

УДК 677.072.6

РЕЗАНОВА В.Г.

Київський національний університет технологій та дизайну

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА КОМП'ЮТЕРНА ВІЗУАЛІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ СПЕЦИФІЧНОГО ВОЛОКНОУТВОРЕННЯ

Мета. Розробка програмного забезпечення для розрахунку ступеня деформації краплі полімеру дисперсної фази в дисперсійному середовищі та візуалізації процесу специфічного волокноутворення.

Методика. Дослідження процесу деформації краплі в полімерній дисперсії здійснювали з позицій структурно-континуального підходу, який враховує основні положення класичної механіки рідини та зміни структури дисперсної фази при течії. Програмне забезпечення розробляли в середовищі Delphi мовою Object Pascal.

Результати. Показано, що з використанням математичної моделі деформації краплі полімеру дисперсної фази при течії сумішей полімерів виконані розрахунки та програмним чином здійснено візуалізацію процесу переходу краплі у мікрОВОЛКНО.

Наукова новизна. Вперше розроблено програмне забезпечення для візуалізації та анімації процесу специфічного волокноутворення.

Практична значимість. Використання створеної програми дозволить прискорити дослідження, зменшити матеріальні і енергетичні затрати на їх проведення за рахунок моделювання процесів на ПЕОМ, а також наглядно демонструвати візуалізацію явища специфічного волокноутворення під час навчального процесу студентам.

Ключові слова: суміші полімерів, крапля, деформація, візуалізація, програмне забезпечення.

Вступ. Використання сумішей полімерів – простий, доступний та ефективний метод їх модифікації, оскільки дає можливість не просто поєднувати властивості обох компонентів в одному виробі, але й забезпечує реалізацію унікальних ефектів. Прикладом цього є явище специфічного волокноутворення, суть якого полягає в тому, що за відповідних умов полімер дисперсної фази утворює в дисперсійному середовищі струмені (мікрОВОЛКНА) від мікро- до нанорозмірів [1-4]. Це відкриває шлях для одержання тонковолокнистих полімерних матеріалів з новими характеристиками та самоармованих композиційних виробів. На сьогодні при створенні полімерних композицій керуються, головним чином, практичними міркуваннями, тобто емпіричний пошук випереджає розвиток теорії. Однак лише науково обґрунтований підхід до вибору хімічної природи полімерів, їх співвідношення та встановлення закономірностей зміни макрореологічних властивостей суміші від її мікроструктури дозволить одержувати матеріали з наперед заданими показниками. Проводячи експерименти, дослідники кожного разу вимушені розглядати безліч різноманітних варіантів, покладаючись на власний досвід та інтуїцію. При цьому традиційні методи часто є довготривалими і потребують значних матеріальних затрат. Прискоренню і вдосконаленню досліджень, пов'язаних з багатофакторними експериментами, та знаходженню оптимальних рішень сприяє використання методів математичного та комп'ютерного моделювання складних явищ і процесів, що мають місце в полімерних системах.

Постановка завдання. Суміші полімерів – це особливий клас колоїдних дисперсій типу «полімер в полімері». Важливою їх відмінністю є утворення між обома компонентами міжфазного перехідного шару, властивості якого різко відрізняються від аналогічних

характеристик розплаву полімеру в об'ємі. Дослідження дисперсних систем методом математичного моделювання показали, що для опису макро- і мікрореологічної поведінки розплавів сумішей полімерів можуть бути використані ті ж самі підходи класичної механіки та структурні моделі, які застосовуються при моделюванні систем типу суспензій, емульсій та колоїдних розчинів. Найбільш придатним для розробки математичних моделей дисперсій є запропонований авторами [5-7] структурно-континуальний підхід, який поєднує феноменологічний та структурний методи і дає можливість враховувати всі основні положення континуальної механіки (суцільність середовища, нерозривність функцій, що характеризують його рух і стан) та особливості поведінки дисперсної фази. В раніше виконаних нами роботах з позицій структурно-континуального підходу була створена математична модель деформації крапель компоненту дисперсної фази при течії розплаву суміші полімерів [8]. Модель представляє собою систему диференціальних рівнянь, яка дозволяє визначати орієнтацію крапель в потоці та величину деформації в залежності від реологічних властивостей компонентів суміші, об'ємної концентрації дисперсної фази та величини міжфазного натягу. Для подальшого вивчення впливу різних факторів на характер течії полімерної дисперсії, наглядної демонстрації вказаного явища під час навчального процесу студентам та зменшення кількості дослідів і економії ресурсів виникла необхідність розробки комп'ютерної візуалізації досліджуваного процесу.

