

边界单元法在聚合物加工研究中的应用

柳和生

(青岛化工学院橡胶新技术研究所 266042)

摘要 将边界单元法引入聚合物加工过程粘性流场的数值计算中,并与其它数值计算方法进行了比较.结果表明边界单元法具有计算量少、计算精度高等优点,便于推广应用.以挤出机排气段熔体输送流场求解为例,说明了边界单元法的实际应用.

关键词 边界单元法,聚合物加工,粘性流场

1 前言

对聚合物加工过程的研究,经常需要对聚合物熔体在各种几何形状的流道内的流动进行数值计算.鉴于聚合物熔体流变特性和流道形状的复杂性,数值计算将是一件非常艰巨的工作.如何选择经济、方便且又可靠的数值计算方法,一直是研究人员苦心求索的问题.边界单元法是近几十年来才发展起来的新型数值计算方法,且已在其它研究领域得到了充分的应用.边界单元法对求解区域的边界作了独特的数学处理,因而具有计算速度快、精度高等优点^[1].本文作者认为:有必要将边界单元法引入聚合物加工研究中,为聚合物熔体流场的数值计算再添一种新的研究手段.

式中 u 为待求解的未知量, Ω 为求解区域, Γ_u 和 Γ_q 分别为函数值已知和函数法向导数值已知的边界.设 $\Gamma = \Gamma_u + \Gamma_q$ 为整个求解区域的边界,如图1,2所示.图中 P, Q 表示区域内点, P', Q' 表示边界上的点.

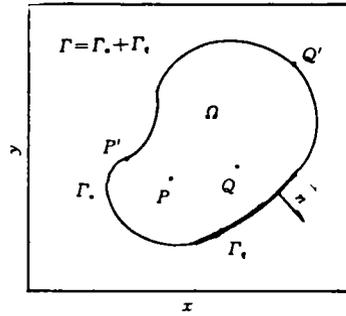


图1 区域及边界

2 边界单元法简述

聚合物加工过程中的粘性流场,在许多情况下可以用泊松方程或拉普拉斯方程来描述.为不失普遍性,本文以泊松方程为例,简述边界单元法在求解这类方程时的应用.

考虑二维泊松方程的第三类边值问题,其控制方程及边界条件如下:

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 u &= b && \text{区域 } \Omega \text{ 内} \\ u &= \bar{u} && \text{边界 } \Gamma_u \text{ 上} \\ q &= \frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q} && \text{边界 } \Gamma_q \text{ 上} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

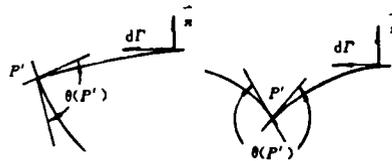


图2 边界上的拐点

方程(1)的基本解 $u^*(P, Q)$ (为两点函数)应满足:

$$\nabla^2 u^*(P, Q) + \delta(P - Q) = 0 \quad (2)$$

其中 $\delta(P - Q)$ 为狄拉克函数.经求解可得:

$$u^*(P, Q) = 2\pi \ln \frac{1}{r(P, Q)} \quad (3)$$

式中 $r(P, Q)$ 为区域内两点 P, Q 之间的距离。根据高斯定理, 可得如下格林公式:

$$\int_{\Omega} (v \nabla^2 u - u \nabla^2 v) d\Omega = \int_{\Gamma} (v \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial v}{\partial n}) d\Gamma \quad (4)$$

令 $v = u^*(P, Q)$, 代入上式后有:

$$\int_{\Omega} [u^*(P, Q) \nabla^2 u(Q) - u(Q) \nabla^2 u^*(P, Q)] d\Omega(Q) = \int_{\Gamma} [u^*(P, Q') q(Q') - u(Q') q^*(P, Q')] d\Gamma(Q') \quad (5)$$

上式左边是关于区域内点 Q 的积分, 右边是关于边界上点 Q' 的积分。式中 q^* 定义为:

$$q^*(P, Q') = \frac{\partial u^*(P, Q')}{\partial n(Q')} \quad (6)$$

将式(1)和(3)代入式(5), 经推导可得积分方程:

$$u(P) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} [\ln \frac{1}{r(P, Q')} \frac{\partial u(Q')}{\partial n(Q')} - u(Q') \frac{\partial}{\partial n(Q')} \ln \frac{1}{r(P, Q')}] d\Gamma(Q') - \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega} \ln \frac{1}{r(P, Q)} b(Q) d\Omega(Q) \quad (7)$$

