

УДК 541.64:532.5

РОТАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМ ТЕЧЕНИЯ ЖИДКИХ ПЛОТНЫХ СИСТЕМ ГЛАДКИХ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

© 1993 г. Ал. Ал. Берлин*, Л. Ротенбург**, Р. Басэрст***

*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
117977 Москва, ул. Косыгина, 4

**Университет Ватерлоо, Ватерлоо, Канада

***Королевский военный колледж, Кингстон, Канада

Поступила в редакцию 23.11.92 г.

Изучено жидкоподобное течение плотных 2D-систем эллиптических частиц методом компьютерного моделирования. Показано, что жидкоподобное течение в отличие от необратимой (пластической) деформации твердого стеклообразного тела характеризуется низким сдвиговым напряжением течения, т.е. низким макроскопическим коэффициентом трения; постоянством числа контактов; постоянством объема (площади) образца и однородностью локальных деформаций. Сдвиговая деформация этих систем в жидком состоянии определяется поворотами частиц и соответствующим изменением ориентации частиц. Установлена связь между параметрами ориентации частиц и сдвиговой деформацией тела.

ВВЕДЕНИЕ

Большинство молекулярных теорий течения жидкостей [1, 2], в том числе полимерных [3] предполагает, что элементарным актом течения является перескок частицы (сегмента в полимерных системах) в "дырку", т.е. пустоту молекулярного размера, образованную путем флуктуации объема системы. Однако данные молекулярной динамики [4] свидетельствуют об ином механизме, связанном с постепенным перемещением частиц вследствие их многократных колебаний в ячейках, образованных соседями, и непрерывного плавного изменения координат центров, относительно которых эти колебания происходят. Заметим также, что сегменты макромолекул имеют анизотропную форму и могут быть в первом приближении представлены в виде эллипсоидов. Поэтому описанный ниже механизм течения жидких систем твердых эллипсов может в определенной степени моделировать поведение полимерных жидкостей.

В работах [5, 6] мы показали, что гранулированные системы, как и большинство молекулярных тел, могут находиться в твердом (кристаллическом или стеклообразном) и жидком состояниях.

В работах [5, 6] нами методом компьютерного моделирования был выявлен механизм необратимой (пластической) деформации твердого аморфного (неупорядоченного) гранулированного тела: разрывы контактов между частицами под действием сдвиговых напряжений. Кроме того, в этих работах было показано, что при необратимой сдвиговой деформации гранулированного тела в жидком состоянии число контактов и плот-

ность системы практически не изменяются. При этом абсолютное значение числа контактов γ (в расчете на одну частицу) и плотность ρ плоской (2D) системы гладких эллиптических частиц в жидком состоянии оказываются очень большими: $\gamma \cong 5.8$; $\rho \cong 0.9$.

Представляло интерес исследовать механизм течения в таких плотных системах эллиптических частиц, что может иметь и более общее значение как для гранулированных, так и для молекулярных, в том числе полимерных тел.

Использованные нами методы компьютерного моделирования механического поведения плоских (2D) систем упругих эллиптических частиц описаны в работах [7, 8], а также в более ранних работах этих авторов (ссылки в работах [5 - 8]).

Для анализа использовали следующие 2D-системы частиц.

Полидисперсная система случайно ориентированных эллипсов, функция распределения по размерам и изображение системы ~1000 частиц представлены в работах [5, 6].

Совершенный кристалл из дисков (рис. 1, Iв).

Монодисперсная система случайно ориентированных эллипсов, выращенная из совершенного кристалла дисков – изотропный кристалл, изменение системы в процессе постепенного увеличения эксцентриситета эллипсов показана на рис. 1.

Монодисперсная система одинаково ориентированных эллипсов, выращенная из совершенного кристалла дисков – анизотропный кристалл, изменение системы в процессе постепенного увеличения эксцентриситета эллипсов показана на рис. 2; видно самопроизвольное возникновение дефектов кристаллической структуры.

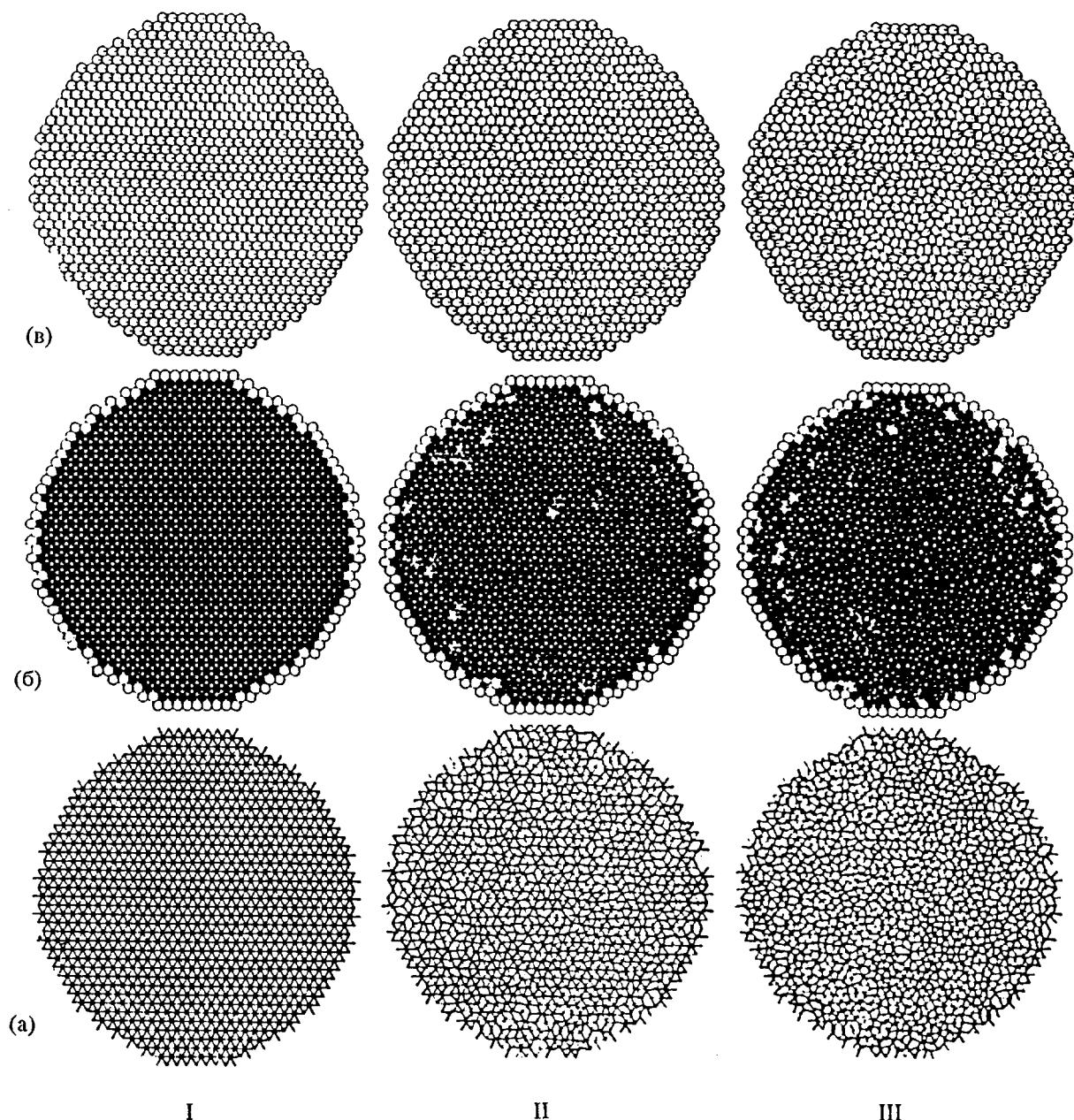


Рис. 1. Системы случайно ориентированных эллипсов, выращиваемые из совершенного кристалла: эксцентрикситет, $e \equiv 0$ (I); 0.107 (II); 0.213 (III); а – пространственное распределение контактных сил между частицами; б – частицы с числом контактов б – черные и <б – светлые; в – ориентация частиц; толщина каждой черточки на рисунке (а) пропорциональна величине контактной силы.

