

К ТЕОРИИ ФОРМОВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

Г.В. Пышнограй, А.А. Рыбаков, И.В. Третьяков

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

Аннотация. На основе решения системы уравнений описывающих установившееся течение полимерного расплава в одномерном приближении получены распределение скорости, температуры и напряжений, возникающих при формировании пленок, что позволило рассчитать ширину пленки на различных расстояниях до выхода из экструдера и сравнить полученные результаты с экспериментальными данными.

Ключевые слова: полимерная пленка, реологическая модель, теплообмен.

В данной работе рассмотрена задача математического моделирования процесса изготовления полимерной пленки, схематическое изображение которого представлено согласно [1–3] на рис. 1, где изображен экструдер, через который продавливается полимерный расплав. Далее, после выхода, полученная пленка попадает на охлаждающий барабан. В результате движения пленки от экструдера до барабана происходит охлаждение материала, изменение его ширины и толщины. При этом пленка растягивается неравномерно, что приводит к появлению «эффекта шейки». Так как все эти процессы происходят одновременно, то при их математическом моделировании необходимо совместное решение уравнений для скорости, напряжений и теплопереноса. В работе для нахождения установившихся напряжений при растяжении была использована обобщенная реологическая модель Виноградова-Покровского, параметры которой являются известными функциями температуры. При тепловом расчете учитывалось, что толщина пленки достаточно мала и поэтому можно предполагать, что температура по толщине пленки постоянна.

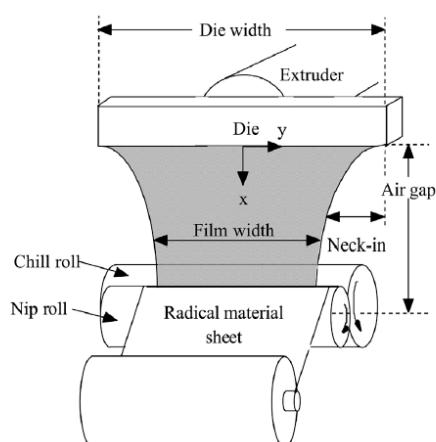


Рис. 1. Схематическое изображение технологического процесса изготовления

полимерной пленки [1-3].

Для решения задачи растяжения и охлаждения пленки после выхода из экструдера будем использовать реологическое определяющее соотношение [4]:

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= -p\delta_{ik} + 3\frac{\eta_0}{\tau_0}a_{ik}; \\ \frac{d}{dt}a_{ik} - v_{ij}a_{jk} - v_{kj}a_{ji} + \frac{1+(\kappa-\beta)I}{\tau_0}a_{ik} &= \frac{2}{3}\gamma_{ik} - 3\frac{\beta}{\tau_0}a_{ij}a_{jk}, \end{aligned} \quad (1)$$

где σ_{ik} – тензор напряжений; p – гидростатическое давление; η_0 и τ_0 – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации; v_{ik} – тензор градиентов скорости; a_{ik} – симметричный тензор анизотропии второго ранга; $I=a_{jj}$ – первый инвариант тензора анизотропии; $\gamma_{ik} = \frac{1}{2}(v_{ik} + v_{ki})$ – симметризованный тензор градиентов скорости; κ, β – феноменологические параметры модели, учитывающие в уравнениях динамики макромолекулы размеры и форму молекулярного клубка.

Тогда в декартовых координатах система уравнений динамики имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} &= 0, \\ \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) &= \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z}, \\ \rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) &= \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial z}, \\ \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) &= \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z}, \end{aligned} \quad (2)$$

где v_x, v_y, v_z – скорости вдоль осей Ox, Oy и Oz соответственно; ρ – плотность. В неизотермическом случае система (1, 2) должна быть дополнена уравнением переноса энергии [5, 6]:

$$\begin{aligned} \rho C_V \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) &= \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \mu(T - T_0), \end{aligned} \quad (3)$$

где C_V – удельная теплоемкость при постоянном объеме; T – температура пленки, T_0 – температура окружающей среды, λ – коэффициент теплопроводности; μ – коэффициент теплообмена. Последнее слагаемое в (3) учитывает охлаждение пленки через ее поверхность. Отметим, что в (3) не учитывается диссипативная функция, характеризующая поток тепла, возникающий при ненулевых градиентах скорости.

