

Моделирование деформационных свойств полимерных материалов.

Мартышенко В.А.

(Военная академия радиационной, химической и бактериологической  
защиты и инженерных войск)

Полимерные материалы, занимающие, обладают свойствами, характерными как для твердых тел, так и для жидкости. А так как соотношения между компонентами, ответственными за свойства материала, может быть различным, то это объясняет и многообразие свойств полимерных материалов. Одним из характерным свойств материалов является его способность деформироваться.

Попытки объединить классические методы исследования деформаций твердых тел и жидкости ещё не привели к созданию классических уравнений для описания деформационных свойств полимерных материалов. Полимерные материалы, появившиеся гораздо позднее традиционных материалов, обладавшие новыми и неизвестными свойствами, требовали на первом этапе их исследования создания базы экспериментальных данных, которые могли бы стать фундаментом для дальнейших исследований и создания теоретических основ науки о свойствах нового класса материалов. По мере накопления первоначальных экспериментальных данных стали создаваться новые модели для описаний деформационных явлений. Так появились модели Максвелла, Кельвина-Фойгта-Мейера, линейного стандартного тела, а затем и более сложные модели, представляющие собой линейные комбинации простых моделей [1, 2, 3, 4, 5]. Как правило, модели создавались как чисто умозрительные конструкции, а затем искали подтверждения этих моделей для реальных материалов. Если какая-либо модель не соответствовала материалу, то эту модель «доводили» путём

модернизации её структуры. Иными словами, сначала создавали модель, а затем проверяли диапазон её действия. И если диапазон модели был достаточно широк, то эта модель как лучший экземпляр в конкурентной борьбе занимал соответствующее место в рейтинге, а модель получала распространение.

В данной работе предлагается другой подход для моделирования исследуемых явлений, Основой для моделирования являются экспериментальные данные, а результатом моделирования являются уравнения, описывающие экспериментальные зависимости. Таким образом, предлагаемая методика является обратной по отношению к традиционным подходам. Желательно, чтобы экспериментальные данные были получены с достаточной точностью и статистически обоснованы. Чем выше будет уровень требований к исходным данным, тем более точную модель можно создать (построить, сконструировать, спроектировать).

Результатом моделирования является дифференциальное уравнение для описания исследуемого явления или процесса. Никаких ограничений на структуру дифференциальных уравнений не накладывается. Каждый исследователь должен самостоятельно решить, какими частными условиями нужно ограничить поиск модели. Критерием показателя модели может служить отклонение модельных значений функции от экспериментальных.

Метод получения моделей был проверен на различных физических задачах для различных материалов и является универсальным по своей природе и обоснован математическими методами обработки информации.

Эспериментальные данные были получены в лабораторных условиях при испытании деформационных свойств полимерных материалов на твердомере ТР 5006 М при вдавливании индентора с металлическим шариком под нагрузкой 100Н (Рис.1).



Рис. 1.

При этой нагрузке фиксируется глубина внедрения индентора с точностью до 0,02 мм. Начиная с данного момента начинается видеосъемка процесса деформация материала, выполняемая с помощью видеокамеры или камерой мобильного телефона. Оба прибора имеют встроенные таймеры, что позволяет фиксировать время изображения, а направлены камеры на шкалу прибора, фиксирующую показания глубины внедрения индентора. Таким образом, после первоначального внедрения индентора производится видеосъемка процесса восстановления деформации полимерного материала. С целью повышения надежности результатов производилась видеозапись четырех последовательно выполненных опытов для разных точек опытного образца. Обработка опытных данных производилась на компьютере, 4 массива данных синхронизировались и для дальнейших исследований использовались средние значения 4-х массивов. Таким образом, для построения модели использованы статистические опытные данные.

Моделирование экспериментальных значений производится обыкновенными дифференциальными уравнениями, структура которых выбирается пользователем. В качестве модели принимается линейное обыкновенное однородное дифференциальное уравнение третьего порядка с постоянными коэффициентами

$$Y''' + a_2 Y'' + a_1 Y' + a_0 Y = 0, \quad (1)$$

где  $Y' = dY/dt$ .

Коэффициенты дифференциального уравнения  $a_0$ ,  $a_1$  и  $a_2$  принимаются постоянными и определяются из условия минимизации модельных и экспериментальных значений для всех опытных точек.

