На правах рукописи

Воронин

Воронин Михаил Сергеевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКО-УПРУГОГО ПОВЕДЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ В РАМКАХ ПОДХОДА МАКСВЕЛЛА-ГОДУНОВА

01.02.04 — механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск — 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель: **Мержиевский Лев Алексеевич**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Роменский Евгений Игоревич,**
доктор физико-математических наук,
ФГБУН Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
главный научный сотрудник

Киселев Сергей Петрович,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБУН Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: ФГБУН ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН» Обособленное подразделение «Институт вычислительного моделирования СО РАН»

Защита состоится «26» февраля 2018 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 003.054.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, пр. академика Лаврентьева, 15. Тел.: (383)333-21-66, e-mail: kurguzov@hydro.nsc.ru

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт гидродинамики им. Лаврентьева СО РАН, www.hydro.nsc.ru.

Автореферат разослан «   » января 2018 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук   Кургузов В. Д.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Полимеры являются материалами, которые благодаря своим уникальным свойствам, очень часто используются как элементы экспериментальных установок, технических изделий аэрокосмической, автомобильной и оборонной промышленности, где требуется как можно более точное описание поведения этих материалов в условиях динамического нагружения. В частности, плексиглас в экспериментальных сборках применяется как окно, поскольку сохраняет прозрачность до высоких давлений, а также используется как инертная преграда при исследовании чувствительности взрывчатых веществ. Фторопласт используется как изоляция в экспериментах по измерению профилей давления с помощью манганиновых датчиков, а также для снижения трения между элементами конструкций. Эпоксидные смолы нашли широкое применение в качестве матрицы в композитных материалах. В этой связи является **актуальным** построение и апробация моделей, адекватно описывающих поведение полимеров в условиях динамического нагружения. Также в связи с развитием вычислительной техники компьютерное моделирование конструкций, подвергаемых внешним воздействиям различного типа, становится всё более значимым и актуальным. В настоящее время экспериментаторы при проектировании экспериментальных установок всё более широко используют методы математического моделирования, поскольку это помогает избежать проведения дополнительных экспериментов, то есть лишних затрат времени и ресурсов.

Проблеме моделирования деформирования полимеров в последние десятилетия были посвящены многочисленные научные работы. При этом работ, в которых рассматриваются модели ударно-волнового деформирования полимеров, существенно меньше, чем работ, в которых строятся модели квазистатического и квазидинамического деформирования полимеров. Особенности механического поведения полимеров связаны со сложностью внутренней структуры этих материалов. Для наиболее точного описания процессов деформирования полимеров в широком диапазоне скоростей деформации модель, претендующая на такое описание, должна учитывать микроструктурные особенности полимеров. Построению модели, адекватно описывающей механическое поведение полимеров как при квазистатических, так и при динамических нагрузках, посвящена данная работа. За основу взята модель вязко-упругого тела максвелловского типа [1], до этого применяемая, главным образом, к описанию динамического деформирвания металлов.

Целью настоящей диссертационной работы является построение определяющих соотношений модели вязко-упругого тела максвелловского типа и последующее её применение к описанию деформирования ряда полимеров: ПММА (плексиглас, оргстекло), ПТФЭ (фторопласт, тефлон), эпоксидной смолы, резины, полиэтилена, а также тестирование модели с помощью решения одномерных задач ударно-волнового деформирования этих полимерных материалов.

Основные задачи исследований

1. Для рассматриваемого ряда полимеров необходимо построить уравнения состояния (УрС), включающие зависимость термодинамического потенциала от первого и второго инвариантов тензора эффективных упругих деформаций.
2. При построении уравнения состояния требуется сформулировать новый вид слагаемого свободной энергии, описывающего вклад от теплового возбуждения атомов, удовлетворяющего нескольким требованиям: 1) расчёт теплоёмкости по уравнению состояния должен соответствовать имеющимся моделям теплоёмкости полимеров; 2) расчёт температуры за фронтом ударной волны должен соответствовать имеющимся экспериментальным данным ударной адиабаты; 3) формулировка должна быть как можно более простой, для того чтобы полученное уравнение состояния не снижало скорости расчётов, в которых оно интенсивно используется.
3. Необходимо сформулировать вид функции времени релаксации касательных напряжений (ВРКН) для полимерных сред, в которых возможно протекание нескольких механизмов релаксации. Определить параметры этой функции для рассматриваемого набора полимеров, а также для нескольких полимеров, предварительно подвергнутых ионизирующему излучению (ПММА, ПТФЭ, сверхвысокомолекулярный полиэтилен).
4. Сформулировать новый метод определения параметров функции ВРКН, а также ускорить расчёт параметров, ответственных за описание предела упругости материала.
5. Используя построенные определяющие соотношения, провести одномерные расчёты ударно-волнового деформирования рассматриваемых полимеров и сравнить полученные с помощью нового метода результаты расчетов с соответствующими экспериментальными данными.