Рассмотрим решение стационарной задачи, когда в неподвижной системе координат нет величин зависящих от времени. Начало координат поместим в середине выходного отверстия, ось Ox направим вдоль движения пленки и будем искать зависящее только от переменной x решение системы (1-3)

$$v_x = v_x(x), \quad (4)$$

$$T = T(x). \quad (5)$$

Согласно [6] тензор напряжений в случае одноосного растяжения имеет вид:

$$\sigma_{ik} = \begin{pmatrix} \sigma_0(x) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

и для растягивающего напряжения $\sigma_0(x)$ можно записать соотношение

$$\sigma_0 = 3 \frac{\eta_0}{\tau_0} (a_{11} - a_{22}) = \lambda_{el} \left(\frac{dv_x}{dx} \right) \frac{dv_x}{dx}, \quad (7)$$

где $\lambda_{el} \left(\frac{dv_x}{dx} \right)$ – вязкость при удлинении, зависящая от градиента скорости. Эту зависимость можно определить численно [7].

Полагая скорости вдоль осей y и z в виде

$$v_y = yv'_y(x), \quad (8)$$

$$v_z = zv'_z(x), \quad (9)$$

получаем:

- из уравнений (3, 5):

$$\rho C_v \left(v_x \frac{dT}{dx} \right) = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \mu(T - T_0),$$

$$\rho C_v v_x \frac{dT}{dx} = \lambda \frac{d^2 T}{dx^2} - \mu(T - T_0), \quad (10)$$

- из уравнений (2, 4, 7, 8):

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} (yv'_y(x)) + \frac{\partial}{\partial z} (zv'_z(x)) = 0,$$

$$\frac{dv_x}{dx} + v'_y + v'_z = 0, \quad (11)$$

- из уравнений (2, 4, 6):

$$\rho v_x \frac{dv_x}{dx} = \frac{d\sigma_{11}}{dx},$$

$$\rho v_x \frac{dv_x}{dx} = \frac{d\sigma_0}{dx}, \quad (12)$$

- из уравнений (2, 6, 8):

$$\rho(v_x y \frac{dv'_y}{dx} + y v'_y v'_y) = 0,$$

$$\rho v_x \frac{dv'_y}{dx} + \rho (v'_y)^2 = 0, \quad (13)$$

- из уравнений (2, 6, 9):

$$\rho(v_x z \frac{dv'_z}{dx} + z v'_z v'_z) = 0,$$

$$\rho v_x \frac{dv'_z}{dx} + \rho (v'_z)^2 = 0, \quad (14)$$

Таким образом, из (7, 10-14) получаем систему уравнений для скорости растяжения и температуры:

$$\rho v_x \frac{dv_x}{dx} = 3 \frac{d}{dx} \left(\frac{\eta_0}{\tau_0} (a_{11} - a_{22}) \right), \quad \rho C_V v_x \frac{dT}{dx} = \lambda \frac{d^2 T}{dx^2} - \mu (T - T_0), \quad (16)$$

которая может быть решена численно для значений x на отрезке от 0 до l .

Эти уравнения необходимо дополнить граничными условиями для скорости и температуры. В случае v_x эти условия имеют вид: $v_x(0) = v_0$; $v_x(l) = kv_0$, где k - коэффициент растяжения пленки.

Для температуры будем рассматривать граничные условия в случае, когда температура пленки при соприкосновении с барабаном 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.

Один из вопросов, возникающих при численном решении какой-либо практически интересной задачи, это необходимость охватить целый класс физических явлений, при решении конкретно поставленной задачи. Кроме того, при вычислениях необходимо следить за тем, чтобы значения физической величины не выходили за пределы, допустимые для вычислительной машины. Также важным вопросом является выбор системы единиц, в которой будут измеряться все физические величины. Обойти все вышеперечисленные трудности позволяет так называемое обезразмеривание задачи, т.е. приведение системы уравнений, граничных условий и т.д. к безразмерному виду. Для этого каждую функцию, фигурирующую в формулировке задачи, представляют следующим образом:

$$f = f_m \bar{f},$$

где \bar{f} - безразмерная функция, а f_m - некоторый постоянный размерный множитель, представляющий характерный масштаб для измерения величины f . Часто в качестве масштабных множителей выбирают параметры, непосредственно входящие в условия задачи.

