

УДК 532.135

ЗАВИСИМОСТЬ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕЧЕНИЯ ПОЛИМЕРНОГО РАСПЛАВА В СХОДЯЩЕМСЯ КАНАЛЕ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ¹

Кошелев К.Б. *, Пышнограй Г.В. **, Кузнецов А.Е. ***, Толстых М.Ю. ***

Институт водных и экологических проблем СОП АН, г. Барнаул, Россия**Алтайский государственный педагогический университет, г. Барнаул, Россия*****Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия*

АННОТАЦИЯ

В работе рассмотрено влияние температуры полимерного расплава на размеры вихревой области, возникающей при течении на входе в щелевой канал. Математическое моделирование трехмерного течения расплава в сходящемся плоскопараллельном канале реализуется с использованием модифицированной реологической модели Виноградова-Покровского, обобщенной для учета немонотонного характера градиентной зависимости вязкости при растяжении и при наличии остаточной вязкости с ньютоновским законом поведения. На твердой стенке были использованы условия прилипания для скорости. Температурная зависимость начальной сдвиговой вязкости полимерного расплава имеет Аррениусовский вид. Начальное время релаксации оценивалось как путем сравнения с экспериментальными данными для градиентной зависимости стационарной вязкости при одноосном растяжении, так и на основе молекулярно-кинетического подхода. Дискретные аналоги системы уравнений динамики полимерной жидкости находились методом контрольного объема с разделением по физическим процессам. При реализации численного алгоритма учитывалась возможность применения технологии параллельных вычислений на базе графических процессоров. В численных экспериментах обнаружены возвратные течения полимерного расплава перед входом в узкую часть канала и показано, что зависимость размеров вихря от температуры расплава носит немонотонный характер и проходит через максимум. Также показано, что течение полимерного расплава перед входом в щелевой канал имеет существенно трехмерный характер, размеры вихревой области, вычисленной в сечениях, проведенных на различных расстояниях от оси канала, вначале увеличиваются при приближении к твердой стенке, а затем уменьшаются. Все отмеченные в расчетах особенности наблюдаются и в реальных экспериментах на расплавах разветвленного полиэтилена низкой плотности.

Ключевые слова: реология; вязкость; температурная зависимость; расплавы полимеров; параллельные вычисления; реологическое уравнение состояния; трехмерные течения

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE HYDRODYNAMIC CHARACTERISTICS OF POLYMER MELTS FLOWS IN CONVERGING CHANNELS

Koshelev K.B. *, Pyshnograï G.V. **, Kuznetsov A.E. ***, Tolstykh M.Yu. ***

Institute for Water and Environmental Problems SB RAS, Barnaul, Russia**Altai State Pedagogical University, Barnaul, Russia*****Altai State Technical University, Barnaul, Russia*

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-41-04003 а Сибирь).

ABSTRACT

The effect of temperature of polymeric melt on the size of the vortex area arising in case of a flow on an entrance to the slot-hole channel is considered. Mathematical modeling of a three-dimensional melt flow in the converging plane-parallel channel is performed using the modified Vinogradov-Pokrovsky rheological model generalized to account the non-monotonic gradient dependence of elongation viscosity in presence of the residual viscosity with Newtonian behavior. The sticking boundary conditions for the velocity are posed on the wall. The Arrhenius temperature dependence of initial shear viscosity of polymeric melt was used. The initial relaxation time was estimated by comparison with the experimental data for gradient dependence of stationary viscosity of uniaxial elongation as well as on the basis of molecular-kinetic theory. The discrete analogs of dynamic equation systems of polymeric liquids were constructed by the control volume approach with separation on physical processes. The possibility of application of parallel computing technology based on graphical processors was considered in case of implementation of numerical algorithm. The reverse polymeric melt flows on the entrance to the channel narrow part are found on the basis of the numerical simulations. It is shown that the dependence of the vortex size on the melt temperature is non-monotonic and has a maximum. It is also shown that the polymeric fusion flow on the entrance to the slot-hole channel is significantly three-dimensional; the sizes of the vortex area calculated in the sections which are carried out at various distances from an axis of the channel initially increase at the approach to the rigid wall, and then decrease. All the features found on the basis of the simulations are observed also in real experiments on low density melts of branched polyethylene.

Keywords: rheology; viscosity; the temperature dependence; polymer melts; parallel computing; the rheological equation of state; three-dimensional flow

ВВЕДЕНИЕ

Современные синтетические полимеры по разнообразию и свойствам во многих случаях превосходят другие материалы, благодаря чему они находят широкое применение в различных областях. При этом температура является одним из важных параметров, влияющих на качество получаемых изделий. Согласно одной из имеющихся классификаций, все синтетические полимеры можно разделить на две группы: термопласты и термореактивные полимеры. Отличительной особенностью термопластов является возможность их плавления нагревом, причем при охлаждении они затвердевают, сохраняя приобретенную форму без изменения своей структуры. Такие полимеры, к которым относят полиэтилен, полипропилен, полистирол, поливинилхлорид, поликарбонат, полиэтилентерефталат, полиамид, можно переплавлять несколько раз. Термореактивные полимеры, в отличие от термопластов, отвердевают необратимо. Вследствие возникновения между макромолекулами поперечных связей их структура представляет постоянную трехмерную сеть. К ним относятся: бакелит, эпоксидные смолы, и большинство полиуретановых реактопластов.

Известно, что промышленная переработка полимеров производится в вязкотекучем состоянии, поэтому в данной работе будем рассматривать термопласты. Отметим, что большинство процессов по переработке полимеров, таких как выдувание, экструзия, литье, и др., осуществляются в областях с изменяющейся формой. Следовательно, одной из важнейших задач современной реологии является исследование течений полимерных растворов и расплавов в областях со сложной геометрией и, в частности, в сходящихся каналах. Экспериментальным и теоретическим исследованиям течений в различных

сходящихся каналах посвящено большое число работ. Объектами исследования являются различные полимеры: полиэтилен с различной структурой [1-3], полистирол, полипропилен. При этом в исследованиях отмечается наличие вторичных течений (вихрей) во входной области щелевого канала. Размеры вихрей зависят от скорости течения, температуры и других факторов. Также в литературе отмечается трехмерный характер таких течений, когда размеры вихря могут зависеть от положения секущей плоскости [1]. Кроме того, размеры вихря могут зависеть от температуры расплава, которая влияет как на начальную сдвиговую вязкость полимера, так и на времена релаксации [1-3].

Одним из способов исследования таких течений является математическое моделирование, которое содержит два взаимосвязанных шага. В первую очередь, необходимо выбрать и обосновать реологическую модель. Следующий этап – алгоритмическая реализация полученных уравнений и проведение численного эксперимента.

