



论文

粉末注射成形喂料的流体动力学

蒋亦民^{①②}, 李益民^①, 彭政^{②*}, 王光耀^①^① 中南大学, 粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083;^② 中南大学, 物理科学与技术学院, 长沙 410083

* 联系人: E-mail: pz177@yahoo.com.cn

收稿日期: 2010-12-08; 接受日期: 2011-03-17; 网络出版日期: 2011-09-16

粉末冶金国家重点实验室开放研究基金资助项目

摘要 本文通过合并近年来报道的高聚物和颗粒物质的流体力学理论, 提出了一个描述其混合物 — 粉末注射成形喂料宏观力学行为的新理论. 与传统的喂料非牛顿流体力学相比, 该理论多出了颗粒温度和两个弹性应变张量 (分别表征高聚物和颗粒物组元) 等状态变量, 能全面描述喂料中出现的颗粒骨架和高聚物的弹性效应. 对平面定常剪切流动情形, 它简化为表观剪切黏度性质与喂料一致的非牛顿流体力学方程, 表明新理论包含了传统喂料理论, 因此可用于研究其适用前提, 和包括法向应力差系数在内的流变学参数. 本工作除有助于研究复杂多相系统连续力学方程的建立方法外, 还将对粉末注射成形领域关注的喂料动力学分析提供一条新途径.

关键词 粉末注射成形, 喂料, 颗粒物质, 流体动力学**PACS:** 45.70-n, 46.05+b, 05.70.Ln

粉末注射成形 (Powder Injection Molding 或 PIM) 是一种源于传统塑料成形的现代冶金新技术, 其工艺过程大致为先将金属或陶瓷粉与高聚物黏结剂充分混合制成喂料 (feedstock), 再用注塑机将喂料注射至模具中得到坯, 然后用脱脂工艺除去坯中的黏结剂, 最后对它作烧结给出最终金属或陶瓷制品^[1,2]. 与常规粉末冶金技术相比, PIM 的主要特色是使用黏结剂来改善粉末在模具中的流动效果和成形能力, 以解决几何形状复杂的零件在坯制作上的困难. 为辅助研发高质量坯制作工艺, PIM 领域开展了许多有关喂料动力学的分析计算工作^[2], 诸如缺陷的形成^[3]、偏析^[4]、边界层^[5,6]、振动^[7]、剪切速率和温度^[8]对流动的影响, 等等, 期望能从理论上理解和精密掌控喂料在复杂模具中注射成形时的运动行为. 这

是一种速度跨度达 10 m/s 的非稳恒运动 (从刚注入时的高速到几乎静止), 流场和力场高度空间非均匀, 甚至密度场、温度场也不均匀从而影响着喂料的物性. 因此用来分析喂料流动的流体动力学方程应该在相当宽的频率和波长范围内有效, 这对有关理论是一个很高的要求和挑战. 另外喂料的颗粒装载率通常在 40%~60% (体积比) 之间, 属于可能发生显著颗粒效应的材料. 如用半径相同球形颗粒的最松无规堆积 (The Random Loosest Packing) 分数 54% 和最紧无规堆积 (The Random Closest Packing) 分数 65%^[9] 估算, 喂料中的颗粒有可能通过相互之间的固-固弹性接触形成力链网, 或弹性骨架^[10]. 这类接触堆积物体的力学性质至今仍未被人们彻底认识, 是当前颗粒物理和力学的一个研究前沿^[11]. 除骨架外, 高聚物在

引用格式: 蒋亦民, 李益民, 彭政, 等. 粉末注射成形喂料的流体动力学. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2011, 41: 1144–1155

Jiang Y M, Li Y M, Peng Z, et al. A hydrodynamic theory for feedstock in powder injection molding (in Chinese). Sci Sin Phys Mech Astron, 2011, 41: 1144–1155, doi: 10.1360/132010-1203

喂料颗粒间的填充可以呈饱和或非饱和状态(即全部或部分填充),与岩土力学中的饱和土或非饱和土有相似的结构. 尽管土力学对这类多相流系统进行了长时间的研究,有关非饱和土的力学分析至今仍是一个没有完全解决的问题^[12]. 综上所述可以看到,深入研究喂料的力学基础不只是 PIM 领域的一个重要理论课题,同时也是一个对颗粒物理和岩土力学都有一定科学意义的研究方向.

目前 PIM 领域中有关喂料充填过程的连续力学分析计算大都基于非牛顿流体力学方程^[2,8]. 该方法的主要思想是将喂料的所有材料力学性质都汇总到一个黏度函数模型中,包括颗粒骨架的弹性与屈服、颗粒的涨落运动、高聚物的黏性和弹性、颗粒效应、等等^[10]. 在这个思想构架里,喂料理论的发展被局限在黏度模型的改善上. 近年来 PIM 领域的一些研究工作表明,用简单的幂率黏度模型就能成功描述喂料的许多流动行为,黏度因此成为 PIM 工艺研究中表征喂料力学性能的唯一材料模型和参数^[8]. 但值得注意的是从物理概念上看,黏度并不是描述弹性的最一般方法,因为它不能定量地表征材料的弹性势能及其对应力的贡献程度^[13]. 由于没有描述弹性所必须的应变张量,非牛顿流体力学和黏度模型顶多只是喂料弹性的一个等效或近似描述. 为更好地描述弹性和澄清它与黏度之间的关系,我们将在本文提出一组全新的喂料流体力学理论,明确地引入描述颗粒骨架和高聚物弹性的应变张量,以及描述颗粒无规涨落运动强度的变量. 这是一个从物理角度看内容完整的宏观喂料理论,并在一定情况下(如定常流动)可约化为非牛顿流体模型,因此原则上能涵盖所有那些被后者成功描述的喂料流变现象,可用于黏度模型的推导和其适用前提条件的研判. 由于在弹性和其它颗粒效应的处理方式上突破了非牛顿流体框架的限制,它能更为准确和细致地描述喂料运动,在黏度概念外的更大范围内研究和表征喂料的材料性质,特别是对出现明显弹性骨架的高粉末装载率时的 PIM 分析. 与非牛顿流体力学比较,这个理论扩充的代价是偏微分方程的数目、材料系数、和所涉及的物理概念都有所增加,但由于方程和变量都有明确物理意义和计算公式,表征弹性和颗粒效应的参数都有具体分工,这些复杂性不会带来概念和条理上的混

乱. 另外,由于近年来计算技术的快速发展,数值处理这些方程已经不再是问题.

文中出现的所有物理变量都是实验室惯性系的时空坐标 t, x, y, z 的函数,即欧拉表象下的场变量. 另外流体力学属于宏观理论,本文中的物理量和方程都是宏观意义下的,它们仅描述波长远大于邻近颗粒间距的长波动力学行为,不能给出诸如单个粉末颗粒运动轨迹这样的细观信息. 对喂料这样的复杂材料系统,宏观理论亦会相应地复杂和繁琐,其中的材料模型和参数值一般不能用例如“从头计算(ab initio)”这样的细观理论计算出来,只能根据它的一些宏观测量数据来判定. 本文将局限于纯宏观内容,不考虑诸如单个颗粒的细观性质与宏观材料模型和参数之间有何关系这样的、涉及“细观-宏观”是如何联系的理论问题.

1 高聚物和颗粒物的流体力学方程

最近十多年来,有关高聚物和颗粒物的流体力学研究取得了一些新进展. 由于将从这些工作出发建立喂料理论,我们先对它们作些简单介绍,详细可见文献^[14~17]和^[18~21]. 注意文中的“流体力学”泛指从牛顿流体力学延伸出来的连续力学理论,其应用对象并不局限于普通气体和液体,还包括诸如晶体、固体、颗粒物质、等非流体材料^[22]. 它通常由一般方程和材料方程两部分组成:前者指守恒方程、熵增加方程、各种热力学关系等,后者指热力学特征函数和描述耗散过程的迁移(或输运)系数表达式,都是代数关系. 值得强调的是,作为基本物理原理的数学表述,一般方程都是被严格遵守和不允许更改的. 材料方程可随不同材料而变,是流体力学理论建模的具体对象,并可根据实验数据进行修改和完善. 有时同一种材料有多种不同模型公式,很难判断它们的优劣.

