

POLYFLOW基础

及其在

塑料加工中的应用

钱欣 许王定 金杨福 编著

轻松
上手

本书采用软件基本操作与典型范例相结合的讲解方式
结构清晰◎内容全面◎图文并茂◎通俗易懂

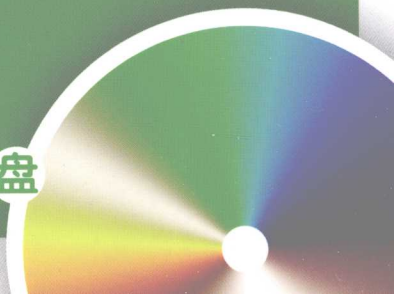
- 介绍了POLYFLOW软件的理论基础和各模块的功能及操作，内容涵盖几何模型建立、模型网格划分、模型边界及参数设置、分析计算、后处理分析及结果输出等
- 通过典型实例介绍POLYFLOW软件在挤出成型、中空吹塑成型和聚合物混合等方面的应用
- 光盘包含范例的操作视频和范例模型文件

66-39



化学工业出版社

附光盘



POLYFLOW基础

及其在塑料加工中的应用



钱欣 许王定 金杨福 编著

TQ320.66-39

Q255



化学工业出版社

· 北京 ·

POLYFLOW 软件是目前应用最广泛的黏弹性材料流动分析的 CAE 软件, 本书以 POLYFLOW 3.10 为版本, 内容共分为 10 章, 1~7 章分别介绍了 POLYFLOW 软件的理论基础和各模块的功能及操作, 内容涵盖几何模型建立、模型网格划分、模型边界及参数设置、分析计算、后处理分析及结果输出等; 8~10 章通过一些典型的实例介绍 POLYFLOW 软件在挤出成型、中空吹塑成型和聚合物共混等方面的应用。

本书采用软件基本操作与典型范例相结合的讲解方式, 结构清晰, 内容全面, 图文并茂, 通俗易懂, 可以使读者轻松上手, 并配有一张光盘, 包含范例的操作视频和范例模型文件。

本书可作为 POLYFLOW 软件初学者的自学教材和参考书, 还可作为大专院校高分子材料和模具专业师生的课程教材及相关培训教材。

图书在版编目(CIP)数据

POLYFLOW 基础及其在塑料加工中的应用/钱欣, 许王
定, 金杨福编著. —北京: 化学工业出版社, 2009.12
ISBN 978-7-122-06838-5

I. P… II. ①钱… ②许… ③金… III. 塑料-生
产工艺-应用软件, Ployflow IV. TQ320.66-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 185880 号

责任编辑: 仇志刚 李 胤

文字编辑: 颜克俭

责任校对: 王素芹

装帧设计: 关 飞

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张 20% 字数 526 千字 2010 年 1 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 59.00 元 (含 1CD)

版权所有 违者必究

前 言

目前,我国在塑料制品设计、模具设计和成型工艺控制等新产品开发环节还主要依靠设计者的经验,但由于高分子流体黏弹性而产生流动行为的特殊性,导致设计存在缺陷,经常出现不能获得合格产品而反复试模和修模的状况。CAE (Computer Aid Engineering) 技术是在计算机上运用专业软件对产品的生产过程进行模拟分析,以此来代替试制和试验,提高一次试模的成功率。利用 CAE 技术可以在设计阶段对制品设计和模具设计的方案进行评价,预测制品可能产生的缺陷,修改设计,从而获得最优化的方案。本书中我们介绍的 POLYFLOW 软件就是一种目前应用最广泛的黏弹性材料流动分析的 CAE 软件。

POLYFLOW 软件是由比利时 Louvain 大学于 1982 年研发成功的,是采用有限元法的计算机流体力学 (CFD) 软件,具有强大的解决非牛顿、非线性问题的能力,专用于黏弹性材料的流动模拟。它主要适用于高分子材料的挤出成型、吹塑成型、挤出纺丝、层流混合过程中的流动及传热和化学反应问题。多年来, POLYFLOW 在模拟黏弹性流动方面始终领先于其他软件。

POLYFLOW 软件作为高分子流动过程模拟领先的软件在国外拥有大批的用户,近年来 POLYFLOW 软件在国内的许多科研单位 and 生产企业开始应用,但目前国内介绍 POLYFLOW 软件的中文教程很少,内容也不系统。为此,我们编写此书,为对 POLYFLOW 软件学习感兴趣的读者提供参考。

本书以 POLYFLOW 3.10 为版本,内容分为两部分:1~7 章分别介绍了 POLYFLOW 软件的理论基础、各模块的功能、基本菜单及基本操作,内容涵盖几何模型建立、模型网格划分、模型边界及参数设置、分析计算、后处理分析及结果输出等;8~10 章结合我们的研究工作,通过一些典型的实例介绍 POLYFLOW 软件在挤出成型、中空吹塑成型和聚合物共混等方面的应用。

POLYFLOW 是一种多级菜单结构的软件,为方便读者的学习,本书对每个英文菜单和命令进行了中文注释,并配有一张光盘,包含范例的实际操作视频和范例模型文件,可以引导读者按照书中的过程进行练习操作,使读者轻松学习。