Мета роботи – розробка програмного забезпечення для розрахунку ступеня деформації краплі полімеру дисперсної фази в дисперсійному середовищі та візуалізації процесу специфічного волокнутворення.

Результати досліджень. Теоретичні дослідження в механіці дисперсних систем свідчать, що за їх течії в дисперсійному середовищі виникають напруги, які передаються краплям дисперсної фази та забезпечують деформацію і орієнтацію останніх в потоці. За малих градієнтів швидкості крапля набуває форму еліпсоїда обертання, а за великих – перетворюється в рідкий циліндр. Для переробки полімерів і їх сумішей використовується екструзійне обладнання, в якому завжди є зона, де розплав тече із широкого резервуару у вузький. За такої геометрії течії поздовжнє і зсувове деформування накладаються одне на друге, лінії потоку сходяться, утворюючи конус. При цьому вектори локальних швидкостей мають дві складові: в напрямку течії – швидкість розтягу та в поперечному напрямку – швидкість зсуву. На осі потоку діють лише розтягувальні напруги, які зароджуються далеко від входу в отвір, зростають за величиною, досягаючи максимуму на вході у формувальну насадку [9]. Під дією цих напруг за течії розплавів сумішей формується мікроструктура їх екструдатів.

В створеній нами моделі для аналізу поля швидкостей у вхідній зоні використовували циліндричну систему координат, оскільки лінії току на вході в канал мають радіальну складову швидкості, а форму краплі приймали за еліпсоїд, який змінює в процесі взаємодії з дисперсійним середовищем свої розміри, але при цьому зберігає об'єм. Деформацію краплі в залежності від орієнтації в потоці враховано за допомогою тензора швидкості деформації одноосного розтягу. Математична модель складається із системи диференціальних рівнянь, які в безрозмірних змінних можна записати так:

$$\begin{cases} \dot{\varphi} = 0 \\ \dot{\theta} = -\frac{3}{4}u\lambda_3 \sin(2\theta) \\ \frac{\dot{q}}{q} = \frac{3}{2}\left(\lambda_1 + \frac{u}{2}(\lambda_2 r_0^2 q^{4/3} + \lambda_3)(2 - 3\sin^2 \theta)\right) \end{cases} \quad (1)$$

де: φ, θ – кути, що визначають орієнтацію краплі в потоці;
 u – інтенсивність течії одноосного розтягнення;
 q – величина деформації (безрозмірний розтяг).

У наведених рівняннях крапка означає повну похідну по часу.

Систему диференціальних рівнянь (1) розв'язували чисельно методом Рунге-Кутта за допомогою спеціально написаної програми в середовищі Delphi мовою Object Pascal [10, 11]. В результаті отримували значення параметрів, які є функцією тривалості течії розплаву суміші полімерів у вхідній зоні формувального каналу.

Комп'ютерна модель дає змогу моделювати течію розплаву суміші полімерів та деформацію краплі компонента дисперсної фази, змінюючи основні фізико-хімічні параметри процесу, зокрема – в'язкості вхідних полімерів та величину поверхневого натягу на межі поділу фаз, а також гідродинамічні параметри течії, а саме – кут відхилення осі симетрії краплі від осі течії.

Основною задачею етапу комп'ютерного моделювання і візуалізації була модифікація та розширення існуючого програмного забезпечення (ПЗ). Створене ПЗ умовно можна розділити на дві частини: розрахункову (математичну) та графічну (частину візуалізації). Розроблене авторами раніше програмне забезпечення [8] здійснювало розв'язання системи диференціальних рівнянь (1) у вигляді функцій, залежних від часу (програмним чином ці функції табулювались). На етапі візуалізації потрібно за отриманими результатами будувати модель краплі компонента дисперсної фази. Відповідно до створеної моделі, крапля – це еліпсоїд, а проекція його на площину – еліпс. Для побудови еліпса було розроблено спеціальний алгоритм, оскільки стандартні графічні процедури мов програмування не дають змоги будувати «похилий» еліпс. Для відображення процесу деформації краплі у часі було реалізовано передачу даних з розрахункової частини ПЗ до графічної. Передача даних відбувається у дискретні моменти часу. Ефект анімації досягається за рахунок перемальовування вікна виводу у ці моменти. Головну форму програми з панеллю графічної демонстрації представлено на рис. 1. Краплю наведено в початковий момент часу (крапля недеформована), кут між напрямком течії та віссю обертання еліпсоїда $\theta = 0,4$.

