

同向啮合双螺杆挤出机挤出过程的计算机模拟*

郑泓俞 炜 张洪斌 周持兴**

冯连芳 许忠斌

(上海交通大学高分子科学与工程系 上海 200240) (浙江大学高分子科学与工程系 杭州 310027)

摘 要 计算机模拟研究了聚苯乙烯在 TSE-35A 型同向啮合双螺杆挤出机的挤出过程, 计算得到不同喂料速率与不同转速下的停留时间分布, 并与在线荧光法测量值对比, 二者基本相符. 确定了停留时间与螺杆转速及喂料速率之间的函数关系式. 模拟结果还预测了喂料速率、螺杆转速等工艺参数对双螺杆内流场变量, 如温度、填充率、压力及粘度等的影响. 模拟计算有助于了解双螺杆挤出机内部聚合物材料流动状态及停留时间长短, 从而指导实际聚合物生产.

关键词 双螺杆挤出机, 聚苯乙烯, 模拟, 停留时间分布, 流场

双螺杆挤出机作为连续混合挤出机械, 已广泛地应用于聚合物生产、食品加工及医药工业等领域. 建立描述螺杆挤出机中挤出过程的正确理论, 对指导挤出机设计与加工生产至关重要^[1-3]. 但由于螺杆元件几何复杂, 物料在螺杆挤出机中的流动分析非常困难. 根据螺杆的不同职能, 分为固体输送段、熔融段及熔体输送段, 其中对于熔融段输送机理的理论尚不成熟, 因此目前的理论和模拟研究都仅仅针对其中的一个职能区甚至一个螺杆元件中的流场进行分析^[4-7], 而对于整个螺杆挤出机的挤出过程, 即从加料开始到挤出的整个过程的模拟鲜见报道.

基于 Souveton 关于熔融段的理论描述, 本文运用 Ludovic(r) 软件对聚苯乙烯 (PS) 在同向啮合双螺杆挤出机中的挤出过程进行模拟, 计算得到的停留时间分布 (residence time distribution, RTD) 将与实验测量值进行对比, 同时分析喂料速率与螺杆转速对挤出过程停留时间、填充率及温度等参数的影响.

1 简化流动模型

1.1 流场参数的计算

忽略聚合物熔体弹性, 假设在双螺杆内熔体的流动为粘性非牛顿性, 且熔体不可压缩, 不考虑重力作用. 采用柱坐标系, 设平行芯轴方向为 z , 旋转面上定义径向 r 与切向 θ . 考虑到螺杆元件构型存在差异, 如正向输送元件、啮合元件与反向元件, 为了简化问题, 假设在同一螺杆元件上熔体

流动速度与 z 无关, 故有:

$$V_z = V_z(r, \theta), V_r = 0, V_\theta = V_\theta(r, \theta) \\ P = P(z, r, \theta) \quad (1)$$

其中, V 是速度, P 是压力.

对于双螺杆挤出系统, 首先设定 4 个参数, 即料桶内径、两螺杆中心距、头数、螺杆与料桶间的间隙, 同时还需要定义不同螺杆元件的几何参数^[1]. 例如对于正向输送元件, 需要设定螺杆元件长度与导程; 啮合元件需要设定啮合块旋向、偏转角、盘宽与块长. 对各元件内聚合物熔体的流动运用连续介质力学理论, 建立质量守恒方程与运动方程, 并考虑边界条件, 即可求出流体速度分布. 然后对速度分布进行积分, 可求得体积流量分布, 继而求得流场内各点的剪切速率分布. 体积流量表达式分为两部分, 源于两种作用机制, 螺杆与料桶间的相对运动及压力差. 熔体的粘度可以用指数定律、Carreau-Yasuda 模型或者用户自定义函数来描述, 通常熔体粘度与剪切速率和温度有关. 根据计算得到的粘度与流量, 即可求得压力差.

