

УДК 539.3

Л.А. Мерзиевский, М.С. Воронин

Моделирование деформирования и разрушения полимеров на основе максвелловского подхода

L.A. Merzhievsky, M.C. Voronin

Modeling Deformation and Fracture of Polymers Using Maxwellian Approach

Построены модели вязкоупругого тела для ряда полимерных материалов, определяющие уравнения которых включают уравнения состояния при нешаровом тензоре деформаций и зависимости для времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды. Приводятся результаты решения ряда задач квазистатического и динамического деформирования, результаты которых сравниваются с соответствующими экспериментальными данными.

Ключевые слова: полимер, максвелловский подход, моделирование, диаграммы деформирования.

При нагружении полимерные материалы демонстрируют сложное поведение, связанное с последовательной сменой микроструктурных механизмов деформирования по мере роста деформаций. К этим микроструктурным механизмам относятся смещения сегментов, мономерных звеньев, кооперативные перемещения и т.д. [1]. Для учета особенностей поведения полимеров в широком диапазоне изменения условий нагружения целесообразно привлечь максвелловский подход к описанию необратимых процессов в сплошных средах. Как было показано автором ранее [2, 3], этот подход позволяет сочетать преимущества макроскопического описания с позиций механики сплошных сред с учетом микроструктурных механизмов необратимого деформирования.

Система основных уравнений модели имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} &= 0, \quad \frac{dE}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial r_j} = 0, \\ \frac{dG}{dt} + GW + W_0 G + \frac{1}{\tau} \left(G + \frac{3\rho}{2R} I \right) &= 0, \\ G = \|g_{ij}\|, W = \left\| \frac{\partial u_i}{\partial r_j} \right\|, W_0 = \left\| \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right\|, \\ R = \frac{\partial \rho}{\partial g_{kk}}, \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial r_k}, \\ \rho = \rho_0 \sqrt{\det G}, \sigma_{ij} = -2\rho g_{ik} \frac{\partial E}{\partial g_{ki}}, \\ E = E(g_{ij}, S), \tau = \tau(g_{ij}, S). \end{aligned}$$

Models of deformation and fracture of polymers using Maxwellian approach has been built. Constitutive equations include two dependences: for internally energy with not spherical tensor of deformations and for relaxation time. A solution of some problems of the quasistatic and dynamic deformation of polymers has been compared with corresponding experimental data.

Key words: polymer, Maxwellian approach, modeling, stress-strain diagrams.

Здесь G – метрический тензор; σ_{ij} – компоненты тензора напряжений; u_i – компоненты вектора скорости; ρ_0, ρ – начальная и текущая плотности; E – удельная упругая (внутренняя) энергия; S – энтропия; τ – время релаксации касательных напряжений; t и r_j – время и пространственные координаты; $i, j = 1, 2, 3$; I – единичный тензор.

Для замыкания системы необходимо построение уравнения состояния, включающего в данном случае связь внутренней энергии при нешаровом тензоре напряжений и времени релаксации с параметрами, характеризующими состояние среды. Принципы методики построения замыкающих соотношений описаны в [2, 3]. За основу принимается уравнение Ми-Грюнайзена, в которое добавляется слагаемое E_D , отвечающее за изменение энергии за счет работы на касательных напряжениях:

$$E(\delta, D, S) = E_c(\delta) + E_D(\delta, D) + E_t(\delta, S),$$

D – второй инвариант тензора напряжений; $\delta = \rho/\rho_0$; E_c и E_t – упругая и тепловая составляющие.

Принципиальное значение для адекватного описания реальных свойств полимерных материалов имеет учет релаксационных процессов, происходящих при внешних воздействиях [1]. В построенной модели это осуществляется через зависимость времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды. Функция для времени релаксации с учетом термоактивируемой природы механизмов структурной релаксации в полимерах выбиралась в виде [1]:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{U_0 - \alpha_0 \sigma_{int} + \alpha_1 \varepsilon}{RT}\right),$$

где U_0 , σ_{int} ; ε – энергия активации, интенсивность напряжений и деформаций; α_0 , α_1 – интерполяционные константы.

