УДК 664.1:539.37

ПОСТРОЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Штефан Е.В., Блаженко С.И.
Национальный университет пищевых технологий, г. Киев, Украина

Одним из важнейших научно-технических направлений развития современной экономики является проектирование технологического оборудования для переработки гетерогенных дисперсных материалов в химической, пищевой и энергетической промышленностях. Технологическая переработка дисперсных материалов сопровождается зачастую одновременным протеканием реологических, химических, температурных, массообменных процессов. Теоретические исследования подобных процессов в рамках основных положений физико-химической механики [1] базируются на формулировке соответствующих нелинейных пространственно – нестационарных краевых задач математической физики. Постановка и исследование краевых задач, описывающих основные закономерности термомеханических и массообменных процессов при деформировании материалов, представлены в [2, 11]. Однако получение аналитических решений этих задач связано со значительными математическими трудностями. Использование проекционно-сеточных методов решения этих задач дает возможность получения соответствующих решений. Однако, существующие хорошо апробированные алгоритмы построения решений с использованием методов конечных элементов и конечных разностей ориентированы на исследование деформирования, как правило, гомогенных упругопластических материалов [3]. Для использования данных алгоритмов и соответствующих им числовых моделей в анализе деформирования гетерогенных дисперсных материалов необходимо построение аналитических моделей в форме отвечающей используемым стандартным процедурам (типа методов переменных параметров упругости, дополнительных нагрузок и т. п. [3, 4]).

В данной работе предложена аналитическая модель деформирования гетерогенных дисперсных материалов [5], которую можно использовать в алгоритмических моделях деформирования гомогенных упруго-вязко-пластических материалов дополненных некоторыми специальными процедурами.

Аналитическая модель как составная часть математической модели [5] основана на концепции представления дисперсного материала в виде двухфазной смеси: твердых частиц (твердой дисперсной фазы) и газожидкой дисперсионной среды. Для модельного описания поведения таких материалов необходимо использовать следующие традиционные понятия: напряжение, деформация, плотность, а также скорости изменения этих параметров. Указанные тензорные и скалярные характеристики имеют локальную природу и определяются с помощью операций предельного перехода, когда элементы пространства (объемы и поверхности) стягиваются к точкам. В традиционных моделях континуума точки отождествляются с частицами среды, а те, в свою очередь, являются элементарными носителями свойств материала. Подобное отождествление в дисперсных системах осложняется в виду отсутствия единого мнения о том, что следует понимать под частицей такой среды. Классическое представление о частице в механике дисперсных систем [6] состоит в отождествлении ее с твердыми зернами различной дисперсности.

Возникает следующий парадокс: каждая частица дисперсного материала, по сути, представляет собой деформируемое твердое тело. Поскольку каждая дискретная частица взаимодействует с соседними частицами, распределение напряжений в ней неоднородно. Поэтому, для упрощения математического описания механического поведения дисперсных материалов, будем использовать для соответствующих параметров пространственное осреднение по твердой и газо-жидкой фазам [6] .

В основу аналитической модели положены уравнения сохранения количества движения в макро-координатах для:

а) газо-жидкой фазы

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2\rho_2\mathbf{v})+\mathrm{grad}(\alpha_2\rho_2\mathbf{v}\times\mathbf{v})-\mathrm{grad}(\alpha_2\mathbf{P})-\mathbf{F}_2+\mathbf{F}^{(2)}=\mathbf{0}\ ; \qquad (1)$$

б) твердой фазы

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1\rho_1\mathbf{u})+\mathrm{grad}(\alpha_1\rho_1\mathbf{u}\times\mathbf{u})-\mathrm{grad}(\alpha_1\sigma)-\mathbf{F}_1-\mathbf{F}^{(1)}=0\ , \qquad (2)$$

где $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ – векторы средней скорости смещения твердых частиц и жидкости соответственно; ρ_1,ρ_2 – средние их плотности; α_1, α_2 – объемные содержания твердой и газо-жидкой фаз соответственно; $\mathbf{P}$ – гидростатическое давление в газо-жидкой фазе; $\mathbf{F}_1$, $\mathbf{F}_2$ – векторы объемных сил в твердой и жидкой фазах соответственно; σ – тензор напряжений в твердой фазе; $\mathbf{F}^{(1)}$, $\mathbf{F}^{(2)}$ – силы межфазного взаимодействия.

