

بررسی مدل‌های رئولوژیکی صورتبندی برای مذابها و محلولهای غلیظ پلیمری

Investigation of Conformational Rheological Models for Polymer Melts and Concentrated Solutions

حسن اسلامی^{۱*}، احمد رضوانی سعادت آبادی^۲، حسین علی خنکدار سنگدهی^۱

۱- تهران، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، پژوهشکده فرایند، گروه پلاستیک، صندوق پستی ۱۳۹۶۵/۱۱۵

۲- تهران، دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی، صندوق پستی ۱۱۳۶۵/۹۳۱۳

دریافت: ۸۲/۹/۴، پذیرش: ۸۳/۱/۱۸

چکیده

در این پژوهش، دو مدل رئولوژیکی طول ثابت و حجم ثابت برای پیش‌بینی رفتار رئولوژیکی مذابها و محلولهای غلیظ پلیمری در جریان برشی استفاده شده است. برای هر دو مدل یاد شده فرمولبندی کلی با استفاده از یک تانسور تحرک‌پذیری و یک تابع انرژی معرفی و به کمک روش عمومی پواسون براکت تحلیل شده است. همچنین، حساسیت مدل‌های یاد شده به انتخاب تانسور تحرک‌پذیری نیز بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که انعطاف‌پذیری مدل طول ثابت به علت محدودیت در انتخاب تانسور تحرک‌پذیری در مقایسه با مدل حجم ثابت کمتر است. زیرا، در مدل طول ثابت فقط می‌توان تانسور تحرک‌پذیری از مرتبه اول نسبت به تانسور صورتبندی یا ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر را انتخاب کرد، در حالی که در مدل حجم ثابت هر ترکیبی از تانسور تحرک‌پذیری را می‌توان برگزید. این قابلیت مدل حجم ثابت، باعث کاربرد گسترده این مدل برای پیش‌بینی رفتار رئولوژیکی مواد پلیمری مختلف شده است. همچنین، اثر سرعت برش بر پیش‌بینی خواص تابع ماده در جریان برشی در حالات گذرا و دائمی بررسی و تحلیل شده و در ادامه پیش‌بینی دو مدل برای خواص تابع ماده با داده‌های تجربی مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی

مدل حجم ثابت، مدل طول ثابت،
تانسور تحرک‌پذیری،
تانسور صورتبندی، مذاب پلیمری

مقدمه

پلیمری از قبیل اکستروژن و تزریق تا اندازه‌ای پیچیده است [۱،۲]. مدل‌های زیادی برای پیش‌بینی رفتار رئولوژیکی سیالات ویسکوالاستیک توسعه یافته است که از آن جمله می‌توان مدل‌های ویسکوالاستیک خطی و غیرخطی را نام برد. از مدل‌های ویسکوالاستیک خطی برای تغییر

بررسی رفتار رئولوژیکی مواد پلیمری به دلیل وجود زنجیرهای درشت مولکول در آنها بسیار پیچیده است. زیرا، رفتار این مواد بین رفتار سیالات نیوتنی و جامدات کشسان قرار می‌گیرد، بنابراین از قوانین ساده فیزیکی پیروی نمی‌کند. از این رو، مدل‌سازی فرایندهای

Key Words

volume preserving model,
FENE-P model, mobility tensor,
conformation tensor, polymer melt

اساس نظری مدل سازی

مدل سازی جریان سیالات تراکم ناپذیر در جریانهای مختلف نیازمند معادلاتی است که بتوان به کمک آنها رفتار سیالات را در جریانهای مختلف گذرا و دائمی و در هندسه‌های مورد نظر پیش بینی کرد. برای سیالات نیوتنی این امر با بکارگیری رابطه خطی موجود بین تنش و سرعت تغییر شکل امکان پذیر است. اما نبود معادله‌ای خاص که بتواند به درستی رفتار بین تنش و سرعت تغییر شکل را برای سیالات ویسکوالاستیک مختلف پیش بینی کند، باعث شده است که معادلات مختلفی با استفاده از روشهای متفاوت برای این منظور گسترش یابند. روش عمومی پواسون براکت از جمله موارد گسترش یافته برای این پیش بینی است [۱۷، ۱۸].

بر اساس روش عمومی و با اعمال بعضی از فرضیات ساده کننده برای سیالات ویسکوالاستیک، تغییرات تنسور صورت‌بندی و تنسور تنش با زمان به شکل زیر بیان می شوند [۱۴، ۱۸، ۱۹]:

$$\frac{\partial c_{\alpha\beta}}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} (\dot{\gamma} \cdot c + c \cdot \dot{\gamma})_{\alpha\beta} - \frac{1}{\gamma} (\omega \cdot c - c \cdot \omega)_{\alpha\beta} - \Lambda_{\alpha\beta\gamma\epsilon} : \frac{\partial \Phi}{\partial c_{\gamma\epsilon}} \quad (1)$$

$$\sigma = -\tau c_{\alpha\beta} \frac{\partial \Phi}{\partial c_{\alpha\beta}} \quad (2)$$

در این معادلات $\dot{\gamma}$ تنسور شدت برش، c تنسور صورت‌بندی، ω تنسور سرعت برش، Λ تنسور تحرک پذیری، Φ تابع انرژی سیستم و σ تنسور تنش و ϵ ، α ، β و γ اندیس اند.