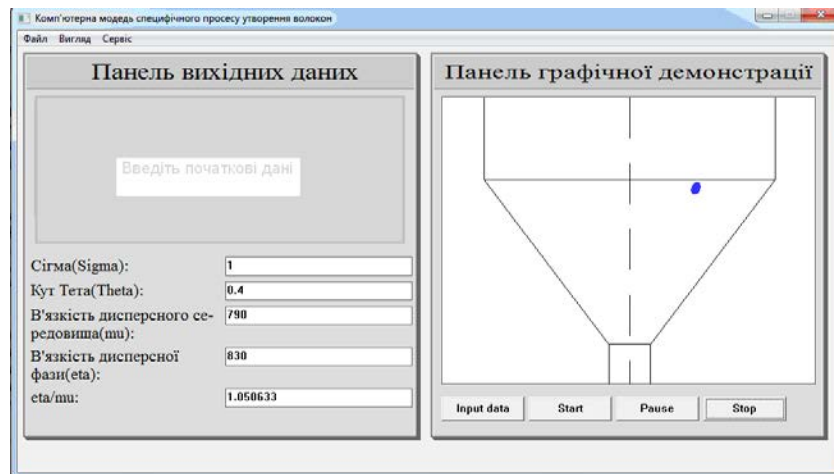


Рис. 1. Комп'ютерна модель деформації краплі полімеру дисперсної фази в матриці

Відомо, що на здатність краплі до деформації та перехід у струмінь (мікрОВОлокно) впливає багато чинників, основними з яких є співвідношення в'язкостей і еластичностей розплавів змішуваних компонентів та ступінь їх взаємодії у міжфазному шарі. З точки зору гідродинаміки, процес диспергування полімерних крапель в полімер-полімерних системах відбувається найбільш ефективно, коли величини в'язкостей і еластичностей дисперсної фази і дисперсійного середовища є близькими [3,12], тобто величина деформації краплі (q) є функцією співвідношення в'язкостей волокноутворюючого (η) і матричного компонентів (μ) ($K = \eta/\mu$). Дослідження, виконані на багатьох сумішах полімерів, свідчать, що відхилення величини K від одиниці призводить до погіршення процесу специфічного волокноутворення: зростає середній діаметр мікрОВОлокон, утворюються інші типи структур (частинки, плівки) [1-3]. Моделювання впливу співвідношення в'язкостей компонентів на величину q проводили за інших однакових умов: вміст волокноутворюючого полімеру 30.0 мас. %, $\theta = 0.4$, величина міжфазного натягу $\gamma_{\alpha\beta} = 0.5$. Наведене на рис. 2 зображення процесу розтягу краплі в потоці чітко демонструє вказану залежність – зі збільшенням співвідношення в'язкостей компонентів здатність до деформації крапель дисперсної фази зменшується.



а)

б)



Рис.2. Комп'ютерна модель впливу співвідношення в'язкостей полімеру дисперсної фази і матриці на деформацію краплі: $K = 1.0$ (а); $K = 2.5$ (б); $K = 6.7$ (в); $K = 10.0$ (г)

Відомо, що дисперсійне середовище при течії діє на дисперговану в ньому краплю з силою, яка зможе деформувати її, якщо є достатня взаємодія між двома полімерами суміші в перехідному шарі. Із фундаментальних співвідношень щодо термодинамічної рівноваги в дисперсних системах витікає, що найбільш дієвим фактором, який дозволяє регулювати параметри фазової структури, є величина міжфазного натягу. З точки зору термодинаміки, поверхневий натяг — це робота утворення одиниці площі нової поверхні шляхом розтягнення старої. Питома робота диспергування пропорційна величині міжфазного натягу, тобто зниження його підвищує ступінь деформації, що дає можливість отримувати більш тонкі мікрОВОлокна. Це наглядно підтверджується анімацією, представленою на рис. 3.

