

УДК 519.6:539.3

**ДЕФОРМИРОВАНИЕ ВЯЗКОУПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ
С ИЗМЕНЯЮЩЕЙСЯ СТРУКТУРОЙ ¹**

Н.А. Беляева

Представлен обзор работ с участием автора, в которых рассматриваются процессы деформирования структурированных материалов. Разработанные математические модели охватывают широкий круг объектов — от порошковых систем до полимерных материалов и композитов на их основе. Указанные модели позволяют определять изменение деформационных, тепловых и структурных характеристик многообразных систем в ходе различных процессов — отверждение, твердофазная экструзия, течение неньютоновской жидкости.

1. Введение Развитие технологических процессов переработки различных органических и неорганических материалов, многочисленные области применения таких материалов требуют ясного понимания закономерностей формирования конечного продукта с заданными физико-механическими и структурными характеристиками. Одна из важных составляющих этой проблемы — представление об эволюции макроскопической структуры материала в ходе технологического процесса. Правильное понимание и математическое моделирование структурных изменений полимерных и композиционных материалов с учетом широкого спектра тепловых, диффузионных, кинетических и реодинамических факторов является весьма актуальным в связи с развитием твердофазных технологических процессов формования изделий из этих материалов.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы, ГК № 02.740.11.0618

Одним из направлений научных исследований кафедры математического моделирования и кибернетики Сыктывкарского госуниверситета, заведующий кафедрой Михайловский Е.И., является создание и развитие термовязкоупругих математических моделей получения изделий из полимерных и композитных материалов в технологических процессах, к которым относятся процессы отверждения, экструзии и непосредственно связанные с ними течения структурированных жидкостей. В данной работе представлены результаты исследований процессов отверждения осесимметричных изделий, выполненных в рамках несвязанной теории термовязкоупругости; математические модели твердофазной плунжерной экструзии вязкоупругого структурированного композитного материала, в том числе представлена температурная модель; отмечены результаты исследования процессов самоорганизации течения структурированной (неньютоновской) жидкости. По всем указанным направлениям продолжаются исследования и в настоящее время.

2. Моделирование процессов отверждения

Одним из способов формирования полимерных изделий является метод отверждения мономерной массы в ходе совместного протекания реакций полимеризации и кристаллизации. Полимеры с высокой температурой плавления легко могут быть получены кристаллическими в процессе полимеризации. Высококристаллические полимеры, как правило, оказываются прочными и упругими. Этот факт открывает большие возможности для получения изделий из кристаллизующихся полимеров методом химического формования. Изменение структуры полимеров и полимерных композиций, обусловленное деформациями, влияние изменения на свойства формируемых изделий является в настоящее время неоспоримым экспериментально установленным фактом [1]. Однако кристаллизацию в процессе полимеризации стали изучать на основе совместного математического, физического и химического подхода только недавно. Многие вопросы этого сложного явления остаются нерешенными. В современных исследованиях для учета влияния кристаллизации на механические свойства полимеров предлагаются различные подходы. Так, в работе [2] описание свойств полимерных материалов предлагается с помощью параллельно соединенных БСНЭ (базисный структурно-механический элемент).

В представленных ниже математических моделях формирования полимерных осесимметричных изделий в процессе их формирования при параллельном протекании реакций полимеризации и кристаллизации предлагается учитывать изменение структуры материала, полимериза-

цию и кристаллизацию, с помощью макрокинетической модели совмещенного процесса [3–10].

2.1. Макрокинетическая модель совмещенного процесса полимеризации и кристаллизации

Рассмотрим формование полого осесимметричного изделия ($R_1 \leq r \leq R$) в ходе фазового перехода жидкость \rightarrow твердое тело при совместном протекании реакций полимеризации и кристаллизации в рамках несвязанной теории термовязкоупругости. Распределение температуры $T = T(r, t)$, степени структурных превращений — глубины полимеризации $\alpha = \alpha(r, t)$ и кристаллизации $\eta = \eta(r, t)$ — определяется на основе макрокинетической модели совмещенного процесса:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_0 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q_p \frac{\partial \alpha}{\partial t} + Q_k \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = k_{01} \exp \left(-\frac{U}{R_u T} \right) (1 - \alpha)(\epsilon_1 + \alpha), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = k_{02} \exp \left(-\frac{E^a}{R_u T} - \frac{\psi T_f}{T(T_f - T)} \right) (\epsilon_2 + \eta)(\alpha \eta_b - \eta), \quad (3)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$t = 0 : \quad \alpha = 0; \quad \eta = 0; \quad T \Big|_{R_1 \leq r \leq R} = T_0; \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} - h_0 (T - T_0) \Big|_{R_1} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial r} + h (T - T_0) \Big|_R = 0. \quad (5)$$

В системе (1)-(5): (1) — уравнение теплопроводности, (2), (3) — кинетические уравнения полимеризации и кристаллизации, соответственно; n — коэффициент формы (для цилиндра $n=1$, для сферы $n=2$); $c, \rho, \lambda_0, Q_p, Q_k, U, R_u, E^a, \psi, T_f, \epsilon_1, \epsilon_2$ — технологические параметры процесса,

$$\eta_b = 0.52 \sqrt{1 - (T/T_f)^4}$$

— равновесная степень кристалличности.

Влияние условий полимеризации на свойства формируемого изделия наиболее отчетливо можно проследить путем определения высокотемпературного или низкотемпературного режима проведения реакции посредством критериев Семенова [3–5]:

$$\kappa_p = U Q_p R^2 k_1(T_*) / \lambda_0 R_u T_*^2; \quad \kappa_{cr} = U Q_{cr} R^2 k_2(T_*) / \lambda_0 R_u T_*^2,$$

где T_* — характерная температура процесса.

Представленные результаты свидетельствуют о неустойчивости температурного режима процесса: в зависимости от условий проведения процесса реализуется низкотемпературный или высокотемпературный режим отверждения. Неустойчивость температурного режима влечет неустойчивость формирования внутренних напряжений по отношению к кинетике проводимого процесса.

2.2. Метод интегрального уравнения

Предложенный метод определения напряженного состояния в ходе отверждения основан на решении уравнения последействия Больцмана-Вольтерры

$$\varphi(\varepsilon) = \sigma(t) + \int_{\tau=0}^{\tau=t} K(t-\tau)\sigma(\tau)d\tau,$$

где $\varphi(\varepsilon)$ — некоторая функция деформации, $K(t-\tau)$ — так называемое ядро последействия.