Были построены замыкающие соотношения для полиметилметакрилата (ПММА), фторопласта (ПТФЭ), эпоксидных смол и ряда других полимеров. С их использованием рассчитаны диаграммы деформирования, сравнение которых с экспериментальными данными проводится на рисунках 1–4. Сплошные линии на всех рисунках – расчет, точками показаны результаты экспериментов. Для ПММА (рис. 1) – собственные эксперименты, проведенные при комнатной температуре, скорости деформаций $\xi = 6.667 \cdot 10^{-5}$, 0.1383 c^{-1} для 1, 2 соответственно. Диаграммы сжатия ПТФЭ (рис. 2) для начальных температур 15, 24, 50, 100 и 150°C (1–5 соответственно) получены при $\xi = 3200 \pm 100 \text{ c}^{-1}$ [5]. Широкий диапазон $10 \leq \xi \leq 6000 \text{ c}^{-1}$ охвачен на рисунке 3, эпоксидная смола RTM-6, эксперименты [6] при комнатной температуре. Для эластомера (каучука) на рисунке 4 приведены данные квазистатических экспериментов [7] при $\xi = 0,075$; $0,225$ и $0,96 \text{ c}^{-1}$ (1–3) и соответствующих расчетов (сплошные линии). Приведенные данные иллюстрируют широкий диапазон применимости построенных моделей. Как показывают нижеприведенные результаты, этот диапазон может быть расширен в сторону увеличения температур и ξ , в том числе и для описания ударно-волновых процессов.

С целью проверки применимости построенных моделей для решения ударно-волнового деформирования решался ряд соответствующих задач. В качестве примера на рисунке 5 показаны в координатах давление – массовая скорость рассчитанные ударные адиабаты и изэнтропы разгрузки (сплошные линии) для ПММА в сравнении с экспериментальными данными [8] (точки).