1.2 温度场计算

假设料桶与螺杆温度不变, 聚合物材料在螺杆挤出机内被输送、剪切与熔化, 由于受热, 温度不断上升直至熔化, 并释放相变焓热. 受剪切作用将发生粘性耗散, 对于不同的元件, 粘性耗散热定义为:

$$\dot{W} = \eta \dot{\gamma}^2 \quad (2)$$

式中, $\dot{W}$ 是粘性耗散所释放的能量, η 是熔体粘度, $\dot{\gamma}$ 是剪切速率. 通常, 在啮合块区域由于强剪

切作用,将产生大量的耗散热,可能造成局部温度过高等现象^[3]。

1.3 熔融段的计算

假设从进料口加入的聚合物固体颗粒具有统一半径.进入螺杆后,由于受热被熔化,采用相对粘度模型来描述这一过程的变化:

$$\eta_{rel} = (1 - \alpha \cdot \phi)^\beta \quad (3)$$

$$\eta_m = \eta \cdot \eta_{rel} \quad (4)$$

式中, η_m 是熔融段粘度; η_{rel} 为相对值; α, β 为模型参数,不同材料值不同; ϕ 为固体质量分率,可以从固体颗粒的直径、固液两相的密度以及质量流量计算得到。

熔化时,固体颗粒粒径 R 逐渐变小,直至消失,转变为熔体,其变化过程可用下式表达:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{h_s \cdot (T_s - T_l)}{\rho_s (C_{ps} (T_m - T_s) + \Delta H_f)} \quad (5)$$

式中, h_s 是热传导系数; T_s, T_l, T_m 分别是固相,

液相温度及材料熔点; ρ_s 固体颗粒密度; C_{ps} 固体颗粒热容; ΔH_f 相变焓热。

1.4 算法

计算时,先设置螺杆及螺杆元件组合的参数,以及挤出口模的形状和尺寸.为了计算聚合物熔体在流动过程中与螺杆及料桶的热交换以及粘性耗散热,需要设定螺杆、料桶及材料的热参数和初始温度.然后设定一熔化点 ($T = T_m$) 的位置.由于加料段处于未充满状态,压力未知,因此需要由口模处所设定的压力开始,逐个元件计算,直至喂料口.采用温度作为判定计算收敛的变量,预先给定一挤出口模温度的预测值,逐个元件求解流场,直至熔化点位置,如果计算得到该点的温度恰好等于熔体熔点,则计算收敛;如果二者不相等,则改变挤出口模温度,重复计算,直至二者相等.其算法如图 1 所示。

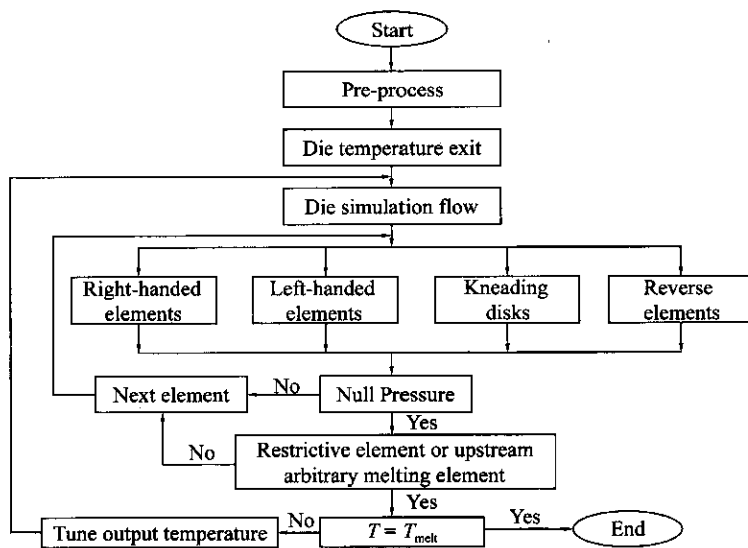


Fig. 1 Global algorithm of computing the flow fields in intermeshing co-rotating twin screw extruders