1.1 守恒方程和熵增加方程

利用质量、动量、能量的守恒性质,和熵只能产生不能消失的热力学第二定律,可得下列对任何材料都普遍适用的偏微分方程(文中脚标 i, j, l, k, m, n 等取

空间坐标 x, y, z , 当重复出现时自动求和, t 是时间):

$$\partial_t \rho + \nabla_k \rho v_k = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t m_i + \nabla_k (\rho v_i v_k + \sigma_{ik}) = \rho g_i, \quad (2)$$

$$\partial_t w + \nabla_k Q_k = \rho v_k g_k, \quad (3)$$

$$\partial_t s + \nabla_k (s v_k - f_k) = R/T \geq 0, \quad (4)$$

其中 ρ, m_i, w, s 分别是单位体积的质量、动量、能量、熵, $\rho v_k, (\rho v_i v_j + \sigma_{ik}), Q_k, (s v_k - f_k)$ 是它们的流量, 即单位时间流过单位面积的质量、动量、能量、熵. 这里按惯例定义速度 v_k 为质量流除以密度 ρ , 将熵流分成了由于质量流动导致的熵流 $s v_k$ 和其他耗散过程 (如热传导) 导致的熵流 $-f_k$ 两部分, 将动量流也分成来自质量流动的贡献 $\rho v_i v_k$ 和其他贡献 σ_{ik} 两部分. 由于动量流就是力, σ_{ik} 常称作应力张量. 另外来自重力的影响在方程 (2) 和 (3) 的右边单独给出, g_k 是重力加速度, 因此这里的动量、能量和它们的流中不包括重力场的贡献. 方程 (4) 右边的 T 是温度, R 是热产生率 (单位体积材料在单位时间产生的热), R/T 即是熵产生率.

方程 (1)~(4) 中的动量和应力满足

$$m_i = \rho v_i, \quad (5)$$

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ki}. \quad (6)$$

注意 (5) 式只对没有电磁场的情况有效, 表示动量完全由质量的运动给出. 方程 (6) 表示应力必须是对称张量, 是根据角动量守恒和相对论原理得出的一般性质^[13]. (1)~(6) 式都是一般方程, 对包括高聚物、颗粒物质、喂料在内的任何材料都普遍成立.

1.2 高聚物流体动力学

上小节介绍的守恒和熵增加方程显然不构成闭合方程组, 因此还需要加入热力学关系和材料模型, 才能得到完备的流体动力学方程组. 热力学关系也是不涉及材料具体特性的一般方程, 但要针对材料类别, 视表征其平衡热力学状态的完备独立变量集合情况而定. 牛顿流体 (如空气、水) 是状态变量数目最少的一类材料, 静止时其平衡状态用两个标量就可表征, 如密度 ρ 和熵 s . 弹性体 (如合金、晶体) 的状态变量除 ρ 和 s 外, 还需要一个称作应变的 3×3 对称

张量 U_{ik} , 描述与弹性相关的势能和力. 由于状态变量的增加, 它的热力学构架也将相应地复杂和繁琐, 但基本做法思路是类似的.

标准热力学构架中含有一个描述材料平衡态性质的热力学势函数, 和许多描述耗散性质的迁移 (或称输运) 系数 (Transport Coefficient). 它们都是状态变量的函数, 具体形式因材料的不同而异, 需要根据材料性质建立专门模型, 因此称材料关系. 实际上, 所谓建立某材料的流体动力学理论, 就是指合理或近似地揭示它的这些材料关系, 因为一般方程都是不可变更的物理原理, 是不再需要去“创建”的内容. 有些简单物质的材料关系可从物质结构组元间的相互作用模型出发, 用分子运动论或动理学 (kinetics) 来理论推导, 比如稀薄气体的状态方程. 但对复杂凝聚态材料, 它们主要是通过各种实验数据, 逐步摸索而得.

高聚物常被认为属于液体一类的材料, 但这并不十分正确, 至少对频率 f 较高的快速动力学过程不合适. 实验表明, 高聚物对足够高频率变化的外力一般作弹性响应. 严格地讲, 普通固体和高聚物都是有弹性应变和弹性势能的材料, 它们的差别主要反映在弹性的耗散行为上: 前者的弹性基本不耗散, 也就是说没有随时间的弛豫或松弛现象, 属于有无限长弹性寿命的物质. 后者的弹性寿命一般是有限的, 如果没有激发机制来维持, 弹性应变和势能将将在有限时间 $\tau_{\text{高聚物}}$ 里弛豫或松弛掉. 对 $1/f \ll \tau_{\text{高聚物}}$ 的快速过程, 弹性来不及弛豫, 因此会表现得像普通固体, 但对 $1/f \gg \tau_{\text{高聚物}}$ 的慢速过程, 由于有充足时间弛豫掉弹性, 其表现将基本与液体类似, 能做大塑性变形或流动. 基于这个事实, 文献 [14~17] 的作者们最近提出了一个全新的高聚物流体动力学理论构架, 其核心思想是认为高聚物属于弹性应变的寿命有限的弹性体, 在一定的时间里它能像普通固体那样具备抗剪能力. 这种只在有限时间里表现弹性的材料又叫“暂态弹性行为 (Transient Elastic Behavior)”材料, 需要像弹性体那样用 $\{\rho, s, U_{ij}\}$ 表征其热力学状态. 注意这个将高聚物视为暂态弹性体的理论在基本观点上不同于传统的, 将其看做没有 U_{ij} 的非牛顿流体理论. 考虑到 PIM 中会出现快速过程, 本文将用这个暂态弹性理论来处理高聚物. 下面将先介绍弹性体的一般热力学方程, 然后再讨论适合高聚物的材料模型.

1.2.1 弹性体的热力学关系

对局域处于热力学平衡态的材料, 其宏观状态可完全由守恒量 and 对称破缺变量表征^[22]. 这是现代凝聚态物理中的一个基本原理, 也是流体动力学中确定材料状态变量集的基础. 按照这个规则进行分类, 流体属于没有对称破缺的材料, 在局域静止坐标系下的平衡状态可用质量和能量 $\{\rho, w\}$ 两个守恒量表征 (在实验室坐标下还要加入动量). 如果流体的空间平移对称性发生破缺, 状态变量集中需加入相应的对称破缺变量: 弹性应变 U_{ij} . 它使材料变为能抵抗剪切力的固体, 同时支持横声波运动模式 (一种 U_{ij} 的低能波动运动, 物理中又称 Goldstone 模). 下面介绍局域静止坐标系下, 以 $\{\rho, w, U_{ij}\}$ 为状态变量集的固体热力学.