در هر دو مدل از تنسور تحرک پذیری ۱۲ پارامتری ارائه شده توسط بریس و ادواردز استفاده شده است که شکل کلی آن به صورت زیر است [۱۸، ۲۰]:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha\beta\gamma\epsilon} = & a_1 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\epsilon} + a_2 (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon} \delta_{\beta\gamma}) + \\ & a_3 (c_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\epsilon} + \delta_{\alpha\beta} c_{\gamma\epsilon}) + a_4 (c_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\epsilon} + \\ & c_{\alpha\epsilon} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} c_{\beta\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon} c_{\beta\gamma}) + a_5 c_{\beta\alpha} c_{\gamma\epsilon} \\ & + a_6 (c_{\alpha\gamma} c_{\beta\epsilon} + c_{\alpha\epsilon} c_{\beta\gamma}) + a_7 (c_{\alpha\mu} c_{\mu\beta} \delta_{\gamma\epsilon} + \\ & \delta_{\alpha\beta} c_{\gamma\mu} c_{\mu\epsilon}) + a_8 (c_{\alpha\mu} c_{\mu\gamma} \delta_{\beta\epsilon} + c_{\alpha\mu} c_{\mu\epsilon} \delta_{\beta\gamma} + \\ & \delta_{\alpha\gamma} c_{\beta\mu} c_{\mu\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon} c_{\beta\mu} c_{\mu\gamma}) + a_9 (c_{\alpha\mu} c_{\mu\beta} c_{\gamma\epsilon} + \\ & c_{\alpha\beta} c_{\gamma\mu} c_{\mu\epsilon}) + a_{10} (c_{\alpha\mu} c_{\mu\gamma} c_{\beta\epsilon} + c_{\alpha\mu} c_{\mu\epsilon} c_{\beta\gamma} + \\ & \alpha\gamma c_{\beta\mu} c_{\mu\epsilon} + c_{\alpha\epsilon} c_{\beta\mu} c_{\mu\gamma}) + a_{11} c_{\alpha\eta} c_{\eta\beta} c_{\gamma\mu} c_{\mu\epsilon} \\ & + a_{12} (c_{\alpha\eta} c_{\eta\gamma} c_{\beta\mu} c_{\mu\epsilon} + c_{\alpha\eta} c_{\eta\epsilon} c_{\beta\mu} c_{\mu\gamma}) \quad (3) \end{aligned}$$

شکل‌های کوچک استفاده می شود. در حالی که فرایندهای پلیمری، اغلب فرایندهایی با تغییر شکل بی نهایت اند. بنابراین، مدل‌های ویسکوالاستیک خطی کاربرد گسترده‌ای در مدل کردن رفتار پلیمرها ندارند. نمونه‌ای از مدل‌های ویسکوالاستیک خطی، مدل‌های جفری و ماکسول است که این مدل‌ها توسط برد و آرمسترانگ مرور شده است [۱]. مدل‌های ویسکوالاستیک غیرخطی که برای تغییر شکل‌های بزرگ از آنها استفاده می شوند، در مدل سازی رفتار سیالات ویسکوالاستیک توسعه زیادی پیدا کرده اند. از مدل‌های ویسکوالاستیک غیرخطی می توان به مدل‌های از نوع دیفرانسیلی، انتگرالی و صورت‌بندی اشاره کرد [۸-۱، ۴]. تاکنون کارهای زیادی در مورد مدل‌های دیفرانسیلی و انتگرالی انجام شده است. مدل‌های از نوع صورت‌بندی را می توان به دو دسته کلی مدل‌های حجم ثابت و طول ثابت تقسیم کرد.

در مدل‌های حجم ثابت فرض بر آن است که حجم زنجیر درشت مولکولها در خلال فرایندهای پلیمری ثابت است. در این مدل‌ها از نظر ریاضی دترمینان تنسور صورت‌بندی، که معرف حجم درشت مولکولهاست، ثابت فرض می شود. نمونه‌ای از مدل‌های حجم ثابت مدل لیونوو است [۹، ۲]. رضانی و همکارانش نیز مدل حجم ثابت را برای محلولها و مذابهای پلیمری توسعه داده اند [۱۱، ۱۰].

در مدل‌های طول ثابت فرض بر آن است که طول زنجیر درشت مولکولها در خلال فرایندهای پلیمری ثابت است. در این مدل‌ها از نظر ریاضی تریس (tr) تنسور صورت‌بندی ثابت فرض می شود (منظور از تریس تنسور صورت‌بندی مجموع عناصر روی قطر اصلی این تنسور صورت‌بندی است). نمونه‌ای از مدل‌های طول ثابت مدل FENE-P است [۱۳، ۱۲]. ایت کادی و همکارانش مدل طول ثابت را برای پلیمرهای پر شده با الیاف کوتاه بررسی کرده اند [۱۴]. در ادامه رضانی و همکارانش نیز این مدل را برای پلاستیکهای پر شده با الیاف کوتاه با جزئیات بیشتری مورد بررسی قرار داده اند [۱۰]. پرنود و کروکت از مدل FENE-P برای پیش بینی رفتار رئولوژیکی محلول پلی آکریل آمید استفاده کرده اند [۱۵]. هیل و همکارانش نیز به بررسی این مدل برای جریانهای مختلف پرداخته اند [۱۶].

در این پژوهش، هر یک از مدل‌های حجم ثابت (volume preserving model) و طول ثابت (FENE-P model) بطور جداگانه برای مذابها و محلولهای غلیظ پلیمری با استفاده از روش عمومی پواسون براکت در جریان برشی ساده در حالات گذرا و دائمی بررسی شده و مقایسه‌ای بین دو مدل در پیش بینی رفتار رئولوژیکی مذابها و محلولهای غلیظ پلیمری انجام گرفته است. همچنین، پیش بینی‌های دو مدل با داده‌های تجربی مقایسه شده است.

نسبت به تنسور صورت‌بندی برای جریان برشی ساده حل شد. نتایج حاصل از این دو مدل در قسمت نتایج و بحث با یکدیگر مقایسه شده است.

