

УДК 541.64:532.132:539.3

ВРАЩЕНИЕ КОНТИНУУМА В УСЛОВИЯХ СДВИГОВОГО ТЕЧЕНИЯ РАСПЛАВА ПОЛИМЕРА И ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ КЛУБКОВ¹

© 2005 г. А. Л. Свистков, О. А. Путилова

Институт механики сплошных сред
Уральского отделения Российской академии наук
614013 Пермь, ул. Ак. Королева, 1

Поступила в редакцию 08.07.2004 г.
Принята в печать 26.11.2004 г.

Предложен метод получения определяющих уравнений реологической среды. Для описания упругих и вязких связей между точками на схеме применены уравнения нелинейной теории упругости и нелинейной вязкой жидкости. Основное внимание уделено учету вращательных свойств континуума. Высказано предположение о том, что деформация среды и деформация полимерных клубков в условиях течения совпадают. Определена вероятная геометрия полимерного клубка в условиях сдвигового течения.

ВВЕДЕНИЕ

Для моделирования механических свойств вязкоупругих материалов и вязкоупругих жидкостей используют модели либо интегрального, либо дифференциального типа. Дифференциальные модели более просты и удобны для расчетов и для идентификации констант по имеющимся экспериментальным данным. Этим, по-видимому, объясняется интерес в последние годы к дифференциальным моделям сплошной среды в условиях конечных деформаций [1–13].

В настоящей работе предлагается простой метод получения определяющих уравнений, построенный на применении символьных схем. Его достоинством является физическая прозрачность каждого из математических выражений, удобство построения математической модели среды.

Большинство предлагавшихся реологических моделей использует мультиплективное разложение градиента деформации на произведение упругих и вязких компонент. Однако этот подход не является необходимым. Способ построения оп-

ределяющих уравнений без помощи указанной гипотезы предложен в статьях [14, 15]. Отказ от применения мультиплективного разложения является одной из посылок в данной работе.

Для моделирования вращательных свойств среды предложено использовать дополнительные спины (антисимметричные индифферентные тензорные функции параметров состояния). С их помощью удается точно описать поведение полимерных расплавов.

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ УРАВНЕНИЙ

Для построения математической модели реологической среды удобно использовать следующую расчетную схему. Схема состоит из точек, соединенных друг с другом упругими и вязкими связями (рис. 1). Будем называть их упругими и вязкими элементами. Все они должны располагаться горизонтально и иметь левую и правую точки, в которых происходит соединение с другими элементами. Имеются также левая и правая точки схемы *A* и *E*, с которыми могут соединяться упругие и вязкие элементы.

Для описания свойств упругих элементов целесообразно применять обычные уравнения механики несжимаемых упругих сред, которые определяют зависимость девиатора тензора напряже-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Департамента образования и науки Пермской области (код проекта 04-01-96058), а также проекта фундаментальных научных исследований, выполняемых совместно учеными Уральского, Сибирского и Дальневосточного отделений Российской академии наук.

E-mail: svistkov@icmm.ru (Свистков Александр Львович).

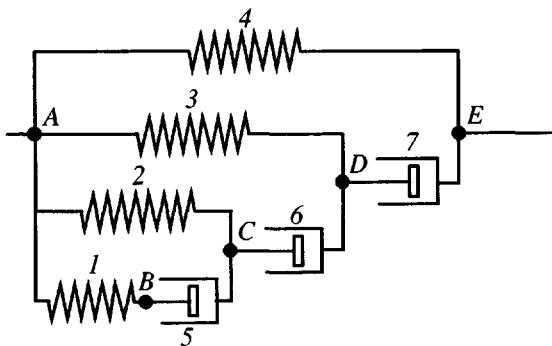


Рис. 1. Одна из возможных схем поведения вязкоупругого материала.

ний Коши \mathbf{T}_i соответствующего элемента от свободной энергии материала по формуле

$$\operatorname{dev} \mathbf{T}_i = \operatorname{dev} \left(\rho \sum_{k=1}^3 \lambda_k^i \frac{\partial f}{\partial \lambda_k^i} \mathbf{n}_k^i \otimes \mathbf{n}_k^i \right), \quad (1)$$

где ρ – плотность среды, \mathbf{n}_k^i и λ_k^i – собственные векторы и собственные значения левого тензора растяжений i -го упругого элемента, f – массовая плотность свободной энергии среды.