В случае объемного режима реакции пространственно-временное поведение отверждающегося материала в форме полого (бесконечного) цилиндра можно полностью описать следующей системой определяющих соотношений, справедливых в общем случае неупругой сплошной среды:

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} = \frac{\sigma_{\varphi\varphi} - \sigma_{rr}}{r}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{\varphi\varphi}}{\partial r} = \frac{\varepsilon_{rr} - \varepsilon_{\varphi\varphi}}{r}, \quad (7)$$

(6) — уравнение равновесия, (7) — условие совместности деформаций; $\sigma_{rr}, \sigma_{\varphi\varphi}$ — радиальная и окружная компоненты тензора напряжения; $\varepsilon_{rr}, \varepsilon_{\varphi\varphi}$ — соответствующие компоненты тензора деформации. Полные компоненты деформации в (7) являются суммой вязкоупругой ε^* , температурной $\varepsilon^T = \alpha_0(T - T_0)$ и химической $\varepsilon^{ch} = \varepsilon_p + \varepsilon_{cr}$, $\varepsilon_p = k_1\alpha$, $\varepsilon_{cr} = k_2\eta$ ($\varepsilon_p, \varepsilon_{cr}$ — усадки вследствие полимеризации и кристаллизации, соответственно) составляющих:

$$\varepsilon = \varepsilon^* + \varepsilon^T + \varepsilon^{ch}.$$

Здесь α_0 — аналог коэффициента линейного температурного расширения материала, для простоты будем считать его постоянным; k_1, k_2 — константы.

В двумерном случае вязкоупругую компоненту деформации будем искать в тензорном виде

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{rr}^*(r, t) \\ \varepsilon_{\varphi\varphi}^*(r, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/E & -\nu/E \\ -\nu/E & 1/E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{rr}(r, t) \\ \sigma_{\varphi\varphi}(r, t) \end{pmatrix} + \int_0^t \begin{pmatrix} f_{rr}(t-\tau) & f_{r\varphi}(t-\tau) \\ f_{\varphi r}(t-\tau) & f_{\varphi\varphi}(t-\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{rr}(r, \tau) \\ \sigma_{\varphi\varphi}(r, \tau) \end{pmatrix} d\tau, \quad (8)$$

Применяя к соотношению (17) преобразование Лапласа, используя условие несжимаемости материала, находим выражения для изображений неизвестных функций f_{ij} и, следовательно, сами функции. Так, для стандартной модели вязко-упругого тела [3, 4, 6]

$$f_{rr}(t) = \frac{\lambda - \mu}{E} e^{-\mu t}, \quad (9)$$

а $f_{rr} = f_{\varphi\varphi} = -f_{r\varphi}(p) = -f_{\varphi r}$. В соотношении (9)

$$\lambda = (E_1 + E_2)/\beta, \quad E_1 = E = \text{const}, \quad E_2 = 3 \cdot 10^{10}(T_f/T - 1);$$

$$\mu = E_2/\beta, \quad \beta = \beta_1 \eta / (\eta_b - \eta), \quad \beta_1 = A \exp(-E^v / R_u T + A_1 \alpha).$$

Для определения компонент напряжений была введена функция напряжений $\Phi = \Phi(r, t)$:

$$\sigma_{rr}(r, t) = \frac{\Phi}{r}, \quad \sigma_{\varphi\varphi}(r, t) = \frac{\partial \Phi}{\partial r},$$

что позволило найти радиальную и окружную компоненты напряжений в явном виде:

$$\sigma_{rr}(r, t) = \frac{1}{r} \left\{ J(r, t) - \int_0^t (\lambda - \mu) \exp[-\lambda(t - \tau)] J(r, \tau) d\tau \right\},$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r, t) = \frac{\partial J(r, t)}{\partial r} - \int_0^t (\lambda - \mu) \exp[-\lambda(t - \tau)] \frac{\partial J(r, \tau)}{\partial r} d\tau,$$

где

$$J(r, t) = -\frac{1}{r} \int_r^R F(r, t) r dr + \frac{1}{2r} F(R_1, t) (R^2 - r^2),$$

а функция $F(r, t)$ определяется на основе макрокинетической модели (1–5).

Возникновение температурных неоднородностей при объёмной полимеризации (отверждении) может привести к изменению теплового режима полимеризации, переходу объёмной полимеризации в режим распространения фронта и наоборот. Эти явления наиболее сильно выражены при протекании реакции в больших объёмах, где саморазогрев может вызвать существенно неизотермическое развитие полимеризации.

2.3. Фронтальное отверждение

Задача о фронтальном формировании (отверждении) осесимметричного изделия решается [3, 4, 7–10] с точки зрения непрерывно нарастающего твердого тела. Отличие от постановки задачи для фиксированного тела вытекает из того факта, что элемент растущего тела в окрестности какой-либо точки (r) деформируется совместно с другими элементами, лишь начиная с момента его отверждения $t^*(r)$, совпадающего с моментом присоединения этого элемента к образованной (затвердевшей) области. Чтобы соблюсти корректность постановки рассматриваемой задачи и учесть динамический характер протекающего процесса отверждения (непрерывного наращивания), основные уравнения (6–8) и граничные условия записываются в продифференцированном по времени виде.

Если на растущей поверхности $r = r^*(t)$ задано внешнее давление $p(t)$, а на нерастущей $r = R_1$ — внутреннее $p_i(t)$, т.е.

$$\dot{\sigma}_{rr}(r^*(t)) = -\dot{p}(t), \quad \dot{\sigma}_{rr}(R_1) = -\dot{p}_i(t),$$

тогда производные по времени радиальной и окружной компонент напряжений определяются выражениями

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{rr}(r, t) &= - \int_r^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr + c(t) R_1^3 \right) \frac{1}{r^3} dr - \dot{p}(t), \\ \dot{\sigma}_{\varphi\varphi}(r, t) &= -\dot{p}(t) \frac{r^{*2}(r^2 + R_1^2)}{r^2(r^{*2} - R_1^2)} + \frac{R_1^2(r^{*2} + r^2)}{r^2(r^{*2} - R_1^2)}. \end{aligned} \quad (10)$$

$$\cdot \left(\dot{p}_i(t) - \int_{R_1}^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right) - \\ - \int_r^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr + \frac{1}{r^2} \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr.$$

Здесь функция $\chi(r, t)$ определяется решением интегро-дифференциального уравнения

$$\dot{\chi}(r, t) + \tilde{f}_{rr}(0)\chi(r, t) + \int_{t^*}^t \dot{f}_{rr}(r, t - \tau)\chi(r, \tau) d\tau = -E\dot{F}(r, t),$$

а функция $F(r, t)$ определяется на основе макрокинетической модели (1–5). Для определения давления на границе фронта реакции воспользуемся условием несжимаемости материала — при продвижении фронта отверждения от $r^* - \Delta r$ до r^* выполняется условие

$$(1 - \nu) \Delta p / E + [\varepsilon^{ch} + \varepsilon^T] = 0, \quad (11)$$

где Δp — приращение давления, а температурная ε^T и химическая ε^{ch} усадки на границе фронта определяются из макрокинетической модели процесса в применении к фронтальному режиму реакции [4]. Из уравнения (11) определяем изменение давления Δp на границе твердого слоя $r^* = r^*(t)$ в момент времени t :

$$p(r^*(t)) = p(r^* - \Delta r) + \Delta p(r^*(t)), \quad p(r^*, 0) = p_i.$$

Методы построения моделей отверждения цилиндрического изделия, изложенные выше, используется и при моделировании объемного и фронтального отверждения сферического изделия [3, 4, 7].

