

Неизотермическое течение химически реагирующей композиции в плоском канале

Nonisothermal flow of chemically reacting compound in a flat channel

А.В. БАРАНОВ

A.V. BARANOV

Российский государственный университет нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, г. Москва, Россия
Gubkin Russian State University of Oil and Gas, Moscow, Russia

alexvbaranov@yahoo.co.uk

Исследуется течение и теплообмен неньютоновской химически реагирующей жидкости в плоском канале. Основные допущения при постановке задачи были сделаны на основании низкого значения числа Рейнольдса и высокого значения числа Пекле. В качестве реологической модели используется модель Эллиса с вязкостью, зависящей от температуры, давления и степени химического превращения. Течение сопровождается протеканием химической реакции, что в результате вело к резкому росту вязкости. Это привело, в свою очередь, к включению в математическую модель кинетического уравнения химической реакции. Рассматриваются высоковязкие среды, поэтому в уравнении энергии учитывается диссипативный член. Используются тепловые граничные условия первого рода. Показано значительное влияние различных параметров на скорость образования затвердевшего пристеночного слоя. Задача решена численным методом конечных разностей с использованием итераций.

Ключевые слова: неньютоновская жидкость, теплообмен, полимерная композиция

Consideration is given to the flow and heat transfer of non-Newtonian chemically reacting fluid in a flat channel. Many assumptions were made on the basis of the fact that the flow occurs at low values of the Reynolds number and at a high Peclet number. The Ellis model with a viscosity dependent on temperature, pressure and the degree of chemical transformation was used as the rheological model. The flow is accompanied by a chemical reaction that leads to a sharp increase in viscosity. This, in turn, led to the inclusion of the kinetic equation of a chemical reaction in the mathematical model. A high viscosity medium was investigated. Therefore, dissipative heat emissions are accounted in the energy equation. The problem is solved for temperature first-order boundary conditions. We have shown the substantial influence of different parameters on the rate of growth in the hardened wall layer. The solution was analyzed numerically by the finite difference method according to the iterative scheme.

Keywords: non-Newtonian fluid, heat transfer, polymer compound

DOI: 10.35164/0554-2901-2024-06-30-32

Исследованию процессов неизотермического течения неньютоновских сред в различных каналах посвящены многочисленные публикации, частичный обзор которых приведен [1]. Зачастую в качестве реологической модели использовался степенной закон [2, 3]. Однако степенная модель для псевдопластичной среды имеет существенный недостаток: при малых скоростях сдвига (напряжений сдвига) эта модель дает бесконечно большую вязкость. В этой связи более предпочтительной является реологическая модель Эллиса [4, 5]. Для течения в плоском канале (рис. 1) данная модель записывается следующим образом:

$$\frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{1}{\mu} \left(1 + k |\tau_{xy}|^{m-1} \right) \tau_{xy} \quad (1)$$

где x , y – продольная и поперечная координаты соответственно; v_x – осевая компонента скорости; k , m – реологические константы модели Эллиса; μ – вязкость полимера; τ_{xy} – напряжение сдвига.

При больших скоростях (напряжениях) сдвига она представляет собой степенной закон, а при очень малых скоростях (напряжениях) предсказывает ньютоновское поведение. При этом анализ литературы показал отсутствие работ по описанию течения жидкости Эллиса в неизотермических условиях с переменной, зависящей от температуры, вязкостью. Поэтому в данной работе рассматривается неизотермическое течение высоковязкой неньютоновской среды в плоском канале (рис. 1) с переменной вязкостью. Температура среды T_0 и температура стенок канала T_w не совпадают. При этом считается, что T_w больше, чем T_0 . Это означает, что композиция по мере течения в канале будет прогреваться как от горячих стенок канала, так и за счет диссипации энергии.

Кроме того, течение среды может сопровождаться протеканием химической реакции, как, например, отверждение полимерного

связующего (эпоксидные или полиэфирные смолы). Если процесс течения выходит за пределы индукционного периода, то химические превращения могут привести к резкому росту вязкости. В связи с этим в математическую модель процесса необходимо включить зависимость вязкости не только от температуры, но и от степени превращения.

