

壁面条件对异向锥形双螺杆挤出硬质聚氯乙烯过程的影响

曹英寒, 陈晋南

北京理工大学化工与环境学院, 北京 100081

摘要 数值模拟了壁面条件对异向锥形双螺杆挤出硬质聚氯乙烯 (RPVC) 过程的影响。由 Navier 线性滑移定律确定螺杆壁面熔体所受的剪切应力与熔体滑移速度的关系, 在不同壁面条件下, 使用 Polyflow 软件的 Eolution 法, 数值计算了异向锥形双螺杆计量段流道内 RPVC 熔体的体积流量和三维等温流场。结果表明, 熔体在螺杆壁面无滑移时, 螺杆流道内熔体速度大, 速度梯度大, 剪切速率等值线形状不规则, 分布杂乱。当滑移系数小于 $10^{-4} \text{Pa} \cdot \text{s/m}$ 时, 锥形双螺杆流道内熔体的体积流量不变。当滑移系数大于 $10^{-4} \text{Pa} \cdot \text{s/m}$ 时, 随着滑移系数的减小, 锥形双螺杆流道内熔体的体积流量增大, 速度梯度减小, 压力和剪切速率梯度减小, 参考线上熔体压力波动减小。因此, 改善壁面条件有利于提高聚合物螺杆挤出过程的稳定性, 降低制品的残余应力, 提高制品质量。

关键词 壁面滑移; 异向锥形双螺杆挤出; 硬质聚氯乙烯

中图分类号 TQ320.66

文献标识码 A

文章编号 1000-7857(2010)12-0061-05

Effect of Wall Conditions on Counter-Rotating Conical Twin Screw Extrusion of Rigid Polyvinylchloride

CAO Yinghan, CHEN Jinnan

School of Chemical Engineering and Environment, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

Abstract The effect of wall conditions on the counter-rotating conical twin screw extrusion of Rigid Polyvinylchloride (RPVC) is studied. The relationship between the screw wall shear stress and the slip velocity of the flowing melt follows the Navier linear law. The volumetric flow rate and 3D isothermal flow fields of RPVC are calculated under different wall slip conditions in the metering section of a counter-rotating conical twin screw extruder by the use of the evolution technique in Polyflow. The results show that the melt velocity and the velocity gradient are high when there is no slip. The shape of the shear rate isolines is irregular with the distribution in disarray. When the slip coefficient is smaller than $10^{-4} \text{Pa} \cdot \text{s/m}$, the volumetric flow rate of melt is constant and it is in the full slip condition. When the slip coefficient is greater than $10^{-4} \text{Pa} \cdot \text{s/m}$, with the decrease of the slip coefficient, the volumetric flow rate increases, the gradients of velocity, pressure and shear rate decrease, and the fluctuation of the pressure along the reference line decreases. The residual stress of the product is thus decreased. As a result, the improvement of the wall condition is beneficial to the stability of polymer extrusion process and the improvement of the product quality.

Keywords wall slip; counter-rotating conical twin screw extrusion; rigid polyvinylchloride

0 引言

在聚合物螺杆挤出加工中, 聚合物熔体与挤出机流道内壁面有相对运动, 不存在绝对的壁面无滑移情况。壁面条件影响挤出制品质量, 在聚合物挤出加工中起重要作用^[1]。早在 1999 年, 在壁面滑移条件下, Kalyon 等^[2]分别用有限元方法和

X 射线衍射技术研究了同向平行双螺杆挤出机流道内聚二甲基硅氧烷的速度、温度和压力分布, 发现靠近机筒壁面, 熔体速度梯度大, 黏性热大, 温度高, 无滑移时熔体压力比有滑移时的压力高。2004 年, Hu 等^[3]使用 Polyflow 软件数值研究了滑移系数对平行双螺杆螺纹块元件流道内聚丙烯熔体流场的

