

УДК 535.529:541.64

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМОВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК В УСЛОВИЯХ ДВУХОСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ С УЧЕТОМ ТЕПЛОПЕРЕНОСА

Г. В. Пышнограй, И. В. Третьяков, Ю. А. Алтухов

Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,
656038 Барнаул
E-mail: pyshnograi@mail.ru

На основе модифицированной реологической модели Виноградова — Покровского с учетом теплопереноса исследуется процесс получения полимерной пленки. Найдены зависимости температуры пленки, ее скорости и ширины от расстояния до выхода из экструдера и изучено влияние параметров модели на эти зависимости.

Ключевые слова: реология, линейные полимеры, реологическое уравнение состояния, теплообмен.

Проектирование и производство изделий из полимерных материалов с использованием математического моделирования имеет ряд преимуществ, к числу которых можно отнести возможности управления качеством полимерных изделий и решения ряда оптимизационных задач. Широко распространенным процессом переработки полимерных материалов является изготовление полимерной пленки с использованием экструдера, через который продавливается полимерный расплав [1–4]. Затем полученная пленка попадает на охлаждающий барабан. В результате движения пленки от экструдера к барабану происходит ее охлаждение, а также изменение ширины и толщины. При этом пленка растягивается неравномерно, что приводит к появлению эффекта “шейки” [2, 3], заключающегося в существовании на кривой зависимости ширины пленки от расстояния до выхода из экструдера двух участков. На первом участке происходит существенное изменение ширины пленки за счет интенсивного деформирования, на втором участке это изменение незначительно и материал движется как единое целое. Поскольку все указанные процессы происходят одновременно, при их математическом моделировании необходимо совместно решать уравнения для скоростей, напряжений и теплопереноса. В данной работе для нахождения установившихся напряжений при растяжении используется обобщенная реологическая модель Виноградова — Покровского [5], параметры которой являются известными функциями температуры:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + 3 \frac{\eta_0}{\tau_0} a_{ik}, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} a_{ik} - \nu_{ij} a_{jk} - \nu_{kj} a_{ji} + \frac{1 + (\alpha - \beta)I}{\tau_0} a_{ik} = \frac{2}{3} \gamma_{ik} - 3 \frac{\beta}{\tau_0} a_{ij} a_{jk}.$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 09-01-00293).

© Пышнограй Г. В., Третьяков И. В., Алтухов Ю. А., 2012

Здесь σ_{ik} — тензор напряжений; p — гидростатическое давление; η_0, τ_0 — начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации; ν_{ik} — тензор градиентов скорости; a_{ik} — симметричный тензор анизотропии второго ранга; $I = a_{jj}$ — первый инвариант тензора анизотропии; $\gamma_{ik} = (\nu_{ik} + \nu_{ki})/2$ — симметризованный тензор градиентов скорости; κ, β — феноменологические параметры модели, учитывающие в уравнениях динамики макромолекулы размеры и форму молекулярного клубка.

Результаты расчетов вискозиметрических течений с помощью данной реологической модели хорошо согласуются с экспериментальными данными [6], что позволяет считать ее адекватной и использовать при расчете более сложных течений. Например, в работах [7, 8] рассмотрено установившееся движение между параллельными плоскостями под действием постоянного перепада давления и показано, что модель (1) предсказывает непараболическую форму профиля скорости и наличие ненулевого перепада давления в направлении, перпендикулярном к потоку.

Используем модель (1) для описания процесса формирования полимерной пленки. Поскольку в этом случае градиенты скорости неизвестны, для замыкания системы уравнений (1) необходимо добавить уравнения сохранения массы и импульса [9, 10], которые в неизотермическом случае должны быть дополнены уравнением переноса энергии

$$\rho C_V \frac{dT}{dt} = \operatorname{div} (\lambda \operatorname{grad} T) - \frac{\mu}{h} (T - T_0), \quad (2)$$

где C_V — удельная теплоемкость при постоянном объеме; T — температура пленки; T_0 — температура окружающей среды; λ — теплопроводность; μ — коэффициент теплообмена; $h = S/p = ab/(2a + 2b) = b/2$ — отношение площади сечения пленки к его периметру; a, b — ширина и толщина пленки соответственно (для тонких пленок $a \gg b$) [10]. Последнее слагаемое в (2) учитывает охлаждение пленки через ее поверхность. Заметим, что в (2) не учитывается диссипативная функция, характеризующая поток тепла, возникающий при ненулевых градиентах скорости.