Научная новизна

1. Предлагаемый новый подход к моделированию вязко-упругого поведения сплошной среды впервые в полной мере применяется для описания деформирования полимеров. Основная особенность подхода заключается в использовании уравнения состояния в виде зависимости энергии от первого и второго инвариантов тензора деформаций, использовании функции времени релаксации касательных напряжений, зависящей от параметров, характеризующих состояние среды, а также понятия тензора эффективной упругой деформации, предложенного С. К. Годуновым. Благодаря

этому возможно единообразное описание упругой и пластической деформаций среды, то есть нет необходимости делать разложение тензора деформации на соответствующие составляющие и вводить критерии пластичности.

2. Предложена новая формулировка теплового слагаемого уравнения состояния полимера, которая является более точной по сравнению с использовавшимися ранее простыми уравнениями состояния металлов, поскольку позволяет рассчитать теплоёмкость полимера в зависимости от температуры и плотности. С другой стороны предложенная формулировка имеет достаточно простой вид по сравнению с широко-диапазонными УрС, что является преимуществом при использовании этого слагаемого в расчётах, интенсивно использующих УрС.
3. В рамках рассматриваемого подхода впервые применён принцип суммы нескольких ВРКН для описания механического поведения среды с несколькими микроструктурными механизмами релаксации. Идея принципа основана на результатах релаксационной спектрометрии полимеров, регистрирующих большое число различных микроструктурных механизмов релаксации напряжений в полимерах. Благодаря введению этого принципа возможно описание предела упругости и, как следствие, механического поведения полимеров в широком диапазоне скоростей деформации и температур. Также благодаря этому принципу стало возможным описание пластических участков диаграмм деформирования некоторых полимеров при больших значениях деформации.
4. Предложен новый упрощённый метод определения параметров ВРКН основанный на традиционном, которым является метод решения задачи о деформирования тонкого стержня. Упрощённый метод позволяет намного быстрее рассчитывать параметры ВРКН, ответственные за описание предела упругости материала.

Практическая значимость

1. Построенные в работе уравнения состояния могут быть использованы в любых моделях и расчётах динамического деформирования полимеров. При этом несмотря на свой несложный вид, их точность сравнима с точностью имеющихся широко-диапазонных уравнений состояния в диапазоне давлений до 60–100 ГПа. Помимо теплоёмкости и температуры за фронтом ударной волны, они могут быть использованы для расчёта других термодинамических функций, например коэффициента Грюнайзена, являющегося функцией плотности и температуры в случае полимеров.
2. Предложенный упрощенный метод расчёта параметров ВРКН может быть легко преобразован для решения обратной задачи –

расчёта предела упругости материала по заданным скорости деформации и температуре. Построенные в работе функции ВРКН полимеров могут быть использованы в таких расчётах для любых моделей, где требуется величина предела упругости материала.
3. Построенную в работе модель вязко-упругого тела максвелловского типа для полимеров можно внедрить в коммерческие пакеты, например ANSYS Autodyn.
4. Развитый в работе подход для решения одномерных задач можно адаптировать для решения двумерных и трёхмерных задач ударно-волнового деформирования полимеров. Полученные в данной работе определяющие соотношения можно использовать при решении таких классов задач.

Методология и методы исследования. При построении уравнений состояния используется метод полуэмпирических уравнений состояния. Численным методом определения искомых параметров УрС является минимизация суммы квадратичных отклонений расчётных значений ударной адиабаты от соответствующих экспериментальных данных в процессе варьирования искомых параметров. При этом используется готовая программная реализация соответствующего численного метода из пакета MATLAB. Для определения всех искомых параметров необходимо и достаточно наличие данных о теплоёмкости и ударной адиабате материала.

