

Математическая модель неизоотермического формования вязкоупругой полимерной пленки

Mathematical model of non-isothermal viscoelastic polymer film molding

А.В. БАРАНОВ

A.V. BARANOV

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия
Gubkin Russian State University of Oil and Gas, Moscow, Russia
alexvbaranov@yahoo.co.uk

Рассматривается установившийся неизоотермический процесс формования вязкоупругой плоской полимерной пленки. Расплав полимера продавливается через плоскощелевую головку экструдера, подвергается одноосному растяжению и одновременно охлаждению на воздухе, затем поступает на приемно-охлаждающий валок. Предполагается, что пленка достаточно широкая и расстояние между головкой экструдера и приемным валком минимально до такой степени, что можно пренебречь изменением ширины полотна в процессе продольной вытяжки. Считается также, что силами тяжести, инерции и поверхностным натяжением можно пренебречь. С реологической точки зрения расплав полимера представляет собой вязкоупругую жидкость. Используется верхняя конвективная модель Максвелла. Теплофизические свойства, вязкость и время релаксации считаются зависящими от температуры и степени кристалличности. Математическая модель дополняется уравнениями теплового баланса и кинетики неизоотермической кристаллизации. Задача решена численно методом конечных разностей.

Ключевые слова: вязкоупругая жидкость, формование пленок, теплообмен, кристаллизация

The steady-state non-isothermal process of forming a viscoelastic flat polymer film is considered. The polymer melt is extruded through a flat die subjected to uniaxial stretching and simultaneous air cooling, and then finally cooled down on a chill roll. It is assumed that the film is wide enough and the distance between the extruder head and the chill roll is small to such an extent that the change in the film width during the longitudinal stretching can be neglected. It is also assumed that the forces of gravity, inertia and surface tension can be neglected. Rheologically, the polymer melt is a viscoelastic liquid. The Upper Convected Maxwell model is used. Thermophysical properties, viscosity and relaxation time are considered to be dependent on temperature and degree of crystallinity. The mathematical model is supplemented by equations of heat balance and kinetics of non-isothermal crystallization. The problem is solved numerically using the finite difference method.

Keywords: viscoelastic fluid, film casting, heat transfer

DOI: 10.35164/0554-2901-2026-01-34-36

Массовое производство полимерных пленок занимает одно из важнейших мест в процессах переработки полимеров. В результате в отечественной и мировой литературе появилось достаточно большое количество работ, посвященных математическому моделированию процессов формования, теплообмена и кристаллизации при производстве различных пленок. Достаточно подробный обзор работ, посвященных данной теме, появившихся в мировой литературе, приведен в [1]. В данном обзоре отражены публикации, в которых использовались различные реологические модели и рассматривались как изотермические, так и неизоотермические условия формования. Из указанного обзора стало очевидно, что в литературе существует недостаточное число работ, посвященных разработке несложных математических моделей неизоотермического формования вязкоупругой пленки с переменными физическими свойствами. Поэтому в представленной работе предпринята попытка разработать относительно несложную для инженерных приложений модель, учитывающую зависимость теплофизических свойств, вязкости и времени релаксации от температуры и степени кристалличности.

Рассматривается установившийся неизоотермический процесс формования вязкоупругой плоской полимерной пленки. Расплав полимера продавливается через плоскощелевую головку экструдера, подвергается одноосному растяжению и одновременно охлаждению на воздухе, затем поступает на приемно-охлаждающий валок (рис. 1). Предполагается, что пленка достаточно широкая и расстояние между головкой экструдера и приемным валком минимально до такой степени, что можно пренебречь изменением ширины полотна в процессе продольной вытяжки. Считается также, что силами тяжести, инерции и поверхностным напряжением можно пренебречь. С реологической точки зрения расплав полимера

считается вязкоупругой жидкостью, у которой вязкость зависит от температуры, а время релаксации зависит от температуры и степени кристалличности.

