

Э. Р. Кутузова, С. А. Кутузов, М. А. Рузанова,
А. Г. Кутузов, Г.С. Кутузова

ВЛИЯНИЕ ЛИНИИ ТРЕХФАЗНОГО КОНТАКТА НА ЭКСТРУЗИЮ РЕОЛОГИЧЕСКИ СЛОЖНОЙ ЖИДКОСТИ

Ключевые слова: экструдат, вязкоупругая жидкость FENE-P, течение, линия трехфазного контакта.

Представлены результаты математического моделирования течения вязкоупругой жидкости FENE-P вблизи точки выхода экструдата из формирующего канала экструзионной головки.

Keywords: extrudate, viscoelastic liquid FENE-P, flow, three-phase contact line.

The mathematical simulation results of FENE-P viscoelastic liquid flow near the exit point of the extrudate from the molding channel of extrusion head are presented.

Введение

Огромное влияние на устойчивое течение экструдата оказывают особенности течения вязкоупругой жидкости вблизи линии трехфазного контакта. Важность исследования течений вблизи линии трехфазного контакта связана с тем, что именно здесь развиваются значительные градиенты растягивающих и тангенциальных напряжений, способных привести к разрушению экструдата [1-10]. Достоверность получаемых результатов во многом определяется выбором реологической модели полимерной жидкости. В последнее время для построения конститутивных реологических соотношений используется молекулярный подход. Это объясняется тем, что, во-первых, реологические свойства полимерных жидкостей зависят от структуры молекулы, молекулярно-массового распределения, жесткости молекулярной цепочки; во-вторых, взаимодействие между молекулами полимера и растворителя может оказывать значительное влияние на свойства раствора; в-третьих, в окрестности твердых границ движение макромолекул ограничивается, что приводит к росту напряжений и появлению эффекта скольжения. В данной работе используется реологическое конститутивное соотношение FENE-P, основанное на Броуновской динамике. В качестве реальной полимерной цепочки принимается механическая модель Рауза, состоящая из бусинок, свободно соединенных пружинками.

Математическая постановка задачи

Медленное установившееся течение описывается следующими уравнениями:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right) = -\vec{\nabla} P + \nabla \cdot \vec{\tau} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (2)$$

где ρ – плотность жидкости, $\vec{v}$ – вектор скорости, P – давление, $\vec{\tau}$ – девиатор напряжения.

В соответствии с принципом расщепления напряжений:

$$\vec{\tau} = \vec{\tau}_1 + \vec{\tau}_2, \quad (3)$$

где

$$\vec{\tau}_1 = \frac{\eta_1}{\lambda} \left[\frac{\tilde{\mathbf{A}}}{1 - (\text{tr} \tilde{\mathbf{A}})/(3L^2)} - \frac{\tilde{\mathbf{I}}}{1 - 1/L^2} \right], \quad (4)$$

$$\frac{\tilde{\mathbf{A}}}{1 - (\text{tr} \tilde{\mathbf{A}})/(3L^2)} + \lambda \frac{\vec{v}}{\tilde{\mathbf{A}}} = \frac{\tilde{\mathbf{I}}}{1 - 1/L^2}, \quad (5)$$

$$\vec{\tau}_2 = 2\eta_2 \tilde{\mathbf{D}}. \quad (6)$$

Здесь η_1 – вязкость полимерной составляющей жидкости, η_2 – вязкость растворителя, λ – характерное время релаксации, L^2 – безразмерный параметр, характеризующий степень растяжения данной макромолекулы.