Рассмотрим стационарную задачу в одномерном приближении. В такой постановке учитывается, что толщина пленки достаточно мала, поэтому ее температуру можно считать постоянной по толщине. Начало координат находится в центре выходного отверстия экструдера, ось Ox направлена вдоль направления движения пленки, а ось Oz — вдоль щели экструдера. Будем искать решение системы (1), (2) $v_x = u(x)$, $T = T(x)$, зависящее только от переменной x . При этом кинематику процесса можно описывать в рамках модели одноосного растяжения (см. [11]). Однако, как показали расчеты, в этом случае при постоянной кратности удлинения $k = v_1/v_0$ (v_1 — скорость пленки на барабане; v_0 — скорость полимера на выходе из экструдера) для различных образцов ширина получающейся пленки будет одинаковой, что противоречит экспериментальным данным [2]. Для устранения этого противоречия в данной работе предлагается рассматривать движение полимерной пленки в режиме двухосного растяжения. Следует отметить, что в этом случае необходимо учесть дополнительное напряжение по оси Oz , величина которого определяется в соответствии с экспериментальными данными. Тогда в тензоре полных напряжений отличными от нуля компонентами являются растягивающее напряжение σ_{11} и дополнительное напряжение σ_{33} :

$$\sigma_{11} = 3 \frac{\eta_0}{\tau_0} (a_{11} - a_{22}), \quad \sigma_{33} = 3 \frac{\eta_0}{\tau_0} (a_{33} - a_{22}). \quad (3)$$

При этом скорость изменения ширины пленки отличается от скорости изменения ее толщины, и выражение для тензора градиентов скорости имеет вид

$$\nu_{ij} = \begin{bmatrix} u'(x) & 0 & 0 \\ 0 & -(1 - \alpha)u'(x)/2 & 0 \\ 0 & 0 & -(1 + \alpha)u'(x)/2 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где α — параметр, характеризующий анизотропию растяжения потока. Такой режим течения можно называть режимом анизотропного растяжения. В этом случае можно найти зависимость скорости пленки $u(x)$ от ее ширины и толщины. Так как $\nu_{22} = \partial u / \partial y$, то $\partial u / \partial y = -(1 - \alpha)u'(x)/2$, откуда находим $U_y(x, y) = -y(1 - \alpha)u'(x)/2$. При $y = a(x)$ получаем

$$u = \frac{dy}{dt} = \frac{da(x)}{dt} = a'(x) \frac{dx}{dt} = u(x)a'(x).$$

Окончательно имеем

$$\frac{a'(x)}{a(x)} = -\frac{1 - \alpha}{2} \frac{u'(x)}{u(x)}.$$

Интегрируя последнее уравнение, получаем выражение для ширины пленки

$$a(x) = a(0)(u(x)/v_0)^{-(1-\alpha)/2}. \quad (5)$$

Аналогично можно найти распределение толщины пленки по координате x :

$$b(x) = b(0)(u(x)/v_0)^{-(1+\alpha)/2}. \quad (6)$$

Из (1)–(6) получаем математическую модель процесса формования полимерной пленки в одномерном приближении

