

УДК 539.3
ББК В251

М. С. Воронин, Л. А. Мерзиевский
г. Новосибирск, Россия

Модель квазистатического и динамического деформирования эластомеров

В работе строится модель динамического деформирования эластомеров, основанная на максвелловских представлениях о механизмах необратимого деформирования. Построено уравнение состояния при нешаровом тензоре деформации и зависимость времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды. В рамках сформулированной модели решен ряд задач квазистатического и ударно-волнового деформирования резин.

Ключевые слова: динамическая деформация, эластомеры, уравнение состояния, тензор деформации, ударно-волновые процессы.

M. S. Voronin, L. A. Merzhievsky
Novosibirsk, Russia

Model of Quasi-static and Dynamic Deformation of Elastomers

We construct a model of dynamic deformation of elastomers, based on Maxwell's views on the mechanisms of irreversible deformation. The equation of the state for the not spherical strain tensor and the dependence of relaxation time of shear stresses on the parameters characterizing the state of the environment is derived. In the framework of the formulated model some problems of quasi-static and shock-wave deformation of rubber is solved.

Keywords: dynamic deformation, elastomers, equation of state, the strain tensor, shock-wave processes.

Среди органических полимеров в особую группу выделяют эластомеры, имеющие при обычных температурах ярко выраженные высокоэластические свойства. Температура стеклования их существенно ниже 0°C . Наиболее яркими представителями эластомеров являются каучуки и получаемые из них химически сшитые материалы, называемые резинами.

Исследованию химического строения, физических и механических свойств эластомеров, и построению моделей их деформирования и разрушения посвящены работы [1; 6; 7; 11; 17] и др. Развитие теории деформации и разрушения высокополимеров начиналось с описания высокоэластического состояния, которое связывалось гибкостью отдельных макромолекул, изменяющих свою длину под действием внешних сил [6]. Дальнейшее развитие привело к представлениям о сеточной структуре высокополимеров, связанной с образованием физических узлов – временных связей, находящихся в динамическом равновесии, и о существовании надмолекулярных образований, оказывающих существенное влияние на свойства и поведение полимеров [6; 12]. Построение моделей деформирования эластомеров базировалось на описании вязкоупругого характера их поведения, связанного с релаксационными явлениями [4; 12]. При этом развивались максвелловские представления [8], получившие широкое обобщение в работе [3].

В данной статье развитый в работах [9; 10] подход применяется к построению модели и решению ряда задач деформирования каучука и резин.

1. Формулировка модели. Полная механико-математическая формулировка уравнений используемой в работе модели упруговязкого тела максвелловского типа детально изложена в работе [3]. Основные уравнения модели, выражающие законы сохранения импульса, энергии и эволюции компонентов тензора эффективных деформаций, имеют вид:

$$\frac{du}{dt} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} = 0, \quad \frac{dE}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial r_j} = 0,$$

$$\frac{dG}{dt} + GW + W_0G + \frac{1}{\tau} \left(G + \frac{3\rho}{2R} I \right) = 0. \quad (1)$$

Здесь $G = \|g_{ij}\|$ – метрический тензор, $W = \|\frac{\partial u_i}{\partial r_j}\|$, $W_0 = \|\frac{\partial u_i}{\partial r_i}\|$, $R = \frac{\partial \rho}{\partial g_{kk}}$, σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, u_i – компоненты вектора скорости, ρ и ρ_0 – начальная и текущая плотности, E – удельная упругая энергия, τ – время релаксации касательных напряжений, t и r_j – время и пространственные координаты; $i, j = 1, 2, 3$; I – единичный тензор,

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial r_k}, \quad \rho = \rho_0 \sqrt{\det G}, \quad \sigma_{ij} = -2\rho g_{ik} \frac{\partial E}{\partial g_{ki}}.$$

Уравнение неразрывности в данной модели следует из приведенных уравнений. Система замыкается уравнением, связывающим изменение удельной внутренней энергии E с компонентами нешарового тензора деформаций и энтропией S :

$$E = E(g_{ij}, S) \quad (2)$$

и зависимостью для времени релаксации касательных напряжений:

$$\tau = \tau(g_{ij}, S), \quad (3)$$

с помощью которой учитываются микроструктурные механизмы необратимого деформирования. Система соотношений (2), (3) является составным уравнением состояния среды.