Число контактов во всех этих системах равно $\gamma = 5.8 - b$, что близко к теоретическому значению для статического равновесия бесконечной системы твердых эллиптических частиц ($\gamma = 6$) [5, 6]. Небольшое отличие величины γ от теоретического значения связано с влиянием границы, на которой условия статического равновесия требуют меньшего значения числа контактов. Этот вывод подтверждается пространственным распределением частиц с различным числом контактов (рис. 3).

Все эти системы испытывали при двухосном сжатии ($\sigma_{11} > \sigma_{22} = \text{const}$) по схеме, описанной в работах [5, 6].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Первое, что следует отметить – все исследованные системы, состоящие из гладких эллипсов (отсутствуют тангенциальные силы в контакте, т.е. трение) деформируются на начальных стадиях как жидкые тела: число контактов сохраня-

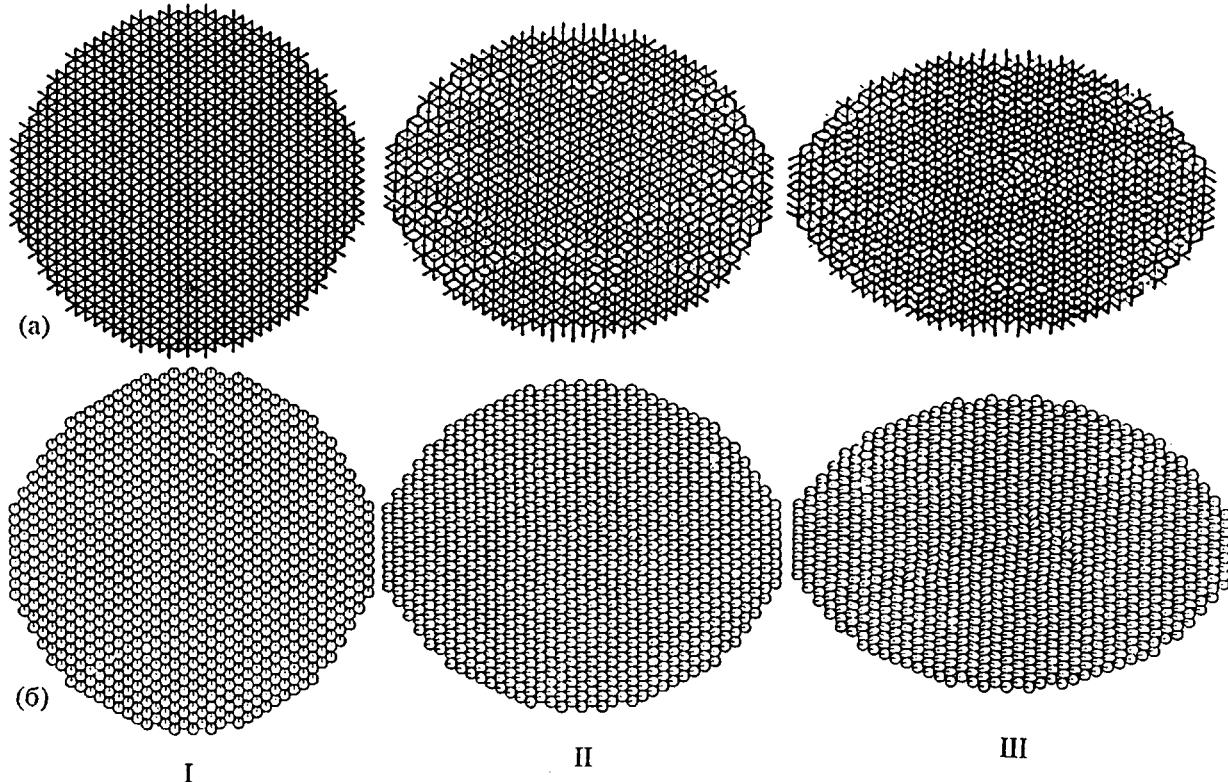


Рис. 2. Системы одинаково ориентированных эллипсов, выращиваемые из совершенного кристалла: эксцентриситет, $e \equiv 0$ (I); 0.107 (II); 0.213 (III); а – пространственное распределение контактных сил между частицами; б – ориентация частиц. Толщина каждой черточки на рисунке (а) пропорциональна величине контактной силы.

ется постоянным (рис. 4 - 6), сдвиговое напряжение невелико и уменьшается при снижении скорости счета, скорости испытания (рис. 5, 6), т.е. при приближении к условиям статического равновесия¹, и мгновенные локальные деформации случайны (рис. 7 - 9) в отличие от пластической деформации твердого тела, когда образуются полосы сдвига [5, 6].

Кроме того, при деформации в жидким состоянии практически не наблюдается изменения объема системы (во всех случаях $|\epsilon_v/\epsilon_t| < 0.04$; например, рис. 4 и 10), в отличие от твердого состояния, в котором при упругой деформации (на начальной стадии) под действием сжимающей нагрузки объем уменьшается и $|\epsilon_v/\epsilon_t| \cong (1-\nu)/(1+\nu) \cong 0.5$ (для 2D системы частиц с центральными силами, коэффициент Пуассона $\nu = 1/3$), а затем при пластической деформации объем увеличивается из-за дилатации [5, 6] с $|\epsilon_v/\epsilon_t| \cong 0.5$.

Далее следует отметить, что в процессе деформации частицы поворачиваются под действием прилагаемой нагрузки [10, 11] и средняя ориентация эллипсов изменяется (рис. 11). Посколь-

ку частицы анизотропны, изменение их средней ориентации приводит к изменению формы тела, т.е. к сдвиговой деформации.

Назовем такой механизм необратимой сдвиговой деформации жидкого тела (т.е. его течения) ротационным.

Далее необходимо понять, какой вклад повороты частиц вносят в суммарную величину сдвиговой деформации. Следующие факты позволяют предположить, что в данном случае ротационный механизм течения является основным.