由于本书的写作较为匆忙,加之我们对软件的理解有限,书中难免存在不足,热忱希望读者提出宝贵意见,帮助我们不断完善。

编者

2009 年 7 月于杭州

目 录

第 1 章 POLYFLOW 理论基础..... 1

1.1 计算流体力学分析理论基础..... 1

1.1.1 概述..... 1

1.1.2 计算流体力学的工作步骤..... 2

1.1.3 计算流体力学的特点..... 2

1.1.4 计算流体力学的应用领域..... 2

1.1.5 计算流体力学的数值解法..... 3

1.2 流体力学中流体与流动的基本特性..... 4

1.2.1 理想流体与黏性流体..... 4

1.2.2 牛顿流体与非牛顿流体..... 4

1.2.3 流体热传导及扩散..... 5

1.2.4 可压缩流体与不可压缩流体..... 5

1.2.5 稳定流动与非稳定流动..... 5

1.2.6 层流与湍流..... 6

1.2.7 聚合物流变行为..... 6

1.3 流体力学控制方程..... 7

1.3.1 质量守恒方程..... 8

1.3.2 动量守恒方程..... 8

1.3.3 能量守恒方程..... 10

1.3.4 组分质量守恒方程..... 11

1.3.5 控制方程的通用形式..... 11

1.3.6 对控制方程的进一步讨论..... 12

1.4 CFD 的求解过程..... 13

1.4.1 总体计算流程..... 13

1.4.2 建立控制方程..... 13

1.4.3 确定边界条件与初始条件..... 14

1.4.4 划分计算网格..... 14

1.4.5 建立离散方程..... 14

1.4.6 离散初始条件和边界条件..... 15

1.4.7 给定求解控制参数..... 15

1.4.8 求解离散方程..... 15

1.4.9 判断解的收敛性..... 15

1.4.10 显示和输出计算结果..... 15

1.5 CFD 软件结构以及常用的 CFD

商业软件..... 16

1.5.1 软件结构..... 16

1.5.2 常用的 CFD 商用软件..... 17

第 2 章 POLYFLOW 软件及分析流程..... 20

2.1 软件介绍..... 20

2.1.1 POLYFLOW 简介..... 20

2.1.2 POLYFLOW 软件结构..... 20

2.1.3 POLYFLOW 的一些基本概念..... 21

2.1.4 POLYFLOW 分析概要..... 25

2.2 POLYFLOW 分析流程..... 27

2.2.1 问题描述..... 27

2.2.2 POLYMAN 中新建项目、启动 POLYDATA 和输入网格文件..... 28

2.2.3 POLYDATA 参数设置..... 31

2.2.4 POLYFLOW 计算求解..... 40

2.2.5 结果文件的后处理..... 42

第 3 章 主控程序 POLYMAN..... 53

3.1 POLYMAN 用户界面..... 53

3.1.1 菜单栏..... 54

3.1.2 工具栏..... 54

3.1.3 树状区..... 55

3.1.4 信息区..... 55

3.1.5 注释区..... 55

3.1.6 Tab (标签) 栏..... 56

3.2 创建新的工程项目、新的模拟和几何..... 56

3.2.1 创建新的项目..... 56

3.2.2 创建新的 GAMBIT 文件..... 56

3.2.3 创建新的模拟..... 57

3.3 打开已有项目..... 57

3.4 导入文件..... 57

3.4.1 导入 GAMBIT 文件..... 57

3.4.2 导入模拟文件..... 58

3.4.3 导入网格文件..... 58

3.4.4 导入材料参数文件..... 58

3.4.5 导入数据文件..... 58

3.4.6 导入结果文件	58	4.2.1 一般操作	74
3.4.7 导入 UDF 文件	58	4.2.2 创建顶点	79
3.4.8 导入 CSV 文件	58	4.2.3 创建边	82
3.4.9 导入 Ideas 文件	58	4.2.4 创建面	88
3.4.10 导入 Patran 文件	59	4.2.5 创建体积	92
3.5 导出文件	59	4.2.6 布尔操作	94
3.6 复制和删除文件	59	4.2.7 分割/融合操作	96
3.7 启动 POLYFLOW 软件的各模块	59	4.3 模型的网格划分	99
3.7.1 启动 GAMBIT	60	4.3.1 生成边界层	99
3.7.2 启动 POLYDATA	60	4.3.2 边网格划分	100
3.7.3 启动 POLYFLOW	60	4.3.3 面网格划分	101
3.7.4 启动 FLUENT/Post	60	4.3.4 体网格划分	101
3.7.5 启动 FIELDVIEW	60	4.3.5 组网格划分	102
3.7.6 启动 POLYFUSE	61	4.4 设定区域类型	103
3.7.7 启动 POLYSTAT	61	4.4.1 设定边界类型	103
3.7.8 启动 POLYMAT	61	4.4.2 指定连续介质类型	104
3.7.9 启动 POLYDIAG	61	4.5 实例一: 基本几何结构的 创建和网格化	104
3.8 设置模块选项	61	4.5.1 问题描述	105
3.8.1 POLYDATA 选项	61	4.5.2 操作步骤	105
3.8.2 POLYFLOW 选项	62	4.6 实例二: 三管相贯模型的建立	110
3.8.3 FIELDVIEW 选项	63	4.6.1 问题描述	110
3.9 转换 GAMBIT 中性文件	63	4.6.2 操作步骤	111
3.10 查看列表文件	64		
3.11 获得项目信息和模拟信息	64	第 5 章 主程序模块 POLYDATA	126
3.11.1 获得项目信息	64	5.1 POLYDATA 图形用户界面	126
3.11.2 获得模拟信息	64	5.1.1 主菜单栏	127
3.12 安排模拟项目	64	5.1.2 关键字栏	128
3.13 帮助	67	5.1.3 文本窗口	128
3.14 退出 POLYMAN	67	5.1.4 图形显示窗口	128
		5.1.5 文本输出窗口	128
第 4 章 前处理模块 GAMBIT	68	5.1.6 POLYDATA 主菜单窗口	129
4.1 GAMBIT 的图形用户界面	69	5.2 POLYDATA 中的渐近问题	143
4.1.1 绘图窗口	69	5.2.1 非线性和渐近	143
4.1.2 主菜单条	69	5.2.2 渐近法简介	144
4.1.3 Operation 工具栏	70	5.2.3 POLYDATA 中的渐近函数	145
4.1.4 窗口区域	72	5.2.4 使用渐近法	146
4.1.5 Global Control 工具条	72	5.3 POLYDATA 中的瞬态问题	150
4.1.6 Description 窗口	72	5.3.1 瞬态理论	150
4.1.7 Transcript 窗口和 Command 文本框	73	5.3.2 瞬态流动分析流程	152
4.2 生成几何结构	73		

