

# 常规螺杆元件四面体间隙的拟合

刘 慧<sup>1</sup> 张慕鸿<sup>2</sup>

(1. 北京化工大学理学院, 北京 100029; 2. 美国加州大学伯克利分校, 伯克利 94720)

**摘 要:** 文中利用了两种对非规则边界参数区域进行拟合的方法, 对同向双螺杆挤出机四面体间隙进行了拟合, 并建立了一种曲面拟合误差测量的新方法; 应用此法, 从度量曲面的整体贴近程度方面对拟合曲面进行了误差分析。

**关键词:** 常规同向双螺杆; 四面体间隙; 曲面拟合; 误差度量

**中图分类号:** TQ320.5

双螺杆挤出机是聚合物加工的主要设备之一, 在聚合物加工行业已经得到、并将进一步得到越来越广泛的应用<sup>[1]</sup>。文中简单介绍了同向全啮合双螺杆挤出机四面体间隙几何形状的数学模型。为给双螺杆挤出机的流场分析提供简单、实用的数学模型<sup>[2]</sup>, 作者还应用两种对非规则边界参数区域进行拟合的方法, 对四面体间隙曲面进行了拟合。首先在柱坐标系下进行拟合, 当发现问题反而复杂化之后, 改用在直角坐标系下拟合。最后在直观对比的基础上, 提出了一种基于衡量曲面整体贴近程度的误差度量方法, 按此方法拟合的曲面品质良好。

## 1 四面体间隙形成原理及数学模型

### 1.1 四面体间隙形成原理

如图 1 所示, 旋转坐标系  $O_1 - x y$  与螺杆 固

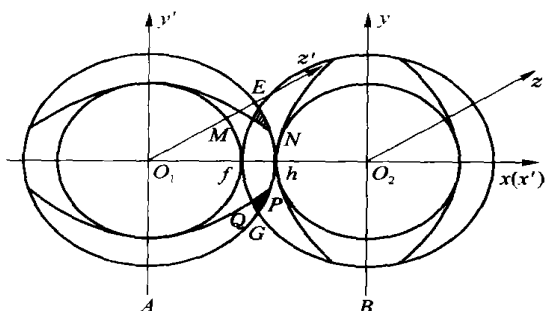


图 1 双螺杆截面图

Fig. 1 Twin-screw of section

联, 旋转坐标系  $O_2 - x y$  与螺杆 固联, 它们的转速与方向均相同。  $O_1 - x y$  与  $O_2 - x y$  平面上的八段弧绕自身轴  $O_1, O_2$  作逆时针旋转, 同时沿轴  $O_1 z, O_2 z$  作匀速直线运动, 则形成了两个全啮合同向旋转的双螺杆的三维立体图形。四面体间隙位于两个螺杆相邻螺棱侧面之间, 它的各部分数学模型如公式 (1), (2) 所示。弧段  $MN$  旋转成四面体间隙的一个面, 其旋转面方程为<sup>[3-4]</sup>

$$\begin{cases} (r, \theta) = -R_s \cos(\phi - \frac{a}{2}) + \\ \sqrt{C_L^2 - R_s^2 \sin^2(\phi - \frac{a}{2})} \\ z = \frac{T}{2} \end{cases} \quad (1)$$

弧段  $QP$  旋转成四面体间隙的另一个面, 其方程为

$$\begin{cases} 1(r, \theta) = -R_s \sin(\phi_1 - \frac{a}{2}) + \\ \sqrt{C_L^2 - R_s^2 \cos^2(\phi_1 - \frac{a}{2})} \\ z = \frac{T}{2} \end{cases} \quad (2)$$

其中  $\frac{a}{2} = \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} - \frac{a}{2}$ , 该方程是建立在  $O - xyz$  所对应的柱坐标系下。其中  $R_s$  为圆盘外半径,  $C_L = O_1 O_2$  为轴心距离,  $T$  为螺杆导程,  $\phi$  为螺杆顶角,  $\phi_1$  为极角,  $\phi$  为旋转角, 另两个面如图 1 所示弧段  $EfG$  和  $EhG$  沿  $z$  轴方向叠加形成的两柱面。其取值范围在式 (1), (2) 所示的两螺旋面之间。这样就得到了  $1/4$  导程内四面体间隙的四个曲面的解析式。