Верхняя конвективная производная от тензора конфигурации имеет вид:

$$\frac{\nabla}{\tilde{\mathbf{A}}} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{A}}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{A}} - \nabla \vec{v} \cdot \tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\mathbf{A}} \cdot (\nabla \vec{v})^T. \quad (7)$$

Тензор скоростей деформации определяется соотношением:

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T). \quad (8)$$

В качестве безразмерных параметров используются числа Рейнольдса, Вайссенберга, капиллярности и коэффициент ретардации:

$$\text{Re} = \frac{\rho U L}{\eta}, \quad \text{We} = \frac{\lambda U}{L}, \quad \text{Ca} = \frac{\mu U}{\sigma_0},$$

$$\beta = \frac{\eta_2}{\eta_1 + \eta_2}.$$

Граничные условия

На рис.1 представлена расчетная область течения вязкоупругой жидкости вблизи выходного сечения формирующей насадки:

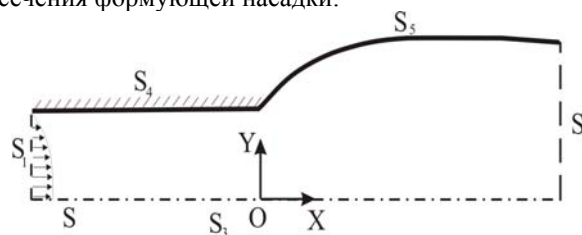


Рис. 1 - Схема расчетной области истечения жидкости из плоского канала

На границе входа в расчетную область S_1 (рис.1) задаются профили скорости и распределение напряжений:

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{4}(4 - y^2), \quad v = 0, \\ \tau_{xx} &= 2We \cdot (1 - \beta) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \\ \tau_{xy} &= We \cdot (1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial y}, \\ \tau_{yy} &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

На границе выхода из области течения S_2 задается установившийся однородный профиль скорости и напряжений:

$$\begin{aligned} v &= 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} &= \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial x} = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

$$p = 0.$$

На границе S_3 задаются условия симметрии:

$$v = 0; \quad \tau_{xy} = 0. \quad (11)$$

На свободной поверхности S_5 задаются кинематические и динамические условия: $\vec{v} \cdot \vec{n} = 0$

$$\text{и } \vec{n} \cdot \vec{\tau} \cdot \vec{t} = \sigma_0 / \rho \cdot \vec{n}, \quad (12)$$

где $\vec{n}, \vec{t}$ - единичные векторы нормали и касательной на поверхности S_5 ; σ_0 - средний коэффициент поверхностного натяжения; ρ - радиус кривизны свободной поверхности. На линии трехфазного контакта задается также контактный угол смачивания.

Аппроксимация уравнений (1)-(6) и вычисления проводились методом конечных элементов (МКЭ) второго порядка на нерегулярных сетках, сгущающихся к зоне истечения полимера из экструзионной головки. Местоположение деформируемой свободной поверхности находится из аппроксимации кинематического условия на свободной поверхности.

Результаты численного моделирования

В результате численного решения поставленной задачи получены распределения скорости, напряжений и давления в расчетной области течения полимерной жидкости. На рис.2 показано распределение давлений, нормальных и сдвиговых напряжений для числа $We = 1.0$ и максимально возможной степени растяжения макромолекул $L^2=100$. Необходимо отметить, что в разных точках области течения степень растяжения макромолекул может быть разной. Она зависит от уровня напряжений в разных точках области течения. Однако гибкие гантели, являющиеся моделью макромолекулы, могут вытянуться не более чем в $L^2=100$ раз. Из требования выполнения закона сохранения расхода следует, что струя,

выходящая из канала, должна сужаться. Этот эффект известен для низкомолекулярных жидкостей, не проявляющих высокоэластических свойств, и составляет 0.87. Для полимерных же систем реализуется упругое восстановление, обусловленное высокоэластическими деформациями. На данных картинах это явление отчетливо заметно. В выходном сечении формирующей головки наблюдается резкое увеличение поперечного сечения струи, и только на некотором расстоянии от выхода струя начинает сужаться. Также из рис. 2 хорошо видно, что

