Polimerek reológiája és szimulációs technikái (BMEGEPTNG02)

MŰEGYETEM 1782
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Gépészmérnöki Kar
Polimertechnika Tanszék

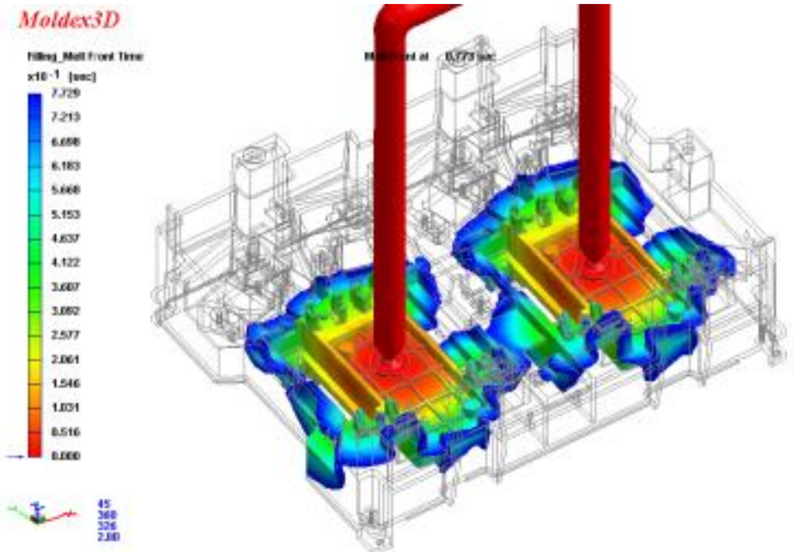
Szabó Ferenc

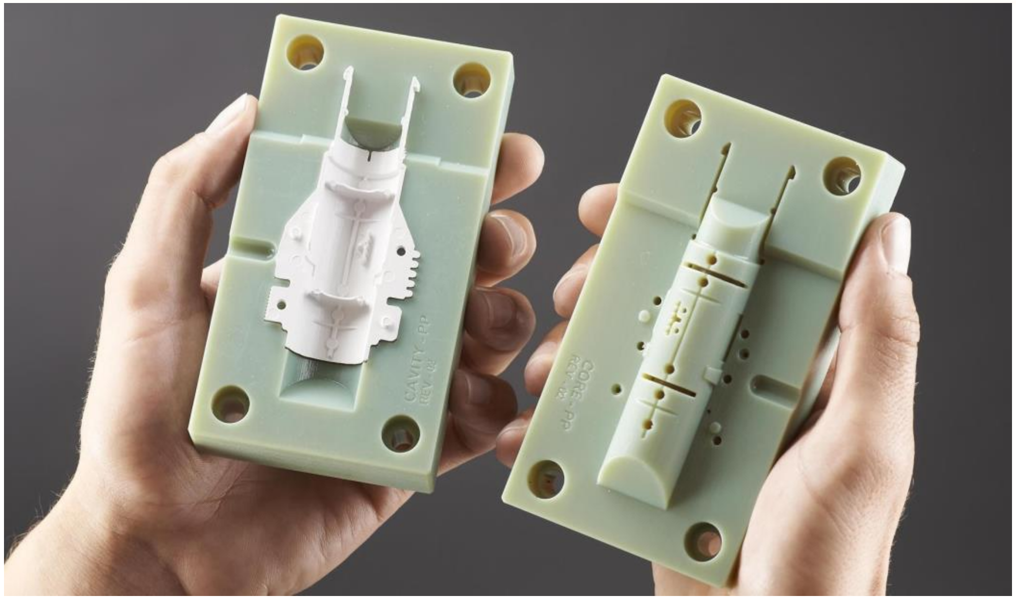
2023

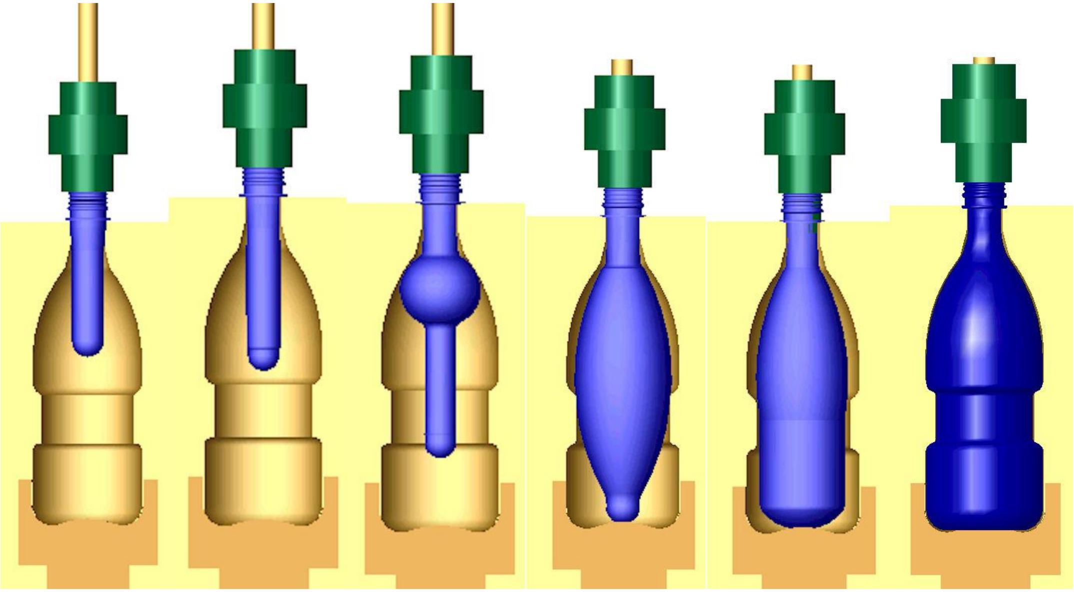
A polimerek feldolgozása

- Térhálós anyagok feldolgozása
- Hőre lágyuló anyagok feldolgozása
  - Nagyrészt folyadék(szerűbb) állapotban történik a feldolgozás
  - Fizikai és kémiai állapotváltozások (a kémiai általában kerülendő)
  - Fröccsöntés, extrúzió, melegalakítás, szálgyártás stb.

- Megfigyelések, kísérleti eredmények ➔ Modellek