通常习惯用熵取代能量, 将固体的平衡状态变量集取为 $\{\rho, s, U_{ij}\}$. 这时, 能量 w 或自由能 $\Phi = w - sT$ 将是这些状态变量的函数, 并满足全微分关系:

$$d\Phi = \mu d\rho - s dT - \Pi_{ij} dU_{ij}, \quad (7)$$

其中 μ 和 Π_{ij} 分别是 ρ 和 U_{ij} 的热力学共轭量, 即化学势和弹性应力. 弹性应变 U_{ij} 的运动方程由连续力学中广为熟悉的几何方程给出, 外加一项表示弹性耗散的项 X_{ij}^D :

$$d_t U_{ij} + U_{ik} \nabla_j v_k + U_{jk} \nabla_i v_k = v_{ij} + X_{ij}^D, \quad (8)$$

其中记号 $d_t \equiv \partial_t + v_k \nabla_k$ 是物质导数, 对称张量 $v_{ij} \equiv (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i)/2$ 是速度的空间导数, 表示变形率. 对没有任何耗散的理想固体, $X_{ij}^D = 0$, 上式化为纯几何方程, 意味着 U_{ij} 就是材料的几何应变 $\epsilon_{ij} \sim \int v_{ij} dt$. 注意完全弹性只是近似或理想情况, 实际固体在变形时多少会有耗散伴随, 变形 ϵ_{ij} 含弹性和塑性两部分. 比如晶体中由缺陷作扩散移动造成的变形就不是弹性的, 需要 $X_{ij}^D (\neq 0)$ 项描述. 这时弹性应变 $U_{ik} \neq \epsilon_{ij}$, 相差为塑性应变^[22]. 扩散型耗散导致的塑性往往非常微弱, 至少对普通固体而言可忽略不计. 过渡弹性材料的 X_{ij}^D 主要来自弛豫型耗散, 它能导致大塑性变形、甚至流化行为, 使材料变成“流动的固体”.

根据一般弹性理论, 由弹性应变 U_{ij} 给出的应力贡献是 $\Pi_{ij} - 2\Pi_{ik} U_{kj}$. 它与流体力学压强 p_1 和黏滞应

力 σ_{ij}^D 一道给出高聚物的应力公式:

$$\sigma_{ij} = p_1 \delta_{ij} + \Pi_{ij} - 2\Pi_{ik} U_{kj} - \sigma_{ij}^D, \quad (9)$$

$$p_1 = \rho\mu - \Phi, \quad (10)$$

这里 (10) 式是流体力学压强的热力学公式. 公式 (1)~(10) 式中的 $f_k, \sigma_{ij}^D, X_{ij}^D$ 都是与耗散有关的项, 统称耗散流通量 (Dissipative Flux) 或耗散流. 由微分关系 (7) 和熵最大原理可以推得驱动这些耗散流的热力学力分别是 $\nabla_k T, v_{ij}, \Pi_{ij}$, 又称耗散力 (dissipative force). 耗散流和耗散力之间存在着下面的 Onsager 关系:

$$\begin{pmatrix} f_i \\ \sigma_{ij}^D \\ X_{ij}^D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik}^{\text{高聚物}} & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^{\text{高聚物}} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{ijkl}^{\text{高聚物}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k T \\ v_{kl} \\ \Pi_{kl} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

其中右边的方矩阵是迁移系数: κ 是导热率, η 是黏滞系数或黏度. 这里忽略了非对角系数, 即假设耗散流之间没有耦合. 注意迁移系数一般与状态有关, 是态变量 $\{\rho, s, U_{ij}\}$, 或它们的共轭量的函数. 热产生率 R 是这些耗散流与耗散力乘积的和:

$$R = f_k \nabla_k T + \sigma_{ij}^D v_{ij} + X_{ij}^D \Pi_{ij}, \quad (12)$$

如将 Onsager 关系 (11) 代入其中, 可将 R 表示成关于耗散力的二次多项式形式. 由于热产生不能为负, 这个二次多项式必需正定, 也就是说它的系数矩阵, 即方程 (11) 中的迁移系数矩阵必需是正定的.

1.2.2 高聚物的材料模型

从前面介绍的守恒方程和热力学关系不难得到这样一个结论, 即建立某材料的流体动力学理论实际上就是确定它的自由能和迁移系数公式. 它们包含所有的材料参数, 具体形式与材料有关. 文献 [15] 研究了高聚物的这些材料关系, 并建议用下面的, 经过修正后的 Mooney 橡皮弹性能:

$$\Phi_{\text{高聚物}} = \Phi_0(\rho, T) + \Phi_{\text{弹}}(U_1) + \Phi_{\text{弹}}(U_2) + \Phi_{\text{弹}}(U_3), \quad (13)$$

其中函数

$$\Phi_{\text{弹}}(U) = C_1 \left(\frac{1}{\sqrt{1-2U}} - 1 \right)^2 + C_2 \left(1 - \sqrt{1-2U} \right)^2, \quad (14)$$

作为高聚物的自由能公式. 这里 $\Phi_0(\rho, T)$ 是没有弹性应变时的自由能, $C_{1,2}$ 是材料参数, 符号 U_1, U_2, U_3 是应变 U_{ij} 的 3 个本征值, 它们与下面三个应变不变量:

$$\Gamma \equiv -U_{kk}, \quad \Gamma_2 \equiv \sqrt{U_{ij}^* U_{ij}^*}, \quad \Gamma_3 \equiv \sqrt[3]{U_{ij}^* U_{jk}^* U_{ki}^*} \quad (15)$$

($U_{ij}^* \equiv U_{ij} - U_{kk}\delta_{ij}/3$ 是偏应变) 之间的关系是

$$U_1 = \frac{2\Gamma_2}{\sqrt{6}} \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin \frac{\sqrt{6}\Gamma_3^3}{\Gamma_2^3} - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}\Gamma, \quad (16)$$

$$U_2 = -\frac{2\Gamma_2}{\sqrt{6}} \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin \frac{\sqrt{6}\Gamma_3^3}{\Gamma_2^3}\right) - \frac{1}{3}\Gamma, \quad (17)$$

$$U_3 = \frac{2\Gamma_2}{\sqrt{6}} \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin \frac{\sqrt{6}\Gamma_3^3}{\Gamma_2^3} + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}\Gamma, \quad (18)$$

注意由 (15) 可以证明 $6\Gamma_3^6 \leq \Gamma_2^6$, 意味着这里的 $\arcsin$ 有意义, 值域取 $[-\pi/2, \pi/2]$. 将 (16)~(18) 带入 (13), 可得高聚物的自由能模型 $\Phi_{\text{高聚物}}(\rho, T, \Gamma, \Gamma_2, \Gamma_3)$, 或利用 (15) 将其写成 $\Phi_{\text{高聚物}}(\rho, T, U_{ij})$.

高聚物和颗粒物都不是普通固体, 它们的弹性都有弛豫或松弛现象, 因此 X_{ij}^D 是不可忽略的重要耗散流, 它能使弹性应变 U_{ik} 远远小于几何变形 ϵ_{ik} , 即材料发生大塑性变形. 描述弹性松弛的最简单方法是取下面的弛豫时间模型^[14~17]:

$$X_{ij}^D = -\frac{U_{ij}^*}{\tau_{s, \text{高聚物}}} - \frac{U_{kk}\delta_{ij}}{\tau_{v, \text{高聚物}}}, \quad (19)$$

其中 $\tau_{s, v}$ 分别是偏应变 U_{ij}^* 和体应变 (又称球应变) U_{kk} 的弛豫时间, 或寿命. 黏滞力可取通常的牛顿定律:

$$\sigma_{ij}^D = 2\eta_{\infty} v_{ij}, \quad (20)$$

其中 η_{∞} 是黏度. 注意与非牛顿流体理论不同, 这里的黏度 η_{∞} 是与速度导数 v_{ij} 无关的系数, 弹性应变按照弛豫时间模型松弛, 所有耗散流与耗散力之间都满足 Onsager 线性关系. 在非牛顿流体理论中, 没有弹性内容, 但黏度与 v_{ij} 有关, 黏滞力 σ_{ij}^D 与驱动它的耗散力 v_{ij} 之间不是线性关系, 属于偏离 Onsager 热力学的做法.