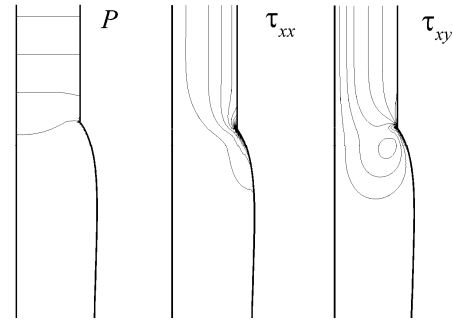


Рис. 2 - Картины течения для $We=1.0$, $L^2=100.0$: изобары давления P и линии уровня напряжений τ_{xx}, τ_{xy}

вблизи неподвижной линии трехфазного контакта (линии раздела жидкости, твердого тела и окружающей воздушной среды) образуется область больших градиентов нормальных и касательных напряжений или область пиков нормальных и касательных напряжений. В дальнейшем большие градиенты напряжений сохраняются в приповерхностном слое экструдата, что качественно соответствует существующим численным данным. Результаты численного моделирования показывают, что с увеличением числа We степень разбухания струи возрастает, увеличиваются пики нормальных и касательных напряжений.

На рис. 3 представлено трехмерное изображение поверхности касательного напряжения τ_{xy} . Видно, что вблизи выходного сечения наблюдается пик отрицательного напряжения, в то время как на оси канала пиковых напряжений нет.

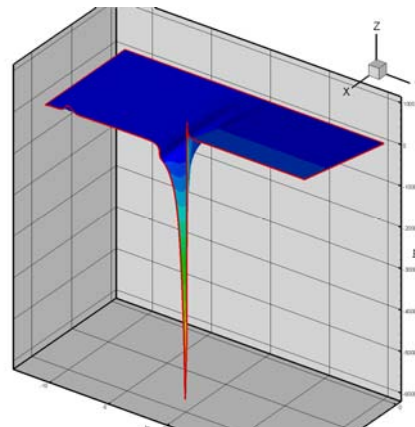


Рис. 3 - Поверхность напряжения τ_{xy} .

В соответствии с эффектом двойного лучепреломления разность главных напряжений $\sigma_1 - \sigma_2$ характеризует степень ориентации макромолекул. Поэтому для анализа степени ориентации макромолекул полимера в потоке использован физический закон пропорциональности тензора напряжений тензору коэффициентов преломления или тензору оптической анизотропии. На рис. 4 приведены результаты расчетов разности главных напряжений. Здесь представлено распределение разности главных напряжений в экструдате вблизи выходного сечения насадки для чисел $We = 1.0, 5.0$. Видно, что вблизи линии трехфазного контакта развивается максимальная разность главных напряжений $\sigma_1 - \sigma_2$. Это означает, что эта область является областью максимальной анизотропии оптических свойств экструдата, что является следствием максимальной степени ориентации макромолекул. Причем, ориентация макромолекул практически отсутствует только на оси канала. Таким образом, под действием развивающихся в движущейся жидкости напряжений возникает ориентация макромолекул полимера в направлении потока. Из рис.4 видно, что возмущающее влияние линии трехфазного контакта очень велико. Как следует из результатов наших вычислений, представленных на рис.4, оно приводит к значительному перераспределению напряжений и их концентрации вблизи кромок выходного сечения канала.

Известно, что ориентация макромолекул вдоль осевой линии только улучшает прочностные характеристики материала. С этой точки зрения повышенная ориентация макромолекул является положительным фактором процесса. Однако при достижении напряжениями некоторого предельного значения повышенная ориентация макромолекул уже вредит процессу экструзии сырой резины, поскольку ориентированные участки области течения, находящиеся вблизи твердой стенки, приобретают новые свойства. Экструдат, в этом случае, в пристенных слоях будет приобретать свойства упругого телесного тела. Образующиеся за счет частичной ориентации участков макромолекул квазисшивки переводят расплав в пристенном слое из вязкотекучего в высокоэластическое состояние. То есть вблизи стенки образуются участки с дальним порядком расположения атомов, что характерно для кристаллических тел. Как только касательные напряжения достигают критического значения, начинается проскальзывание ориентированных участков макромолекул, из-за чего могут происходить осцилляции и нарушения гладкости свободной поверхности.

