

На правах рукописи

УДК 539.32:539.4

Гаришин Олег Константинович

СТРУКТУРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМИРОВАНИЯ
И РАЗРУШЕНИЯ ДИСПЕРСНО НАПОЛНЕННЫХ ЭЛАСТОМЕРНЫХ
КОМПОЗИТОВ

01.02.04 — Механика деформируемого твердого тела

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Пермь — 2003

Диссертационная работа выполнена в Институте механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук

Научный консультант: заслуженный деятель науки и техники
РСФСР, доктор технических наук,
профессор В.В. Мошев

Официальные оппоненты: член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических
наук,
профессор Б.Д. Аннин

доктор физико-математических наук, профессор Ю.В. Соколкин

доктор физико-математических наук, профессор В.В. Стружанов

Ведущая организация: Институт проблем механики РАН
(Москва)

Защита состоится 15 мая 2003 г. в 14 часов на заседании Диссертационного совета Д 004.012.01 в Институте механики сплошных сред УрО РАН по адресу: 614013, Россия, Пермь, ул. Академика Королева 1, Институт механики сплошных сред УрО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института механики сплошных сред УрО РАН.

Автореферат разослан 4 апреля 2003 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор технических наук
И.К. Березин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одним из наиболее значительных достижений последней научно-технической революции можно по праву считать появление и широкое распространение в промышленности различных типов композиционных материалов. Особенно эффективным оказалось их использование в тех областях, где традиционные материалы уже практически исчерпали свои возможности, и не могут обеспечить должных темпов технического прогресса.

Рассматриваемые в работе дисперсно наполненные эластомерные композиты представляют собой структурно-неоднородные системы, состоящие из смеси жестких зернистых частиц, случайно расположенных в мягкой полимерной матрице. Их промышленными аналогами можно считать резины различного назначения, полимеры с зернистым наполнителем, твердые ракетные топлива и т. д. Подобные материалы характеризуются сложным механическим поведением, которое обусловлено различными по природе обратимыми и необратимыми структурными изменениями, происходящими при деформировании.

До последнего времени исследователи описывали поведение таких сред в основном с феноменологических позиций, не вдаваясь в особенности того, что делается на микроструктурном уровне. Вполне удовлетворяя конструкторов, этот подход неприемлем для материаловедов. Для них понимание сути внутренних механизмов, формирующих эффективное поведение композита, является неотъемлемой частью работы. Особую значимость эта проблема приобретает для средних и высоких наполнений, когда взаимодействие между соседними близкорасположенными частицами (т. е. структура) начинает существенно сказываться на макросвойствах. Высокое случайное наполнение плюс сильная механическая неоднородность фаз серьезно затрудняет описание подобных материалов классическими методами механики микронеоднородных сред (самосогласование, регуляризация, вариационные, статистические методы и т.д.). В связи с этим был разработан новый структурный подход к решению таких задач.

Цель работы состояла в создании структурной модели зернистого композита, которая позволила бы объяснить его деформационное и прочностное поведение исходя из внутреннего строения материала и свойств компонентов. Рассматривались только упругие системы, так как именно они являются той базой, на основе которой можно в дальнейшем учесть и другие эффекты, связанные, например, с влиянием временных факторов, диффузией пластификатора и т. д. Основной акцент был сделан на те

структурные механизмы, которые (с точки зрения автора) должны наиболее сильно сказываться на формировании макросвойств именно высоконаполненных существенно механически неоднородных сред: 1) случайное расположение частиц наполнителя в матрице, учитывающее появление ближнего порядка в концентрированных стохастических структурах; 2) развитие внутренней поврежденности в виде межфазных отслоений и микроразрывов матрицы; 3) перестройка геометрии композитной структуры при деформировании.

Научная новизна. Предложен новый подход к структурному моделированию деформационных и прочностных свойств дисперсно наполненных эластомерных композитов. Его основное достоинство заключается в том, что он позволяет напрямую учесть структуру гетерогенного материала без привлечения дополнительных феноменологических гипотез о его внутреннем строении. При этом с ростом степени наполнения точность модели возрастает (по сравнению с другими известными методиками), что немаловажно, так как основным объектом данных исследований были именно высоконаполненные системы.

В основу подхода положен принцип физической дискретизации, согласно которому сложные полевые взаимодействия между структурными неоднородностями заменяются эквивалентными реакциями в соответствующих дискретно-механических аналогах. Иначе говоря, исходя из знания каких-то присущих исследуемой системе физических закономерностей, производится переход от сплошного континуума к более простой для расчетов дискретной системе. При построении такой модели были решены три следующие ключевые проблемы: 1) разработан способ моделирования случайных геометрических систем, адекватно отображающих структуру зернистого композита; 2) получена связь эквивалентных механических характеристик дискретного аналога с напряженным состоянием в отображаемой им области структурно-неоднородного континуума и ее геометрией; 3) разработана процедура перехода от усилий и деформаций, действующих в элементах модельной конструкции, на макроуровень.