上式适用于区域内任意一点。为求边界上的未知函数值和法向导数值, 需将 P 点从区域 Ω 内移至边界 Γ 上(用 P' 表示)。当 P' 点与边界上另一点 Q' 重合时, $r(P', Q') = 0$, 基本解产生奇异性, 积分时可用极限逼近法将奇异性消除。经推导可得边界积分方程:

$$u(P') = \frac{1}{\theta(P')} \int_{\Gamma} [\ln \frac{1}{r(P', Q')} \frac{\partial u(Q')}{\partial n(Q')} - u(Q') \frac{\partial}{\partial n(Q')} \ln \frac{1}{r(P', Q')}] d\Gamma(Q') - \frac{1}{\theta(P')} \int_{\Omega} \ln \frac{1}{r(P', Q)} b(Q) d\Omega(Q) \quad (8)$$

式中 $\theta(P')$ 表示非光滑边界上拐点处的拐角(如图2所示)。对于光滑边界有:

$$\theta(P') = \pi$$

在多数情况下, 不可能用解析法求解积分方程(7)和(8), 必须采用数值解析法。边界单元法将边界 Γ 分割成 n 个边界单元, 每个单元上设若干节点, 用作 u 和 q 的插值点。为叙述方便, 本文采用常单元离散边界(采用其它类型的单元时, 分析过程与下述步骤类似), 节点取在单元中点。为保证计算精度, 此时边界单元划分应比采用其它类型单元时更为细密。

如图3所示, 边界 Γ 被离散成 n 个边界单元 $\Gamma_j (j=1, 2, \dots, n)$ 。其中 n_1 个边界单元属函数值 u 已知的边界 $\Gamma_u, n_2 = n - n_1$ 个单元属于法向导数值 q 已知的边界 Γ_q 。对于节点 P'_i , 边界积分方程(8)可离散为:

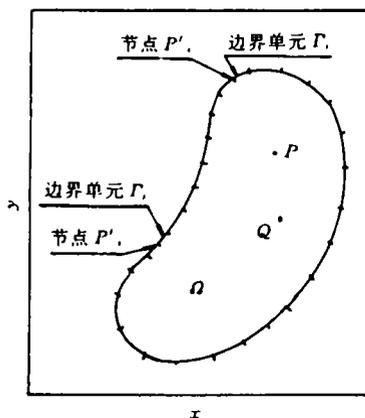


图3 区域及边界的离散

$$\frac{1}{2} u(P'_i) + \sum_{j=1}^n u_j \int_{\Gamma_j} q^*(P'_i, Q') d\Gamma(Q') + \int_{\Omega} u(P'_i, Q) b(Q) d\Omega(Q) = \sum_{j=1}^n q_j \int_{\Gamma_j} u^*(P'_i, Q) d\Gamma(Q') \quad (9)$$

若令:

$$B_i = \int_{\Omega} u^*(P'_i, Q) b(Q) d\Omega(Q) \quad (10a)$$

$$H_{ij} = \frac{1}{2} \delta_{ij} + \int_{\Gamma_j} q^*(P'_i, Q') d\Gamma(Q') \quad (10b)$$

$$G_{ij} = \int_{\Gamma_j} u^*(P'_i, Q') d\Gamma(Q') \quad (10c)$$

则式(9)可改写为

$$B_i + \sum_{j=1}^n u_j H_{ij} = \sum_{j=1}^n q_j G_{ij} \quad (11)$$

以上各式中 Q' 为边界上任意点, P'_i 为边界单元 Γ_i 上的节点, B_i, H_{ij}, G_{ij} 均可由一维或二维高斯积分求出。对于 n 个单元和 n 个节点, 可有下列方程组:

$$\{B\} + [H]\{U\} = [G]\{Q\} \quad (12)$$

式中 $\{B\} = (B_1, B_2, \dots, B_n)^T \quad (13)$

$$\{U\} = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T \quad (14)$$

$$\{Q\} = (q_1, q_2, \dots, q_n)^T \quad (15)$$

$$[H] = \begin{bmatrix} H_{11}, H_{12}, \dots, H_{1n} \\ H_{21}, H_{22}, \dots, H_{2n} \\ \vdots \quad \vdots \quad \dots \quad \vdots \\ H_{n1}, H_{n2}, \dots, H_{nn} \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$[G] = \begin{bmatrix} G_{11}, G_{12}, \dots, G_{1n} \\ G_{21}, G_{22}, \dots, G_{2n} \\ \vdots \quad \vdots \quad \dots \quad \vdots \\ G_{n1}, G_{n2}, \dots, G_{nn} \end{bmatrix} \quad (17)$$