Для массива опытных значений получены следующие значения для коэффициентов дифференциального уравнения (1)

$$a_2=0; \quad a_1=-643337; \quad a_0=134,2359.$$

Для построения частных решений дифференциального уравнения строим характеристическое уравнение

$$K^3 + a_2 K^2 + a_1 K + a_0 = 0. \quad (2)$$

Определяем корни характеристического уравнения. Если корень уравнения является вещественным числом  $K_1 = \alpha$ , то соответствующее ему частное решение имеет вид  $\exp(\alpha t)$ . Если имеем два комплексно сопряженных корня  $K_2 = \alpha + i \beta$ ;  $K_3 = \alpha - i \beta$ ;  $i = \sqrt{-1}$ , то соответствующие им частные решения имеют вид

$$\exp(\alpha t) \sin(\beta t); \quad \exp(\alpha t) \cos(\beta t).$$

Решение кубического уравнения дает корни характеристического уравнения  $K_1 = 0,280609$ ;  $K_2 = -0,085341$ ;  $K_3 = 5,2744 \cdot 10^{-5}$ .

Общее решение однородного линейного дифференциального уравнения (1) получаем методом суперпозиции частных решений

$$Y = C_1 \exp(K_1 t) + C_2 \exp(K_2 t) + C_3 \exp(K_3 t), \quad (3)$$

где  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  - постоянные интегрирования дифференциального уравнения.

Постоянные интегрирования могут быть определены при подчинении функции (3) и её производных известным значениям. Если значение функции в начальный момент известно, то остальные значения не могут быть признаны известными, так как экспериментальные значения не являются точными значениями.

Поэтому определение постоянных интегрирования предлагается выполнить при условии минимизации отклонения модельных и

экспериментальных значений. Составляя целевую функцию и минимизируя её, получаем постоянные интегрирования

$$C_1 = 639616; C_2 = -1159,272; C_3 = 131,295.$$

Модельное значение функции построено в явном виде. Математическое ожидание экспериментальных значений составило 2,6788 мм, среднеквадратичное отклонение модельных и экспериментальных значений -0,1159 мм. СКО составляет 4,32% от МО.

Уравнение (1) относится к классу линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами и включает в себя бесконечное множество частных решений, отличающимися значениями постоянных интегрирования и частными решениями, зависящими от корней характеристического уравнения.

То, что это уравнение получено с числовыми коэффициентами, а не в алгебраической форме, не умаляет его значимость. Числовые коэффициенты дифференциального уравнения являются обобщенными характеристиками, зависящими от показателей многих свойств рассматриваемого материала и раскрытие природы этих коэффициентов представляет собой следующую и достаточно интересную и важную задачу исследования.

Если структура полученного уравнения окажется пригодной для описания рассматриваемых свойств и других материалов, то это будет весомым признаком того, что это уравнение является не случайным проявлением, а закономерностью изучаемого процесса. Тогда и полученное уравнение можно рассматривать как аналитический закон, описывающий данное явление.

Является ли предложенная структура дифференциального уравнения наилучшей для рассматриваемого материала? Оснований для таких выводов нет, так как отсутствуют теоретические исследования по этим вопросам. Так как структура уравнения (1) была выбрана случайным образом, то и решение, полученное на его основе, могут быть приближены к экспериментальным значениям с определенной степенью точности. При другой структуре

дифференциального уравнения, видимо, и степень приближения может быть другой. Поэтому поиск лучшего варианта структуры уравнения заслуживает внимания и может быть решен в рамках выбора при противоречивых требованиях – времени поиска и точности оценки.

В качестве примера рассмотрим второй вариант структуры дифференциального уравнения, когда  $a_0=0$ . Тогда уравнение имеет вид

$$Y''' + a_2 Y'' + a_1 Y' = 0 \quad (4)$$

Соответствующее ему характеристическое уравнение

$$K^3 + a_2 K^2 + a_1 K = 0 \quad (5)$$

Одно решение уравнения (5) имеет вид  $K_1 = 0$ . Остальные два корня определяются из решения уравнения

$$K^2 + a_2 K + a_1 = 0$$

и равны  $K_2 = -a_2/2 + \sqrt{(a_2^2/4 - a_1)}$ ;  $K_3 = -a_2/2 - \sqrt{(a_2^2/4 - a_1)}$ .