Для моделирования свойств вязких элементов используются уравнения состояния вязких жидкостей

$$\operatorname{dev} \mathbf{T}_j = 2\eta_j \mathbf{D}_j \quad (2)$$

Здесь \mathbf{T}_j – тензор напряжений Коши вязкого элемента, \mathbf{D}_j – тензор скорости растяжения вязкого элемента, η_j – коэффициент сдвиговой вязкости.

Каждой точке на схеме соответствует тензор скоростей деформации. С математической точки зрения – это дополнительные тензорные переменные, которые позволяют точно описать реальные механические свойства среды. Разность тензоров скоростей деформации левой $\mathbf{D}_{\text{left}}^i$ и правой $\mathbf{D}_{\text{right}}^i$ точек у каждого из элементов схемы равна тензору скорости деформации \mathbf{D}_i соответствующего элемента:

$$\mathbf{D}_i = \mathbf{D}_{\text{left}}^i - \mathbf{D}_{\text{right}}^i \quad (3)$$

Тензор скорости растяжения левой точки схемы (точка А) полагается равным тензору скорости деформации среды \mathbf{D} , а тензор скорости де-

формации правой точки схемы (точка Е) $\mathbf{D}_{\text{right}}$ полагается равным нулю.

Изменение деформированного состояния во времени упругих элементов зададим с помощью уравнения

$$\begin{aligned} (\mathbf{V}_i^2)^{\cdot} &= \mathbf{V}_i^2 (\mathbf{D}_{\text{left}}^i + \mathbf{W}^T + \mathbf{W}_i^T) + \\ &+ (\mathbf{D}_{\text{left}}^i + \mathbf{W} + \mathbf{W}_i) \mathbf{V}_i^2 - 2\mathbf{V}_i \mathbf{D}_{\text{right}}^i \mathbf{V}_i, \end{aligned} \quad (4)$$

в котором точка означает вычисление материальной производной по времени. Можно убедиться, что уравнение (4) гарантирует индифферентность и симметричность тензора растяжения \mathbf{V}_i . При этом скорость совершения работы при деформировании упругого элемента определяется выражением $\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{D}_i$. Доказательство такого утверждения здесь не рассматривается. В формуле (4) присутствуют спин рассматриваемой среды \mathbf{W} и введенный индифферентный тензор \mathbf{W}_i , который представляет собой дополнительный спин, уточняющий вращательные свойства среды.

Каждой точке соединения элементов на схеме соответствуют сформулированные в виде тензорного уравнения “условия равновесия”. Смысл его заключается в следующем. Сумма тензоров напряжений Коши элементов, соединяемых с точкой слева, равна сумме тензоров напряжений Коши элементов, соединяемых с точкой справа. При этом полагается, что на левую точку схемы слева и на правую точку справа действуют тензоры напряжений Коши рассматриваемой среды. Потенциал свободной энергии среды является функцией температуры и кратностей удлинений упругих элементов схемы. Метод построения определяющих уравнений приводит к автоматическому удовлетворению неравенства диссипации.

Важная особенность модели – использование в уравнениях дополнительного спина \mathbf{W}_i , уточняющего вращательные свойства среды. Особенно ярко необходимость его введения должна проявляться при моделировании течения растворов или расплавов полимеров. Это объясняется тем, что в условиях сдвигового течения скорость вращения микрообъемов среды существенно зависит от того, какая длина и гибкость у полимерных цепей, имеют ли они привески, как полимерные цепи взаимодействуют друг с другом, насколько сильно перепутаны полимерные клубки, как происхо-

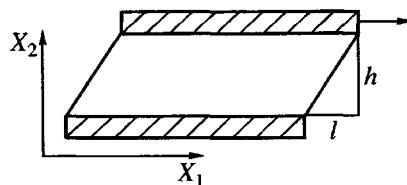


Рис. 2. Схема деформирования расплава полимера в задаче моделирования сдвигового течения.

дит взаимодействие полимерных цепей с молекулами растворителя и другими клубками. Все перечисленные особенности можно учесть в феноменологической модели среды с помощью тензора \mathbf{W}_i .