Вследствие равенства

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{n}=-\sigma\cdot\mathbf{n}\ , \qquad (3)$$

в точках внутренних поверхностей раздела газо-жидкой и твердой фаз (n – вектор нормали к поверхности раздела) выполняется условие:

$$\mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}^{0} \qquad (4)$$

Формальное суммирование уравнений (1) и (2) описывает, очевидно сохранение количества движения во всех макро-точках дисперсной среды:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1\rho_1\mathbf{u} + \alpha_2\rho_2\mathbf{v}) + \mathrm{grad}(\alpha_1\rho_1\mathbf{u}\times\mathbf{u} + \alpha_2\rho_2\mathbf{v}\times\mathbf{v}) - \qquad (5)$$

$$- \mathrm{grad}(\alpha_1\sigma + \alpha_2\mathbf{P}) - \alpha_2\mu\nabla^2\mathbf{v} - \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 = 0 \ ;$$

Однако, в практических расчетах более удобно рассматривать балансные уравнения количества движения в отдельности, т. е. в форме уравнений относительного движения газо-жидкой и твердой фаз.

Если задать силу межфазного взаимодействия в форме [6]

$$\mathbf{F}^{0} = \mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{R} + \mathbf{P}\mathrm{grad}\alpha_2 \qquad (6)$$

и, учитывая, что $\alpha_1 = 1 - \alpha_2$, то уравнение относительного движения твердой фазы примет вид:

$$\alpha_1\left(\rho_1\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \rho_2\frac{d\mathbf{v}}{dt}\right) - \mathrm{grad}\sigma^{f} - \frac{\mathbf{R}}{\alpha_2} - \alpha_1(\rho_1 - \rho_2)\mathbf{G} = 0 \ ; \qquad (7)$$

где $\mathbf{R} = \frac{\mu}{a^2}\alpha_1\alpha_2(\mathbf{v} - \mathbf{u})$ – эффективная сила вязкого сопротивления; σ^{f} – тензор эффективных напряжений.

Уравнение относительного движения жидкой фазы можно представить в форме:

$$\rho_2\frac{d\mathbf{v}}{d\mathbf{t}} = -\mathrm{grad}\mathbf{P} - \frac{\mathbf{R}}{\alpha_2} + \rho_2\mathbf{G}, \qquad (8)$$

где $\mathbf{G}$ – вектор ускорения свободного падения.

Укажем, что для процессов, которые протекают медленно, (отсутствие инерционных эффектов: $\rho_2\frac{d\ \mathbf{v}}{dt} = 0$; $\rho_2\mathbf{G} = 0$;) уравнение (8) отображает закон фильтрации в пористой изотропной среде:

$$\mathbf{v} - \mathbf{u} = -\frac{a^2}{\mu\alpha_1}\mathrm{grad}\mathbf{P} \ . \qquad (9)$$

Как показывают экспериментальные исследования, при небольших градиентах давления или скоростях фильтрации выполняется линейный закон Дарси [7]:

$$\mathbf{v} - \mathbf{u} = -\frac{k^{p}}{\alpha_1}\mathrm{grad}\mathbf{P}, \qquad (10)$$

где k^{p} – коэффициент проницаемости среды.

При формулировке определяющих соотношений предполагаем, что механическая мощность P в процессе деформирования может быть разделена на обратимую P^{0} и необратимую P^{H} составляющие:

$$P = P^{0} + P^{H}. \qquad (11)$$

При этом составляющая P^{0} может быть определена посредством функционала свободной энергии $\varphi = e - Ts$ и компонентами тензора скоростей обратимой (упругой) деформации $\dot{\varepsilon}^{e}_{ik}$ [8]:

$$P^{0} = \frac{\partial\varphi}{\partial\varepsilon^{e}_{ik}}, \qquad (12)$$

где e – внутренняя энергия; T – абсолютная температура; s – энтропия; $\frac{\partial\varphi}{\partial\varepsilon^{e}_{ik}}$ – имеет смысл внутренних напряжений σ_{ik} в деформируемом теле.

