

УДК 679.743.1:519.63

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЛАВЛЕНИЯ ПОЛИМЕРА

Казakov А.В., Петренко А.А.

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Пермь, e-mail: ktei@pstu.ru*

Настоящая статья посвящена описанию практических рекомендаций по использованию экспериментальных данных в программном комплексе ANSYS. Температурные зависимости удельной теплоёмкости, скрытые теплоты плавления и температурные диапазоны плавления материалов были получены в результате проведения экспериментов на приборе DSC Q2000. В качестве образцов использовались материалы трёх марок полиэтилена: ПЭ 271-274К, ПЭ 153-02К, безгалогенный компаунд на основе полиэтилена Megolon HF 1876. В ходе проведения экспериментов использовались различные скорости нагрева материалов. Численное исследование производилось на базе программного комплекса ANSYS. Было проведено математическое моделирование процесса плавления полимеров, происходящего в дифференциально-сканирующем калориметре. Для подтверждения достоверности результатов численного исследования был проведён сравнительный анализ с экспериментальными данными. Данный подход можно использовать для исследования более сложных технологических процессов.

Ключевые слова: практические рекомендации, удельная теплоёмкость, скрытая теплота плавления, температурный диапазон плавления, ANSYS

MATHEMATICAL MODELING OF THE POLYMER MELT

Kazakov A.V., Petrenko A.A.

Perm National Research Polytechnic University, Perm, e-mail: ktei@pstu.ru

This article is devoted to describing practical recommendations with respect to the use of the experimental data in the software ANSYS. The dependence temperature of the specific heat capacity, pure solvent melting heat and the ranges of temperature of melting materials were obtained from experiments on the instrument DSC Q2000. The following materials were used as samples: three grades of polyethylene: PE 271-274K, PE 153-02K, halogen-free compound based on polyethylene Megolon HF 1876. In the course of experiments different heating rates of materials were used. Numerical investigations were carried out on the basis of the software ANSYS. The mathematical modeling of melting of polymers was conducted. The process of melting took place in the differential scanning calorimeter. A comparative analysis of the experimental data was carried out to validate the results of the numerical investigations. This approach can be used for the study of more complex processes.

Keywords: practical advice, specific heat, pure solvent melting heat, melting temperature range, ANSYS

При моделировании технологических процессов изначально требуется получить данные о свойствах материалов экспериментальным путем, а затем, основываясь на полученных результатах, проводить численные исследования. Теплофизические свойства полимеров описаны во многих трудах различных авторов [3, 4, 6, 8]. Следует отметить, что на сегодняшний день в открытой литературе опубликован целый ряд работ по исследованию теплофизических свойств полимеров [1, 9, 10]. Однако недостаточно полно представлены практические рекомендации, позволяющие перейти от натурального эксперимента к моделированию реальных технологических процессов.

Таким образом, представляет научный интерес и является весьма актуальной разработкой универсального подхода по совмещению эксперимента и численного исследования.

Научной новизной работы является описание практических рекоменда-

ций, которые позволят, используя современное оборудование и математическое моделирование, спрогнозировать скрытые особенности поведения материала в реальных технологических процессах.

Использование предложенных практических рекомендаций позволит сократить временные и материальные затраты на производстве при изучении технологических процессов, связанных с переработкой полимеров.

В качестве примера рассматривался процесс плавления полимеров, происходящий в дифференциально-сканирующем калориметре [5].

Было проведено 5 экспериментальных исследований теплофизических свойств для трёх марок полиэтилена: ПЭ 271-274К, Megolon HF 1876, ПЭ 153-02К. На рис. 1 сопоставлены температурные зависимости удельной теплоёмкости при скорости нагрева 10°С/мин.

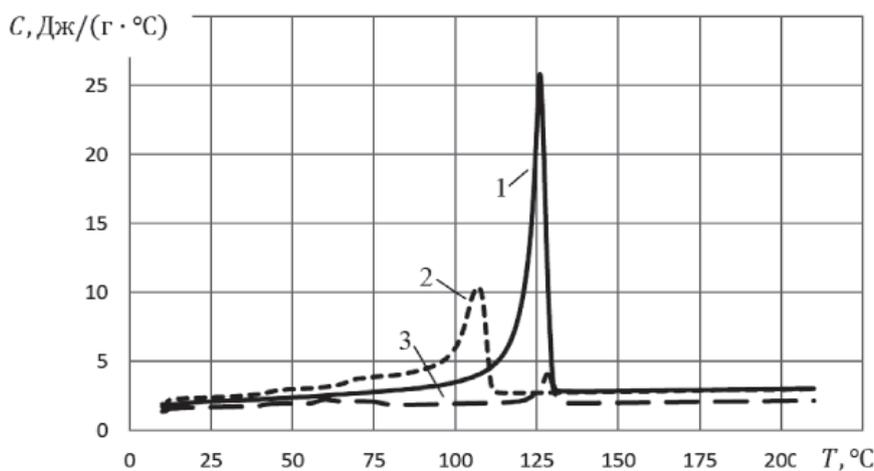


Рис. 1. Температурные зависимости удельной теплоёмкости материалов: 1 – ПЭ 271-274К; 2 – ПЭ 153-02К; 3 – безгалогенный компаунд Megolon HF 1876