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СРЕДЫ

Рассмотрим пример использования дополнительных спинов для точного учета вращательных свойств среды. Пусть требуется описать сдвиговое течение расплава ПЭ между двумя параллельными горизонтально расположенными пластинками (рис. 2). Нижняя пластина неподвижна, а верхняя двигается относительно нее по гармоническому закону с большой амплитудой. Считаем, что течение осуществляется в изотермических условиях. Вначале сформулируем феноменологические уравнения без объяснения физического смысла входящих в них величин.

Используем для расчетов модель механического поведения среды, которую можно представить с помощью двух упругих и двух вязких элементов, соединенных друг с другом согласно схеме на рис. 3. Полагаем, что полимерные цепи при течении деформируются. Однако такие деформации не настолько велики, чтобы учитывать длину цепей и близость их геометрии к геометрии полимерных клубков в предельно растянутом состоянии. Поэтому считаем оправданным применение потенциалов Трелоара для описания свойств упругих элементов. Запишем потенциал свободной энергии среды в следующем виде:

$$f = c_1((\lambda_1^1)^2 + (\lambda_2^1)^2 + (\lambda_3^1)^2 - 3) + \\ + c_3((\lambda_1^3)^2 + (\lambda_2^3)^2 + (\lambda_3^3)^2 - 3), \quad (5)$$

где c_1, c_3 – константы среды. Индексы констант соответствуют номерам элементов на схеме ме-

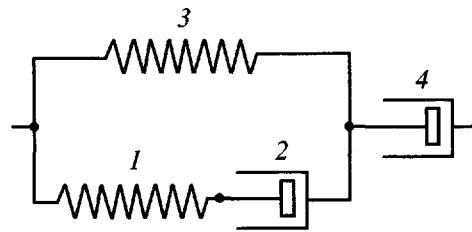


Рис. 3. Модель, использованная для расчетов сдвигового течения расплава ПЭ.

ханического поведения (рис. 3). Формула (1) и выражение (5) определяет тензоры напряжений Коши упругих элементов \mathbf{T}_1 и \mathbf{T}_3 :

$$\operatorname{dev} \mathbf{T}_i = \operatorname{dev}(2\rho c_i \mathbf{V}_i^2) \quad (i = 1, 3)$$

Условие согласования тензоров напряжений для внутренних точек схемы дает зависимость между напряжениями в упругих и вязких элементах $\mathbf{T}_2 = \mathbf{T}_1$ и $\mathbf{T}_4 = \mathbf{T}_1 + \mathbf{T}_3$. Тензор напряжений Коши определяется как сумма тензоров напряжений Коши упругих элементов $\mathbf{T} = \mathbf{T}_1 + \mathbf{T}_3$.

В соответствии с уравнением эволюции левого тензора напряжений (4) упругого элемента и формулы связи между тензорами скоростей растяжения (3) изменение во времени левых тензоров растяжения \mathbf{V}_1 и \mathbf{V}_3 определяется формулами

$$(\mathbf{V}_1^2)^\cdot = \mathbf{V}_1^2(\mathbf{D} + \mathbf{W}^T + \mathbf{W}_1^T) + \\ + (\mathbf{D} + \mathbf{W} + \mathbf{W}_1)\mathbf{V}_1^2 - 2\mathbf{V}_1(\mathbf{D} - \mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_4)\mathbf{V}_1 \\ (\mathbf{V}_3^2)^\cdot = \mathbf{V}_3^2(\mathbf{D} + \mathbf{W}^T + \mathbf{W}_3^T) + \\ + (\mathbf{D} + \mathbf{W} + \mathbf{W}_3)\mathbf{V}_3^2 - 2\mathbf{V}_3(\mathbf{D} - \mathbf{D}_4)\mathbf{V}_3,$$

в которых тензоры скоростей деформации вязких элементов \mathbf{D}_2 и \mathbf{D}_4 вычисляются с помощью зависимости (2) через тензоры \mathbf{T}_2 и \mathbf{T}_4 .