Отметим, что на сегодняшний день существует достаточное количество реологических моделей различной сложности как интегрального (например, модель KBKZ [4,5]), так и дифференциального (например, модель Олдройда-Б [6], модель полимера с разветвленной структурой [7] и ее модификации [8,9], модель Леонова-Прокунина [10] или модифицированная модель Виноградова-Покровского [11-15]) типов. Все эти модели описывают основные наблюдаемые в вискозиметрических экспериментах эффекты: первую и вторую разности нормальных напряжений, градиентную зависимость сдвиговой вязкости и вязкости при одноосном растяжении, немонотонное установление растягивающих и сдвиговых напряжений. Поэтому вопрос об адекватности реологических моделей сводится не только к возможности более точного описания вискозиметрических течений, но и к возможности описания сложных течений.

В данной работе математическое моделирование трехмерного течения полимерного расплава в сходящемся плоскопараллельном канале реализуется с использованием модифицированной реологической модели Виноградова-Покровского, обобщенной для учета немонотонного характера градиентной зависимости вязкости при растяжении. Дискретные аналоги были найдены методом контрольного объема с разделением по физическим процессам. При реализации численного алгоритма учитывалась возможность применения технологии параллельных вычислений CUDA на базе графических процессоров. В настоящей работе продолжаются исследования, начатые в работе [22], где были получены расчеты полей скоростей и напряжений двух образцов расплавов полиэтилена. Кроме того, в [22] отмечается наличие циркуляционного течения в области входа в щелевой канал. При этом показано, что размеры вихря существенно зависят от начального времени релаксации и сдвиговой вязкости.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Известно, что расплавы линейных и разветвленных полимеров являются нелинейными вязкоупругими средами. Для описания их течений в настоящее время часто используются уравнения, учитывающие в той или иной мере существенные особенности строения полимерных жидкостей [4,5,7-14]. Подобный учет этих особенностей достаточно сложен, поэтому 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 макроскопическому описанию осуществляется методами статистической механики [7,12,13,19]. Одной из таких моделей является модифицированная реологическая модель Виноградова-Покровского [11], дополненная уравнениями сохранения импульса и массы

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

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik} + 2\eta_1 \gamma_{ik} + 3 \frac{\eta_0}{\tau_0} a_{ik}, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} a_{ik} - v_{ij} a_{jk} - v_{kj} a_{ji} + \frac{1 + (\kappa - \beta)I}{\tau_0} a_{ik} = \frac{2}{3} \gamma_{ik} - \frac{3\beta}{\tau_0} a_{ij} a_{jk}.$$

где σ_{ik} – тензор напряжений; p – гидростатическое давление; η_0 и τ_0 – значения сдвиговой вязкости и времени релаксации для вязкоупругой составляющей; η_1 – остаточная сдвиговая вязкость ($\eta_1 \ll \eta_0$); v_{ij} – тензор градиентов скорости; a_{ik} – симметричный тензор дополнительных напряжений второго ранга; $I = a_{11} + a_{22} + a_{33}$ – первый инвариант тензора дополнительных напряжений; $\gamma_{ik} = (v_{ik} + v_{ki})/2$ – симметризованный тензор градиентов скорости; $\kappa = 1, 2, \beta$ и $\beta = \beta(I) = (\beta_0 + p_0 I)/(1 + p_0 I)$ – феноменологические параметры модели, учитывающие в уравнениях динамики макромолекулы размеры и форму молекулярного клубка; ρ – плотность полимера; v_i – i -я компонента скорости. Таким образом, параметрами этой модели являются: ρ , p_0 , β_0 , η_1 , η_0 и τ_0 . Заметим, что модель (1) отличается от описанной в [22] наличием параметров p_0 и η_1 , необходимость использования которых обсуждается далее.

Ранее было показано [11], что тензор дополнительных напряжений a_{ik} определяется отклонением тензора инерции макромолекулярного клубка от состояния равновесия отнесенным к их равновесным значениям. В случае, когда в полимерной системе реализуется течение с ненулевыми градиентами скорости, макромолекулярные клубки деформируются вдоль потока, и сплошная среда, образованная такими клубками становится анизотропной. Поэтому тензор дополнительных напряжений a_{ik} называют еще тензором наведенной анизотропии.

Отметим, что при $p_0 = \beta_0 = 0$ система уравнений (1) переходит в контравариантную модель вязкоупругой жидкости Олдройд-Б [6].

Так как модель (1) дает хорошие результаты для простых течений [11-19], то можно предположить, что она окажется подходящей для численного исследования поведения полимеров в сложных условиях деформирования, характерных для технологических процессов переработки полимеров. Такие условия могут возникать в стационарных и нестационарных течениях в круглых каналах, течениях в каналах с резко изменяющейся площадью сечения и течениях со свободной поверхностью. Важная особенность таких течений – их двух- и трехмерный характер. При этом попытки моделирования таких течений на основе уравнений (1) уже предпринимались [14,16,20]. Например, в [14,16] рассматривались двух- и трехмерные напорные течения в каналах

с прямоугольными сечениями. В этом случае градиент поля давлений был известен. В [20] для моделирования входных течений использовался осесимметричный круглый канал. Однако попытка использовать численный метод [20] для расчета плоских каналов оказалась неудачной.

Система уравнений (1) является замкнутой относительно переменных a_{ik} , v_i , p и должна быть дополнена начальными и граничными условиями. Для их постановки обсудим расчетную область, которая изображена на рис.1 и представляет собой два параллелепипеда. Первый, это резервуар или канал с квадратным сечением 14×14 мм, второй, это щелевой канал, с сечением 14×1 мм. При расчетах длины параллелепипедов выбираются достаточно большими, $-80 \leq x \leq 80$ мм, для исключения влияния как входа в резервуар, так и выхода из щелевого канала. Как следует из эксперимента, течение в такой области будет трехмерным, т.е. различным в направлениях различных осей. При этом основной поток будет направлен вдоль оси Ox ; а вдоль оси Oy будет происходить сильное сжатие потока, что может привести к появлению вихрей, вдоль же оси Oz изменения будут незначительными. Поэтому, следуя работе [22], назовем ось Ox направлением потока, ось Oy направлением, перпендикулярным потоку, а ось Oz направлением, нейтральным потоку.