由于在有的节点上函数值 u 已知, 在另一些节点上法向导数值 q 已知, 因此在式(12)左右两边都既有已知量又有待求的未知

量。将已知量移至右边, 未知量移至左边, 则可解所得到的线性代数方程组, 求出边界单元上各节点处的未知函数值 u 和未知法向导数值 q 。此后, 通过方程(18)[为积分方程(7)的离散化形式]可求得区域 Ω 内任意点 P 处的函数值 $u(P)$ 。

$$u(P) = \sum_{j=1}^n (q_j G_{ij} - u_j H_{ij}) - \int_{\Omega} u^*(P, Q) b(Q) d\Omega(Q) \quad (18)$$

式中 q_j, u_j 为边界单元 Γ_j 上节点 P'_j 处的法向导数值及函数值, G_{ij} 和 H_{ij} 仍按式(10)计算, 但此时边界点 P'_j 应换成区域内点 P 。

值得一提的是, 虽然以上推导过程都是针对二维问题进行的, 但均可以推广至三维情况。只需将面积分换成体积分, 线积分换成面积分即可。

考察以上的数学推导过程, 不难发现^[2]:

(1) 边界单元法只需将区域的边界离散成边界单元, 即可使所考虑的问题降低一维。

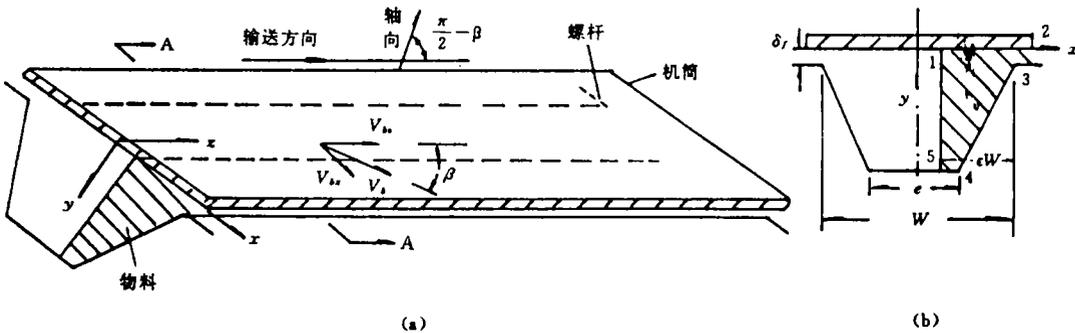


图4 螺杆挤出机排气段熔体输送模型

(2) 边界单元法与整个求解区域进行离散的区域型解法(如差分法、有限元法)相比, 具有输入数据少、计算时间短等优点, 便于在微机实施运算。

(3) 边界单元法只对边界离散, 离散化误差只来自边界, 区域内的有关物理量可由解

析式的离散形式直接求得, 因而提高了计算精确度。

(4) 边界单元法在求解时, 要改变所需计算的内点数量及位置也十分方便, 只需求出边界值。对于区域内的物理量可不必计算, 因此大大提高了计算效率。

3 应用举例

图4所示为螺杆挤出机排气段熔体输送的物理模型。图中 V_b 为机筒相对于螺杆的运动速度, V_{bz} 和 V_{bx} 为它在 z 及 x 方向上的分量, β 为螺旋角, W 、 e 分别为螺槽顶部和底部的法向宽度, ϵ 称为充满系数, 它可以反映熔融物料在螺槽中的充满程度, δ_f 称为螺棱间隙。

在排气段, 熔融物料在沿螺槽方向, 即 z 方向的流动为纯拖曳流^[3], 因此有:

$$0 = \frac{\partial P}{\partial z} = \eta \frac{\partial^2 V_z}{\partial x^2} + \eta \frac{\partial^2 V_z}{\partial y^2} \quad (19)$$

边界条件为[参见图4(b)中的阴影部分]:

$$\left. \begin{aligned} & \text{在边界1-2上: } V_z = V_{bz} \\ & \text{在边界2-3上: } V_z = V_{bz} \left(1 - \frac{y}{\delta_f}\right) \\ & \text{在边界3-4-5上: } V_z = 0 \\ & \text{在边界5-1上: } \frac{\partial V_z}{\partial n} = -\frac{\partial V_z}{\partial x} = 0 \end{aligned} \right\} (20)$$