2.3. Объёмное отверждение при ненулевой критической глубине конверсии

В рассмотренной модели объемного отверждения цилиндрического изделия критическая глубина конверсии α^* предполагалась равной нулю — напряжение рассчитывалось при малых глубинах структурирования (полимеризации и кристаллизации) материала. В случае значительного градиента конверсионного поля в образце формируется четко выраженная граница между еще жидкой частью материала и уже твердой — возникает давление со стороны жидкого слоя на образовавшийся

твердый слой. Разумно считать в этом случае критическую глубину конверсии отличной от нуля, т.е. такой, при которой материал начинает "чувствовать" напряжения: $\alpha^* \cong 0.5 \div 0.8$.

Рассмотрим модель объемного отверждения цилиндрического изделия с учетом граничных условий между сосуществующими твердой и жидкой фазами (при ненулевой критической глубине конверсии материала). Указанная модель впервые публикуется в данной работе.

На рис. 1 представлен объемный режим, переходящий во фронтальный, при котором формируются два фронта реакции: из центральной части к внутренней и внешней граничным поверхностям. В этом случае напряженное состояние формируемого изделия предлагается рассматривать с точки зрения непрерывно наращиваемого твердого тела при граничных условиях на границах фронтов $r = r_1^*(t)$ и $r = r_2^*(t)$:

$$\dot{\sigma}_{rr}(r_1^*(t)) = -\dot{p}_1(t), \quad \dot{\sigma}_{rr}(r_2^*(t)) = -\dot{p}_2(t), \quad (12)$$

где $p_1(t)$; $p_2(t)$ – давления на соответствующих границах, для определения которых воспользуемся условием несжимаемости материала: изменение давления Δp_i ($i = 1, 2$) жидкости в точке $r_i^*(t)$ – границе твердого слоя в момент времени t определяется соотношением

$$(1 - \nu) \Delta p_i / E + (\varepsilon^T + \varepsilon^{ch}) = 0, \quad i = 1, 2.$$

Тогда давление на границах фронтов вычисляется по формуле

$$p_i(r_i^*(t)) = p_i(r_i^* - \Delta r) + \Delta p_i(r_i^*(t)), \quad i = 1, 2.$$

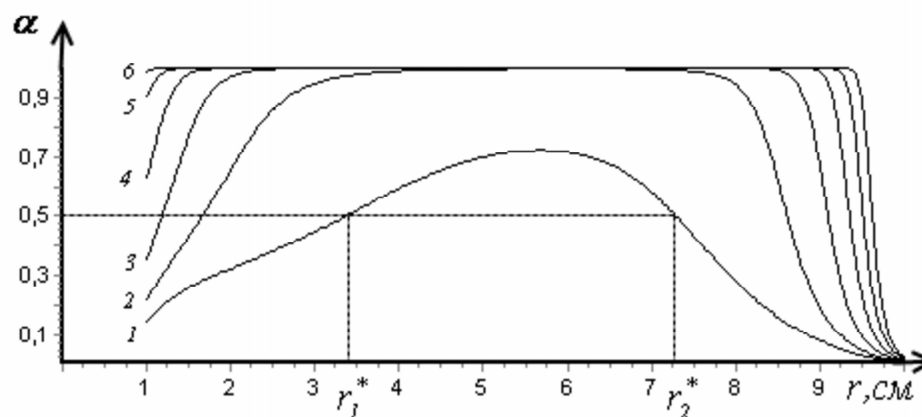


Рис. 1. Динамика степени полимеризации
 $\alpha = \alpha(r, t)$, $t(c)$: 1(1351), 2(1651), 3(1981), 4(2312), 5(2642), 6(2972); $\alpha^* = 0.5$

Для определения компонент напряжения воспользуемся методом, аналогичным фронтальному режиму (10), при выполнении граничных условий (12). Тогда получим выражения для производных радиальной и окружной компонент напряжения в произвольной точке r твердого слоя $[r_1^*(t), r_2^*(t)]$ в момент времени t следующего вида:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{rr}(r, t) = & -\dot{p}_2(t) \frac{r_2^{*2}(r^2 - r_1^{*2})}{r^2(r_2^{*2} - r_1^{*2})} + \frac{r_1^{*2}(r^2 - r_2^{*2})}{r^2(r_2^{*2} - r_1^{*2})} \times \\ & \times \left(\dot{p}_1(t) - \int_{r_1^*}^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right) - \\ & - \int_r^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{\varphi\varphi}(r, t) = & -\dot{p}_2(t) \frac{r_2^{*2}(r^2 + r_1^{*2})}{r^2(r_2^{*2} - r_1^{*2})} + \frac{r_1^{*2}(r_2^{*2} + r^2)}{r^2(r_2^{*2} - r_1^{*2})} \times \\ & \times \left(\dot{p}_1(t) - \int_{r_1^*}^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right) - \\ & - \int_r^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr + \frac{1}{r^2} \int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) r^2 dr. \end{aligned} \quad (14)$$

Формулы (13), (14) применяются при условии, что $r_1^* < r_2^*$ в противном случае $p_1 = p_2 = 0$ — фронт отсутствует.