Для решения поставленных задач достаточно использовать систему уравнений модели в нестационарном одномерном случае в главных осях координат (предполагается, что главные оси тензоров напряжений и деформаций совпадают), которая имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho r^\nu)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u r^\nu)}{\partial r} &= 0, & \frac{\partial(\rho u r^\nu)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u^2 - \sigma_1) r^\nu]}{\partial r} + \nu r^{\nu-1} \sigma_2 &= 0, \\ \frac{\partial[\rho(E + u^2/2) r^\nu]}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u(E + u^2/2) - \sigma_1 u) r^\nu]}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\partial h_2}{\partial t} + u \frac{\partial h_2}{\partial r} - \frac{\nu(3-\nu)u}{2} \frac{u}{r} &= -\frac{d_2}{\tau}, & \frac{\partial h_3}{\partial t} + u \frac{\partial h_3}{\partial r} - \frac{\nu(\nu-1)u}{2} \frac{u}{r} &= -\frac{d_3}{\tau}, \\ \rho &= \rho_0 \exp(-h_1 - h_2 - h_3), & d_i &= h_i - \frac{1}{3} \ln \frac{\rho}{\rho_0}, \\ E = E(h_i, S), \quad \tau &= \tau(h_i, S), & \sigma_i &= \rho \frac{\partial E}{\partial h_i}, & T &= \frac{\partial E}{\partial S}, \end{aligned} \quad (4)$$

где h_i – логарифмы коэффициентов растяжения элемента среды вдоль главных осей, T – температура элемента среды, ν – показатель симметрии: $\nu = 0$ – плоская, $\nu = 1$ – цилиндрическая, $\nu = 2$ – сферическая.

2. Построение уравнения состояния. Наиболее удобной формой представления уравнения состояния для (4) является связь изменения удельной внутренней энергии E с компонентами тензора деформаций и энтропией S :

$$E = E(h_1, h_2, h_3, S).$$

Поскольку энергия не зависима от системы координат, то она должна быть связана не с h_i , а с инвариантами тензора. Ограничимся зависимостью энергии только от первого и второго инвариантов тензора деформаций. Как показывает анализ, третий инвариант в рассматриваемых задачах оказывает малое влияние на характеристики среды и протекание процессов. Для выбранного тензора деформаций инварианты (δ – первый, D – второй) запишутся в виде:

$$\delta = \exp[-(h_1 + h_2 + h_3)], \quad D = (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2).$$

Таким образом можно строить уравнение состояния в виде:

$$E = E(\delta, D, S). \quad (5)$$

На практике чаще используется построение уравнения состояния в форме зависимости для свободной энергии:

$$F = F(\delta, D, T). \quad (6)$$

Переход от (5) к (6) и другим термодинамическим потенциалам осуществляется по формулам термодинамики:

$$E(\delta, D, T) = F(\delta, D, T) - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{h_i}, \quad S(\delta, D, T) = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{h_i}, \quad (7)$$

$$dF = -SdT + \frac{\sigma_i}{\rho} dh_i, \quad dE = TdS + \frac{\sigma_i}{\rho} dh_i \Rightarrow \left(\frac{\partial F}{\partial h_i} \right)_T = \left(\frac{\partial E}{\partial h_i} \right)_S = \frac{\sigma_i}{\rho}.$$

По аналогии с классическим уравнением состояния Ми-Грюнайзена, полную энергию (6) представим в виде суммы упругой (или холодной), тепловой и девиаторной составляющих:

$$F = F_X + F_{dev} + F_T. \quad (8)$$

Конкретный вид зависимости каждого слагаемого в (8) выбирался с использованием имеющихся экспериментальных данных и уравнений состояния разных типов. Форма зависимости для холодной составляющей выбирается либо на основе потенциала взаимодействия атомов и молекул, либо с привлечением феноменологических представлений, базирующихся на косвенных экспериментальных данных. По аналогии с уравнением состояния РОСА [12] в качестве зависимости упругой составляющей F_X примем

$$F_X(\delta) = V_0 \left(\frac{a\delta^{m-1}}{m-1} + \frac{b\delta^{n-1}}{n-1} \right) - F_{X0},$$

$$P_X(\delta) = a\delta^m + b\delta^n - P_{X0}, \quad \delta = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (9)$$