Определение искомых параметров функции ВРКН основано на традиционном методе решения задачи о деформировании тонкого стержня. Система уравнений для этого метода является упрощением исходной системы уравнений рассматриваемой модели. Для определения искомых параметров необходимы диаграммы деформирования материала. В работе предлагается дальнейшее упрощение метода, для которого достаточно наличия данных только предела упругости материала. Определение искомых параметров также основано на минимизации суммы квадратичных отклонений расчётных и экспериментальных значений.

В основе численного метода решения ударно-волновых задач лежит ранее разработанный метод, аналогичный методу распада разрывов Годунова. Расчёт на каждом шаге по времени производится в два этапа. На первом этапе производится расчёт промежуточных «распадных» величин в акустическом приближении. Второй этап заключается в интегрировании законов сохранения с использованием «распадных» величин, найденных на предыдущем этапе.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. На основе модели вязко-упругого тела максвелловского типа построена модель деформирования полимеров.
2. Построены новые замыкающие соотношения модели – уравнения состояния при нешаровом тензоре деформаций и функции времени

релаксации касательных напряжений для ряда полимерных материалов: ПММА, ПТФЭ, эпоксидной смолы, резины.
3. Валидация модели с помощью расчётов серии одномерных тестовых задач ударно-волнового деформирования полимеров.

Достоверность. Проверка адекватности модели является одной из целей работы. Определение параметров определяющих соотношений основано на использовании соответствующих экспериментальных данных. Приводимые в работе результаты расчётов задач ударно-волнового деформирования полимеров также сравниваются с соответствующими экспериментальными данными разных независимых авторов.

Апробация работы. Основные результаты докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

– IX Харитоновские тематические научные чтения (Саров, 2007)
– Забабахинские научные чтения (Снежинск, 2007, 2012)
– Проблемы механики сплошных сред и физики взрыва (Новосибирск, 2007)
– Всероссийская конференция «Новые математические модели механики сплошных сред: построение и изучение» (Новосибирск, 2009)
– Международная конференция «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике», посвященная 110-летию академика М.А. Лаврентьева (Новосибирск, 2010)
– XIII и XV Международные конференции «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2011, 2014)
– II и III Всероссийские конференции «Деформирование и разрушение структурно-неоднородных сред и конструкций» (Новосибирск, 2011, 2014)
– V и VII Российские конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение» (Екатеринбург, 2008, 2012)
– XXIII Всероссийская конференция «Численные методы решения задач теории упругости и пластичности» (Барнаул, 2013)
– Всероссийская конференция «Взрыв в физическом эксперименте» (Новосибирск, 2013)
– Proc. International conference «Failure of Heterogeneous Materials under Intense Loading: Experiment and Multi-scale Modeling» (Perm, 2014)
– XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Казань, 2015)
– Семинар отдела механики твёрдого деформируемого тела ИГиЛ СО РАН под руководством академика Анина Б. Д. (Новосибирск, 2017)

Личный вклад. Представленная в работе формулировка теплового слагаемого свободной энергии была предложена автором. Автором был предложен и сформулирован упрощённый метод определения параметров

ВРКН. В рамках рассматриваемого подхода автором был предложен принцип суммы слагаемых ВРКН при описании зависимости предела упругости полимеров и моделировании пластических участков диаграмм деформирования полимеров. Автором был разработан набор программ в пакете MATLAB, с помощью которого были выполнены все приводимые в работе результаты расчётов.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 8 печатных изданиях, 8 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи работы, ее научная и практическая значимость, дается краткий обзор развития модели вязко-упругого тела максвелловского типа, её приемущества и принципы построения этой модели для какого-либо класса материалов. Также приводится краткий обзор существующих работ с формулировками уравнений состояния полимеров, моделей, описывающих предел упругости и диаграммы деформирования полимеров, моделей динамического деформирования полимеров. Дано краткое описание содержания диссертации по главам. Описан личный вклад автора.

Первая глава начинается с описания особенностей строения и механического поведения полимеров. Рассматриваются основные понятия и представления, применяемые к описанию микроструктуры полимеров; основные виды молекулярной подвижности, как они влияют и проявляются при упругом и неупругом деформировании полимера.