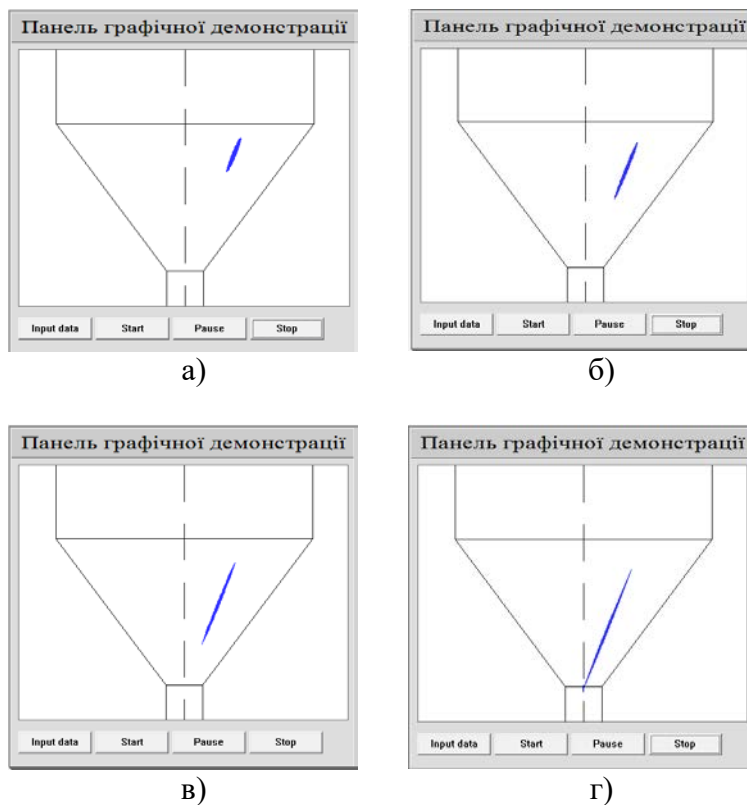


Рис.3. Комп'ютерна модель залежності деформації краплі від величини поверхневого натягу за інших однакових умов: $\gamma_{\alpha\beta} = 3.0$ (а); $\gamma_{\alpha\beta} = 2.0$ (б); $\gamma_{\alpha\beta} = 1.0$ (в); $\gamma_{\alpha\beta} = 0.1$ (г)

Дослідження, виконані методом математичного моделювання, показали, що волокноутворення одного полімеру в матриці іншого найбільш ефективно реалізується за таких умов: $K = 1.0$, величина $\gamma_{\alpha\beta}$ є мінімальною, а крапля розміщується найближче до центральної осі потоку. Одночасне використання оптимальних значень всіх перерахованих параметрів зумовлює максимальну деформацію краплі.

Таким чином, розроблена комп'ютерна анімаційна модель адекватно відображає реальні процеси деформації крапель одного полімеру в масі іншого за течії розплавів сумішей у вхідній зоні формувального отвору. Модифікація та розширення існуючого програмного забезпечення дозволяє наглядно демонструвати процес перетворення еліпсоїда в циліндр, тобто процес волокноутворення.

Висновки. Розроблене програмне забезпечення є внеском у теоретичні дослідження процесів структуроутворення у розплавах сумішей полімерів, зокрема – специфічного волокноутворення, оскільки дає можливість їх візуалізації за одночасної зміни кількох параметрів. Практична значимість розробленого ПЗ полягає у тому, що, змінюючи і комбінуючи вхідні дані, можна змоделювати процес волокноутворення для довільних пар полімерів без проведення довготривалих дослідів, а також передбачити поведінку суміші при додаванні у неї третьої речовини, що є надзвичайно важливим для створення нових полімерних композиційних матеріалів з наперед заданими покращеними характеристиками.