  - Anyagi viselkedés leírása
  - Információ gyűjtés eddig kísérletileg nem vizsgált szituációk esetében







- **Modellezés?**
  - **Legyen matematikai!**
  - **Legyen általános**
- **Mit nem ismerünk?**

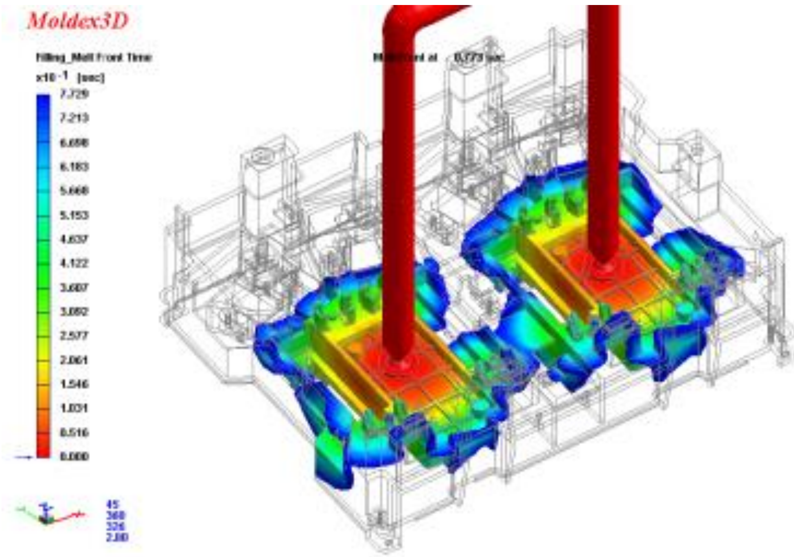
Kontinuummechanika, deformáció

- Kontinuummechanika: Gázok, folyadékok és nem merev szilárd testek globális mechanikai mozgásának kontinuummodellel történő vizsgálata
- Kontinuum: Test, folytonos közeg
  - A molekuláris jelleg elhanyagolható
  - Az anyag állapotát leíró függvények és szükséges számú deriváltjaik folytonosak

- Van nem kontinuum modell is?