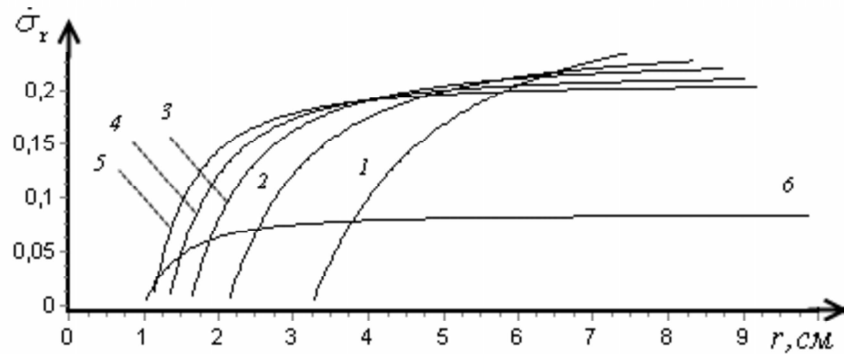


Рис. 2. Пространственно-временное распределение производной радиального напряжения $\dot{\sigma}_{rr} = \dot{\sigma}_{rr}(r, t)$; условия на рис. 1

В настоящее время по данной модели проводится численный эксперимент (выполняется дипломная работа Жаковой Е.А.), некоторые результаты которого представлены в данной работе. На рис. 2, 3 показано изменение производных радиальной $\dot{\sigma}_{rr}(r, t)$ и окружной $\dot{\sigma}_{\varphi\varphi}(r, t)$ компонент напряжения при распространении фронта реакции от центральной области к граничным поверхностям.

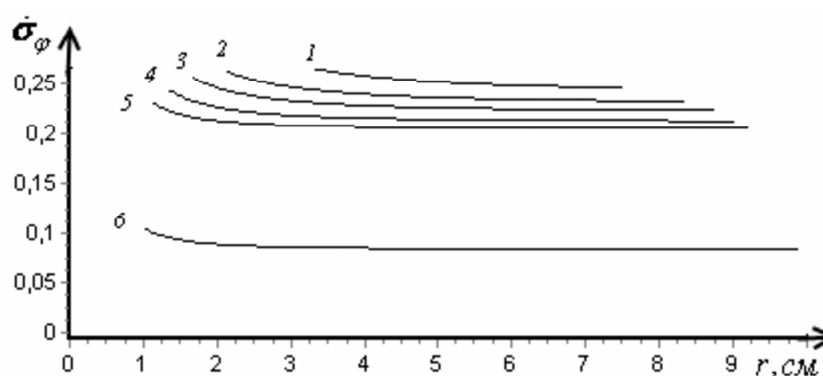


Рис. 3. Пространственно-временное распределение производной окружного напряжения $\dot{\sigma}_{\varphi\varphi} = \dot{\sigma}_{\varphi\varphi}(r, t)$; условия на рис. 1

Представленные выше математические модели формирования осесимметричных изделий методом отверждения позволяют описывать и анализировать различные условия проведения процесса получения изделия, а, следовательно, позволяют решать проблемы регулирования уровня внутренних напряжений формируемых изделий с целью снижения их неблагоприятного воздействия на прочность и надежность получаемых изделий.

3. Структурные математические модели твердофазной экструзии

Традиционные методы переработки композиционных материалов в изделия включают в себя весьма длительные стадии нагрева, охлаждения и фазовых превращений материала в форме, которые в основном определяют общую производительность и энергоемкость технологического процесса. Твердофазная технология получения и обработки композиционных материалов лишена указанных недостатков и поэтому относится к современным энергосберегающим технологиям. Направление исследований, связанное с математическим моделированием процесса твердофазной экструзии мало разработано: общие закономерности про-

цесса твердофазной экструзии полимерных материалов мало изучены, хотя эта проблема весьма важна при разработке эффективных методов получения длинномерных изделий. Для теории твердофазной экструзии важную роль играет учет реологических факторов, так как в нашем рассмотрении объектом деформирования является сжимаемый структурированный полимерный материал. Таким образом, особенностью моделирования этого процесса является необходимость учета вязкоупругого течения материала, динамики структурообразования и технологических условий протекания процесса. Актуальным в настоящее время является совершенствование технологического процесса твердофазной экструзии и оборудования обработки композиционных материалов с использованием метода математического моделирования.

В работах [3, 4, 11–25] представлены структурные математические модели твердофазной плунжерной экструзии вязкоупругого композитного материала.

3.1. Изотермические модели экструзии

Рассмотрим процесс выдавливания вязко-упругого композитного сжимаемого порошкового материала из цилиндрической камеры в направляющий калибр под действием плунжера пресса. Начало координат $z = 0$ свяжем с центром отверстия основания камеры. Вся область течения разделяется на два отдельных участка: движение внутри камеры между перемещающимся поршнем $z = H(t)$ и выходным отверстием и течение внутри калибра между (входным отверстием в калибр) и свободной поверхностью $z = -L(t)$, t — время. Возмущениями в обеих областях при переходе из камеры в отверстие пренебрегаем. Движение смеси в каждой из областей считаем одномерным с одной ненулевой компонентой скорости $V_z = V$.

Из обобщенной модели Максвелла следует, что в условиях принятого одномерного течения тензор напряжения имеет одну ненулевую компоненту σ_z . В силу малости числа Рейнольдса — вязкость несжимаемой основы материала велика — уравнения движения можно заменить условиями равновесия [3]. Это условие, теоретически обоснованное, проверено и численно на основании математических моделей, представленных в работах [11, 12], в которых вместо уравнения равновесия использовалось уравнение движения Навье-Стокса, причем в работе [11] дифференциальное уравнение состояния выписывалось на основе обобщенной модели Ньютона, при которой тензор напряжений имеет три компоненты напряжений: $\sigma_r, \sigma_\varphi, \sigma_z$. Результаты численных экспериментов полностью подтверждают правомерность замены уравнения движения на

уравнение равновесия.

В рассматриваемой модели течения уравнение равновесия имеет вид $\partial\sigma_z/\partial z = 0$. Следовательно, напряжение в камере не зависит от осевой координаты, а является функцией лишь временной координаты: $\sigma_z \equiv \sigma(t)$. Первоначальная длина заготовки равна H_0 , радиус поперечного сечения r_0 . На дне камеры имеется круглое отверстие радиуса r_1 , через которое происходит выдавливание материала в направляющий цилиндрический калибр того же радиуса. Ось симметрии заготовки примем в качестве оси z , положительное направление которой противоположно направлению движения поршня.

Будем трактовать процесс изменения структуры в ходе деформирования, как деформацию связей молекулярно-кинетических единиц под действием приложенного механического поля интенсивностью σ . Изменение числа межмолекулярных сшивок материала происходит в результате наложения двух процессов: разрушения и образования. По аналогии с задачами химической кинетики суммарную скорость превращения структуры по схеме $A_1 \leftrightarrow A_2$ будем определять по формуле

$$\Phi = -k_1 \exp(p\sigma)a + k_2(1 - a), \quad (15)$$

где $a = a(z, t)$ — степень структурных превращений, $k_1 \exp(p\sigma)$ — коэффициент скорости разрушения структуры (характеризует снижение эффективной энергии активации), $k_2 = const$ — коэффициент скорости накопления числа сшивок.

