

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРЫВА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПЕЙ ЖИДКИХ СРЕД ПОСРЕДСТВОМ МЕХАНОАКТИВАЦИИ

Ю. В. Воробьев¹, Н. В. Воробьева²

*Кафедры: «Теория машин, механизмов и детали машин»,
ФГБОУ ВПО «ТГТУ» (1); «Математический анализ», ФГБОУ ВПО «Московский
государственный машиностроительный университет (МАМИ)», г. Москва (2);
tmm-dm@mail.nnn.tstu.ru*

Ключевые слова и фразы: диссипация; жидкая среда; механоактивация; сдвиговые смещения; энергия.

Аннотация: Обоснована возможность структурной перестройки жидкой среды посредством механического воздействия в условиях диссипации энергии и подкачки энергии со стороны среды. Отмечено, что движение жидкой среды со смещением слоев при определенном уровне рассеяния энергии сопровождается разрывом межмолекулярных связей и увеличением размерности среды в многомерном фазовом пространстве.

Механоактивация жидких сред предполагает разрыв межмолекулярных связей механическим воздействием и образование новых химических связей, отвечающих критериям устойчивости системы: минимуму внутренней энергии системы, энтальпии и свободной энергии.

Устойчивость системы выражается в виде принципа Ле Шателье-Брауна. Как известно, движение несжимаемой баротропной жидкости описывается системой, включающей уравнения Навье-Стокса, состояния и неразрывности. Характер движения выражается числом Рейнольдса [1]. Однако, при изменении структуры жидкой среды, помимо указанных критериев устойчивости, желательно иметь фактор управления получаемой структуры. Таким фактором будем считать диссипативную энергию (энергию рассеяния), которая обусловлена силами сопротивления, пропорциональными скоростям движущихся точек.

Суммарная мощность диссипативных сил равна

$$\sum N_j^D = 2T,$$

где T – функция рассеяния.

Для полной механической энергии имеем

$$\frac{dE}{dt} = -2T$$

и, таким образом, создавая диссипативные силы путем закачки относительно небольшой внешней энергии, можно управлять изменением полной энергии системы в широком диапазоне.

Одним из эффективных способов механоактивации жидкой среды является создание сдвиговых смещений внутри или в приповерхностном слое жидкости. Эти смещения могут возникать при встречном движении струй, при движении

струй с различными скоростями за счет пристенного трения, при движении одной струи внутри другой, так называемой «затопленной струи», при создании вихрей. Все эти явления сопровождаются внутренним трением, которое зависит от давления, относительной скорости, вязкости и плотности жидкой среды. Если рассматривать поток движущейся жидкости в целом, то на преодоление внутреннего и пристенного трения будет расходоваться кинетическая энергия движения потока, зависящая от мощности источника этой энергии.

Поскольку во всех случаях, приводящих к перестройке структуры и изменению свойств жидкой среды в результате механоактивации первостепенную роль играют сдвиговые смещения, то их моделирование является одним из способов выбора оптимального конструктивного варианта. Одно из возможных устройств для механоактивации жидких сред приводится в работе [2].

Будем называть относительное смещение слоев жидкости наплывом. Как следует из рисунка, наплыв образуется, если

$$[x_1 + u(x_1)] - [x_2 + u(x_2)] > 0, \quad (1)$$

где x_1 и x_2 – точки, принадлежащие двум параллельным слоям жидкой среды, движущимся с разными скоростями; $u(x_1)$ и $u(x_2)$ – смещения точек за один и тот же интервал времени.

При $x_2 > x_1$ следует

$$\frac{(x_1 - x_2) + [u(x_1) - u(x_2)]}{x_2 - x_1} > 0$$

или

$$-1 - \frac{\Delta u}{\Delta x} > 0,$$

откуда

$$-u'(x) - 1 > 0,$$

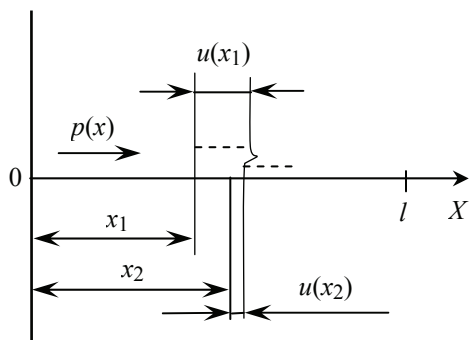
где $\Delta u = u(x_1) - u(x_2)$, $\Delta x = x_2 - x_1$.