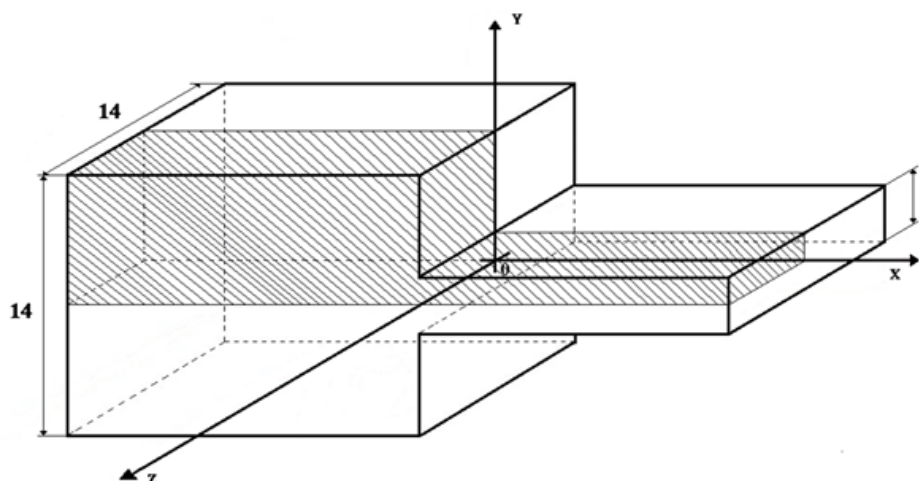


Рис.1. Расчетная область и ее размеры (мм).

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. Так как расчетная область симметрична относительно плоскостей $z = 0$ и $y = 0$, то расчеты проводились для заштрихованной на рис.1 области.

В качестве граничных условий при $z = 0$ или $y = 0$ были использованы условия симметрии или равенства нулю соответствующих частных производных. На входе в резервуар при $x = -80$ мм для компонент скорости использованы выражения $v_2(-80, y, z) = v_3(-80, y, z) = 0$ и $v_1(-80, y, z) = 9V(z - 7)^2(y - 7)^2 / 5488$ мм/с, где V – объемный расход.

Течения в плоскопараллельном канале с внезапным сужением (рис.1) обычно называют сходящимися течениями или течениями входа. Для расчетов таких течений по модели (1) необходимо определить численные значения

параметров реологической модели ρ , p_0 , β_0 , η_1 , η_0 и τ_0 . Для этого обратимся к экспериментальным данным, приведенным в [1], где исследовались течения расплавов полиэтиленов различной плотности. При этом в работе [1] приведены данные по градиентной зависимости стационарной сдвиговой вязкости, а в работе [2] построена зависимость стационарной вязкости при одноосном растяжении. Параметры модели $\beta = 0,1$ и $p_0 = 0,005$ подбирались из условия наилучшего совпадения экспериментальных и теоретических зависимостей для сдвиговой вязкости и вязкости при одноосном растяжении. Результаты сравнения этих зависимостей приведены на рис.2. Пересчет значений η_0 и τ_0 для простого сдвига осуществлялся по формулам

$$\eta_0(T) = \eta_0(T_0) \cdot 10^{\frac{E_a}{2,3R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)}, \quad \tau_0(T) = \frac{\eta_0(T) \cdot M}{\rho RT}, \quad (2)$$

где R – универсальная газовая постоянная, $E_a = 58$ КДж/моль – энергия активации [2], $T_0 = 150$ °С.

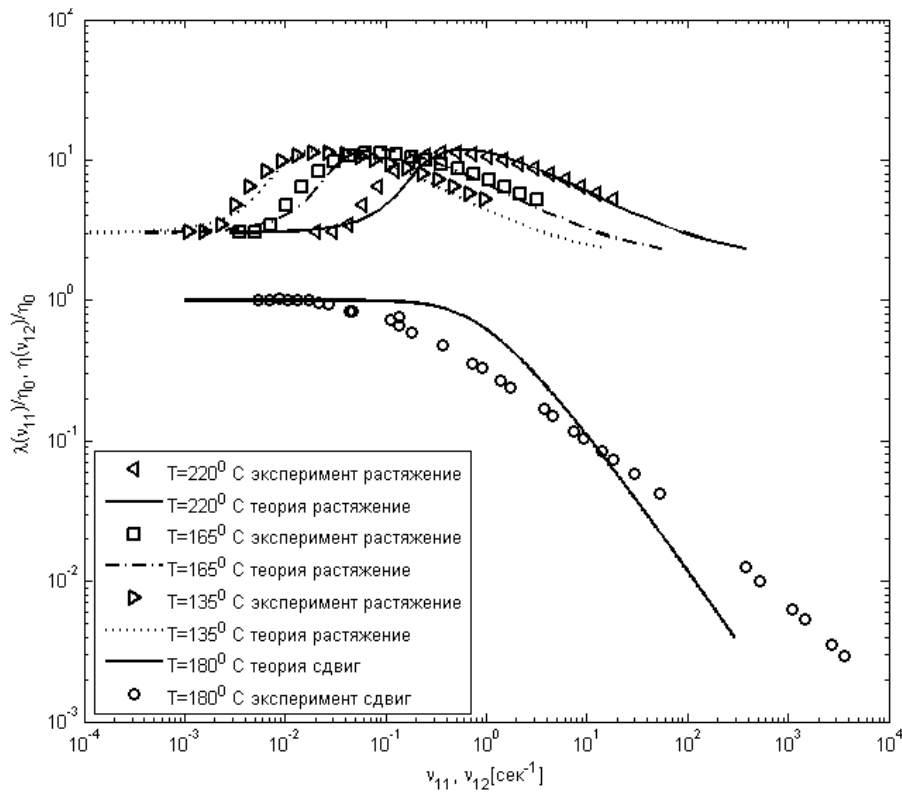


Рис.2. Сравнение теоретических и экспериментальных зависимостей стационарной вязкости при растяжении от скорости удлинения для различных значений температуры и стационарной сдвиговой вязкости от скорости сдвига.

Для одноосного растяжения значения τ_0 подбирались таким образом, чтобы точнее описать начальный участок возрастания элонгационной вязкости, а значения p_0 подбирались для участка убывания элонгационной вязкости.

Заметим, что влияние параметра p_0 на вид стационарных и нестационарных вискозиметрических функций было исследовано в работе [32], где было отмечено,

что этот параметр незначительно влияет на зависимость стационарной сдвиговой вязкости. Он был введен для описания немонотонного характера стационарной вязкости при одноосном растяжении.

Полученные значения начальных вязкостей и времен релаксации представлены в Таблице 1.

Таблица 1.