Введем обобщенные (лагранжевы) координаты (q, t) : лагранжево время совпадает с реальным временем t , массовая координата q имеет смысл относительной массы материала, находящейся между переменным сечением z и свободной поверхностью $z = -L(t)$. Таким образом,

$$q = M/S_0\rho_1 = \int_0^z \rho(\xi, t)d\xi + \frac{S_1}{S_0} \int_{-L(t)}^0 \rho(\xi, t)d\xi.$$

Система уравнений, описывающая движение материала в камере и выдавленного стержня в калибре с использованием лагранжевых координат имеет вид:

$$\dot{\sigma} + \frac{G}{\mu}\sigma = G\frac{\partial V}{\partial q}\rho, \quad \sigma = \sigma(t), \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho^2\frac{\partial V}{\partial q} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + V\rho\frac{\partial a}{\partial q} = D(\rho^2\frac{\partial^2 a}{\partial q^2} + \rho\frac{\partial a}{\partial q}\frac{\partial \rho}{\partial q}) + k_2(1 - a) - k_1a \exp(p\sigma); \quad (17)$$

$$\rho|_{t=0} = \rho_0(q), \quad a|_{t=0} = 0; \quad (18)$$

$$\sigma|_{q=q_0} = \sigma(t) \quad (19)$$

или

$$V|_{q=q_0} = V_0; \quad (20)$$

$$V_+(q^*; t) = -\frac{S_1 k_r |\sigma(t)|^m}{S_0 \rho_1 \rho(q^*; t)}, \quad V_-(q^*; t) = -\frac{k_r |\sigma(t)|^m}{\rho_1 \rho(q^*; t)}; \quad (21)$$

$$\left. \frac{\partial a}{\partial q} \right|_{q=q_0} = \left. \frac{\partial a}{\partial q} \right|_{q=q^*} = 0, \quad (22)$$

$$\sigma|_{q=0} = 0. \quad (23)$$

Первое уравнение (16) — уравнение состояния, следствие обобщенной модели Максвелла. Здесь $\mu = \mu(a) = \mu_0 \exp(ka)$, $G = G(a) = \mu(a)/t_r$ — вязкость и модуль сдвига, соответственно, зависящие от степени структурных превращений a (концентрации межмолекулярных сшивок); μ_0 — вязкость несжимаемой основы; σ — массовая компонента тензора напряжений, $V = V(q, t)$ — скорость течения материала; второе — уравнение равновесия; третье — уравнение неразрывности. Здесь $\rho = \rho(q, t)$ — относительная плотность, плотность всего экструдированного материала определяется произведением $\rho_1 \rho$, где ρ_1 — плотность несжимаемой основы. Уравнение (17) — диффузионно-кинетическое уравнение относительно степени структурных превращений $a = a(q, t)$. Здесь $k_1 \exp(p\sigma)$ — коэффициент скорости разрушения структуры (характеризует снижение эффективной энергии активации), k_2 — коэффициент скорости накопления числа сшивок. Условия (21)-(23) — граничные условия: (21) задает скорость на отверстии в камере и калибре, соответственно; условия (22) — непроникновение вещества через плунжер и отсутствие структурных изменений в калибре; (23) — выдавленный стержень движется в калибре свободно: доуплотнения и структуризации не происходит.

Граничные условия (19) и (20) определяют два вида экструзии и, соответственно, две различные модели экструзии: с условием заданного усилия на плунжере [3, 4, 11, 16, 19–21, 24] и заданной скорости движения плунжера [3, 4, 12–18, 25]. В работе [22] рассмотрен частный случай

модели экструзии с заданной скоростью (19) — модель уплотнения порошкового вязкоупругого структурированного материала.

Каждая из рассмотренных моделей допускает частично аналитическое решение, представленное в указанных работах.

В случае граничного условия (19) определены характерные режимы экструзии и критериальные условия, их разделяющие: выдавливание предельно структурированного и полностью уплотненного материала; переходные режимы структурирования: выдавливание частично структурированного материала и без структурирования; переходные режимы уплотнения: выдавливание частично уплотненного и материала без уплотнения; выдавливание без структурирования и уплотнения, так называемый поршневой режим экструзии или квазистационарный режим, при котором плотность не меняется со временем.

Численные эксперименты, выполненные на основании математической модели с заданной скоростью движения плунжера — граничное условие (20) — показали возможность неустойчивых режимов экструзии, выраженных в колебаниях напряжения и степени структуризации в камере.

3.2. Неизотермическая реодинамика твердофазной экструзии

В данной работе представлена новая неизотермическая структурная модель твердофазной экструзии, численный анализ которой проводится в настоящее время в дипломной работе Прянишниковой Е.А. При построении модели использованы изотермические структурные модели, о которых шла речь выше, а также температурные зависимости в работах по СВС-компактированию уплотняемой композиции [26].

Порошковая композиция, нагретая до высокой температуры $T = T^*$, в течение некоторого времени уплотняется в камере (СВС-компактирование), а затем выдавливается в калибр под действием усилия, заданного на плунжере. В силу принятого условия одномерного течения: $\vec{V} = (0, 0, V_z)$, $V = V_z$ и замены (малость коэффициента Рейнольдса) уравнения движения

$$\rho_1 \cdot \rho \left[\frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial z} \right] = \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}$$

на уравнение равновесия $\partial \sigma_{zz} / \partial z = 0$ — компонента тензора напряжений σ_{zz} является лишь функцией времени.

При построении модели использовалась зависимость между тензором напряжений и тензором скоростей деформации — дифференциальное уравнение состояния — в форме обобщенного закона Ньютона для

изотропной жидкости [11].

$$\frac{\partial T^1}{\partial t} + V\rho \frac{\partial T^1}{\partial q} = \frac{1}{c\rho_1} \cdot \frac{\partial}{\partial q} \left(\rho\lambda(\rho) \frac{\partial T^1}{\partial q} \right) - \frac{2\alpha}{c\rho_1\rho r_0} (T^1 - T_0); \quad (24)$$

$$\frac{\partial T^2}{\partial t} + V\rho \frac{\partial T^2}{\partial q} = \frac{1}{c\rho_1} \rho\lambda(\rho) \frac{\partial^2 T^2}{\partial^2 q} - \frac{2\alpha}{c\rho_1\rho r_1} (T^2 - T_0); \quad (25)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho^2 \frac{\partial V}{\partial q} = 0; \quad (26)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + V\rho \frac{\partial a}{\partial q} = D \left(\rho^2 \frac{\partial^2 a}{\partial q^2} + \rho \frac{\partial a}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) + k_2 [1 - a - a\chi \exp(p\sigma)]; \quad (27)$$

$$\sigma_{zz} = \sigma(t); \quad (28)$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = \left(\xi - \frac{2}{3}\mu \right) \rho \frac{\partial V}{\partial q}, \quad \sigma_{zz} = \left(\xi + \frac{4}{3}\mu \right) \rho \frac{\partial V}{\partial q}; \quad (29)$$