2 结果与讨论

2.1 RTD 测量

采用以上理论对型号为 TSE-35A 同向旋转自清洁双螺杆挤出机(南京瑞亚高聚物装备有限公司制造)的挤出过程进行模拟,螺杆组合如图 2 所示.实验原料为 BASF 公司生产的通用 PS-158K,计算得到的停留时间分布与在线荧光检测装置测定的 RTD 进行比较^[8,9]。

实验时,将 15 份蒽和 85 份 PS 在间歇混合器中混合并挤出、切粒形成和聚苯乙烯形状接近的

颗粒,设定聚合物的喂料速率为 8 ~ 35 kg/h,螺杆转速 60 ~ 30 r/min,挤出机在饥饿状态下工作,机筒温度设置为 220℃.当挤出机过程达到稳态后,少量的示踪剂(0.1 g)以脉冲形式由喂料口加入.从加入示踪剂开始计时 ($t = 0$),启动荧光在线检测装置,在挤出机口模处以 1 次/s 的频率采集信号.在实验的示踪剂浓度范围内,电压信号与示踪剂浓度可近似作线性比例关系处理,因此归一化的 RTD 函数 $E(t)$ 可根据下式计算:

$$E(t_i) = U(t_i) / \sum_{i=1}^n U(t_i) (t_i - t_{i-1}) \quad (6)$$

											
Length (mm)	88	64	96	22	32	32	64	44	22	64	44
Pitch (mm)	22	32	48	22	32	32	32	22	22	32	22
K5/45L K5/90 K5/45 K4/60 K5/45											
Length (mm)	32	96	22	44	64	22	32	96	32	22	32
Pitch (mm)	32	48	22	22	32	22	32	48	32	22	32
K4/60 K5/45 K4/60 K5/45 K5/45L											
Length (mm)	22	64	44	22	64	220	32	96	32		
Pitch (mm)	22	32	22	22	32	22	32	48	32		
K4/60 K5/45 K4/60 K5/45											

Fig. 2 Screw elements of a TSE-35A twin screw extruder from die to hopper, K5/45 means a block of kneading disk of thickness of 5 mm and staggering angle 45°; L corresponds to left-handed element

式中, $U(t_i)$ 是相应于时间 t_i 时的相对电压值.

2.2 材料物性参数及挤出实验条件

测定加工温度 220℃ 下 PS 的流动曲线, 如图 3 所示, 用来拟和 Carreau-Yasuda 模型中的参数, 零剪切粘度 $\eta_0 = 3093.47 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, 松弛时间 $\lambda = 0.1311 \text{ s}$, 模型参数 $a = 0.703$, 流动指数 $m = 0.367$, 可以看出 Carreau-Yasuda 模型能很好地描述很大剪切速率范围内 ($0.01 \sim 100 \text{ s}^{-1}$) 材料的流动特性.

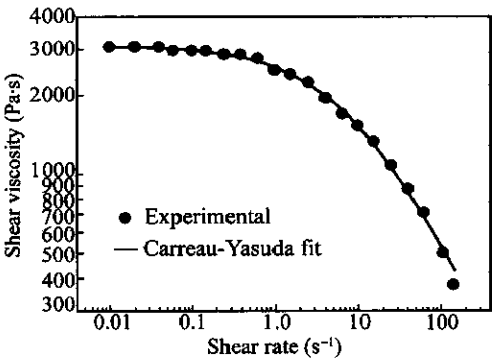


Fig. 3 Flow curve of PS-158 K melt and model fitting of Carreau Yasuda formula

其余材料物性及模型参数如下, 流动活化能 $E = 100 \text{ kJ/mol}$, 固体颗粒热容 $C_{ps} = 2000 \text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$, 固体颗粒密度 $\rho = 1050 \text{ kg/m}^3$, 熔体密度 $\rho_{liq} = 1000 \text{ kg/m}^3$, 固体颗粒给热系数 $h_s = 0.2 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$, PS 熔融热焓 $\Delta H_f = 12 \text{ kJ/kg}$, 熔融模型参数 $\alpha = 1.11, \beta = -0.508$.

