

УДК 674.028

UDC 674.028

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА  
СКЛЕИВАНИЯ ДРЕВЕСИНЫ КЛЕЕМ,  
ОБРАБОТАННЫМ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ  
ПОЛЕ****MODELING OF PROCESS OF WOOD GLUING  
WITH A GLUE, PROCESSED IN ELECTRIC  
FIELD**

Мозговой Николай Васильевич  
д.т.н., профессор  
*Воронежская государственная лесотехническая  
академия, Воронеж, Россия*

Mozgovoy Nikolay Vasilyevich  
Dr.Sci.Tech., professor  
*Voronezh State Academy of Forestry and Technolo-  
gies, Voronezh, Russia*

Предложена математическая модель процесса склеивания древесины клеями, подвергнутыми обработке электрическим полем. Модель позволяет определять зависимость прочности клеевых соединений от параметров технологического процесса

A mathematical model of the process of adhesive bonding of wood with glues, treated by an electric field, is suggested. The model allows determining the dependence of the strength of adhesive joints on technological process parameters

Ключевые слова: ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ, КЛЕЕВОЕ СОЕДИНЕНИЕ, НАПРЯЖЕННОСТЬ, ПРОЧНОСТЬ, МОДЕЛЬ

Keywords: ELECTRIC FIELD, ADHESIVE JOINT, INTENSITY, STRENGTH, MODEL

Изделия из клееной древесины в последнее время составляют основной объем продукции, которую выпускают современные деревообрабатывающие предприятия. При склеивании изделий из массивной древесины основным требованием к клеевым соединениям является их высокая прочность. Для повышения прочности клееной древесины проводятся работы по совершенствованию технологии склеивания, разрабатываются новые марки клеев. Однако, эти мероприятия уже не в состоянии удовлетворить растущие требования производителей и потребителей готовой продукции. Более перспективными и дающими большой эффект повышения прочности клеевых соединений выглядят способы воздействия на клей физическими полями, приводящие к перестройке структуры полимерной основы клея. Достаточно эффективным показал себя способ обработки клеев постоянным магнитным полем [1, 2]. Аналогичное воздействие на структуру клея следует ожидать при его обработке электрическим полем [3].

Для реализации экспериментальной программы по изучению процесса склеивания на клею, подвергнутом воздействию электрическим полем были проведены теоретические исследования этого процесса. На этом эта-

пе была поставлена задача создать математическую модель процесса склеивания древесины наиболее часто применяемыми на деревообрабатывающих предприятиях клеями марок КФ-МТ-15 и КФ-Ж, которые предварительно были подвергнуты воздействию постоянным электрическим полем. Модель позволила бы изучить зависимость прочности клеевого соединения от параметров технологического процесса и на основе этого оптимизировать технологический процесс.

Для исследования сложных систем, к которым относятся полимерные клеи, на микроскопическом уровне в настоящее время наибольшее распространение получил метод молекулярной динамики [4, 5]. С его помощью моделируется структура и физические свойства твердых тел, жидкостей и газов, а также процессы плавления, кристаллизации, испарения и конденсации. В методе молекулярной динамики каждая микроскопическая частица (атом, ион, молекула) рассматривается как геометрическое тело простой формы (шар, диск), движущееся в соответствии с законами классической динамики Ньютона и взаимодействующее с другими частицами по определенному закону.

Основные особенности поведения реальной системы могут быть воспроизведены в двух измерениях, поэтому для большей наглядности получаемых результатов была построена двумерная модель. Исключения третьего измерения дает возможность при заданном числе элементов (в расчетах использовалось до 10000 элементов) увеличить линейные размеры образца материала в направлениях  $X$  и  $Y$ . Метилольные группы (мономер) в модели представляются отдельными круглыми элементами (в дальнейшем называемыми «молекулами»), имеющими три степени свободы, а именно: движение вдоль осей  $OX$  и  $OY$  и вращение вокруг собственной оси.