T [°C]	η_0 [Па · сек]	τ_0 [сек] по (2)	τ_0 [сек] из эксперимента [1]
135	100000	7,9	85
150	54500	4,1	44
165	30900	2,3	25
180	18200	1,3	14
200	9480	0,6	6,2
220	5200	0,3	3,2

Можно заметить, что начальные времена релаксации в третьем и четвертом столбцах таблицы отличаются от экспериментальных данных на один порядок. Это можно объяснить различием в процессах релаксации при сдвиге и растяжении. При сдвиге макромолекулярный клубок движется как целое и для его деформации необходимо приложить большие скорости сдвига, что приводит к уменьшению времени релаксации. При одноосном растяжении происходит процесс выпутывания макромолекулы и поэтому нелинейные особенности течения проявляются при меньших скоростях растяжения, что соответствует большему времени релаксации. Предварительные расчеты, проведенные в [22], показали, что параметры модели, рассчитанные по (2), лучше описывают течения полимерных расплавов и растворов в сходящемся канале и поэтому в данной работе в качестве τ_0 были выбраны значения, рассчитанные по (2). Принимая во внимание, что оптимальные значения τ_0 могут лежать в соответствующем интервале.

Значения плотности ρ были приведены в работе [1] и для полиэтилена низкой плотности составляют 918 кг/м³. Что касается остаточной вязкости η_1 , то ее значения выбирались $\eta_1 = 0,005 \cdot \eta_0$ и ее влияние на рис.2 не видно. Этот параметр введен в модель, чтобы при больших градиентах скорости, которые могут наблюдаться на этапе установления поля скоростей и напряжений, реологическая модель не переходила в модель идеальной жидкости. Чтобы обнаружить эту вязкость в вискозиметрических экспериментах для полимерных расплавов, нужно существенно расширить диапазон скоростей сдвига, в то же время, для концентрированных растворов этот параметр легко определяется [33] и является не просто вязкостью растворителя, но и зависит от концентрации полимера. Влияние η_1 на конечные результаты мало, но позволяет обеспечить существенно больший шаг по времени на начальном этапе вычислений, когда имеющееся приближение требует значительно перестройки.

Наличие расхождения между теоретическими и экспериментальными зависимостями можно объяснить одномодовым характером реологической модели (1) так как при ее выводе учитывается только один, самый медленный релаксационный процесс. Учет множественности релаксационных процессов, как показано в [23], позволяет более точно описать вискозиметрические функции, но приводит к существенному усложнению модели.

2. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Методика расчетов строится таким образом, чтобы ее можно было относительно легко реализовать при создании компьютерной модели с использованием технологии CUDA – программно-аппаратной архитектуры параллельных вычислений, которая позволяет существенно увеличить вычислительную производительность благодаря использованию графических процессоров [24-26]. Для нахождения решения использовался конечно-разностный подход. При разностной аппроксимации применялся метод контрольного объема, что не вызывает сложности при относительно простой геометрии области. Детали построения разностной схемы и организации вычислений подробно обсуждались в работе [22] и поэтому здесь не приводятся.

Известно, что обоснование применения численного метода к решению систем уравнений в частных производных включает в себя оценку аппроксимации, устойчивости и сходимости выбранной расчетной схемы. Очень часто эти задачи оказываются не менее сложными, чем решение полученных систем нелинейных уравнений.

Недавно в работе [27] были найдены условия t -гиперболичности системы (1). В силу квазилинейности, при известном давлении p , эти условия проверяются на известном решении, что позволило получить аналоги решений Пуазейля и Куэтта для системы уравнений Навье-Стокса, а также стационарные разрывные решения.

Также была обнаружена линейная неустойчивость течения типа Пуазейля в бесконечном плоском канале [28]. Этот результат согласуется с аналогичным фактом для вязкого газа, высказанным Гейзенбергом [29], а затем строго подтвержденным Крыловым [30].

Если же рассматривать не произвольные возмущения течения типа Пуазейля, а ограничиться возмущениями, периодическими по переменной, связанной с длиной бесконечного канала, то оказывается, что выбранное стационарное решение не обладает свойством асимптотической устойчивости в смысле Ляпунова [31].

Заметим, что решение вопроса об устойчивости стационарных решений системы уравнений (1) является принципиально важным, так как знание этого факта поможет в будущем четко очертить границы области применимости сформулированной модели. При этом очевидно, что при применении модели (1) к реальным течениям полимерных расплавов следует искать нестационарные решения этой системы.

Для оценки аппроксимационных свойств расчетной схемы проводились расчеты на сетках с различным шагом, причем измельчение шага производилось в области входа в целевой канал, что было удобно делать, так как была использована неравномерная сетка.

Устойчивость численного метода гарантируется как применением неявной схемы, так и использованием релаксации при переходе на следующий шаг итерации.

Для обеспечения сходимости расчеты производились для нестационарной задачи на интервале, превышающем начальное время релаксации τ_0 в несколько раз.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными обратимся к [1]. В этой работе было исследовано влияние температуры и удельного расхода расплава разветвленного полиэтилена низкой плотности на размеры вихревой зоны при входе в щелевой канал. Обнаружено, что для таких течений существует выраженный вторичный поток в углах проточного канала, размеры которого существенно зависят как от температуры расплава, так и от удельного расхода. Эти вихри изменяли свою форму в параллельных оси канала сечениях, что характеризует трехмерный характер поля течения. Кроме того, отмечено, что в исследуемом вихревом течении существует винтовой поток, который направлен к стенкам резервуара. Особое внимание уделено распределению скорости вдоль оси симметрии канала. Обнаружено, что максимальное значение скорости наблюдается непосредственно за входом в щелевую часть канала. Также в экспериментах [1-3] отмечено, что при больших расходах все измеряемые величины совершают осцилляции около стационарных значений, которые можно найти усреднением по периоду колебаний.

Обратимся теперь к результатам численного эксперимента. В первую очередь заметим, что в расчетах так же, как и в экспериментах, не удается достигнуть стационарных значений, так как рассчитанные профили скорости, напряжений и давлений колеблются около стационарных значений. Величина этих колебаний не превышает 10 процентов для составляющих вектора скорости, что позволяет провести сравнение с экспериментом, которое приведено на рис.3. Как в эксперименте, так и в расчете обнаружено наличие вихревой зоны перед входом в щелевой канал. Так как в расчетах используется неравномерная сетка, то на правом рисунке для изображения вектора скорости применяется мелкий масштаб. На самом деле значения модулей скорости близки, что гарантируется совпадением расходных характеристик.