На защиту выносятся следующие научные результаты:

1. Предложен алгоритм компьютерного синтеза моно- и полифракционных случайных систем из частиц круглой формы.

2. Дано описание метода физической дискретизации в применении к моделированию механических свойств дисперсно наполненного композита со слабоэластичной несжимаемой матрицей. Разработана соответствующая структурно-механическая модель.

3. Получено численно-аналитическое решение краевой задачи об осесимметричном нагружении двух жестких сфер в несжимаемой линейно-упругой матрице, что позволило определить механические характеристики элементов аппроксимирующей реальной композит модельной системы.

4. Для композитных материалов с бидисперсной структурой рассчитаны зависимости эффективного модуля от концентрации дисперсной фазы, фракционного состава и соотношения размеров частиц наполнителя.

5. Исследованы закономерности возникновения и развития поврежденности в дисперсно наполненных композитах со слабоэластичным полимерным связующим для случаев сильной и слабой адгезионной связи между матрицей и включениями.

6. Предложен новый алгоритм, предназначенный для решения задач о нагружении нелинейно-упругих конечно деформируемых стержневых систем, — метод локальных итераций.

7. Со структурных позиций проведены исследования по моделированию деформационного и прочностного поведения ненаполненного высокоэластичного полимера в зависимости от топологии молекулярной сетки и неоднородности свойств составляющих ее молекулярных цепочек.

8. Предложена структурно-статистическая модель дисперсно наполненного композита с высокоэластичной матрицей, предназначенная для быстрых оценочных расчетов.

9. Разработана структурно-механическая модель дисперсно наполненного эластомерного композита, способного испытывать большие упругие деформации.

Достоверность полученных научных результатов базируется на использовании хорошо известных численных и аналитических методов, применяемых в механике деформируемого твердого тела, и подтверждена сравнением проведенных расчетов с данными теоретических и экспериментальных работ других исследователей. Обоснованность сформулированных в диссертации выводов и рекомендаций обусловлена тем, что они полностью вытекают из результатов, полученных автором, без привлечения каких-то дополнительных непроверенных гипотез и утверждений.

Практическая ценность. Разработанная и доведенная до уровня пакета прикладных программ структурно-механическая модель дисперсно наполненного эластомерного композита позволяет на основе данных о внутренней структуре материала и свойствах компонентов прогнозировать его эффективное деформационное и прочностное поведение. Это может оказаться полезным при разработке новых композиционных материалов с

заранее заданными свойствами, так как позволяет существенно снизить затраты на дорогостоящие экспериментальные исследования.

Результаты работы используются в практических исследованиях в ФГУП "Научно-исследовательский институт шинной промышленности" (Москва) и ФГУП "Научно-исследовательский институт полимерных материалов" (Пермь). Разработанные автором методики могут быть рекомендованы к применению в научно-исследовательских и проектно-конструкторских организациях, связанных с решением прикладных задач механики композиционных материалов, а также при разработке курсов лекций по механике структурно-неоднородных сред.

Авторский вклад. Все изложенные в диссертации результаты получены автором лично, либо при его определяющем личном участии.

Апробация. Результаты, вошедшие в данную диссертационную работу, докладывались и обсуждались на 42 научно-технических конференциях и научных семинарах. В том числе: VIII Всесоюзная конференция по прочности и пластичности (Пермь, 1983); Межинститутский научный семинар Института синтетических полимерных материалов РАН им. Н.С. Ениколопова (Москва, 1985); Всесоюзная школа-семинар "Математическое моделирование в науке и технике" (Пермь, 1986); IV, V и VI Всесоюзные Научно-технические конференции по методам расчета изделий из высокоэластичных материалов (Рига, 1986, 1989, 1992); Научный семинар Института химии высокомолекулярных соединений АН Украины (Киев, 1990); Международный симпозиум "Advances in Structured and Heterogeneous Continua" (Москва, 1993); V, IX, XI, XII и XIII Симпозиумы "Проблемы шин и резинокордных композитов" (Москва, 1993, 1998, 2000, 2001, 2002); Международная конференция по каучуку и резинам "IRC-94" (Москва, 1994); Международный симпозиум по механике эластомеров "МЭ-94" (Украина, Севастополь, 1994); International Conference "PROBAMAT — 21st CENTURY: Probabilities and Materials" (Perm, 1997); International Conference "Mesomechanics-98" (Tel Aviv, 1998); XI и XII Международные зимние школы по механике сплошных сред (Пермь, 1997, 1999); VIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Пермь, 2001); XXX Summer school "Advanced problems in mechanics" (Санкт-Петербург, 2002); Euromech Colloquium 438 "Constitutive equations for polymer microcomposites: on the border of mechanics and chemistry" (Vienna, 2002).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 50 печатных работ. Основные научные результаты отражены в монографии и 11 статьях в отечественных и зарубежных журналах.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложения. Она содержит 320 страниц, 67 рисунков и 5 таблиц. Список литературы насчитывает 275 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Введение. Дано обоснование актуальности темы диссертации, сформулированы цель работы, ее научная новизна и практическая ценность, кратко изложено содержание проведенных исследований по главам.