Каждая отдельная молекула в модели представляет собой электрический диполь с зарядами  $+q$  и  $-q$ , находящимися на расстоянии  $d$  друг от

друга. Состояние  $i$ -й молекулы описывается тремя переменными: декартовыми координатами ее центра  $(x, y)$  и углом поворота  $\varphi_i$   $i$ -й молекулы относительно оси ОХ. Для формирования начальной конфигурации 10000 кругов-молекул случайным образом помещаются в ячейку в форме прямоугольника. На всех границах прямоугольника используются зеркальные граничные условия: молекула, которая соприкасается со стенкой, испытывает абсолютно упругое соударение и возвращается в расчетную ячейку. Силы межмолекулярного взаимодействия складываются из взаимодействия, обусловленного отталкиванием электронных оболочек молекул на малых расстояниях, а также электростатического диполь-дипольного взаимодействия между молекулами. Отсюда сила, действующая на  $i$ -ю молекулу со стороны других молекул системы, равна

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^N \left( \vec{F}_{ij}^y + \vec{F}_{ij}^{zn} \right), \quad (1)$$

где  $\vec{F}_{ij}^y$  - сила упругого взаимодействия молекул  $i$  и  $j$ ;  $\vec{F}_{ij}^{zn}$  - сила электростатического взаимодействия  $i$  и  $j$ ;  $N$  – число молекул в модели.

При расчете сил для каждой пары молекул предварительно вычисляется расстояние  $r_{ij}$  между их центрами  $S_i(x_i, y_i)$  и  $S_j(x_j, y_j)$ :

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}. \quad (2)$$

Первый вид межмолекулярного взаимодействия описывается в рамках представления об упругом взаимодействии. Зависимость силы взаимодействия двух молекул  $i$  и  $j$  от расстояния между ними (рисунок 4.4) описывается следующими формулами:

$$F_{ijX}^y = \begin{cases} C(r_0 - r_{ij})(x_i - x_j)/r_{ij}, & \text{если } r_{ij} < r_0 + d_0; \\ 0, & \text{если } r_{ij} \geq r_0 + d_0 \end{cases} \quad (3)$$

$$F_{ijY}^y = \begin{cases} C(r_0 - r_{ij})(y_i - y_j)/r_{ij}, & \text{если } r_{ij} < r_0 + d_0; \\ 0, & \text{если } r_{ij} \geq r_0 + d_0, \end{cases}$$

где  $F_{ijx}^y$  и  $F_{ijy}^y$  – проекции силы  $\dot{F}_{ij}^y$  на координатные оси ОХ и ОУ соответственно;

$C$  – жесткость упругого взаимодействия молекул;

$r_0$  – диаметр молекулы;

$r_0 + d_0$  – расстояние, на котором молекулы упруго взаимодействуют между собой ( $d_0 = 0,2r_0$ ).

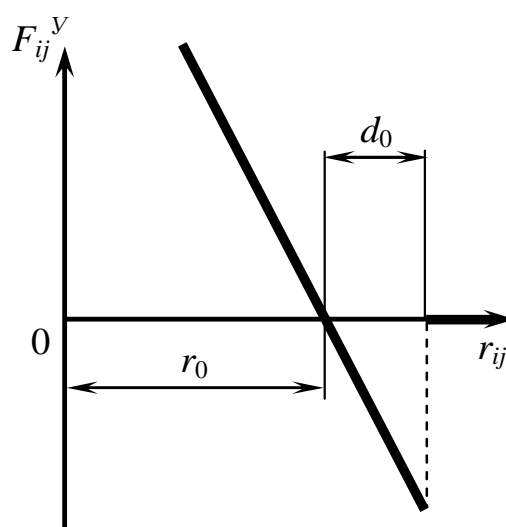


Рисунок 1. Зависимость силы упругого взаимодействия двух молекул  $i$  и  $j$  от расстояния между ними.

Моделирование производится при участии большого числа молекул и требует значительных затрат времени, поэтому целесообразно оптимизировать алгоритм с целью максимального уменьшения времени счета. Для этого используется следующий прием. Поскольку основной объем вычислений связан с нахождением сил межмолекулярного взаимодействия (3), то в процессе расчета сил упругого взаимодействия проверяется условие

$$r_{ij}^2 < r_{\text{вз}}^2, \quad (4)$$

где  $r_{\text{вз}}$  – радиус области, в пределах которой учитывается взаимодействие.

Вычисление функций  $F_{ij}$  производится только при выполнении условия (4), в противном случае указанные величины считаются равными нулю. Так как на каждом шаге молекулы смещаются на расстояния, значительно меньшие среднего расстояния между ними, то расчет сил можно значительно ускорить с помощью следующей процедуры. Для каждой молекулы составляются массивы с номерами частиц, находящихся на расстояниях, не превышающих  $r_{\text{вз}}$  от данной. Для  $i$ -й молекулы рассчитывается взаимодействие только с частицами, попавшими в соответствующий массив.