$$\begin{aligned} \rho u \frac{du}{dx} &= 3 \frac{d}{dx} \left(\frac{\eta_0}{\tau_0} (a_{11} - a_{33}) \right), \\ u \frac{da_{11}}{dx} - 2 \frac{du}{dx} a_{11} + \frac{1 + (\varkappa - \beta)(a_{11} + a_{22} + a_{33})}{\tau_0} a_{11} &= \frac{2}{3} \frac{du}{dx} - 3\beta a_{11}^2, \\ u \frac{da_{22}}{dx} + (1 - \alpha) \frac{du}{dx} a_{22} + \frac{1 + (\varkappa - \beta)(a_{11} + a_{22} + a_{33})}{\tau_0} a_{22} &= -\frac{1 - \alpha}{3} \frac{du}{dx} - 3\beta a_{22}^2, \\ u \frac{da_{33}}{dx} + (1 + \alpha) \frac{du}{dx} a_{33} + \frac{1 + (\varkappa - \beta)(a_{11} + a_{22} + a_{33})}{\tau_0} a_{33} &= -\frac{1 + \alpha}{3} \frac{du}{dx} - 3\beta a_{33}^2, \\ \rho C_V u \frac{dT}{dx} &= \lambda \frac{d^2 T}{dx^2} - \frac{\mu}{h} (T - T_0). \end{aligned} \quad (7)$$

Система уравнений (7) представляет собой совокупность обыкновенных дифференциальных уравнений, четыре из которых являются уравнениями первого порядка и одно — уравнением второго порядка. Поэтому система (7) должна быть дополнена шестью граничными условиями. Для функции v_x эти условия имеют вид $v_x(0) = v_0$, $v_x(l) = kv_0$, где k — коэффициент растяжения пленки.

Граничные условия для температуры будем рассматривать в случае, когда при соприкосновении пленки с барабаном ее температура совпадает с установившейся температурой барабана и равна температуре окружающей среды: $T(0) = T_1$, $T(l) = T_0$. Здесь T_1 — температура расплава на выходе из экструдера.

Два дополнительных условия для напряжений можно получить при расчете движения полимерной жидкости в головке экструдера. Для того чтобы оценить напряжения a_{22} и a_{33} , используем результаты работы [7], в которой получены формулы для расчета плоскопараллельного течения под действием постоянного перепада давления $\bar{A} = (\tau_0/\eta_0) \partial p / \partial x$:

$$a_{yy} = -\frac{\beta}{12} \bar{A}^2 (h - 2y)^2, \quad u(y) = \frac{\bar{A}}{2\tau_0} y(h - y).$$

Из этих выражений находим средние значения напряжений и скорости

$$\bar{a}_{yy} = \frac{1}{R} \int_0^h a_{yy}(y) dy = -\frac{\beta}{36} \bar{A}^2 h^2, \quad \bar{u} = \frac{1}{R} \int_0^h u(y) dy = -\frac{\bar{A} h^2}{12}.$$

Следовательно,

$$\bar{a}_{yy} = -\frac{4\beta}{h^2} \tau_0^2 \bar{u}^2.$$

При оценке a_{22} h — ширина пленки (достаточно большая), поэтому в качестве граничного условия можно выбрать условие $a_{22}(0) = 0$. При оценке a_{33} h — толщина пленки. В этом случае величина a_{33} становится неограниченной, что недопустимо. Это противоречие объясняется тем, что в работе [7] выражения для скорости и напряжений получены с точностью до членов первого порядка по \varkappa и β , поэтому при больших градиентах давления они не верны. В работе [8] найдено предельное значение $a_{yy} = -5/17$, которое следует использовать в качестве граничного условия для $a_{33}(0)$.

При проведении расчетов по модели (7) будем считать, что

$$\eta_0(T) = \eta_0(T_1) \exp \left[\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T+273} - \frac{1}{T_1} \right) \right], \quad \tau_0(T) = \frac{\eta_0(T)}{nk_B(T+273)},$$

где n — число макромолекул в единице объема; k_B — постоянная Больцмана; R — универсальная газовая постоянная; $\Delta H/R$ — энергия активации.