В п. **1.2** дан дополнительный обзор имеющихся подходов к моделированию деформирования полимеров, а также обзор развития моделей деформирования полимеров, главным образом, на примере эластомеров.

В п. **1.3** более подробно приводится формулировка модели вязкоупругого тела максвелловского типа [1]. Уравнения движения среды формулируются без учета теплопередачи, химических реакций и других внутренних процессов. Состояние среды характеризуется полем скоростей $u_i(x_1, x_2, x_3, t)$, полем напряжений $\sigma_{ij}(x_1, x_2, x_3, t)$ и температурой $T(x_1, x_2, x_3, t)$. Предполагаются выполненными законы сохранения массы, импульса и энергии.

Для описания деформации вводится понятие *тензор эффективной упругой деформации* – тензор определённый по измеренному напряжённому состоянию и температуре, а также в соответствии с этим *эффективный метрический тензор упругой деформации* $G^{eff} = \|g_{ij}^{eff}\|$. По аналогии с выражениями для эволюции метрического тензора реальной деформации

G можно записать выражения для эволюции метрического тензора эффективной упругой деформации:

$$\begin{aligned} &\frac{dG^{eff}}{dt} + W^* G^{eff} + G^{eff} W = -\Phi = -\|\varphi_{ij}\|, \\ &W = \|w_{ik}\|, w_{ik} = \frac{\partial u_i}{\partial x_k}, \end{aligned} \tag{1}$$

отличающихся от уравнений для полного метрического тензора деформации только наличием правых частей $-\varphi_{ij}$, которые в рассматриваемой модели задают скорость неупругих процессов – скорость релаксации. Компоненты φ_{ij} выбираются так, чтобы выполнялось уравнение неразрывности (или закон сохранения массы), как и в среде без релаксации.

В главных осях тензора деформаций эволюционные уравнения удобно записывать с помощью логарифмического тензора деформаций Генки $H = -\frac{1}{2}\ln G$:

$$\begin{aligned} &\frac{dh_i}{dt} - \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = -\varphi_i, \\ &\varphi_i = \frac{1}{\tau}\left(h_i - \frac{h_1 + h_2 + h_3}{3}\right) = \frac{d_i}{\tau}, \end{aligned} \tag{2}$$

где $h_i (i = 1, 2, 3)$ – диагональные компоненты тензора H, также являющиеся логарифмами относительных удлинений/сжатий элемента среды вдоль главных осей; в (2) суммирование по индексу i не производится.

В случае конечных деформаций связь тензора напряжений с метрическим тензором деформации $\|g_{ij}\|$ в нелинейной теории упругости задается формулами Мурнагана, которые для тензора деформаций Генки H в главных осях принимают вид:

$$\sigma_i = \left(\rho \frac{\partial E}{\partial h_i}\right)_S, \tag{3}$$

где E – удельная внутренняя энергия.

Для решаемых в работе задач достаточно одномерной формулировки рассматриваемой модели:

$$
\begin{gathered}
\frac{\partial(\rho r^{\nu})}{\partial t}+\frac{\partial\left(\rho u r^{\nu}\right)}{\partial r}=0,\ \frac{\partial\left(\rho u r^{\nu}\right)}{\partial t}+\frac{\partial\left[\left(\rho u^{2}-\sigma_{1}\right) r^{\nu}\right]}{\partial r}+\nu r^{\nu-1}\sigma_{2}=0,\\
\frac{\partial\left[\rho\left(E+u^{2}/2\right) r^{\nu}\right]}{\partial t}+\frac{\partial\left[\left(\rho u\left(E+u^{2}/2\right)-\sigma_{1}u\right) r^{\nu}\right]}{\partial r}=0,\\
\frac{\partial h_{2}}{\partial t}+u\frac{\partial h_{2}}{\partial r}-\frac{\nu(3-\nu)}{2}\frac{u}{r}=-\frac{d_{2}}{\tau},\ \frac{\partial h_{3}}{\partial t}+u\frac{\partial h_{3}}{\partial r}-\frac{\nu(\nu-1)}{2}\frac{u}{r}=-\frac{d_{3}}{\tau},\\
E=E\left(\delta,D,S\right),\ \tau=\tau\left(\sigma_{i},T\right),\ \sigma_{i}=\rho\left(\frac{\partial E}{\partial h_{i}}\right)_{S},\ T=\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{\delta,D},\\
\delta=\frac{\rho}{\rho_{0}}=\exp\left(-\sum_{i=1}^{3}h_{i}\right),\ D=\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{3}d_{i}^{2}\right),\ d_{i}=h_{i}+\frac{1}{3}\ln\delta,
\end{gathered}
\tag{4}
$$