Из (12) вытекают известные уравнения состояния упругого тела (закон Гука), которые для изотропного материала имеют вид:

$$\dot{\varepsilon}^{e}_{ik} = \frac{1+\nu}{E}\left(\dot{\sigma}_{ik} + \frac{\nu}{1+\nu}\dot{\sigma}_{ll}\delta_{ik}\right), \qquad (13)$$

где E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона.

Неравновесная составляющая мощности P^{H} определяется диссипативным механизмом необратимого процесса деформирования в форме закона для плотности производства энтропии ρ_S в объеме текущей конфигурации заполненной дисперсным материалом (неравенство Клаузиуса-Дюгема [9]):

$$\rho_S = \mathrm{Д}_q + \mathrm{Д}_M + \mathrm{Д}_0 \geq 0, \qquad (14)$$

где $\mathrm{Д}_q = J_q\mathrm{grad}(1/T)$ – функция тепловой диссипации с тепловым потоком J_q; $\mathrm{Д}_M = \frac{\rho}{T}P^{H}$ – функция механической диссипации; $\mathrm{Д}_0 = \rho q^{V}/T$ – функция объемной диссипации, обусловленная наличием внутренних источников энергии q^{V}.

Принимая во внимание гипотезу о существовании некоторой поверхности Φ, определенной в пространстве напряжений как граница обратимого и необратимого состояний, функцию механической диссипации представим в виде

$$\mathrm{Д}_M = \mu(\Phi)\cdot\Phi, \qquad (15)$$

где $\mu(\Phi)$ – некоторый множитель.

Основываясь на (15) получим следующую систему определяющих отношений необратимо деформируемого материала:

$$p^H = \sigma_{ik} \cdot \dot{\varepsilon}^H_{ik};$$

$$\dot{\varepsilon}^H_{ik} = \mu(\Phi)\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}}.$$

Потенциал Φ, определяющий условие перехода процесса деформирования дисперсного материала из обратимого в необратимое (или наоборот), представим в виде [10]:

$$\Phi(p,\tau,\theta,k) = \frac{\tau^2}{\varphi} + \frac{p^2}{\psi} - (1-\alpha_2)k^2 = 0,$$

где p – уровень гидростатического давления в материале; τ^2 – второй инвариант девиатора напряжений: $\tau^2 = \frac{1}{2}S_{ik}S_{ik}$; K – предел текучести твердой фазы материала; φ, ψ – функции пористости, зависящие от объемных содержаний фаз [10] – $\varphi(\alpha_2) = (1-\alpha_2)^2$; $\psi(\alpha_2) = 2(1-\alpha_2)^3 / 3\alpha_2$.

Отметим, что, полагая, $\alpha_2 = 0$; $\varphi = 1/3$; $\psi = \infty$, получим условие текучести Мизеса, описывающее процесс упругопластического деформирования гомогенного изотропного несжимаемого материала.

Подстановка (18) в (17) дает

$$\dot{\varepsilon}^H_{ik} = \frac{\mu(\Phi)}{\psi\varphi}\left[\psi\sigma_{ik} + \left(\frac{2}{3}\varphi - \psi\right)p\delta_{ik}\right].$$

Обращая (19), имеем

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{\mu(\Phi)}\left[\varphi\dot{\varepsilon}^H_{ik} + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi\right)e^H\delta_{ik}\right],$$

где $e^H = \dot{\varepsilon}^H$.