第6章 图形后处理模块

FLUENT/Post	156
6.1 FLUENT/Post 用户界面	156
6.2 文件操作	157
6.2.1 读取文件	157
6.2.2 导入文件	158
6.2.3 保存文件	158
6.2.4 图像文件硬复制	158
6.3 系统定义	159
6.3.1 定义活动域	159
6.3.2 定义场函数	160
6.3.3 定义单位	161
6.4 创建表面	162
6.4.1 创建区域表面	162
6.4.2 创建点表面	163
6.4.3 创建线表面和靶表面	164
6.4.4 创建平面表面	165
6.4.5 创建二次表面	166
6.4.6 创建等值面	167
6.4.7 创建等值剪切表面	168
6.4.8 转换表面	168
6.4.9 管理表面	169
6.5 图形可视化	170
6.5.1 基本图形生成	170
6.5.2 自定义图形显示方式	178
6.5.3 XY 曲线图和柱状图	184
6.6 数字计算报告	187
6.6.1 表面积分	187
6.6.2 柱状图报告	189

第7章 统计后处理模块 POLYSTAT

7.1 聚合物加工过程中的混合原理	191
7.1.1 混合机理	191
7.1.2 混合的分类	191
7.2 POLYDATA 中的混合任务	192
7.2.1 输入网格文件创建混合任务	192
7.2.2 定义流体区域	193
7.2.3 定义边界条件	194
7.2.4 定义速度场	195
7.2.5 定义材料点生成	197

7.2.6 设置轨迹参数	198
7.2.7 设置运动学参数	199
7.2.8 选择生成结果	200
7.2.9 设置文件储存	201
7.2.10 定义运动部件	201
7.2.11 保存混合结果文件, 退出 POLYDATA	202
7.3 POLYSTAT 中的混合任务	202
7.3.1 FILE 菜单	202
7.3.2 PROPERTIES 菜单	208
7.3.3 TRAJECTORIES 菜单	211
7.3.4 SLICES 菜单	214
7.3.5 STATISTICS 菜单	216

第8章 POLYFLOW 在塑料挤出成型中的应用

8.1 2.5D 轴对称挤出	219
8.1.1 模型描述	219
8.1.2 主要操作步骤	220
8.2 3D 挤出成型	235
8.2.1 模型描述	236
8.2.2 操作步骤	237
8.3 3D 逆向挤出	247
8.3.1 模型描述	247
8.3.2 操作步骤	247
8.4 黏弹流体的挤出胀大流动	252
8.4.1 模型描述	252
8.4.2 操作步骤	252
8.5 黏弹性流体的流动分析	257
8.5.1 模型描述	257
8.5.2 操作步骤	257
8.6 共挤	262
8.6.1 模型描述	262
8.6.2 操作步骤	262

第9章 POLYFLOW 在吹塑成型中的应用

9.1 2D 等温吹塑成型的厚度分布分析	269
9.1.1 模型描述	269
9.1.2 操作步骤	270
9.2 3D 吹塑成型	279

9.2.1 模型描述	279
9.2.2 操作步骤	280

第 10 章 POLYFLOW 在聚合物共混 过程中的应用

10.1 2D 混合任务描述	286
10.1.1 模型描述	286
10.1.2 有限元任务模拟计算	286
10.1.3 混合任务模拟计算	295
10.2 聚合物熔体在双螺杆挤出机的 三维数值模拟分析	305
10.2.1 模型描述	305

10.2.2 计算步骤	305
10.3 HAAKE 混合器中聚合物共混物的 分布混合和分散混合分析	310
10.3.1 模型描述	310
10.3.2 材料物性参数与边界条件	312
10.3.3 混合 1s 的模型计算	312
10.3.4 混合 30s 的模型计算	318
10.3.5 混合 600s 的模型计算	319
10.3.6 整合 10.3.3~10.3.5 的浓度场 计算结果	319

参考文献	321
------------	-----

第 1 章 POLYFLOW 理论基础

本章介绍了 POLYFLOW 软件分析的理论基础——计算流体动力学 (CFD)，其中包括 CFD 概述、流体流动特性、流动控制方程、CFD 求解过程以及 CFD 软件结构和常用商业软件。通过本章的学习，可以为读者深入了解 POLYFLOW 和综合应用软件奠定基础。