Пусть $0 \leq x \leq l$ (l — расстояние от выхода из экструдера до охлаждающего барабана), V_0 — скорость жидкости на выходе из экструдера, τ_0^* , η_0^* — вычисленные при $T = 150$ °С значения времени релаксации и начальной вязкости соответственно. Тогда можно ввести следующие характерные параметры: число Прандтля $Pr = \eta_0^* C_V / \lambda$, число Нуссельта $Nu = \mu l / \lambda$, число Рейнольдса $Re = \rho V_0 / \eta_0^*$, число Вайсенберга $We = \tau_0^* V_0 / l$ (характеризует отношение времени релаксации жидкости к характерному времени процесса) [12, 13]. С использованием этих параметров систему уравнений (7) можно записать в безразмерном виде

$$\begin{aligned} Pr Re u \frac{dT}{dx} &= \frac{d^2 T}{dx^2} - \frac{2 Nu}{b_0} u^{(1+\alpha)/2} (T - T_0), \\ 423 Re We \frac{du}{dx} &= 3 \frac{d}{dx} \left(\frac{\eta_0}{\tau_0} (a_{11} - a_{33}) \right), \\ u \frac{da_{11}}{dx} - 2 \frac{du}{dx} a_{11} + \frac{1 + (\varkappa - \beta)(a_{11} + a_{22} + a_{33})}{We \tau_0} a_{11} &= \frac{2}{3} \frac{du}{dx} - 3\beta a_{11}^2, \\ u \frac{da_{22}}{dx} + (1 - \alpha) \frac{du}{dx} a_{22} + \frac{1 + (\varkappa - \beta)(a_{11} + a_{22} + a_{33})}{We \tau_0} a_{11} &= -\frac{1 - \alpha}{3} \frac{du}{dx} - 3\beta a_{22}^2, \\ u \frac{da_{33}}{dx} + (1 + \alpha) \frac{du}{dx} a_{33} + \frac{1 + (\varkappa - \beta)(a_{11} + a_{22} + a_{33})}{We \tau_0} a_{11} &= -\frac{1 + \alpha}{3} \frac{du}{dx} - 3\beta a_{33}^2, \end{aligned} \quad (8)$$

где $0 \leq x \leq 1$; b_0 — безразмерная (отнесенная к l) начальная толщина пленки; τ_0 — безразмерное время релаксации; η_0 — безразмерная сдвиговая вязкость. При этом температура измеряется по шкале Цельсия. Этим объясняется появление множителя 423 во втором уравнении системы (8).

На основе модели (8) можно рассчитать зависимости скорости, температуры и напряжений от расстояния до экструдера. Наибольший практический интерес представляет

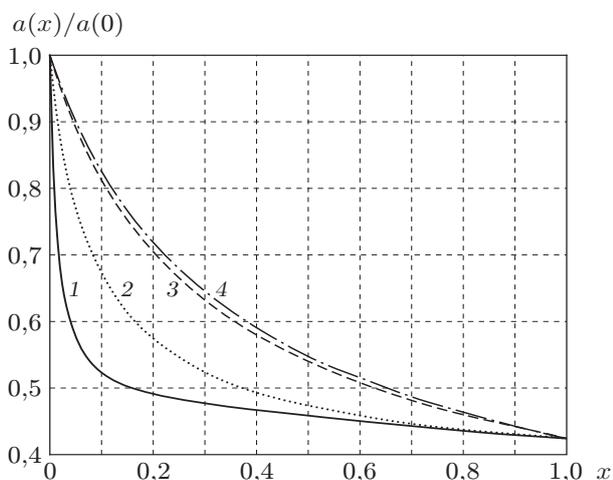


Рис. 1

Рис. 1. Зависимость ширины пленки от координаты x при различных значениях Re :

1 — $Re = 5 \cdot 10^{-6}$; 2 — $Re = 5 \cdot 10^{-5}$; 3 — $Re = 5 \cdot 10^{-4}$; 4 — $Re = 5 \cdot 10^{-3}$