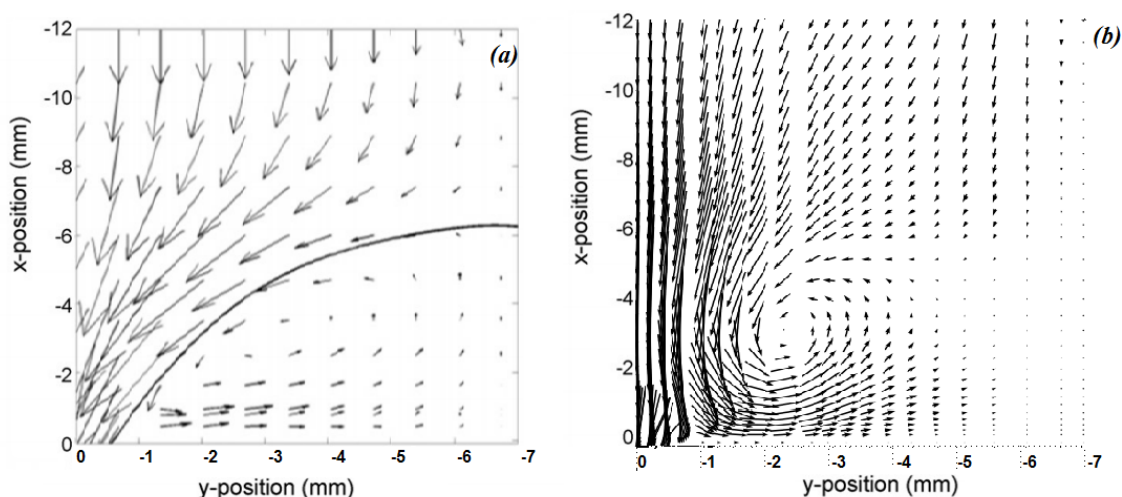


Рис.3. Сравнение экспериментальных (а) и теоретических (б) полей вектора скорости полимерного образца в области входа в щелевой канал ($V=0,20 \text{ см}^3/\text{с.}$) при $180 \text{ }^\circ\text{C}$.

Таким образом, одной из существенных характеристик таких течений являются размеры вихря или его площадь. В работе [1] предложено рассчитывать площадь вихря по следующей методике.

Вначале ищем значения $f(x)$, для которых $\int_{-7}^{f(x)} u(y)dy = 0$, а затем находим

площадь под кривой $f(x)$. Заметим, что эта методика будет давать хороший результат только в случае, когда составляющая вектора скорости в направлении нейтральном потоке много меньше, чем в двух других направлениях.

Будем теперь вычислять площади вихревых зон при сечении потока плоскостями $z = const$. Сравнивая приведенные на рис.4 экспериментальные и расчетные зависимости размеров вихря от расстояния до оси канала можно сделать вывод об увеличении интенсивности вихревых течений при удалении от оси канала. Этот факт можно объяснить эффектом Вайсенберга. Из приведенного сравнения можно сделать вывод о качественном соответствии экспериментальных и расчетных данных. Отметим, что в расчеты, проведенные для ньютоновского закона поведения ($\tau_0 = 0; \beta_0 = p_0 = 0$) демонстрируют отсутствие вихревых зон, а расчеты для вязкоупругой жидкости Олдройда-Б ($\beta_0 = p_0 = 0$) демонстрируют заниженные значения площади вихря и отсутствие увеличения интенсивности вихря при удалении сечения от оси канала.

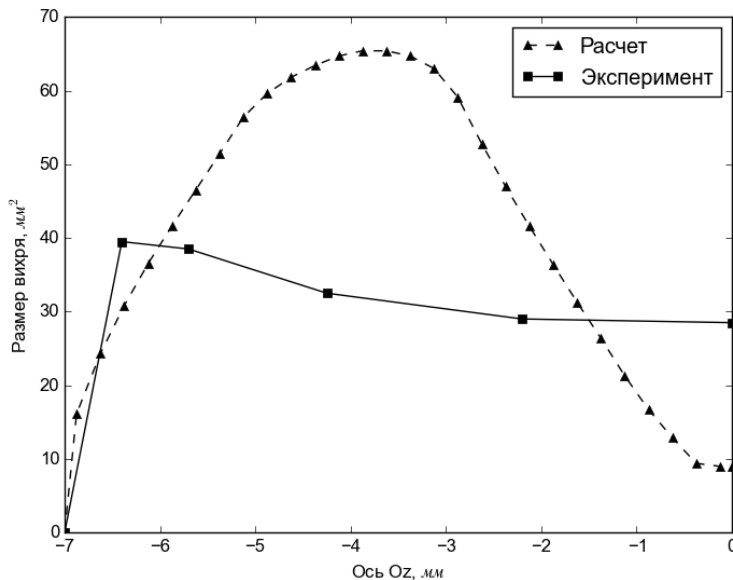


Рис.4. Размеры вихря в различных сечениях при $T=180^{\circ}\text{C}$.

Рассмотрим, как зависят размеры вихревой зоны от температуры полимерного расплава. На рис.5 приведены рассчитанные значения площади вихря в осевом сечении при различных значениях температуры. Так как температура влияет, как на начальную сдвиговую вязкость η_0 , так и на начальное время релаксации τ_0 , приводя к их уменьшению с ростом температуры, как видно из таблицы 1, то ее влияние оказывается достаточно сложным. Вначале с ростом температуры размеры вихря увеличиваются, а затем, пройдя через максимум, начинают уменьшаться. Такой немонотонный характер зависимости наблюдается и в экспериментах, результаты которых также приведены на рис.5.

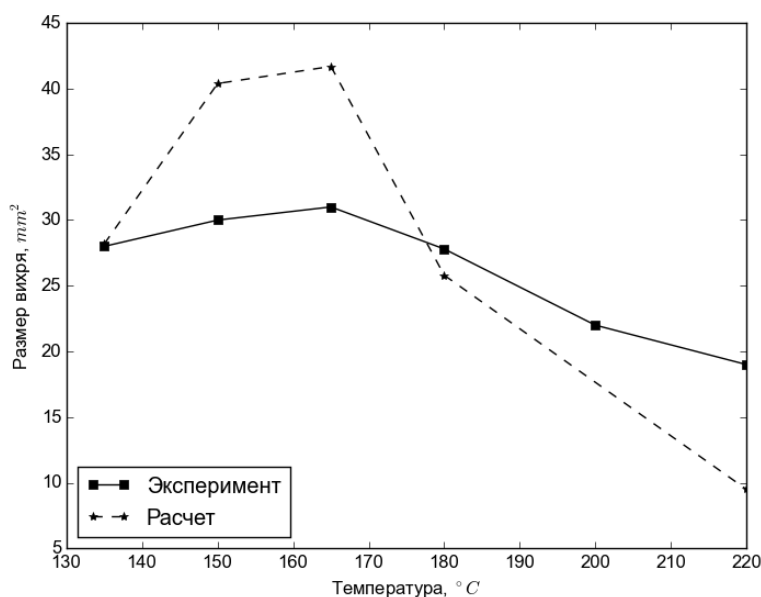


Рис.5. Зависимость размеров вихря от температуры расплава.