1.1 计算流体动力学分析理论基础

1.1.1 概述

计算流体动力学 (Computational Fluid Dynamics, 简称 CFD)，是通过计算机数值计算和图像显示，对包含有流体流动和热传导等相关物理现象的系统所做的分析。CFD 的基本思想可以归结为：把原来在时间域及空间域上连续的物理量的场，如速度场和压力场，用一系列有限个离散点上的变量值的集合来代替，通过一定的原则和方式建立起关于这些离散点上场变量之间关系的代数方程组，然后求解代数方程组获得场变量的近似值。

CFD 可以看作是在流动基本方程 (质量守恒方程、动量守恒方程、能量守恒方程) 控制下对流动的数值模拟。通过这种数值模拟，我们可以得到极其复杂问题的流场内各个位置上的基本物理量 (如速度、压力、温度、浓度等) 的分布，以及这些物理量随时间的变化情况，确定旋涡分布特性、空化特性及脱流区等。还可据此算出相关的其他物理量，如旋转式流体机械的转矩、水力损失和效率等。此外，与 CAD 联合，还可进行结构优化设计等。

CFD 方法与传统的理论分析方法、实验测量方法组成了研究流体流动问题的完整体系，图 1-1 给出了表征三者之间关系的“三维”流体力学示意。

理论分析方法的优点在于所得结果具有普遍性，各种影响因素清晰可见，是指导实验研究和验证新的数值计算方法的理论基础。但是，它往往要求对计算对象进行抽象和简化，才有可能得出理论解。对于非线性情况，只有少数流动才能给出解析结果。

实验测量方法所得到的实验结果真实可信，它是理论分析和数值方法的基础，其重要性不容低估。然而，实验往往受到模型尺寸、流场扰动、人身安全和测量精度的限制，有时可能很难通过试验方法得到结果。此外，实验还会遇到经费投入、人力和物力的巨大耗费及周期长等许多困难。

而 CFD 方法恰好克服了前面两种方法的弱点，在计算机上实现一个特定的计算，就好像在计算机上做一次物理实验。例如，机翼的绕流，通过计算并将其结果在屏幕上显示，就可以看到流场的各种细节，如激波的运动、强度，旋涡的生成与传播，流动的分离，表面的压力分布、受力大小及其随时间的变化等。数值模拟可以形象地再现流动情景，与做实验没有什么区别。

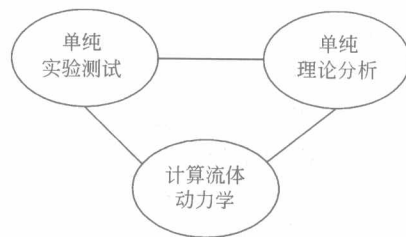


图 1-1 “三维”流体力学示意

1.1.2 计算流体力学的工作步骤

采用 CFD 的方法对流体流动进行数值模拟，通常包括以下步骤。

(1) 建立反映工程问题或物理问题本质的数学模型 具体地说就是要建立反映问题各个量之间关系的微分方程及相应的定解条件，这是数值模拟的出发点。没有正确完善的数学模型，数值模拟就毫无意义。流体的基本控制方程通常包括质量守恒方程、动量守恒方程、能量守恒方程以及这些方程相应的定解条件。

(2) 寻求高效率、高准确度的计算方法 即建立针对控制方程的数值离散化方法，如有限差分法、有限元法、有限体积法等。这里的计算方法不仅包括微分方程的离散化方法及求解方法，还包括随体坐标的建立、边界条件的处理等。这些内容，可以说是 CFD 的核心。

(3) 编制程序和进行计算 这部分工作包括计算网格划分、初始条件和边界条件的输入、控制参数的设定等。这是整个工作中花时间最多的部分。由于求解的问题比较复杂，比如 Navier-Stokes 方程就是一个十分复杂的非线性方程，数值求解方法在理论上不是绝对完善的，所以需要通过实验加以验证。正是从这个意义上讲，数值模拟又叫数值试验。应该指出，这部分工作不是轻而易举就可以完成的。

(4) 显示计算结果 计算结果一般通过图表等方式显示，这对检查和判断分析质量和结果有重要参考意义。

以上这些步骤构成了 CFD 数值模拟的全过程。其中数学模型的建立是理论研究的课题，一般由理论工作者完成。

1.1.3 计算流体力学的特点

CFD 的长处是适应性强、应用面广。首先，流动问题的控制方程一般是非线性的，自变量多，计算域的几何形状和边界条件复杂，很难求得解析解，而用 CFD 方法则有可能找出满足工程需要的数值解。其次，可利用计算机进行各种数值试验，例如，选择不同流动参数进行物理方程中各项有效性和敏感性试验，从而进行方案比较。最后，它不受物理模型和实验模型的限制，省钱省时，有较多的灵活性，能给出详细和完整的资料，很容易模拟特殊尺寸、高温、有毒、易燃等真实条件和实验中只能接近而无法达到的理想条件。