Рассматривая процесс необратимого неравновесного деформирования, считаем, что полные напряжения σ_{ik} могут быть представлены в виде суммы равновесной σ^p_{ik} и неравновесной σ^V_{ik} составляющих

$$\sigma_{ik} = \sigma^p_{ik} + \sigma^V_{ik}.$$

Равновесную составляющую тензора напряжений (21) определяем в соответствии с [10] на основании (20)

$$\sigma^p_{ik} = \frac{\sqrt{\rho}K}{\sqrt{\varphi\gamma^2 + \psi e^2}}\left[\varphi\dot{\varepsilon}^H_{ik} + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi\right)e^H\delta_{ik}\right],$$

где γ – второй инвариант девиатора скоростей деформаций $\dot{\varepsilon}_{ik}$.

В свою очередь для вязкой (неравновесной) составляющей тензора напряжений в соответствии с [10] на основании (20), имеем

$$\sigma_{ik}^{V} = 2\eta_k\left[\varphi\dot{\varepsilon}_{ik}^{H} + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi\right)e^{H}\delta_{ik}\right], \tag{23}$$

где η_k – коэффициент вязкости материала [10].

Подставляя (22) и (23) в (21), получим определяющие соотношения вязко-пластичности в виде

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\sqrt{\rho}K}{\sqrt{\varphi\gamma^2 + \psi e^2}} + 2\eta_k\right)\left[\varphi\dot{\varepsilon}_{ik} + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi\right)e^{H}\delta_{ik}\right]. \tag{24}$$

Обратив (24), имеем

$$\dot{\varepsilon}_{ik}^{H} = \frac{\sqrt{\varphi\gamma^2 + \psi e^2}}{\varphi\psi\left(\sqrt{\rho}K + 2\eta_k\sqrt{\varphi\gamma^2 + \psi e^2}\right)}\left[\psi\sigma_{ik} + \left(\frac{1}{3}\varphi - \psi\right)p\delta_{ik}\right]. \tag{25}$$

Получение определяющих соотношений упруго-вязко-пластического поведения дисперсного материала возможно на основе компиляции моделей сред в формах (13) и (25). Для этого воспользуемся конечно-разностной дискретизацией процесса деформирования по времени.

На основании 2-х слойной аппроксимации производной по времени, вектор скорости деформации $\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}$ в текущий момент времени t $/t_n \le t \le t_{n+1}/$ определяем линейной комбинацией соответствующих векторов на n-ом и n+1-ом временных слоях

$$\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\} = \left(1 - \overline{\omega}\right)\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_n + \overline{\omega}\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n+1}, \tag{26}$$

где $\overline{\omega} = \dfrac{t - t_n}{\Delta t}$ – весовой множитель $/0 \le \overline{\omega} \le 1/$.

Вектор $\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n+1}$ в (26) разложим в ряд Тейлора по временному аргументу t в окрестности точки t_n:

$$\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n+1} = \sum_{0}^{1}\frac{d^{l-1}}{dt^{l-1}}\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_n\Big|_{t_n}\frac{(\Delta t_n)^l}{l!} + o(\Delta t_n)^{l+1} \approx \left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_n + \left(\left[\dot{Z}^{H}\right]\{\sigma\}_n + \left[Z^{H}\right]_n\{\dot{\sigma}\}_n\right)\Delta t_n. \tag{27}$$

Подставляя (27) в (26), имеем

$$\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\} = \left(1-\overline{\omega}\right)\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n} + \overline{\omega}\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n} + \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[\dot{Z}_{H}\right]_{n}\{\sigma\}_{n} + \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[Z_{H}\right]_{n}\{\dot{\sigma}\}_{n} =$$

$$= \left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n} + [V]_{n}\{\dot{\sigma}\}_{n} + \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[\dot{Z}_{H}\right]_{n}\{\sigma\}_{n},$$

где $[V] = \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[Z^{H}\right]_{n}$.