Література

1. Rezanova N.M., Plavan V.P., Rezanova V.G., Bohatyrov V.M. Regularities of producing of nano-filled polypropylene microfibers // *Vlakna a Textil.* –2016. – No 4. – P. 3-8.
2. Tsebrenko M.V., Rezanova V.G., Tsebrenko I.A. Polypropylene microfibers with filler in nano state // *Chem. & Chem. Technol.* – 2010. – V.4, No 3. – P. 253-260.
3. Глубіш П.А., Ірклей В.М., Клейнер Ю.Я., Резанова Н.М., Цебренко М.В., Кернер С.М., Омельченко В.Д., Турчаненко Ю.Т. Високотехнологічні, конкурентоспроможні і екологічно орієнтовані волокнисті матеріали та вироби з них.– К.: Арістей, 2007.–263 с.
4. Vu Anh Doan, Masayuki Yamaguchi. Interphase transfer of nanofillers and functional liquid between immiscible polymer pairs // *Recent Res. Devel. Mat. Sci.* – 2013. – No10. – P. 59-88.
5. Придатченко Ю.В., Пасечник З.В. Определение реологических характеристик разбавленных суспензий деформируемых частиц // *Прикладная механика.* – 1985. – Т.21, № 6. – С.107-111.
6. Куак Ван Донг, Шмаков Ю.И. Реологические уравнения состояния слабоконцентрированных суспензий деформируемых эллипсоидальных частиц // *Журнал прикладной механики и технической*

References

1. Rezanova, N.M., Plavan, V.P., Rezanova, V.G., Bohatyrov, V.M. (2016) [Regularities of producing of nano-filled polypropylene microfibers]. *Vlakna a Textil.* No 4. P. 3-8.
2. Tsebrenko, M.V., Rezanova, V.G., Tsebrenko, I.A. (2010) [Polypropylene microfibers with filler in nano stat] *Chem. & Chem. Technol.* V.4, No 3. P. 253-260.
3. Hlubish, P.A., Irkley, V.M., Kleyner, Yu.Ya., Rezanova, N.M., Tsebrenko, M.V., Kerner, S.M., Omelchenko, V.D., Turchanenko, Yu.T. (2007) *Vysokotekhnologichni, konkurentnospromozhni i ekolohichno orientovani voloknysti materialy ta vyroby z nyh.* [High-tech, competitive and environmentally oriented fibrous materials and products made of them] K.: Aristey, 263 p. [in Ukrainian]
4. Vu Anh Doan, Masayuki Yamaguchi. (2013) Interphase transfer of nanofillers and functional liquid between immiscible polymer pairs. *Recent Res. Devel. Mat. Sci.* No10. p. 59-88.
5. Pridatchenko, Yu.V., Pasechnik, Z.V. (1985) *Opredelenie reologicheskikh harakteristik razbavlennykh suspenziy deformiruemyykh chastits.* [Determination of the rheological characteristics of dilute suspensions of deformable particles] *Prikladnaya mekhanika.* T.21, no 6. p.107-111. [in Russian]
6. Kuak Van Dong, Shmakov Yu.I. (1980) *Reologicheskie uravneniya sostoyania slabokontsentrirrovannykh suspenziy deformiruemyykh ellipsoidalnykh chastits* [Rheological equations of state for weakly concentrated suspensions of

физики. – 1980. – № 3 – С.84-90.

7. Затонацька Т.Г., Придатченко Ю.В., Таран Є.Ю. Реологічна поведінка розбавлених суспензій деформівних частинок // Доповіді НАН України. – 1998. – № 10. – С. 88-93.

8. Rezanova V.G., Prydatchenko Yu. V., Tsebrenko M.V. Mathematical model of strain of a dispersed-phase polymer in flow of molten polymer blends // Journal of Physics and Thermophysics. – 2006. – V. 78, No 5. – P. 975-982.

9. Хан Ч.Д. Реология в процессах переработки. Пер. с англ./под ред. Виноградова Г.В., Фридмана М.Л. – М.: Химия. – 1979. – 366 с.

10. Фленов М. Библия программиста (Delphi), 3-е издание С-Пб.: БХВ-Петербург, 2011. – 688 с.

11. 4. Культин Н. Delphi в примерах (3-е издание). С-Пб.: БХВ-Петербург, 2012. – 288с.