## 2 拟合思想及方法

四面体间隙的解析表达式已经给出。然而, 上

收稿日期: 2004-04-22

基金项目: 教育部科学技术研究重点项目 (02016)

第一作者: 女, 1944 年生, 教授

E-mail: liuhui@mail.buct.edu.cn

面列出挤出机的螺杆四面体间隙曲面的表达式是极其复杂的,其中包括了三角函数和根式。在实际应用中,这往往会带来很多麻烦,甚至使问题变得不可解。为了解决这一困难,本文希望能够找到替代的数学模型,既能比较准确地描述曲面的形状,又能比较简单且易于处理问题。

常用曲面插值或逼近算法 Hermite, Coons, Bezier, B 样条, NURBS 等均是在矩形网格上进行的<sup>[5]</sup>。本文涉及的曲面参数区域比较复杂,划分成矩形网格比较困难,故采用一种基于三维散列数据的曲面构造方法。对三维散列数据的定义域作三角剖分,在每个三角形上作双三次分片插值,最后将所有三角形分片曲面拼接成一张  $C^1$  连续的曲面。

## 2.1 重心坐标定义

对于给定的一组三维数据  $(x_i, y_i, z_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , 构造一个新的插值曲面,具有所需光滑度的曲面  $S(x, y)$ , 使之插值于这些数据,即满足  $S(x_i, y_i) = z_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ 。

设插值曲面  $S$  定义在  $xy$  平面上区域  $D$  中,  $(x_i, y_i) \in D$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ 。将  $V_i = (x_i, y_i)$  作为顶点,对区域  $D$  作三角剖分,在每个三角形上求插值函数  $S(x, y)$ 。对  $xy$  平面上任意  $H$ , 顶点为  $V_1, V_2, V_3$ ,  $V$  是平面上任一点,定义  $V$  相对于  $H$  的重心坐标  $(u_1, u_2, u_3)$ ,  $u_1 = A_1/A$ ,  $A_1$  和  $A$  分别是  $VV_2V_3$  和  $H$  的面积,如图 2 所示,  $u_2, u_3$  与此类似。 $V$  点的重心坐标为:  $\left(\frac{A_1}{A}, \frac{A_2}{A}, \frac{A_3}{A}\right)$ 。

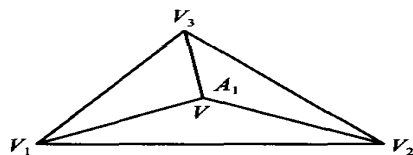


图2 重心坐标定义

Fig. 2 Coordinates of center of gravity

## 2.2 十点插值格式

如图 3 所示,  $V_1V_2V_3$  上有 10 个标记点处数

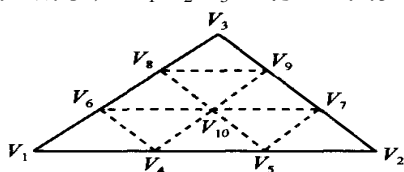


图3 双三次插值数据点

Fig. 3 Double-cubic interpolation

据,即  $z_i = S(V_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, 10$ 。其中  $V_4, V_5$  为  $V_1V_2$  的三等分点,  $V_6, V_8$  为  $V_1V_3$  的三等分点,  $V_7, V_9$  为  $V_2V_3$  的三等分点,  $V_{10}$  为  $V_6V_7$  中点。