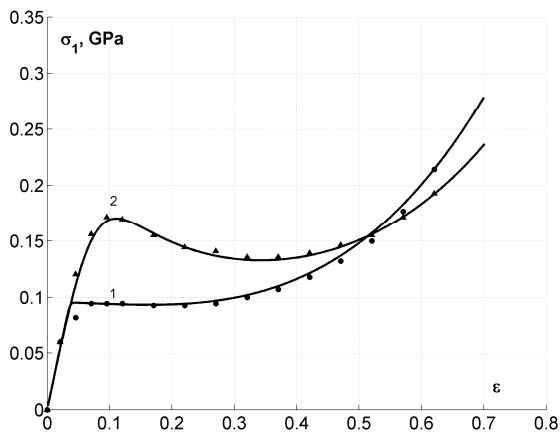


Рис. 1. Диаграммы деформирования ПММА

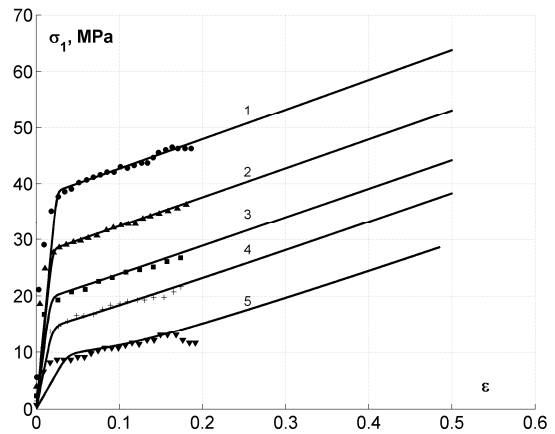


Рис. 2. Диаграммы деформирования ПТФЭ

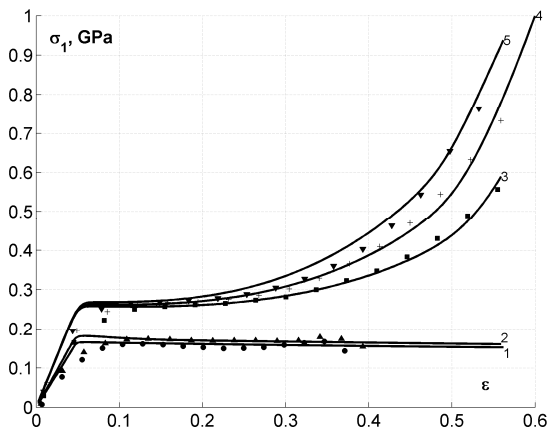


Рис. 3. Диаграммы деформирования эпоксидной смолы RTM-6

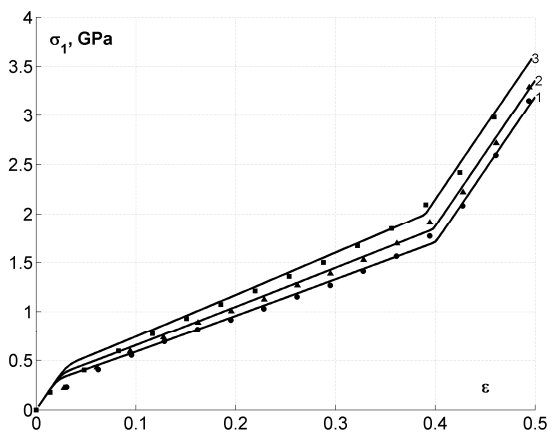


Рис. 4. Диаграммы деформирования каучука

Рассчитанные профили (зависимости массовой скорости от времени) распространяющихся в ПММА ударных импульсов сравниваются с экспериментальными данными [9] на рисунке 6.

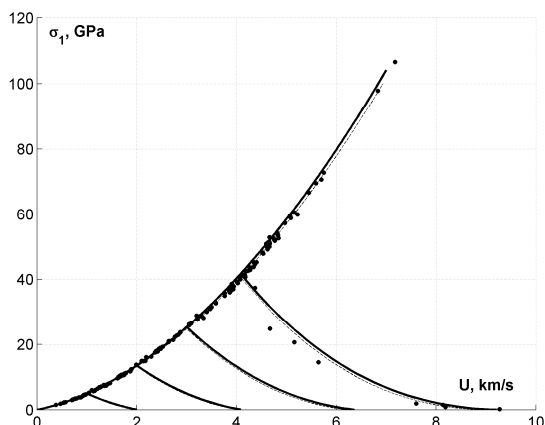


Рис. 5. Адиабаты (ударная, разгрузки) ПММА

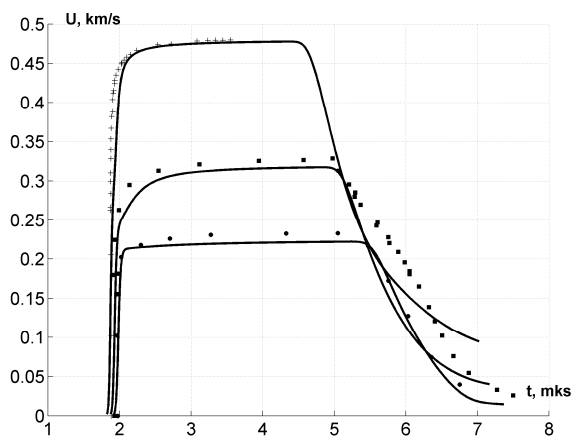


Рис. 6. Профили ударных импульсов

Важной с точки зрения анализа адекватности построенных моделей следует считать задачу о затухании плоской ударной волны при взаимодействии с догоняющей волной разрежения. Такое взаимодействие является некоторым элементарным актом при расчете многомерных ударно-волновых задач, в которых происходят многочисленные взаимодействия ударных волн и волн разрежения. В [10, 11] исследовалось затухание ударной волны в ПММА, вызванной подрывом на поверхности плексигласового цилиндра цилиндрического заряда взрывчатого вещества диаметром, меньшим диаметра образца. Сравнение данных экспериментов с результатами расчета проводится на рисунке 7 (2 – данные [10], 1 – [11]). Здесь в качестве граничных условий задавалась скорость движения контактной поверхности в зависимости от времени, начальное значение которой определялось из решения задачи о распаде разрыва между продуктами детонации и образца. Далее полагалось, что скорость убывает в соответствии с изотропой продуктов детонации.

Результаты расчета в плоском случае (рис. 7, пунктир), начиная с расстояния ~ 3 см, существенно отклоняются от экспериментальных точек 1. Простая оценка с использованием скорости звука в сжатом веществе при известных размерах заряда ВВ показывает, что приблизительно на этом расстоянии в условиях экспериментов [11] происходит смыкание боковых волн разрежения на оси симметрии. Естественно предположить, что в этот момент меняется тип симметрии задачи и затухание происходит уже как и в случае со сферической симметрией. Соответствующее изменение в расчете дает адекватное описание затухания и в этом случае.