Пусть все функции входящие в нашу систему уравнения (16) обезразмерены следующим образом:

$$v_x = v_m \bar{v}, \quad (17)$$

$$x = x_m \bar{x}, \quad (18)$$

$$T = T_m \bar{T}, \quad (19)$$

$$\eta = \eta_m \bar{\eta}, \quad (20)$$

Тогда, в результате преобразований:

$$\begin{cases} \frac{v_m^2 \bar{v}}{x_m} \frac{d\bar{v}}{dx} = 3 \frac{\eta_0^m v_m}{x_m^2 \rho} \frac{d}{dx} \left(\bar{\eta}_0 \frac{d\bar{v}}{dx} \right), \\ \frac{v_m T_m}{x_m} \bar{v} \frac{d\bar{T}}{dx} = a^2 \frac{T_m}{x_m^2} \frac{d^2 \bar{T}}{dx^2} - \frac{\mu}{\rho C_v} T_m (\bar{T} - \bar{T}_0), \\ \frac{-d\bar{v}}{v \frac{d\bar{v}}{dx}} = 3 \frac{\eta_0^m v_m}{x_m^2 \rho} \frac{x_m}{v_m^2} \frac{d}{dx} \left(\bar{\eta}_0 \frac{d\bar{v}}{dx} \right), \\ \frac{-d\bar{T}}{v \frac{d\bar{T}}{dx}} = a \frac{T_m}{x_m^2} \frac{x_m}{v_m T_m} \frac{d^2 \bar{T}}{dx^2} - \frac{\mu T_m}{\rho C_v} (\bar{T} - \bar{T}_0), \end{cases}$$

система уравнений (16) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{-d\bar{v}}{v \frac{d\bar{v}}{dx}} = 3 \frac{\eta_0^m}{x_m \rho v_m} \frac{d}{dx} \left(\bar{\eta}_0 \frac{d\bar{v}}{dx} \right), \\ \frac{-d\bar{T}}{v \frac{d\bar{T}}{dx}} = \frac{a}{x_m v_m} \frac{d^2 \bar{T}}{dx^2} - \frac{\mu T_m}{\rho C_v} (\bar{T} - \bar{T}_0), \end{cases} \quad (21)$$

где $a = \frac{\lambda}{\rho C_v}$ - коэффициент температуропроводности.

Сделаем следующую замену:

$$Re = \frac{\eta_0^m}{x_m \rho v_m}; F_0 = \frac{a}{x_m v_m}; Pe = \frac{\mu T_m}{\rho C_v}. \quad (22)$$

Окончательный вид системы уравнений (21) с учетом замены (22):

$$\begin{cases} \frac{-d\bar{v}}{v \frac{d\bar{v}}{dx}} = 3 Re \frac{d}{dx} \left(\bar{\eta}_0 \frac{d\bar{v}}{dx} \right), \\ \frac{-d\bar{T}}{v \frac{d\bar{T}}{dx}} = F_0 \frac{d^2 \bar{T}}{dx^2} - Pe (\bar{T} - \bar{T}_0), \end{cases} \quad (23)$$

В результате удалось произвести обезразмеривание системы уравнений (16), при этом, не изменив самого вида уравнений. Это позволит, говорить об универсальности программы, составленной для расчета, так что с ее помощью становится возможным численное исследование задач различных классов.

Зависимость ширины получающейся пленки от расстояния до выхода из экструдера рассчитывается по формуле:

$$a = a_0 \left(\frac{v}{v_0} \right)^{\frac{1-\alpha}{2}}, \quad (24)$$

где a_0 – ширина пленки на выходе из экструдера, α - параметра, который характеризует анизотропию растяжения.

В работе [2] данные были получены в результате эксперимента над полимером Exxon Exact 3132. Соответственно для теоретических расчетов будем брать характеристики данного материала.

$$\rho = 0.9 \text{ г/см}^3, \mu_0 = 353778 e^{-0.209T(x)} \text{ Па}\cdot\text{с}, C_v = 1 \text{ Дж / (г}\cdot\text{К)}, \alpha = 0.07.$$

Расстояние от экструдера до барабана составляет $l = 140$ мм. Ширина пленки на выходе из экструдера составляет $a_0 = 52$ мм.