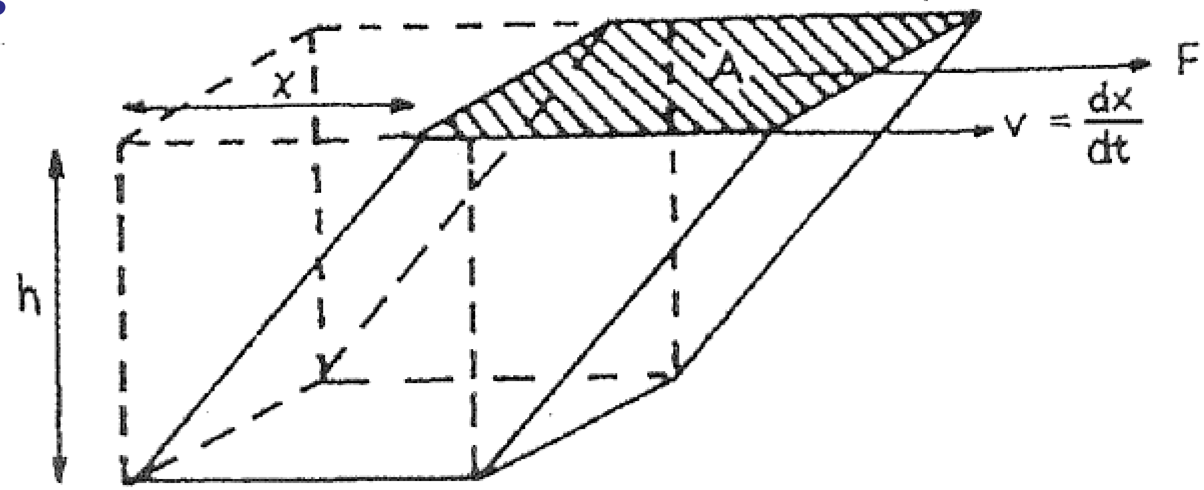
- Mi a deformáció?
  - ➔ Forma megváltozása
  - Transzláció?
  - Rotáció?
  - Nyírás?
  - Nyújtás?

- **Reológiai probléma**
  - **Ismeretlenek: v_x, v_y, v_z, η, p, T, ρ**
  - **➔ Megoldás:**
  - **Anyagtól független egyenletek (Megmaradási egyenletek)**
    - Impulzus egyenlet, 3 irányban
    - Folytonosság
    - Energia egyenlet
  - **Anyagtól függő egyenletek (Állapotegyenletek)**
    - Reológiai állapotegyenlet
    - Fizikai állapotegyenlet
  - **Zárt alakban gyakran egyszerű geometriák esetén sem írható fel a megoldás**
  - **➔ Közelítő módszerek**
  - **➔ Kezdeti és peremfeltételek**



Deformáció és deformáció sebesség

- **Egyszerű nyírás**



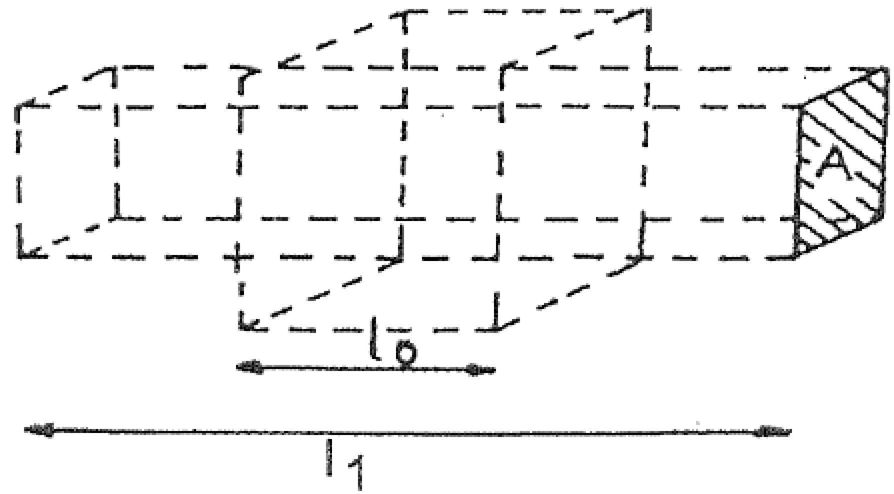
- **Nyírófeszültség** $$\tau = \frac{F}{A}$$