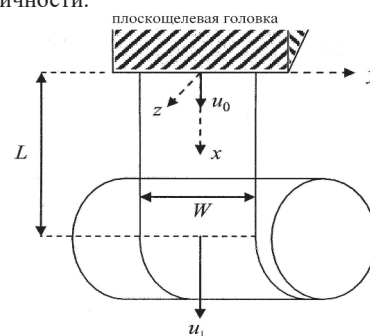


Рис. 1. Схема процесса.

В данной работе вязкоупругие реологические свойства описываются верхнеконвективной моделью Максвелла (ВКМ):

$$\tau + \lambda \left(\frac{\partial \tau}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \tau - \nabla \vec{v}^T \cdot \tau - \tau \cdot \nabla \vec{v} \right) = \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T), \quad (1)$$

где τ – экстратензор напряжений, λ – время релаксации, \vec{v} – вектор скорости, μ – вязкость при нулевой скорости сдвига. Поставленная задача решается для неизоотермического случая, когда вязкость и время релаксации считаются зависящими от температуры и степени кристалличности [2]:

$$\mu = \mu_0 \exp \left[\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) + s_1 \beta \right]; \quad \lambda = \lambda_0 \exp \left[\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) + s_2 \beta \right], \quad (2)$$

где T – температура полимера, T_0 – температура расплава на выходе из плоскощелевой головки, μ_0 , λ_0 – вязкость и время релаксации при температуре T_0 , E – энергия активации, R – газовая постоянная, β – безразмерная (относительная) степень кристалличности.

Верхнеконвективная модель Максвелла (ВКМ) может рассматриваться как частный случай реологических моделей Гисекуса и Ван-Тьен-Таннера, которые в последние 30 лет стали особенно популярны в работах по описанию процессов переработки полимеров. Однако при разумно ограниченных скоростях деформации, что часто имеет место в технологической практике, модель ВКМ широко используется при моделировании различных видов течения.

Для данного вида формования плоской пленки реологическая модель (1) в упрощенной форме примет вид:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} - 2\lambda\tau_{xx}\dot{u} &= 2\mu\dot{u} \\ \tau_{zz} + 2\lambda\tau_{zz}\dot{u} &= -2\mu\dot{u}, \end{aligned} \quad (3)$$

где u – скорость в продольном направлении; $\dot{u} = \frac{du}{dx}$; τ_{xx} , τ_{zz} – компоненты экстра тензора напряжений в направлении соответствующих координатных осей.

Из (3) нетрудно получить выражение для первой разности напряжений, которая в дальнейшем используется в математической модели:

$$\tau_{xx} - \tau_{zz} = \frac{4\mu\dot{u}}{1 - 4\lambda^2\dot{u}^2} \quad (4)$$

При постановке задачи, как уже отмечалось, пренебрегают инерционными силами и поверхностным напряжением. В этом случае математическая модель данного процесса состоит из следующей системы уравнений [1, 3]:

$$hWu = Q = const \quad (5)$$

$$W \frac{d}{dx} [(\tau_{xx} - \tau_{zz})h] = \frac{dF}{dx} = 0, \quad (6)$$

где F – постоянное растягивающее усилие на приемном валке; W – ширина полотна; h – толщина пленки; Q – объемный расход полимера, $Q = h_0Wu_0$; h_0 , u_0 – толщина пленки и скорость потока на выходе из плоскощелевой головки.

Используя уравнение неразрывности (5), уравнение движения (6) можно представить в следующем виде:

$$Q \frac{d}{dx} \left(\frac{\tau_{xx} - \tau_{zz}}{u} \right) = \frac{dF}{dx} = 0 \quad (7)$$

Ввиду неизотермичности процесса математическую модель необходимо дополнить уравнением теплового баланса [3]:

$$\rho c_p h u \frac{dT}{dx} = 2\alpha(T_a - T) + 2k\varepsilon(T_a^4 - T^4) + \rho q \frac{d\beta}{dt}, \quad (8)$$

где ρ , c_p – плотность и теплоемкость полимера; T_a – температура окружающего воздуха; α – коэффициент теплоотдачи; k – постоянная Стефана-Больцмана; q – удельная теплота кристаллизации; ε – коэффициент излучения.