Сравнение с экспериментальными данными приведено на рисунках 2-5, из которых видно хорошее соответствие теоретических кривых и значений, полученных в ходе эксперимента.

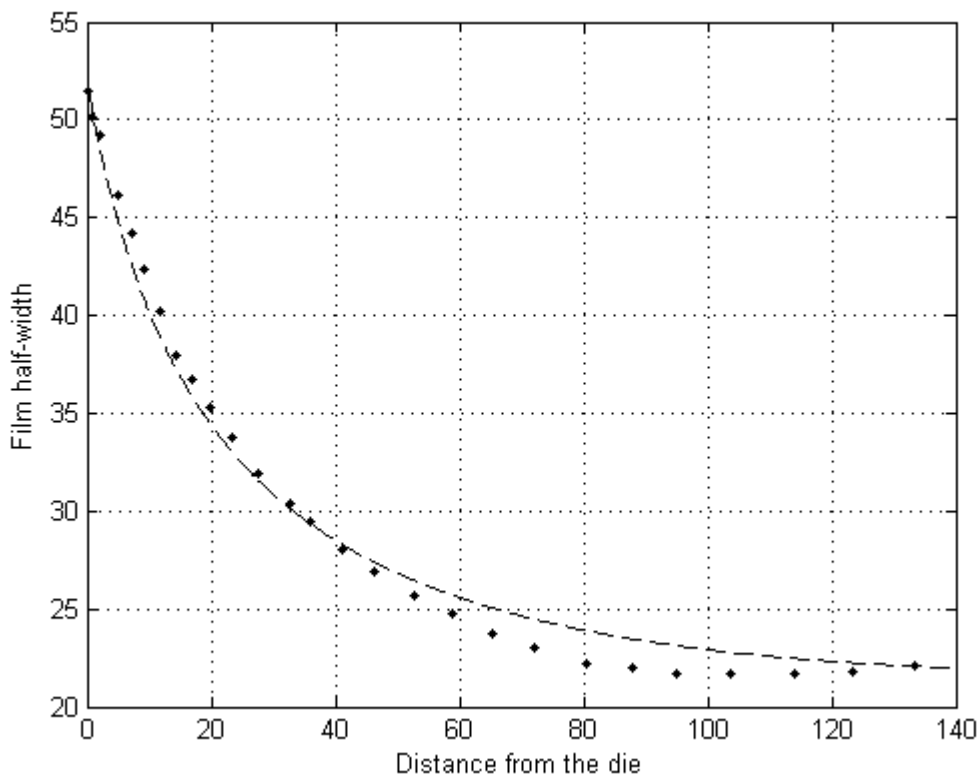


Рис. 2. Форма кромки пленки ($v(0) = 1$; $v(l) = 5$; $\mu = 0.01$; $\lambda = 500$)