PS 双螺杆挤出实验的工艺条件如表 1 所示.

Table 1	Processing conditions of extrusion experiments of PS				
Experimental	No.1	No.2	No.3	No.4	No.5
Feed rate(kg/h)	13.9	13.9	13.9	15.5	10.7
Rotational rate(r/min)	120	90	60	60	60

2.3 RTD 实验值与模拟结果的对比

图 4, 5 分别比较了不同转速及不同喂料速率下实验测定的 RTD 与理论预测值的比较结果. 由图 4 可得, 增大螺杆转速, 材料在螺杆中的停留时间减少, 亦即增大了 PS 的出料速度. 同时发现改变转速, RTD 峰形变化不大, 主要表现在 RTD 峰的位置发生变化. 较小转速 ($N = 60 \text{ r/min}$) 时, 模拟得到 RTD 曲线与实验值相符合. 随着转速的增大, 出现偏差. 例如 $N = 120 \text{ r/min}$ 时, 相对于实验, 计算得到的 RTD 曲线略为下降, 并偏移向长停留时间区域, 估算峰值偏差约为 +11.5%. 究其原因有二, 一是转速增大, 流场剪切作用增强, 极有可能造成螺杆内部局部温度上升, 熔体粘度下降, 输送加快, 从而实验测定的停留时间减小. 但对于这种局部流场参数的变化, 在现有模拟方法中没有体现. 二是模拟计算完全忽略聚合物熔体的弹性, 仅仅采用粘性模型来描述流体的流动状态, 同时缺乏更高剪切速率下材料的粘度数据, 也造成计算略偏离实验值. 这两个因素在研究喂料速率对 RTD 的影响时作用甚微, 故实验与模拟更加吻合,

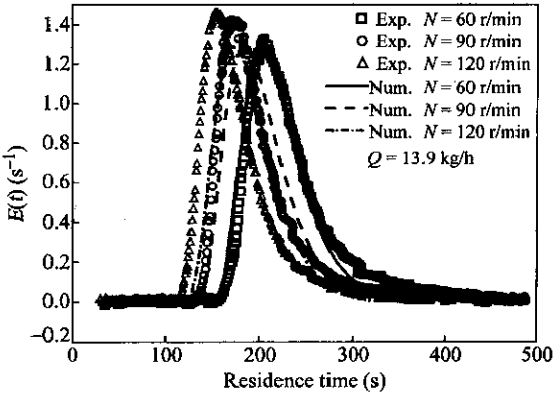


Fig. 4 Comparison between the measured and calculated RTD, influence of rotation speed

如图 5 所示.

图 5 中比较了相同转速、不同喂料速率下实验及模拟得到的 RTD,可以看出在实验的喂料速率范围内,实验值与计算值基本符合,证明了模拟方法的准确性.实验和模拟均显示,增大流量,RTD 峰变得更加尖锐,并向低停留时间区域偏移,这与其他人的实验也相符合^[5,10,11].相对于螺杆转速,喂料速率对 RTD 的影响更大.

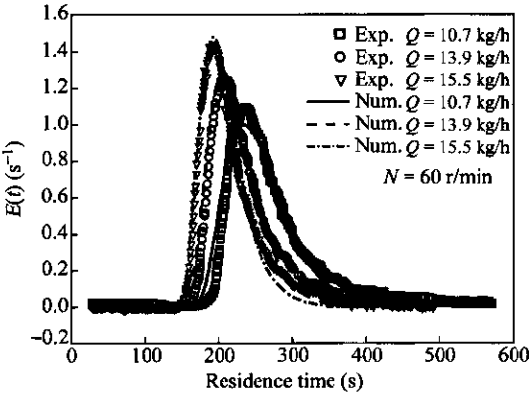


Fig. 5 Comparison between the measured and calculated RTD, influence of feed rate