روش حل معادلات

سه پارامتر گرانیوی، اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال، که به خواص تابع ماده معروف‌اند، نشان‌دهنده رفتار رئولوژیکی مواد پلیمری‌اند و برای بدست آوردن این توابع نیاز به اجزای تنسور تنش است. برای بدست آوردن اجزای تنسور تنش باید تغییرات تنسور صورت‌بندی را با زمان محاسبه کرد. بنابراین، با حل معادله دیفرانسیل ۱ برای هر دو مدل بطور جداگانه تنسور صورت‌بندی به شکل تابعی از زمان بدست می‌آید که از آنجا می‌توان خواص تابع ماده را بدست آورد.

در حل این معادلات تنسور تحرک پذیری برای مدل حجم ثابت هر عبارت انتخابی از معادله ۳ و برای مدل طول ثابت از عبارات دارای تنسور صورت‌بندی از مرتبه اول و ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر انتخاب شده است.

برای جریان برشی ساده تنسورهای شدت برش و سرعت برش به شکل زیر تعریف می‌شوند [۱]:

$$a(t) = \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \phi(t) = \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

از آنجا که معادلات دیفرانسیل ۱ بر حسب تنسور صورت‌بندی‌اند، بنابراین برای حل عددی معادلات بالا برنامه‌ای کامپیوتری با استفاده از نرم‌افزار Mathematica نوشته شده است. بعد از حل معادلات بالا و بدست آوردن عناصر تنسور صورت‌بندی در زمانهای مختلف خواص تابع ماده در حالت گذرا جریان برشی به شکل زیر بدست می‌آیند [۱]:

$$\eta_{11}^{\pm}(t, \dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}} \quad \psi_{11}^{\pm}(t, \dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\dot{\gamma}^2}$$

$$\psi_{22}^{\pm}(t, \dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\dot{\gamma}^2} \quad (8)$$

در این معادلات σ_{ij} اجزای تنسور تنش‌اند که از معادله ۲ محاسبه می‌شوند. همچنین، η ، ψ_1 و ψ_2 به ترتیب گرانیوی، اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال‌اند. علامت + نشان‌دهنده خواص تابع ماده در آزمایش آغاز (start-up) و علامت - نشان‌دهنده خواص تابع ماده در آزمایش آسایش است.

در جریان برشی حالت پایدار گرانیوی، اولین و دومین ضرایب

در معادله بالا a_i ضریب ثابت، c تنسور صورت‌بندی و δ تنسور واحد و α ، β ، γ ، ϵ ، μ و η اندیس‌اند.

تابع انرژی بکار رفته در مدل حجم ثابت از نوع تابع انرژی هوکین بوده که شکل کلی آن به صورت زیر است [۱۰]:

$$\Phi = \frac{\lambda}{\gamma} \left[\text{tr} \left(\frac{-c^{-1}}{\gamma} \right) \right]^2 + M \left[\text{tr} \left(\frac{-c^{-1}}{\gamma} \right) \right]^2 \quad (4)$$

در معادله بالا c تنسور صورت‌بندی، δ تنسور واحد و M و λ پارامترهای مدل است که به ترتیب به جرم مولکولی پلیمر و زمان آسایش آن ارتباط دارند. تابع انرژی استفاده شده در مدل طول ثابت نیز به شکل زیر است [۱۴]:

$$\Phi = -K R_0 \ln(1 - \text{tr} c) - \frac{1}{\gamma} K_B T \ln(\det c) \quad (5)$$

در معادله بالا K نشان‌دهنده سختی زنجیر، R_0 نشان‌دهنده ماکسیمم طول زنجیر، K_B ثابت بولتزمن و T دمای مطلق بر حسب درجه کلوین است. برای مدل حجم ثابت رمضانی و همکاران شرایط مدل را به گونه‌ای اصلاح کرده‌اند که بتوان به ازای هر انتخاب از تابع انرژی و تنسور تحرک پذیری دترمینان تنسور صورت‌بندی ثابت باشد. به عبارت دیگر، به ازای هر انتخاب از تابع انرژی و تنسور تحرک پذیری، مدل از نوع مدل حجم ثابت است. در این حالت جمله دوم معادله ۱ باید به شکل زیر اصلاح شود [۱۰، ۱۱]:

$$\Lambda : \frac{\partial \Phi}{\partial c} = \Lambda^1 : \frac{\partial \Phi}{\partial c} - \frac{1}{\gamma} \text{tr}(c^{-1}) \cdot \Lambda^1 : \frac{\partial \Phi}{\partial c} c \quad (6)$$

در این معادله: علامت ضرب دو نقطه ای است. بنابراین، مدل حجم ثابت با در نظر گرفتن تابع انرژی به شکل معادله ۴ و با اعمال شرط بالا برای جریان برشی ساده حل شد. اما در مورد مدل طول ثابت در انتخاب تنسور تحرک پذیری محدودیت وجود دارد، یعنی به ازای هر انتخاب از تنسور تحرک پذیری نمی‌توان به رفتار رئولوژیکی قابل قبولی رسید، هر چند که با هر انتخاب از تنسور تحرک پذیری مقدار تریس تنسور صورت‌بندی ثابت می‌ماند. از این رو، برای حل مدل FENE-P فقط می‌توان از تنسورهای تحرک پذیری از مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی یا ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر از تنسور صورت‌بندی استفاده کرد. زیرا، وقتی از تنسور تحرک پذیری فقط از مرتبه دوم و مراتب بالاتر نسبت به تنسور صورت‌بندی استفاده می‌شود، شیب ناحیه قانون توان در جریان برشی حالت پایدار کمتر از ۱- خواهد شد که غیرمنطقی است، زیرا شاخص قانون توان برای مواد پلیمری بین ۰ و ۱ است.