1.3 颗粒固体的流体动力学

静态颗粒物质可稳定地处于有限剪切力状态, 能传播横声波, 因此具有抗剪切能力, 属于弹性固体类

材料. 但作为大量离散颗粒的堆积物, 它的弹性性质和动态行为与普通固体有很大差别. 颗粒间的相互作用为固-固接触力, 或碰撞力 (如果接触时间特别短的话), 动态接触或碰撞时总是伴有热损失, 如果没有持续能量注入, 它们的动能会因此快速损失而进入静态. 颗粒运动速度一般有平均和涨落两部分, 前者由流体力学速度 v_i 描述, 后者是围绕它的脉动型运动, 有很强的无规性. 不难想象, 假设没有热损失的话, 颗粒的涨落运动会由于碰撞进入像气体分子运动那样的、完全无规的高斯分布状态. 这提示我们可以用一个类似熵或温度的标量: s_g 或 T_g 来描述与颗粒涨落相关的热力学. 该做法至少可追溯到 30 年前 Haff 提出的稀疏和高度激发颗粒气体的流体动力学方程^[23]. 注意由于热损失, 这个颗粒层次上的熵或温度, 又称颗粒熵或颗粒温度, 与 s 和 T 比较有一个很大的不同点: 它们并不是严格的平衡态热力学变量, 而是偏离局域平衡态时才有的弛豫变量, 颗粒熵 s_g 除增加外, 还允许通过向熵 s 转移的方式减少. 近年来的一些研究结果显示, 这个颗粒物质的双熵图像 (见图 1) 对理解高密度和低速蠕动颗粒固体也至关重要, 能成功描述一系列颗粒固体特有的耗散和塑性行为^[18~21]. 这些颗粒效应在喂料运动中都可能发生.

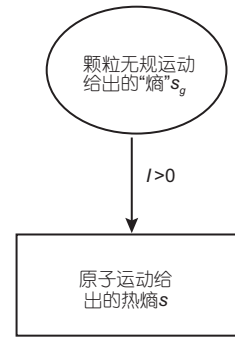


图 1 颗粒熵向热熵的弛豫

I 是弛豫率 (即单位体积颗粒材料的 s_g 在单位时间里的减少量).

注意它必须大于零, 因为没有相反的弛豫过程

Figure 1 Relaxation of granular entropy to heat. I is the relaxation rate (namely, decreasing of granular entropy per unit time and volume). Note that because its reversed process is not allowed, I must be positive.

因此从固体到颗粒固体的关键是引入 and 处理好那些与 s_g 有关的效应. 计入 s_g 这个颗粒固体特有的

独立变量, 我们有状态变量集 $\{\rho, s, u_{ij}, s_g\}$, 对应的热力学自由能全微分为

$$d\Phi = \mu d\rho - s dT - \pi_{ij} du_{ij} - s_g dT_g. \quad (21)$$

它比普通固体多出一与 $s dT$ 类似的项 $s_g dT_g$. 弹性应变 u_{ij} 的运动方程与前面的方程 (8) 类似:

$$d_t u_{ij} + u_{ik} \nabla_j v_k + u_{jk} \nabla_i v_k = v_{ij} + Y_{ij}^D, \quad (22)$$

最后一项 Y_{ij}^D 是它的耗散流. 颗粒熵 s_g 满足与 (4) 式类似的运动方程:

$$\partial_t s_g + \nabla_k (s_g v_k - f_k^g) = R_g / T_g - I, \quad (23)$$

注意这里除“颗粒熵扩散流” f_k^g 和“颗粒热产生率” $R_g \geq 0$ 外, 还多出了一个反映 s_g 向 s 衰变的量 I , 可解释为单位体积颗粒物质在单位时间里由于碰撞和摩擦发热而造成的颗粒熵减少. 显然 I 将贡献 IT_g 的热, 颗粒固体的热产生率为

$$R = f_k \nabla_k T + \sigma_{ij}^{(1)} v_{ij} + Y_{ij}^D \pi_{ij} + IT_g, \quad (24)$$

它的前三项分别是与热传导、黏滞、弹性松弛伴随的发热率. 对应这个 R 的 Onsager 关系是

$$\begin{pmatrix} f_i \\ \sigma_{ij}^{(1)} \\ Y_{ij} \\ I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik}^{\text{颗粒}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^{\text{颗粒}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{ijkl}^{\text{颗粒}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k T \\ v_{lk} \\ \pi_{lk} \\ T_g \end{pmatrix}, \quad (25)$$

注意这里驱动 I 的耗散力是 T_g , 因为只有出现颗粒涨落运动 ($T_g \neq 0$) 时, 才有 s_g 向 s 衰变的过程 ($I \neq 0$) 发生. 颗粒热产生率 R_g 也可用同样的 Onsager 方法处理. 如果只考虑 s_g 的扩散和黏滞过程, 有

$$R_g = f_k^g \nabla_k T_g + \sigma_{ij}^{(2)} v_{ij} \quad (26)$$

和

$$\begin{pmatrix} f_i^g \\ \sigma_{ij}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik}^g & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k T_g \\ v_{lk} \end{pmatrix}, \quad (27)$$

其中 κ_{ik}^g 和 η_{ijkl}^g 分别是颗粒层次的“热”导率和黏度系数. 由于黏性应力有 $\sigma_{ij}^{(1)}$ 和 $\sigma_{ij}^{(2)}$ 两项, 颗粒固体的应力为

$$\sigma_{ij} = p_1 \delta_{ij} + \pi_{ij} - 2\pi_{ik} u_{kj} - \sigma_{ij}^{(1)} - \sigma_{ij}^{(2)}, \quad (28)$$

其中流体压强 p_1 的表达式与 (10) 式一样. 在 Onsager 关系 (25) 和 (27) 中, 我们忽略了所有非对角迁移系数.

热力学关系式 (21)~(28), 加上 1.1 小节的守恒方程和熵增加方程, 给出了颗粒固体流体力学的一般方程组. 下面介绍闭合它们材料关系, 即文献 [18~21] 提出的自由能和迁移系数模型. 尽管还相当简陋, 它们能在一定程度上概括一系列颗粒固体的复杂特性, 包括非线性弹性行为、屈服、静力分布、塑性蠕变和流动、体内和表面声波性质、振动致密现象, 以及各种三轴测试结果, 如临界状态, 循环加载下的棘齿效应, 一些复杂的吸引子, 等等. 该自由能模型是

$$\Phi_{\text{颗粒}} = \frac{\rho}{m_1} f_1 + B \sqrt{\Delta} \left(\frac{2}{5} \Delta^2 + \frac{u_s^2}{\xi} \right) - \frac{\rho b}{2} T_g^2, \quad (29)$$

其中 m_1 和 $f_1(T)$ 分别是单个颗粒的平均质量和自由能, 符号

$$\Delta \equiv -u_{kk}, u_s \equiv \sqrt{u_{ij}^* u_{ij}^*} \quad (30)$$

是体弹和剪弹应变的强度, $u_{ij}^* \equiv u_{ij} - u_{kk} \delta_{ij}/3$ 是偏应变, B, ξ, b 是材料参数. 描述弹性弛豫的耗散流 Y_{ij}^D 也可以用弛豫时间模型:

$$Y_{ij}^D = -\frac{u_{ij}^*}{\tau_s^{\text{颗粒}}} - \frac{u_{kk} \delta_{ij}}{\tau_v^{\text{颗粒}}}. \quad (31)$$

但需要特别注意的是只有当颗粒出现涨落运动时, 即 s_g 或 $T_g \neq 0$ 时, 弹性寿命 $\tau_{s,v}^{\text{颗粒}}$ 才取有限值. 一旦静止了, $T_g = 0$, 颗粒固体的弹性将长期存在, 意味着 $\tau_{s,v}^{\text{颗粒}} \sim \infty$. 这个行为可以简单地用模型:

$$\frac{1}{\tau_{s,v}^{\text{颗粒}}} = \lambda_{s,v}^{\text{颗粒}} T_g \quad (32)$$

反映, 其中 $\lambda_{s,v}^{\text{颗粒}}$ 是与 T_g 无关的材料参数. 高聚物的弹性总是暂时的, 普通固体的弹性总是永久的, 而颗粒固体的弹性在静止时是永久的, 在 T_g 的激发下变成暂时的, 可以说介于前两者之间.