На рис. 4 приведены результаты деформации системы гладких эллиптических частиц в двух вариантах: первый – обычный, когда все движения частиц разрешены, в том числе, и повороты; второй – с замороженным вращением, все остальные движения частиц разрешены. В первом случае (кривые 1) тело ведет себя как жидкость, а во втором (кривые 2) – как твердое тело²: большое сдвиговое напряжение, разрушение контактов в ходе сдвиговой деформации и изменение объемной деформации как у твердого тела – $|\epsilon_v/\epsilon_t| = 0.5$ на начальной упругой стадии деформации и дила-

¹ Если говорить в терминах, принятых в механике гранулированных систем, то коэффициент трения для твердого состояния равен 0.5 - 0.6, а для жидкого – более чем на порядок ниже (<0.05).

² Этот факт противоречит встречающемуся в литературе утверждению [11] о том, что гранулированные материалы в отсутствие трения между частицами должны всегда вести себя как жидкость.

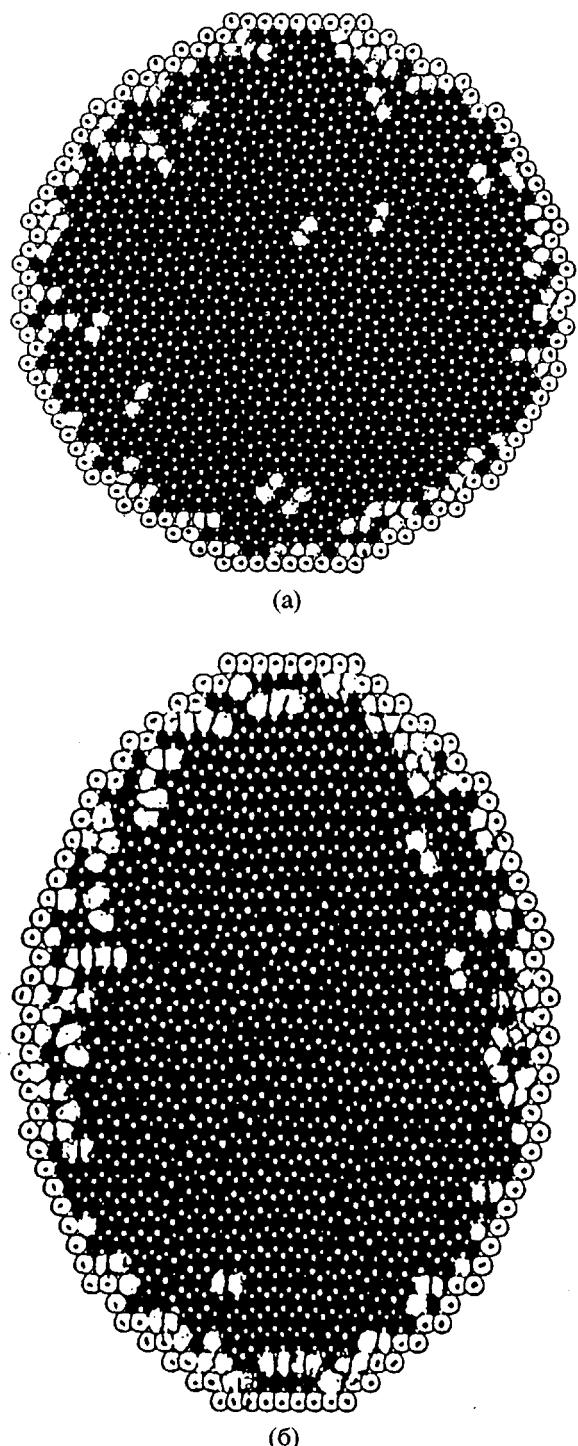


Рис. 3. Пространственное распределение частиц с числом контактов b – черные и $< b$ – белые; изотропный кристалл эллипсов с $e = 0.2$ (а); анизотропный кристалл эллипсов с $e \approx 0.213$ (б).

тация на стадии пластического течения с приблизительно таким же по абсолютной величине значением $|\varepsilon_v/\varepsilon_r| \approx 0.5$.

Как видно из рис. 11 и 12, в процессе течения жидкого изотропного кристалла ориентация эл-

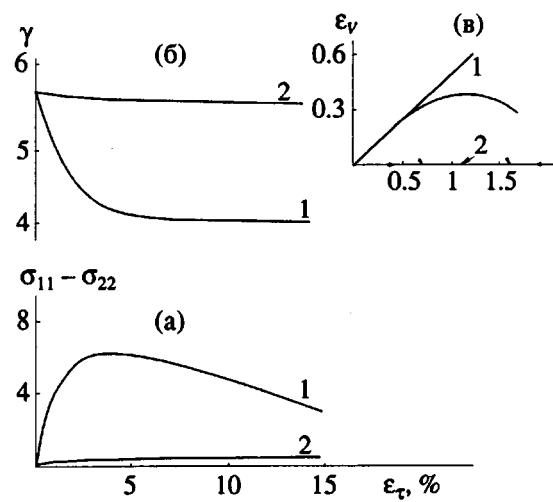


Рис. 4. Двухосное сжатие ($\sigma_{11} > \sigma_{22} = \text{const}$) полидисперсной системы гладких эллипсов ($e = 0.2$) с замороженным (1) и разрешенным (2) вращением частиц; зависимости сдвигового напряжения (а), числа контактов γ (б) и объемной деформации ε_v (в) от сдвиговой деформации ε_r ; $\sigma_{22} = 2.0$ в условных единицах, здесь и далее.

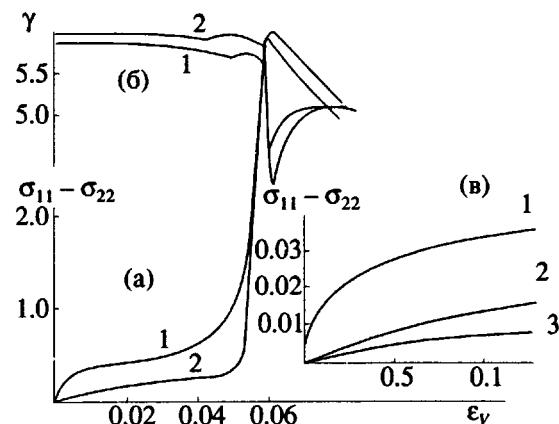


Рис. 5. Двухосное сжатие ($\sigma_{11} > \sigma_{22} = \text{const}$) монодисперсной системы гладких эллипсов с $e \approx 0.027$ (изотропный кристалл); сдвиговое напряжение (а, б) и число контактов γ (в); соотношение скоростей нагружения 1 : 0.1 : 0.01 для кривых 1, 2 и 3.

липов нарастает до тех пор, пока они все не ориентируются в одном направлении – в данном случае перпендикулярно направлению сжатия. До этой деформации наблюдаются все признаки течения жидкости – распределение мгновенных локальных деформаций случайно (рис. 13), сдвиговое напряжение мало, число контактов не меняется, объемная деформация практически отсутствует (рис. 10).