12. Полимерные смеси. Т. 1: Систематика / под ред. Д.Р. Пола, К.Б. Баклелла. Пер. с англ. В.Н. Кулезнева. СПб: Научные основы и технологии. – 2009. – 618 с.

deformable ellipsoid particles] Zhurnal prikladnoy mekhaniki i tekhnicheskoy fiziki. No. 3 p.84-90. [in Russian]

7. Zatonatska T.G., Pridatchenko Yu.V., Taran E.Yu. (1998) *Reolohichna povedinka rozbavlenykh suspenziy deformivnykh chastynok* [Rheological behavior of dilute suspenziy of deformable particles] Dopovidi NAN Ukrainy. No. 10. p. 88-93. [in Ukrainian]

8. Rezanova, V.G., Prydatchenko, Yu. V., Tsebrenko, M.V. (2006) [Mathematical model of strain of a dispersed-phase polymer in flow of molten polymer blends] Journal of Physics and Thermophysics. V. 78, No 5. P. 975-982.

9. Han Ch.D. (1979) *Reologiya v processakh pererabotki* [Rheology in the processing processes]. Per. s. Angl./pod red. Vinogradova G.V., Fridmana M.L. M.: Himiya. 366 p. [in Russian]

10. Flenov M. (2011) *Biblia programmista (Delphi)*, (3-e izdanie) [Bible of programmer (3rd edition)]. S-Pb.: BHV-Peterburg, 688 p. [In Russian]

11. Kultin N. (2012) *Delphi v primerah I zadachah* (3-e izdanie). [Delphi in examples and problems (3rd edition)]. S-Pb.: BHV-Peterburg, 288 p. [In Russian]

12. *Polimernye smesi. T. 1: Sistematika* [Polymeric mixtures. T. 1: Systematics] pod red. D.R. Pola, K.B. Baklella. Per. s. angl. V.N. Kulezneva. SPb: Nauchnye osnovy I tecnologii. 2009. 618 p. [In Russian]

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА СПЕЦИФИЧЕСКОГО ВОЛОКНООБРАЗОВАНИЯ РЕЗАНОВА В.Г.

Киевский национальный университет технологий и дизайна

Цель. Разработка программного обеспечения для расчета степени деформации капли полимера дисперсной фазы в дисперсионной среде и визуализации процесса специфического волокнообразования.

Методика. Исследование процесса деформации капли в полимерной дисперсии осуществляли с позиций структурно-континуального подхода, который учитывает основные положения классической механики жидкости и изменение структуры дисперсной фазы при течении. Программное обеспечение разрабатывали в среде Delphi на языке Object Pascal.

Результаты. Показано, что с использованием математической модели деформации капли полимера дисперсной фазы при течении смесей полимеров выполнены расчеты и программным образом осуществлена визуализация процесса перехода капли в микроволокно.

Научная новизна. Впервые разработано программное обеспечение для визуализации и анимации процесса специфического волокнообразования.

Практическая значимость. Использование созданной программы позволит ускорить исследования, уменьшит материальные и энергетические затраты на их проведение за счет моделирования процессов на ПЕОМ, а также наглядно продемонстрировать визуализацию явления специфического волокнообразования во время учебного процесса студентам.

Ключевые слова: смеси полимеров, капля, деформация, визуализация, программное обеспечение.

MATHEMATICAL MODELING AND COMPUTER VISUALIZATION OF THE PROCESS OF SPECIFIC FIBER-FORMATION

REZANOVA V.G.

Kyiv National University of Technologies and Design

Purpose. Development of software for calculating the degree of deformation of a droplet of a polymer of dispersed phase in a dispersion medium and visualization of the process of specific fiber-formation.

Method. The process of deformation of a droplet in a polymer dispersion was studied from the viewpoint of the structural-continuum approach, which takes into account the basic concepts of classical fluid mechanics and the change in the structure of the dispersed phase during flow. The software was developed in the Delphi environment in the language of Object Pascal.

Results. It is shown that with the use of the mathematical model of deformation of a polymer drop of a dispersed phase during the flow of polymer mixtures, calculations were performed and the visualization of the process of drop transformation into microfiber was carried out in a program way.

Scientific novelty. The software for visualization and animation of the process of specific fiber formation was developed for the first time.

Practical significance. Using the created program will speed up the research, reduce the material and energy costs for their implementation by modeling the processes on the PC, and also visually demonstrate the visualization of the phenomenon of specific fiber formation during the educational process to students.

Keywords: polymer mixtures, drop, deformation, visualization, software.