где t, r – время и пространственная переменная; ρ, u, T, S – плотность, скорость, температура, энтропия; σ_i – главные напряжения; $E\left(\delta, D, S\right)$ – уравнение состояния при нешаровом тензоре деформаций, в качестве которого может быть выбран любой термодинамический потенциал; $\tau(\sigma_i, T)$ – время релаксации касательных напряжений; ν – показатель симметрии: $\nu = 0$ – плоская, $\nu = 1$ – цилиндрическая, $\nu = 2$ – сферическая; δ и D – первый и второй инварианты тензора деформаций.

Вторая глава посвящена построению уравнения состояния в случае полимерных сред, которое бы соответствовало перечисленным во введении требованиям. В п. **2.1** дополнительно приводится небольшой обзор используемых ранее и современных уравнений состояния. Построением уравнений состояния полимеров занимались: Хищенко К. В., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М. В., Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортов В. Е., Молодец А. М., Morris C. E., Fritz J. N., McQueen R. G., Clements B. E. и др. Экспериментально подтверждённая теория теплоёмкости полимеров была предложена Вундерлихом Б. и Бауром Г.

Для описания свойств неидеальных сред в широком диапазоне параметров применяется метод полуэмпирических уравнений состояния, в которых общий вид функциональных зависимостей устанавливается на основании теоретических соображений, а данные эксперимента используются для определения численных значений коэффициентов в этих зависимостях.

Наиболее традиционным в полуэмпирических моделях является разделение термодинамического потенциала, например, свободной энергии, на холодную составляющую $E_x(\delta)$ и определяемые термическим возбуждением тепловые члены. В свою очередь, тепловые компоненты представляются в виде суммы вкладов теплового движения атомов или молекул $F_a(\delta, T)$ и вклада термически возбужденных электронов $F_e(\delta, T)$. В рассматриваемой модели необходимо добавление еще одного – девиаторного слагаемого

$F_d(\delta,D)$, что приводит к общему выражению

$$F(\delta, D, T) = E_x(\delta) + F_d(\delta,D) + F_a(\delta, T) + F_e(\delta, T). \tag{5}$$

Конкретный вид и форма записи отдельных членов (5) зависят от общности соответствующего полуэмпирического уравнения состояния.

Для холодного давления строимого УрС принята следующая функциональная зависимость:

$$\begin{aligned} &E_x(\delta) = V_{0K}\left(\frac{a\delta^{m-1}}{m-1} + \frac{b\delta^{n-1}}{n-1}\right) - E_{x0}, \;\; E_{x0} = V_{0K}\left(\frac{a}{m-1} + \frac{b}{n-1}\right), \\ &P_x(\delta) = a\delta^m + b\delta^n - P_{x0}, \;\; P_{x0} = a + b. \end{aligned} \tag{6}$$

Она имеет простой вид и с хорошей точностью аппроксимирует холодные составляющие широко-диапазонных УрС как в области сжатий, так и разрежений.

При построении тепловой составляющей уравнения состояния обычно исходят из рассмотрения всевозможных степеней свободы атомов и молекул среды. Колебательный спектр полимеров делят на два участка: скелетные (акустические) и групповые (оптические) колебательные моды. Под скелетными подразумеваются колебания самой макромолекулы, которые охватывают диапазон акустических колебаний 20–20000 Гц. Групповые колебания включаются в себя все движения с более высокими частотами достаточно изолированных групп атомов, расположенных вдоль макромолекулы. Для полимеров со сложной структурой звена сумма групповых вкладов в теплоемкость будет иметь большое количество слагаемых, например, 45 для ПММА и 16 для ПТФЭ.