通常 $\sigma_{ij}^{(1)}$ 和 f_i^g 可忽略, 但颗粒层次的黏性 $\sigma_{ij}^{(2)}$ 是必须计入的迁移过程, 因为任何非均匀流动总会致颗粒熵的产生, 这是对 R_g 的主要贡献项, 见 (26). 可以用最常见的方法处理 (27) 式中的黏度 η_{ijkl}^g , 即取

$$\sigma_{ij}^{(2)} = \eta_2 v_{ij}^* + \zeta_2 v_{kk} \delta_{ij}, \quad (33)$$

注意这个黏滞也是由涨落运动引起的动量输运过程, $T_g = 0$ 时它也为零. 这个性质可以用假设 (33) 中的两个黏度比例与 T_g 的模型:

$$\eta_2 = \eta_g T_g, \zeta_2 = \zeta_g T_g \quad (34)$$

来简单描述 (η_g 和 ζ_g 是与 T_g 无关的材料参数). 将 (33) 代入 (26) 得颗粒熵产生率:

$$R_g/T_g = \eta_g v_{ij}^* v_{ij}^* + \zeta_g v_{kk}^2. \quad (35)$$

颗粒熵的衰减率由迁移系数 γ 决定, 它与 T_g 的变化关系可简单地用泰勒级数展开的方法处理, 在线性近似下有

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_1 T_g, \quad (36)$$

其中 γ_0 和 γ_1 是与 T_g 无关的材料参数.

材料关系 (29)~(36) 式可以在实验数据的引导下进一步改善. 原则上模型中的所有材料参数都可以随密度变化, 但在初次分析时, 可忽略这个复杂性.

2 喂料的流体动力学

如前言所述, 喂料是高聚物和颗粒的混合物. 我们可以很方便地合并不同组元的流体动力学方程, 得到多元系统的方程. 这在物理领域里很常见, 例如双流体超流方程、双温度等离子体模型等. 能够直接合并是流体动力学方法在处理混合物时的一个重要优势. 本节将用合并上节介绍的高聚物和颗粒固体流体动力学的方程组, 得到喂料的完备方程组. 注意类似的做法在本构理论中一般没有, 如不能用合并颗粒物质弹塑本构关系和高聚物非牛顿黏度本构关系的办法来建立喂料的本构方程.

显然 1.1 节中的方程 (1)~(6) 都将保持有效, 只是其中的物理量应该理解为混合物的守恒量和它们的流量, s 是混合物熵密度, R 是它的增加率. 因此需要组合的只是热力学关系. 首先是状态变量集. 如果不考虑偏析, 组元间的相对流动和温度差, 喂料的状态变量集可取为 $\{\rho, s, U_{ij}, u_{ij}, s_g\}$, 相应的自由能全微分是

$$d\Phi = \mu d\rho - s dT - \Pi_{ij} dU_{ij} - \pi_{ij} du_{ij} - s_g dT_g. \quad (37)$$

这里 μ 和 T 是喂料的化学势和温度. 如果在状态变量集中再引入组元间的质量差和熵差, 可进一步建

立含偏析和温度差的喂料理论. 本文将忽略这个复杂性, 仅限于考虑有两个弹性应变的“双弹性”理论.

状态变量 $\rho, s, U_{ij}, u_{ij}, s_g$ 的运动方程也与前面的一样, 即方程 (1), (4), (8), (22), (23). 与发热有关的耗散过程可从 (12) 和 (24) 式看出, 有喂料的发热率:

$$R = f_k \nabla_k T + \sigma_{ij}^D v_{ij} + X_{ij}^D \Pi_{ij} + Y_{ij}^D \pi_{ij} + I T_g. \quad (38)$$

相应的 Onsager 关系为

$$\begin{pmatrix} f_i \\ \sigma_{ij}^D \\ X_{ij}^D \\ Y_{ij}^D \\ I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{ik}^{\text{喂料}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{ijkl}^{\text{喂料}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{ijkl}^{\text{高聚物}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{ijkl}^{\text{颗粒}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \nabla_k T \\ v_{lk} \\ \Pi_{lk} \\ \pi_{lk} \\ T_g \end{pmatrix}, \quad (39)$$

这里忽略了非对角迁移系数. 另外对每个组元, 热传导和黏滞过程都由同样的耗散力 $\nabla_k T$ 和 v_{lk} 驱动, 因此被合并到一起. 颗粒熵的增加率和相应的 Onsager 关系仍由 (26) 和 (27) 式给出.

混合物的应力张量含下面三项贡献:

$$\sigma_{ij} = p_1 \delta_{ij} + \sigma_{ij}^{\text{弹}} - \sigma_{ij}^D, \quad (40)$$

其中 p_1 是用热力学公式 (10) 定义的流体静压强, σ_{ij}^D 是 Onsager 关系 (39) 中的黏滞应力. $\sigma_{ij}^{\text{弹}}$ 是弹性应力, 包括高聚物的弹性应力和颗粒物的弹性应力两部分:

$$\sigma_{ij}^{\text{弹}} = \Pi_{ij} - 2\Pi_{ik} U_{kj} + \pi_{ij} - 2\pi_{ik} u_{kj}, \quad (41)$$

方程 (37)~(41) 即是高聚物和颗粒物流体静力学理论合并后得到的喂料一般方程.

下面考虑喂料的材料关系模型. 对自由能, 可不失一般地将其写成各组元自由能之和, 加上相互作用能 V :

$$\Phi = \Phi_{\text{高聚物}} + \Phi_{\text{颗粒}} + V, \quad (42)$$

其中 $\Phi_{\text{高聚物}}$ 是与 u_{ij}, s_g 无关的高聚物自由能 (13) 和 (14) 式, $\Phi_{\text{颗粒}}$ 是与 U_{ij} 无关的颗粒自由能 (29) 式. 相互作用 v 是所有喂料状态变量的函数. 如果假设高聚物弹性 U_{ij} 与颗粒骨架弹性 u_{ij} 之间没有能量上的耦合, $v = 0$. 这个解耦近似可看做最简单的喂料自由能模型, 它直接利用上节介绍的材料模型处理喂料, 避免了建模困难, 并且易于计算分析. 如依据实验数据对模型参数值做适当调整, 往往能初步描述混合物的许多动力学行为. 在物理中这类参数值调整一般称作“重整化”, 例如研究金属电输运性质时, 可忽略复杂的电子之间, 及其与原子核之间的库仑力, 将载流电子看做质量“重整化”后的自由电子. 下面我们将仅局限于喂料的解耦近似, 至于相互作用 v 和与其相关的复杂效应的计入, 需要今后在实验数据的引导下逐步研究. 值得指出的是, 组元之间的耦合效应只在材料关系中出现, 反映建模的细致程度, 流体动力学的一般方程形式不受它们的影响.

在解耦近似下, 喂料的热传导系数和黏度也是高聚物组元和颗粒物组元的相应系数之和:

$$\kappa_{ik}^{\text{喂料}} = \kappa_{ik}^{\text{高聚物}} + \kappa_{ik}^{\text{颗粒}}, \quad (43)$$

$$\eta_{ijkl}^{\text{喂料}} = \eta_{ijkl}^{\text{高聚物}} + \eta_{ijkl}^{\text{颗粒}}, \quad (44)$$

另外, (43) 和 (44) 式和 Onsager 关系 (27) 和 (39) 式中的高聚物和颗粒物迁移系数都可以取上节介绍的模型形式, 只是参数值可能会有变化. 例如, 由 (20), (33) 和 (44) 式, 可得喂料的黏滞应力:

$$\sigma_{ij}^D = 2\eta_{\infty} v_{ij} + \eta_2 v_{ij}^* + \zeta_2 v_{kk} \delta_{ij}, \quad (45)$$

其中参数 η_2 和 ζ_2 仍由模型 (34) 式给出.