因此, 边界1-2-3-4-5属函数已知的边界 Γ_u , 边界5-1属函数法向导数值 q 已知的边界 Γ_q 。

用边界单元法求解方程(19)可得沿螺槽方向速度 V_z 的分布, 将其在整个被物料充满的面积[即图4(b)中的阴影部分]上积分可得每条螺槽内的 z 向流率, 该流率乘以螺头数可得挤出机的挤出体积流率。反过来, 在一定的挤出流率时, 亦可用迭代法求得在不同工艺条件或螺杆结构参数时的充满系数 ϵ 。充满系数 ϵ 的大小直接影响排气段的工作性能, 是一个非常重要的特性参数。

图5~7中所示的为计算所得的充满系数 ϵ 与螺杆转速 N (r/min)、螺旋角 β 及螺棱间隙 δ_f 之间的关系曲线。

必须指出的是, 考虑到在排气段以输送、排气作用为主, 剪切混合作用相对来说不甚强烈, 因此在计算时曾视熔体粘度为常数, 这样处理虽然和实际情况有一定出入, 也会给计算带来一定的误差, 但作为一个应用边界

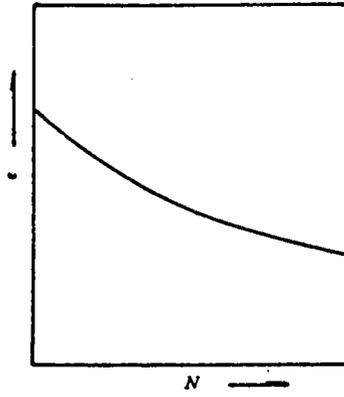


图5 $\epsilon \sim N$ 的关系曲线

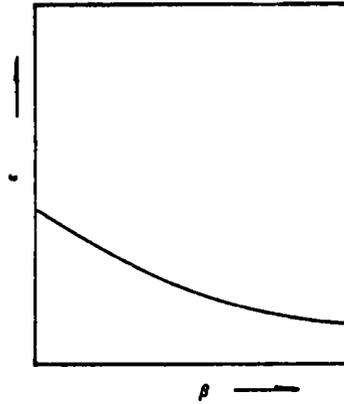


图6 $\epsilon \sim \beta$ 的关系曲线

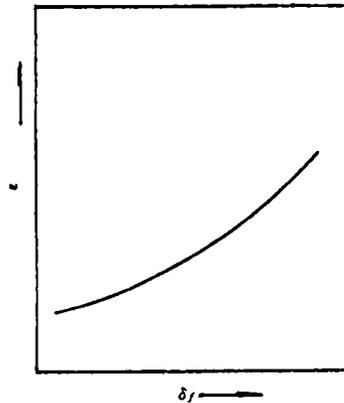


图7 $\epsilon \sim \delta_f$ 的关系曲线

单元法的算例, 其方法仍具有借鉴作用。如果计入粘度随剪切速率的变化, 由此而产生的非线性须由松弛迭代法加以处理^[4]。

4 结束语

由边界单元法的数学推导过程可知,边界单元法的核心是求出基本解后,根据积分定理将区域内的微分方程变换为边界上的积分方程,然后将其离散成代数方程求解边界上的未知量。

因此,从理论上讲,只要能求出原始微分方程的基本解,就可以用边界单元法进行求解。但对于那些难于求出基本解的微分方程,边界单元法就显得束手无策了。

值得庆幸的是,在聚合物加工研究中所遇到的微分方程,在大多数情况下类似于可以求得基本解的泊松方程或拉普拉斯方程,这就为应用边界单元法创造了条件。作者在

研究同向旋转双螺杆挤出机的熔体输送机理时,利用边界单元法求解速度场和温度场就是一个成功的例证^[4]。

参考文献

- [1] 王元淳,边界单元法基础,6,上海交通大学出版社,上海,1988。
- [2] 柳和生,挤出理论及其工程应用,39,浙江大学博士后研究人员出站科研报告,1992.12。
- [3] 朱复华,螺杆设计及其理论基础,221,轻工业出版社,北京,1984。
- [4] 柳和生,双螺杆挤出机中非牛顿粘性流场计算及其挤出行为研究,上海交通大学博士学位论文,1990.12。

收稿日期 1993-05-13

Application of Boundary Element Method in Analysis of Polymer Processing

Liu Hesheng

(Qingdao Institute of Chemical Technology, Shandong)

Abstract In this paper, the boundary element method (BEM) is introduced into the numerical calculation of the viscous flow of polymer melt in polymer processing, and is compared with some other numerical methods. BEM makes the calculation easier and yields more accurate results, and readily finds use in more fields. Also the calculation is given of the melt conveying flow in the venting section of a single screw extruder to exemplify the practical application of BEM.

Keywords boundary element method; polymer processing; viscous flow field.