В данной работе было установлено, что для рассматриваемых в работе полимеров теплоёмкость можно с хорошей точностью аппроксимировать суммой из не менее трех эйнштейновских функций:

$$c_V = \sum_{i=1}^{3} c_i = R_\mu \sum_{i=1}^{3} N_i \frac{x_i^2 \exp x_i}{(\exp x_i - 1)^2}, \; x_i = \frac{\theta_i}{T}, \tag{7}$$

где R_μ – универсальная газовая постоянная, деленная на молярную массу; θ_i имеют смысл «усреднённых» характеристических температур для некоторых наборов колебательных мод; N_i – интерполяционные константы, удовлетворяющие условию $\sum N_i \approx N$, где N – сумма чисел всех колебательных мод. Ввиду своей простоты формула (7) была принята за исходную формулу теплоёмкости при построении теплового «атомного» слагаемого УрС.

Таким образом, в соответствии с (7) свободная энергия «атомного» теплового слагаемого, строимого УрС, имеет вид:

$$F_a(\delta, T) = R_\mu T \sum_{i=1}^{3} N_i \ln\left(1 - e^{-x_i}\right), \tag{8}$$
$$x_i = \frac{\theta_i(\delta)}{T}, \theta_i(\delta) = \theta_{0i}\delta^{\gamma_{0i}},$$

где γ_{0i} – интерполяционные константы, имеющие смысл коэффициентов Грюнайзена для соответствующих наборов колебательных мод. Константы N_i, θ_{0i} находятся с помощью аппроксимации изохорной теплоёмкости. Константы γ_{0i} находятся с помощью аппроксимации экспериментальной ударной адиабаты.

В случае с ПММА также было добавлено слагаемое, учитывающее тепловое возбуждение электронов при больших амплитудах ударной волны, поскольку без него не удаётся описать экспериментальные данные температуры вдоль ударной адиабаты ПММА.

В п. **2.5** на основе оценочных расчётов показано, что при решении ударно-волновых задач в полимерах девиаторное слагаемое уравнения состояния можно использовать в виде:

$$F_d(\delta, D) = G(\delta)D = 2c_{0\perp}^2 \delta_0^{\xi_0} D, \tag{9}$$

где $c_{0\perp}$ – поперечная скорость звука среды при $T = 0\text{K}$, ξ_0 – интерполяционная константа. Такое же девиаторное слагаемое использовали ранее для металлов.

При решении задач, в которых рассматриваются скорости деформации, существенно меньшие ударно-волновых, для более точного описания необходимо учитывать зависимость модуля сдвига полимера от скорости деформации и температуры. На основе имеющихся в литературе данных для ПММА в работе была построена аппроксимирующая функция поперечной скорости звука $c_\perp(T, \dot{\epsilon})$ от температуры и скорости деформации, которую использовали при расчётах диаграмм деформирования ПММА. Для других полимеров подобную функцию аппроксимировали сплайном по наклону упругого участка экспериментальных диаграмм деформирования. В оценочных расчётах было показано, что в ударно-волновой задаче функцию $c_\perp(T, \dot{\epsilon})$ можно заменить постоянным значением, которое она принимает в пределе низких температур и высоких скоростей деформации.

В п. **2.6** приводятся параметры построенных уравнений состояния для ПММА, ПТФЭ, эпоксидной смолы, резины и ПЭ, результаты расчётов по этим уравнениям состояния кинематических величин и температуры вдоль ударной адиабаты, а также теплоёмкости для этих полимеров.

Третья глава посвящена построению зависимостей для времени релаксации касательных напряжений (далее также ВРКН) в случае полимеров и методам определения параметров этих зависимостей.

Данные релаксационной спектрометрии свидетельствуют о том, что большинство релаксационных процессов в полимерах имеют экспоненциальный характер, поэтому в основе функции ВРКН лежит формула Больцмана-Аррениуса:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{U}{RT}\right), \tag{10}$$

где U – потенциальный барьер (энергия активации), который необходимо преодолеть кинетической единице для перехода в новое равновесное состояние, T – температура, τ_0 – некоторое характерное для кинетической единицы время. Если к полимеру приложены внешние напряжения, то энергия активации изменяется из-за работы внешних сил на переход кинетической единицей из одного равновесного состояния в другое. Для среды с одним механизмом релаксации функция времени релаксации касательных напряжений примет вид:

$$\begin{aligned} &\tau(\hat{\sigma}, T) = \tau_0 \exp\left(\frac{U_0 - \nu_A \hat{\sigma}}{RT}\right), \\ &\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2}{6}}, \end{aligned} \tag{11}$$

где $\hat{\sigma}$ – интенсивность касательных напряжений; σ_1, σ_2, σ_3 – главные напряжения.