بنابراین، مدل طول ثابت نیز با در نظر گرفتن تابع انرژی به شکل معادله ۵ و تنسور تحرک پذیری از مرتبه اول و ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر

اختلاف تنشهای نرمال با معادلات زیر بیان می‌شوند [۱]:

$$\eta(\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}} \quad (9)$$

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\dot{\gamma}^2}$$

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\dot{\gamma}^2}$$

در نتیجه، منحنیهای گرانروی، اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال برحسب شدت برش بدست می‌آیند، که به نحوی رفتار رئولوژیکی مواد پلیمری را بیان می‌کند.

نتایج و بحث

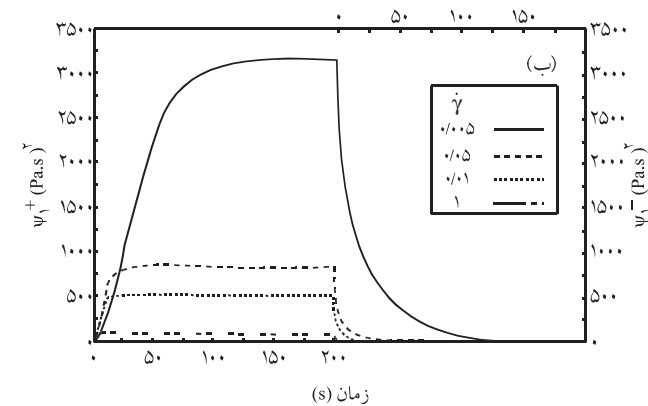
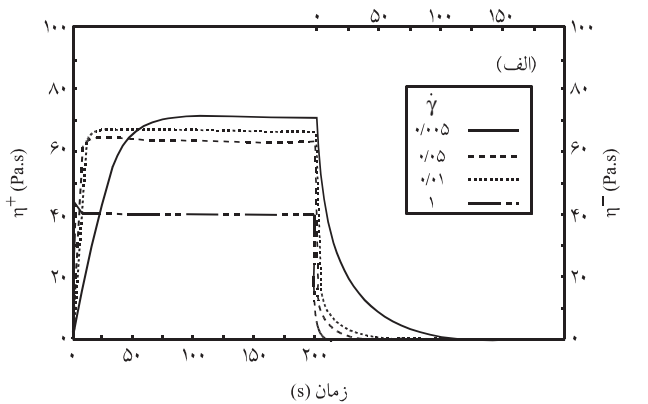
پیش‌بینی مدل‌ها در جریان برشی ساده در حالت گذرا

شکل ۱ الف و ب به ترتیب اثر سرعت برش بر گرانروی و اولین ضریب

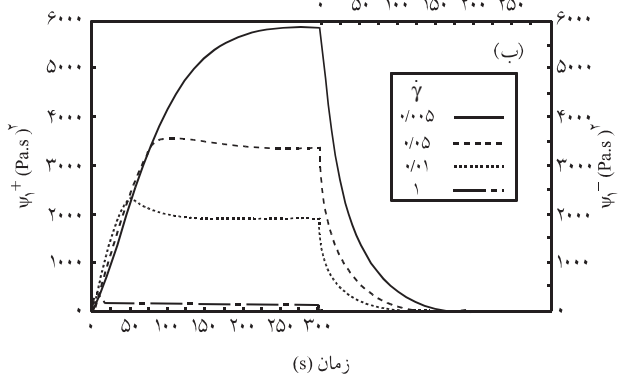
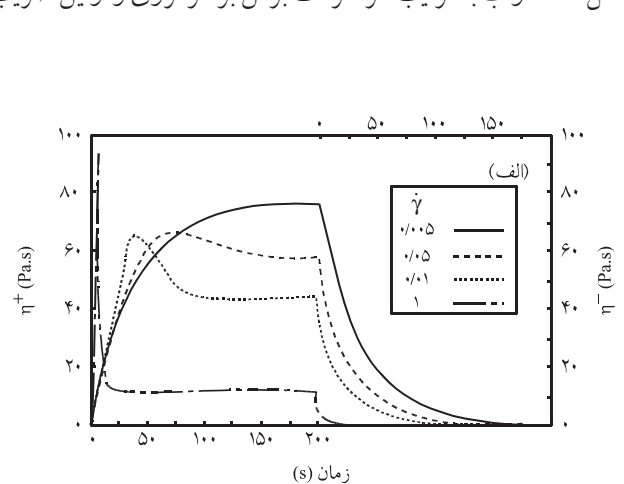
اختلاف تنشهای نرمال را برای مدل طول ثابت در حالت گذرا نشان می‌دهد. شکل ۲ الف نیز اثر سرعت برش بر گرانروی و ۲ ب اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال را برای مدل حجم ثابت در حالت گذرا ارائه می‌کند. تنسور تحرک‌پذیری استفاده شده در هر دو مدل از مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی است.

شکل‌های ۱ الف و ۲ الف نشان می‌دهند که در آزمایش آغاز برای هر دو مدل با گذشت زمان گرانروی در سرعت‌های برش کم بطور یکنواخت افزایش می‌یابد، ولی در سرعت‌های برش زیاد ابتدا گرانروی افزایش و سپس کاهش می‌یابد و سپس در مقدار معینی ثابت می‌شود. به عبارت ساده‌تر، منحنیهای حاصل دارای یک فرارفت (overshoot) هستند. همچنین، مقایسه این فرارفتها نشان می‌دهد که در هر دو مدل با افزایش شدت برش مقدار ماکسیمم در منحنیهای گرانروی بر حسب زمان در زمانهای کمتری اتفاق می‌افتد.

مقایسه بین شکل‌های ۱ الف و ۱ ب نشان می‌دهد که در یک سرعت



شکل ۲- اثر سرعت برش بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل حجم ثابت در حالت گذرا. پارامترهای مدل $M=1$ ، $\lambda=100$ و $\Lambda_0=0.14$ و تنسور تحرک‌پذیری از مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی است.