Затем деформация этого тела как жидкости прекращается, резко возрастает сдвиговое напряжение ($\sigma_{11} - \sigma_{22}$), число контактов γ уменьшается

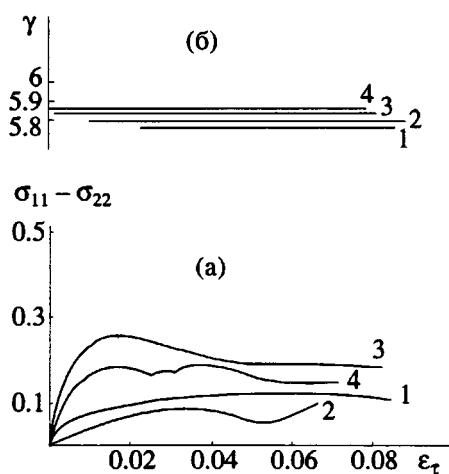


Рис. 6. Двухосное сжатие ($\sigma_{11} > \sigma_{22} = \text{const}$) монодисперсной системы гладких эллипсов с $e \equiv 0.213$; изотропный кристалл (1, 2), анизотропный кристалл (3, 4). Показаны сдвиговое напряжение (а) и число контактов γ (б). Соотношение скоростей погружения 1 : 0.1 для кривых 1, 3 и 2, 4 соответственно.

от 5.8 - 5.9 до ~4, сдвиговая деформация локализуется и образуются полосы сдвига (рис. 13), объемная деформация происходит так, как в кристалле или в твердом стекле (рис. 10в, кривая 1): сна-

чала она отрицательна (при сжатии), затем положительна (дилатация) с большим абсолютным значением отношения $|\epsilon_V/\epsilon_r| \approx 0.5$.

Таким образом, после прекращения вращения частиц механизм необратимой сдвиговой деформации меняется от типичного для жидкости к характерному для твердого тела.

Нами разработана упрощенная теория, связывающая изменение формы тела, т.е. сдвиговую деформацию, с изменением средней ориентации и распределением частиц по ориентации. Теория основана на предположениях о сохранении объема тела, пропорциональности размера тела в любом направлении сумме максимальных размеров частиц в этом направлении и простой статистике ориентаций частиц, полученной введением энтропии

$\pi/2$
пии в виде $S = \int_0^{\pi/2} \rho(\theta) \ln \{\rho(\theta)\} d\theta$. Максими-

зация энтропии при заданных размерах тела (соотношение размеров в главных направлениях) позволяет определить $\rho(\theta)$ и связать средний угол поворота частиц и любой параметр ориентации частиц со сдвиговой деформацией и изменением формы тела (Приложение).

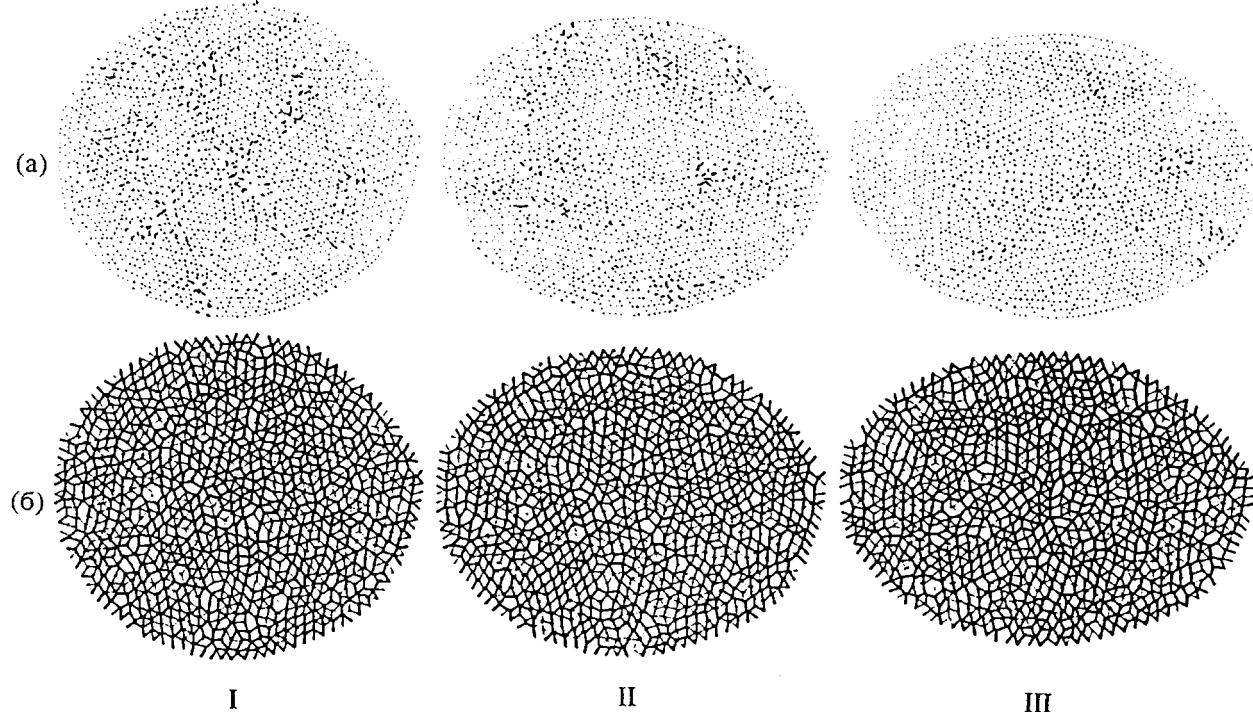


Рис. 7. Пространственное распределение мгновенных локальных деформаций (а) и контактных сил (б) при двухосном сжатии полидисперсной системы гладких эллипсов с $e = 0.2$; длина каждой черточки пропорциональна мгновенной локальной деформации (а); толщина – величине контактной силы (б); средняя сдвиговая деформация $\epsilon_t = 0.05$ (I), 0.10 (II), 0.15 (III).