Уравнение теплового баланса записано в предположении, что диссипативными тепловыделениями и осевой теплопроводностью можно пренебречь. В отличие от [1, 3], теплофизические свойства полимера считаются зависящими от температуры и степени кристалличности. При описании этих зависимостей используется двухфазная модель и линейная зависимость от T и β . Это хорошо согласуется с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными [5]:

$$\rho = [\rho_0 + \gamma_1(T - T_0)](1 - \beta) + [\rho_a + \gamma_2(T - T_a)]\beta \quad (9)$$

$$c_p = [c_{p0} + \gamma_3(T - T_0)](1 - \beta) + [c_{pa} + \gamma_4(T - T_a)]\beta,$$

где γ_i – эмпирические константы.

Температура расплава однородна по толщине пленки и зависит только от продольной координаты.

Представленную математическую модель необходимо дополнить уравнением кинетики неизотермической кристаллизации. Вычисление относительной степени кристалличности β с любой температурно-временной предысторией $T(t)$ осуществлялось в предположении так называемых изокинетических условий, когда временные зависимости скорости роста кристаллических образований и скорости образования активных центров являются подобными функциями [1–4]:

$$\ln(1 - \beta) = - \left(\int_t^t K^n(T(t)) \tau^n dt \right) \quad (10)$$

Уравнение (10) является одним из самых простых уравнений для неизотермической кристаллизации. При этом (10) не требует про-

ведения обширных экспериментов для определения многочисленных эмпирических констант. Функция $K(T)$, являющаяся обратной полупериоду кристаллизации, определялась следующим выражением [1–4]:

$$K(T) = K_0 \exp \left(- \frac{aT}{T - T_g + b} - \frac{cT_m}{T(T_m - T)} \right), \quad (11)$$

где T_g , T_m – температура стеклования и плавления полимера соответственно, a , b , c – эмпирические константы.

В данной постановке задачи граничные условия выглядят следующим образом:

$$x = 0, u = u_0, h = h_0, T = T_0 \quad (12)$$

$$x = L, u = u_1, h = h_1 \quad (13)$$

Задача решалась по итерационной схеме численно методом конечных разностей. Изначально на нулевом шаге итерации использовались распределение скорости и толщины пленки для ньютоновской жидкости в изотермических условиях. Это решение известно [6]:

$$\bar{u}(x) = u_0 \left(\frac{x}{L} \right)^{\frac{x}{L}}; \quad \bar{h}(x) = h_0 \left(\frac{u_0}{u_1} \right)^{\frac{x}{L}}$$

Как и во многих работах, посвященных данной задаче, растягивающее усилие F высчитывалось таким образом, чтобы удовлетворялось граничное условие $u = u_1$ при $x = L$.

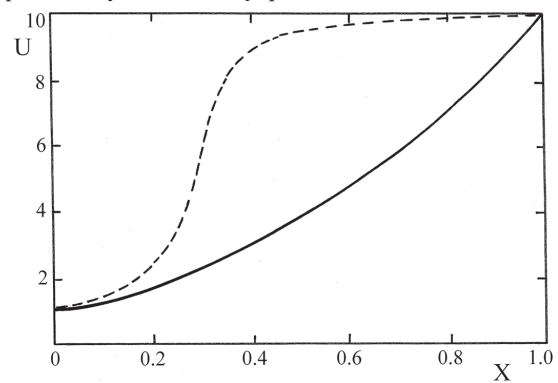


Рис. 2. Зависимость скорости от продольной координаты при $Wi_1 = 0,03$. Сплошная линия: $q = 0, s_1 = 0, s_2 = 0$; пунктирная линия: $q = 170$ Вт/кг, $s_1 = 5, s_2 = 1$.