Анализируя результаты, приведенные на рис.4 и 5, можно отметить расхождения между теоретическими и экспериментальными зависимостями, которые могут достигать двух раз. Можно ли такую точность считать приемлемой или это говорит о неадекватности реологической модели (1)?

Заметим, что в случае, когда речь идет о моделировании вискозиметрических функций, рассчитанных на основе модели (1), то, как показано в [32], эти различия могут достигать 5-10 раз для установления напряжений при простом сдвиге и одноосном растяжении. Это также видно и на рис.2 для стационарной сдвиговой вязкости при значении скорости сдвига $0,7 \text{ сек.}^{-1}$. Такой недостаток модели легко преодолим переходом к многомодовому приближению [23]. При этом в рассмотрение вводятся несколько релаксационных процессов временные масштабы, которых могут отличаться на четыре порядка. И если при моделировании вискозиметрических течений, в силу их простоты, это не представляет сложности, то при моделировании трехмерных течений этот факт может привести не только к существенному увеличению расчетного времени, но и к невозможности выполнения расчетов за счет повышения «жесткости» решаемой системы. Также заметим, что в работе [22] при изменении начального времени релаксации с 2 сек. до 0,2 сек. размеры вихревой зоны уменьшились до нуля. Другими словами погрешности в определении времен релаксации могут существенно менять картину течения и поэтому достигнутую на рис.4 и 5 точность расчетов можно считать приемлемой. В любом случае этот вопрос требует всестороннего изучения как с точки зрения сходимости численных схем, так и с точки зрения адекватности описания исследуемых процессов.

Это позволяет утверждать, что модель (1) качественно описывает отмеченные здесь эксперименты, и различия между экспериментальными и теоретическими кривыми можно отнести, как на счет неточности в определении параметра τ_0 , так и на счет одномодового характера модели (1) или колебательного характера получаемых решений. Возможно, что это является

следствием неустойчивости, присущей изучаемому течению, при этом осцилляции вектора скорости возможны как по абсолютной величине, так и незначительно, по направлению, что позволяет провести усреднение наблюдаемых величин по периоду осцилляций. Несмотря на это, следует отметить, что рассматриваемое здесь течение не является турбулентным; другими словами, наблюдаемые осцилляции носят не хаотический, а регулярный характер. Так или иначе, эти вопросы требуют дополнительных исследований, которые будут выполнены в следующих работах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе проведено сравнение гидродинамических характеристик течений полимерных расплавов при различных температурах в сходящемся канале с прямоугольным сечением и показано, что внезапное сужение канала приводит к появлению вихревого течения, размеры которого проходят через максимум при увеличении температуры расплава, что обнаруживается в экспериментах. Это является ещё одним подтверждением возможности применения модифицированной реологической модели Виноградова-Покровского для описания течений полимерных расплавов в областях со сложной геометрией. Также полученные в работе результаты служат доказательством эффективности применения технологии параллельных вычислений CUDA при нестационарных расчетах трехмерных течений нелинейных вязкоупругих сред с реологическим законом поведения в дифференциальной форме.

Из приведенных расчетов видно, что сходящиеся течения некоторых полимерных расплавов могут демонстрировать существенную трехмерную картину, которая проявляется в наличии компонент скорости в нейтральном потоке направлении. Это следует принимать во внимание при организации экспериментов, так как есть методы, которые не в состоянии измерять все компоненты скорости. Также следует отметить, что профиль скорости в щелевой части канала устанавливается на значительном расстоянии от входа в канал. Это следует учитывать при проведении замеров в узкой части каналов.

В данной статье не обсуждаются многие вопросы, связанные с течениями в сходящихся каналах. Например, не рассматривается как геометрия канала, молекулярная структура полимера или увеличение расхода могут повлиять на картину течения. Эти и другие вопросы могут быть изучены в последующих работах на основе разработанной математической модели и опробованных здесь численных методах.

Авторы выражают глубокую признательность Сибирскому суперкомпьютерному центру и кластеру Нижегородского государственного университета за возможность проведения расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hertel D., Valette R., Munstedt H. *Three-dimensional entrance flow of a low-density polyethylene (LDPE) and a linear low-density polyethylene (LLDPE) into a slit die* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 2008. – Vol.153. – P.82-94.

2. Hertel D., Munstedt H. *Dependence of the secondary flow of a low-density polyethylene on processing parameters as investigated by laser-Doppler velocimetry* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 2008. – Vol.153. – P.73-81.
3. Munstedt H., Schmidt M., Wassner E. *Stick and slip phenomena during extrusion of polyethylene melts as investigated by laser-Doppler velocimetry* // J. Rheology. – 2000. – Vol.44. – N2. – P.413-427.
4. Papanastasiou A.C., Scriven L.E., Macosko C.W. *An Integral Constitutive Equation for Mixed Flows: Viscoelastic Characterization* // J. Rheology. – 1983. – Vol.27. – P.387-410.
5. Olley P. *An adaptation of the separable KBKZ equation for comparable response in planar and axisymmetric flow* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 2000. – Vol.95. – P.35-53.
6. Oldroyd J. *On the Formulation of Rheological Equations of State* // Proc. of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. – 1953. – Vol.200(1063). – P.523-541.
7. McLeish T.C.B., Larson R.G. *Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer* // J. Rheology. – 1998. – Vol.42. – P.81-110.
8. Peters G.W.M., Schoonen J.F.M., Baaijens F.P.T., Meijer H.E.H. *On the performance of enhanced constitutive models for polymer melts in a cross-slot flow* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 1999. – Vol.82. – P.387-427.
9. Verbeeten W.M.H., Peters G.W.M., Baaijens F.P.T. *Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom-Pom model* // J. Rheology. – 2001. – Vol.45. – Pp.823-843.
10. Leonov A.I., Prokunin A.N. *Nonlinear Phenomena in Flows of Viscoelastic Polymer Fluids*. – New York: Chapman and Hall, 1994. – 395 p.
11. Пышнограй Г.В., Покровский В.Н., Яновский Ю.Г., Образцов И.Ф., Карнет Ю.Н. *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.
12. Pyshnograï G.V., Gusev A.S., Pokrovskii V.N. *Constitutive Equations for Weakly Entangled Linear Polymers* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 2009. – Vol.163. – N1-3. – P.17-28.
13. Pokrovskii V.N. *The Mesoscopic Theory of Polymer Dynamics. 2nd Edition* – Berlin: Springer, 2010. – 184 p.
14. 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.
15. 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.
16. 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.
17. 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. – Vol.121. – N2-3. – P.73-86.