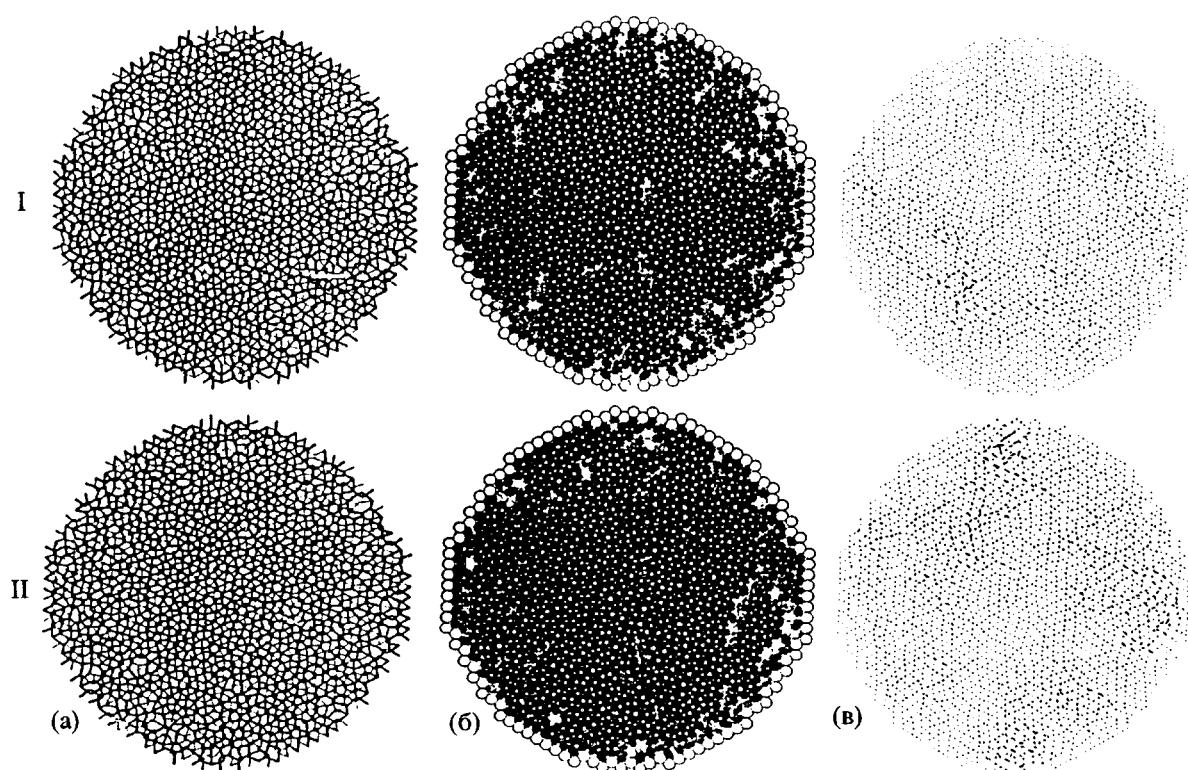


Рис. 8. Пространственное распределение мгновенных локальных деформаций (а), частиц с числом контактов b – черные и $< b$ – светлые (б) и контактных сил (в) при двухосном сжатии изотропного кристалла гладких эллипсов с $e \approx 0.213$; длина каждой черточки пропорциональна мгновенной локальной деформации (а), а толщина – величине контактной силы (в); средняя сдвиговая деформация $\epsilon_t = 0.035$ (I), 0.06 (II).

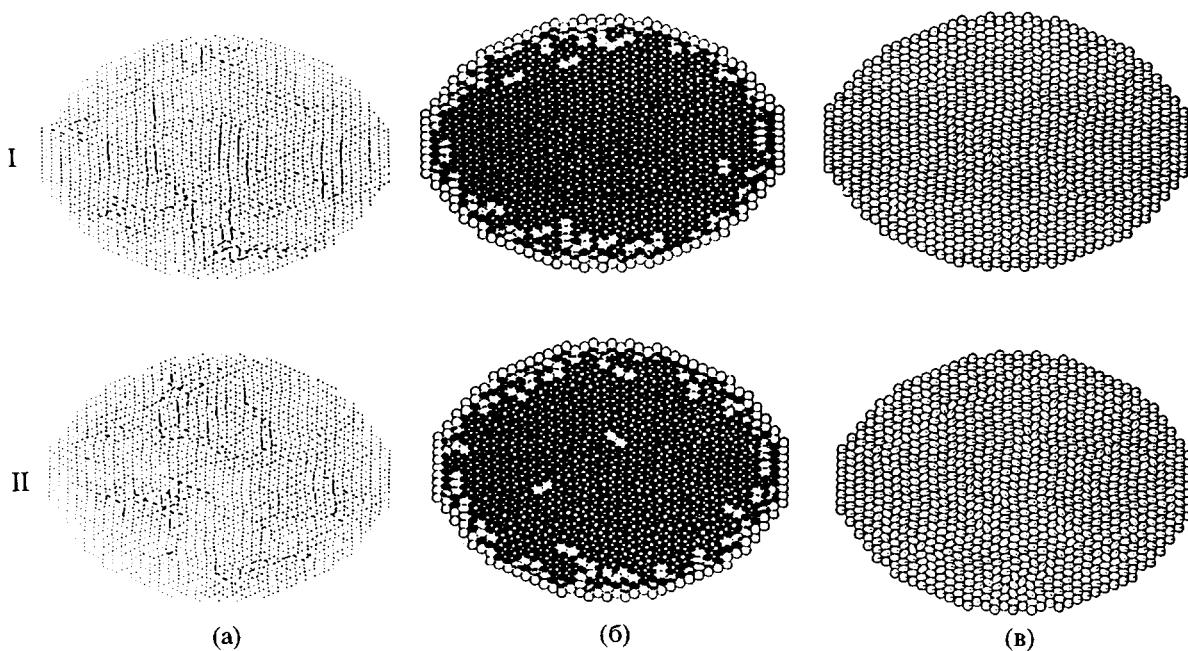


Рис. 9. Пространственное распределение мгновенных локальных деформаций (а), частиц с числом контактов b – черные и $< b$ – светлые (б) и ориентаций эллипсов (в) при двухосном сжатии анизотропного кристалла гладких эллипсов с $e \approx 0.213$; длина каждой черточки на рисунке (а) пропорциональна мгновенной локальной деформации; средняя сдвиговая деформация $\epsilon_t = 0.035$ (I), 0.07 (II).

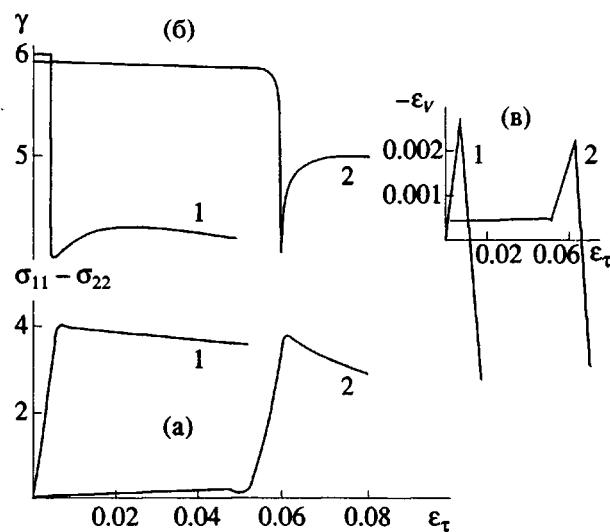


Рис. 10. Двухосное сжатие ($\sigma_{11} > \sigma_{22} = \text{const}$) совершенного кристалла из дисков (1) и монодисперсной системы гладких эллипсов с $e \approx 0.027$ (изотропный кристалл). Показаны сдвиговое напряжение (а), число контактов γ (б) и объемная деформация ϵ_V (в).

Результаты расчета количественно согласуются с данными, полученными компьютерным моделированием (рис. 14).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, основным механизмом сдвиговой деформации в жидким состоянии плотных систем гладких эллипсов является ротационный – вращение частиц. В системах, образованных монодисперсными эллипсами, максимальная величина деформации ограничена полной ориентацией всех эллипсов, после чего происходит кристаллизация системы, тело становится твердым в направлении деформации и дальнейшая необратимая сдвиговая деформация в том же направлении возможна только путем разрывов контактов, как это происходит в твердом гранулированном теле.

Анизотропный кристалл, образованный эллипсами, ориентированными в одном направлении, деформируется почти как жидкость при сжатии вдоль большой оси эллипсов и как твердое тело при сжатии вдоль малой оси.

Изотропный кристалл деформируется как жидкость до полной ориентации эллипсов.