где a, b, m, n – имеют смысл интерполяционных констант, а константы F_{X0} и P_{X0} необходимы для выполнения условий $F_X(1) = 0$ и $P_X(1) = 0$. Все эти параметры находились из наилучшего соответствия с уравнением состояния [13].

В девиаторном слагаемом ограничимся линейной зависимостью внутренней энергии единицы массы вещества от второго инварианта D :

$$F_{dev}(\delta, D) = 2c_{\perp}^2 \delta^{\xi_0} D, \quad (10)$$

где c_{\perp} – поперечная скорость звука, ξ_0 – интерполяционная константа.

Тепловое слагаемое строилось на основе имеющейся в литературе информации о теплоемкости полимеров [14]. Анализ совокупности теоретических и экспериментальных работ, посвященных рассмотрению структурных механизмов (колебательных спектров), определяющих теплоемкость полимеров, и непосредственному измерению соответствующих параметров, позволил остановиться на следующей зависимости для тепловой составляющей уравнения состояния:

$$F_T(\delta, T) = R_m T \sum_{i=1}^3 N_i \ln(1 - e^{x_i}) - \frac{1}{2} \beta(\delta) T^2,$$

$$x_i = \frac{\theta_i(\delta)}{T}, \quad \theta_i = \theta_{0i} \delta^{\gamma_{0i}}, \quad \beta(\delta) = \beta_0 \delta^{-\Gamma_e}, \quad (11)$$

где R_m – универсальная газовая постоянная, делённая на молярную массу, θ_{0i} – характеристические температуры, определяемые экспериментально, γ_{0i} – интерполяционные константы, имеющие смысл аналогов коэффициента Грюнайзена, для соответствующих колебательных мод, N_i – интерполяционные константы, удовлетворяющие условию $\sum N_i = N$, где N – полное число колебательных мод, β_0 и Γ_e – интерполяционные константы, которые отличны от нуля в случае необходимости учета теплового возбуждения электронов. Входящие в приведенное соотношение параметры определяются с привлечением данных из [13; 18] и сравнения расчетной и экспериментальной ударной адиабаты.

3. Построение зависимости для времени релаксации касательных напряжений.

Впервые, по-видимому, идея о релаксационном характере необратимого деформирования была сформулирована Д. К. Максвеллом [8]. В качестве иллюстрации было выписано соотношение, получившее в дальнейшем широкую известность как определяющее уравнение реологической модели Максвелла. В рамках существовавших в то время представлений механизм необратимой деформации и сопутствующей релаксации напряжений любой конденсированной среды рассматривался как макроскопический результат перегруппировок её молекул (атомов) и перемещений разнообразных комплексов этих молекул к такому (стабильно-равновесному) расположению, при котором энергия взаимодействия совокупности молекул, образующих рассматриваемое тело, и, соответственно, его свободная энергия имеют минимальное значение. Это однозначно коррелирует с современными представлениями о микроструктурных механизмах высокоэластической деформации полимеров. Исходя из термоактивируемого характера микроструктурных механизмов [1], для времени релаксации примем классическое соотношение Больцмана-Аррениуса

$$\tau = \tau_0 \exp(U/RT),$$

где τ_0 – некоторое характерное время кинетической единицы, за счет движения которой происходит релаксация, U – энергия активации соответствующего механизма релаксации.

С учетом изменения энергии активации в процессе деформирования, а также с учетом возможности протекания нескольких механизмов релаксации это соотношение принимает вид

$$\begin{aligned} \tau(\delta, D, T) &= \sum_i \tau_{0i} \exp\left(\frac{U_{0i} - \alpha_i(T)\Sigma}{RT}\right), \\ \alpha_i(T) &= \alpha_{0i} \cdot (1 + \alpha_{1i}\Delta T), \quad \Delta T = T - T_0, \\ \Sigma &= \sqrt{\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2]}, \end{aligned} \quad (12)$$

где α_{0i} , α_{1i} – интерполяционные константы, Σ – интенсивность касательных напряжений.