CFD 也存在一定的局限性。第一，数值解法是一种离散近似的计算方法，依赖于物理上合理、数学上适用、适合于在计算机上进行计算的离散的有限数学模型，且最终结果不能提供任何形式的解析表达式，只是有限个离散点上的数值解，并有一定的计算误差。第二，它不像物理模型实验一开始就能给出流动现象并定性地描述，往往需要由原体观测或物理模型试验提供某些流动参数，并需要对建立的数学模型进行验证。第三，程序的编制及资料的收集、整理与正确利用，在很大程度上依赖于经验与技巧。此外，因数值处理方法等原因有可能导致计算结果的不真实，例如产生数值黏性和频散等伪物理效应。当然，某些缺点或局限性可通过某种方式克服或弥补，这在本书中会有相应介绍。此外，CFD 因涉及大量数值计算，因此，常需要较高的计算机软硬件配置。

CFD 有自己的原理、方法和特点，数值计算与理论分析、实验观测相互联系、相互促进，但不能完全替代，三者各有各的适用场合。在实际工作中，需要注意将三者有机地结合，争取做到取长补短。

1.1.4 计算流体力学的应用领域

近十多年来，CFD 有了很大的发展，替代了经典流体力学中的一些近似计算法和图解法。

过去的一些典型教学实验,如 Reynolds 实验,现在完全可以借助 CFD 手段在计算机上实现。所有涉及流体流动、热交换、分子输运等现象的问题,几乎都可以通过计算流体力学的方法进行分析和模拟。CFD 不仅作为一个研究工具,而且还作为设计工具在水利工程、土木工程、环境工程、食品工程、海洋结构工程、工业制造等领域发挥作用。典型的应用场合及相关的工程问题包括:

- ① 水轮机、风机和泵等流体机械内部的流体流动;
 - ② 飞机和航天飞机等飞行器的设计;
 - ③ 汽车流线外形对性能的影响;
 - ④ 洪水波及河口潮流计算;
 - ⑤ 风载荷对高层建筑物稳定性及结构性能的影响;
 - ⑥ 温室及室内的空气流动及环境分析;
 - ⑦ 电子元器件的冷却;
 - ⑧ 换热器性能分析及换热器片形状的选取;
 - ⑨ 河流中污染物的扩散;
 - ⑩ 汽车尾气对街道环境的污染;
- 食品中细菌的迁移。

对这些问题的处理,过去主要借助于基本的理论分析和大量的物理模型实验,而现在大多采用 CFD 的方式加以分析和解决,CFD 技术现已发展到完全可以分析三维黏性湍流及旋涡运动等复杂问题的程度。

1.1.5 计算流体力学的数值解法

经过四十多年的发展,CFD 出现了多种数值解法。这些方法之间的主要区别在于对控制方程的离散方式。根据离散的原理不同,CFD 大体上可分为四个分支:

- ① 有限差分法 (Finite Difference Method, FDM);
- ② 边界元法 (Boundary Element Method, BEM);
- ③ 有限体积法 (Finite Volume Method, FVM);
- ④ 有限元法 (Finite Element Method, FEM)。

(1) 有限差分法 (FDM) 这种方法是求得偏微分方程数值解的最早的一种方法,也是对简单的几何形状中的流动与传热问题最容易实施的一种方法,基本原理是将求解区域用网格线的结点所组成的集合来代替。在每个结点上,描写所研究的流动与传热问题的偏微分方程中的每一个导数项用相应的差分表达式来代替,从而在每个结点上形成一个代数方程。它是一种直接将微分问题变为代数问题的近似数值解法。在此基础上发展起来的方法有 PIC (Particle-in-Cell) 法、MAC (Marker-and-Cell) 法,以及由美籍华人学者陈景仁提出的有限分析法 (Finite Analytic Method) 等。FDM 的计算方法及程序都比较简单,但不太适合解决复杂边界条件问题,并且计算结果可靠性低,在模型几何结构比较复杂的情况下,得到的结果容易失真。这种方法发展较早,比较成熟,较多地用于求解双曲线型和抛物线型问题,但是在聚合物共混流场计算中,很少采用这样的方法。

(2) 边界元法 (BEM) 边界元法是工程上解决数学模型满足泊松方程和 Laplace 方程问题的有效方法。计算时只需要边界离散成边界单元,使其所考虑的问题维数降低一维;输入

数据少, 计算时间短, 节省内存; 由于离散化的误差仅来源于边界, 提高了计算精度。但是, 使用边界元法时首先要求出问题的基本解, 而并不是所有的问题都有基本解。因此, 它的使用具有一定的局限性。

(3) 有限体积法 (FVM) 有限体积法是将计算区域划分为一系列控制体积, 将待解微分方程对每一个控制体积分得出离散方程。有限体积法的关键是在导出离散方程过程中, 需要对界面上的被求函数本身及其导数的分布作出某种形式的假定。用有限体积法导出的离散方程可以保证具有守恒特性, 而且离散方程系数物理意义明确, 计算量相对较小。1980 年, S.V.Patanker 在其专著《Numerical Heat Transfer and Fluid Flow》中对有限体积法作了全面的阐述。此后, 该方法得到了广泛应用, 是目前 CFD 应用较为广泛的一种方法。当然, 对这种方法的研究和扩展也在不断进行, 如 P.Chow 提出了适用于任意多边形非结构网格的扩展有限体积法。

(4) 有限元法 (FEM) 有限元法是20世纪80年代开始应用的一种数值解法, 它吸收了有限差分法中离散处理的内核, 又采用了变分计算中选择逼近函数对区域进行积分的合理方法。