Может быть построен кристалл (рис. 15), способный деформироваться как жидкость в двух направлениях вследствие изменения угла между слоями. Оценка отношения объемной и сдвиговой деформаций показывает, что оно уменьшается с ростом эксцентриситета эллипсов и не превышает $|\epsilon_V/\epsilon_{\tau}| < 0.02$ при $e = 0.2$.

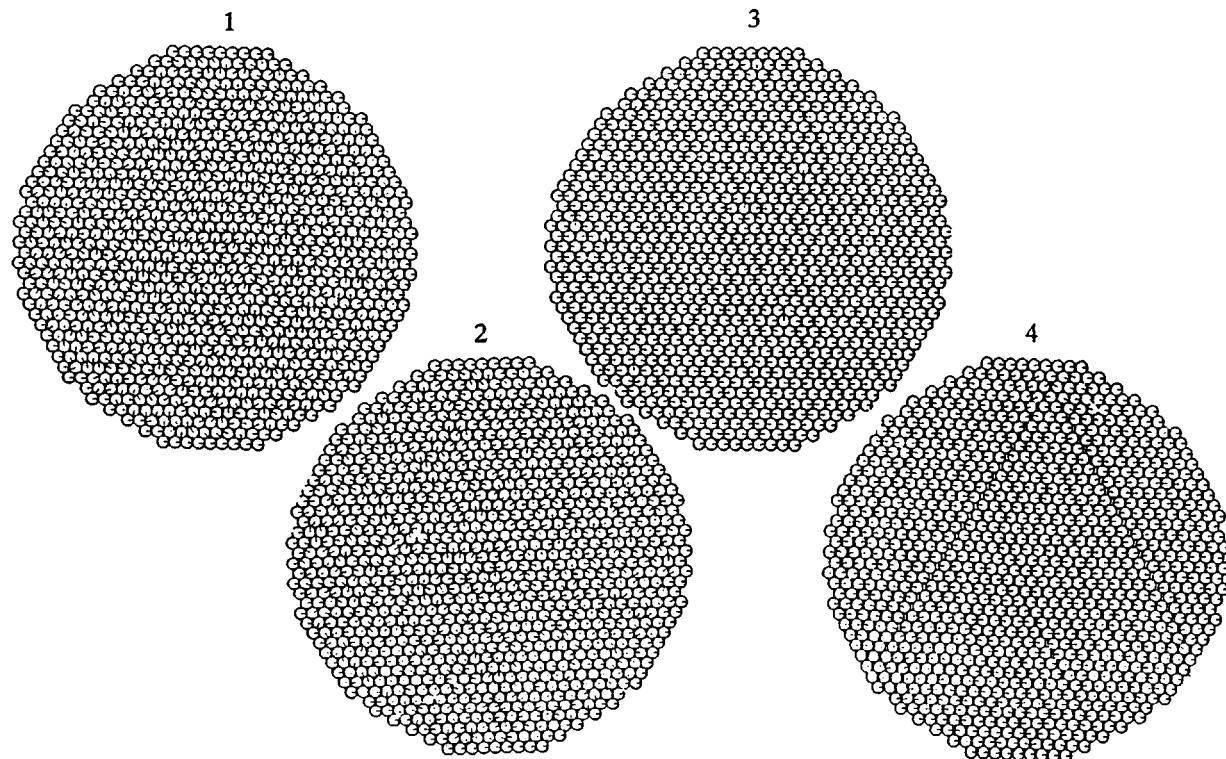


Рис. 11. Изменение ориентаций эллипсов в процессе деформации изотропного кристалла; $e \approx 0.027$; $\epsilon_{\tau} = 0$ (1); 0.02 (2); 0.065 (3); 0.09 (4) (видны полосы сдвига).

Структура такого кристалла, возможно, является наиболее или одной из наиболее устойчивых структур эллиптических частиц на плоскости. Действительно, мы наблюдали образование зародышей подобных структур при выращивании систем эллипсов из систем дисков как для монодисперсных, так и для полидисперсных ансамблей частиц (рис. 16). Размер и упорядоченность таких зародышей возрастает и угол между соседними слоями уменьшается по мере роста величины эксцентриситета эллипсов.

Приложение

Рассмотрим одноосное растяжение–сжатие системы эллиптических частиц одного размера и предположим, что размер тела в направлении растяжение–сжатие пропорционален сумме максимальных размеров эллипсов в этом направлении

$$L \sim \int_0^{\pi/2} l(\theta) \rho(\theta) d\theta,$$

где $l(\theta)$ – въсота эллипса, наклоненного под углом θ к оси нагружения, а $\rho(\theta)$ – функция распределения частиц по ориентации. Если e – эксцен-

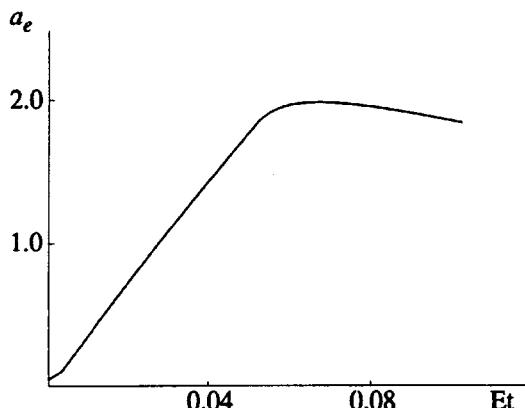


Рис. 12. Изменение коэффициента анизотропии эллипсов в процессе двухосного сжатия изотропного кристалла; $e \approx 0.027$.

триситет, а d – средний диаметр эллипса, то $l(\theta)$ можно записать в виде

$$l(\theta)/d = \sqrt{1 + e^2 + 2e \cos 2\theta}.$$

Учитывая, что объем системы при деформации в жидком состоянии практически не изменяется, можем записать (при $\varepsilon_t \ll 1$):

$$\varepsilon_t/2 = \varepsilon_{11} = -\varepsilon_{22} = (L - L_0)/L_0. \quad (1)$$