Отсюда

$$u'(x) < -1. \quad (2)$$

Найдем $u'(x)$. Для этого воспользуемся интегральным уравнением, которое применяется при решении задач с условиями энергетического равновесия

$$D \int_{\Omega} \frac{p(x)}{x_2 - x_1} dx = u'(x), \quad (3)$$



Образование наплыва при смещении точек x_1 и x_2 , принадлежащих параллельным слоям жидкости

где $p(x)$ – функция, содержащая параметры, вызывающие сдвиговые (касательные) нагрузки; D – параметр, учитывающий в совокупности физико-технические показатели среды; Ω – область, в которой рассматривается движение жидкости.

Учитывая силы инерции в межмолекулярном взаимодействии и внешнем соударении, примем

$$u''(x) = ax + c$$

и следовательно

$$u'(x) = A_2 x_2^2 + A_1 x_2 + A_0. \quad (4)$$

Уравнение (4) является нелинейным и соответствует условию отщепления независимой подсистемы от полной системы динамических уравнений [3], значения A_0, A_1, A_2 включают энергетические параметры жидкой среды.

Уравнение (3) примет вид

$$D \int_0^l \frac{p(x)}{x_2 - x_1} dx = A_2 x_2^2 + A_1 x_2 + A_0, \quad (5)$$

где l – граница участка, на котором действует касательная нагрузка $p(x)$.

Функцию $p(x)$ находим из решения интегрального уравнения (5)

$$p(x) = -\frac{\sqrt{(x_1 + l)(l - x_1)}}{4\pi^2} \int_0^l \frac{a_2 x_2^2 + a_1 x_2 + a_0}{(x_2 - x_1)\sqrt{l^2 - x_2^2}} dx, \quad (6)$$

где постоянная D и значения A_0, A_1, A_2 входят в a_0, a_1 и a_2 ($a = A/D$).

Чтобы оно было ограничено, следует выполнить условие [4]

$$\int_0^l \frac{a_2 x_2^2 + a_1 x_2 + a_0}{\sqrt{l^2 - x_2^2}} dx = 0.$$

Тогда имеем

$$p(x) = -\frac{(a_2 x_1 + a_1)\sqrt{l^2 - x_1^2}}{4\pi}. \quad (7)$$

Из решения уравнений (3) и (7) получим

$$A_2 = \frac{2 \frac{C}{\eta Q} \sqrt{(E - \Delta E)(2E - \Delta E)}}{l^2};$$

$$A_1 = \frac{2 \frac{C}{\eta Q} \Delta E}{l};$$

$$A_0 = -\frac{C}{\eta Q} \sqrt{(E - \Delta E)(2E - \Delta E)},$$

где η – вязкость; Q – расход; E – полная энергия жидкой среды в потоке; ΔE – энергия диссипации; C – безразмерная величина.

Приняв $\sqrt{(E - \Delta E)(2E - \Delta E)} \approx (1,41E - \Delta E)$, подставим значения A_2, A_1 и A_0 в уравнение (4) и получим условие разрыва потока жидкой среды

$$u'(x) = \frac{C}{\eta Q} \left[-2(1,41E - \Delta E) \frac{x^2}{l^2} - 2\Delta E \frac{x}{l} + (1,41E - \Delta E) \right] < -1. \quad (8)$$

После преобразования неравенство (8) имеет вид

$$u'(x) = \frac{C}{\eta Q} \left(-2 \cdot 1,41E \frac{x^2}{l^2} + 1,41E + 2\Delta E \frac{x^2}{l^2} - \Delta E - 2\Delta E \frac{x}{l} \right) < -1$$

или

$$E \left(1,41 - 2 \cdot 1,41 \frac{x^2}{l^2} \right) - \Delta E \left(1 + 2 \frac{x}{l} - 2 \frac{x^2}{l^2} \right) < -\frac{\eta Q}{C}.$$

Приняв за l длину того элемента, который создает локальные сопротивления движению жидкой среды, получим диссипацию энергии в точке x от начала указанного элемента. Дальнейшая задача состоит в выборе конструкции, обеспечивающей полученное значение ΔE .