Электростатическое взаимодействие между электрическими зарядами диполей осуществляется по закону Кулона:

$$\mathbf{F}_{ij}^{\text{эл}} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3} \mathbf{r}_{ij}, \quad (5)$$

где  $q_i$  и  $q_j$  – электрические заряды в узлах  $i$  и  $j$ , равные  $\pm e$ ;  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная;  $\mathbf{r}_{ij}$  – радиус-вектор, направленный от заряда  $i$  к заряду  $j$ .

При приложении внешнего электрического поля с напряженностью  $\mathbf{E}$  на каждый электрический заряд будет действовать дополнительная сила, направленная вдоль поля и вычисляемая по формуле:

$$\mathbf{F}_i^{\text{вн}} = q_i \mathbf{E}. \quad (6)$$

Таким образом, на каждый электрический заряд действует сила электростатического взаимодействия:

$$\mathbf{F}_i^{\text{эл}} = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij}^{\text{эл}} + \mathbf{F}_i^{\text{вн}}. \quad (7)$$

На каждую молекулу действует момент силы, вызывающий ее вращение относительно центра:

$$M_i = (F_{i1}^X - F_{i2}^X) d \sin \varphi_i + (F_{i1}^Y - F_{i2}^Y) d \cos \varphi_i, \quad (8)$$

где  $F_{i1}^X$  и  $F_{i2}^X$  – проекции силы  $\dot{F}_i^{эп}$  на ось ОХ, действующей на заряды  $q_1$  и  $q_2$  соответственно;  $F_{i1}^Y$  и  $F_{i2}^Y$  – проекции силы  $\dot{F}_i^{эп}$  на ось ОУ, действующей на заряды  $q_1$  и  $q_2$  соответственно;  $d$  – плечо диполя.

В методе молекулярной динамики численно решаются уравнения движения в форме Ньютона. Для поступательного движения  $N$  молекул система уравнений движения имеет вид:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_i) \\ \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \end{cases}, \quad (9)$$

где  $m_i$ ,  $\mathbf{v}_i$ ,  $\mathbf{r}_i$  – масса, скорость и радиус-вектор  $i$ -й молекулы соответственно;  $\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_i)$  – сила, действующая на  $i$ -ю молекулу;  $t$  – время,  $i$  – номер молекулы ( $i = 1, 2, \dots, N$ ).

Вращательное движение молекул описывается системой уравнений:

$$\begin{cases} I_i \frac{d\omega_i}{dt} = M_i(\varphi_i) \\ \frac{d\varphi_i}{dt} = \omega_i \end{cases}, \quad (10)$$

где  $I_i$ ,  $\omega_i$ ,  $\varphi_i$  – момент инерции, угловая скорость и угол поворота относительно оси ОХ  $i$ -й молекулы;  $M_i(\varphi_i)$  – момент силы, действующий на  $i$ -ю молекулу.

Для численного интегрирования системы уравнений (9) применялся модифицированный метод Эйлера [6]:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \Delta t \mathbf{v}_i^n + \left( \frac{\Delta t^2}{2m_i} \right) \mathbf{F}_i^n \\ \mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^n + \left( \frac{\Delta t}{2m_i} \right) (\mathbf{F}_i^{n+1} + \mathbf{F}_i^n) \end{cases}, \quad (11)$$

где  $\Delta t$  – шаг интегрирования по времени;  $n$  – номер шага интегрирования.

Во всех расчетах шаг интегрирования составлял  $Dt = 20 \cdot 10^{-15}$  с.

Система уравнений (10) интегрировалась аналогично:

$$\begin{cases} \varphi_i^{n+1} = \varphi_i^n + \Delta t \omega_i^n + \left( \frac{\Delta t^2}{2I_i} \right) M_i^n \\ \omega_i^{n+1} = \omega_i^n + \left( \frac{\Delta t}{2I_i} \right) (M_i^{n+1} + M_i^n) \end{cases}, \quad (12)$$

Данный численный алгоритм отличается простотой, надежностью и устойчивостью, и связанная с ним глобальная погрешность имеет третий порядок для координаты и второй порядок для скорости. Он является самостартующим и не приводит к накоплению погрешности округления [7].

Для того, чтобы в модели корректно учесть температуру клея, начальное распределение молекул по скоростям задавалось по максвелловскому закону для некоторой температуры  $T_f$ . Для достижения системой равновесия при заданной температуре необходимо производить нормировку скоростей на каждом временном шаге по формуле

$$\mathbf{v}_i^{n+1} \rightarrow \beta \mathbf{v}_i^{n+1}, \quad (13)$$

где  $\beta$  – нормировочный множитель:

$$\beta = \sqrt{\frac{3NkT_f}{\sum_{i=1}^N m_i v_i^2}}, \quad (14)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана.

