

Моделирование 3d течения полимерного расплава в сходящемся канале с прямоугольным сечением

М.Ю. Толстых
АлтГТУ, г. Барнаул

Известно, что расплавы линейных полимеров являются нелинейными вязкоупругими средами. Для описания их течений в настоящее время часто используются уравнения, учитывающие существенные особенности поведения полимерных жидкостей [1–6]. При этом предпочтение при выборе математической модели следует отдавать моделям, в которых учитывается, в той или иной мере, структура полимерных молекул. Так как подобный учет достаточно сложен, то наиболее востребованными являются модели, в основе которых лежит мезоскопический подход. В этом случае поведение полимерной макромолекулы заменяется поведением одного или нескольких релаксаторов, а переход к макроscopicкому описанию осуществляется методами статистической механики [4, 5].

В данной работе будет использована модифицированная реологическая модель Виноградова-Покровского [7].

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

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; $I = a_{ij}$ – 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.

Ранее попытки моделирования таких течений на основе уравнений (1) уже предпринимались [6, 8]. В работах [6, 8] рассматривались двух- и трехмерные напорные течения в каналах с прямоугольными сечениями. При этом градиент поля давлений был известен.

Для того чтобы на основе этой модели проводить расчеты реальных течений к (1) следует добавить уравнения сохранения импульса и массы:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} v_i + v_k \frac{\partial}{\partial x_k} v_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \sigma_{ik}; \quad \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2)$$

Система уравнений (1,2) представляет собой замкнутую систему относительно переменных a_{ij} , v_i , P . Так уравнения этой системы являются уравнениями в частных производных, то они должны быть дополнены начальными и граничными условиями.

Расчетная область представляет собой два параллелепипеда. Первый резервуар – канал с квадратным сечением 14×14 мм, второй – щелевой канал, с сечением 14×1 мм. Длины параллелепипедов выбираются достаточно большими ($-80 \leq z \leq 80$), чтобы исключить влияние как входа в резервуар, так и выхода из щелевого канала.

Основными граничными условиями являются условия прилипания на твердой поверхности для скорости $v_i = 0$. Граничные условия для безразмерных напряжений получаются подстановкой этих условий в уравнения (1) и отбрасыванием соответствующих слагаемых. В качестве граничных условий при $x=0$ или $y=0$ были использованы условия симметрии или равенства нулю соответствующих частных производных. На входе в резервуар, при $z=-80$, для компонент скорости были использованы выражения $v_1(x, y, -80) = v_2(x, y, -80) = 0$ и $v_3(x, y, -80) = 9V(x-7)^2(y-7)^2 / 5488$. При этом V – объемный расход.

Для того чтобы выполнить расчеты необходимо определить численные значения параметров реологической модели κ , β , η_0 и τ_0 . Результаты сравнения этих зависимостей приведены на рисунке 1. При этом было получено, что для образца LLDPE $\eta_0 = 14500$ Па, $\tau_0 = 0,2$ сек, а для образца LDPE $\eta_0 = 18500$ Па, $\tau_0 = 2$ сек.

Значение параметров анизотропии $\beta = 0,1$ и $\kappa = 0,12$ оказались одинаковыми.