有限元法是把计算区域划分成离散的容积或者单元, 然后通过对控制方程做积分来得到离散方程。它最大的优点在于对不规则几何区域的适应性很好, 而且即使在粗网格下也能得到准确的积分守恒, 从而在实际计算中将大大节省内存的占用, 提高计算效率。在处理复杂的边界问题以及不规则的几何模型时, 它更展示出强大的功能。

目前的 CFD 大型商用软件大多采用有限元法。本书所介绍的 ANSYS-FLUENT 公司旗下的 POLYFLOW 也是一个以有限元为基础, 专门用于黏弹性材料流动模拟的商业软件。

1.2 流体力学中流体与流动的基本特性

1.2.1 理想流体与黏性流体

流体的特点是可以流动, 但在流动过程中是存在阻力的, 如一个流层在外力作用下向前运动时, 紧贴着它的一个流层对其运动有一个阻滞力, 这种阻滞力与固体之间相对运动时产生的摩擦力相类似。我们称之为“内摩擦力”(internal friction)或“黏性”(viscosity)。从微观分析, “内摩擦力”或“黏性”的产生是由于两流层分子间的内聚力、分子链之间的相互缠绕的牵制力等。所以要使流体流动就必须消耗能量来克服流体的黏性。

黏性大小依赖于流体的性质, 并显著地随温度而变化。当流体的黏性很小时, 我们可以近似地将这样的流体看成是无黏性的, 称为无黏流体(inviscid fluid), 也叫做理想流体(perfect fluid)。而对于有黏性的流体, 则称为黏性流体(viscous fluid)。应该强调指出, 真正的理想流体在客观实际中是不存在的, 它只是实际流体在某种条件下的一种近似模型。

1.2.2 牛顿流体与非牛顿流体

依据内摩擦剪应力与速度变化率的关系不同, 黏性流体又分为牛顿流体(Newtonian fluid)与非牛顿流体(non-Newtonian fluid)。

观察近壁面处的流体流动, 可以发现, 紧靠壁面的流体黏附在壁面上, 静止不动。而在流体内部之间的黏性所导致的内摩擦力的作用下, 靠近这些静止流体的另一层流体受迟滞作

用速度降低。

流体的剪切力 τ 由牛顿黏性定律决定：

$$\tau = \mu \lim_{\Delta n \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta n} = \mu \frac{\partial u}{\partial n} \quad (1-1)$$

式中， Δn 为沿法线方向的距离增量； Δu 为对应于 Δn 的流体速度的增量； $\Delta u / \Delta n$ 为法向距离上的速度变化率，所以，牛顿黏性定律表示：流体剪切应力和单位距离上的两层流体间的相对速度成比例；比例系数 μ 称为流体的动力黏度，常简称为黏度，它的值取决于流体的性质、温度和压力大小， μ 的单位是 $\text{N} \cdot \text{s} / \text{m}^2$ 。

若 μ 为常数，则称该类流体为牛顿流体；否则，称为非牛顿流体。空气、水等均为牛顿流体；聚合物溶液、含有悬浮粒杂质或纤维的流体为非牛顿流体。

对于牛顿流体，通常用 μ 和密度 ρ 的比值 ν 来代替动力黏度 μ ：

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (1-2)$$

通过量纲分析可知， ν 的单位是 m^2 / s 。由于没有动力学中力的量纲，只具有运动学的要素，所以称 ν 为运动黏度。

1.2.3 流体热传导及扩散

除了黏性外，流体还有热传导 (heat transfer) 及扩散 (diffusion) 等性质。当流体中存在着温度差时，温度高的地方将向温度低的地方传送热量，这种现象称为热传导。同样地，当流体混合物中存在着组元的浓度差时，浓度高的地方将向浓度低的地方输送该组元的物质，这种现象称为扩散。

流体的宏观性质，如扩散、黏性和热传导等，是分子输运性质的统计平均。由于分子的不规则运动，在各层流体间交换着质量、动量和能量，使不同流体层内的平均物理量均匀化。这种性质称为分子运动的输运性质。质量输运在宏观上表现为扩散现象，动量输运表现为黏性现象，能量输运则表现为热传导现象。

理想流体忽略了黏性，即忽略了分子运动的动量输运性质，因此在理想流体中也不应考虑质量和能量输运性质——扩散和热传导，因为它们具有相同的微观机制。

1.2.4 可压缩流体与不可压缩流体

根据密度 ρ 是否为常数，流体分为可压缩 (compressible) 与不可压缩 (incompressible) 两大类。当密度 ρ 为常数时，流体为不可压缩流体，否则为可压缩流体。空气为可压缩流体，水为不可压缩流体。有些可压缩流体在特定的流动条件下，可以按不可压缩流体对待。有时，也称为可压缩流动与不可压缩流动。

在可压缩流体的连续方程中含密度 ρ ，因而可把 ρ 视为连续方程中的独立变量进行求解，再根据气体的状态方程求出压力。

不可压缩流体的压力场是通过连续方程间接规定的。由于没有直接求解压力的方程，不可压缩流体的流动方程的求解有其特殊的困难。

1.2.5 稳定流动与非稳定流动

根据流体流动的物理量 (如速度、压力、温度等) 是否随时间变化，将流动分为稳定 (steady) 与非稳定 (unsteady) 两大类。当流动的物理量不随时间变化，即 $\frac{\partial ()}{\partial t} = 0$ 时，为稳