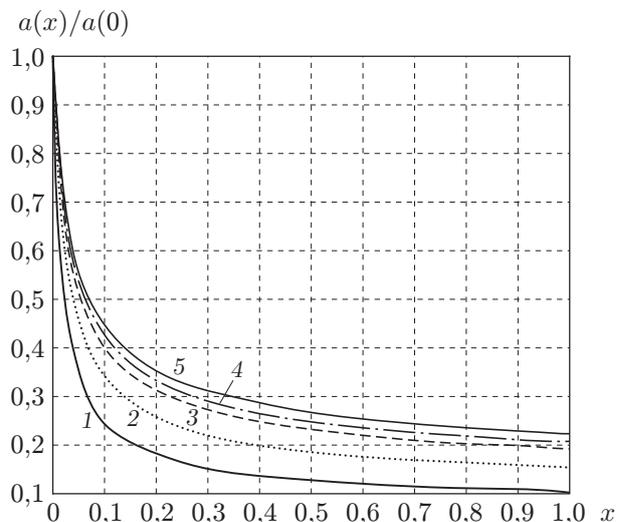


Рис. 2

Рис. 2. Зависимость ширины пленки от координаты x при различных значениях α :

1 — $\alpha = 0,5$; 2 — $\alpha = 0,25$; 3 — $\alpha = 0,1$; 4 — $\alpha = 0,05$; 5 — $\alpha = 0$

изучение зависимости ширины пленки от координаты x . Рассмотрим влияние параметров Pr , Re , Nu на эту зависимость. Заметим, что в модели присутствует также параметр We , однако при изменении этого параметра в интервале $0,001 \div 0,100$ его влияние незначительно.

На рис. 1 представлена зависимость ширины пленки от безразмерной координаты x при различных значениях параметра Re . Видно, что при увеличении значения Re процесс остывания пленки замедляется. Это обуславливает более пологий выход ширины пленки на постоянное значение.

Аналогичная зависимость имеет место при различных значениях числа Прандтля Pr . С увеличением Pr теплообмен с окружающей средой уменьшается, наличие охлаждающего барабана оказывает менее существенное влияние, что приводит к замедлению процесса остывания пленки.

Увеличение числа Нусельта Nu обуславливает более резкое уменьшение ширины пленки, что объясняется более быстрым ее остыванием за счет отдачи тепла в окружающий воздух. В случае уменьшения параметра Nu время остывания пленки уменьшается.

Имеется обратная зависимость температуры от Pr и Re : с увеличением этих параметров пленка остывает быстрее.

Следует отметить, что изменение параметра анизотропии растяжения потока оказывает наиболее существенное воздействие на ширину пленки (рис. 2), причем меньшие значения этого параметра соответствуют большей ширине пленки.

Рассмотрим экспериментальные данные работы [2], в которой исследовалось течение между экструдером и барабаном полиэтилена различного типа. Эксперименты проводились при следующих значениях параметров: $l = 0,14$ м, $b_0 = 0,0005$ м, $a_0 = 0,051$ м, $u_0 = 0,00082$ м/с. При этих значениях параметров, а также при значениях теплопроводности и теплоемкости образцов, приведенных в [13], вычислены безразмерные значения Re ,

Значения параметров задачи для различных полимеров

Полимер	$\eta_0, \text{Па} \cdot \text{с}$ ($T = 150 \text{ }^\circ\text{C}$)	$\Delta H/R,$ Дж	nk_B	α	$\text{Pr} \cdot 10^7$	$\text{Re} \cdot 10^{-5}$	$\text{We} \cdot 10^{-3}$
Exxon Exact3132	15 326	17 159	67,344	0,07	1,53	4,8	3,17
Mobil NTX101	17 813	14 070	62,100	0,15	1,78	4,2	3,90
Dow Affinity PL1880	33 084	18 956	64,722	0,20	3,30	2,2	7,00
Dow Affinity PL1840	33 480	19 475	86,388	0,30	3,35	2,2	5,40