可以确定插值曲面的方程  $S(x, y)$  为

$$S(x, y) = \sum_{i=1}^{10} z_i f_i(x, y) \quad (3)$$

其中  $f_i(x, y)$  属于双三次多项式函数类,且满足

$f_i(V_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, 10$ 。据此导出用重心坐标表示的双三次 Lagrange 插值函数。

$$\begin{aligned} h_1 &= \frac{9}{2} u_1 \left(u_1 - \frac{1}{3}\right) \left(u_1 - \frac{2}{3}\right) \\ h_2 &= \frac{9}{2} u_2 \left(u_2 - \frac{1}{3}\right) \left(u_2 - \frac{2}{3}\right) \\ h_3 &= \frac{9}{2} u_3 \left(u_3 - \frac{1}{3}\right) \left(u_3 - \frac{2}{3}\right) \\ h_4 &= \frac{27}{2} u_1 u_2 \left(u_1 - \frac{1}{3}\right) \\ h_5 &= \frac{27}{2} u_1 u_2 \left(u_1 - \frac{1}{3}\right), h_6 = \frac{27}{2} u_1 u_3 \left(u_1 - \frac{1}{3}\right) \\ h_7 &= \frac{27}{2} u_2 u_3 \left(u_2 - \frac{1}{3}\right), h_8 = \frac{27}{2} u_1 u_3 \left(u_3 - \frac{1}{3}\right) \\ h_9 &= \frac{27}{2} u_2 u_3 \left(u_3 - \frac{1}{3}\right), h_{10} = 27 u_1 u_2 u_3 \end{aligned} \quad (4)$$

可以证明式(4)具有仿射不变性,因而适合于三维图形的表示,且具有  $C^1$  连续性。

## 2.3 三点插值格式

如图 4 所示,取三角形顶点  $V_1, V_2, V_3$  为型值点,已知  $z_i = S(V_i)$ ,  $z_{xi} = \frac{\partial S(V_i)}{\partial x}$ ,  $z_{yi} = \frac{\partial S(V_i)}{\partial y}$ ,  $i = 1, 2, 3$ 。

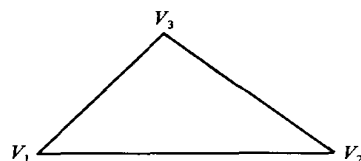


图4 3点格式插值点

Fig. 4 Interpolation of three points

已知 9 个插值条件,可令拟合的函数类为缺少  $x^2y$  或  $xy^2$  项的不完全双三次多项式,使得拟合所得结果  $S(x, y)$  满足

$$S(V_i) = z_i, \quad \frac{\partial S(V_i)}{\partial x} = z_{xi}, \quad \frac{\partial S(V_i)}{\partial y} = z_{yi}, \quad i = 1, 2, 3.$$

插值曲面的方程  $S(x, y)$  为

$$S(x, y) = \sum_{i=1}^3 z_i f_i(x, y) + \sum_{i=1}^3 z_{xi} f_{xi}(x, y) + \sum_{i=1}^3 z_{yi} f_{yi}(x, y) +$$

$$z_{yi} f_{yi}(x, y)$$

### 3 四面体间隙的拟合

#### 3.1 曲面边界的求解

由以上讨论已经得出了四面体间隙四个曲面的数学表达式,其中两个为旋转曲面,另外两个是圆柱面。但是构成四面体间隙的只是各个曲面的一部分,因此作图的关键是要确定曲面的边界<sup>[6]</sup>。由于柱面不需要进行拟合,所以只以其中的一个旋转面为例,确定曲面的边界并且用以上两种方法进行曲面的拟合。

如图 5(a) 所示,在  $-\frac{a}{2} + \frac{a}{2}$  时,弧线  $PQ$  属于间隙的部分为夹在  $P, L$  之间的部分。