Проведенные вычисления позволили установить, что удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными (рис. 4) получается при вычислении коэффициентов сдвиговой вязкости среды с помощью выражений

$$\eta_2 = \frac{\eta_2^0}{1 + c_2^n \sqrt{\mathbf{W}_1 \cdot \mathbf{W}_1}} \quad (6)$$

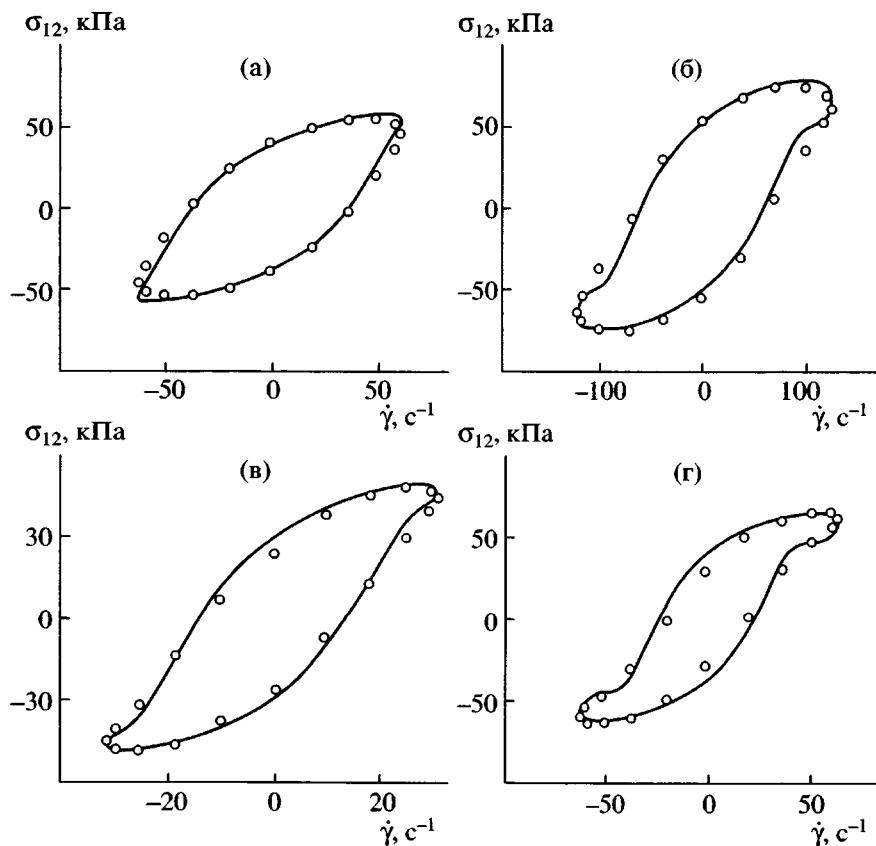


Рис. 4. Зависимость сдвигового напряжения от скорости сдвига в условиях гармонического деформирования расплава ПЭ для следующих условий: $\gamma_0 = 5$ (а, в) и 10 (б, г); $v = 2$ (а, б) и 1 Гц (в, г).

$$\eta_4 = \frac{\eta_4^o}{1 + c_4^{\eta} \sqrt{\mathbf{W}_3 \cdot \mathbf{W}_3}} \quad (7)$$

$$\lambda_1^1 \lambda_2^1 \lambda_3^1 = \lambda_1^3 \lambda_2^3 \lambda_3^3 = 1$$

и при использовании в качестве дополнительных спинов тензоров

$$\mathbf{W}_1 = c_1^w (\mathbf{D} \mathbf{V}_1^2 - \mathbf{V}_1^2 \mathbf{D}) \quad (8)$$

$$\mathbf{W}_3 = c_3^w (\mathbf{V}_1^2 \mathbf{V}_3^2 - \mathbf{V}_3^2 \mathbf{V}_1^2) \quad (9)$$

В выражениях (6)–(9) символами η_2^o , η_4^o , c_2^{η} , c_4^{η} , c_1^w , c_3^w обозначены константы среды, определяющие ее реологические свойства.

Можно показать, что условие деформирования среды без изменения ее объема

$$\text{tr } \mathbf{D} = 0$$

приводит к неизменности объемов упругих элементов при деформировании

СРАВНЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Результаты компьютерного эксперимента представлены на рис. 4. Сплошные линии показывают расчетные кривые, точки – экспериментальные данные работы [16]. Символ $\gamma = l/h$ используется для обозначения относительного перемещения пластинок (рис. 2). Видно, что с помощью соответствующего выбора констант можно добиться хорошего совпадения вычисленных значений с экспериментальными данными (рис. 4). К сожалению, для конкретного материала, рассматриваемого в данной работе, отсутствуют экспериментальные данные для случая, когда верхняя пластина движется относительно нижней с постоянной скоростью. Однако такая мо-