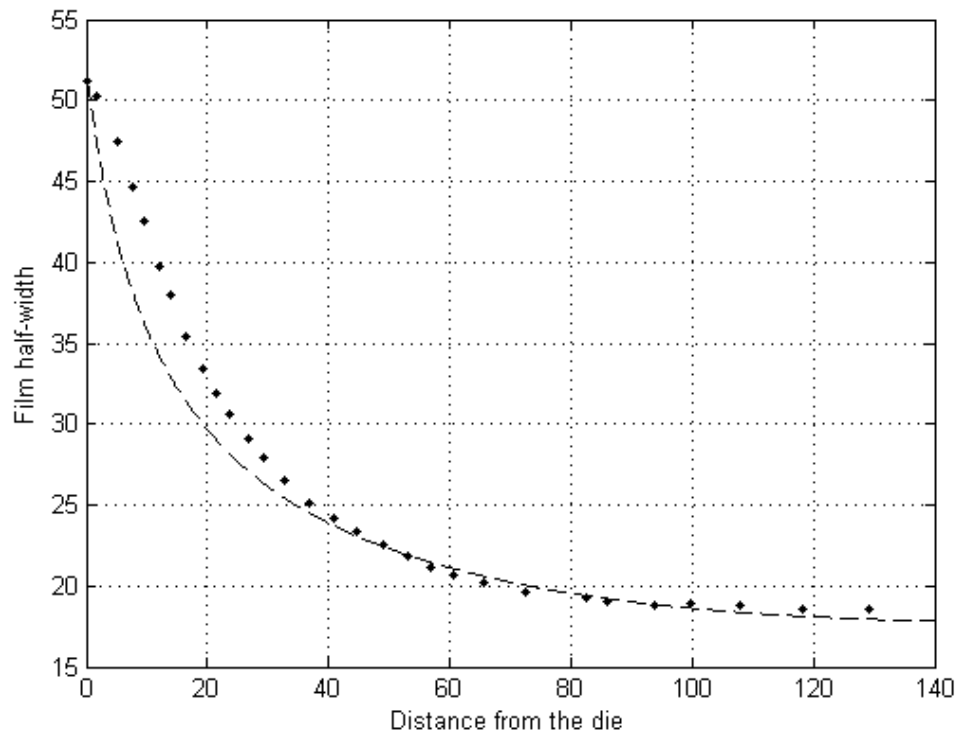


Рис. 3. Форма кромки пленки ($v(0) = 1$; $v(1) = 10$; $\mu = 0.01$; $\lambda = 500$)

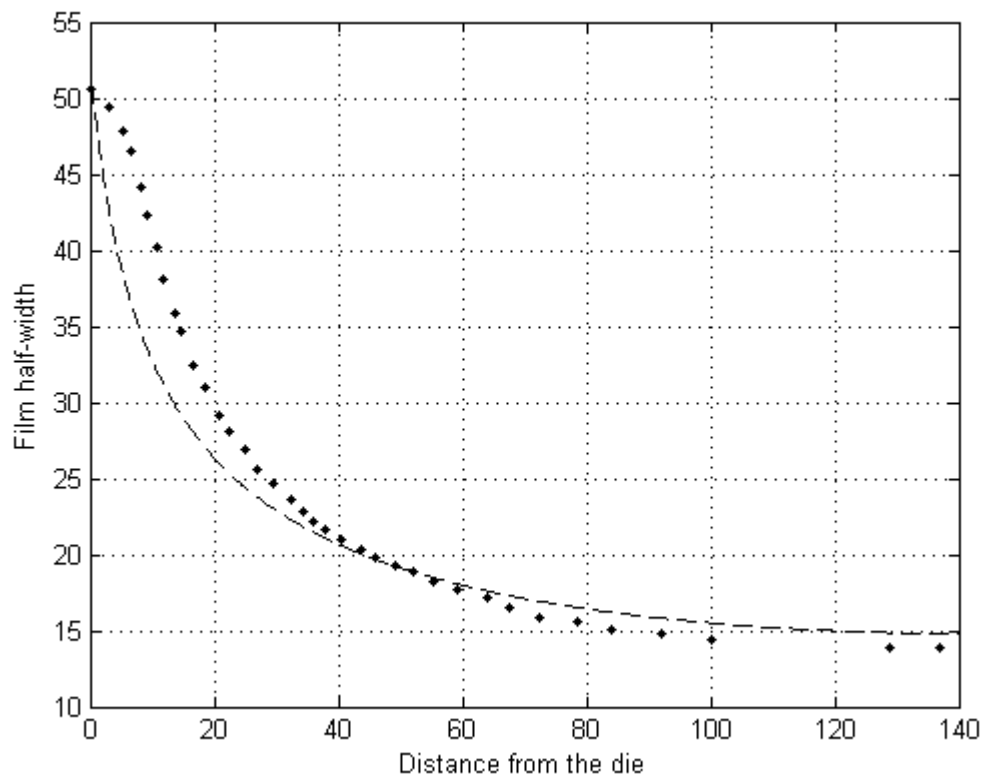


Рис. 4. Форма кромки пленки ($v(0) = 1$; $v(1) = 15$; $\mu = 0.01$; $\lambda = 500$)