начальные и граничные условия:

$$T(q, 0) = T^*; \quad (30)$$

$$\sigma_{zz} \Big|_{t=0} = \sigma(0), \quad \rho \Big|_{t=0} = \rho_0(q), \quad a \Big|_{t=0} = 0; \quad (31)$$

$$\rho\lambda(\rho) \frac{\partial T^1}{\partial q} \Big|_{q=q_0} = -h_1 (T^1 - T_0) \Big|_{q=q_0}; \quad (32)$$

$$\rho\lambda(\rho) \frac{\partial T^2}{\partial q} \Big|_{q=0} = h_2 (T^2 - T_0) \Big|_{q=0};$$

$$T^1 \Big|_{q=q^*} = T^2 \Big|_{q=q^*}, \quad -\rho\lambda(\rho) \frac{\partial T^2}{\partial q} \Big|_{q=q^*} = \frac{S_0}{S_1} \rho\lambda(\rho) \frac{\partial T^1}{\partial q} \Big|_{q=q^*}; \quad (33)$$

$$V(q_+, t) = -\frac{S_1 k_1 |\sigma_{zz}(t)|^m}{S_0 \rho_1 \rho(q^*, t)}, \quad V(q_-, t) = -\frac{k_1 |\sigma_{zz}(t)|^m}{\rho_1 \rho(q^*, t)}; \quad (34)$$

$$\left. \frac{\partial a}{\partial q} \right|_{q=q_0} = \left. \frac{\partial a}{\partial q} \right|_{q=q^*} = 0, \left. \sigma \right|_{q=q_0} = \sigma(t). \quad (35)$$

Соотношения (24) и (25) — уравнения теплопроводности в камере и калибре, соответственно. $T^i = T^i(q, t)$ — температура: $i = 1$ — в камере, $i = 2$ — в калибре; $\lambda = \lambda(\rho) = \lambda_0 \rho / \rho_0$ — коэффициент теплопроводности, λ_0 — коэффициент теплопроводности в неуплотненном состоянии; c — удельная теплоемкость материала. Последние слагаемые в этих уравнениях отвечают за теплообмен с окружающей средой через боковые поверхности, T_0 — температура окружающей среды, α — коэффициент теплообмена. Соотношения: (26) — уравнение неразрывности, (27) — диффузионно-кинетическое уравнение; (29) — выражения для компонент тензора напряжений вследствие обобщенной модели Ньютона, причем $\mu = \mu(\rho, a, T)$ — сдвиговая вязкость, $\xi = \xi(\rho, a, T)$ — объемная.

Условия (30) и (31) характеризуют начальную температуру материала, напряжение на плунжере, распределение плотности ρ и степени структуризации a в камере. Условия теплообмена (33): определяют теплообмен на плунжере и свободном конце выдавленного в калибр стержня с коэффициентами теплообмена h_1, h_2 , соответственно; первое соотношение (33) означает непрерывность температурного поля, второе — равенство тепловых потоков на отверстии в камере и калибре; (34) — скорость на отверстии в камере и калибре, соответственно, вследствие закона сопротивления отверстия.

Для численного решения задачи была разработана программа в среде *Delphi 7*. Приведем некоторые результаты численного анализа представленной выше модели.

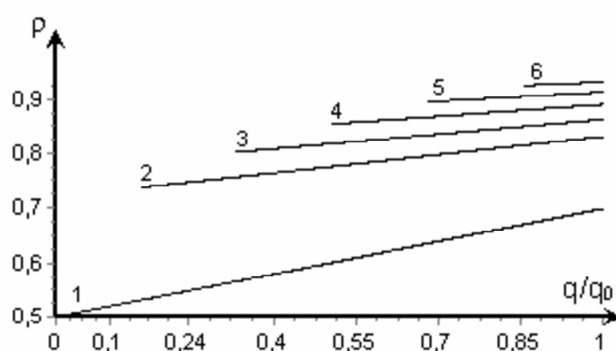


Рис. 4. Массово-временное изменение плотности $\rho = \rho(q, t)$ в камере; $t(c)$: 1(0), 2(23), 3(34), 4(45), 5(57), 6(70)

Динамика плотности в камере (Рис. 4) показывает уплотнение материала и постепенное ее выравнивание от отверстия к плунжеру. Таким образом, плотность выдавливаемых в калибр масс увеличивается. Массы, прилежащие к плунжеру, выдавливаются полностью уплотненными.

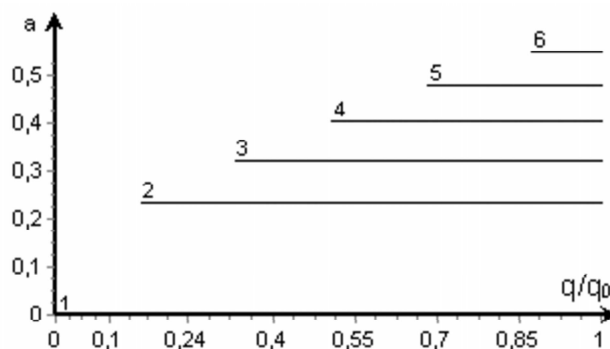


Рис. 5. Динамика степени структуризации в камере $a = a(q, t)$ в камере; условия на рис. 4

Массово-временное распределение степени структуризации (Рис. 5) демонстрирует ее однородность по массовой координате. Этот факт наблюдался и анализировался в выше описанных математических моделях [19, 21, 23].

Начальная температура композиции в камере $T^0 = 2000^\circ K$ – расплавленный материал уплотняется в камере в течение $10 \div 15(c)$ а затем экструдировается в калибр.

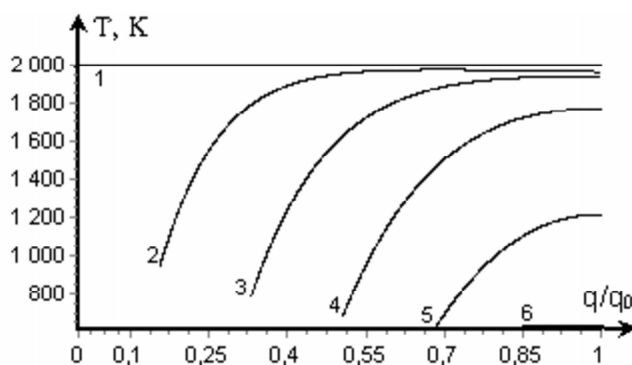


Рис. 6. Массово-временное изменение температуры в камере $T = T(q, t)$ в камере; условия на рис. 4

Как видно из поведения температурных кривых (Рис. 6), вследствие теплообмена через плунжер, боковую поверхность камеры, температура

понижается вблизи плунжера и значительно понижается вблизи отверстия, вследствие выдавливания. Выдавленный в калибр стержень имеет значительно более низкую температуру (Рис. 6).