2.4 对流场参数分布的影响

可以定义平均停留时间

$$t_{\text{mean}} = \int_0^{\infty} tE(t)dt \tag{7}$$

来衡量聚合物材料在双螺杆挤出机中综合停留时间长短.同时,输送最快的示踪剂粒子离开双螺杆的时间即为最小停留时间 t_0 .物料在双螺杆内的停留时间将影响成型产品的内部结构形态及性能,是聚合物反应加工中的最重要影响因素之一^[3, 12~16].图 6,7 分别模拟研究了螺杆转速及喂料速率对最小停留时间 t_0 与平均停留时间 t_{mean} 的影响,并采用合适的数学模型来确定二者的定量关系.从图 6 可知,喂料速率为 13.9 kg/h 时,PS 在双螺杆内的 t_0 及 t_{mean} 随着螺杆转速的增大而呈指数衰减函数形式下降,因而采用如下关系式来描述这一变化趋势:

$$t = t_{\text{eq}} + A\exp(-N/N_e) \tag{8}$$

式中, N 表示螺杆转速, t 表示 t_0 或者 t_{mean} . t_{eq} , A , N_e 为模型参数. t_{eq} 可以视为本征停留时间,亦即无论转速多大,输送挤出所需要的最小时间. N_e 为一控制衰减趋势的参数,与材料的粘度、熔融指数及挤出温度等因素有关,不同材料值不同.拟合结果如下: $t_0 = 106.1 + 125.6\exp(-N/70.5)$

及 $t_{\text{mean}} = 147.5 + 125.8\exp(-N/70.5)$.

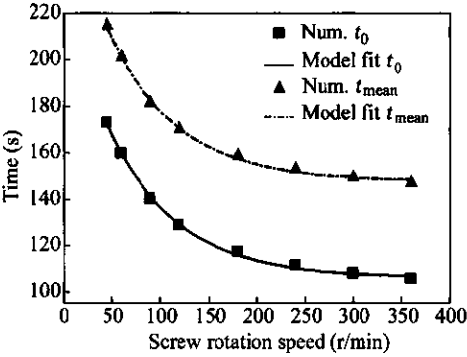


Fig. 6 Influence of the rotation speed of the screw on residence time

喂料速率对停留时间的影响明显区别于螺杆转速的影响.随着喂料速率的增大, t_0 及 t_{mean} 均呈线性下降,如图 7 所示.引入线性函数来确定喂料速率对停留时间的影响情况:

$$t = a + b \cdot Q \tag{9}$$

式中, Q 表示喂料速率; a , b 为待定参数.对于本文中的螺杆及 PS,当转速为 60 r/min,且 $Q < 10$ kg/h 时,拟合结果为 $t_0 = 232.05 - 5.03Q$ 与 $t_{\text{mean}} = 325.17 - 8.58Q$.实验与模拟都证实,固定转速,喂料速率不能无限增加.实际加工时,喂料速率过大容易造成扭矩太大而被迫中止生产,模拟计算则出现不收敛解或者错误解,如图 7 中的 E1 及 E2 点所示,对应的喂料速率为 20 kg/h,其所对应的 RTD 分布峰变形,计算得到的方差远大于其他小喂料速率下的计算值,被认为是错误解.

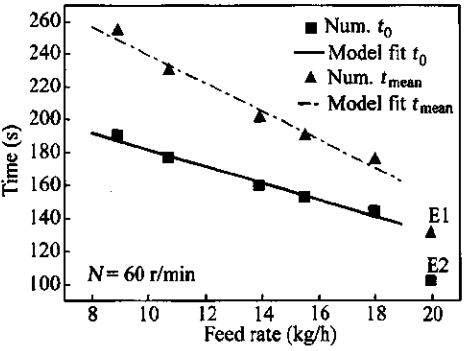


Fig. 7 Influence of the feed rate on residence time of the materials

实际螺杆混合挤出加工过程中,聚合物材料在螺杆内受剪切作用时间越长,混合效果越好,但同时可能会造成材料降解、交联等现象,因此控制合适的转速或喂料速率以及采用最佳螺杆组合是

进行有效挤出生产的保证. 通过以上分析, 给出了 TSE-35A 型螺杆挤出机停留时间与螺杆转速及喂料速率的关系. 实际生产中, 可以在保证材料化学稳定的前提下, 选择合适的螺杆转速或喂料速率, 得到最佳混炼效果.