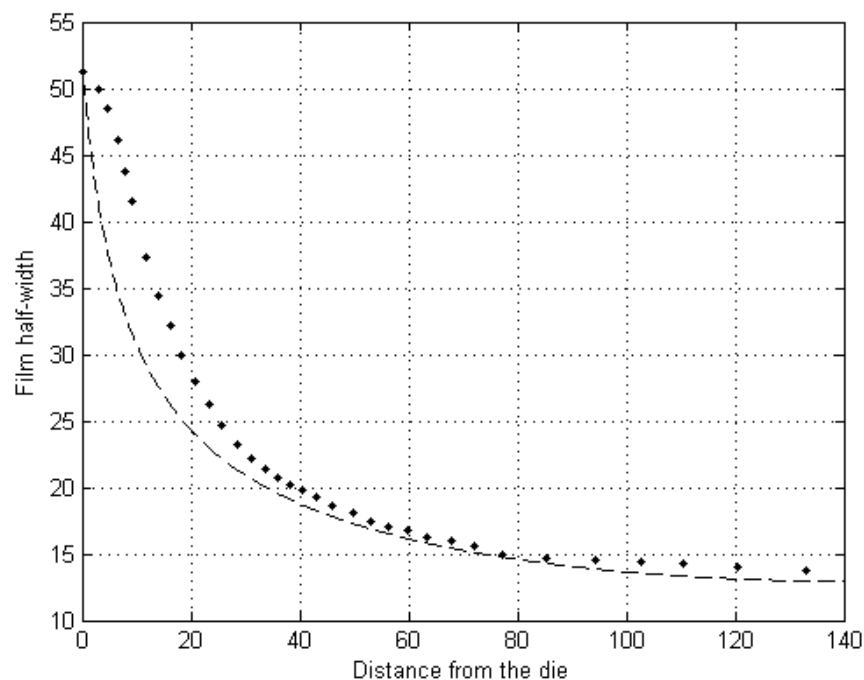


Рис. 5. Форма кромки пленки ($v(0) = 1$; $v(1) = 20$; $\mu = 0.01$; $\lambda = 500$)

Таким образом, можно сделать вывод, что реологическая модель (1, 2) при учете теплообмена (3) непротиворечиво описывает наблюдаемые при формировании полимерных пленок эффекты [1–3], и полученные зависимости составляющих тензора напряжений от расстояния до выхода из экструдера могут быть использованы при моделировании процесса кристаллизации полимерного расплава.

ЛИТЕРАТУРА

1. Silagy D., Demay Y, Agassant J.F. Stationary and stability analysis of the film casting process // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* – 79. – 1998. – p. 563-583.
2. Seay C W., Baird D. G. Sparse Long-chain Branching's Effect on the Film-casting Behavior of PE // *International Polymer Processing.* – Issue 2009/05. – 2009. – p. 428-438.
3. Kajiwara T., Yamamura M., Asahina T. Relationship between neck-in phenomena and rheological properties in film casting // *Journal of the Society of Rheology, Japan.* – 2006. – Vol. 34. – № 2. – p. 97 – 102.
4. Ito H., Doi M., Isaki T., Takeo M., Yagi K. 2D flow analysis of film casting process // *Journal of the Society of Rheology, Japan.* – 2003. – Vol. 31. – № 3. – p. 149-155.
5. Пышнограй Г.В. Определяющее уравнение нелинейных вязкоупругих (полимерных) сред в нулевом приближении по параметрам молекулярной теории и следствия для сдвига и растяжения // Г.В. Пышнограй, В.Н. Покровский, Ю.Г. Яновский и др. // *Докл. АН.* – 1994. – Т. 339. – №5. – С. 612–615.
6. Янков В.И., Перевадчук В.П., Боярченко В.И. Процессы переработки волокнообразующих полимеров. – М., «Химия». – 1989, 320 с.
7. Виноградов Г.В., Малкин А.Я. Реология полимеров. – М., «Химия». – 1977, 440 с.
8. Пышнограй Г.В., Алтухов Ю.А. Микроструктурный подход в теории течения линейных полимеров и нелинейные эффекты на его основе. // *Высокомолекулярные соединения, серия А.* – 1996. – т.38. – № 7. – с. 1185–1193.