Если  $a_2^2/4 - a_1 > 0$ , то решение уравнения (4) имеет вид

$$Y = C_1 + C_2 \exp(K_2 t) + C_3 \exp(K_3 t).$$

Если  $a_2^2/4 - a_1 < 0$ ,

$$Y = C_1 + \exp(-a_2 t/2)(C_2 \sin(\sqrt{(a_1 - a_2^2/4)}t) + C_3 \cos(\sqrt{(a_1 - a_2^2/4)}t)).$$

Применяя вышеприведенную методику определения коэффициентов дифференциального уравнения для новой структуры (4), получаем корни характеристического уравнения  $K_1 = 0$ ;  $K_2 = -0,045278$ ;  $K_3 = -0,016811$  и соответствующее решение дифференциального уравнения

$$Y = C_1 + C_2 \exp(-0,045278 t) + C_3 \exp(-0,016811 t). \quad (7)$$

Постоянные интегрирования находим из условия минимизации среднеквадратичного отклонения модельных и экспериментальных значений для всех опытных точек

$$C_1 = 2,621244 \text{ мм}, \quad C_2 = 53232,85 \text{ мм}, \quad C_3 = -51,22266 \text{ мм}.$$

Математическое ожидание для экспериментальных точек составляет, среднеквадратичное отклонение модельных и экспериментальных значений для опытных точек  $-0,0323$  мм. Доля СКО в МО составляет 1,3 %.

Сравнивая результаты, полученные с помощью двух моделей, делаем вывод о том, что вторая модель даёт меньшие отклонения от экспериментальных данных. Следовательно, вторая модель точнее описывает экспериментальные результаты.

Таким образом, используя несколько моделей для описания процесса и сравнивая результаты, можно выбрать из предложенных наилучшую модель.

Возможности по использованию новых моделей могут быть значительно расширены, если потребуется учесть влияние и других факторов при исследовании процесса. Так, например, полимерные материалы являются очень чувствительными при взаимодействии с жидкостью. Даже если нет химического взаимодействия полимерного материала с жидкостью, при так называемом физическом взаимодействии происходит набухание полимерного материала. Известно, что помещение полимерного материала в жидкую среду приводит к его набуханию, которое может сопровождаться изменением его структуры и, как следствие, изменением деформационных свойств. Видимо, в этом случае изменяется и дифференциальное уравнение, описывающее закономерности развития деформации.

Выполнены экспериментальные исследования деформационных свойств полимерного материала после предварительного взаимодействия с дистиллированной водой в течение 1 суток и 3-х суток.

Приводим результаты моделирования экспериментальных данных:

1. для сухого материала

$$Y = 1.1089 \exp(0,281t) - 0,150048 \exp(+0,0853t) + 0,9608 \exp(0,527 \cdot 10^{-4} t)$$

$$C_1 = 2,0178913; \quad C_2 = -0,321132; \quad C_3 = 0,17323.$$

$$MO = 2,7206 \text{ мм}, \quad SKO = 0,0472 \text{ мм}, \quad SKO/MO = 0,0173$$

2. для материала после выдержки в дистиллированной воде в течение 1 суток

$$K_1 = 0,28061, \quad K_2 = -0,85341, \quad K_3 = 5,27 \cdot 10^{-5}.$$

$$C_1 = 0, \quad C_2 = -1377,18 \text{ мм}, \quad C_3 = 2,6497.$$

$$MO = 2,6788 \text{ мм}, \quad SKO = 0,13572 \text{ мм}, \quad SKO/MO = 0,0506.$$

3. для материала после выдержки в дистиллированной воде в течение 3-х суток

$$K_1 = 0,28061, \quad K_2 = 0,021257, \quad K_3 = 5,27 \cdot 10^{-05}.$$

$$C_1 = 1170,6 \text{ мм}, \quad C_2 = -1,0522 \cdot 10^{-3} \text{ мм}, \quad C_3 = 2,7447 \text{ мм}.$$

$$MO = 2,8156 \text{ мм}, \quad SKO = 0,0584 \text{ мм}, \quad SKO/MO = 0,0208.$$

Эксперименты показывают, что некоторые коэффициенты дифференциального уравнения изменяются, что доказывает изменение структуры материала, влияющие на его деформационные свойства.

Выводы:

1. Показана возможность выполнять исследования по созданию моделей, описывающих явления, процессы физических явлений, основанные на обработке экспериментальных данных.
2. Полученные модели могут описывать в дифференциальной форме достаточно общие закономерности.
3. Особенно эффективно применение данной методики там, где отсутствуют общепризнанные методы исследования.

Литература:

1. Аскадский А.А. Деформация полимеров. Изд-во «Химия». М. 1973. 448 с.
2. Нарисава И. Прочность полимерных материалов. Изд-во «Химия». М. 1987. 398 с.
3. Уорд И. Механические свойства полимерных материалов. Изд-во «Химия». 1975. 350 с.
4. Яхно О.М., Дубовицкий В.Ф. Основы реологии полимеров. Изд-во «Вища школа», 1976. 168 с.