收稿日期: 2010-04-26

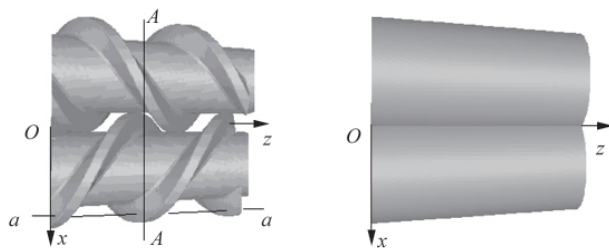
作者简介: 曹英寒, 博士研究生, 研究方向为化工过程基本理论与技术, 电子信箱: caoyh1107@163.com; 陈晋南 (通信作者), 教授, 研究方向为化学工艺, 电子信箱: jnchen@bit.edu.cn

影响,发现流量恒定时,进出口间压差随滑移系数的增大而增大,压差恒定时,螺棱两侧压力峰值随滑移系数增大而增大。2006年,在滑移条件下,Patil等^[4]数值模拟了挤出机锥形口模的几何结构对流动内聚四氟乙烯熔体压力的影响,发现当口模锥角大于 30° 时,口模流动内熔体压力随锥角的增大而增大,口模锥角恒定时,熔体压力随口模长径比的增大而增大。2007年,在壁面滑移条件下,Taliadorou等^[5]数值模拟了挤出机口模几何结构对口模流动内可压缩高密度聚乙烯熔体等温非稳态流动过程的影响,发现随着稳流段长度增加,口模流动内熔体压力波动减小。2008年,在壁面滑移条件下,Kavousankis等^[6]数值模拟了 Oldroyd-B 流体的非稳态流平板 Poiseuille 流,发现流动曲线上存在两个 Hopf 分枝点和一个斜率为负值的区域。2009年,Chatzimina等^[7]建立了壁面剪切应力和滑移速度的线性滑移模型,数值研究了壁面条件对牛顿流体环形 Poiseuille 流动的影响,发现流动曲线的形状与圆环半径比率、滑移方程有关。

综上所述,研究熔体壁面滑移对聚合物螺杆混合挤出的影响,逐渐成为研究的热点。尚未见研究不同滑移条件的聚合物锥形双螺杆混合挤出过程的相关报道。本文使用 Polyflow 软件,数值模拟了异向锥形双螺杆挤出硬质聚氯乙烯(Rigid Polyvinylchloride,RPVC)的过程,计算了锥形双螺杆计量段流动内熔体的三维等温流场,分析讨论了壁面条件对异向锥形双螺杆挤出 RPVC 过程的影响,为工程实际提供理论依据和技术支持。

1 数学物理模型和计算方法

异向锥形双螺杆大端外径 110mm,小端外径 55mm,导程 100mm,螺槽深 10mm,长径比 12。机筒与螺杆之间的间隙为 0.3mm。选取锥形双螺杆的螺杆头部后面 100mm 的计量段作为研究对象,以锥形双螺杆大端横截面的中心为原点,流动中心线为 z 轴建立直角坐标系,在计算平台上分别建立异向锥形双螺杆和机筒的几何模型,如图 1 所示。



(a) 异向锥形双螺杆计量段
(a) Metering section of counter-rotating conical twin screw
(b) 机筒
(b) Barrel

图 1 异向锥形双螺杆计量段和机筒几何模型
Fig. 1 Geometric models of counter-rotating conical twin screw and barrel

用正四面体单元分别划分形状不规则的螺杆和机筒的网格,加密双螺杆表面网格,再使用网格叠加技术组合机筒和螺杆,以避免因螺杆运动重复划分网格。异向锥形双螺杆网格数为 277316 个,机筒为 154802 个。异向锥形双螺杆计量段和机筒网格如图 2 所示。