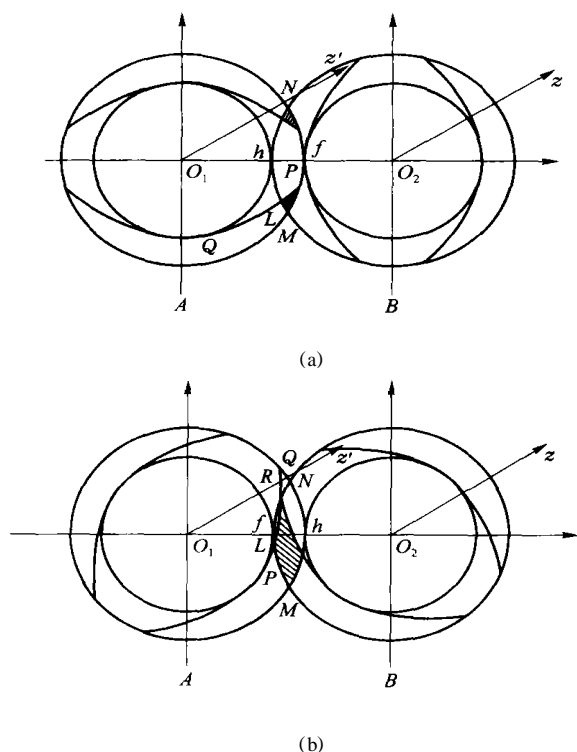


图 5 四面体间隙边界

Fig. 5 Boundary of the tetrahedral gap

其中  $P$  点的轨迹为

$$-\frac{a}{2} = -\frac{a}{2} \quad \text{即}$$

$$3(\quad) = -\frac{a}{2} \quad (5)$$

$L$  点为弧  $PQ$  与弧  $MhN$  的交点。即

$$\begin{cases} = \sin\left(-\frac{a}{2}\right) R s + \\ \sqrt{C_L^2 - R s^2 \cos^2\left(-\frac{a}{2}\right)} \quad \text{弧 } PQ \\ 1 = R s \quad \text{弧 } MhN \end{cases} \quad (6)$$

求解三角方程得到

$$= \arctan \frac{R s \cos\left(-\frac{a}{2}\right)}{\pm C_L - R s \sin\left(-\frac{a}{2}\right)} \quad (7)$$

得出的结果为弧  $PQ$  与大圆  $B$  的两个交点,当

$-\frac{a}{2} + \frac{a}{2} + \frac{a}{2}$  时,啮合区内只有一个交点  $L$ 。 $L$  点坐标满足

$$2(\quad) = \arctan \frac{R s \cos\left(-\frac{a}{2}\right)}{-C_L - R s \sin\left(-\frac{a}{2}\right)} \quad (8)$$

当  $-\frac{a}{2} - \frac{a}{2} - \frac{a}{2}$  时,弧  $PQ$  属于四面体间隙的部分变为夹在上面求得两交点  $L, R$  之间的部分,如图 5(b) 所示。

$L$  点的方程仍为公式(8),  $R$  的方程为

$$1(\quad) = \arctan \frac{R s \cos\left(-\frac{a}{2}\right)}{C_L - R s \sin\left(-\frac{a}{2}\right)} \quad (9)$$