При постановке задачи сделан ряд общепринятых допущений, подробно описанных [2, 3], основанных на высокой вязкости среды и низкой теплопроводности. Ввиду высокой вязкости среды в уравнении энергии учтены диссипативные тепловыделения. Температура среды на входе однородна по сечению (рис. 1).

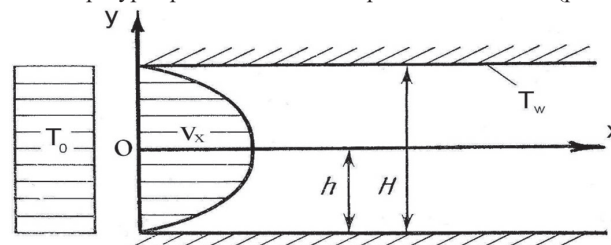


Рис. 1. Схема процесса.

Влияние давления на вязкость полимеров относится к числу важнейших теоретических и технических вопросов. Частичный обзор работ, посвященных данному вопросу, приведен в [6] и [7]. Также можно отметить отсутствие работ, где для модели Эллиса учитывалась бы зависимость вязкости от давления.

Пристеночные слои потока наиболее интенсивно прогреваются от горячих стенок канала и за счет диссипации. Кроме того, эти слои имеют значительно большее время пребывания в канале по сравнению с приосевой зоной. Совокупность этих факторов может

привести к преждевременному началу реакции отверждения реактопластов или вулканизации (подвулканизации) резиновых смесей. Вот почему принимается во внимание, что процесс течения сопровождается протеканием химической реакции, которая может сильно влиять на реологические свойства жидкости и существенно трансформировать профиль скорости.

Таким образом, в безразмерном виде математическая модель представлена следующей системой уравнений:

Уравнение Эллиса

$$\frac{\partial V_x}{\partial Y} = \frac{1}{\bar{\mu}} \left(1 + K |\sigma_{xy}|^{m-1} \right) \sigma_{xy} \quad (2)$$

где

$$Y = y/h, \quad V_x = v_x / \bar{v}_x, \quad \bar{\mu} = \mu / \mu_w, \quad \sigma_{xy} = \frac{\tau_{xy} h}{\mu_w \bar{v}_x}, \quad K = \frac{k \mu_w^{m-1} \bar{v}_x^{m-1}}{h^{m-1}}.$$

Уравнение движения

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial Y} = \frac{dP}{dX} \quad (3)$$

где $P = \frac{ph}{\mu_w \bar{v}_x}$, $X = x/h$, p – давление в канале,

$\bar{v}_x$ – средняя скорость потока; h – полувысота канала.

Уравнение неразрывности для одномерного течения

$$\int_0^1 V_x dY = 1, \quad (4)$$

Уравнение энергии

$$V_x \frac{\partial \theta}{\partial X} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} + \frac{Br}{Pe} \sigma_{xy} \frac{\partial V_x}{\partial Y} \quad (5)$$

где

$$Pe = \frac{\bar{v}_x h}{a}, \quad Br = \frac{\mu_w \bar{v}_x^2}{\lambda (T_w - T_0)}, \quad \theta = \frac{T_w - T}{T_w - T_0},$$

T – температура; λ , a – теплопроводность и температуропроводность соответственно.

Принимается во внимание, что процесс течения сопровождается протеканием химической реакции, которая может сильно влиять на реологические свойства жидкости. Поэтому систему (2)–(5) необходимо дополнить кинетическим уравнением химической реакции. Считается, что химическая реакция проходит в одну стадию и может быть описана с помощью одного параметра – степени превращения:

$$V_x \frac{\partial \beta}{\partial X} = Da(1 - \beta)^r \exp\left(-\frac{\bar{U}}{\theta + \gamma}\right) \quad (6)$$

где $Da = \frac{k_0 h}{\bar{v}_x}$; $\bar{U} = \frac{U}{R(T_0 - T_w)}$; $\gamma = \frac{T_w}{(T_0 - T_w)}$,

β – безразмерная (относительная) степень превращения; r , U – порядок и энергия активации химической реакции; R – универсальная газовая постоянная; k_0 – константа скорости химической реакции.