- **Deformáció** $$\gamma = \frac{x}{h}$$

- **Deformáció sebesség** $$\dot{\gamma} = \frac{1}{h}\frac{dx}{dt}$$

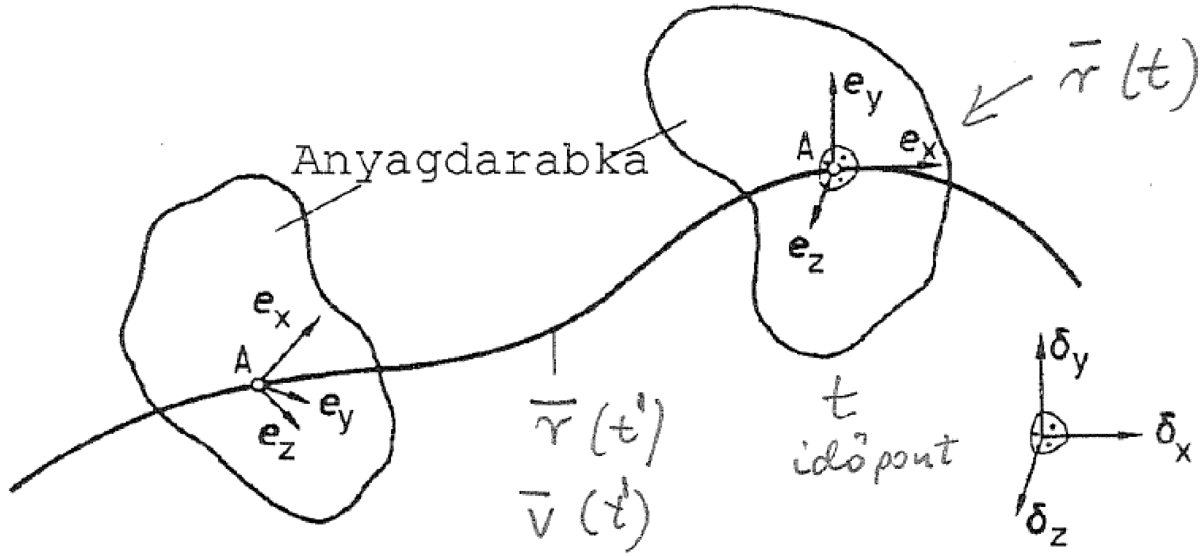
Deformáció és deformáció sebesség

- Egyszerű nyújtás



- Húzófeszültség $\sigma = \dfrac{F}{A}$
- Deformáció $\varepsilon = \int_{l_0}^{l_1} \dfrac{dl}{l} = \ln\left(\dfrac{l_1}{l_0}\right)$
- Deformáció sebesség $\dot{\varepsilon} = \dfrac{d\varepsilon}{dt}$

- **Általánosítva**



- **„A" jelű anyagdarab, „t" időpillanatban, e_x, e_y, e_z derékszögű kr.**
- **Deformáció hatására az ei vektorok hossza és a bezárt szögük is változhat**
- **r(t') úton, v(t') sebességgel jutott az r(t) helyre, közben deformálódott**
- **t, a referencia időpont, t' az összes múltbéli pont (-∞<t'<t)**

$$\bar{r}(t) - r(t') = \int_{t'}^{t} \bar{v}(t')dt'$$

Cauchy alakváltozási tenzor

- **Az anyagi koordinátarendszer deformációjának leírása ➔ Tenzor**
- **Cauchy tenzor:**

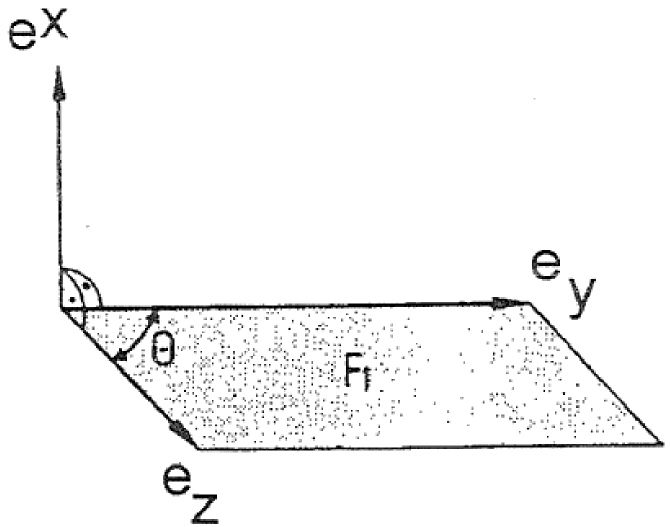
$$\overline{\overline{C}}(t') = \sum_{i,j} \overline{e}_i \cdot \overline{e}_j \, \overline{\delta}_i \otimes \overline{\delta}_j \quad \text{i, j=x, y, z}$$