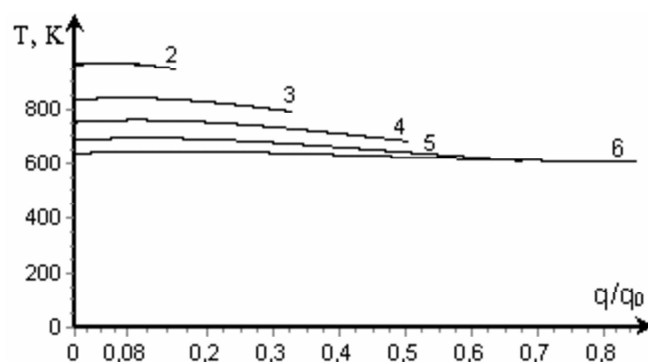


Рис. 7. Массово-временное изменение температуры в калибре $T = T(q, t)$ в калибре; условия на рис. 4

4. Течение структурированной жидкости

Для структурированных текучих систем характерным являются процессы самоорганизации (автоколебания, автоволны, диссипативные структуры), причиной которых являются структурные изменения в таких системах. В работах [3, 4, 8, 27–31] продолжены исследования течений структурированной жидкости и явлений самоорганизации, начатые в работах Худяева С.И., Столина А.М. и др. [32, 33].

Простейшая математическая модель структурированной жидкости, состоящая из двух структурных единиц, взаимосвязанно рассматривает течение и их взаимное превращение.

Предположим, что жидкость является смесью двух компонент A_1 и A_2 , взаимно превращающихся друг в друга $A_1 \leftrightarrow A_2$ под действием приложенного механического поля, характеризуемого напряжением сдвига σ и скоростью деформации γ .

Жидкость подчиняется реологическому уравнению состояния

$$\sigma = \mu\gamma.$$

Здесь вязкость μ зависит от степени структурных превращений $a = a(\gamma)$ составляющих компонент жидкости:

$$\mu^{-1}(a) = \mu_1^{-1}a + \mu_2^{-1}(1 - a),$$

где μ_1, μ_2 — вязкости компонент A_1, A_2 , соответственно, a — доля A_1 в смеси A_1 и A_2 .

Суммарная скорость превращения структур, по аналогии с химическими реакциями первого порядка, определяется формулой:

$$\Phi = k_2(1 - a) - k_1a, \quad (36)$$

где k_1, k_2 — коэффициенты скоростей разрушения и восстановления структуры.

Для случая куэттовского течения жидкости в плоском зазоре между двумя плоскостями [27–29], одна из которых движется, а другая неподвижна, система уравнений, описывающая течение и взаимное превращение структурных единиц, имеет вид

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial \xi} \right), \quad (37)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D \frac{\partial^2 a}{\partial \xi^2} + \Phi \left(a, \frac{\partial u}{\partial \xi} \right), \quad (38)$$

$$\frac{\partial a}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = \frac{\partial a}{\partial \xi} \Big|_{\xi=h} = 0, \quad (39)$$

$$u \Big|_{\xi=0} = 0; \quad u \Big|_{\xi=h} = u_0. \quad (40)$$

Здесь u — скорость течения жидкости, $\partial u / \partial \xi = \gamma$ — скорость деформации, ρ — плотность, функция $\Phi = \Phi(\xi, t)$ в (36), (38) имеет вид

$$\Phi = k_2 \left[1 - a - a \frac{k_0}{k_2} \exp(p\mu(a)\gamma + q\gamma^2) \right]$$

Исследование однородных стационарных состояний системы (37)–(40), то есть решений вида:

$$a = const, \quad \frac{\partial u}{\partial \xi} = \gamma = const$$

в области немонотонности реологической кривой течения — области "сверханомалии вязкости" — являлось задачей выше указанных работ. Именно в этих областях имеют место процессы самоорганизации: происходит потеря устойчивости однородных стационарных состояний и формирование устойчивых пространственно-неоднородных стационарных состояний — диссипативных структур.

Численный анализ безразмерной системы (37)–(40) течения псевдопластической жидкости позволил определить значения параметров, соответствующих области немонотонности реологической кривой течения, показал возникновение указанной области диссипативной структуры, график которой представляет монотонно убывающую или монотонно возрастающую зависимость $a = a(\xi)$, которая удовлетворяет стабилизирующему соотношению [3, 27]. Для дилатантной жидкости рассматривалось течение с заменой второго граничного условия в (40) на условие заданной скорости деформации. Показано установление диссипативной структуры с резонансным поведением.

В работах [29, 30] представлена модель напорного течения структурированной жидкости в полосе между двумя неподвижными плоскостями, [29, 31] – модель куэттовского течения между двумя коаксиальными цилиндрами; численно анализируются стационарные течения, определяются области сверханомалии вязкости. Представляется целесообразным продолжение исследований данных течений на основе разработанных моделей по вопросам самоорганизации.

Литература

1. **Bartczak Z.** Deformation of high-density polyethylene produced by rolling with side constraints. I. Orientation behavior // J. Appl. Polym. Sci. 2002. V. 86. P. 1396–1404.
2. **Ошмян В. Г., Патлажан С. А., Remond Y.** Принципы структурно-механического моделирования полимеров и композитов // Высокомолек. соед., Серия А, 2006. Т. 48. № 9. С. 1–12.
3. **Беляева Н. А.** Математические модели деформируемых структурированных материалов. Монография. Сыктывкар: Изд-во СыктГУ, 2008. 116 с.
4. **Беляева Н. А.** Математическое моделирование деформирования вязкоупругих структурированных полимерных (композитных) систем. Автореферат дисс. на соискание ученой степени д.ф.-м.н. Черноголовка, ИПО СыктГУ. 2008. 32 с.
5. **Беляева Н. А., Клычников Л. В., Давтян С. П., Худяев С. И.** Напряженное состояние при формировании цилиндрических