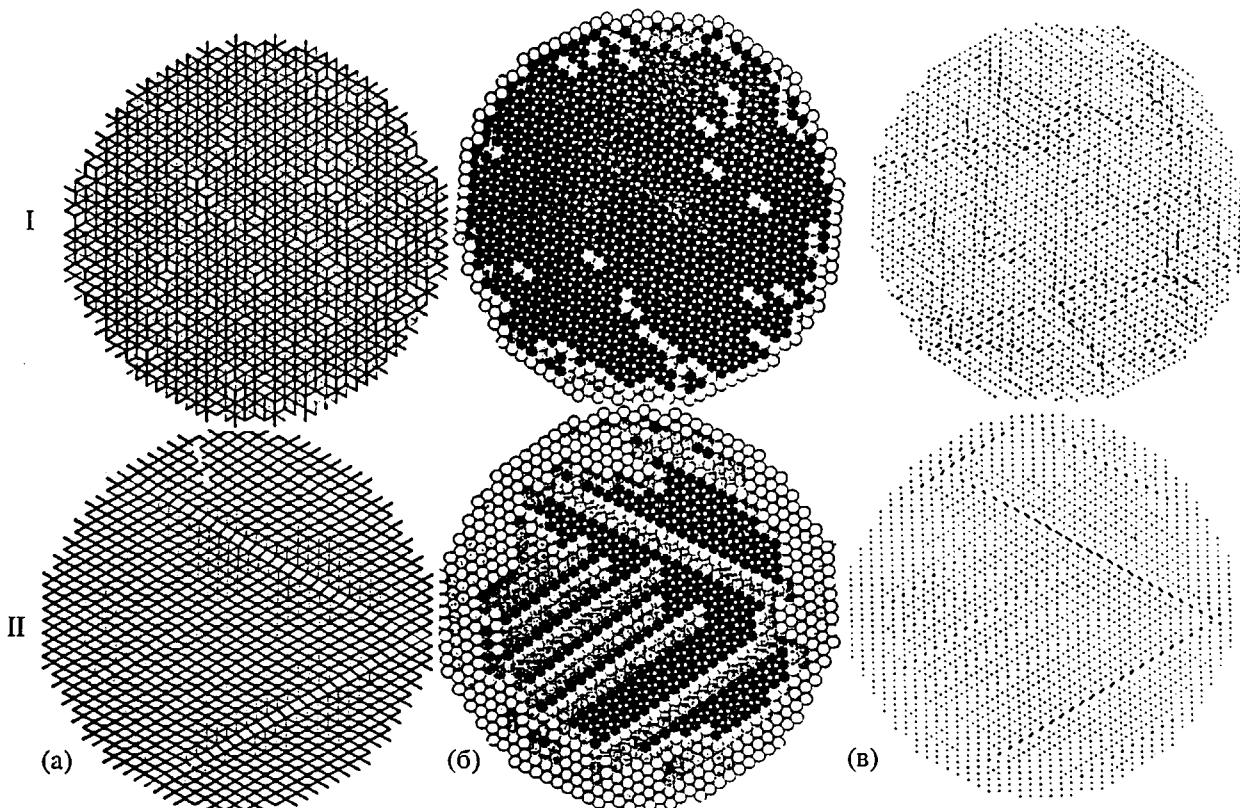


Рис. 13. Двухосное сжатие ($\sigma_{11} > \sigma_{22} = \text{const}$) монодисперсной системы гладких эллипсов с $e \approx 0.027$ (изотропный кристалл) до (I) и после (II) полной ориентации частиц; пространственное распределение мгновенных локальных деформаций (a); частиц с числом контактов b – черные и $< b$ – светлые (б) и контактных сил между частицами (в); $\varepsilon_t = 0.02$ (I) и 0.09 (II).

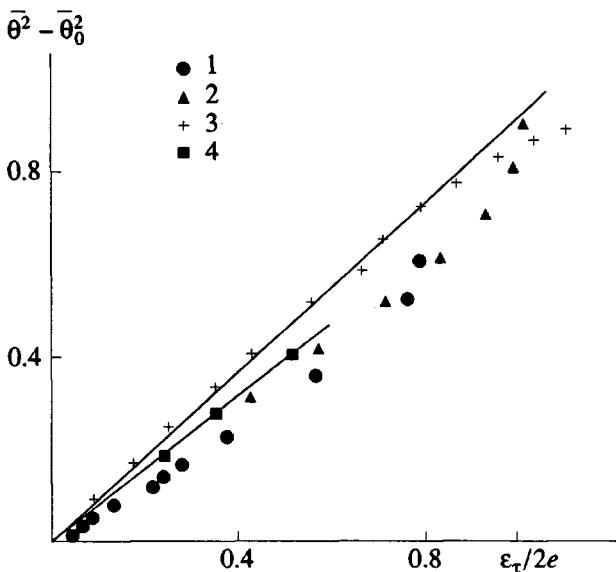


Рис. 14. Результаты расчета по формуле (4) (1, 2) и данные компьютерного моделирования (3, 4) для зависимости среднеквадратичного угла поворота частиц, $\bar{\theta}^2 - \bar{\theta}_0^2$, от сдвиговой деформации системы; $e = 0.026667$ (1, 3) и 0.2 (2, 4).

Для определения $\rho(\theta)$ введем ориентационную энтропию

$$S = \int_0^{\pi/2} \rho(\theta) \ln \{ \rho(\theta) \} d\theta$$

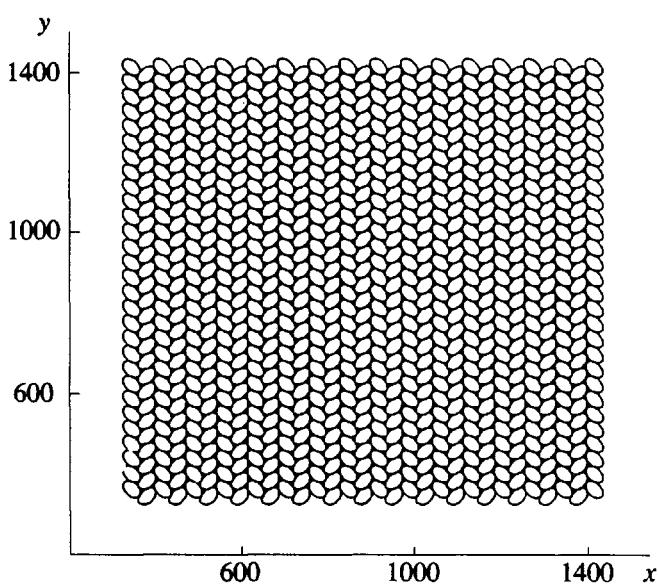


Рис. 15. Жидкий кристалл из эллипсов с произвольным углом между слоями ("паркетный" кристалл).

и найдем максимум энтропии при условии постоянства формы тела

$$L = \text{const.}$$

Тогда получим

$$\rho(\theta) = C_1 \exp[-\mu l(\theta)],$$

$$(C_1 = \left\{ \int_0^{\pi/2} \exp[-\mu l(\theta)] d\theta \right\}^{-1} - \text{нормировочный}$$

множитель, μ – параметр, характеризующий распределение эллипсов по ориентациям) и

$$L \sim C_1 \int_0^{\pi/2} l(\theta) \exp[-\mu l(\theta)] d\theta$$

или

$$L \sim C_1 \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 + e^2 + 2e \cos 2\theta} \times \quad (2) \\ \times \exp(-\mu \sqrt{1 + e^2 + 2e \cos 2\theta}) d\theta.$$

Параметр ориентации эллипсов A_e , входящий в интерполяционную формулу для функции распределения по ориентациям частиц $\rho(\theta) = 2/\pi(1 + A_e \cos 2\theta)$, определяли методом наименьших квадратов.