Механизм осцилляций можно объяснить следующим образом. Когда напряжения на твердой стенке достигают больших величин, полимерные макромолекулы ориентируются, раствор вблизи твердой стенки переходит в высокоэластическое состояние и возникает скольжение на твердой стенке. Это, в свою очередь, снижает напряжение на

стенке и, соответственно, уменьшает степень ориентации. Снижение напряжений вблизи твердой стенки приводит к восстановлению условия прилипания полимерной жидкости. Таким образом, происходит периодическое изменение свойств жидкости вблизи стенки от вязкоупругого к высокоэластическому и обратно. Происходят периодические изменения граничных условий на стенке, что приводит к осцилляциям в жидкости и появлению периодических волн на свободной поверхности экструдата.

Исходя из описанного механизма осцилляций становится понятно, почему периодическое проскальзывание начинается именно в зоне трехфазного контакта и только потом, с ростом напряжений, распространяется вглубь насадки. Знание местоположения, величины пиков напряжений и предельных значений касательных и нормальных напряжений позволяет определять наиболее опасные участки формирующей головки, где возможно проскальзывание экструдата.

Суммируя вышеизложенное, можно утверждать, что проскальзывание возможно, в первую очередь, в непосредственной близости от выхода из экструзионной головки. Поэтому эта зона является наиболее опасной для возникновения эластической турбулентности.

Из рис.4 хорошо видно, что на линии трехфазного контакта появляется пик напряжения. Перед сечением выхода образуется зона с пониженным значением $\sigma_1 - \sigma_2$. Таким образом, нами установлено, что в тех местах, где анизотропия максимальна, будет максимальной и ориентация макромолекул.

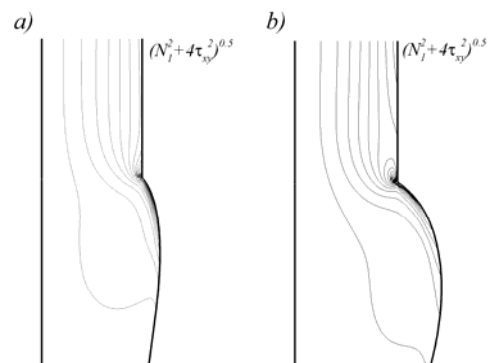


Рис 4 - Распределение разности главных напряжений $\sigma_1 - \sigma_2$ а) $We=1.0, L^2=100.0$ б) $We=5.0, L^2=100.0$

Повышенная степень ориентации макромолекул может приводить к периодическому проскальзыванию ориентированных участков макромолекул.

На рис.5 показана поверхность разности главных напряжений $\sigma_1 - \sigma_2$. Внимательный анализ рис.4 и рис.5 показывает, что перед пиком первой разности главных напряжений наблюдается небольшое снижение значения $(\sigma_1 - \sigma_2)$. Можно сделать вывод о том, что здесь ориентация макромолекул несколько снижается. Этот факт

является подтверждением наличия здесь застойной зоны. С изменением релаксационных свойств полимера размеры этой зоны могут изменяться. Причем, если время релаксации макромолекул полимера увеличивается, то увеличивается и застойная зона.

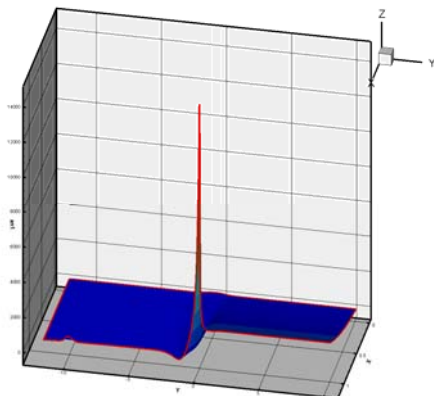


Рис. 5 - Поверхность разности главных напряжений $\sigma_1 - \sigma_2$

Для предупреждения образования застойной области и уменьшения пиков напряжений можно допустить некоторое постоянное проскальзывание экструдата по внутренней поверхности формующего канала экструзионной головки. Скольжение экструдата вблизи выходного сечения уменьшает первую разность главных напряжений $\sigma_1 - \sigma_2$, что свидетельствует об уменьшении степени ориентации макромолекул, а также снижает пики напряжений в окрестности линии трехфазного контакта.

