

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 промышленности. 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, однородных 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 однородных упруго-вязкопластических материалов дополненных некоторыми специальными процедурами.

Аналитическая модель как составная часть математической модели [5] основана на концепции представления дисперсного материала в виде

дисперсной смеси: твердых частиц (твердой дисперсной фазы) и газожидкой дисперсионной среды. Для модельного описания поведения таких материалов необходимо использовать следующие традиционные понятия: деформация, 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 осуществляется 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 частицами 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 усреднение по твердой и газо-жидкой фазам [6].

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

а) газо-жидкой фазы

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

б) твердой фазы

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

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; $\mathbf{F}^{(1)}, \mathbf{F}^{(2)}$ – векторы межфазного взаимодействия.

Из следствия равенства

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u} + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{v}) + \text{grad}(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u} \times \mathbf{u} + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{v} \times \mathbf{v}) - \\ - \text{grad}(\alpha_1 \sigma + \alpha_2 P) - \alpha_2 \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 = 0 \quad ; \end{aligned} \quad (5)$$

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]

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

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

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

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

Уравнение относительного движения жидкой фазы можно представить в форме:

$$\rho_2 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\text{grad} P - \frac{\mathbf{R}}{\alpha_2} + \rho_2 \mathbf{G}, \quad (8)$$

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:

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

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

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

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:

$$P = P^0 + P^H. \quad (11)$$

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

$$P^0 = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\epsilon}_{ik}^e}, \quad (12)$$

e – внутренняя энергия; T – абсолютная температура; s – энтропия; $\dot{\epsilon}_{ik}^e$ – 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:

$$\dot{\epsilon}_{ik}^e = \frac{1+\nu}{E} \left(\dot{\sigma}_{ik} + \frac{\nu}{1+\nu} \dot{\sigma}_{rr} \delta_{ik} \right), \quad (13)$$

E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона.

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

$$\rho s = D_q + D_M + D_0 \geq 0, \quad (14)$$

где $D_q = J_q \text{grad}(1/T)$ – функция тепловой диссипации с тепловым потоком

J_q ; $D_M = \frac{\rho}{T} P^H$ – функция механической диссипации; $D_0 = \rho^q \frac{V}{T}$ – 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

$$D_M = \mu(\Phi) \cdot \Phi, \quad (15)$$

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

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

$$p^H = \sigma_{ik} \cdot \dot{\epsilon}_{ik}^H, \quad (16)$$

$$\dot{\epsilon}_{ik}^H = \mu(\Phi) \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}}, \quad (17)$$

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

$$\Phi(p, \tau, \theta, k) = \frac{\tau^2}{\varphi} + \frac{p^2}{\psi} - (1 - \alpha_2) k^2 = 0, \quad (18)$$

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] – $\varphi(\alpha_2) = (1 - \alpha_2)^2$; $\psi(\alpha_2) = 2(1 - \alpha_2)^2 / 3\alpha_2$.

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

Подстановка (18) в (17) дает

$$\dot{\epsilon}_{ik}^H = \frac{\mu(\Phi)}{\psi\varphi} \left[\psi\sigma_{ik} + \left(\frac{2}{3}\varphi - \psi \right) p\delta_{ik} \right]. \quad (19)$$

Обращая (19), имеем

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{\mu(\Phi)} \left[\varphi\dot{\epsilon}_{ik}^H + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi \right) e^H \delta_{ik} \right], \quad (20)$$

где $e^H = \dot{\epsilon}^H$.

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

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}^p + \sigma_{ik}^v. \quad (21)$$

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

$$\sigma_{ik}^p = \frac{\sqrt{\rho K}}{\sqrt{\varphi\gamma^2 + \psi e^2}} \left[\varphi\dot{\epsilon}_{ik}^H + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi \right) e^H \delta_{ik} \right], \quad (22)$$

второй инвариант девиатора скоростей деформаций $\dot{\epsilon}_{ik}$.

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

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

η_k – коэффициент вязкости материала [10].