曲面在四面体间隙中的完整的参数区域为式(5), (8), (9) 所围区域。如图 6 所示。用同样方法也可以确定其它三个曲面的边界。

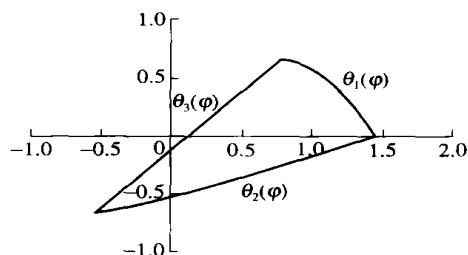


图 6 旋转曲面的参数区域

Fig. 6 Region of parameter of revolution surface

对图 6 作一旋转平移,再分割成为三块曲边三角形区域如图 7 所示。这样就确定出了其中一个旋转曲面的边界。下面对此曲面进行拟合。

#### 3.2 曲面拟合

用 10 点插值格式将曲面进行拟合,在柱坐标系下表示为

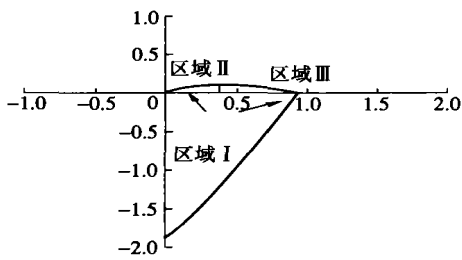


图7 参数区域的分割

Fig. 7 Division of the region of parameter

$$z_1(x, y) = \begin{cases} 36.3460 - 29.3541x + 16.0771x^2 - \\ 2.8161x^3 + 29.3643y - 32.2500y^2 + \\ 8.5486y^3 + 16.1705xy - \\ 8.6297x^2y + 2.8972x^3y \quad (x, y) \text{ 区域} \\ 35.5498 - 27.1076x + 14.3135x^2 - \\ 2.4949x^3 + 29.1866y - 33.6983y^2 + \\ 10.6389y^3 + 18.1303xy - \\ 11.3870x^2y + 3.4924x^3y \quad (x, y) \text{ 区域} \\ 34.7288 - 24.5044x + 11.6035x^2 - \\ 1.5070x^3 + 27.3407y - 29.1955y^2 + \\ 7.0698y^3 + 14.9215xy - 5.5587xy^2 - \\ 0.0040x^3y \quad (x, y) \text{ 区域} \end{cases}$$

曲面拟合结果如图8所示。

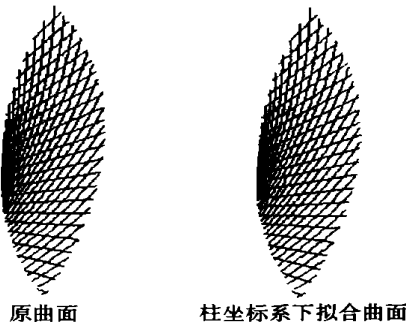


图8 拟合曲面与原曲面的比较

Fig. 8 Fitting surface and original surface

在用三点插值进行曲面拟合时,由于柱坐标过于复杂,可以首先将方程转化为直角坐标表示。

在直角坐标系下

$$z = \frac{T}{2} = \frac{T}{2} \left( -\frac{a}{2} - \arcsin \frac{2 + Rs^2 - C_L^2}{2Rs} \right)$$

其中  $s = \arctan \frac{y}{x}$ ,  $s = \sqrt{x^2 + y^2}$ 。这样参数区域即变为较规则形状。

采用三点插值格式进行拟合,曲面拟合结果为

$$z_1(x, y) = \begin{cases} 331.3021 - 37.4598x + 1.4504x^2 - \\ 0.0190x^3 - 3.9391y + 0.3726xy - \\ 0.0080x^2y - 0.0746y^2 + 0.0024xy^2 + \\ 0.0001y^3 \quad (x, y) \text{ 区域} \\ 47.6425 - 3.3426x + 0.0848x^2 - \\ 0.0008x^3 + 0.7921y - 0.0227xy + \\ 0.0002x^2y - 0.0344y^2 + 0.0008xy^2 + \\ 0.0001y^3 \quad (x, y) \text{ 区域} \\ 331.3021 - 37.4598x + 1.4504x^2 - \\ 0.0190x^3 + 6.3222y - 0.4781xy + \\ 0.0095x^2y - 0.0610y^2 + 0.0020xy^2 - \\ 0.0003y^3 \quad (x, y) \text{ 区域} \\ 47.6425 - 3.3426x + 0.0848x^2 - \\ 0.0008x^3 + 0.6338y - 0.0118xy + \\ 0.0002x^2y - 0.0242y^2 + 0.0005xy^2 - \\ 0.0002y^3 \quad (x, y) \text{ 区域} \end{cases}$$

#### 4 误差度量

两片曲面之间的贴近程度有多种衡量标准,主要考虑曲面的整体贴合程度。本文建立了以下方法作为误差衡量标准。

设参数曲面  $S$  的参数区域为  $D$ ,将  $D$  分为若干小块  $D_i$ ,  $i=1, 2, \dots, n$ 。对于每一小块  $D_i$ ,选出一个代表点  $P_i$ 。过  $P_i$  作曲面  $S$  的法线  $l$ ,设  $l$  与另一曲面  $S$  交于点  $Q_i$ 。设