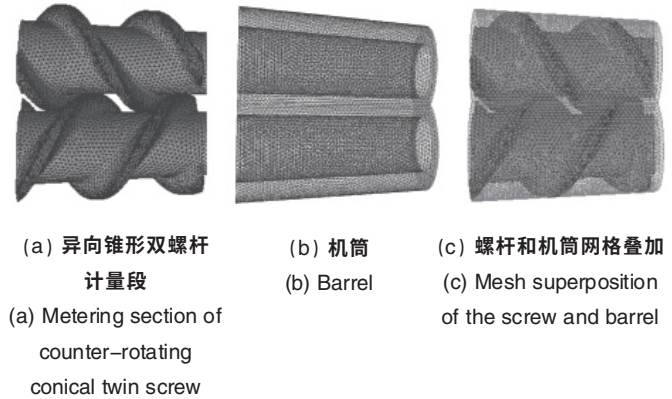


图 2 异向锥形双螺杆计量段和机筒网格

Fig. 2 Meshes for counter-rotating conical twin screw and barrel

用 Cross 模型描述 RPVC 的表观黏度随剪切速率的变化^[8],

$$\eta = \frac{\eta_0}{(1 + \lambda \dot{\gamma})^n} \quad (1)$$

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2D:D} \quad (2)$$

$$D = (\nabla u + \nabla u^T)/2 \quad (3)$$

式中, η 为表观黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$; η_0 为零剪切黏度, $0.47 \times 10^5 \text{Pa} \cdot \text{s}$; λ 为松弛时间, 0.26s ; $\dot{\gamma}$ 为剪切速率, s^{-1} ; n 为非牛顿指数, 0.65 ; D 为变形速度张量, s^{-1} ; u 为速度向量, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

根据锥形双螺杆挤出 RPVC 的工况,假设螺杆流动内全充满高黏度 RPVC 熔体,忽略惯性力和质量力,熔体流动为稳定不可压缩的等温层流。基于以上假设,描述锥形双螺杆流动内熔体流动的控制方程为^[9]

$$\text{连续性方程} \quad \nabla \cdot u = 0 \quad (4)$$

$$\text{动量方程} \quad -\nabla p I + \nabla \cdot \tau = 0 \quad (5)$$

$$\text{本构方程} \quad \tau = 2\eta(\dot{\gamma})D \quad (6)$$

式中, p 为压力, Pa ; I 为单位张量, Pa ; τ 为应力张量, Pa ; ρ 为密度, 1450kg/m^3 。

螺杆壁面所受的剪切应力与熔体滑移速度的关系遵从 Navier 线性滑移定律^[9]

$$\tau_s = F_{\text{slip}}(u_{\text{wall}} - u_t) \quad (7)$$

式中, τ_s 为剪切应力, Pa ; F_{slip} 为滑移系数, $\text{Pa} \cdot \text{s/m}$; u_{wall} 为壁面切向速度, m/s ; u_t 为熔体在壁面上的切向速度, m/s 。

F_{slip} 为 $+\infty$ 时表示壁面无滑移, F_{slip} 为零时表示壁面全滑移。 F_{slip} 越大,表明熔体与壁面间摩擦力越大。使用 Polyflow 软件的 Evolution 法确定 F_{slip} :

$$F_{\text{slip},i} = 10^8 f(s_i) \quad (8)$$

$$f(s_i) = \exp(-1.8421s_i) \quad S_{i+1} = S_i + \Delta S_i \quad (9)$$

式中, s_i 为变量参数, $i=1, 2, \dots, N$ 。初始值 $s_1=1$, 终值 $s_N=10$, 最小增量 $\Delta s_{\min}=0.01$, 最大增量 $\Delta s_{\max}=1$ 。

方程(1)~(6)是非线性耦合方程, 无法解析求解。因此在数值计算中, 速度和压力采用线性函数插值, 黏度采用皮卡迭代。引入罚函数项修正动量方程(5), 将连续性方程(4)作为求解动量方程的约束条件, 用隐式欧拉法数值求解离散化的方程组。机筒内壁使用壁面无滑移条件, 螺杆表面使用滑移边界条件。在螺杆转速 25r/min、压差为零的工艺条件下, 将 $F_{\text{slip}}=10^0, 10^1, 10^2, \dots, 10^8, +\infty$ (Pa·s/m) 代入式(7)确定壁面剪切应力条件, 用有限元方法数值求解方程(1)~(6), 用 Evolution 法一次计算不同壁面条件的 RPVC 熔体体积流量, 以及相应螺杆计量段熔体三维等温流场。在 HPXW9300 工作站上完成全部计算, 计算收敛精度为 10^{-3} , 完成一次计算需 3d。