Для определения входящих в зависимость (12) параметров воспользуемся разработанной в [9] методикой. Будем решать задачу об одноосном деформировании тонкого стержня. В предположении об однородности деформации все величины в исходной системе уравнений (4) являются функциями только времени. Поэтому в итоге система упрощается и принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{dh_1}{dt} &= \dot{\epsilon} - \frac{2}{3} \frac{h_1 - h_2}{\tau}, \quad \frac{dS}{dt} = \frac{2}{3} \frac{h_1 - h_2}{\tau} \frac{\sigma_1}{\rho T}, \\ F &= F(\delta, D, T), \quad \tau = \tau(\delta, D, T), \quad \sigma_2 \equiv \sigma_3 \equiv 0, \\ h_2 &= h_3, \quad \delta = \exp(-h_1 - 2h_2), \quad D = \frac{1}{3}(h_1 - h_2)^2, \\ \sigma_i &= \rho \left(\frac{\partial F}{\partial h_i} \right)_T, \quad S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{h_i}. \end{aligned} \quad (13)$$

Результатом решения этой задачи являются диаграммы деформирования. Значения параметров в (12) определяются на основе условия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных диаграмм деформирования.

4. Результаты. На рис. 1 линиями приведены результаты расчета диаграмм деформирования каучука в квазистатическом диапазоне. Здесь кривые 1–3 соответствуют $\dot{\epsilon} = 0.075, 0.225, 0.96 \text{ с}^{-1}$. Символами показаны экспериментальные данные из [14]. Как следует из приведенных на рисунке данных, при $\epsilon \sim 40\%$ происходит резкое изменение наклона диаграмм. Это вызвано изменением механизма структурной релаксации полимера, связанной с изменением характера микроструктурного механизма необратимого деформирования – активацией молекулярных комплексов более высокого порядка. В построенной модели это передается изменением параметров в зависимости для времени релаксации касательных напряжений.

На рис. 2, 3 расчетные диаграммы деформирования (сплошные линии) сравниваются с экспериментальными данными [16] (символы) резин двух разных марок. На рис. 2 кривые 1–3 соответствуют скоростям деформации $\dot{\epsilon} = 1200, 1800, 3000 \text{ с}^{-1}$, кривые 1–3 на рис. 3 получены для

$\dot{\epsilon} = 900, 2500, 3000 \text{ с}^{-1}$ соответственно. Здесь момент изменения механизма релаксации выражен менее четко, и структурный переход наблюдается в диапазоне деформаций $\epsilon \sim 20\text{--}40\%$. В модели данное обстоятельство учтено тем, что (12) представляется в форме двух слагаемых с соответствующими значениями параметров. Значения этих параметров обеспечивают постепенный переход от описания механизма деформации более низкого уровня к более высокому.

Для ряда практических задач необходимо описание поведения эластомеров при ударно-волновом нагружении. Резиноподобные материалы зачастую используются для демпфирования импульсов ударного сжатия и в других практических случаях. С целью проверки применимости построенной модели для решения таких задач проведены расчеты ударной адиабаты и адиабат разгрузки резины. Результаты расчетов приведены на рис. 4 (зависимости в координатах гидростатического давления P от массовой скорости U , 1 – ударная адиабата, 2–4 – адиабаты разгрузки, пунктир – расчет по уравнению состояния [13], символы – экспериментальные данные [15]). На рис. 5, 6 приведены эти же данные в координатах: скорость ударной волны D – массовая скорость и давление – удельный объем V соответственно (использованы те же обозначения, что и на предыдущем рисунке).