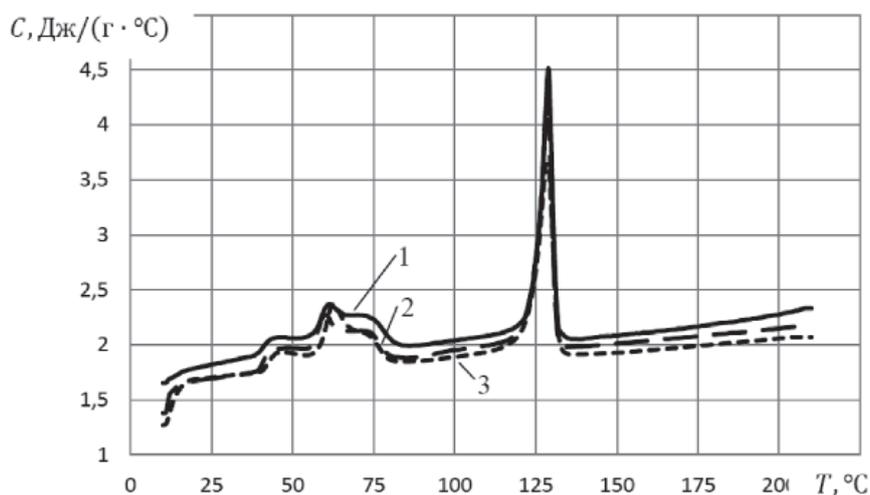


Рис. 2. Температурные зависимости удельной теплоёмкости для безгалогенного компаунда Megolon HF 1876 при разных скоростях нагрева: 1 – 5°C/мин; 2 – 10°C/мин; 3 – 20°C/мин

Проанализировав данные графики, можем сделать вывод, что материал ПЭ 271-274К является более термостойчивым, в отличие от остальных. Его скрытая теплота плавления превышает теплоты двух других материалов и равна 270,1 Дж/г, а у материалов Megolon HF 1876 и ПЭ 153-02К она равна 200,9 и 75,85 Дж/г соответственно. Это говорит о том, что для его плавления требуется большее количество тепла. Также об этом свидетельствуют значения удельной теплоёмкости в температурном диапазоне плавления. Максимальное значение удельной теплоёмкости для этого материала достигает значения 25,8 Дж/(г·°С), в то время как у материалов Megolon HF 1876 и ПЭ

153-02К она равна соответственно 4,047 и 10,38 Дж/(г·°С).

На рис. 2 сопоставлены графики зависимостей теплоёмкости от температуры для материала Megolon HF 1876 при разных скоростях нагрева. Проанализировав данные графики, можно увидеть, как скорость нагрева влияет на процесс плавления. Чем выше скорость нагрева, тем меньше скрытая теплота плавления материала, следовательно, тем меньше требуется тепла для перехода материала из твёрдого состояния в жидкое. Для скорости 5°C/мин скрытая теплота плавления равна 76,2 Дж/г, при скорости 10°C/мин она равна 75,85 Дж/г, а для скорости 20°C/мин она равна 75,26 Дж/г.

Также по температурному диапазону плавления видно, что при большей скорости нагрева материал начинает плавиться раньше, чем при меньшей скорости. Скорости нагрева 5 °С/мин соответствует температурный диапазон плавления (125,34–128,84) °С, скорости 10 °С/мин – (124,4–128,45) °С, скорости 20 °С/мин – (123,49–128,52) °С.

После экспериментального исследования теплофизических свойств рассматриваемых материалов было проведено численное исследование.

Математическое описание процесса плавления в дифференциально-сканирующем калориметре основывается на законе сохранения энергии. Решение общей задачи осуществляется поэтапно [7].

Поскольку реальные процессы теплообмена сложны, для возможности их моделирования и упрощения системы примем следующие допущения:

- задача осесимметричная;
- свойства материала однородны, изотропны;
- теплофизические свойства материала постоянны, за исключением теплоёмкости (зависит от температуры);
- отсутствуют внутренние источники тепла (отсутствует тепло за счет отсутствия диссипации);
- тепловым потоком $\frac{\partial T}{\partial \theta}$ пренебрегаем;
- материал находится в неподвижном состоянии.