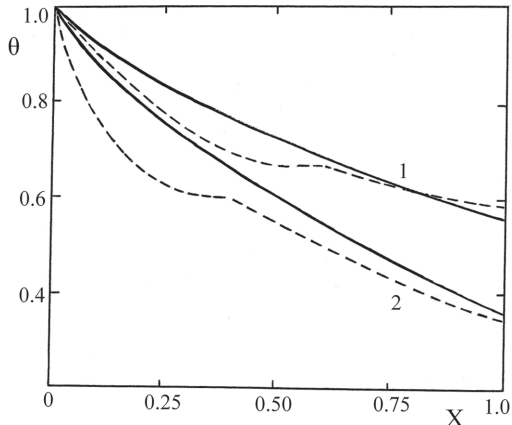


Рис. 3. Зависимость безразмерной температуры пленки от продольной координаты: 1. $u_1/u_0 = 10, \alpha = 20$ Вт/(м²·К); 2. $u_1/u_0 = 20, \alpha = 30$ Вт/(м²·К). Сплошная линия: $q = 0, s_1 = 0, s_2 = 0$; пунктирная линия: $q = 170$ Вт/кг, $s_1 = 5, s_2 = 1$.

Ниже представлены некоторые результаты расчетов, произведенные в безразмерном виде. Была предпринята попытка отразить влияние теплоты кристаллизации, а также зависимости реологических свойств от степени кристалличности на процесс формования плоской пленки. Как видно из рис. 2 и 3, учет процесса кристаллизации с его тепловыделением и влиянием на реологические свойства полимера может привести к качественной трансформации кривых.

На рис. 2 показано изменение безразмерной скорости $U = u/u_0$ вдоль безразмерной продольной координаты $X = x/L$ при фиксированном значении числа Вайсенберга

$$Wi = \frac{\lambda u_0}{L}$$

(во многих работах называемого также числом Деборы). Тепловыделение от кристаллизации повышает температуру пленки, что

вызывает заметное изменение реологических свойств полимера. В результате на некотором расстоянии от головки экструдера скорость резко возрастает, а на последнем участке формования и скорость, и толщина пленки уже практически не меняются.

На рис. 3 показано изменение безразмерной температуры пленки

$$\theta = \frac{T - T_a}{T_0 - T_a}$$

от безразмерной продольной координаты $X = x/L$ при различных условиях вытяжки и охлаждения. Здесь также следует подчеркнуть, что в случае учета процесса кристаллизации пленки с включением в уравнение энергии удельной теплоты кристаллизации распределение температуры существенно меняется. Это наглядно видно из рис. 3 путем сравнения соответствующих кривых.

Литература

1. Баранов А.В. Неизотермическое формование вязкоупругой полимерной пленки // Пластические массы. 2019. №5–6. С. 27–29. <https://doi.org/10.35164/0554-2901-2019-5-6-27-29>.
2. Баранов А.В., Тябин Н.В., Герасименко В.А. Математическое описание реодинамики и теплообмена при формовании рукавной пленки раздувом // Инженерно-физический журнал. 1988. Т. 54, №6. С. 956–962.
3. Баранов А.В. Неизотермическая кристаллизация при формовании вязкоупругой полимерной пленки // Пластические массы. 2020. №11–12. С. 33–35. DOI: 10.35164/0554-2901-2020-11-12-33-35.
4. Зябицкий А. Теоретические основы формования волокон. М.: Химия. 1979. 503 с.
5. Баранов А.В., Дахин О.Х., Ляпков А.В., Тябин Н.В. Математическое моделирование процесса формования плоской полимерной пленки // Инженерно-физический журнал. 1990. Т. 53, №5. С. 862–866.
6. Demay Y., Agassant J.F. An overview of molten polymer drawing instabilities // Int. Polymer Processing. 2014. V. 29, N1. P. 128–139. DOI: 10.3139/217.2832.