$\delta_1 \otimes \delta_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$, **a rögzített koordinátarendszer egységvektoraiból képzett diádikus szorzat, a tenzorkomponens indexe**

- **Az anyagdarabka t' és t időpontok közötti deformációját írja le, megfelel egy relatív alakváltozási tenzornak**
- **A t időpillanatban a tenzor az egységtenzorba megy át**

Finger alakváltozási tenzor

- A 3 egységvektor síkokat feszít ki, a síkok torzulását vizsgáljuk



normál vektor → felső index!

F1 sík esetében:

$$e^x = \left(e_y \times e_z\right) / V ,$$

ahol V a cella térfogata

- Finger tenzor:

$$\overline{\overline{C}}^{-1}(t') = \sum_{i,j} \bar{e}^i \cdot \bar{e}^j \; \bar{\delta}_i \otimes \bar{\delta}_j \quad \text{i, j=x, y, z}$$

- A Cauchy és Finger tenzorok egymás inverzei, szorzatuk $\overline{\overline{E}}$
- Folyadékoknál deformáció sebesség → időbeni deriváltak

- **Induljunk ki a sebesség vektoros alakjából, 3 komponens:**
  $v_x(x, y, z)$, $v_y(x, y, z)$, $v_z(x, y, z)$

- **Végezzünk deriválást koordináták szerint ➔ sebesség gradiens tenzor**

$$\overline{\overline{L}} = \text{grad}\ \overline{v} = \begin{pmatrix} \text{grad}\ v_x \\ \text{grad}\ v_y \\ \text{grad}\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_x}{\partial z} \\ \frac{\partial v_y}{\partial x} & \frac{\partial v_y}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial z} \\ \frac{\partial v_z}{\partial x} & \frac{\partial v_z}{\partial y} & \frac{\partial v_z}{\partial z} \end{pmatrix} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad i,j=x,y,z$$

➔ **Általános esetben aszimmetrikus, nem szinguláris, tehát $det\ \overline{\overline{L}} \neq 0$**

- Bontsuk fel a sebesség gradiens tenzort szimmetrikus és antiszimmetrikus részekre

$$\bar{\bar{L}} = \frac{1}{2}\left(\bar{\bar{L}} + \bar{\bar{L}}^T\right) + \frac{1}{2}\left(\bar{\bar{L}} - \bar{\bar{L}}^T\right) = \bar{\bar{D}} + \bar{\bar{W}}$$

$$\underbrace{\frac{\partial v_i}{\partial x_j}}_{\bar{\bar{L}}} = \underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)}_{\bar{\bar{D}}} + \underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)}_{\bar{\bar{W}}}$$

➔ Szimmetrikus rész: deformációsebességtenzor (D)

➔ Antiszimmetrikus rész: elfordulási sebességek, örvénytenzor (W)

- **Deformációsebességtenzor (D)**

$$\overline{\overline{D}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2\frac{\partial v_x}{\partial x} = \dot{\gamma}_{xx} & \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) = \dot{\gamma}_{yx} & \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x}\right) = \dot{\gamma}_{zx} \\ \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) = \dot{\gamma}_{xy} & 2\frac{\partial v_y}{\partial y} = \dot{\gamma}_{yy} & \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) = \dot{\gamma}_{zy} \\ \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x}\right) = \dot{\gamma}_{xz} & \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) = \dot{\gamma}_{yz} & 2\frac{\partial v_z}{\partial z} = \dot{\gamma}_{zz} \end{pmatrix}$$

- **Örvénytenzor (W)**

$$\overline{\overline{W}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y}\right) & 0 & \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z}\right) & \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z}\right) & 0 \end{pmatrix}$$

Deformáció és sebességek

- Helyettesítsük a sebességgradiens tenzorban a sebességeket idő szerinti deriváltakkal. Relatív elmozdulások a referencia állapothoz képest! (')
- Az idő és hely szerinti deriválás sorrendje felcserélhető

$$L_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial x_i'}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t'}\frac{\partial x_i'}{\partial x_j}$$