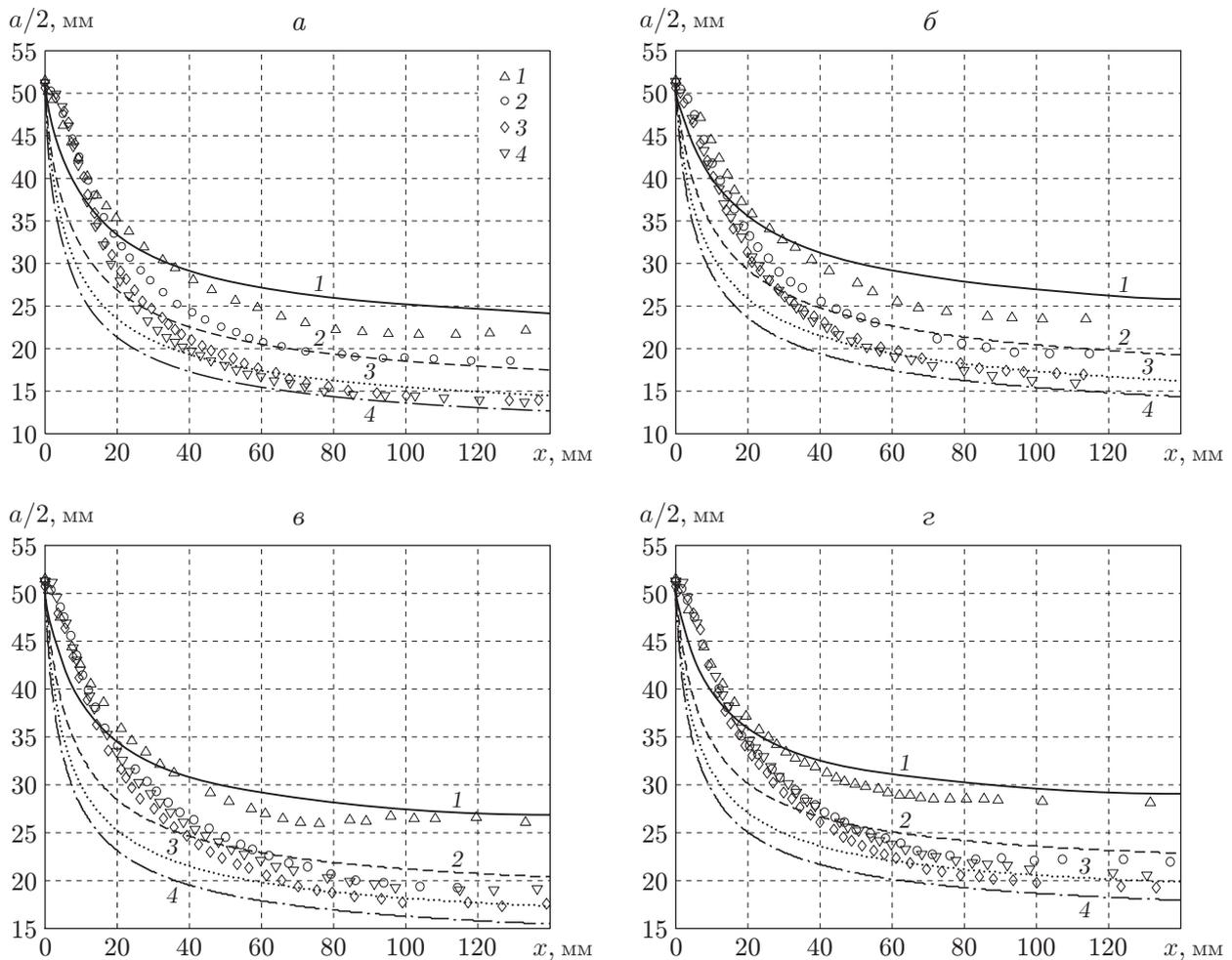


Рис. 3. Расчетные (линии) и экспериментальные (точки) зависимости ширины пленки от расстояния до головки экструдера при различных значениях степени растяжения:

a — образец 1 ($\rho = 900$), *б* — образец 2 ($\rho = 917$), *в* — образец 3 ($\rho = 902$), *г* — образец 4 ($\rho = 909$); 1 — $k = 5$, 2 — $k = 10$, 3 — $k = 15$, 4 — $k = 20$

Pr , We (см. таблицу). Число Нуссельта вычислялось по формуле $Nu = (5T)^{0,25}$ [12]. Параметр α подбирался из условия наилучшего соответствия между расчетными и экспериментальными данными.

