

Министерство образования Российской Федерации
Волгоградский государственный технический университет
Межкафедральная лаборатория информационных технологий
ХТФ
Кафедра химии и технологии переработки эластомеров

РАСЧЕТ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕМПЕРАТУРНОГО
ПОЛЯ
И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СТЕПЕНИ ВУЛКАНИЗАЦИИ
КРУПНОГАБАРИТНЫХ РЕЗИНОТЕХНИЧЕСКИХ
ИЗДЕЛИЙ

Методические указания

Волгоград 2001

УДК 678.04

Расчет нестационарного температурного поля и прогнозирование степени вулканизации крупногабаритных резинотехнических изделий: Методические указания к лабораторной работе/ Сост. И.П. Петрюк, А.Н. Гайдадин, В.Ф. Каблов, Б.П. Петрюк: Волгоград. гос. техн. ун-т.– Волгоград, 2001.– 8 с.

В лабораторной работе описано решение одномерной нестационарной задачи теплопроводности с помощью численных методов и методика прогноза степени вулканизации крупногабаритных резинотехнических изделий с помощью уравнения неизотермической вулканизации резин. Предназначены для студентов по направлению 5508 – “Химическая технология и биотехнология”, специальности 2506 – “Химическая технология переработки пластмасс и эластомеров” по курсу “Моделирование процессов переработки полимеров”, а также для студентов по магистерской программе 5508-15 – “Технология переработки эластомеров”.

Библиограф.: 4 назв.

Рецензент В.П. Медведев

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Волгоградского государственного технического университета.

© Волгоградский государственный
технический университет, 2001

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Целью настоящей работы является ознакомление с методикой расчета нестационарного температурного поля; моделирование процесса вулканизации резиновой смеси в неизотермическом режиме прогрета.

Задачей студента является овладение теоретическими подходами и основными математическими закономерностями, на которых базируется расчет процесса неизотермической вулканизации; знакомство с численными методами решения дифференциального уравнения теплопроводности, в частности, с конечно-разностными схемами; приобретение навыков использования теоретических основ для решения реальных технологических задач с использованием специализированного программного обеспечения.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Общее уравнение одномерной нестационарной задачи теплопроводности имеет следующий вид [1]

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (1)$$

где T – температура; t – время; x – пространственная координата; a – коэффициент теплопроводности.

Уравнение (1) описывает медленное перераспределение температуры в одномерной среде, происходящее неволновым диффузионным образом через хаотическое неупорядоченное движение переносчиков тепла. Характерная особенность решения уравнения (1) заключается в том, что всякое неоднородное начальное распределение $T(x, t=0)$, $x \in [0, L]$, не переносится вдоль x в виде волны, а постепенно "размазывается", так что происходит выравнивание распределения $T(x)$.

При численном решении уравнения (1) строить непрерывные распределения нет возможности, поэтому приходится использовать конечно-разностную аппроксимацию, т.е. вычислять значения $T(x, t)$ в дискретных пространственно-временных узлах

$$T = T(x_i, t_j) = T_i^j.$$

Для аппроксимации первой производной по времени требуется использовать значения T в двух или более различных моментах времени T^j и T^{j+1} , и, как минимум, три значения T_{i-1} , T_i , T_{i+1} для аппроксимации второй производной по пространственной координате. Соответственно, разностные схемы оказываются двух- (и более) слойными по времени и трех- (и более) слойными по координате. В зависимости от того на каком

временном слое аппроксимируется правая часть уравнения (1), различают явные и неявные схемы.

Простейшая **явная схема** имеет вид

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\tau} = a \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{h^2} \quad (2)$$

$$i = 0, 1, \dots, N; \quad N = L/h; \quad j = 0, 1, \dots$$

где τ и h — шаги по времени и координате. Для удобства здесь представлена однородная пространственно - временная сетка $\tau = t_{j+1} - t_j = \text{const}$, $h = x_{i+1} - x_i = \text{const}$ для любых i и j .

Если известно распределение T_i на j -м временном слое, то значение T_i^{j+1} в каждом i -м узле определяется из (2) явным образом

$$T_i^{j+1} = \frac{\tau a}{h^2} T_{i+1}^j + \left(1 - 2 \frac{\tau a}{h^2}\right) T_i^j + \frac{\tau a}{h^2} T_{i-1}^j. \quad (3)$$

Значения T в узлах $i=1$ и $i=N-1$, примыкающих к граничным, вычисляются с использованием граничных условий в точках $i=0$ и $i=N$.

Схема (2) условно устойчива. Иначе говоря, при достаточно больших шагах интегрирования по времени τ , превышающих характерное диффузионное время $t_{diff} \sim h^2/D$, за которое возмущение переносится на расстояние $\sim h$ диффузионным образом, численное решение начинает неограниченно расти, так что спустя конечное число шагов происходит переполнение и остановка расчета. Это явление называется численной неустойчивостью и связано с тем, что в схеме учитывается поступление информации в узел i только от соседних узлов $i-1$ и $i+1$, в то время как при $\tau > t_{diff}$ информация должна поступать также и от более далеких узлов. Анализ устойчивости схемы (2) дает точную границу

$$\frac{\tau a}{h^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (4)$$

В **неявной схеме** переменные на $j+1$ -м временном слое задействованы в трех соседних узлах

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\tau} = a \frac{T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}}{h^2} \quad (5)$$

а потому явно выразить T^{j+1} через T^j нельзя. Система алгебраических уравнений (5) относительно неизвестных T^{j+1} решается методом прогонки. Решение для T_i^{j+1} ищется в виде

$$T_{i+1}^{j+1} = K_{i+1} T_{i+1}^{j+1} + L_{i+1} \quad (6)$$

где K_{i+1} и L_{i+1} – прогоночные коэффициенты. Прогонка начинается с узла $i=0$. При этом из левого граничного условия определяются коэффициенты K_1 и L_1 .

