值模拟[J]. 华东理工大学学报:自然科学版,2016,42(3):301-307.
Tang Hao, Zong Yuan. Numerical simulation of reactive extrusion of polyurethane[J]. Journal of East China University of Science and Technology: Natural Science Edition, 2016, 42(3): 301-307.
- [5] 邱方军,黄虹,李能文,等. POLYFLOW 软件在聚合物加工中的应用进展[J]. 塑料制造,2009(9):60-63.

- Qiu Fangjun, Huang Hong, Li Nengwen, et al. The application situation of polyflow software in polymer molding process[J]. *Plastics Manufacture*, 2009(9):60-63.
- [6] 栗阳, 王振文, 吴敏. 双螺杆挤出机流道流场和操作参数的数值模拟研究进展[J]. *食品工业科技*, 2021, 42(2):338-344.
- Li Yang, Wang Zhenwen, Wu Min. Research progress on numerical modeling of flow field and operating parameters in twin screw extruder[J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2021, 42(2):338-344.
- [7] Yu Huiwen, Xu Baiping, Wu Hongwu, et al. A visualization of flow patterns of viscoelastic fluid partially filled in a Co - rotating nontwin screw extruder[J]. *Polymer Engineering & Science*, 2019, 59(S1).
- [8] 郭树国, 于淼, 王丽艳, 等. 带有开槽中性捏合块和反向螺纹双螺杆挤出机的三维流场分析[J]. *沈阳化工大学学报*, 2020, 34(4):358-362.
- Guo Shuguo, Yu Miao, Wang Liyan, et al. Three-dimensional flow field analysis of twin-screw extruder with slotted neutral kneading block and reverse thread[J]. *Journal of Shenyang University of Chemical Technology*, 2020, 34(4):358-362.
- [9] Domingues N, Gaspar-Cunha A, Covas J A. Global mixing indices for single screw extrusion[J]. *International Journal of Material Forming*, 2008(1):723-726.
- [10] 韩海川, 刘谨, 李开国, 等. 双螺杆啮合元件与反螺纹元件对流场影响的仿真[J]. *工程塑料应用*, 2020, 48(6):74-77, 87.
- Han Haichuan, Liu Jin, Li Kaiguo, et al. Simulation of influence of twin-screw meshing element and anti-thread element on flow field[J]. *Engineering Plastics Application*, 2020, 48(6):74-77, 87.
- [11] 张国才, 韩海川, 陈占春. 剪刀式单螺杆螺头数和螺棱与机筒间隙对挤出流场影响的计算机模拟[J]. *机械设计*, 2021, 38(1):97-101.
- Zhang Guocai, Han Haichuan, Chen Zhanchun. Computer simulation of the effect of the number of screw edges and the gap between screw edges and barrel edges on the flow field of extrusion[J]. *Journal of Machine Design*, 2021, 38(1):97-101.
- [12] 姚爱英, 韩海川, 陈占春, 等. 新型剪刀式力化学反应器及其对聚合物挤出流场的影响[J]. *塑料科技*, 2020, 48(1):15-18.
- Yao Aiyang, Han Haichuan, Chen Zhanchun, et al. A new type of shear force chemical reactor and its effect on the extrusion flow field of polymer[J]. *Plastics Science and Technology*, 2020, 48(1):15-18.
- [13] Zhang Xianming, Feng Lianfang, Chen Wenxing, et al. Numerical simulation and experimental validation of mixing performance of kneading discs in a twin screw extruder[J]. *Polymer Engineering and Science*, 2009, 49(9):1772-1783.
- [14] 刘彪, 徐百平, 谭寿再, 等. 差速非对称同向双螺杆挤出机内局部停留时间分布测试[J]. *工程塑料应用*, 2020, 48(5):74-80.
- Liu Biao, Xu Baiping, Tan Shouzai, et al. Local residence time distributions in a dual-speed co-rotating non-twin screw extruder[J]. *Engineering Plastics Application*, 2020, 48(5):74-80.
- [15] René O V, Eduardo V-Lima, Octavio M. Simulation of nonlinear polyurethane production in a twin-screw extruder[J]. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 2006, 45(1):9-21.

(上接第76页)

- He Chunxia, Ding Weimin, Gu Hongyan. Preparation and mechanical properties of nano- Al_2O_3 / PTFE composites[J]. *China Plastics Industry*, 2001(4):16-17.
- [8] 顾红艳, 何春霞, 史丽萍. 不同纳米材料填充聚四氟乙烯复合材料的力学性能研究[J]. *塑料*, 2008, 37(5):86-88.
- Gu Hongyan, He Chunxia, Shi Liping. Mechanical property of PTFE composites filled with different nano-material[J]. *Plastics*, 2008, 37(5):86-88.
- [9] 王永虎, 王玲娟, 宋利明, 等. 氧化石墨烯-聚四氟乙烯纳米复合材料及其性能[J]. *化工生产与技术*, 2014, 21(2):12-14, 66.
- Wang Yonghu, Wang Lingjuan, Song Liming, et al. Oxidized graphene-polytetrafluoroethylene nanocomposites and their properties[J]. *Chemical Production and Technology*, 2014, 21(2):12-14, 66.
- [10] 解挺, 杨华平, 杨辉. 摩擦磨损过程的数值模拟研究[J]. *润滑与密封*, 2013, 38(12):88-92.
- Xie Ting, Yang Huaping, Yang Hui. Numerical simulation of the process of friction and wear[J]. *Lubrication Engineering*, 2013, 38(12):88-92.
- [11] 郭志婧, 刘伟帅, 曹晓雪. 基于分子动力学模拟的环氧/多层石墨界面拉伸性能[J]. *工程塑料应用*, 2018, 46(5):42-47.
- Guo Zhijing, Liu Weishuai, Cao Xiaoxue. Interfacial tensile properties of epoxy / multilayer graphene based on molecular dynamics simulation[J]. *Engineering Plastics Application*, 2018, 46(5):42-47.
- [12] Li Yunlong, Wang Shijie, Wang Quan. Enhancement of tribological properties of polymer composites reinforced by functionalized graphene[J]. *Composites Part B*, 2017, 120 :83-91.
- [13] 陈正隆. 分子模拟的理论与实践[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.
- Chen Zhenglong. The theory and practice of molecular simulation[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [14] Li Yunlong, Wang Shijie, Wang Quan. A molecular dynamics simulation study on enhancement of mechanical and tribological properties of polymer composites by introduction of graphene[J]. *Carbon*, 2017, 111 :538-545.
- [15] 程梦萱, 吕建峰, 程鑫, 等. 聚四氟乙烯 / MoS_2 复合材料的制备及性能研究[J]. *广东化工*, 2020, 47(3):1-2, 11.
- Cheng Mengxuan, Lyu Jianfeng, Cheng Xin, et al. Preparation and property of PTFE / MoS_2 composites[J]. *Guangdong Chemical Industry*, 2020, 47(3):1-2, 11.