Могут быть найдены также средние углы ориентации эллипсов по отношению к направлению нагружения

$$\bar{\theta} = C_1 \int_0^{\pi/2} \theta \exp[-\mu l(\theta)] d\theta, \quad (3)$$

$$\bar{\theta}^2 = \left\{ C_1 \int_0^{\pi/2} \theta^2 \exp[-\mu l(\theta)] d\theta \right\}^{1/2}. \quad (4)$$

Анализируя начальные стадии деформации, можно показать, что выполняются соотношения

$$(dA_e/d\varepsilon_\tau)e = (d\bar{\theta}/d\varepsilon_\tau)e = (d\bar{\theta}^2/d\varepsilon_\tau)e = \text{const.}$$

Численные расчеты приводят к следующим значениям:

$$\left(\frac{\varepsilon_\tau}{\mu e^2} \right)_{\mu \rightarrow 0} = 1; \quad \left(\frac{dA_e}{d\varepsilon_\tau} e \right)_{\mu \rightarrow 0} \cong 1.0,$$

$$\left(\frac{d\bar{\theta}}{d\varepsilon_\tau} e \right)_{\mu \rightarrow 0} \cong 0.32; \quad \left(\frac{d\bar{\theta}^2}{d\varepsilon_\tau} e \right)_{\mu \rightarrow 0} \cong 0.28.$$

Таким образом, уравнение (1) – (4) задают связь между деформацией и степенью ориентации эллипсов в параметрическом виде. Результаты

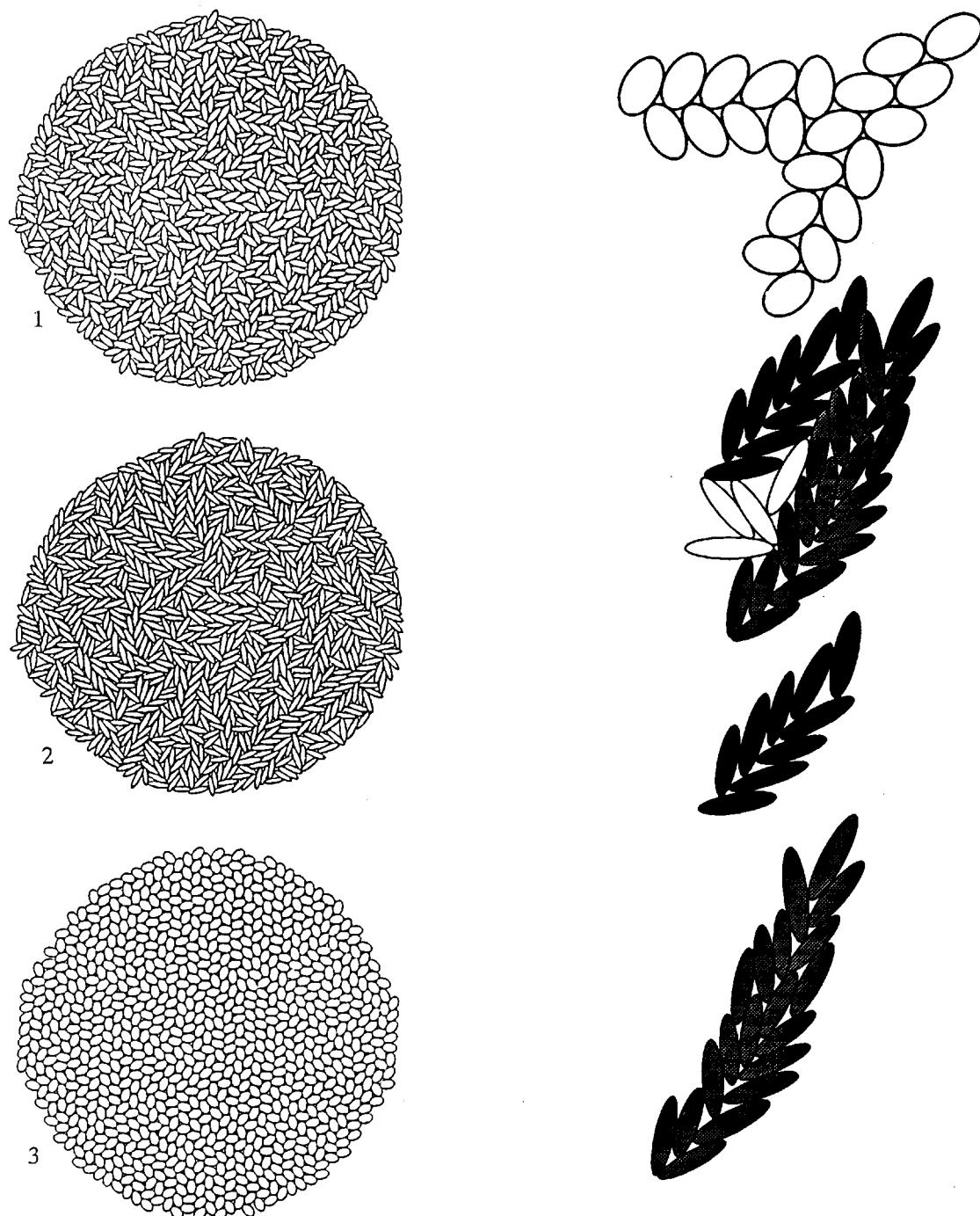


Рис. 16. Полидисперсные (1, 2) и монодисперсная (3) изотропные системы эллипсов (а) и выделенные структуры (б), которые можно рассматривать как зародыши "паркетного" кристалла.

численного решения этих уравнений приведены на рис. 14.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Френкель Я.И. Собр. науч. тр. Т. 3. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1953.
2. Jhon M.C., Klotz W.L., Eyring H. // J. Chem. Phys. 1969. V. 51. No. 9. P. 3692.
3. Виноградов Г.В., Малкин А.Я. Реология полимеров. М.: Химия, 1977.
4. Alder B.J., Weinwright T.E. // J. Chem. Phys. 1970. V. 53. No. 10. P. 3813.
5. Берлин Ал.Ал., Ротенбург Л., Басэрст Р. // Хим. физика. 1991. Т. 10. № 9. С. 1284.
6. Берлин Ал.Ал., Ротенбург Л., Басэрст Р. // Высокомолек. соед. А. 1992. Т. 34. № 7. С. 6.

7. Rothenburg L., Bathurst R.J. // Computers and Geotechnics. 1991. V. 11. P. 315.
8. Rothenburg L., Bathurst R.J. // Geotechnique. 1992. V. 42. No. 1. P. 79.
9. Oda M., Konishi J., Nemat-Nasser S. // Mechanics of Granular Materials: New Models and Constitutive Relations / Ed. by Jenkins J.T., Satake M. Amsterdam: Elsevier. 1983. P. 21.
10. Konishi J., Oda M., Nemat-Nasser S. // Mechanics of Granular Materials: New Models and Constitutive Relations / Ed. by Jenkins J.T., Satake M. Amsterdam: Elsevier. 1983. P. 31.
11. Oda M. // Soil and Foundations. 1972. V. 12. No. 2. P. 1.

Rotation Mechanism of Flow of System of Smooth Elliptical Particles

Al. Al. Berlin*, L. Rothenburg, and R. J. Bathurst*****

**Institute of Chemical Physics, Kosygin Str. 4, Russian Academy of Sciences, Moscow, 117977, Russia*

***University of Waterloo, Ontario, Canada, N2L3G1*

****Royal Military College of Canada, Kingston, Ontario, Canada, K7K5L0*

Abstract – Flow of liquid two-dimensional system of elliptic particles was investigated using computer imitation. Typical features of the liquid state are: low yield stress, the number of interparticle contacts and the volume of the system do not change during flow, local strains are uniform. The mechanism of shear strain in the liquid state is the particles rotation. A relationship between the average particle orientation and shear strain of the system in solid state is determined.