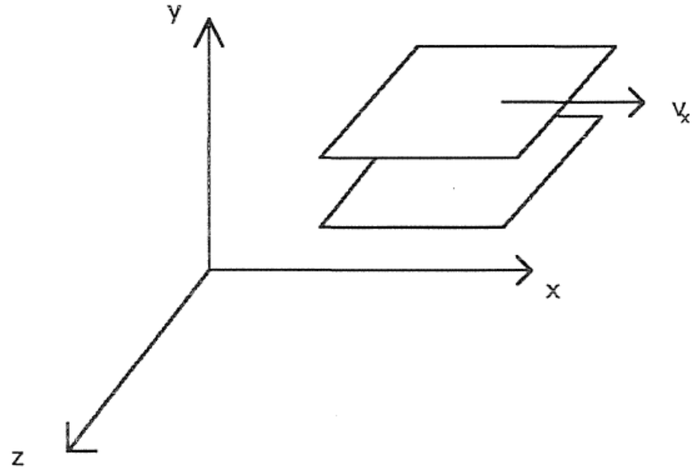
- Relatív deformációgradiens tenzor

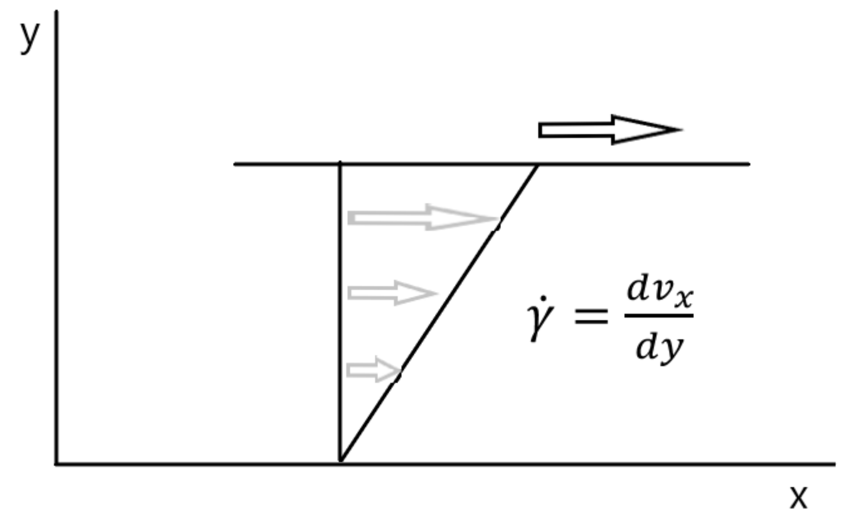
$$\frac{\partial\, x_i'}{\partial\, x_j} = F_{t\, i,j}$$

- Összefüggés a relatív Cauchy tenzorral:

$$\overline{\overline{C}}_t = \overline{\overline{F}}_t^{\,T}\,\overline{\overline{F}}_t$$

- **Áramlás csak x irányban, időben állandósult folyamat**





- **Sebesség komponensek:**

$$v_x = \dot{\gamma}\, y, \quad v_y = 0, \quad v_z = 0$$

$$\frac{dx'}{dt'} = \dot{\gamma}\, y, \quad \frac{dy'}{dt'} = 0 \quad \frac{dz'}{dt'} = 0$$

Stacioner egyszerű nyíró áramlás

- **Oldjuk meg a három szeparálható diff. egyenletet, ha t'=t, akkor x'=x, y'=y, z'=z**

$$\int dx' = \int \dot{\gamma}\, y dt'$$

$$x' = \dot{\gamma}\, yt' + c$$

$$x = \dot{\gamma}\, yt + c$$

ezzel

$$x' = \dot{\gamma}\, yt' + x - \dot{\gamma}\, yt = x + \dot{\gamma}\, y(t' - t)$$

Továbbá az x komponensnél alkalmazottakhoz hasonló módon:

y'=y, z'=z

Stacioner egyszerű nyíró áramlás

- **A felírt egyenletekből a relatív deformációgradiens tenzor:**

$$\frac{\partial x_i'}{\partial x_j} = F_{t\,i,j} \qquad \overline{\overline{F}}_t = \begin{pmatrix} 1 & \dot{\gamma}(t'-t) & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- **A sebességgradiens tenzor:**

$$\overline{\overline{L}} = \frac{\partial\ \overline{\overline{F}}_t}{\partial t'} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- **A deformációsebesség tenzor:**

$$\overline{\overline{D}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) = \frac{1}{2}\left(L_{ij} + L_{ji}\right) = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- **A relatív Cauchy tenzor:**