Важной задачей, решение которой является тестом для проверки применимости моделей для описания реальных ударно-волновых процессов, является задача о взаимодействии ударной волны с догоняющей волной разрежения. Этот процесс часто реализуется в экспериментальных исследованиях и на практике. Следует указать, что численные расчеты показывают [10], что многие из моделей, традиционно применяющихся к описанию ударно-волновых процессов, неверно передают характер затухания ударных волн при их взаимодействии с догоняющими волнами разрежения. Для тестирования построенной модели на адекватность описания таких процессов решалась задача, постановка которой соответствовала экспериментальному исследованию [5]. Плоские ударные волны в образцах из вакуумной резины создавались ударом пластин из алюминия или оргстекла, или детонацией зарядов взрывчатого вещества, контактирующего с образцом. Ввиду недостатка в [5] информации о параметрах ударников при расчете в качестве начальных условий задавался экспериментально измеренный вблизи поверхности нагружения ударный импульс (на приведенных ниже рисунках показаны цифрами). Профили рассчитанных волн в нескольких лагранжевых точках (сплошные линии) сравниваются с экспериментальными (символы) на рис. 7, 8. Проведенное сравнение показывает, что построенная модель с хорошей точностью воспроизводит результаты экспериментальных исследований и может применяться для решения задач ударно-волнового деформирования.

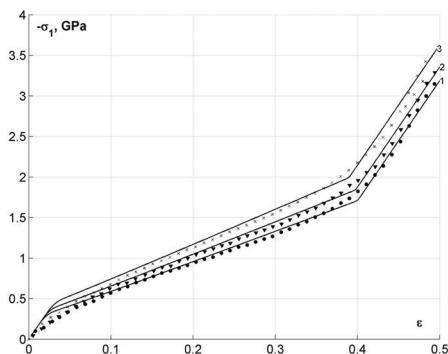


Рис. 1.

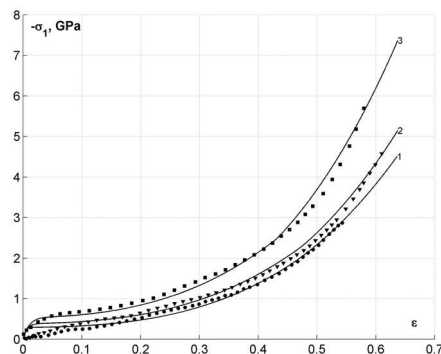


Рис. 2.

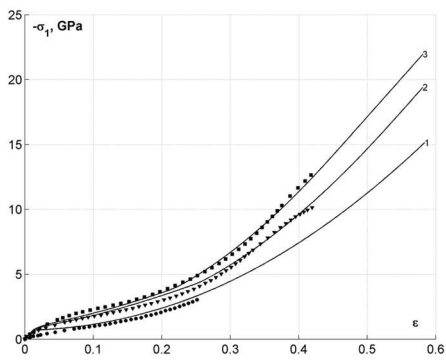


Рис. 3.

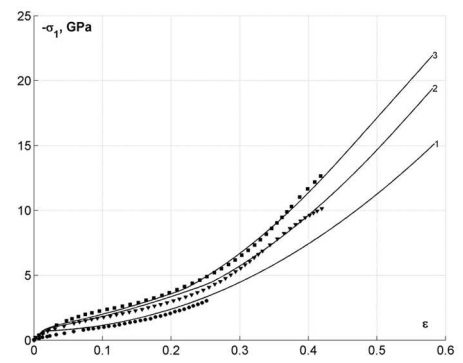


Рис. 4.

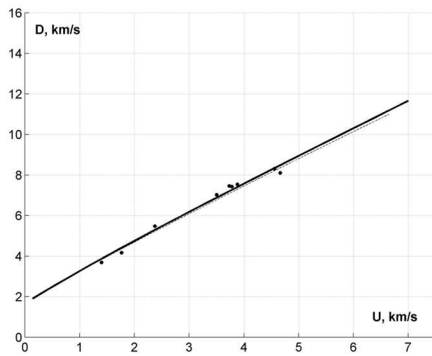


Рис. 5.

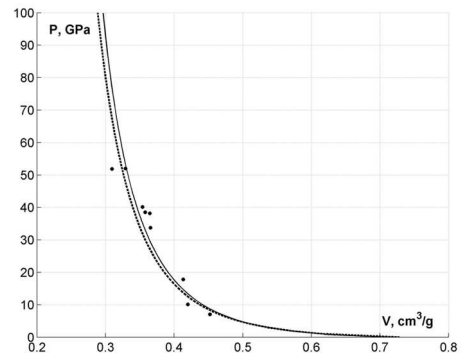


Рис. 6.