Выводы. Жидкая среда относится к системам с большим числом степеней свободы, что определяет ее большую подвижность и структурную неустойчивость. Если систему привести в хаотичное состояние, то при достижении критической ситуации, связанной с диссипацией энергии, вызываемой внешним и внутренним трением, а также межмолекулярным обменом энергией, происходит локальный разрыв связей в молекулярных цепях, переходящий в стадию цепных реакций. Жидкость становится сжимаемой, что приводит к ее самоорганизации и структурной устойчивости.

Список литературы

1. Матвеев, А. Н. Молекулярная физика : учеб. пособие / А. Н. Матвеев. – М. : ОНИКС : Мир и Образование, 2006. – 360 с.
2. Воробьев, Ю. В. Основы теории механоактивации жидких сред / Ю. В. Воробьев // Вестн. Тамб. гос. техн. ун-та. – 2013. – Т. 19, № 3. – С. 608 – 613.
3. Шамолин, М. В. Методика анализа динамических систем с переменной диссипацией в динамике твердого тела / М. В. Шамолин. – М. : Экзамен, 2007. – 349 с.
4. Трение и износ в машинах : сб. ст. Сб. 14 / под ред. М. М. Хрущева ; Акад. наук СССР. Ин-т машиноведения. – М. : Изд-во Акад. наук СССР, 1960. – 334 с.

Modeling of Discontinuity of Molecular Chains in Liquid Medium by Means of Mechanical Activation

Yu. V. Vorobyov¹, N. V. Vorobyova²

*Departments: "Theory of Machines and Machine Parts", TSTU (1);
"Higher Mathematics", Moscow State Engineering University (MAMI), Moscow (2);
tmm-dm@mail.nnn.tstu.ru*

Key words and phrases: dissipation; energy; fluid; mechanical activation; shear displacements.

Abstract: This article explains the possibility of restructuring the liquid medium by mechanical impact on conditions of energy dissipation and supply of energy from the

medium. The movement of liquid medium with displacement of layers at a certain level of energy dissipation is accompanied by rupture of intermolecular bonds and increase in the dimension of the medium in the multidimensional phase space.

Modellierung des Bruches der molekularen Ketten der flüssigen Umgebungen mittels der mechanischen Aktivierung

Zusammenfassung: Im Artikel wird die Möglichkeit der strukturellen Umgestaltung der flüssigen Umgebung mittels der mechanischen Einwirkung in den Bedingungen der Dissipation der Energie und des Hinzupumpens der Energie seitens der Umgebung rechtfertigt. Die Bewegung der flüssigen Umgebung mit der Absetzung der Schichten bei einem bestimmten Niveau des Zerstreuens der Energie wird vom Bruch der intermolekularen Beziehungen und der Vergrößerung der Dimension der Umgebung im mehrdimensionalen Phaseraum begleitet.

Modélage de la rupture des chaînes moléculaires des milieux liquides par une activation mécanique

Résumé: Dans l'article est argumentée la possibilité de la restructuration du milieu liquide par une activation mécanique dans les conditions de la dissipation de l'énergie du côté du milieu. Le mouvement du milieu liquide avec un décalage des couches avec un niveau défini de la dissipation de l'énergie est accompagné d'une rupture des liens entre les molécules et de l'augmentation des dimensions du milieu dans un espace multivarié de phase.

Авторы: *Воробьев Юрий Валентинович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Теория машин, механизмов и детали машин», ФГБОУ ВПО «ТГТУ»; *Воробьева Нина Валентиновна* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Математический анализ», ФГБОУ ВПО «Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ)», г. Москва.

Рецензент: *Родионов Юрий Викторович* – доктор технических наук, доцент кафедры «Техническая механика и детали машин», ФГБОУ ВПО «ТГТУ».