18. Pokrovskii V.N., Altukhov Y.A., Pyshnograï G.V. *The mesoscopic approach to the dynamics of polymer melts: consequences for the constitutive equation* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 1998. – Vol.76. – N1-3. – P.153-181.
19. Алтухов Ю.А., Головичева И.Э., Пышнограï Г.В. *Молекулярный подход в динамике линейных полимеров: теория и численный эксперимент* // Известия РАН. МЖГ. – 2000. – №1. – С.3-13.
20. Алтухов Ю.А., Пышнограï Г.В. *Входные течения в канале 4:1 текучих линейных полимеров* // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2001. – Т.7. – №1. – С.16-23.
21. Mitsoulis E., Schwetz M, Munstedt H. *Entry flow of LDPE melts in a planar contraction* // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 2003. – Vol.111. – P.41-61.
22. Кошелев К.Б., Пышнограï Г.В., Толстых М.Ю. *Моделирование трехмерного течения полимерного расплава в сходящемся канале с прямоугольным сечением* // Известия РАН. МЖГ. – 2015. – №3. – С.16-24.
23. Мерзликина Д.А., Пышнограï Г.В., Пивоконский Р., Филип П. *Реологическая модель для описания вискозиметрических течений расплавов разветвленных полимеров* // Инженерно-физический журнал. – 2016. – Т.89. – №3. – С.643-652.
24. Gaurav Sharma, Jos Martin *MATLAB: A Language for Parallel Computing* // Intern. J. of Parallel Programming. – 2009. – Vol.37. – N1. – P.3-36.
25. Kanupriya Gulati, Sunil P. Khatri *GPU Architecture and the CUDA Programming Model* // Hardware Acceleration of EDA Algorithms. – 2010. – P.23-30.
26. Dariusz Mrozek, Miłosz Brożek, Bożena Małysiak-Mrozek *Parallel implementation of 3D protein structure similarity searches using a GPU and the CUDA* // J. of Molecular Modeling. – 2014. – Vol.20. – N2. – P.1-17.
27. Бамбаева Н.В., Блохин А.Н. *Стационарные решения уравнений несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014. – Т.54. – №5. – С.845-870.
28. Блохин А.М., Ткачев Д.Л. *Линейная неустойчивость решений математической модели, описывающей течения полимеров в бесконечном канале* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2015. – Т.55. – №5. – С.122-147.
29. Heisenberg W. *Über Stabilität und Turbulenz von Flüssigkeitsströmen* // Ann. Phys. – 1924. – Vol.74. – P.577-627.
30. Крылов А.Н. *Об устойчивости течения Пуазейля в плоском канале* // Доклады АН СССР. – 1964. – Т.158. – №5. – С.978-881.
31. Блохин А.М., Ткачев Д.Л. *Линейная асимптотическая неустойчивость стационарного течения полимерной среды в плоском канале в случае периодических возмущений* // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2014. – Т.ХVII. – №3(59). – С.13-25.
32. Аль Джода Х.Н.А., Афонин Г.Л., Мерзликина Д.А., Филип П., Пивоконский Р., Пышнограï Г.В. *Модификация закона внутреннего трения в мезоскопической теории текучих полимерных сред* // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2013. – Т.19. – №1. – С.124-135.
33. Шиповская А.Б., Абрамов А.Ю., Пышнограï Г.В., Аль Джода Х.Н.А. *Реологические свойства воднокислотных растворов хитозана: эксперимент и расчеты вискозиметрических функций на основе мезоскопической модели* // Инженерно-физический журнал. – 2016. – Т.89. – №3. – С.632-642.

REFERENCES

1. Hertel D., Valette R., Munstedt H. *Three-dimensional entrance flow of a low-density polyethylene (LDPE) and a linear low-density polyethylene (LLDPE) into a slit die*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2008, Vol.153, Pp.82-94.
2. Hertel D., Munstedt H. *Dependence of the secondary flow of a low-density polyethylene on processing parameters as investigated by laser-Doppler velocimetry*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2008, Vol.153, Pp.73-81.
3. Munstedt H., Schmidt M., Wassner E. *Stick and slip phenomena during extrusion of polyethylene melts as investigated by laser-Doppler velocimetry*. J. Rheol., 2000, Vol.44, No.2, Pp.413-427.
4. Papanastasiou A.C., Scriven L.E., Macosko C.W. *An Integral Constitutive Equation for Mixed Flows: Viscoelastic Characterization*. J. Rheol., 1983, Vol.27, Pp.387-410.
5. Olley P. *An adaptation of the separable KBKZ equation for comparable response in planar and axisymmetric flow*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2000, Vol.95, Pp.35-53.
6. Oldroyd J. *On the formulation of rheological equations of state*. Proc. of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1953, Vol.200, Pp.523-541.
7. McLeish T.C.B., Larson R.G. *Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer*. J. Rheol., 1998, Vol.42, Pp.81-110.
8. Peters G.W.M., Schoonen J.F.M., Baaijens F.P.T., Meijer H.E.H. *On the performance of enhanced constitutive models for polymer melts in a cross-slot flow*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 1999, Vol.82, Pp.387-427.
9. 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, Vol.45, Pp.823-843.
10. Leonov A.I., Prokunin A.N. *Nonlinear phenomena in flows of viscoelastic polymer fluids*. New York: Chapman and Hall, 1994, Pp.356-395.
11. Pyshnograi G.V., Pokrovskii V.N., Ianovskii Iu.G., Obraztsov I.F., Karnet Iu.N. *Opredelianiushchee uravnenie nelineinykh viazkouprugikh (polimernykh) sred v nulevom priblizhenii po parametram molekuliarnoi teorii i sledstviia dlia sdviga i rastiazheniia [Nonlinear viscoelastic constitutive equation (polymer) environments in the zero approximation in the parameters of molecular theory and implications for shear and tensile]*. Doklady AN, 1994, Vol.335, No.9, Pp.612-615.
12. Pyshnograi G.V., Gusev A.S., Pokrovskii V.N. *Constitutive equations for weakly entangled linear polymers*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2009, Vol.163, No.1-3, Pp.17-28.
13. Pokrovskii V.N. *The mesoscopic theory of polymer dynamics. 2nd Edition*. Berlin: Springer, 2010, 184 p.
14. Kuznetsova Iu.L., Skul'skii O.I., Pyshnograi G.V. *Techenie nelineinnoi viazkouprugoi zhidkosti v ploskom kanale pod deistviem zadannogo gradienta davleniia [Pressure driven flow of a nonlinear viscoelastic fluid in a plane channel]*. Vychislitel'naia mekhanika sploshnykh sred, 2010, Vol.3, No.2, Pp.55-69.
15. Gusev A.S., Makarova M.A., Pyshnograi G.V. *Mezoskopicheskoe uravnenie sostoianiia polimernykh sred i opisanie dinamicheskikh kharakteristik na ego osnove [Mesoscopic equation of state for polymeric media and the description of the dynamic characteristics based on it]*. J. of Engineering Physics and Thermophysics, 2005, Vol.78, No.5, Pp.55-61.