$$\overline{\overline{C}}_t = \overline{\overline{F}}_t^T \overline{\overline{F}}_t = \begin{bmatrix} 1 & \dot{\gamma}(t'-t) & 0 \\ \dot{\gamma}(t'-t) & 1+\dot{\gamma}^2(t'-t)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- **A relatív Finger tenzor :**

$$\overline{\overline{C}}_t^{-1} = \begin{bmatrix} 1+\dot{\gamma}^2(t'-t)^2 & -\dot{\gamma}(t'-t) & 0 \\ -\dot{\gamma}(t'-t) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Stacioner egyszerű nyíró áramlás, invariánsok

- A relatív Cauchy tenzor invariánsai: bizonyos matematikai műveletek hatására nem változnak meg (Pl. koordinátatranszformáció), így előszeretetettel alkalmazzák őket reológiai állapotegyenletekben

$$I=\mathrm{tr}(C_t)=\mathrm{Spur}(C_t)$$

$$II=\mathrm{tr}(\mathrm{adj}(C_t))$$

$$III=\det(C_t)$$

$$\mathrm{I}_{C_t} = 3+\dot{\gamma}^2(t'-t)^2 = \mathrm{II}_{C_t}$$
$$\mathrm{III}_{C_t} = 1$$

- A relatív Finger tenzor invariánsai megegyeznek a fentiekkel

Térfogatváltozás és formaváltozás

- Térfogatváltozás: olyan speciális alakváltozás amely során az összes egységvektor azonos arányban nyúlik meg vagy húzódik össze. A bezárt szögek továbbra is merőlegesek maradnak.
- A térfogatot a következőképp írhatjuk fel:

$$V(t') = \bar{e}_x \cdot (\bar{e}_y \times \bar{e}_z) = \sqrt{\det \bar{\bar{C}}(t')} = \sqrt{III_C(t')}$$

- A t időpontban az anyagdarabka térfogata V(t)=1 (mert így vettük fel…) Ezzel a relatív térfogatváltozás:

$$\frac{V(t) - V(t')}{V(t)} = 1 - \sqrt{III_C(t')}$$

- Térfogat növekedés esetén: $\sqrt{III_C(t')} < 1$
- Térfogat csökkenés esetén: $\sqrt{III_C(t')} > 1$

Térfogatváltozás és formaváltozás

- A reológiai állapotegyenletek megfogalmazásakor célszerű a tiszta formaváltozást és a térfogatváltozást elkülöníteni:

$$Tiszta\ formaváltozás = \overline{\overline{C}}(t') - \left[1 - \sqrt{III_C(t')}\right]\overline{\overline{E}}$$

- A tiszta formaváltozás esetében a térfogat állandó

➔ Tiszta nyújtás: a szögek egymásra merőlegesek maradnak

➔ Nyírás: a szögek is megváltoznak

- A deformációsebesség tenzor is felbontható a térfogatváltozási sebességet ($\Delta\overline{\overline{E}}$) és a formaváltozási sebességet leíró tenzorokra:

$$\Delta\overline{\overline{E}} = \frac{1}{3}(\mathrm{Spur}\ 2\overline{\overline{D}})\cdot\overline{\overline{E}} = \left[\frac{1}{3}\left(2\frac{\partial v_x}{\partial x} + 2\frac{\partial v_y}{\partial y} + 2\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)\right]\overline{\overline{E}} = \left[\frac{2}{3}\left(\nabla\cdot\overline{v}\right)\right]\overline{\overline{E}}$$

- A formaváltozási sebesség ezzel:

$$2\overline{\overline{D^*}} = 2\overline{\overline{D}} - \left[\frac{2}{3}\left(\nabla\cdot\overline{v}\right)\right]\overline{\overline{E}}$$

Térfogatváltozás és formaváltozás

<table>
<tr><td colspan="5">Deformáció</td></tr>
<tr><td colspan="2">Térfogatváltozás</td><td colspan="3">Formaváltozás</td></tr>
<tr><td>Dilatáció</td><td>Kompresszió</td><td>Nyírás</td><td>Nyúlás</td><td>Nyírás+nyúlás együtt</td></tr>
<tr><td colspan="2">A térfogatváltozást a fizikai állapotegyenlet írja le</td><td colspan="3">A formaváltozást a reológiai állapotegyenlet írja le</td></tr>
</table>