Уравнение энергии, исходя из принятых допущений, примет следующий вид:

$$C(T)\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad (2)$$

где $C(T)$ – удельная теплоёмкость материала, Дж/(кг·°С) (является функцией от температуры); ρ – плотность материала, кг/м³; λ – теплопроводность материала, Вт/(м·°С).

Уравнение (2) необходимо дополнить условиями однозначности.

Температура во всем объеме материала в начальный момент времени $t = 0$ равна T_0 , °С.

$$T(r, z, 0) = T_0. \quad (3)$$

В данной задаче используются граничные условия 1-го рода, задаётся значение функции $T(r, z, t)$ на границах для каждого момента времени:

$$T(r, t)|_{z=0} = F; \quad (4)$$

$$T(r, t)|_{z=h} = F; \quad (5)$$

$$T(z, t)|_{r=r_0} = F, \quad (6)$$

где $F = f(t)$ – функция по времени; h – высота исследуемой модели, м; r_0 – радиус модели, м.

$$f(\tau) = T_0 + \Delta T \cdot \tau, \quad (7)$$

где ΔT – скорость нагрева, °С/с.

Таким образом, уравнение (2), замкнутое условиями однозначности (3)–(7), является математической моделью процесса плавления.

В результате моделирования процесса плавления, проходящего в дифференциально-сканирующем калориметре, были получены следующие результаты, которые представлены ниже. При численной реализации в пакете *ANSYS* температурная зависимость теплоёмкости, скрытая теплота плавления и температурный диапазон плавления материала взяты из экспериментальных данных. Для удельной теплоёмкости из всего распределения выбраны опорные точки, отображающие изменение состояния материала. Плотность и теплопроводность взяты из справочника [2].

На рис. 3 просматривается появление областей расплава в объеме материала. Это говорит о начале плавления. Для оценки невязки сравнивались температурные диапазоны плавления материалов. Результаты сравнительного анализа представлены в таблице.

Оценка невязки

Номер опыта	Материал	Скорость нагрева, °С/мин	Температура начала плавления, °С		Невязка, %	Температура конца плавления, °С		Невязка, %
			Эксп.	Расч.		Эксп.	Расч.	
1	ПЭ 271-274К	10	121,44	121,67	0,18	126,06	126,67	0,48
2	ПЭ 153-02К	10	98,82	98,34	0,49	107,15	107,5	0,33
3	Megolon HF 1876	5	125,34	125,78	0,35	128,84	128,7	0,11
4		10	124,4	124,17	0,18	128,45	128,34	0,09
5		20	123,49	123,99	0,40	128,52	128,67	0,12

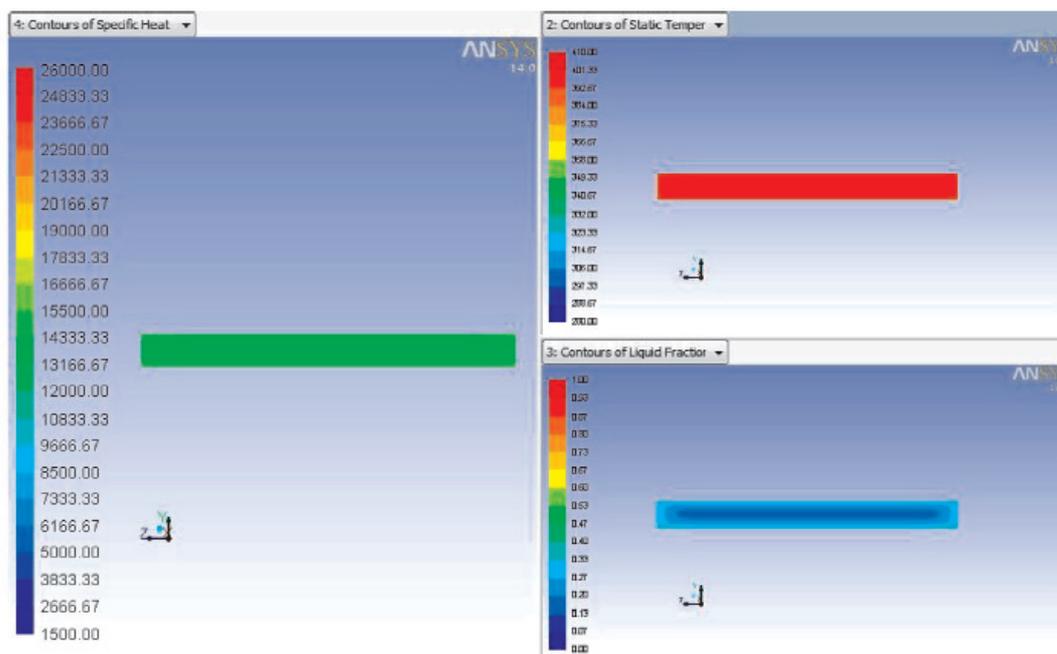


Рис. 3. Сечение YZ, $t = 670$ с. Слева: теплоемкость материала; справа сверху: температура; справа внизу: содержание жидких фракций

По результатам таблицы можно отметить, что отклонение расчетных значений от экспериментальных не превышает 5%. Это говорит о том, что представленная математическая модель является адекватной.