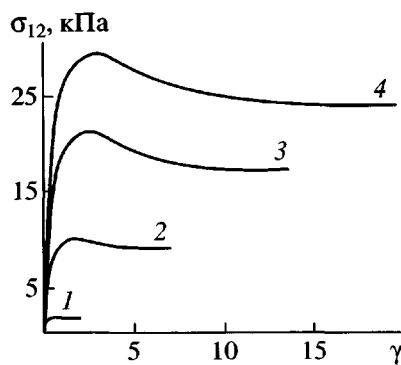


Рис. 5. Зависимость сдвиговой компоненты тензора напряжений от относительного перемещения пластинок в условиях сдвигового течения расплава ПЭ при постоянной скорости относительного движения пластинок. Скорость сдвига $\dot{\gamma} = 0.1$ (1), 1 (2), 3 (3) и 5 с^{-1} (4).

дель дает разумное качественное описание реологии полимерного расплава в этих условиях. Рисунки 5 и 6 иллюстрируют данный вывод.

Результаты расчетов напряжения в зависимости от относительного смещения пластинок, полученные для разных постоянных скоростей движения, показаны на рис. 5. На начальных участках деформирования среда ведет себя как упругий материал. Но дальнейшее ее поведение зависит от того, успевают ли полимерные клубки одновременно с деформированием разворачиваться и перестраиваться относительно друг друга под действием внешней нагрузки.

Здесь имеются два характерных времени. Одно из них определяется скоростью деформирования среды. Оно задается скоростью относительного перемещения пластинок $\dot{\gamma}$. Второе определяется скоростью перемещения полимерных клубков относительно друг друга. При медленной скорости сдвигового течения полимерные цепочки успевают перестраиваться и деформироваться одновременно. Данный процесс отвечает кривой, рассчитанной для $\dot{\gamma} = 0.1 \text{ с}^{-1}$. С повышением скорости нагружения клубки деформируются сильнее, что ведет к более высоким значениям напряжений в установившемся режиме. Наконец, начиная с некоторых скоростей нагружения, процесс перестройки полимерных клубков в пространстве относительно друг друга происходит медленнее, чем деформирование полимерных клубков,

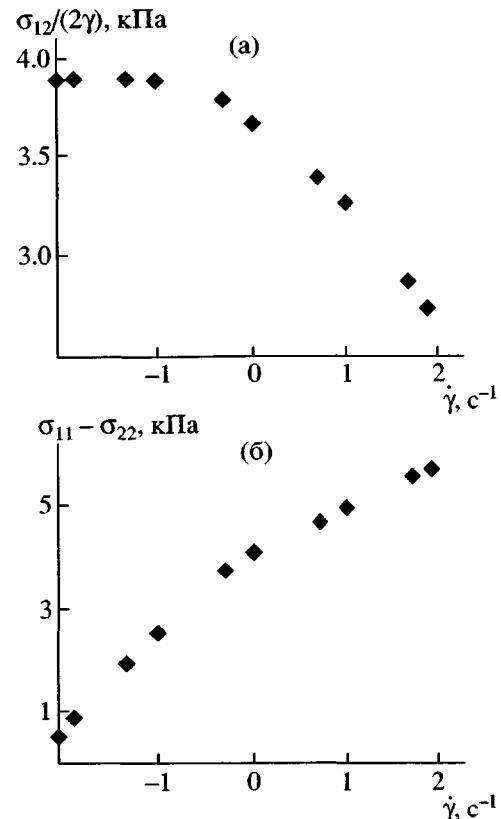


Рис. 6. Расчет аномалии вязкости (а) и эффект Вайссенберга (б).

поэтому на кривой появляется пик с последующей ниспадающей ветвью (рис. 5).

Важно отметить следующий момент. Когда направления главных осей тензора скоростей деформации среды D не меняются во времени, они совпадают с направлениями главных осей тензоров растяжений V_1 и V_3 . В таком случае спины W_1 и W_3 равны нулю. Вращения среды не происходит. Коэффициенты вязкости η_2 и η_4 в этом случае имеют одно и то же значение независимо от того, с какой скоростью деформируется среда.