В случае полимеров, которым свойственны спектры механизмов релаксации, естественно представить функцию ВРКН суммой из слагаемых вида (11):

$$\tau(\hat{\sigma}, T) = \sum_i \tau_{0i} \exp\left(\frac{U_{0i} - \nu_{0i} \hat{\sigma}}{RT}\right), \tag{12}$$

где каждое из слагаемых ассоциируется с отдельным механизмом релаксации.

Если материал проявляет упрочнение/разупрочнение в области пластического течения, то к энергии активации добавляются слагаемые, пропорциональные пластической деформации в некоторой степени. Коэффициенты пропорциональности при этом имеют смысл коэффициентов упрочнения/разупрочнения, в зависимости от их знака.

В работе также рассмотрены диаграммы деформирования полимеров предварительно подвергнутых облучению. Для их моделирования можно брать функцию ВРКН необлучённого полимера, с добавлением в неё зависимости начальной энергии активации от интенсивности облучения. В данной работе построены линейные зависимости начальной энергии активации от интенсивности облучения для ПММА, ПТФЭ, СВМПЭ и некоторых его композитов.

В п. **3.3** приводится формулировка метода определения параметров времени релаксации касательных напряжений, ставшего традиционным – решение задачи о деформировании тонкого стержня в рамках рассматриваемой модели.

В п. **3.4** формулируется упрощённый метод определения параметров ВРКН, ответственных за описание предела упругости материала. На основе выводов из [1] можно утверждать, что в точке предела упругости σ_Y, для которой $\dot{\sigma}_1 = 0$, выполняется:

$$\dot{\epsilon} = \frac{2}{3}\frac{h_1 - h_2}{\tau(\sigma_Y, T)}. \tag{13}$$

где $\dot{\epsilon}$ – скорость деформации. Чтобы определить значения h_1 и h_2, для всех экспериментальных точкек σ_{Yi} необходимо численно решить систему из двух нелинейных уравнений. После этого один раз проварьировать искомые параметры минимизируя сумму квадратичных отклонений расчётной и экспериментальной скорости деформации. Такой метод позволяет существенно сократить время вычислений по сравнению с традиционным методом, где на каждом шаге варьирования искомых параметров необходимо решать систему из двух дифференциальных уравнений.

В п. **3.5** описаны особенности определения параметров ВРКН в случае полимеров, которые, вероятно, можно обобщить и на другие среды, обладающие несколькими механизмами релаксации. Для таких сред на графиках предела упругости, который будет поверхностью $\sigma_Y(\dot{\epsilon}, T)$, можно выделить области линейной зависимости $\sigma_Y(\lg(\dot{\epsilon}), T_0)$ с разным наклоном. Каждая из этих областей соответствует какому-то одному микроструктурному механизму, за счёт которого протекает релаксация напряжений. Параметры ВРКН для каждого слагаемого определяются по экспериментальным точкам σ_Y из соответствующей этому слагаемому области $(\dot{\epsilon}, T)$.

Для наиболее точного определения параметров ВРКН желательно иметь экспериментальные результаты, полученные в широком диапазоне температур и скоростей деформации. При недостатке экспериментальной информации одни и те же экспериментальные точки предела упругости σ_Y можно описать, используя разные наборы параметров ВРКН.

В п. **3.6-3.10** представлены результаты опеределения параметров ВРКН и построенные с их помощью диаграммы деформирования для ПММА, ПТФЭ, эпоксидной смолы и резины на основе экспериментальных данных разных авторов.

Четвертая глава посвящена результатам расчётов ударно-волновых задач. В п. **4.1** более детально описан используемый численный метод. В его основе лежит ранее разработанный метод, аналогичный методу распада разрывов Годунова. Расчёт на каждом шаге по времени производится в два этапа. На первом этапе производится расчёт промежуточных «распадных» величин в акустическом приближении. Второй этап заключается в интегрировании законов сохранения с использованием «распадных» величин, найденных на предыдущем этапе.

В п. **4.2** приводятся результаты решения задачи о распространении стацонарной ударной волны. На примере ПММА проводится анализ величины касательных напряжений за фронтом ударной волны в зависимости от её интенсивности. Показано, что информации о пределе упругости, основанной только на диаграммах деформирования, может быть недостаточно, поскольку получаемые при этом значения динамического предела упругости не совпадают с имеющимися экспериментальными данными для амплитуд выше 2 ГПа.