Таким образом, совместное использование натурного эксперимента и численного исследования дает возможность для дальнейшего моделирования более сложных технологических процессов.

Список литературы

1. Гаспарян Р.А. Структурные фазовые переходы в гибкоцепных полимерах // Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. – СПб., 2000. – 175 с.
2. Корицкий Ю.В., Пасынкова В.В., Тареева Б.М. Справочник по электротехническим материалам: В 3 т. Т. 1 / под ред. Ю.В. Корицкого и др. – 3-е изд., перераб. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 368 с.
3. Кулезнев В.Н., Шершнева В.А.. Химия и физика полимеров. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: КолосС, 2007. – 367 с.: ил. – (Учебники и учеб. пособия для студентов высш. учеб. заведений).
4. Михайлов Н.В. Основы физики и химии полимеров: учеб. пособие для вузов / под ред. В.Н. Кулезнев. – М.: Высш. школа, 1977. – 248 с.
5. Субботин Е.В. Пространственные неизомермические течения в рабочих и охлаждающих каналах пластицирующего экструдера: автореферат дис. ... канд. техн. наук: 01.02.; [Место защиты: Перм. нац. исслед. политехн. ун-т]. – Пермь, 2013. – 130 с.
6. Тагер А.А. Физико-химия полимеров. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Научный мир, 2007. – 576 с.
7. Труфанова Н.М. Переработка полимеров: учеб. пособие. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2009. – 159 с.
8. Тугов И.И., Кострыкина Г.И. Химия и физика полимеров: учеб. пособие для вузов. – М.: Химия, 1989. – 432 с.
9. Фрейман Е.И. Математическая модель и численное исследование твердотельного фазового перехода в наноразмерном образце: дис. ... канд. физ.-матем. наук. – Тула, 2011. – 118 с.
10. Шевченко С.С. Моделирование равновесных свойств, фазовых переходов и локальной подвижности в двумерных частично упорядоченных полимерных доменах: дис. канд. физ.-матем. наук. – Череповец, 2005. – 196 с.

References

1. Gasparjan R.A. *Strukturnye fazovye perehody v gibkocepnyh polimerah* [Structural phase transitions in flexible chain polymers]. Saint Petersburg., 2000. 175 p.
2. Korickij Ju.V., Pasynkova V.V., Tareeva B.M. *Spravochnik po jelectrotehnicheskim materialam* [Handbook of electrical materials]. 1986. 368 p.
3. Kuleznev V.N., Shershnev V.A.. *Himija i fizika polimerov* [Chemistry and physics of polymers]. 2007. 367 p.
4. Mihajlov N.V. *Osnovy fiziki i himii polimerov* [Basic physics and chemistry of polymers]. High school, 1977. 248 p.
5. Subbotin E.V. *Prostranstvennye neizotermicheskie tечения v rabochih i ohlazhdajushhix kanalah plasticirujushhego jekstrudera* [Spatial non-isothermal flow in the working and cooling channels extruder]. Perm., 2013. 130 p.
6. Tager A.A. *Fiziko-himija polimerov* [Physical chemistry of polymers]. 2007. 576 p.
7. Trufanova N.M. *Pererabotka polimerov* [Polymer processing]. Perm., 2009. 159 p.
8. Tugov I.I., Kostrykina G.I. *Himija i fizika polimerov* [Chemistry and physics of polymers]. 1989. 432 p.
9. Frejman E.I. *Matematicheskaja model' i chislennoe issledovanie tverdotel'nogo fazovogo perehoda v nanorazmernom obrazce* [Mathematical model and numerical study of solid phase transition in nanoscale sample]. Tula, 2011. 118 p.
10. Shevchenko S.S. *Modelirovanie ravnovesnyh svoystv, fazovyh perehodov i lokal'noj podvizhnosti v dvumernykh chastichno uporyadochennykh polimernykh domenah* [Of the equilibrium properties of phase transitions and local mobility in the two-dimensional polymer of partially ordered domains]. Cherepovets, 2005. 196 p.

Рецензенты:

Щербинин А.Г., д.т.н., доцент, профессор кафедры «Конструирование и технологии в электротехнике», ФГБОУ ВПО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», г. Пермь;

Труфанова Н.М., д.т.н., профессор, зав. кафедрой «Конструирование и технологии в электротехнике», ФГБОУ ВПО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», г. Пермь.