شکل ۱- اثر سرعت برش بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل طول ثابت در حالت گذرا. پارامترهای مدل $b=10$ و $\Lambda_0=0.01$ و تنسور تحرک‌پذیری از مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی است.

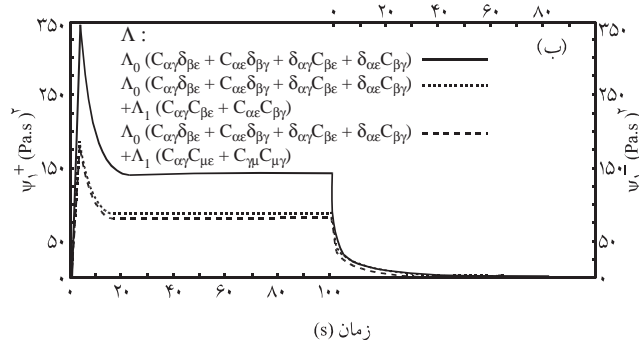
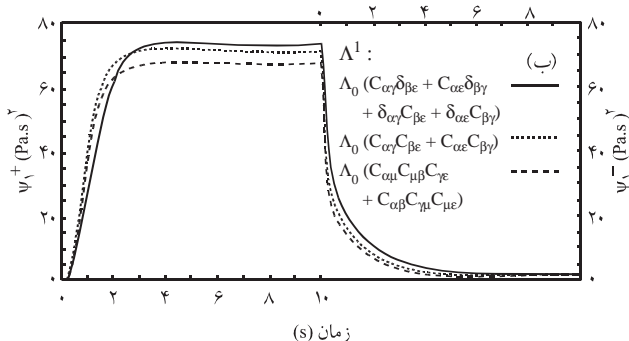
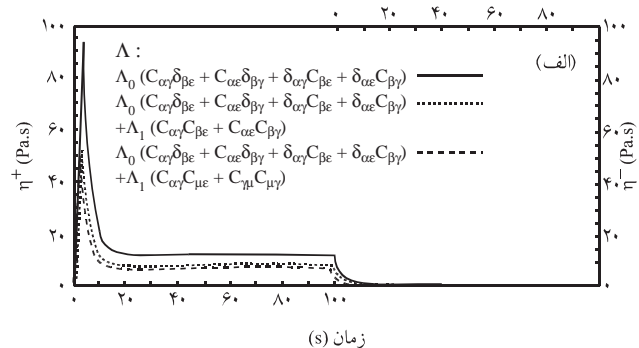
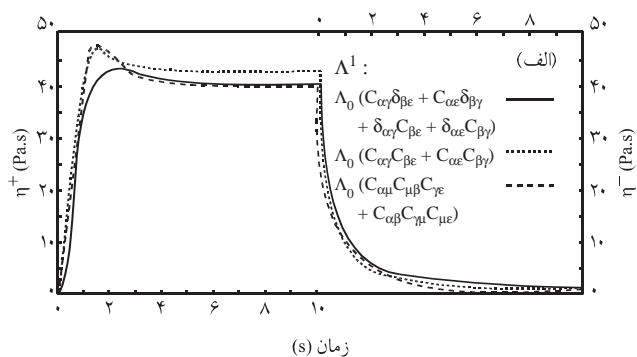
همان‌طور که قبلاً اشاره شد، در مدل طول ثابت محدودیت در انتخاب تنسور تحرک پذیری وجود دارد. بنابراین، فقط تنسور تحرک پذیری از مرتبه اول و ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر نسبت به تنسور صورت‌بندی انتخاب می‌شود، در حالی که در مدل حجم ثابت با اصلاحیه‌ای که رضانی و همکاران روی مدل انجام داده‌اند [۱۰، ۱۱]، هر انتخابی از تنسور تحرک پذیری ارائه شده توسط بریس و ادواردز قابل قبول خواهد بود. نتایج شکل‌های ۳ الف و ۳ ب نمایانگر آن است که برای مدل طول ثابت وقتی از تنسور تحرک پذیری از مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی استفاده می‌شود، بیشترین مقدار فرارفت در منحنیهای خواص تابع ماده در آزمایش آغاز وجود دارد. همچنین، خواص تابع ماده در آزمایش آسایش سریعتر آسوده می‌شوند. به عبارت ساده‌تر، وقتی از تنسور تحرک پذیری مرتبه اول استفاده می‌گردد سریعتر به حالت پایدار می‌رسد. نتایج شکل‌های ۴ الف و ۴ ب برای مدل حجم ثابت نشان می‌دهد که وقتی تنسور تحرک پذیری از مرتبه دوم نسبت به تنسور صورت‌بندی انتخاب می‌شود، بیشترین مقدار فرارفت در منحنیهای مربوط به آن مشاهده می‌شود.

برش یکسان سرعت فرارفت برای مدل طول ثابت بیشتر از مدل حجم ثابت است. به عبارت دیگر، در حالت گذرا مدل طول ثابت نسبت به مدل حجم ثابت به شدت برش حساستر است. نتایج نسبتاً مشابهی برای اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال بدست آمده است (شکل ۱ ب برای مدل طول ثابت و شکل ۲ ب برای مدل حجم ثابت).

شکل‌های ۱ الف و ۲ الف نشان می‌دهند که در آزمایش آسایش نیز برای هر دو مدل طول ثابت و حجم ثابت با گذشت زمان گرانروی بطور یکنواخت کاهش و با افزایش سرعت برش زمان لازم برای رسیدن به حالت پایدار کاهش می‌یابد.

مقایسه شکل‌های ۱ الف و ۲ الف نشان می‌دهد که دو مدل پیش‌بینی مشابهی برای رفتار آسایش محلولها و مذابهای پلیمری دارند. نتایج مشابهی برای اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال نیز بدست آمده است (شکل ۱ ب برای مدل طول ثابت و شکل ۲ ب برای مدل حجم ثابت).