Подставляя (6) в систему (5), получают рекуррентные уравнения для определения K и L

$$\begin{aligned} K_{i+1} &= \frac{\tau a / h^2}{1 + \tau a (2 - K_i) / h^2}, \\ L_{i+1} &= \frac{T_i^j + \tau a L_i / h^2}{1 + \tau a (2 - K_i) / h^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Прогоняя "вперед" по формулам (7), начиная с первых K_1 и L_1 , находят все K и L вплоть до K_N и L_N . Правое граничное условие используют для того, чтобы начать прогонку "назад".

Вычислив T_N^{j+1} , далее по формулам (6) прогоняют "назад" от $i=N-1$ до $i=1$ и находят все T_i^{j+1} .

Неявная схема устойчива при любом шаге τ . Это связано с тем, что в уравнениях (5) переменные T_i^{j+1} самоцепляются. Если изменить значения T в некотором узле (i, j) , то это приведет к тому, что изменятся значения на всем $j+1$ -м временном слое, а не только в узлах $(i-1, j+1)$ и $(i+1, j+1)$, как в случае явной схемы. Информация в каждый узел сетки

попадает не только от смежных узлов, но от всех узлов в целом, вне зависимости от величины шага τ , и потому ограничений на шаг интегрирования не возникает.

При расчете процесса неизотермической вулканизации для реакции первого порядка [1, 3] скорость процесса описывается уравнением

$$\frac{dx}{dt} = K(1-x), \quad (8)$$

где x – степень вулканизации; t – время; K – константа скорости процесса. Зависимость K от температуры описывается уравнением Аррениуса. Однако, на практике часто эту зависимость преобразуют к следующему виду

$$K(T) = K_0 \exp\left(-\frac{E}{R}\left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right]\right), \quad (9)$$

где K_0 – константа скорости реакции первого порядка при температуре T_0 ; T_0 – базовая (или эквивалентная) температура; E – энергия активации процесса вулканизации; R – универсальная газовая постоянная.

Подставляя (9) в (8) получают интегральную зависимость степени вулканизации от температуры

$$\ln(1-x) = \ln Q - \int K_0 \exp\left(-\frac{E}{R}\left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right]\right) dt, \quad (10)$$

где Q – константа интегрирования, характеризующая продолжительность индукционного периода; T – функция изменения температуры во времени.

Таким образом, подставляя в уравнение (10) значение температуры, вычисленное по формулам (3) или (6), можно определить степень вулканизации резиновой смеси в любой момент времени.

3. ХОД РАБОТЫ

1. Получить у преподавателя задание и подготовить исходные данные для расчета.

2. Найти и запустить программу *termo.exe*.

3. Определить или выбрать в моделируемом объекте точки для контроля температуры и степени вулканизации.

4. Задаться предполагаемым временем вулканизации и запустить расчет. Определить эпюру изменения температуры и степени вулканизации по глубине, зависимость их изменения от времени, оптимальное время вулканизации изделия.

5. Занести результаты работы в лабораторный журнал, построить необходимые графические зависимости.

4. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Понятие моделирования процесса вулканизации, как одного из этапов проектирования изделия.

2. Кинетические особенности изменения свойств полимерного материала в результате структурирования.

3. Особенности изменения температуры и степени структурирования крупногабаритного изделия в процессе вулканизации.

4. Определение оптимального времени вулканизации.

5. Выбор или определение контрольных точек в моделируемом объекте.

6. Преимущества и недостатки численных методов решения нестационарной задачи теплопроводности.

7. Экспериментальные методы определения нестационарного температурного поля и оптимального времени вулканизации крупногабаритных резинотехнических изделий.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лукомская А. И., Баденков П. Ф., Кеперша Л. М. Расчеты и прогнозирование режимов вулканизации резиновых изделий.– М.: Химия, 1978.– 280 с.

2. Юдаев Б.Н. Техническая термодинамика. Теплопередача.– М.: Высш. шк., 1988.– 479 с.

3. Гофманн В. Вулканизация и вулканизирующие агенты.– Л.: Химия, 1968.– 464 с.

4. Красовский В.Н., Воскресенский А.М., Харчевников В.М. Примеры и задачи по технологии переработки эластомеров.– Л.: Химия, 1984.– 240 с.

Составители: Иван Павлович ПЕТРЮК
Алексей Николаевич ГАЙДАДИН
Виктор Федорович КАБЛОВ
Борис Павлович ПЕТРЮК

РАСЧЕТ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ
И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СТЕПЕНИ ВУЛКАНИЗАЦИИ
КРУПНОГАБАРИТНЫХ РЕЗИНОТЕХНИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ
Методические указания к лабораторной работе

Редактор Е. М. Богомазова
Темплан 2001 г., поз. №8

Подписано в печать Формат 60x84 1/16.
Бумага газетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 0,46
Уч.-изд. л. 0,4 Тираж 100 экз. Заказ

Волгоградский государственный технический университет
400131, Волгоград, пр. Ленина, 28

РПК «Политехник»
Волгоградского государственного технического университета
400131, Волгоград, ул. Советская, 35