定流动；当流动的物理量随时间变化，即 $\frac{\partial()}{\partial t} \neq 0$ ，则为非稳定流动。稳定流动也称为恒定流动，或稳态流动；非稳定流动也称为非恒定流动、非稳态流动，或瞬态（transient）流动。许多流体机械在启动或关机时的流体流动一般是非稳定流动，而正常运转时可看作是稳定流动。

1.2.6 层流与湍流

自然界中的流体流动状态主要有两种形式，即层流（laminar）和湍流（turbulence）。在许多中文文献中，湍流也称为紊流。层流是指流体在流动过程中两层之间没有相互混掺，而湍流是指流体不是处于分层流动状态。一般说来，湍流是普遍的，而层流则属于个别情况。

对于圆管内流动，定义 Reynolds 数（也称雷诺数）： $Re = ud/\nu$ 。式中， u 为液体流速， ν 为运动黏度， d 为管径。当 $Re \leq 2300$ 时，管流一定为层流； Re 为 8000~12000 时，管流一定为湍流；当 $2300 < Re < 8000$ 时，流动处于层流与湍流间的过渡区。

对于一般流动，在计算 Reynolds 数时，可用水力半径 R 代替上式中的 d 。这里， $R = A/x$ ， A 为通流截面积， x 为湿周。对于液体， x 等于在通流截面上液体与固体接触的周界长度，不包括自由液面以上的气体与固体接触的部分；对于气体，它等于通流截面的周界长度。

1.2.7 聚物流变行为

影响聚合物加工的主要流变行为主要有聚合物的流动性和弹性。

（1）流动性 以黏度的倒数表示流动性。按作用方式的不同，流动可分为剪切流动和拉伸流动，相应地有剪切黏度和拉伸黏度。前者为切应力与切变速率之比；后者为拉伸应力与拉伸应变速度之比。聚合物的结构不同，流动性（或黏度）就不同。对于聚合物熔体，大多数是属于假塑性液体，其剪切黏度随剪切应力的增加而降低，同时测试条件（温度、压力）、分子参数（分子量及其分布、支化度等）和添加剂（填料、增塑剂、润滑剂等）等因素对剪切黏度-剪切应力曲线的移动方向均有影响。对于拉伸黏度，当应变速率很低时，单向拉伸的拉伸黏度约为剪切黏度的 3 倍，而双向相等的拉伸，其拉伸黏度约为剪切黏度的 6 倍。拉伸黏度随拉伸应力增大而增大，即使在某些情况下有所下降，其下降的幅度也远较剪切黏度的小。因此，在大的应力作用下，拉伸黏度往往要比剪切黏度大一二个数量级，这可使化学纤维纺丝过程更为容易和稳定。

（2）弹性 由于聚物流体流动时，伴随有高弹形变的产生和储存，故外力除去后会发生回缩等现象，例如：塑料、橡胶挤出后和纤维纺丝后会发生断面尺寸增大而长度缩短的离模膨胀现象，或称为弹性记忆效应；搅动时流体会沿杆上升，这种爬杆现象称为韦森堡效应或法向应力效应。此外，聚合物加工时，半成品或成品表面不光滑，出现“橘子皮”和“鲨鱼皮”，出现波浪、竹节、直径有规律的脉动、螺旋形畸变甚至支离破碎等影响制品质量的熔体破裂和不稳定流动等现象，这些现象主要与熔体弹性有关。

下面简单介绍几种聚合物特有的流变行为。

① 韦森堡效应（Weissenberg Effect），又称法向应力效应或者爬杆现象 现象描述：如图 1-2（b）所示，在装有黏弹性流体的圆柱形桶内，由于转轴转动，流体沿着转轴往上爬升，这种现象称为韦森堡效应或法向应力效应。而图 1-2（a）的牛顿流体则由于惯性力的作用沿边缘处往上爬升。

② 弹性回复（Elastic Recoil）现象描述：图 1-3 描述了聚物流体的弹性回复作用过程。可以看出，聚物流体在流动过程中包含有弹性形变，即具有可回复形变。而牛顿流体的流动性则不可恢复。

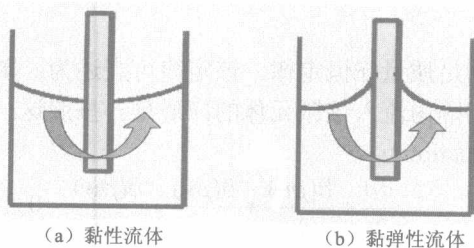


图 1-2 韦森堡效应

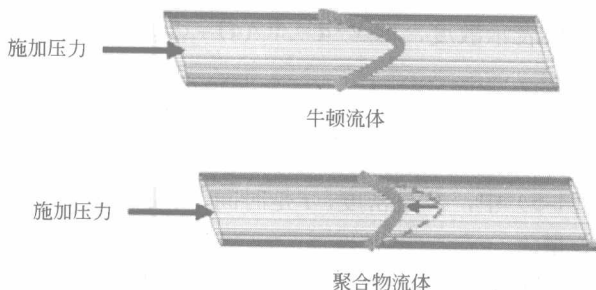


图 1-3 弹性回复现象

③ 挤出胀大 (Extrusion Swell), 又称 Barus 效应 现象描述: 如图 1-4 (b) 所示, 聚合物熔体在挤出过程中发生离模膨胀现象, 挤出段的截面变大, 而图 1-4 (a) 的牛顿流体则由于重力作用, 挤出段的截面变小。其中挤出胀大比 (Die Swell Ratio) $B = D_{\max}/D$, 是描述挤出胀大效应的重要参数。