شکل ۳ اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) را برای مدل طول ثابت در حالت گذرا ارائه می‌دهد. در شکل ۴ نیز اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل حجم ثابت در حالت گذرا نشان داده شده است.



شکل ۴ - اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل حجم ثابت در حالت گذرا. پارامترهای مدل: $M=1$, $\lambda=100$, $\Lambda_0=0.014$ و $\gamma=1s^{-1}$.

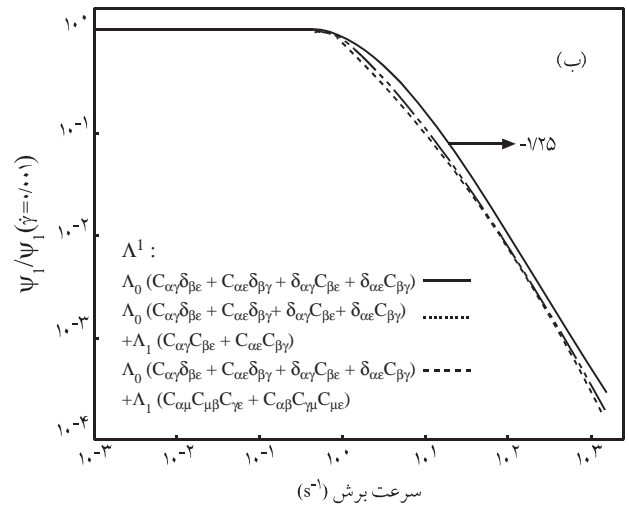
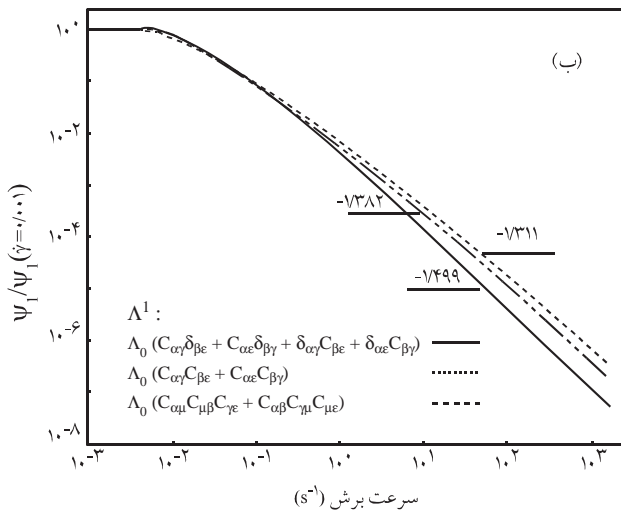
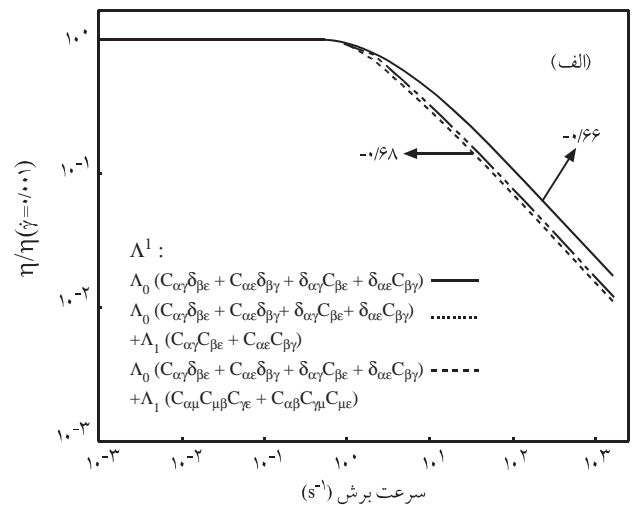
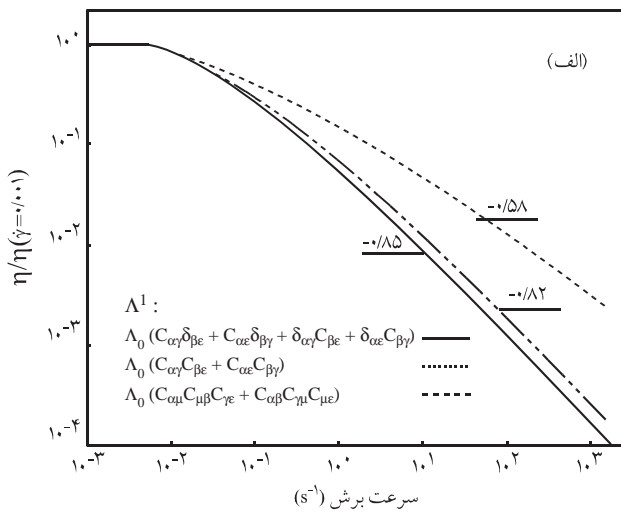
شکل ۳ - اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل طول ثابت در حالت گذرا. پارامترهای مدل: $b=10$, $\Lambda_0=0.001$ و $\gamma=1s^{-1}$.

پیش‌بینی مدل‌ها در جریان برشی ساده در حالت پایدار

شکل ۵ الف و ب به ترتیب اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال را برای مدل طول ثابت در حالت پایدار نشان می‌دهد. شکل ۶ الف نیز اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی و شکل ۶ ب اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال را برای مدل حجم ثابت در حالت پایدار نشان می‌دهد.