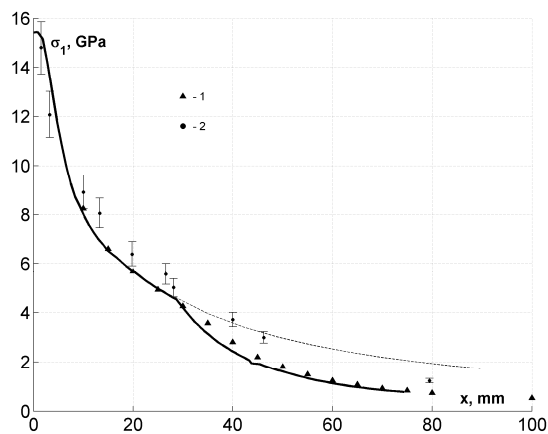


Рис. 7. Затухание ударной волны в ПММА

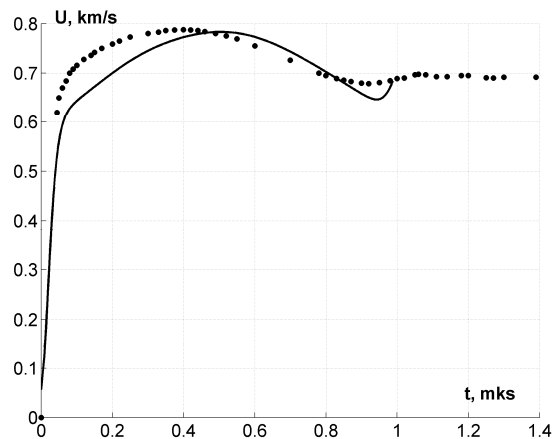


Рис. 8. Откол в ПММА

Одной из наиболее часто рассматриваемых задач динамического разрушения является задача об отколе, возникающем при выходе ударной волны на свободную поверхность преграды. Для решения соответствующих задач использовался кинетический критерий С.Н. Журкова. Соответствующие данные для ПММА, обобщенные зависимостью $t = A \exp(-\alpha\sigma)$, приведены в [12]. Для расчета про-

цесса разрушения при переменном растягивающем напряжении было использовано обобщение Бейли. На рисунке 8 представлено решение задачи об ударе плексигласового ударника толщиной 2,16 мм по мишени толщиной 8,3 мм со скоростью 850 м/с. Расчет передает фиксируемый в экспериментах «от-

кольный импульс», позволяющий рассчитать параметры откола. Как следует из приведенных результатов, построенные модели вполне адекватно описывают экспериментальные данные о деформировании полимерных материалов.

Библиографический список

1. Бартенев Г.М., Френкель С.Я. Физика полимеров. Л., 1990.
2. Мержиевский Л.А., Реснянский А.Д. Численное моделирование ударно-волновых процессов в металлах // ФГВ. – 1984. – Т. 20, №5.
3. Мержиевский Л.А. Моделирование динамического сжатия поликристаллического Al_2O_3 // ФГВ. – 1998. – Т. 34, №6.
4. Воронин М.С., Мержиевский Л.А. Модель динамического деформирования полимерных сред // Новые математические модели МСС: построение и изучение: тез. докл. Всерос. конф. – Новосибирск, 2009.
5. Rae P.J., Dattelbaum D.M. The properties of poly (tetrafluoroethylene) (PTFE) in compression // Polymer. – 2004. – V. 45.
6. Gerlach R., Siviour C.R., Petrinic N., Wiegand J. Experimental characterisation and constitutive modeling of RTM-6 resin under impact loading // Polymer. – 2008. – V. 49.
7. Amin A.F.M.S., Alam M.S., Okui Y. An improved hyperelasticity relation in modeling viscoelasticity response of natural and high damping rubbers in compression: experiments, parameter identification and numerical verification // Mechanics of Materials. – 2002. – V. 34.
8. Трунин Р.Ф., Гударенко Л.В., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. – Саров, 2001.
9. Barker L.M., Hollenbach R.E. Shock-Wave Studies of PMMA, Fused Silica, and Sapphire // J. of Appl. Physics. – 1970. – V. 41, №10.
10. Bourne N.K., Milne A.M., Biers R.A. Measurement of the pressure pulse from a detonating explosive // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2005. – V. 38.
11. Liddiard Jr.T.P. The Compression of Polymethyl Methacrylate by Low Amplitude Shock Waves // Fourth Symposium on Detonation. – 1965.
12. Евсеенко Е.П., Зильбербранд Е.Л., Златин Н.А., Пугачев Г.С. Динамическая ветвь временной зависимости прочности полиметилметакрилата // Письма в ЖТФ. – 1977. – Т. 3, вып. 14.