Выводы

Линия трехфазного контакта характеризуется большими градиентами давления и напряжений, скачком продольной компоненты скорости течения от нуля на твердой поверхности формующего канала головки до конечной скорости на свободной поверхности экструдата, что приводит к отрыву струи от поверхности формующего канала и разрывам на свободной поверхности экструдата, примыкающей к линии трехфазного контакта.

Вблизи линии трехфазного контакта образуется застойная зона, сужающая выходное сечение формующего канала и негативно влияющая на качество экструдата.

Литература

1. Виноградов Г.В. Реология полимеров / Г.В. Виноградов, А.Я. Малкин. - М.: Химия, 1977. - 440с.
2. Малкин А.Я. Неустойчивое течение полимеров / А.Я. Малкин, А.И. Леонов // Успехи реологии полимеров. - М.: Химия, 1970. - С.98-117.
3. Босых М.С. Реологические свойства полимеров при периодическом механотермическом воздействии: автореф. дис...канд. техн. наук / М.С. Босых. - Воронеж: ВГТА, 2004.-19 с.
4. Фихман В.Д. Реологические свойства полимеров на растяжении с постоянной скоростью деформации и с постоянной скоростью растяжения / В.Д. Фихман, Б.В. Радужкевич, Г.В. Виноградов // Успехи реологии полимеров. - М.: Химия, 1970. - С. 9-23.
5. Радужкевич Б.В. Вязкостные и релаксационные свойства полимеров в процессе растяжения / Б.В. Радужкевич, В.Д. Фихман, Г.В. Виноградов // Успехи реологии полимеров. - М.: Химия, 1970.- С. 24-39.
6. Айбиндер С.Б. Реологические свойства полимеров при различных видах напряженного состояния / С.Б. Айбиндер // Успехи реологии полимеров. - М.: Химия, 1970. - С. 253-269.
7. Френкин Э.И. Вязкоупругость полимеров и их поведение при трении / Э.И. Френкин, Ю.Г. Яновский // Успехи реологии полимеров. - М.: Химия, 1970. - С. 269-293.
8. Виноградов Г.В. Реологические свойства полимеров в текучем состоянии / Г.В. Виноградов, А.Я. Малкин, Ю.Г. Яновский, В.Ф. Шумский, Е.А. Дзюра // Механика полимеров.- 1969, №1.- С. 164-181.
9. Кутузова Г.С., Кутузов А.Г., Кутузова М.А., Тазюков Ф.Х. Течение вязкоупругой жидкости FENE-P в формующей головке экструдера // Вестник Казанского технологического университета, №21, 2012г., С.145-148.
10. Кутузов А.Г., Кутузов С.А., Кутузова Э.Р. Реологическая модель FENE-P для описания вязкоупругих свойств полимера, перерабатываемого в экструдере// Вестник Казанского технологического университета, №21, 2013г., Т. 16., № 12, С.196-200.

© А. Г. Кутузов – д-р техн. наук, проф. каф. автоматизации технологических процессов и производств НХТИ КНИТУ, Kutuzov_Alek@list.ru; С. А. Кутузов – асп. каф. ТМиСМ КНИТУ; Э. Р. Кутузова – асс. каф. АСОИ КНИТУ; М. А. Рузанова – канд. техн. наук, доц. каф. процессов и аппаратов химических технологий НХТИ КНИТУ; Г.С. Кутузова – канд. техн. наук, доц. каф. химия НХТИ КНИТУ.