2 计算结果与讨论

为了深入研究壁面条件对异向锥形双螺杆混合挤出 RPVC 的影响, 选取了横截面 A-A ($z=50\text{mm}$) 和参考线 a-a 详细讨论螺杆流道内熔体各物理量的变化。其中, a-a 线与锥形螺杆根部平行, 距螺杆根部距离为 5mm。横截面和参考线的位置如图 1 所示。首先讨论锥形双螺杆流道内熔体体积流量随 F_{slip} 的变化, 再详细研究壁面条件对螺杆流道内熔体流场的影响。

图 3 给出了锥形双螺杆流道内 RPVC 的体积流量随 F_{slip} 的变化。由图 3 可知, 当 $1 \leq F_{\text{slip}} \leq 10^4 \text{Pa} \cdot \text{s/m}$ 时, 锥形双螺杆流道内 RPVC 的体积流量不变, 即熔体在螺杆表面完全滑移。当 $F_{\text{slip}} > 10^4 \text{Pa} \cdot \text{s/m}$ 时, 随着 F_{slip} 的增大, RPVC 的体积流量逐渐减小, 部分熔体粘附在螺杆表面。 $F_{\text{slip}} \rightarrow +\infty$ 与全滑移时相比, 熔体体积流量减小了 65.5%。由式(7)可知, 随着 F_{slip} 增大, 螺

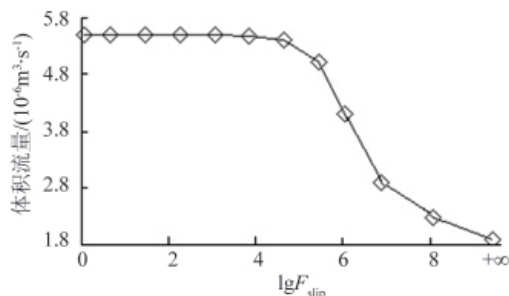


图 3 锥形双螺杆流道内 RPVC 的体积流量随 F_{slip} 的变化

Fig. 3 Volumetric flow rates of RPVC versus F_{slip} in conical twin screw extruder

杆表面熔体所受剪切应力增大, 熔体的输送阻力增大, 体积流量减小。

分析典型 $F_{\text{slip}} \rightarrow +\infty, 10^7$ 和 $10^4 \text{Pa} \cdot \text{s/m}$ 的数值计算结果, 不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 A-A 面熔体的速度场、压力场、剪切速率场和黏度场如图 4~图 7 所示。由图 4~图 7 可知, 无滑移时, 随着螺杆转动熔体运动, 此时螺杆壁面熔体速度大, 速度梯度大, 而剪切速率等值线形状不规则, 分布杂乱。壁面滑移条件下, 锥形双螺杆螺槽内熔体速度、压力和剪切速率变化率小。全滑移与无滑移时相比, 熔体的最大速度减小了 42.9%, 最大压力减小了 63.0%, 最大剪切速率减小了 50.0%, 而最大黏度增大了 26.1%。由此可知, 随着 F_{slip} 减小, A-A 横截面熔体速度梯度、压力、剪切速率减小, 而熔体黏度增大。螺槽两侧出现压力峰值, 压力峰值随着 F_{slip} 减小而减小。研究结果与单螺杆^[1]和平行同向双螺杆^[2-3]研究得到的规律一致。可见, 熔体的壁面滑移有利于提高挤出操作的稳定性和制品质量。

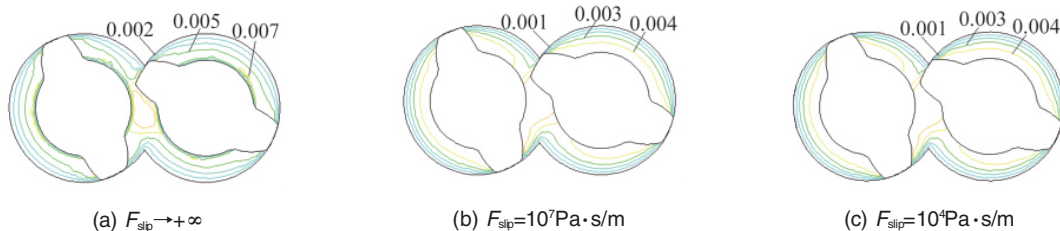


图 4 不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 A-A 面熔体速度场 (m/s)