Совсем иная ситуация имеет место в условиях сдвигового течения. Главные направления тензора напряжений Коши и тензора скоростей деформации среды не совпадают и изменяют взаимную ориентацию во времени. Коэффициенты вязкости η_2 и η_4 в такой ситуации зависят от скорости относительного движения пластинок $\dot{\gamma}$. Как следствие этого в среде наблюдается аномалия вязкости и эффект Вайссенберга (рис. 6).

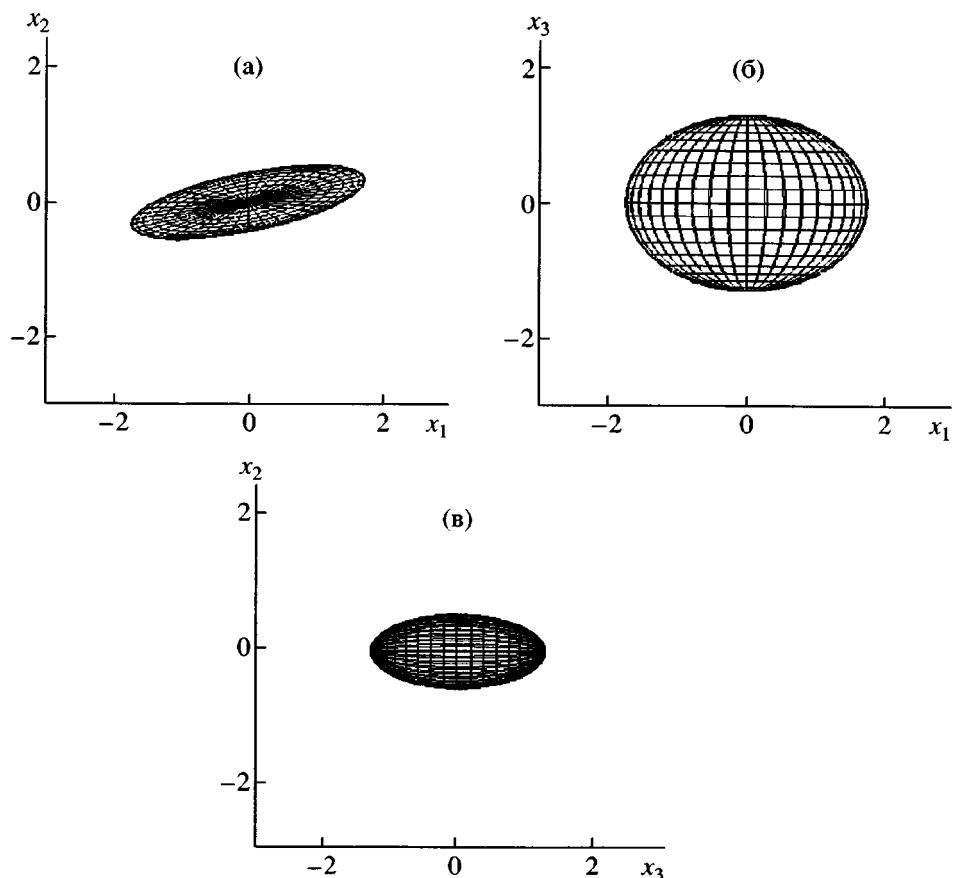


Рис. 7. Проекции эллипсоида, полученного при деформировании сферической области тензором растяжения V_3 на плоскости, проведенные через оси x_1 и x_2 (а); x_1 и x_3 (б); x_3 и x_2 (в).

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ ТЕНЗОРНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Рассматриваемая среда представляет собой вязкоупругую жидкость. Она может течь и упруго деформироваться одновременно. Но деформироваться в вязкоупругой жидкости могут только полимерные клубки. Поэтому представляется разумным предположить, что деформация среды состоит в деформации полимерных клубков. Течение же определяется движением центров масс полимерных клубков относительно друг друга. Приведенная гипотеза означает, что на схеме (рис. 3) за деформирование полимерных клубков отвечает часть, состоящая из параллельно соединенных упругого и максвелловского элементов, а за течение – вязкий элемент, обозначенный на схеме цифрой 4.