Результаты расчетов приведены на рис. 3. Видно, что расчетные зависимости и зависимости, полученные в эксперименте, хорошо согласуются.

Таким образом, в работе исследовано влияние таких параметров модели, как начальная сдвиговая вязкость, начальное время релаксации, температуропроводность, коэффициент теплообмена, коэффициенты наведенной анизотропии и коэффициент анизотропии потока, на зависимости продольной скорости, температуры и компонент тензора напряжений от расстояния до выхода из экструдера. Показано, что модифицированная модель Виноградова — Покровского предсказывает появление “шейки” в процессе формования полимерных пленок. Адекватное описание этого процесса в одномерном приближении возможно только в рамках модели двухосного растяжения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Silagy D., Demay Y., Agassant J. F.** Stationary and stability analysis of the film casting process // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1998. V. 79. P. 563–583.
2. **Seay C. W., Baird D. G.** Sparse long-chain branching's effect on the film-casting behavior of PE // *Intern. Polymer Process.* 2009. Iss. 5. P. 41–49.
3. **Kajiwara T., Yamamura M., Asahina T.** Relationship between neck-in phenomena and rheological properties in film casting // *J. Soc. Rheol.* 2006. V. 34, N 2. P. 97–102.
4. **Ito H., Doi M., Isaki T., et al.** 2D flow analysis of film casting process // *J. Soc. Rheol.* 2003. V. 31, N 3. P. 149–155.
5. **Пышнограй Г. В., Покровский В. Н., Яновский Ю. Г. и др.** Определяющее уравнение нелинейных вязкоупругих (полимерных) сред в нулевом приближении по параметрам молекулярной теории и следствия для сдвига и растяжения // *Докл. АН.* 1994. Т. 339, № 5. С. 612–615.
6. **Pyshnograï G. V., Gusev A. S., Pokrovskii V. N.** Constitutive equations for weakly entangled linear polymers // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2009. V. 163, N 1–3. P. 17–28.
7. **Алтухов Ю. А., Гусев А. С., Макарова М. А., Пышнограй Г. В.** Обобщение закона Пуазейля для плоскопараллельного течения вязкоупругих сред // *Механика композиц. материалов и конструкций.* 2007. Т. 13, № 4. С. 581–590.
8. **Кузнецова Ю. Л., Скульский О. И., Пышнограй Г. В.** Течение нелинейной упруго-вязкой жидкости в плоском канале под действием заданного градиента давления // *Вычисл. механика сплошных сред.* 2010. Т. 3, № 2. С. 55–69.
9. **Виноградов Г. В.** Реология полимеров / Г. В. Виноградов, А. Я. Малкин. М.: Химия, 1977.
10. **Кутателадзе С. С.** Теплопередача и гидродинамическое сопротивление: Справ. пособие. М.: Энергоатомиздат, 1990.
11. **Гусев А. С., Рыбаков А. А., Пышнограй Г. В.** Одномерное приближение в задаче растяжения с учетом теплопереноса в нелинейной теории вязкоупругости линейных полимеров // *Механика композиц. материалов и конструкций.* 2008. Т. 14, № 3. С. 366–372.
12. **Босворт Р. Ч. Л.** Процессы теплового переноса. М.: Гостехтеоретиздат, 1957.
13. **Новиченок Л. Н.** Теплофизические свойства полимеров / Л. Н. Новиченок, З. П. Шульман. Минск: Наука и техника, 1971.