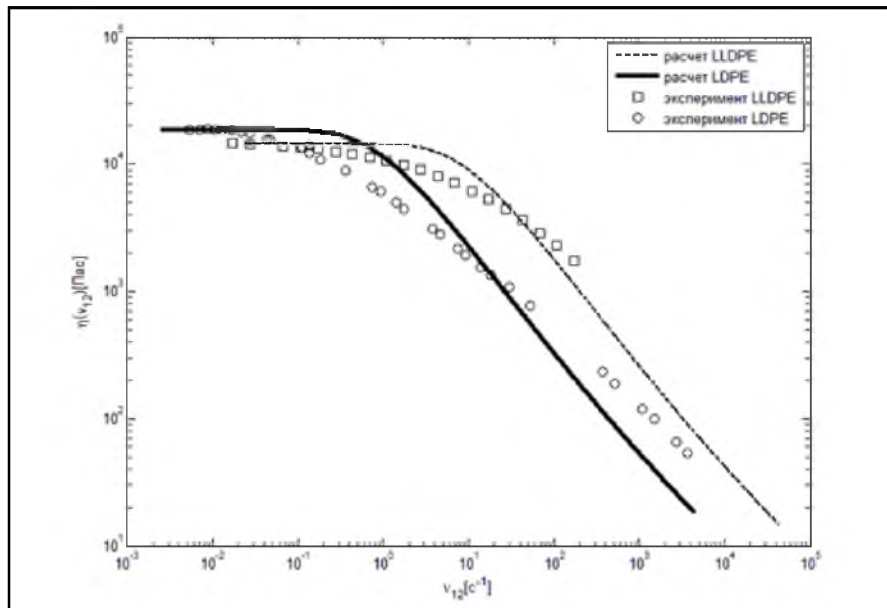


Рисунок 1 – Сравнение теоретических (линии) и экспериментальных (точки) зависимостей стационарной сдвиговой вязкости от скорости сдвига для линейного полиэтилена низкой плотности (LLDPE) и полиэтилена низкой плотности (LDPE)

Сравнивались течения расплавов двух образцов полиэтилена, линейный полиэтилен низкой плотности (LLDPE) и полиэтилен низкой плотности (LDPE). Различия между этими двумя образцами состоит в том, что у LLDPE сдвиговая вязкость изменяется меньше, чем у LDPE и время релаксации у LLDPE меньше, чем у LDPE. При этом было обнаружено, что для течений LDPE существует выраженный вторичный поток в углах проточного канала, который не наблюдается для LLDPE. Эти вихри изменяют свою форму, в сечениях параллельных оси канала, что характеризует трехмерный характер поля течения. Кроме того, было отмечено, что в исследуемом вихревом течении существует винтовой поток, который направлен к стенкам резервуара. Особое внимание было уделено распределению скорости вдоль оси симметрии канала. Было обнаружено, что у LDPE максимальное значение скорости наблюдается непосредственно за входом в щелевую часть канала. Этот эффект не появляется для течений LLDPE при тех же условиях. Все эти эффекты обнаруживаются при проведении численного эксперимента.

Библиографический список

1. Verbeeten W.M.H., Peters G.W.M., Baaijens F.P.T. Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom–Pom model // *J. Rheol.* – 2001. – V. 45. – P. 823.
2. Leonov A.I., Prokunin A.N. *Nonlinear Phenomena in Flows of Viscoelastic Polymer Fluids* // Chapman and Hall, New York. – 1994. 1sted. – P. 356-395.
3. Пышнограй Г.В., Покровский В.Н., Яновский Ю.Г., Образцов И.Ф., Карнет Ю.А. Определяющее уравнение нелинейных вязкоупругих (полимерных) сред в нулевом приближении по параметрам молекулярной теории и следствия для сдвига и растяжения // *Доклады АН.* – 1994. – Т. 335. – № 9. – С. 612–615.
4. Gusev A.S., Pyshnograï G.V., Pokrovskii V.N. Constitutive Equations for Weakly Entangled Linear Polymers // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* – 2009. – V. 163. – № 1-3. – P. 17–28.
5. Pokrovskii V.N. *The Mesoscopic Theory of Polymer Dynamics*. 2nd Edition. Berlin: Springer, 2010. – P. 184.
6. Кузнецова Ю.Л., Скульский О.И., Пышнограй Г.В. Течение нелинейной вязкоупругой жидкости в плоском канале под действием заданного градиента давления // *Вычислительная механика сплошных сред.* – 2010. – Т. 3. № 2. – С. 55–69.
7. Гусев А.С., Макарова М.А., Пышнограй Г.В. Мезоскопическое уравнение состояния полимерных сред и описание динамических характеристик на его основе // *Инженерно-физический журнал.* – 2005. – Т. 78, № 5. – С. 55–61.
8. Алтухов Ю.А., Самойлов В.С., Пышнограй И.Г., Пышнограй Г.В. Моделирование 3D профиля скорости нелинейной вязкоупругой жидкости в канале с квадратным сечением // *Механика композиционных материалов и конструкций.* – 2012. – Т. 18, № 3. – С. 325–332.
9. Altukhov Y.A., Pyshnograï G.V., Pokrovskii V.N. On the difference between weakly and strongly entangled linear polymers // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* – 2004. – V. 121, № 2–3. – P. 73–86.