В недеформированном состоянии полимерные клубки имеют форму, близкую к сферической. Необходимо принять во внимание следующее. Тензоры по своему смыслу представляют собой

линейные операторы, отображающие векторы в векторы. В частности, левый тензор растяжений при действии на множество точек, образующих сферическую область, отображает их в эллипсоидальную область. Переход сферы в эллипсоид дает наглядное представление о деформации области. Главные оси тензора растяжения являются главными осями эллипсоида, а изменение длины главных диаметров определяется кратностями растяжения.

Аналогичное превращение формы клубков при течении иллюстрируют модели статистической физики. Все это наводит на мысль о том, что в рамках рассматриваемой модели деформирование полимерных клубков должен определять тензор растяжения третьего упругого элемента. Максвелловский элемент только уточняет скорость, с которой происходит деформирование (зацепление, перепутывание, разворачивание цепочек). Таким образом, можно предположить, что изменение наиболее вероятной геометрии по-

лимерных клубков можно наблюдать на примере действия тензора растяжений V_3 на множество векторов, образующих сферическую область.

В результате расчетов в задаче с постоянной скоростью относительного сдвига $\dot{\gamma} = 5 \text{ c}^{-1}$ установлено, что тензор V_3 превращает сферическую область в эллипсоидальную. При этом по первому главному направлению происходит увеличение главного диаметра эллипса в 1.7 раза по сравнению с диаметром исходной сферы, по второму – уменьшение в 2 раза (рис. 7). Полимерный клубок напоминает диск, наклоненный относительно горизонтальной плоскости. Угол наклона и скорость, с которой он изменяется во времени, зависят от дополнительных спинов W_1 и W_3 .

Угол наклона главных осей тензора напряжений и тензора растяжения полимерных клубков относительно направления движения зависит от того, длинные или короткие полимерные цепи образуют клубки, имеются ли у полимерных цепей привески, имеется ли в среде растворитель, существует ли взаимодействие между молекулами, как происходит зацепление между звеньями полимерных клубков при движении и т.д. С помощью дополнительных спинов в модели можно учитывать влияние этих факторов на изменение направления главных осей тензорных величин и с хорошей точностью описывать механические свойства вязкоупругих жидкостей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Balan C., Tsakmakis C. // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2002. V. 103. P. 45.
2. Govindjee S., Simo J.C. // Int. J. Solid Struct. 1992. V. 29. P. 1737.
3. Govindjee S., Reese S. // J. Eng Mater. Tech. 1997. V. 119. P. 251.
4. Haupt P., Lion A., Backhaus E. // Int. J. Solid Struct. 2000. V. 37. P. 3633.
5. Holzapfel G.A., Simo J.C. // Int. J. Solid Struct. 1996. V. 33. P. 3019.
6. Holzapfel G.A. // Int. J. Numer. Meth. Eng. 1996. V. 39. P. 3903.
7. Lion A. // Acta Mech. 1997. V. 123. P. 1.
8. Lion A. // J. Mech. Phys. Solids. 1997. V. 45. P. 1805.
9. Lion A. // J. Mech. Phys. Solids. 1998. V. 46. P. 895.
10. Lin R.C., Schomburg U. // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 2003. V. 192. P. 1591.
11. Miehe C., Keck J. // J. Mech. Phys. Solids. 2000. V. 48. P. 323.
12. Reese S., Govindjee S. // Int. J. Solid Struct. 1998. V. 35. P. 3455.
13. Simo J.C. // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 1987. V. 60. P. 153.
14. Пальмов В.А. // Успехи механики. 1980. Т. 3. № 3. С. 75.
15. Palmov V.A. // Acta Mechanica. 1997. V. 125. P. 129.
16. Giacomin A.J., Jeyaseelan R.S., Samurkas T., Dealy J.M. // J. Rheol. 1993. V. 37. P. 811.

Rotation of Continuum under Shear Flow of Polymer Melt and Deformation of Polymer Coils

A. L. Svistkov and O. A. Putilova

*Institute of Continuous Media Mechanics, Ural Division, Russian Academy of Sciences,
ul. Akademika Koroleva 1, Perm, 614013 Russia*

Abstract—A method was proposed for deriving the constitutive equations of a rheological medium. Elastic and viscous connections between points on the scheme are described by the equations of the nonlinear theory of elasticity and a nonlinear viscous fluid. Basic attention is focused on the involvement of the rotational properties of a continuum. It is assumed that deformation of a medium and deformation of polymer coils are identical under flow conditions. Possible geometry of the polymer coil under the shear-flow conditions was determined.