$$d_i = |P_i Q_i|, S_i = S_{D_i}$$

$d_i$  为  $P_i, Q_i$  间距。 $S_i$  为参数区域  $D_i$  的面积。

定义曲面  $S$  与曲面  $S$  之间的误差为

$$= \sum_{i=1}^n d_i S_i$$

按如上方法求得用10点格式对以上旋转曲面进行拟合的结果误差为

$$\varepsilon_1 = 75.9432 \text{ mm}^3$$

用3点插值格式对它进行拟合的结果误差为

$$\varepsilon_2 = 53.5348 \text{ mm}^3$$

对于选取的参数对应的四面体间隙的体积在文献[2]中已经用数值方法求得。

$$V = 10523.83 \text{ mm}^3$$

将求得的误差与其结果相比较即可定量地衡量曲面拟合的好坏。通过计算求得这种相对误差为

$$\tilde{\varepsilon}_1 = \frac{\varepsilon_1}{V} = 0.7216\% \quad \tilde{\varepsilon}_2 = \frac{\varepsilon_2}{V} = 0.5087\%$$

## 5 结果综述

长期以来,聚合物加工业对四面体间隙的几何形状仅有一些定性的粗略估计<sup>[2]</sup>,使得研究间隙的流体力学变得极其复杂困难。刘慧教授所建立的数学模型中<sup>[3]</sup>解析表达式仍然十分复杂。为了简化,本文利用两种方法,研究对非规则边界参数区域的曲面的拟合。在直观对比的基础之上提出了一种衡量误差的方法,应用此方法得出的,拟合曲面与原曲面非常接近。关于两个曲面拼接,需进一步考虑。

### 参 考 文 献

[1] 耿孝正. 双螺杆挤出机及其应用[M]. 北京:中国轻工业

出版社,2003

- [2] Eduardo L Canedo, Lefteris N Valsamis. Mixing in corotating intermeshing twin-screw extruders with farrel asymmetric modular mixing elements (FAMME) [C]. 53<sup>rd</sup> Annual Technical Conference & Exhibition ANTEC. Boston: SPE ANTEC '95, 1995, 312 - 314
- [3] 刘 慧,曹达鹏. 啮合同向旋转双螺杆挤出机四面体间隙的研究[J]. 化工学报, 1997, 48(4): 492 - 497
- [4] Booy M L. Geometry of fully wiped twin-screw equipment [J]. Poly Eng Sci, 1978, 118(12): 973
- [5] 王国瑾,汪国昭,郑建民. 计算机辅助几何设计[M]. 北京:高等教育出版社,2001
- [6] 贾洪国,黎 明,曹达鹏. 啮合同向双螺杆四面体间隙体积的数学模型[J]. 北京化工大学学报, 1998, 25(3): 91 - 96

## Fitting of tetrahedral gap of the intermeshing twin-screw

LIU Hui<sup>1</sup> ZHANG Mu-hong<sup>2</sup>

(1. College of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;

2. University of California, Berkeley University of California, Berkeley CA 94720, USA)

**Abstract:** Two methods were applied to fit surfaces of the tetrahedral gap of an intermeshing co-rotating twin-screw extruder. The surfaces are irregular border's parameter domain. And a new method was proposed to measure the error and was applied to measure the error between the fitting surfaces.

**Key words:** co-rotating twin-screw; tetrahedral gap; fitting surfaces; error

(责任编辑 曾宪玉)

(上接第 79 页)

## Analysis of calculated data and structure confirm of the trisazabridged [60] fulleroid

TANG Guang-shi<sup>1</sup> ZHANG Sheng-yuan<sup>1</sup> WANG Jing<sup>2</sup> LI Jiang-bo<sup>3</sup>

(1. College of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029;

2. Research Institute of Petroleum Processing, SINOPEC, Beijing 100083, China;

3. School of Chemistry and Chemical Technology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030, China)

**Abstract:** The structures of trisazabridged [60] fulleroid were analyzed by the quantum chemistry calculation, Multi-Tf MS, UV-vis, and NMR. The calculated results show there is a group effect of the nitro group even if the group effect was too weak to change the symmetry of C<sub>60</sub> derivatives. Furthermore, the space fine structure of the C<sub>60</sub> derivatives is confirmed through the analogue derivatives.

**Key words:** C<sub>60</sub> derivatives; symmetry; group effect; quantum chemistry calculation

(责任编辑 曾宪玉)