На каждом шаге по времени осуществлялся контроль над потенциальной энергией системы  $W$ :

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N U(r_{ij}), \quad (15)$$

где  $U(r_{ij})$  – потенциальная энергия взаимодействия молекул  $i$  и  $j$ .

Процедура интегрирования уравнений движения по формулам (10) и (11) продолжалась до тех пор, пока значение потенциальной энергии си-

стемы уменьшалось. Для достижения системой равновесия требовалось около 20000 временных шагов, после чего величина  $W$  начинала осциллировать относительно среднего равновесного значения.

После релаксации системы в течение заданного времени рассчитывалась сила адгезии  $F_A$  между древесиной и клеем:

$$F_A = F_K + F_{эл}, \quad (16)$$

где  $F_{эл}$  – сила электростатического взаимодействия между молекулами клея и древесины, обусловленная поляризацией молекул;  $F_K$  – обычная сила сцепления между клеем и древесиной, обусловленная прочими факторами.

Предел прочности на скалывание  $\tau$  пропорционален силе адгезии склеенных поверхностей, поэтому

$$t = \frac{F_t}{S} = k \cdot F_A, \quad (17)$$

где  $S$  – площадь склеиваемых поверхностей;  $F_t$  – минимальная сила, которую нужно приложить к клеевому соединению для его разрушения;  $k$  – коэффициент пропорциональности.

Разработанная математическая модель представляет собой систему дифференциальных и алгебраических уравнений. Для удобства исследования системы уравнений составлена компьютерная программа "Программа для моделирования процесса склеивания древесины клеями КФ, обработанными в электрическом поле" на языке Object Pascal в интегрированной среде программирования Borland Delphi 7.0.

При запуске программы появляется интерфейсная форма с большим количеством окон ввода, в которых можно задать 23 основных параметра модели.

Созданное в объеме клея электрическое поле способствует упорядочению диполей. Уже существующие в клее маленькие области сонаправ-



ленных диполей начинают укрупняться и выстраиваться вдоль поля. Для того, чтобы изучить, как напряженность электрического поля влияет на доменную структуру и прочность получаемого в итоге клеевого соединения проведена серия компьютерных экспериментов с моделью. В рамках серии изменяли значение  $E$  от 0 до 1200 В/см с шагом 150 В/см. Полученные данные представлены в виде графика на рис. 2. На графике видно, что с увеличением напряженности электрического поля происходит увеличение сил адгезии.

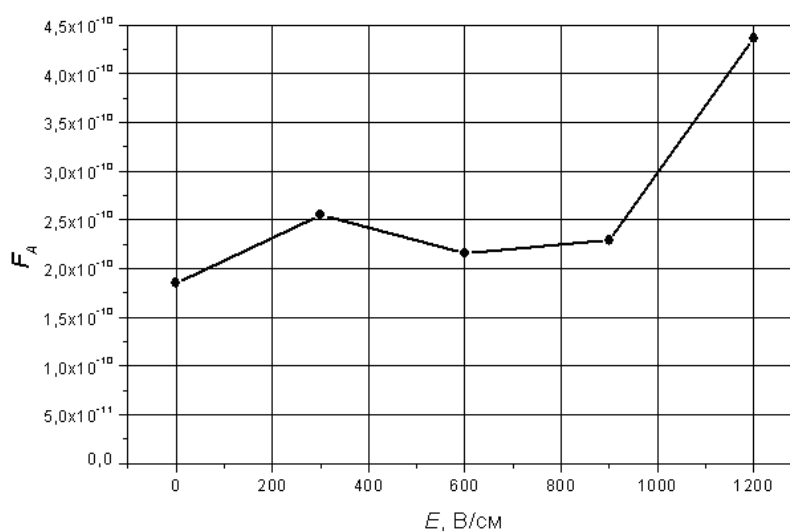


Рисунок 2. Зависимость силы адгезии  $F_A$  от напряженности электрического поля  $E$ .

От времени выдержки клея в поле зависит то, насколько прочно фиксируется созданная полем дипольная структура. Для всех экспериментов напряженность поля составляла 1200 В/см. Полученные данные представлены на рис. 3 из анализа которых следует, что время выдержки имеет параболическую зависимость, максимальные значения силы адгезии под действием электрического поля достигают на 700 шаге, что равняется примерно 12 мин.