Fig. 4 Velocity fields on A-A plane in conical twin screw extruder at different F_{slip} (velocity in m/s)

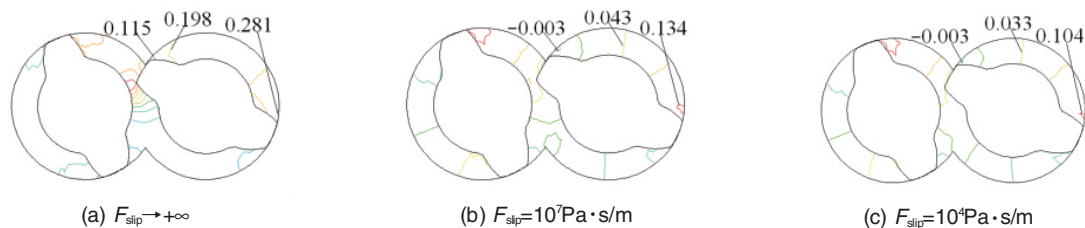


图 5 不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 A-A 面熔体压力场 (MPa)

Fig. 5 Pressure fields on A-A plane in conical twin screw extruder at different F_{slip} (pressure in MPa)

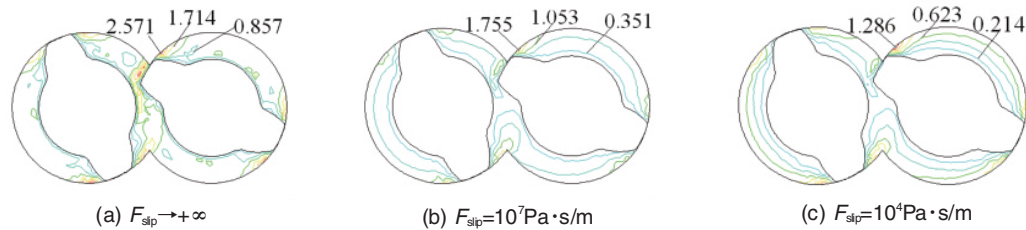


图 6 不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 A-A 面熔体剪切速率场 (s^{-1})

Fig. 6 Shear rate fields on A-A plane in conical twin screw extruder at different F_{slip} (shear rate in s^{-1})

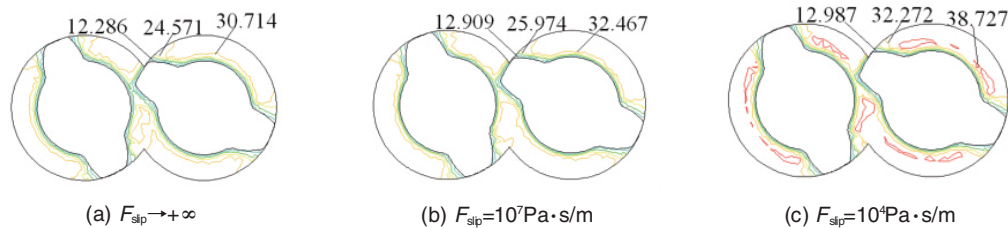


图 7 不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 A-A 面熔体黏度场 ($kPa\cdot s$)

Fig. 7 Viscosity fields on A-A plane in conical twin screw extruder at different F_{slip} (viscosity in $kPa\cdot s$)

图 8 给出了不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 $a-a$ 线上熔体物理量沿 z 轴的变化。由图 8 可知, $F_{slip}=10^7 Pa\cdot s/m$ 、全滑移与无滑移相比, 锥形双螺杆流道 $a-a$ 线上熔体的速度平均分别减小了 24.7% 和 43.0%, 压力分别平均减小了 55.8% 和 53.8%,

剪切速率分别平均减小了 35.6% 和 55.4%, 而黏度分别平均增大了 6.9% 和 14.6%。由此可知, 随着 F_{slip} 减小, 锥形双螺杆流道内熔体压力波动减小, 有利于提高混合挤出过程的稳定性。