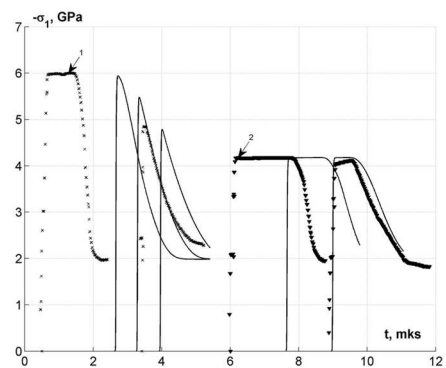


Рис. 7.

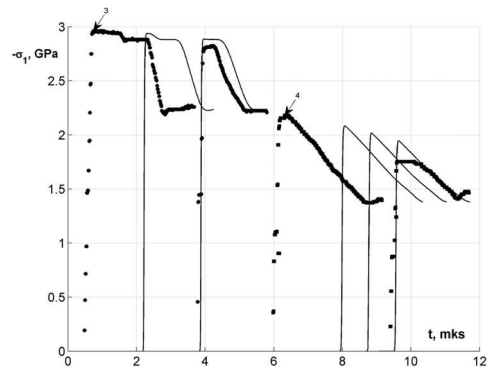


Рис. 8.

Список литературы

1. Бартенев Г. М., Френкель С. Я. Физика полимеров. Ленинград: Химия, 1990. 432 с.
2. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М. Полуэмпирическое уравнение состояние металлов с переменной теплоемкостью ядер и электронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Математического моделирования физических процессов». 1991. в. 2. С. 57–62.
3. Годунов С. К. Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978. 304 с.
4. Гуревич Г. И. О законе деформации аморфных и поликристаллических тел // ЖТФ. 1947. Т. 17. № 12. С. 1491–1502.
5. Калмыков Ю. Б., Канель Г. И., Пархоменко И. П., Уткин А. В., Фортов В. Е. Поведение резины в ударных волнах и волнах разрежения // ПМТФ. 1990. № 1. С. 126–130.
6. Лебедев В. П. Структура аморфных полимеров // Успехи химии. 1978. Т. 47. № 1. С. 127–151.
7. Лукомская А. И., Евстратов В. Ф. Основы прогнозирования механических свойств каучуков и резин. М.: Химия, 1975. 360 с.
8. Максвелл Д. К. Строение тел. // Д. К. Максвелл. Статьи и речи. М.: Наука, 1968. С. 182–192.
9. Мержиевский Л. А., Шамонин С. А. Построение зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды // ПМТФ. 1980. № 5. С. 170–179.
10. Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д. Численное моделирование ударно-волновых процессов в металлах // ФГВ. 1984. Т. 20. № 5. С. 114–122.
11. Уорд И. Механические свойства твердых полимеров М.: Химия, 1975. 360 с.
12. Френкель Я. И., Образцов Ю. Н. Феноменологическая теория механических свойств аморфных тел и распространение колебаний в них // ЖЭТФ. 1939. Т. 9. в. 9. С. 1081–1093.
13. URL: <http://www.ficp.ac.ru/rusbank/> (дата обращения 30.04.2011).
14. Amin A. F., 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. Vol. 34. P. 75–95.
15. S. P. Marsh (Ed.) LASL Shock Hugoniot Data. Univ. California Press. Berkeley, 1980.
16. Yang L. M., Shim V. P. W., Lim C. T. A visco-hyperelastic approach to modelling the constitutive behaviour of rubber // International Journal of Impact Engineering. 2000. Vol. 24. P. 545–560.
17. Treloar L. R. G. The mechanics of rubber elasticity // Proc. Roy. Soc. London. 1976. A 351. P. 295–406.
18. Wunderlich B. Thermal Analysis of Polymeric Materials. Springer Berlin Heidelberg, 2005.

Рукопись поступила в редакцию 10 мая 2011 г.