نتایج شکل ۵ الف نشان می‌دهد که در مدل طول ثابت انتخاب پارامتر تنسور تحرک پذیری اثر اندکی بر گرانروی دارد. با تغییر عبارت Λ ، نتایج نشان می‌دهد که شیب ناحیه قانون توان زمانی که تنسور تحرک پذیری از مرتبه اول و ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر نسبت به تنسور

صورت‌بندی انتخاب می‌شود تغییر محسوسی نمی‌کند و اثر آن بر اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال نیز بسیار اندک است (شکل ۵ ب). در حالی که نتایج شکل ۶ الف نشان می‌دهد که در مدل حجم ثابت انتخاب پارامتر تنسور تحرک پذیری اثر بسزایی بر گرانروی دارد. با تغییر عبارت Λ ، نتایج حاکی از آن است که شیب ناحیه قانون توان زمانی که تنسور تحرک پذیری از مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی انتخاب می‌شود، از مقدار $-0/85$ به $-0/56$ در مقایسه با زمانی که تنسور تحرک پذیری از مرتبه سوم نسبت به تنسور صورت‌بندی انتخاب می‌شود، تغییر می‌کند و این امر انعطاف پذیری مدل را افزایش می‌دهد. همچنین، اثر تنسور تحرک پذیری بر اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال نیز در شکل ۶ ب



شکل ۶ - اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل حجم ثابت در حالت پایدار. پارامترهای مدل $M=100$ ، $\lambda=100$ و $\Lambda_0=0/0001$ است.

شکل ۵ - اثر تنسور تحرک پذیری بر گرانروی (الف) و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال (ب) برای مدل طول ثابت در حالت پایدار. پارامترهای مدل $b=10$ و $\Lambda_0=0/0001$ است.

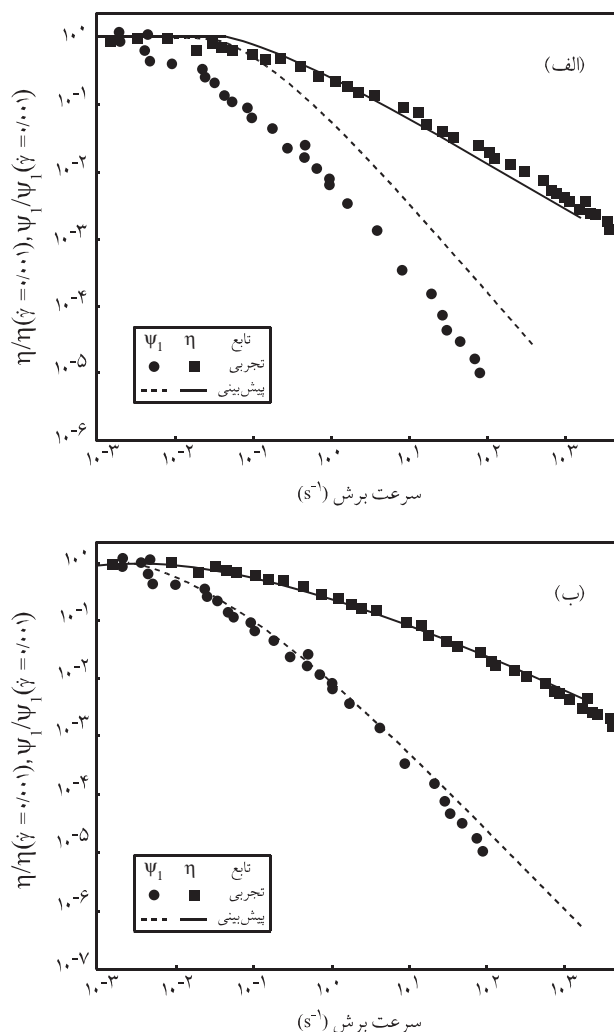
برای مدل‌های طول ثابت و حجم ثابت را ارائه می‌دهد. داده‌های تجربی مربوط به پلی اتیلن سبک است [۲]. تنسور تحرک پذیری برای مدل طول ثابت ترکیبی از مرتبه اول و مرتبه سوم نسبت به تنسور صورت‌بندی و برای مدل حجم ثابت از مرتبه چهارم نسبت به تنسور صورت‌بندی انتخاب شده است. شکل ۷ الف نمایانگر آن است که مدل طول ثابت پیش‌بینی مناسبی را برای گرانیوی نشان می‌دهد، ولی به علت محدودیت در انتخاب تنسور تحرک پذیری پیش‌بینی مناسبی برای اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال نشان نمی‌دهد. به عبارت دیگر، اگر پارامترهای مدل به گونه‌ای انتخاب گردد که پیش‌بینی درستی از گرانیوی ارائه دهد، اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال را درست پیش‌بینی نمی‌کند و بر عکس اگر پارامترهای مدل به گونه‌ای انتخاب شود که اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال را درست پیش‌بینی کند پیش‌بینی درستی از گرانیوی نخواهد داشت. بنابراین، مدل طول ثابت فقط رفتار رئولوژیکی موادی را درست پیش‌بینی می‌کند که شیب ناحیه قانون توان حدود $0/66-$ و شیب ناحیه خطی در اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال حدود $1/25-$ باشد.

نتایج شکل ۷ ب نشان می‌دهد که پیش‌بینی مدل حجم ثابت همپوشانی مناسبی با داده‌های تجربی برای گرانیوی و اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال دارد. بنابراین، مدل حجم ثابت به دلیل آزادی انتخاب در تنسور تحرک پذیری قادر به پیش‌بینی رفتار رئولوژیکی محلولها و مذابهای پلیمری مختلف است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، مدل‌های از نوع حجم ثابت و طول ثابت با استفاده از روش عمومی پواسون براکت برای محلولها و مذابهای پلیمری بررسی و با یکدیگر مقایسه شده است. نتایج حاصل نشان می‌دهد که با انتخاب تابع انرژی و تنسور تحرک پذیری مناسب برای هر یک از مدل‌ها می‌توان پیش‌بینی قابل قبولی از رفتار رئولوژیکی محلولها و مذابهای پلیمری ارائه کرد.

