

УДК 519.6

© О. И. Евстафьев, С. П. Копысов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗМЯГЧЕНИЯ
НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ¹

Введение

Механизмы сопротивления деформированию наполненных полимерных систем очень разнообразны. При разгрузке наблюдается ярко выраженный гистерезис. При повторном нагружении траекторию гистерезиса в координатах напряжения-деформация можно проследить до момента достижения максимальной в предистории деформации, а затем диаграмма деформирования соответствует кривой растяжения материала при исследуемой деформации [1]. Этот эффект характерен как для наполненных полимерных систем, так и для некоторых блок-сополимеров. Микроструктурные разрушения в материале имеют место даже при очень малых скоростях деформации, когда в процессе деформирования заканчивается большинство релаксационных процессов и деформационные свойства материала практически не зависят от времени.

§ 1. Феноменологическая модель

Для моделирования эффектов размягчения использовалась феноменологическая теория, к которой влияние всех механизмов сводится к одному, наиболее поддающемуся формальному описанию. Определяющие соотношения удовлетворяющие гипотезе незатухающей памяти приняты в следующем виде [2]. Девиатор напряжений s_{ij} определяется как

$$s_{ij} = 2\mu_0 e^{(-B\varepsilon_I/\varepsilon_{II})} \left[\frac{\varepsilon_{II}}{\|\varepsilon_{II}\|_p} \right]^m e_{ij} + e^{(-B\varepsilon_I/\varepsilon_{II})} \left[1 - \frac{\varepsilon_{II}}{\|\varepsilon_{II}\|_\infty} \right] \int_0^t R(t-\tau) e'_{ij}(\tau); \quad (1)$$

$$\|\varepsilon_{II}\|_p = \left[\int_0^t |\varepsilon_{II}(\tau)|^p d\tau \right]^{1/p}; \quad \|\varepsilon_{II}\|_\infty = \sup_{0 \leq \tau \leq t} \varepsilon_{II}(\tau). \quad (2)$$

Среднее напряжение записывается в виде

$$\sigma_I = 3K_0\varepsilon_I + D(\varepsilon_{II})^n e^{3q\sigma_I}, \quad (3)$$

где $\mu_0, p, m, B, K_0, D, q, n$ — константы; $R(t-\tau)$ — функция сдвиговой релаксации; $e'_{ij}(\tau)$ — производная девиатора деформаций по времени; $\varepsilon_I, \varepsilon_{II}$ — первый и второй инварианты тензора деформаций.

Соотношения (1) включают элементы незатухающей памяти (первое слагаемое) и затухающей (второе слагаемое), отражающих, соответственно, эффекты накопленных микроструктурных повреждений и наследственной механики. Норма $\|\varepsilon_{II}\|_p$ в (2) связана с моделью линейного накопления микроструктурных повреждений, а норма $\|\varepsilon_{II}\|_\infty$ — макроповреждений в истории деформирования.

На основе определяющих соотношений (1) решались двумерные квазистатические краевые задачи МДТТ [3]. Повторяющиеся циклы нагружения предполагались низкочастотными, тепловыми эффектами деформирования пренебрегалось.

¹РФФИ №06-07-89015

§ 2. Молекулярно-динамическое моделирование

Моделировалась система m взаимодействующих цепей полимера, помещенных в куб. Отдельная молекулярная цепочка представляла собой последовательность из n связанных частиц. Группы CH_2 в молекуле моделировались объединенными частицами. Длины валентных связей считались постоянными. На границах области задавались периодические граничные условия. Описание межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействий основывалось на учете составляющих потенциальной энергии, описывающих парные взаимодействия, валентных углов и взаимодействия через связи в разных плоскостях (через двугранные углы) [4]. Для моделирования деформирования использовались NVT и NPT -ансамбли с заданным внешним циклическим воздействием. Были построены осредненные кривые вириальных напряжений от деформаций для представительного объема.

§ 3. Некоторые результаты моделирования

Проведен сравнительный качественный анализ численных результатов деформирования-размягчения наполненных систем для макро- и микро уровнях моделирования.

При анализе установлено, что использование физически и геометрически линейной вязкоупругости при инфинитизимальных и конечных деформациях даёт значительную погрешность при режимах нагружения, включающих разгрузку и повторное нагружение. Показано, что при всех программах сложного нагружения физически нелинейные модели (1) предсказывают более высокий уровень напряжений на нагрузке. Однако, при повторном нагружении уровень максимальных напряжений для полуматериала меньше в 4 раза, чем по линейной вязкоупругости тела.

Расчеты показали, при деформировании с циклическим нагружением с возрастающей амплитудой напряжения в циклах выше, чем при одноразовом нагружении. При циклическом нагружении с постоянной амплитудой материал упрочняется, наблюдается уменьшение максимальных величин напряжений в цикле. Более значительное упрочнение происходит при режиме нагружения с уменьшающейся амплитудой. Для нелинейных моделей учет эффектов затухающей памяти значительно изменяет характер деформирования заряда при разгрузке и повторном нагружении. При учете только склерономной составляющей модели (1) для полуматериала наполненный композит разгружается до нулевых напряжений, а с затухающей памятью наблюдается рост напряжений при разгрузке (имеют место необратимые деформации).

Список литературы

1. Mullins L. Softening of Rubber by Deformation // Rubber Chem and Technol. 1969. V. 42. P. 339–362.
2. Farris R. J. The character of the stress-strain function for highly filled elastomers // Transactions of the Society of Rheology. 1968. V. 12. P. 303–314.
3. Альес М. Ю., Копысов С. П. Конечноэлементный метод расчета напряженно-деформированного состояния двигателей летательных аппаратов с учетом физической нелинейности наполнителя // Авиационная техника. 1990. № 3. С. 3–6.
4. Лукин О. Л., Копысов С. П., Альес М. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование полимеров на параллельной вычислительной системе // Материалы Всерос. научной школы-конференции по матем. моделированию, геометрии и алгебре. Казань: Изд-во Казан. мат. об-ва, 1997. С. 100-108.

Евстафьев Олег Иванович
Институт прикладной механики УрО РАН,
Россия, Ижевск
e-mail: ole@udman.ru

Копысов Сергей Петрович
Институт прикладной механики УрО РАН,
Россия, Ижевск
e-mail: kopysov@udman.ru