- изделий в ходе параллельного протекания полимеризации и кристаллизации // *Механика композитных материалов*. 1991. № 6. С. 1091–1099.
6. **Беляева Н.А., Осипова В.В.** Формирование цилиндрического изделия в ходе объемного отверждения // Федеральное агентство по образованию. ОФАП. Свид. об отрасл. регистрации разработки. № 7944. 30.03. 2007.
 7. **Беляева Н.А.** Вязкоупругая модель отверждения композитного изделия // *Труды XXXVI Уральского семинара "Механика и процессы управления"*. Екатеринбург, 2006. Т. 1. С. 228–235.
 8. **Беляева Н.А.** Структуризация в процессах деформирования вязкоупругих систем // *Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки*. Ижевск: Удмуртский госуниверситет. 2008. Вып. 2. С. 178–179.
 9. **Беляева Н.А.** Структурные модели процессов деформирования вязкоупругих материалов // *Вестник Сыктывкарского университета. Сер 1*. Вып. 8. 2008. С. 55–68.
 10. **Беляева Н.А.** Формирование цилиндрического изделия с учетом давления перед фронтом отверждения // *Труды шестой Всероссийской конференции с международным участием "Математическое моделирование и краевые задачи"*, 1-4 июня 2009 г. Самара: Самарский государственный технический университет. 2009. Часть 1. С. 47–50.
 11. **Беляева Н.А., Никонова Н.Н.** Структурная модель экструзии с использованием обобщенной модели Ньютона // *Вестн. Сыктывкарского ун-та. Сер.1: математ., мех., информ.* Вып.10. 2009. С. 83–90.
 12. **Беляева Н.А., Спиридонов А.В.** Уравнение движения в одномерной модели экструзии // *Вестн. Сыктывкарского ун-та. Сер.1: математ., мех., информ.* Вып.10. 2009. С. 91–96.
 13. **Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С.** Кинетика уплотнения и структуризации в твердофазной экструзии вязкоупругой среды // *Инженерная физика*. 2007. № 5. С. 34–41.
 14. **Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С.** Влияние структуризации на процесс твердофазной экструзии вязкоупругого материала // *Материалы Международной конференции "XVIII сессия*

Международной школы по моделям механики сплошной среды". Саратов: Изд-во Саратовского госуниверситета, 2008. С. 53–56.

15. **Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С.** Неустойчивые режимы деформирования при твердофазной экструзии вязкоупругих структурированных систем // ДАН. 2008. Т.420. № 6. С. 1–4.
16. **Belyaeva N. A., Stolin A. M., Stelmakh L.S.** Dynamic of Solid-State Extrusion of Viscoelastic Cross-Linked polymeric Materials // Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 2008. Vol. 42. № 5. P. 549–556.
17. **Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С.** Влияние структуризации на процесс твердофазной экструзии вязкоупругого материала // Материалы Международной конференции. XVIII сессия Международной школы по моделям механики сплошной среды. Саратов: Саратовский госуниверситет. 2007. С. 55–58.
18. **Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С.** Неустойчивость в твердофазной экструзии вязкоупругого структурированного материала // Труды пятой Всероссийской научной конференции с международным участием. Математическое моделирование и краевые задачи. 29-31 мая 2008 г. Самара: Самарский технический университет. Ч. 1. С. 56–58.
19. **Беляева Н.А.** Характерные времена в структурной модели твердофазной экструзии // Материалы XVI Зимней школы по механике сплошных сред. Пермь. 2009.
20. **Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С.** Режимы твердофазной экструзии вязкоупругих структурированных систем // Инженерная физика. 2009. № 1. С. 10–16.
21. **Беляева Н.А.** Влияние характерных времен на режимы твердофазной экструзии // Вестник Сыктывкарского университета. Сер 1. Вып. 9. 2009. С. 46–53.
22. **Беляева Н.А., Осипова В.В.** Структурная модель уплотнения вязкоупругого композитного материала // Вестник Сыктывкарского университета. Сер 1. Вып. 9. 2009. С. 84–89.

23. **Беляева Н.А.** Математическое моделирование твердофазной плунжерной экструзии вязкоупругих структурированных композитных систем // Труды Международной научно-технической конференции "Современные металлические материалы и технологии"(СММТ'2009), 24-26 июня 2009 г. Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического университета. 2009. С. 33–42.
24. **Беляева Н.А., Смолев Л.В.** Экструзия с заданным усилием на плунжере пресса // Федеральное агентство по образованию. ОФАП. Свид. об отрасл. регистрации разработки № 7945. 30.03 2007.
25. **Беляева Н.А.** Твердофазная экструзия с условием постоянства скорости плунжера пресса // Федеральное агентство по образованию. ОФАП. Свид. об отрасл. регистрации разработки № 7946. 30.03 2007.
26. **Стельмах Л.С., Жилыева Н.Н., Столин А.М.** О неизотермической реодинамике при СВС-прессовании порошковых материалов // ИФЖ, 1992. Т. 61. № 1. С. 33–39.
27. **Беляева Н.А.** Неоднородное течение структурированной жидкости // Математическое моделирование. 2006. Т.18. № 6. С. 3–14.
28. **Беляева Н.А.** Самоорганизация куэттовского течения структурированной жидкости // Материалы III Международной летней научной школы. Кемерово, Россия. 22-28 июня 2006 г. С. 321–326.
29. **Беляева Н.А.** Пространственно неоднородные течения структурированной жидкости в плоском зазоре // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела: Тр. научн. школы акад. В.В. Новожилова. СПб.: СПбГУ, 2004. Вып.8. С. 174–190.
30. **Беляева Н.А., Вербовик А.Н.** Напорное течение структурированной жидкости // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела: Тр. научн. школы акад. В.В. Новожилова. СПб.: СПбГУ, 2005. Вып.8. С. 151–156.
31. **Беляева Н.А., Размыслов Р.Ю.** Сдвиговое течение структурированной жидкости // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела: Тр. научн. школы акад. В.В. Новожилова. СПб.: СПбГУ, 2005. Вып.8. С. 186–193.

32. Столин А.М., Худяев С.И. Образование пространственно-неоднородных состояний структурированной жидкости в области сверханомалии вязкости // Докл. АН СССР.1981. Т.260. № 5. С. 1180–1184.
33. Худяев С.И., Ушаковский О.В. Пространственная неоднородность и автоколебания при течении структурированной жидкости // Матем. моделирование. 2002. Т.14. № 7. С. 53–73.

Summary

Belyaeva N.A. Deformation of viscoelastic materials with changing structure

Deformation processes of materials with changeable structure is presented. Worked out mathematical models are including wide field of objects beginning with systems-powder to polymer and composite materials. This models give a chance to define deformation, temperature and structure characteristics during hardening, solid state extrusion and non-Newtonian flow.

Сыктывкарский университет

Поступила 17.04.2010