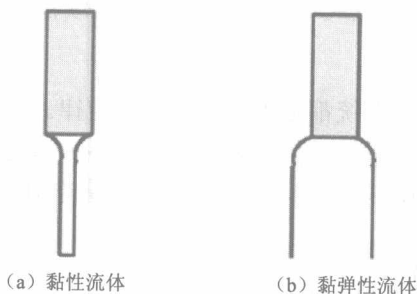


图 1-4 黏弹性流体的挤出胀大现象

1.3 流体动力学控制方程

流体流动要受物理守恒定律的支配, 基本的守恒定律包括: 质量守恒定律、动量守恒定律、能量守恒定律。如果流动包含有不同成分 (组元) 的混合或相互作用, 系统还要遵守组分守恒定律。

控制方程 (governing equations) 是这些守恒定律的数学描述。本节将介绍这些基本的守恒定律所对应的控制方程。如果流动处于湍流状态, 系统还要遵守附加的湍流运输方程。有关湍流的附加控制方程将在 1.3.6 中介绍。

1.3.1 质量守恒方程

任何流动问题都必须满足质量守恒定律。该定律可表述为：单位时间内流体微元体中质量的增加，等于同一时间间隔内流入该微元体的净质量。按照这一定律，可以得出质量守恒方程（mass conservation equation）：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (1-3)$$

引入矢量符号 $\text{div}(\mathbf{a}) = \partial a_x / \partial x + \partial a_y / \partial y + \partial a_z / \partial z$ ，式（1-3）写成：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1-4)$$

有的文献使用符号 ∇ 表示散度，即 $\nabla \cdot \mathbf{a} = \text{div}(\mathbf{a}) = \partial a_x / \partial x + \partial a_y / \partial y + \partial a_z / \partial z$ ，这样，式（1-3）写成：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1-5)$$

在式（1-3）～式（1-5）中， ρ 是密度， t 是时间， $\mathbf{u}$ 是速度矢量， u 、 v 和 w 是速度矢量 $\mathbf{u}$ 在 x 、 y 和 z 方向的分量。

上面给出的是瞬态三维可压缩流体的质量守恒方程。若流体不可压，密度 ρ 为常数，式（1-3）变为：

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1-6)$$

若流动处于稳态，则密度 ρ 不随时间变化，式（1-3）变为：

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (1-7)$$

质量守恒方程，即式（1-3）或式（1-4）也常称作连续性方程（continuity equation）。

1.3.2 动量守恒方程

动量守恒定律也是任何流动系统都必须满足的基本定律。该定律可表述为：微元体中流体的动量对时间的变化率等于外界作用在该微元体上的各种力之和。该定律实际上是牛顿第二定律。按照这一定律，可导出 x 、 y 和 z 三个方向的动量守恒方程（momentum conservation equation）：

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + F_x \quad (1-8a)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \text{div}(\rho v \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + F_y \quad (1-8b)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \text{div}(\rho w \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + F_z \quad (1-8c)$$

式中， p 是流体微元体上的压力； τ_{xx} 、 τ_{xy} 和 τ_{xz} 等是因分子黏性作用而产生的作用在微元体表面上的黏性应力 $\boldsymbol{\tau}$ 的分量； F_x 、 F_y 和 F_z 是微元体上的体积力，若体积力只有重力，且 z 轴竖直向上，则 $F_x = 0$ ， $F_y = 0$ ， $F_z = -\rho g$ 。

式（1-8）是对任何类型的流体（包括非牛顿流体）均成立的动量守恒方程。对于牛顿流体，黏性应力 $\boldsymbol{\tau}$ 与流体的变形率成比例，有：

$$\begin{aligned}
\tau_{xx} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \operatorname{div}(\mathbf{u}) \\
\tau_{yy} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \operatorname{div}(\mathbf{u}) \\
\tau_{zz} &= 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \operatorname{div}(\mathbf{u}) \\
\tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
\tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
\tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)
\end{aligned} \tag{1-9}$$

式中, μ 是动力黏度 (dynamic viscosity); λ 是第二黏度 (second viscosity), 一般可取 $\lambda = -2/3$ 。将式 (1-9) 代入式 (1-8), 得:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{u}) = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u \tag{1-10a}$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{u}) = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} v) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v \tag{1-10b}$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w \mathbf{u}) = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} w) - \frac{\partial p}{\partial z} + S_w \tag{1-10c}$$

式中, $\operatorname{grad}() = \partial()/\partial x + \partial()/\partial y + \partial()/\partial z$; 符号 S_u 、 S_v 和 S_w 是动量守恒方程的广义源项, $S_u = F_x + s_x$, $S_v = F_y + s_y$, $S_w = F_z + s_z$, 而其中的 s_x 、 s_y 和 s_z 的表达式如下:

$$s_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\lambda \operatorname{div} \mathbf{u}) \tag{1-11a}$$

$$s_y = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} (\lambda \operatorname{div} \mathbf{u}) \tag{1-11b}$$

$$s_z = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda \operatorname{div} \mathbf{u}) \tag{1-11c}$$

一般来讲, s_x 、 s_y 和 s_z 是分量, 对于黏性为常数的不可压缩流体, $s_x = s_y = s_z = 0$ 。

式 (1-10) 还可写成展开形式:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} \tag{1-12a}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} \tag{1-12b}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v$$