16. Altukhov Iu.A., Samoilov V.S., Pyshnograi I.G., Pyshnograi G.V. *Modelirovanie 3D profil'ia skorosti nelineinoi viazkouprugoi zhidkosti v kanale s kvadratnym secheniem [3D velocity profile modeling of nonlinear viscoelastic fluid flow in the channel with square section]*. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii, 2012, Vol.18, No.3, Pp.325-332.
17. Altukhov Y.A., Pyshnograi G.V., Pokrovskii V.N. *On the difference between weakly and strongly entangled linear polymers*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2004, Vol.121, No.2-3, Pp.73-86.
18. Pokrovskii V.N., Altukhov Y.A., Pyshnograi G.V. *The mesoscopic approach to the dynamics of polymer melts: consequences for the constitutive equation*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 1998, Vol.76, No.1-3, Pp.153-181.
19. Altukhov Iu.A., Golovicheva I.E., Pyshnograi G.V. *Molekuliarnyi podkhod v dinamike lineinykh polimerov: teoriia i chislennyi eksperiment [Molecular approach to the dynamics of linear polymers: theory and numerical experiment]*. Fluid Dynamics, 2000, No.1, Pp.3-13.
20. Altukhov Iu.A., Pyshnograi G.V. *Vkhodnye techeniia v kanale 4:1 tekuchikh lineinykh polimerov [The input flow channel 4: 1 flowable linear polymers]*. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii, 2001, No.1, Pp.16-23.
21. Mitsoulis E., Schwetz M, Munstedt H. *Entry flow of LDPE melts in a planar contraction*. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2003, Vol.111, Pp.41-61.
22. Koshelev K.B., Pyshnograi G.V., Tolstykh M.Iu. *Modelirovanie trekhmernogo techeniia polimernogo raspava v skhodiashchemsia kanale s priamougol'nym secheniem [Simulation of three-dimensional flow of the polymer melt in a converging channel with a rectangular cross-section]*. Fluid Dynamics, 2015, No.3, Pp.16-24.
23. Merzlikina D.A., Pyshnograi G.V., Pivokonskii R., Filip P. *Reologicheskaia model' dlia opisaniia viskozimetricheskikh techenii raspavov razvetvlennykh polimerov [Rheological model for describing viscometric flows melts of branched polymers]*. J. of Engineering Physics and Thermophysics, 2016, Vol.89, No.3, Pp.643-652.
24. Gaurav Sharma, Jos Martin *MATLAB: A Language for Parallel Computing*. Intern. J. of Parallel Programming, 2009, Vol.37, Iss.1, Pp.3-36.
25. Kanupriya Gulati, Sunil P. Khatri *GPU Architecture and the CUDA Programming Model*. Hardware Acceleration of EDA Algorithms, 2010, Pp.23-30.
26. Dariusz Mrozek, Miłosz Brożek, Bożena Małysiak-Mrozek *Parallel implementation of 3D protein structure similarity searches using a GPU and the CUDA*. J. of Molecular Modeling, 2014, Vol.20, No.2, Pp.1-17.
27. Bambaeva N.V., Blokhin A.N. *Statsionarnye resheniia uravnenii neszimaemoi viazkouprugoi polimernoi zhidkosti [Stationary solutions of incompressible viscoelastic polymer fluid]*. Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2014. Vol.54, No.5, Pp.845-870.
28. Blokhin A.M., Tkachev D.L. *Lineinaia neustoichivost' reshenii matematicheskoi modeli, opisuyvaiushchei techeniia polimerov v beskonechnom kanale [Linear stability of solutions of mathematical models describing the flow of polymers in an infinite channel]*. J. of Engineering Physics and Thermophysics, 2015, Vol.55, No.5, Pp.122-147.
29. Heisenberg W. *Uber Stabilitat und Turbulenz von Flussigkeitsstromen*. Ann. Phys., 1924, Vol.74, Pp.577-627.
30. Krylov A.N. *Ob ustoichivosti techeniia Puazeilia v ploskom kanale [On the stability of Poiseuille flow in a flat channel]*. DAN SSSR, 1964, Vol.158, No.5, Pp.978-881.

31. Blokhin A.M., Tkachev D.L. *Lineinaia asimptoticheskaia neustoichivost' statsionarnogo techeniia polimernoi sredy v ploskom kanale v sluchae periodicheskikh vozmushchenii* [Linear asymptotic instability of steady flow of the polymer medium in a flat channel in the case of periodic disturbances]. J. of Applied and Industrial Mathematics, 2014, Vol.XVII, No.3(59), Pp.13-25.
32. Al' Dzhoda Kh.N.A., Afonin G.L., Merzlikina D.A., Filip P., Pivokonskii R., Pyshnograi G.V. *Modifikatsiia zakona vnutrennego treniia v mezoskopicheskoi teorii tekuchikh polimernykh sred* [Modification of the internal friction law in mesoscopic theory flowable polymer media]. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktсии, 2013, Vol.19, No.1, Pp.124-135.
33. Shipovskaia A.B., Abramov A.Iu., Pyshnograi G.V., Al' Dzhoda Kh.N.A. *Reologicheskie svoistva vodnokislotnykh rastvorov khitozana: eksperiment i raschety viskozimetricheskikh funktsii na osnove mezoskopicheskoi modeli* [The rheological properties of chitosan solutions vodnokislotnyh: experiment and calculations viscometric functions based on mesoscopic models]. J. of Engineering Physics and Thermophysics, 2016, Vol.89, No.3, Pp.632-642.

Поступила в редакцию 22 марта 2016 года

Сведения об авторах:

Кошелев Константин Борисович – к.ф.-м.н., ст.н.с., Институт водных и экологических проблем СОРАН, г. Барнаул, Россия; e-mail: koshelevkb@mail.ru
Пышнограй Григорий Владимирович - д.ф.-м.н., проф., Алтайский государственный педагогический университет, г. Барнаул, Россия; e-mail: pyshnograi@mail.ru
Кузнецов Александр Евгеньевич, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия; e-mail: san-smith@mail.ru
Толстых Михаил Юрьевич, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия; e-mail: mister.tolstykh.m@mail.ru