这样我们就从高聚物和颗粒物出发, 建立了一组完备的喂料流体动力学方程组. 在概念基础和理论结构上, 它与 PIM 领域中常用的非牛顿流体动力学模型都有很大差异, 并且复杂了许多. 但在一定情况下, 这个新理论可简化为非牛顿流体动力学方程, 因此的确能够描述 PIM 领域中那些被后者成功处理的实验现象. 下小节将以一个简单的一维剪切流动为例来说明这个简化过程, 同时给出该理论中的材料系数与一些流变学参数之间的关系.

高聚物和喂料的成分比例 c 是个宏观物理量, 原则上应该将它作为场变量, 纳入流体动力学理论体

系. 由于本文忽略了偏析问题, c 是不随时间空间变化的常数. 许多材料参数一般是它的敏感函数. 例如, 随着颗粒成分的增加, 喂料的颗粒弹性骨架情况会经历从无到有, 再到非常稳定坚固的转变. 这时, 公式 (31) 中描述颗粒成分弹性寿命的弛豫时间将相应地从零变为无穷大. 流变性质如何随 c 定量变化是粉末冶金领域的一个重要问题, 有许多这方面的实验测量 [1]. 深入研究本节给出的喂料流体动力学中的材料模型和参数如何随 c 变化, 是我们今后拟将考虑的主要工作之一.

3 定常剪切流动: 流变学参数的计算

考虑如图 2 所示的速度沿 x 坐标轴方向、并且只随 y 变化的定常剪切流动. 它的速度矢量为

$$v_x = v(y), v_y = 0, v_z = 0, \quad (46)$$

微分后得空间导数 v_{ij} :

$$v_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \chi & 0 \\ \chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (47)$$

其中符号 $\chi = v_{xy} = (1/2) dv/dy$ 是剪切变形率. 注意定常流动的物质导数 $d_t = 0$, 颗粒熵的增加和衰减相互抵消: $R_g = IT_g = \eta_2 v_{ij} v_{ij} = \gamma T_g^2$. 由此得颗粒温度:

$$T_g = \sqrt{\frac{2\eta_g \chi^2}{\gamma} + \frac{\gamma_0^2}{4\gamma^2}} - \frac{1}{2} \frac{\gamma_0}{\gamma}, \quad (48)$$

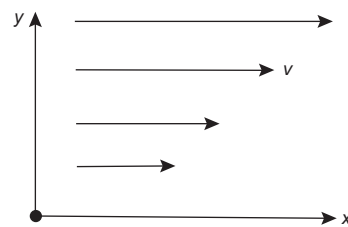


图 2 平面定常剪切流动

Figure 2 Stationary shear flow in a plane.

注意因为 $\chi = 0$ 时 $T_g = 0$, 根号前面取正号. 另外这里还忽略了颗粒熵的扩散流动, $f_i^g \sim 0$.

弹性应变 u_{ij} 随剪切变形率 χ 的变化情况可从它的运动方程 (22) 得到. 考虑迁移系数模型 (31) 和 (32) 式, 有

$$u_{ik}\nabla_j v_k + u_{jk}\nabla_i v_k = v_{ij} - \lambda_s^{\text{颗粒}} T_g u_{ij}^* - \lambda_v^{\text{颗粒}} T_g u_{kk} \delta_{ij}, \quad (49)$$

代入 (47) 式后对应变求解, 得颗粒物组元的弹性应变

$$u_{xx} = \frac{4(\lambda_s^{\text{颗粒}} - 3\lambda_v^{\text{颗粒}})\chi^2}{8\chi^2(\lambda_s^{\text{颗粒}} - 3\lambda_v^{\text{颗粒}}) - 9(\lambda_s^{\text{颗粒}})^2 \lambda_v^{\text{颗粒}} T_g^2}, \quad (50)$$

$$u_{yy} = \frac{\lambda_s^{\text{颗粒}} + 6\lambda_v^{\text{颗粒}}}{\lambda_s^{\text{颗粒}} - 3\lambda_v^{\text{颗粒}}} u_{xx}, \quad (51)$$

$$u_{zz} = u_{xx}, \quad (52)$$

$$u_{xy} = (1 - 2u_{xx}) \frac{\chi}{\lambda_s^{\text{颗粒}} T_g} \quad (53)$$

和 $u_{xz} = 0, u_{yz} = 0$. 类似地, 可计算高聚物组元的弹性应变为

$$U_{xx} = \frac{4\tau_s^{\text{高聚物}}(\tau_v^{\text{高聚物}} - 3\tau_s^{\text{高聚物}})\chi^2}{8\chi^2\tau_s^{\text{高聚物}}(\tau_v^{\text{高聚物}} - 3\tau_s^{\text{高聚物}}) - 9}, \quad (54)$$

$$U_{yy} = \frac{\tau_v^{\text{高聚物}} + 6\tau_s^{\text{高聚物}}}{\tau_v^{\text{高聚物}} - 3\tau_s^{\text{高聚物}}} U_{xx}, \quad (55)$$

$$U_{zz} = U_{xx}, \quad (56)$$

$$U_{xy} = (1 - 2U_{xx}) \tau_s^{\text{高聚物}} \chi \quad (57)$$

和 $U_{xz} = 0, U_{yz} = 0$.

将上面的弹性应变代入应力公式 (40), 可得定常剪切流动的应力张量. 它具有下面的形式

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \sigma_{zz} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N_1 + N_2 & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{xy} & N_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (58)$$

其中符号 $N_1 \equiv \sigma_{xx} - \sigma_{yy}$ 和 $N_2 \equiv \sigma_{yy} - \sigma_{zz}$ 是法向应力差. 按照流变学中的习惯, 定义表观剪切黏度:

$$\eta_a = -\frac{\sigma_{xy}}{2\chi} \quad (59)$$

和法向应力差系数:

$$\psi_1 = -\frac{N_1}{4\chi^2}, \psi_2 = \frac{N_2}{4\chi^2}. \quad (60)$$

利用 (47) 式和应力公式 (40), 还可将它们写成

$$\eta_a = \eta_\infty + \eta_g T_g - \frac{\sigma_{xy}^{\text{弹}}}{2\chi}, \quad (61)$$

$$\psi_1 = \frac{\sigma_{yy}^{\text{弹}} - \sigma_{xx}^{\text{弹}}}{4\chi^2}, \quad (62)$$

$$\psi_2 = \frac{\sigma_{yy}^{\text{弹}} - \sigma_{zz}^{\text{弹}}}{4\chi^2}, \quad (63)$$

公式 (61)~(63) 可以看做流变学参数的流体动力学解释. 注意法向应力差完全来自颗粒骨架和高聚物的弹性, 而表观剪切黏度与两个组元的黏度和弹性都有关.

弹性应力 (41) 式可用高聚物和颗粒物的自由能计算. 考虑解耦近似, 我们有

$$\sigma_{xy}^{\text{弹}} = \Pi_I U_{xy} + \Pi_{II} U_{xy}^{**} + \Pi_{III} U_{xy}^{***} + \pi_I u_{xy} + \pi_{II} u_{xy}^{**}, \quad (64)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{弹}} - \sigma_{yy}^{\text{弹}} &= \Pi_I (U_{xx} - U_{yy}) + \Pi_{II} (U_{xx}^{**} - U_{yy}^{**}) \\ &\quad + \Pi_{III} (U_{xx}^{***} - U_{yy}^{***}) + \pi_I (u_{xx} - u_{yy}) \\ &\quad + \pi_{II} (u_{xx}^{**} - u_{yy}^{**}), \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{弹}} - \sigma_{zz}^{\text{弹}} &= \Pi_I (U_{yy} - U_{zz}) + \Pi_{II} (U_{yy}^{**} - U_{zz}^{**}) \\ &\quad + \Pi_{III} (U_{yy}^{***} - U_{zz}^{***}) + \pi_I (u_{yy} - u_{zz}) \\ &\quad + \pi_{II} (u_{yy}^{**} - u_{zz}^{**}), \end{aligned} \quad (66)$$