Записав определяющие соотношения упругого материала в форме кона Гука (13):

$$\{\dot{\sigma}\} = \left[D^{e}\right]\left\{\dot{\varepsilon}^{e}\right\}$$

с учетом закона аддитивности, вытекающего из (11)

$$\{\dot{\varepsilon}\} = \left\{\dot{\varepsilon}^{e}\right\} + \left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}$$

имеем

$$\{\dot{\sigma}\}_{n} = \left[D^{e}\right]\left(\{\dot{\varepsilon}\}_{n} - \left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n}\right) =$$

$$\left[D^{e}\right]\left(\{\dot{\varepsilon}\}_{n} - \left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n} - [V]_{n}\{\dot{\sigma}\} - \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[\dot{Z}^{H}\right]_{n}\{\sigma\}_{n}\right)$$

$$\left([I] + \left[D^{e}\right][V]_{n}\right)\{\dot{\sigma}\} = \left[D^{e}\right]\left(\{\dot{\varepsilon}\}_{n} - \left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n} - \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[\dot{Z}^{H}\right]_{n}\{\sigma\}_{n}\right)$$

или

$$\{\dot{\sigma}\} = \left[D^{evp}\right]_{n}\{\dot{\varepsilon}\} - \{VP\}_{n},$$

где $\left[D^{evp}\right]_{n} = \left[\left[D^{e}\right]^{-1} + [V]_{n}\right]^{-1}$ – конституциональная матрица упруго-вязкопластичности;

$$\{VP\}_{n} = \left[D^{evp}\right]_{n}\left(\left\{\dot{\varepsilon}^{H}\right\}_{n} + \overline{\omega}\Delta t_{n}\left[\dot{Z}^{H}\right]_{n}\{\sigma\}_{n}\right);$$

$$\text{при } \left\{\dot{Z}^{H}\right\}_{n} = \dot{K}_{n}^{H}\left[D^{H}\right]_{n} + K_{n}^{H}\left[\dot{D}^{H}\right]_{n};$$

$$\dot{K}_{n}^{H} = -\frac{\dot{\varepsilon}_{экв}\left(\dot{\rho}K + 2\rho\dot{K}\right)}{2\sqrt{\rho}\left(\sqrt{\rho}K + 2\eta_{k}\dot{\varepsilon}_{экв}\right)^{2}},$$

где $\dot{\varepsilon}_{экв} = \sqrt{\varphi\gamma^{2} + \psi e^{2}}$;

Выводы. Полученная система уравнений (7), (10) и (33) составляет основу аналитической модели деформирования дисперсного материала. Данные уравнения по форме схожи с соотношениями, описывающими деформирование гомогенных материалов. Поэтому, для практической реализации предложенной аналитической модели можно использовать хорошо апробированные алгоритмы для расчета гомогенных материалов, а также соответствующие их программные реализации (вычислительные комплексы).

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Ребиндер П.А. Физико-химическая механика – новая пограничная область науки.– М.: «Знание»,1958.– 64 с.
2. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры.– 2-е изд., испр.– М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.– 320 с.
3. Бате К., Вилсон Е. Численные методы анализа и метод конечных элементов.– М.: Стройиздат, 1982.– 447 с.
4. Yamada Y. Nonlinear matrices, their implications and applications in inelastic large deformation analysis.– Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 331 (1982).– P. 417-437.
5. Штефан Е.В. Информационные технологии проектирования технологического оборудования для механической обработки дисперсных материалов //Междунар. период. сб. науч. тр. «Обработка дисперсных материалов и сред», вып. № 12.– Одесса: НПО «ВОТУМ», 2002.– 338 с.
6. Механика насыщенных пористых сред. /Николаевский В.Н., Басинев К.С., Горбунов А.Т., Зотов Г.А.– М.: Недра, 1970.– 339 с.
7. Жужиков В.А. Фильтрование.– М.: Химия, 1980.– 398 с.
8. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости.– М.: Наука, 1980.– 521 с.
9. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов (физические основы).– М.: Наука, 1978.– 128 с.
10. Феноменологические теории прессования порошков /Штерн М.Б., Сердюк Г.Г. и др.– К.: Наукова думка, 1982.– 140 с.
11. Поздеев А.А, Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения.– М.: Наука, 1986.– 287 с.