Уравнение (5) во многих случаях отражает реальную картину процесса и позволяет отказаться от сложных многопараметрических систем кинетических уравнений. Так, например, известно [8, 9], что уравнение (6) описывает реакцию отверждения фенолоформальдегидных смол с порядком реакции $r = 1,42$ и реакции образования полиуретанов с $r = 2$. Также уравнение (6) использовалось для описания кинетики отверждения эпоксидных смол.

В математическую модель необходимо также включить зависимость вязкости от температуры, давления и степени превращения:

$$\bar{\mu} = \exp\left[\psi\theta + b_2 P + \frac{b_3 \beta}{\beta_* - \beta}\right], \quad (7)$$

где $\psi = b_1(T_0 - T_w)$, β_* – степень превращения, при которой среда теряет текучесть; b_1 , b_2 и b_3 – эмпирические константы.

Из (7) видно, что с увеличением β вязкость полимерной композиции монотонно возрастает и стремится к бесконечности при $\beta \rightarrow \beta_*$. Таким образом, не существует четкой границы раздела между твердой и текучей фазами.

Гидродинамические и тепловые граничные условия:

$$Y = 0 \quad \frac{\partial V_x}{\partial Y} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0 \quad (8)$$

$$Y = 1 \quad V_x = V_s, \quad \theta = 0 \quad (9)$$

$$X = 0 \quad \theta = 1 \quad (10)$$

Решение задачи проводилось численно методом конечных разностей по итерационной схеме. При этом величина скорости скольжения на стенке V_s определялась по формуле, полученной в [10].

Если при этом анализ проводить в безразмерном виде, то получаемые результаты будут обладать достаточной общностью и охватывать наиболее широкий круг задач в технологической практике.

Из кинетического уравнения (6) следует, что распределение степени превращения в потоке зависит от трех параметров: числа Дамкеллера Da , безразмерных энергии активации $\bar{U}$ и температуры. Последняя, в свою очередь, как это видно из уравнения энергии (5), определяется числами Пекле Pe и Бринкмана Br . При изменении какого-либо из этих параметров с целью определения его влияния на ход химической реакции остальные параметры будут иметь фиксированные значения.

В первую очередь, для высоковязких композиций важно отметить роль диссипации. Учет диссипативных тепловыделений приводит к более высоким температурам потока и, следовательно, к более быстрому протеканию реакции отверждения (вулканизации). Это проявляется в ускоренном нарастании по длине канала толщины затвердевшего слоя (рис. 2), где $X_L = x/L$.

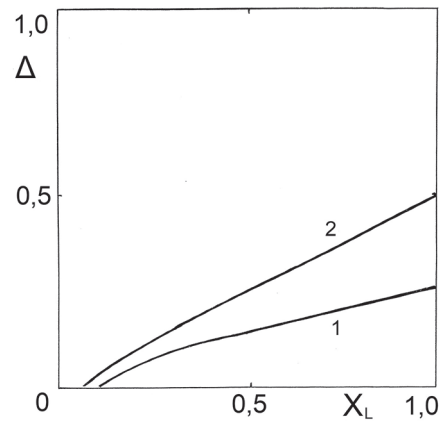


Рис. 2. Развитие затвердевшего слоя по длине канала. $\bar{U} = 10$; $Pe = 10^3$; $Da_0 = 4$; 1. $Br = 0$; 2. $Br = -10$.

Для того, чтобы показать степень влияния диссипации на ход химической реакции при различных значениях $\bar{U}$, были проведены расчеты, представленные на рис. 3. При этом $Da_0 = Da \cdot \exp(-U - \bar{U})$. Показана зависимость толщины затвердевшего пристеночного слоя на выходе из канала Δ_L при достаточно широком варьировании числа Br . Чувствительность скорости химической реакции к температуре определяется величиной $\bar{U}$. Это хорошо видно из рисунка: при увеличении безразмерной энергии активации $\bar{U}$ зависимость Δ_L от Br становится более существенной. Интересно отметить, что $\bar{U} = 7$ является тем предельным значением, ниже которого Δ_L имеет постоянное значение, не зависящее от Br . Это означает, что в области $\bar{U} \leq 7$ влиянием диссипации на ход химической реакции отверждения в канале можно пренебречь.