模拟结果亦预测了粘度、剪切速率、压力、温度及填充率等的分布, 这些流场参数很难在线测量, 因此采用计算机模拟的技术来分析流场, 寻找问题的原因不失为一种先进的方法. 图 8 是喂料速率对双螺杆挤出机内部熔体填充率的影响关系曲线, 可以看出, 随着喂料速率的增大, 充满区域扩大; 小导程螺杆处, 熔体的充满度较大导程元件处大; k_1 , k_2 处装有反向捏合元件, 起到阻挡和加强剪切的作用, 需要在其入口处建立高压, 这时在其上游的某一段轴向长度内物料的充满度为 100%.

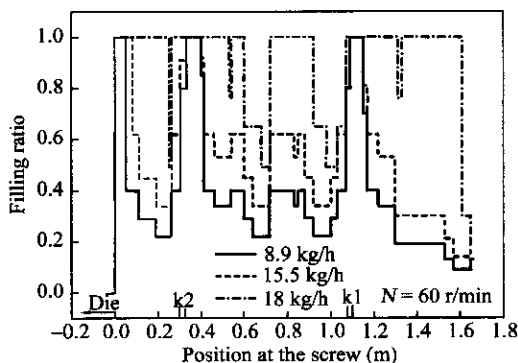


Fig. 8 Influence of feeding rate on filling ratio

温度是聚合物加工过程中最重要的影响因素, 也是出现机器故障、次品等现象的主要原因, 通过模拟了解温度场的变化, 有助于优化工艺. 图 9 中给出了螺杆转速对温度场的影响曲线. 可以看出, 随着螺杆转速的增大, 螺杆元件对熔体的剪切作用增强, 释放粘性耗散热致使温度明显上升. 喂料后, 经过一段固体输送, 大约离喂料口 0.5 m 处固体颗粒开始熔化, 由于熔化发生相变吸热, 温度下降; 但由于料筒温度很高, 迅速传热, 温度又

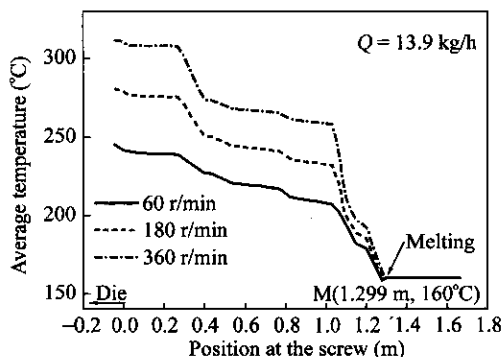


Fig. 9 Influence of the rotational speed of the screw on the average temperature profile along the axis

急剧上升, 因此在熔体开始熔化处存在一个温度变化转折点, 温度稍微下降后迅速回升, 如图 9 中 M 点所示. 曲线中明显存在两段温度骤升区域, 原因是由于这两个区域内存在捏合盘元件, 剪切作用最大, 故造成温度急剧上升.

综上所述, 对 PS 在同向啮合双螺杆挤出机中的挤出过程进行了数值模拟. 模拟研究了螺杆转速及喂料速率对停留时间分布的影响, 预测得到的影响规律与实验测量相符合. 改变流量, RTD 计算值和实验值基本重合. 增大喂料速率, 停留时间减小, 同时 RTD 峰变得更尖锐. 而改变转速, 对 RTD 峰形的改变并不明显; 当螺杆转速较低时, 模拟值很好地符合实验值; 但当螺杆转速较大时, 剪切作用强烈, 可能造成局部高温现象以及高剪切流场中熔体流变性质的偏离模型预测范围, 模拟得到 RTD 曲线略为偏离实验值, 最大停留时间偏差为 +11.5%. 经过与实验值比较, 认为此模拟方法适用于对双螺杆挤出整个过程进行计算机模拟. 同时, 采用平均停留时间来表示物料在螺杆内停留的综合效果, 模拟研究了螺杆转速及喂料速率对最小停留时间及平均停留时间的影响. 同时得到各螺杆内部流场参数的变化情况, 从而可以了解螺杆内部流动情况, 分析加工过程中出现问题的原因, 并优化工艺, 得到最优操作条件.