В п. **4.3** приведены результаты решений задачи о соударении пластин и распространении ударно-волнового импульса в разных полимерах. В п. **4.4** на примере ПММА приведены результаты расчёта задачи о затухании ударной волны при взаимодействии с догоняющей волной разгрузки. Эта задача представляет особый интерес с точки зрения проверки применимости модели для описания ударно-волновых процессов. В п. **4.5** приведены результаты двух расчётов отражения ударной волны от свободной поверхности с внедрением простого критерия разрушения. Показано, что в одномерных расчётах можно оценить момент и область, в которой возникает откол в материале. Результаты расчётов сравниваются с соответствующими экспериментами.

В **заключении** приведены основные результаты работы:

1. Созданная модель вязкоупругого тела максвелловского типа применима для описания процессов квазистатического и динамического деформирования полимеров;
2. Для ПММА, ПТФЭ, эпоксидной смолы, резины, ПЭ построены уравнения состояния в виде зависимости свободной энергии от первого и второго инвариантов тензора деформаций. Сформулирован новый вид теплового слагаемого свободной энергии, позволяющий описать теплоёмкость полимера в зависимости от температуры и плотности, температуру за фронтом УВ в диапазоне до 60 ГПа, удобный для расчётов, интенсивно использующих УрС;
3. Для перечисленных полимеров построены зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды;
4. Предложен и использован упрощённый метод определения параметров ВРКН, ответственных за описание предела упругости материала;
5. Применимость модели подтверждена сравнением результатов расчетов одномерных задач ударно-волнового деформирования с независимыми экспериментальными данными.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Воронин М. С.* Упрощенный метод расчета параметров времени релаксации касательных напряжений на примере полимеров / М. С. Воронин // Вычислительные методы и программирование. — 2017. — Т. 18, вып. 2. — С. 146—157.
2. Temperature measurements for shocked polymethylmethacrylate, epoxy resin, and polytetrafluoroethylene and their equations of state / S. A. Bordzilovskii, S. M. Karakhanov, L. A. Merzhievskii, M. S. Voronin // Journal of Applied Physics. — 2016. — Т. 120, вып. 13. — С. 135903-1—135903-11.
3. Температура ударного сжатия полимерных материалов / С. А. Бордзиловский, М. С. Воронин, С. М. Караханов, Л. А. Мержиевский // Доклады Академии Наук. — 2014. — Т. 455, № 6. — С. 646—650.
4. *Воронин М. С.* Моделирование ударно-волнового деформирования политетрафторэтилена / М. С. Воронин, Л. А. Мержиевский // Учёные записки ЗабГГПУ. Серия: Физика, математика, техника, технология. — 2013. — № 3. — С. 14—21.
5. *Воронин М. С.* Моделирование ударно-волнового деформирования эпоксидной смолы / М. С. Воронин, Л. А. Мержиевский // Учёные записки ЗабГГПУ. Серия: Физика, математика, техника, технология. — 2012. — № 3. — С. 26—31.
6. *Мержиевский Л. А.* Моделирование деформирования и разрушения полимеров на основе максвелловского подхода / Л. А. Мержиевский, М. С. Воронин // Известия Алтайского ГУ. Серия: Математика и механика. — 2012. — Т. 1, № 1. — С. 95—98.
7. *Мержиевский Л. А.* Моделирование ударно-волнового деформирования полиметилметакрилата / Л. А. Мержиевский, М. С. Воронин // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 2. — С. 113—123.
8. *Воронин М. С.* Модель квазистатического и динамического деформирования эластомеров / М. С. Воронин, Л. А. Мержиевский // Учёные записки ЗабГГПУ. Серия: Физика, математика, техника, технология. — 2011. — № 3. — С. 53—59.

Список литературы

1. *Годунов С. К.* Элементы механики сплошных сред и законы сохранения / С. К. Годунов, Е. И. Роменский. — Новосибирск : Научная книга, 1998.

Подписано в печать Заказ № 227
Формат бумаги 60x84 1/16 Объем 1 п.л.
Тираж 75 экз. Бесплатно

Отпечатано на полиграфическом участке Института гидродинамики
им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. акад. Лаврентьева, 15