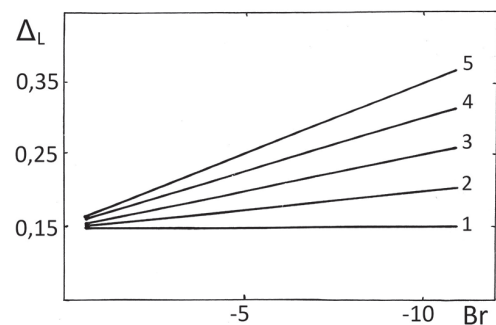


Рис. 3. Влияние числа Br на толщину затвердевшего пристеночного слоя на выходе из канала. $Da_0 = 4$; $Pe = 10^4$. 1. $\bar{U} = 7$; 2. $\bar{U} = 17$; 3. $U = 24$; 4. $U = 30$; 5. $U = 37$.

С целью отдельно отразить влияние числа Дамкеллера на ход реакции отверждения построены графики на рис. 4. Показана весьма существенная зависимость толщины затвердевшего пристеночного слоя от Da , что вполне соответствует тому положению, которое данный критерий занимает в уравнении (6).

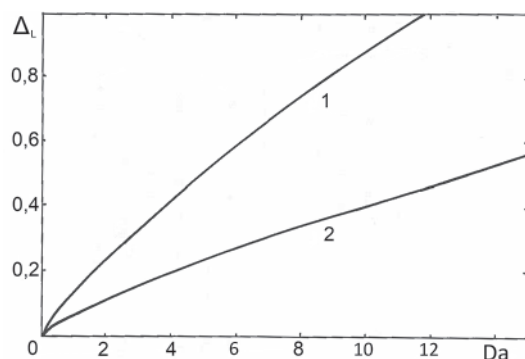


Рис. 4. Влияние критерия Дамкеллера на толщину затвердевшего слоя на выходе из канала. $\bar{U} = 10$, $Br = -10$. 1 – $Pe = 10^3$; 2 – $Pe = 10^4$.

Заключение

Таким образом, в работе впервые поставлена и решена задача о неизоэтермическом течении неньютоновской полимерной среды в плоском канале на основе реологической модели Эллиса. Использование данной модели позволяет получить в явном виде выражение для профиля скорости. При этом учитывались диссипативные тепловыделения, а также зависимость вязкости от температуры, давления и степени химического превращения. Показано существенное влияние различных безразмерных параметров на скорость нарастания затвердевшего пристеночного слоя, что, в свою очередь, приводит к существенной трансформации профиля скорости.

Литература

1. Баранов А.В. Неизоэтермическое течение реологически сложных сред в условиях химических превращений. – *Механика композиционных материалов и конструкций*. 2010. Т.16, №3. С. 384–399.

2. Баранов А.В., Юницкий С.А. Влияние диссипации на формирование композитных изделий в закрытых формах. – *Пластические массы*, 2017, №7–8. С. 380–386.
3. Баранов А.В., Юницкий С.А. Влияние диссипации на теплообмен при течении неньютоновской жидкости в пористом канале. – *Инженерно-физический журнал*. 2017. Т. 90, №4. С. 1052–1058.
4. Steller R.T. Generalized slit flow of an Ellis fluid. – *Polym. Eng. Sci.* 2001. V. 41, N11. P. 1859–1870.
5. Ali N., Khan M.W.S. The Graetz problem for the Ellis fluid model. *Zeitschrift fur Naturforschung A*. 2018. N10. P. 1–10.
6. Баранов А.В., Анисимова Н.А. Реологические особенности полимерных композиций в процессах переработки. – *Механика композиционных материалов и конструкций*. 2008. Т. 14, №2. С. 188–206.
7. Баранов А.В. Влияние температуры и давления на течение вязкоупругой жидкости в плоском канале. *Инженерно-физический журнал*. 2020. Т. 93, №5. С. 1342–1348.
8. Леонов А.И., Басов Н.И., Казанков Ю.В. Основы переработки реактопластов и резин методом литья под давлением. М.: Химия, 1977. 216 с.
9. Малкин А.Я., Куличихин С.Г. Реология в процессах образования и превращения полимеров. М.: Химия, 1985. – 240 с.
10. Malkin A.Ya., Baranov A.V., Vickulenkova M.E. Experimental estimation of wall slip for filled rubber compounds. *Rheologica Acta*. 1993. V. 32, N2. P. 150–155.