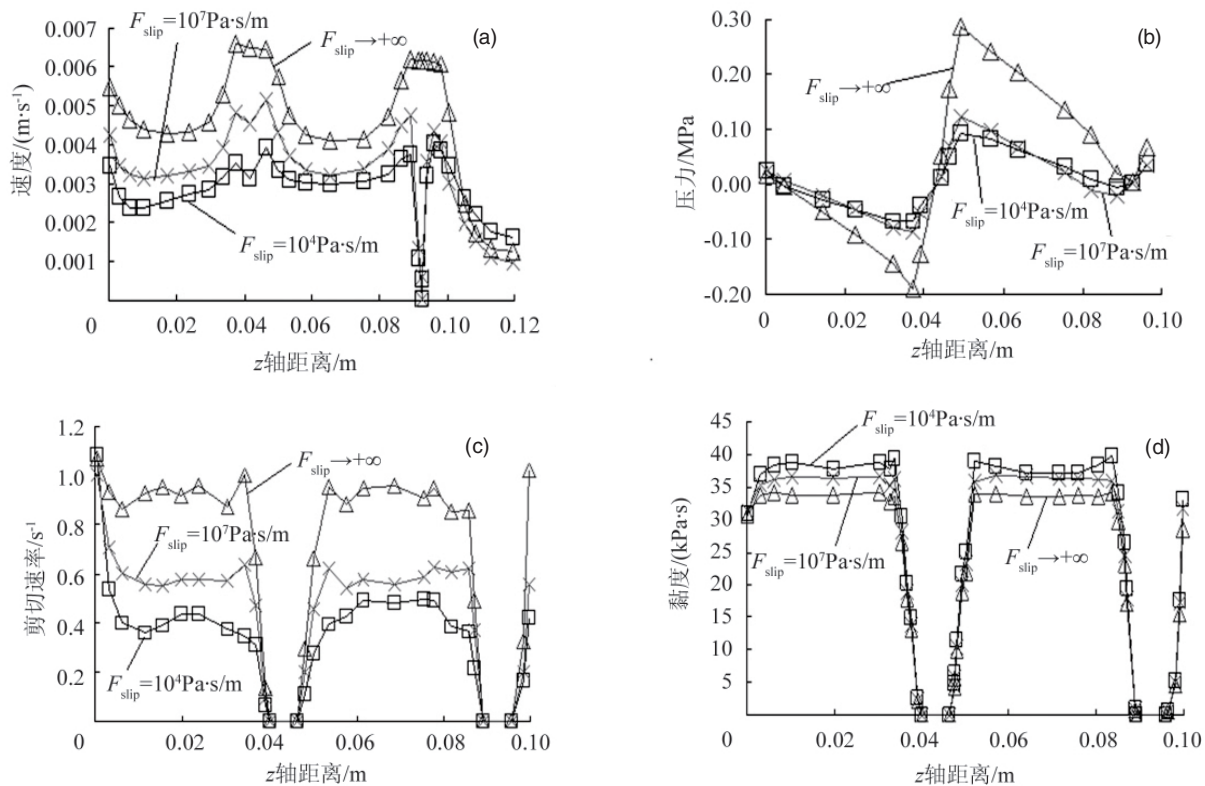


图 8 不同 F_{slip} 的锥形双螺杆流道 $a-a$ 线上熔体物理量沿 z 轴的变化

Fig. 8 Variations of melt physical quantities along line $a-a$ in conical twin screw extruder at different F_{slip}

3 结论

使用 Navier 线性定律描述螺杆壁面熔体剪切应力与熔体滑移速度的关系, 首先用滑移系数 $F_{\text{slip}}=10^0, 10^1, 10^2, \dots, 10^8, +\infty (\text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m})$ 确定不同壁面剪切应力条件。在螺杆转速为 25 r/min, 压差为零的工艺条件下, 用 Polyflow 软件提供的 Evolution 法, 数值计算了不同壁面条件的异向锥形双螺杆计量段流道内 RPVC 熔体体积流量和三维等温流场, 研究了壁面条件对异向锥形双螺杆挤出 RPVC 过程的影响。研究结果表明, 熔体无滑移时, 螺杆流道内熔体速度大, 速度梯度大, 而剪切速率等值线形状不规则, 分布杂乱。当滑移系数小于 $10^4 \text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m}$ 时, 锥形双螺杆流道内熔体的体积流量不变, 熔体在螺杆表面完全滑移。当滑移系数大于 $10^4 \text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m}$ 时, 随着 F_{slip} 减小, 锥形双螺杆流道内熔体的体积流量增大, $A-A$ 横截面熔体速度梯度减小, 螺棱两侧压力峰值减小, 剪切速率变化率减小, 而熔体黏度增大, 参考线上熔体压力波动减小。由此可知, 熔体壁面滑移有利于提高混合挤出过程的稳定性, 减少了制品的残余应力, 可提高制品质量。数值模拟方法可预测螺杆挤出聚合物产品的质量。