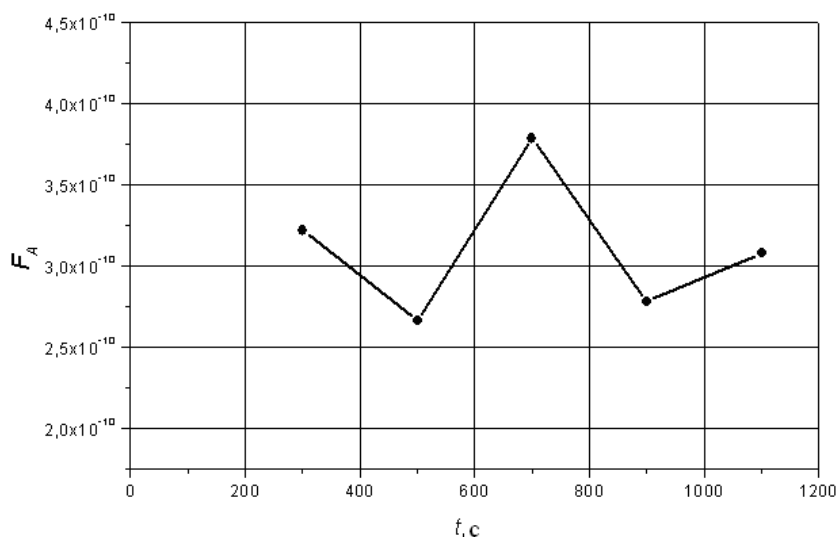


Рисунок 3. Зависимость силы адгезии  $F_A$  от времени  $t$  выдержки клея в электрическом поле.

От температуры отверждения клея зависит то, насколько быстро будет протекать реакция поликонденсации, от которой зависит величина внутренних напряжений в клеевом шве, а следовательно и предел прочности клеевого шва. Полученные данные представлены на рис. 4. Они показывают, что увеличение температуры до  $30^{\circ}\text{C}$  приводит к увеличению предела прочности клеевого шва до максимума, а затем при дальнейшем увеличении температуры выше  $30^{\circ}\text{C}$  происходит резкий спад прочности.

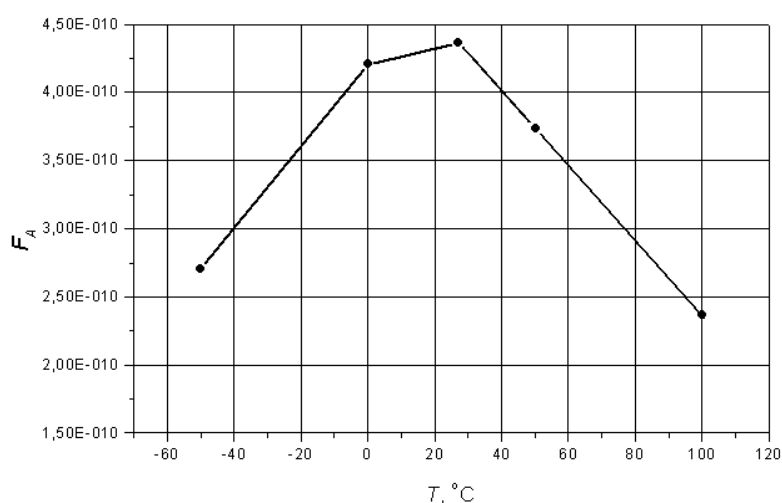


Рисунок 4. Зависимость силы адгезии  $F_A$  от температуры клея  $T$ .

### Список использованной литературы

1. Попов В.М., Иванов А.В. Интенсивная технология получения клееной древесины повышенной прочности // Вестник МГУЛ «Лесной вестник». 2007. № 4. С. 89–91.
2. Попов В.М., Иванов А.В., Шендриков М.А. Влияние магнитного поля на прочность клееной древесины // Вестник МГУЛ «Лесной вестник». 2008. № 6. С. 80–81.
3. Воронежцев Ю.И., Гольдаде В.А., Пинчук Л.С. Электрические и магнитные поля в технологии полимерных композитов. Мн.: Навука і тэхніка, 1990. 263 с.
4. Хеерман Д.В. Метод компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
5. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статической физике // УФН. 1987. Т. 125. № 7. С. 409–448.
6. Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М.: Высшая школа, 1980. 328 с.
7. Самойлов В.Г., Батаронов И.Л., Рошупкин С.А. Использование метода сглаживания экспериментальных данных для решения обратных задач математической физики // Изв. РАН. Сер. физ. 1995. Т. 59. № 10. С. 103–107.