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

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

Обратив (24), имеем

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

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

На основании 2-х слойной аппроксимации производной по времени, для скорости деформации $\dot{\epsilon}_{ik}^H$ в текущий момент времени t ($t \in [t_n, t_{n+1})$) определяем линейной комбинацией соответствующих векторов на n -ом и $n+1$ -ом временных слоях

$$\dot{\epsilon}_{ik}^H = (1 - \bar{\omega}) \dot{\epsilon}_{ik}^H|_n + \bar{\omega} \dot{\epsilon}_{ik}^H|_{n+1}, \quad (26)$$

$\bar{\omega} = \frac{t - t_n}{\Delta t}$ – весовой множитель ($0 \leq \bar{\omega} \leq 1$).

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

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

Подставляя (27) в (26), имеем

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}^H &= (1 - \bar{\omega}) \dot{\epsilon}^H_n + \bar{\omega} \dot{\epsilon}^H_n + \bar{\omega} \Delta t_n [\dot{Z}^H_n] \{\sigma\}_n + \bar{\omega} \Delta t_n [Z^H_n] \{\dot{\sigma}\}_n = \\ &= \dot{\epsilon}^H_n + [V]_n \{\dot{\sigma}\}_n + \bar{\omega} \Delta t_n [Z^H_n] \{\sigma\}_n, \end{aligned} \quad (28)$$

где $[V] = \bar{\omega} \Delta t_n [Z^H_n]$.

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

$$\{\sigma\} = [D^e] \{\epsilon^e\} \quad (29)$$

с учетом закона аддитивности, вытекающего из (11)

$$\{\dot{\epsilon}\} = \dot{\epsilon}^e + \dot{\epsilon}^H \quad (30)$$

имеем

$$\{\dot{\sigma}\}_n = [D^e] \left(\{\dot{\epsilon}\}_n - \dot{\epsilon}^H_n \right) = [D^e] \left(\{\dot{\epsilon}\}_n - \dot{\epsilon}^H_n - [V]_n \{\sigma\}_n - \bar{\omega} \Delta t_n [Z^H_n] \{\sigma\}_n \right) \quad (31)$$

$$([I] + [D^e] [V]_n) \{\dot{\sigma}\}_n = [D^e] \left(\{\dot{\epsilon}\}_n - \dot{\epsilon}^H_n - \bar{\omega} \Delta t_n [Z^H_n] \{\sigma\}_n \right) \quad (32)$$

или

$$\{\dot{\sigma}\}_n = [D^{evp}]_n \{\dot{\epsilon}\}_n - [VP]_n, \quad (33)$$

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

$$[VP]_n = [D^{evp}]_n \left(\dot{\epsilon}^H_n + \bar{\omega} \Delta t_n [Z^H_n] \{\sigma\}_n \right); \quad (34)$$

$$\text{при } \dot{Z}^H_n = \dot{K}_n^H [D^H]_n + K_n^H [D^H]_n; \quad (35)$$

$$\dot{K}_n^H = \frac{\dot{\epsilon}_{\text{эжв}} (\rho K + 2\rho \dot{K})}{2\sqrt{\rho} (\sqrt{\rho K + 2\eta_k \dot{\epsilon}_{\text{эжв}}})^2}, \quad (36)$$

где $\dot{\epsilon}_{\text{эжв}} = \sqrt{\varphi \dot{\gamma}^2 + \psi \dot{\epsilon}^2}$;

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

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- Габриэлер П.А. Физико-химическая механика — новая пограничная область науки. — М.: «Знание», 1958. — 64 с.
- Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: числ. методы. Примеры. — 2-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. — 320 с.
- Вату П., Вилсон Е. Численные методы анализа и метод конечных элементов. — М.: Стройиздат, 1982. — 447 с.
- Yamada Y. Nonlinear matrices, their implications and applications in inelastic large deformation analysis. — Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 331 (1983). — P. 417-437.
- 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.
- Механика насыщенных пористых сред / Николаевский В.И., Басинев В.С., Горбунов А.Т., Зотов Г.А. — М.: Недра, 1970. — 339 с.
- Жужиков В.А. Фильтрация. — М.: Химия, 1980. — 398 с.
- Гурье А.И. Нелинейная теория упругости. — М.: Наука, 1980. — 521 с.
- Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов (физические основы). — М.: Наука, 1978. — 128 с.
- Феноменологические теории прессования порошков / Штерн М.Б., Сердюк Г.Г. и др. — К.: Наукова думка, 1982. — 140 с.
- Николаев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. — М.: Наука, 1986. — 287 с.