参考文献 (References)

- [1] Kim S J, Kwon T H. Development of numerical simulation methods and analysis of extrusion process of particle-filled plastic materials subject to slip at the wall[J]. *Powder Technology*, 1995, 85: 227-239.

- [2] Kalyon D M, Lawal A, Yazici R, *et al.* Mathematical modeling and experimental studies of twin-screw extrusion of filled polymers [J]. *Polymer Engineering and Science*, 1999, 39(6): 1139-1151.
- [3] Hu D, Chen J. Numerical simulation of twin-screw extrusion with wall slip[J]. *Journal of Beijing Institute of Technology*, 2004, 13(1): 85-89.
- [4] Patil P D, Feng J J, Hatzikiakos S G. Constitutive modeling and flow simulation of polytetrafluoroethylene (PTFE) paste extrusion[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2006, 139: 44-53.
- [5] Taliadorou E, Georgiou G C, Alexandrou A N. A two-dimensional numerical study of the stick-slip extrusion instability[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2007, 146: 30-44.
- [6] Kavousankis M E, Russo L, Siettos C I, *et al.* A timestepper approach for the systematic bifurcation and stability analysis of polymer extrusion dynamics[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2008, 151: 59-68.
- [7] Chatzimina M, Georagiou G C, Housiadas K, *et al.* Stability of the annular Poiseuille flow of a Newtonian liquid with slip along the walls[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2009, 159(1-3): 1-9.
- [8] 陈晋南, 胡敏. 数值模拟硬质聚氯乙烯双螺杆模具挤出过程 [J]. *科技导报*, 2009, 27(13): 54-59.
Chen Jinnan, Hu Min. *Science & Technology Review*, 2009, 27(13): 54-59.
- [9] 吕静, 陈晋南, 胡冬冬. 壁面滑移对两种聚合物熔体共挤出影响的数值研究[J]. *化工学报*, 2004, 55(3): 455-459.
Lu Jing, Chen Jinnan, Hu Dongdong. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 2004, 55(3): 455-459.

(责任编辑 代丽)

· 学术动态 ·



“第十一届全国土壤微生物 学术讨论会”征文

中国微生物学会、中国植物营养与肥料学会、中国土壤学会等将于 2010 年 10 月 18—21 日在长沙市举办“第十一届全国土壤微生物学术讨论会”, 并与“第六次全国土壤生物与生物化学学术研讨会”和“第四届全国微生物肥料生产技术创新研讨会”同期举行。会议以“技术创新与发展”为主题, 交流近几年土壤(农业)微生物学研究和微生物肥料等产业发展的技术与应用成果, 研讨下一阶段土壤(农业)微生物学的发展方向与重点。

征文内容包括: 土壤微生物和生物固氮研究的新进展, 植物与微生物相互作用机制的研究, 土壤生物与生物化学研究新进展, 微生物在土壤与环境治理方面的研究进展, 微生物肥料产品与技术创新研究与成果, 微生物肥料产业发展政策和质量标准体系建设, 微生物肥料研发、效果评价与关注热点, 农业生物产业与农产品质量安全。

会议网址: <http://csm.im.ac.cn/html/xuehuitongzhi/20100511/506.html>。

征文截止时间: 2010 年 9 月 20 日。

联系方式: 北京市海淀区中关村南大街 12 号中国农科院农业资源与农业区划所菌肥测试中心(100081) 沈德龙, 李俊; 电话: 010-82106208; 传真: 010-82108702; 电子信箱: dlshen@caas.ac.cn, jli@caas.ac.cn。