از مزیت‌های مدل حجم ثابت در مقایسه با مدل طول ثابت این است که در مدل حجم ثابت در انتخاب تنسور تحرک پذیری آزادی بیشتری وجود دارد، در حالی که در مدل طول ثابت فقط می‌توان از تنسور تحرک پذیری مرتبه اول نسبت به تنسور صورت‌بندی یا ترکیبی از مرتبه اول و مراتب بالاتر انتخاب کرد. بنابراین، در انتخاب تنسور تحرک پذیری محدودیت وجود دارد. این محدودیت در انتخاب تنسور



شکل ۷ - مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای: (الف) مدل طول ثابت و (ب) مدل حجم ثابت. پارامترهای مدل برای مدل طول ثابت $M = 500$ ، $\Lambda_0 = 0/005$ ، $b = 30$ و $\lambda = 3000$ و $\Lambda_0 = 0/00002$ است.

دیده می‌شود. بنابراین، از مزیت‌های مشهود مدل حجم ثابت بر مدل طول ثابت قابلیت تغییر شیب در ناحیه قانون توان است که مدل را قادر می‌سازد تا در پیش‌بینی رفتار رئولوژیکی پلیمرهای مختلف مورد استفاده قرار گیرد. در حالی که مدل طول ثابت فقط برای پلیمرهایی که شیب ناحیه قانون توان حدود $0/66-$ و شیب ناحیه خطی منحنی اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال بر حسب شدت برش حدود $1/25-$ دارند، پیش‌بینی درستی برای خواص تابع ماده دارد.

مقایسه نتایج پیش‌بینی شده از مدل‌ها با داده‌های تجربی

شکل ۷ مقایسه‌ای بین نتایج پیش‌بینی شده از مدل و داده‌های تجربی

تجربی نشان می‌دهد که مدل حجم ثابت پیش‌بینی قابل قبولی از رفتار رئولوژیکی محلول‌ها و مذاب‌های پلیمری ارائه می‌کند، در حالی که مدل طول ثابت فقط رفتار رئولوژیکی موادی را درست پیش‌بینی می‌کند که شیب ناحیه قانون توان حدود $0/66-$ و شیب ناحیه خطی در اولین ضریب اختلاف تنش‌های نرمال حدود $1/25-$ باشد.

مراجع

- Bird R.B., Armstrong R.C. and Hassager O., *Dynamics of Polymeric Liquids. 1, Fluid Mechanics*, 2 nd ed., Wiley-VCH, New York, 1-193, 1987.
- Zatloukal M., Differential Constitutive Equations for Polymer Melts in Steady Shear and Elongational Flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **113**, 209-227, 2003.
- Neergaard J. and Schieber J.D., Dynamics of Linear, Entangled Polymeric Liquids in Shear Flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **105**, 111-130, 2002.
- Maugin G.A. and Drouot R., Internal Variables Thermodynamics of Macromolecule Solutions, *J. Eng. Sci.*, **21**, 705-724, 1983.
- Hand G.L., A Theory of Anisotropy Fluids, *J. Fluid Mech.*, **13**, 33-46, 1962.
- Grmela M., Dependence of the Stress Tensor on the Intermolecular Viscosity, *J. Rheol.*, **33**, 207-231, 1989.
- Wilco M.H., Gerrit W.M. and Frank P.T., Viscoelastic Analysis of Complex Polymer Melt Flows Using the Extended Pom-Pom Model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **108**, 301-326, 2002.
- Zatloukal M., Vilcek J., Tzoganakis C. and Saha P., Improvement in Techniques for the Determination of Extensional Rheological Data from Entrance Flows: Computational and Experimental Analysis, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **107**, 13-37, 2002.
- Leonov A.L., None Equilibrium Thermodynamics and Rheology of Viscoelastic Polymer Media, *Rheol. Acta*, **15**, 85-98, 1976.
- Ramazani A., Ait-Kadi A. and Grmela M., Rheological Modelling of Short Fiber Thermoplastic Composites, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **73**, 241-260, 1997.
- Ait-Kadi A., Ramazani A. and Grmela M., Volume Preserving Rheological Models for Polymer Melts and Solutions Using the GENERIC Formalism, *J. Rheol.*, **43**, 51-72, 1999.
- Herrchen M. and Ottinger H.C., A Detailed Comparison of Various FENE Dumbbell Models, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **68**, 17-42, 1997.
- Schneggenburger Ch., Kroger M. and Hess S., An Extended FENE Dumbbell Theory for Concentration Dependent Shear-induced Anisotropy in Dilute Polymer Solutions, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **6**, 235-251, 1996.
- Ait-Kadi A. and Grmela M., Modelling the Rheological Behaviour of Fibre Suspensions in Viscoelastic Media, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **53**, 65-81, 1994.
- Purnode B. and Crechet M.J., Polymer Solution Characterization with the FENE-P Model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **77**, 1-20, 1998.
- Heel A.P.G., Hulsen M.A. and Brule B.H.A.A., On the Selection of Parameters in the FENE-P Model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **75**, 253-271, 1998.
- Edwards B.J., Beris B.N. and Grmela M., Generalized Constitutive Equation for Polymeric Liquid Crystals, Part I. Model Formulation Using the Hamiltonian (Poisson Bracket) Formulation, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **35**, 51-72, 1990.
- Beris B.N. and Edwards B.J., Poisson Bracket Formulation of Viscoelastic Flow Equations of Differential Type: A Unified Approach, *J. Rheol.*, **34**, 503-538, 1990.
- Grmela M. and Ottinger H.C., Dynamics and Thermodynamics of Complex Fluids. I. Development of a GENERIC Formalism, *Phys.Rev.*, **55**, 6620-6632, 1997.
- Beris A.N. and Edwards B.J., *Thermodynamics of Flowing Systems*, 1 st ed., Oxford University, New York, 209-326, 1994.