REFERENCES

- 1 White J L. Twin Screw Extrusion. Technology and Principles. New York: Hanser Publisher, 1990. 196 ~ 253
- 2 Rauwendaal C. Twin Screw Extruders. New York: Hanser Publisher, 1986. 458 ~ 503
- 3 Stevens M J, Covas J A. Extruder Principles and Operation, 2nd ed. London: Chapman & Hall, 1995. 316 ~ 348
- 4 Poulesquen A, Vergnes B. Polym Eng Sci, 2003, 43: 1841 ~ 1848
- 5 Poulesquen A, Vergnes B, Cassagnau P, Michel A. Polym Eng Sci, 2003, 43: 1849 ~ 1862
- 6 Alsteens B, Legat V, Avalosse T. Int Polym Proc, 2004, 19: 207 ~ 217
- 7 Peng J, Chen J N. J Beijing Institute of Tech, 2002, 11: 189 ~ 192
- 8 Hu G H, Kadri I. Polym Eng Sci, 1999, 39: 299 ~ 311
- 9 Hu G H, Kadri I, Picot C. Polym Eng Sci, 1999, 39: 930 ~ 939
- 10 Gao J, Walsh G C, Bigio D, Brider R M, Wetzel M D. Polym Eng Sci, 2000, 40: 227 ~ 237
- 11 Kim P J, White J L. Intern Polym Proc, 1994, 4: 108 ~ 119
- 12 Chen Yun(陈云), Sheng Jing(盛京), Shen Ningxiang(沈宁祥), Jia Hongtao(贾宏涛). Acta Polymerica Sinica(高分子学报), 2004, (2): 282 ~ 287
- 13 Yu Wei(俞炜), Zhou Chixing(周持兴), Li Liqiang(李立强). Comp Appl Chem(计算机与应用化学), 2000, 17: 295 ~ 298
- 14 Zhou C X. Chinese J Polym Sci, 1999, 17: 151 ~ 158
- 15 Zheng H, Yu W, Zhou C X. Chinese J Polym Sci, 2005, 23: 453 ~ 462
- 16 Wang Yilong(王益龙), Zhang Hongjin(张鸿金), Jian Xigao(蹇锡高), Huang Baotong(黄葆同). Acta Polymerica Sinica(高分子学报), 1994, (4): 482 ~ 485

COMPUTER SIMULATION OF EXTRUSION PROCESS OF INTERMESHING CO-ROTATING TWIN SCREW EXTRUDERS

ZHENG Hong, YU Wei, ZHANG Hongbin, ZHOU Chixing

(Department of Polymer Science & Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240)

FENG Lianfang, XU Zhongbin

(State Key Laboratory of Polymer Reaction Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027)

Abstract Numerical simulation of the extrusion process of polystyrene in a intermeshing co-rotating twin screw extruder was carried out to compute the residence time distribution (RTD) of the material particles and other flow field parameters in various processing conditions. The computed RTD was compared with the on-line measurement results, and a fairly good agreement was reached between them. Moreover, based on the numerical results, a definite relationship was determined for the influence of the screw rotation speed and feed rate on the residence time of the polymer melt. Numeric simulation results also predicted the profile of the flow field parameters such as temperature, filling ratio, pressure and viscosity along the axis of the screw under various processing conditions. The computer simulation method helps to investigate the internal flow state and residence time of the polymeric melt in a twin screw extruder and therefore helps to optimize the production.

Key words Twin screw extruder, Polystyrene, Simulation, Residence time distribution, Flow