其中 $u_{ij}^{**} \equiv u_{ik}^* u_{kj}^*$, $U_{ij}^{**} \equiv U_{ik}^* U_{kj}^*$, $U_{ij}^{***} \equiv U_{ik}^* U_{kl}^* U_{lj}^*$ 是偏应变的平方和立方, 符号 $\Pi_{I,II,III}$ 和 $\pi_{I,II}$ 是由下面公式定义的自由能函数对应变不变量的导数:

$$\Pi_I = \frac{2\Gamma_2^2}{3\Gamma_3^2} \frac{\partial \Phi_{\text{高聚物}}}{\partial \Gamma_3} - 2 \frac{\partial \Phi_{\text{高聚物}}}{\partial \Gamma} - \left(1 - \frac{2\Gamma}{3}\right) \frac{1}{\Gamma_2} \frac{\partial \Phi_{\text{高聚物}}}{\partial \Gamma_2}, \quad (67)$$

$$\Pi_{II} = \frac{2}{\Gamma_2} \frac{\partial \Phi_{\text{高聚物}}}{\partial \Gamma_2} - \left(1 - \frac{2\Gamma}{3}\right) \frac{1}{\Gamma_3^2} \frac{\partial \Phi_{\text{高聚物}}}{\partial \Gamma_3}, \quad (68)$$

$$\Pi_{III} = \frac{2}{\Gamma_3^2} \frac{\partial \Phi_{\text{高聚物}}}{\partial \Gamma_3}, \quad (69)$$

$$\pi_I = -2 \frac{\partial \Phi_{\text{颗粒}}}{\partial \Delta} - \left(1 - \frac{2\Delta}{3}\right) \frac{1}{u_s} \frac{\partial \Phi_{\text{颗粒}}}{\partial u_s}, \quad (70)$$

$$\pi_{II} = \frac{2}{u_s} \frac{\partial \Phi_{\text{颗粒}}}{\partial u_s}, \quad (71)$$

这里的 $\Phi_{\text{高聚物}}$ 和 $\Phi_{\text{颗粒}}$ 由模型 (13) 和 (29) 式给出. 将弹性应变公式 (50)~(57) 和颗粒温度 (48) 式代入, 可得上面的弹性应力随剪切变形率 dv/dy 变化的函数. 如再将它们代入 (61)~(63), 即得到喂料的流变学性质

$\eta_a(\chi)$ 和 $\psi_{1,2}(\chi)$. 由于相当繁长, 这里不再给出它们的具体公式.

图 3 是表观黏度和法向应力差系数随剪切率 dv/dy 的变化曲线. 计算时, 高聚物组元的模型参数取 $\tau_s = 10^{-4} \text{ s}$, $C_1 = 0.24 \text{ MPa}$, 并忽略黏度 η_∞ , 根据文献 [15] 取 $\tau_v = 3\tau_s$, $C_2 = C_1/29$. 颗粒物组元的模型参数取 $B = 80 \text{ MPa}$, $\eta_g = 0.15 \text{ Pa s/K}$, $\gamma_1 = 0.6 \text{ MPa/sK}^2$, 并忽略 γ_0 , 根据文献 [20] 取 $\lambda_v = \lambda_s/9$, $\lambda_s \sqrt{\eta_g/\gamma_1} = 114$. 这组参数值能很好地复现用 Fe-Ni 合金粉末配置的一种典型喂料的黏度随剪切率变化行为, 见图 3(a). 值得注意的是, 单凭黏度数据并不能完全确定材料模型和系数, 它们仍保留有很大的调整和改善余地, 为今后进一步深入描述喂料的其他实验数据, 比如法向应力差系数, 震动力场下的流动行为, 等预留空间. 本节的计算主要是表明新理论的确能够包含喂料非牛顿流体力学的成功之处, 推导其黏度模型.

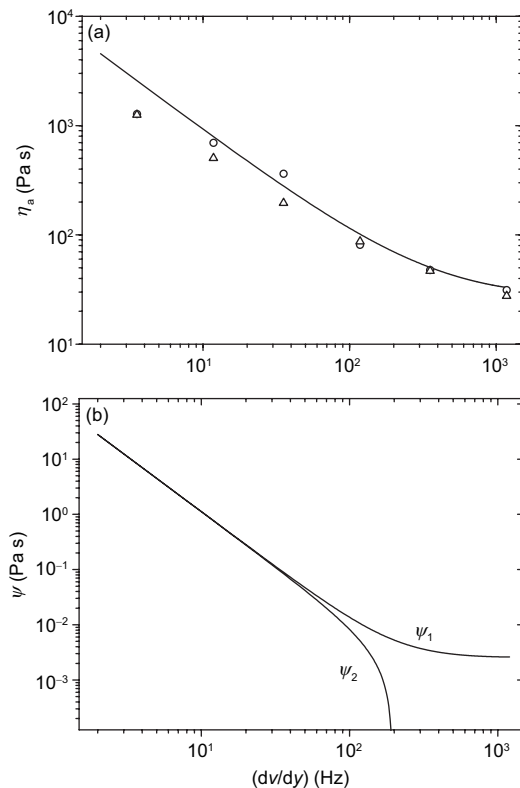


图3 表观黏度(a)和法向应力差系数(b)随剪切速率的变化
实验点是 Fe-Ni 合金喂料的在 140°(圆圈) 和 150°(三角) 的黏度 [1]
Figure 3 Variations of apparent viscosity (a) and normal stress difference (b) with shear rate. Symbols are measurements for a Fe-Ni feedstock at temperature 140° (circle) and 150° (triangle) [1].

4 结论

迄今为止非牛顿流体动力学一直是处理喂料力学行为的主要理论. 本文考虑到喂料中的高聚物和可能出现的颗粒骨架都有弹性行为, 喂料的理论体系中还应该含有弹性应变变量. 含应变变量的喂料理论可以用合并近年来物理文献中报道的高聚物和颗粒物的流体动力学方程的方法获得, 由一般方程(守恒方程和热力学公式)和材料模型(自由能函数和迁移系数)两部分组成. 我们在详细给出所有一般方程的同时, 对喂料材料模型也利用解耦近似提供了一些简单处理办法. 具体计算表明, 在一定情形下, 比如平面定常剪切流动, 它们化为非牛顿流体动力学方程, 并且能合理描述喂料的黏度随剪切率变化行为.

尽管本文给出的高聚物、颗粒物、喂料等三类材料的方程组并不完全相同, 其物理概念结构和论证方式都是下面的路线或程式. 首先它们的出发点都是能量、动量、质量守恒方程, 和熵增加方程(公式(1)~(4)); 然后是确定热力学状态变量和全微分关系(公式(7), (21), (37)), 和状态方程等热力学恒等式(公式(9), (10), (28), (40), (41)); 描述弹性的变量和方程都是弹性应变和几何方程((8), (22)); 利用热力学全微分关系得到材料的平衡条件, 或耗散力(公式(11), (25), (27), (39)最右边的一列矢量); 当这些平衡条件不都满足时, 材料将制造熵(发热), 处于非平衡状态, 有各种耗散流(公式(11), (25), (27), (39)最左边的一列矢量); 这些耗散流和耗散力的乘积之和等于热或熵的产生率(公式(12), (24), (26), (38)), 它们之间有 Onsager 提出的线性关系, 比例系数称作迁移系数, 并构成一个满足 Onsager 倒易条件的正定矩阵(公式(11), (25), (27), (39)); 材料的所有特性及其表征都归结到一个热力学特征函数(公式(13), (14), (29), (41), (42)), 和迁移系数(公式(19), (20), (31)~(34), (36), (43)~(45))中, 它们统称为材料模型. 无论是水或金属那样的简单材料, 还是其他任何复杂的多元混合材料, 流体动力学都是按照上述标准程式建立它们的宏观动力学方程组. 注意除材料模型外, 这个理论的其他方程都来自基本物理原理, 因此是严格的一般方程, 并且有相似的形式.

目前人们普遍认为颗粒物质的力学行为非常复

杂^[11]。喂料作为它与高聚物的混合体,力学性质当然也不会简单。从流体动力学理论的角度看,这类材料的复杂性主要体现在非线性和耗散过程这两个方面,另外还有弹性效应,对它们的描述和表征显然不能都归结到一个黏度模型函数上。因此传统喂料的非牛顿流体动力学理论应该有一定的局限性。目前关于喂料性质的实验工作主要来自流变仪的数据,对其力学行为的观测并不全面。为进一步了解传统理论的局限性和新理论的优势和应用前景,有关喂料的基础实验研究将是一项值得开展的工作,特别是与弹性和迁移过程有关的内容。随着实验观测角度的扩大,所有数据将不能满意地用一个黏度模型来描述。如果实际应用问题涉及到了这些实验现象,并

且要求精准地计入它们的动力学效应,那么原则上应该考虑本文的复杂理论,尝试用热力学势函数和各种迁移系数公式取代黏度,来表征喂料。

由于流体动力学的一般方程都是严格的,其局限性和允许改进的地方只有材料模型,因此该理论方向今后的具体工作就是研究材料模型。本文仅考虑了非常简单和初步的材料模型,忽略了很多迁移系数(如非对角系数),以及高聚物和颗粒物之间的能量耦合。显然在尝试用这个理论分析工程应用问题前,还需要根据各方面的实验数据来进一步完善材料模型,特别是比平面定常情况更复杂的样品形状和流动情况,包括非定常情况的运动和力学数据(例如喂料的振动实验^[7])。这些工作将有待今后逐步开展。

参考文献

- 1 李益民,李云平. 金属注射成形原理与应用. 长沙: 中南大学出版社, 2004
- 2 梁叔权,黄伯云. 粉末注射成形流变学. 长沙: 中南大学出版社, 2000
- 3 Zhen Z S, Qu X H, Lei C M. Defects and variation of viscosity in powder injection molding filling process (in Chinese). *Acta Metall Sin*, 2007, 43: 187-193 [郑洲顺, 曲选辉, 雷长明. PIM 充模流动过程中黏度的变化与缺陷的形成. 金属学报, 2007, 43: 187-193]
- 4 Song J P, Barriere T, Liu B S, et al. Numerical analysis to segregation effects of powder injection molding (in Chinese). *Chin J Appl Mech*, 2008, 25: 33-37 [宋久鹏, Barriere T, 柳葆生, 等. 粉末注射成形中偏析效应及其影响的数值模拟. 应用力学学报, 2008, 25: 33-37]
- 5 Zhen Z S, Qu X H, Han X L, et al. Computation and simulation of solidification on wall of cavity in powder injection molding filling process (in Chinese). *Chin J Nonferrous Metals*, 2008, 18: 511-515 [郑洲顺, 曲选辉, 韩旭里, 等. 粉末注射成形充模流动过程模壁凝固层增长的计算模拟. 中国有色金属学报, 2008, 18: 511-515]
- 6 Wang Y H, Qu X H, He X B, et al. Numerical simulation of unique boundary layer effect during powder injection molding filling flow process (in Chinese). *Mater Mech Eng*, 2008, 32: 77-80 [王玉会, 曲选辉, 何新波, 等. 粉末注射成形充模过程特有边界层效应的数值模拟. 机械工程材料, 2008, 32: 77-80]
- 7 Pan Y X, Qu J P, Jin G, et al. The rheological behavior of metal powder injection molding feedstock under the vibration force field (in Chinese). *Powd Metall Ind*, 2006, 16: 5-9 [潘映雪, 翟金平, 晋刚, 等. 金属粉末注射成形喂料在振动力场下的流变行为. 粉末冶金工业, 2006, 16: 5-9]
- 8 Li Y M, Qu X H, Huang B Y. Evaluation of rheological properties of metal injection molding feedstocks (in Chinese). *J Mater Eng*, 1999, 7: 32-35 [李益民, 曲选辉, 黄伯云. 金属注射成形喂料的流变学性能评价. 材料工程, 1999, 7: 32-35]
- 9 Onoda G Y, Liniger E G. Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset. *Phys Rev Lett*, 1990, 64: 2727-2730
- 10 German R M, Han F L. Establishment of the scientific underpinnings in powder injection molding and liquid phase sintering (in Chinese). *Powd Metall Tech*, 2008, 26: 145-152 [German R M, 韩凤麟. 粉末注射成形与液相烧结科学基础的建立. 粉末冶金技术, 2008, 26: 145-152]
- 11 de Gennes P G. Granular matter: A tentative view. *Rev Mod Phys*, 1999, 71: S374-S382
- 12 沈珠江. 理论土力学. 北京: 中国水利水电出版社, 2000
- 13 Landau L D, Lifshitz E M. *Theory of Elasticity*. (Volume 7 of course of theoretical physics). 3rd ed. Oxford: Pergamon Press, 1986
- 14 Temmen H, Pleiner H, Liu M, et al. Convective nonlinearity in non-Newtonian fluids. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 3228-3231
- 15 Mueller Oliver. Die hydrodynamische Beschreibung nicht-Newtonscher Stroemungseffekte in polymeren Fluiden und Ferrofluiden (in German). Dissertation for the Doctoral Degree. Tuebingen: Universitaet Tuebingen, 2006
- 16 Pleiner H, Harden J L, Liu M, et al. Nonlinear hydrodynamic description of non-Newtonian fluids. *Rheol Acta*, 2004, 43: 502-508
- 17 Pleiner H, Harden J L, Liu M, et al. The structure of convective nonlinearities in Polymer Rheology. *Rheol Acta*, 2000, 39: 560-565
- 18 Jiang Y M, Liu M. From elasticity to hypoplasticity: Dynamics of granular solids. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 105501
- 19 Jiang Y M, Liu M. Granular elasticity without the coulomb condition. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 144301
- 20 Jiang Y M, Liu M. Granular solid hydrodynamics. *Granular Matter*, 2009, 11: 139-156
- 21 Jiang Y M, Liu M. GSH or Granular Solid Hydrodynamics: On the Analogy between Sand and Polymers. Nakagawa M, Luding S, eds. *AIP Conf Proc: Powders and Grains*, 2009. 1145: 1096-1099

- 22 Martin P C, Parodi O, Pershan P S. Unified hydrodynamic theory for crystals, liquid crystals, and normal fluids. *Phys Rev A*, 1972, 6: 2401–2420
23 Haff P K. Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon. *J Fluid Mech*, 1983, 134: 401–430

A hydrodynamic theory for feedstock in powder injection molding

JIANG YiMin^{1,2}, LI YiMin¹, PENG Zheng^{2*} & WANG GuangYao¹

¹ State Key Laboratory for Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China;

² School of Physics, Central South University, Changsha 410083, China

By combining two hydrodynamic theories of polymer and granular matter reported recently, we proposed a theory describing macroscopic mechanical behaviors of feedstock in powder injection molding. In contrast with the traditional non-Newtonian hydrodynamics of feedstock, the theory has as state variables in addition a granular temperature and two tensors of elastic strain (for polymer and granular components respectively), then can give a complete description of elastic effects due to granular skeleton and polymer. In a special case of steady planar shear flow, it is reduced to the non-Newtonian hydrodynamics with an apparent viscosity comparable to those measured for feedstock. This supports that the new theory does contain the traditional one, so can be used to study its validity range, and the rheological parameters including coefficients of differences of normal stresses. The work provides a new way for analyzing feedstock dynamics interested in powder injection molding. Also its method is helpful for establishing continuous mechanical equations of other multi-phase systems.

powder injection molding, feedstock, granular matter, hydrodynamics

PACS: 45.70-n, 46.05+b, 05.70.Ln

doi: 10.1360/132010-1203