Глава I посвящена проблемам математического синтеза и исследования случайных геометрических структур, адекватно отображающих внутреннее строение зернистых композитов. Дан обзор основных методов теоретического и экспериментального изучения морфологии случайно упорядоченных структур из частиц круглой формы. Предложен алгоритм компьютерного моделирования моно- и полифракционных плотных случайных упаковок из частиц круглой формы, а на их базе и разреженных структур с заранее заданной объемной концентрацией и фракционным составом. В основе подхода лежит идея о возможности численного синтеза таких систем под действием сил, имитирующих радиально расширяющееся гравитационное поле.

Плоские и объемные геометрические структуры генерировали по одной программе. На рис. 1 приведены фрагменты плоских плотной и разреженной бинарных структур. Однако все дальнейшие расчеты по моделированию свойств композитов проводили только на трехмерных системах.

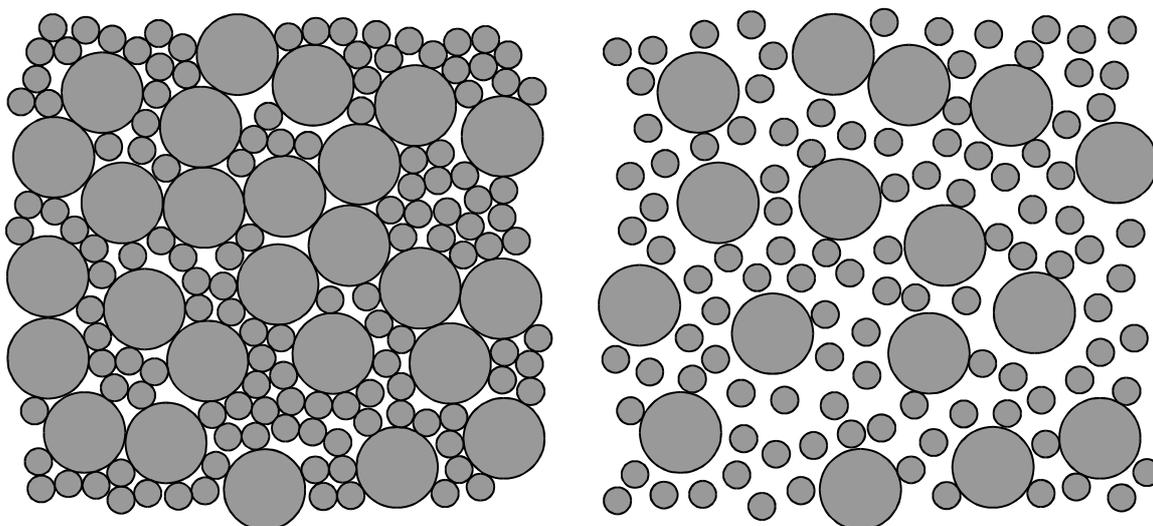


Рис. 1 Плотная ($\phi=85\%$, $X_k=65\%$) и разреженная ($\phi=54\%$, $X_k=58\%$) бинарные структуры. $\psi = 3$

Надежность разработанных алгоритмов подтверждается сравнением модельных структурных характеристик с известными из литературы опытными данными. Сравнивали радиальные распределения степени наполнения плотных упаковок ϕ , статистические распределения координационного числа и некоторые другие параметры. Было установлено, что для синтезированных на компьютере структур выполняется условие статистической макрооднородности и макроизотропности. Построенные для них многоточечные корреляционные функции (вплоть до пятого порядка включительно) зависели лишь от расстояния между расчетными точками, но не от их взаимного расположения, а начальная моментная функция была постоянна и равнялась концентрации частиц.

В качестве количественной меры стохастичности использовали энтропийный критерий H (геометрический аналог информационной энтропии), вычисляемый по распределению зазоров между частицами. При прочих равных условиях для дальнейших расчетов выбирали структуры с максимальным значением H , считая их наиболее вероятными и близкими к действительности.

Одно из достаточно часто предъявляемых к зернистым композитам требований заключается в сочетании высокого наполнения с достаточной эластичностью системы в целом. С точки зрения геометрии оптимальные в этом отношении структуры должны иметь фракционный состав, при котором число контактов и малых зазоров между включениями было бы по возможности минимальным. Такие геометрические исследования были проведены для случайных бинарных систем из частиц круглой формы с соотношением размеров частиц ψ от 1 до 5. Установлено, что наиболее эластичные (для заданного наполнения) структуры должны иметь объемную долю крупной фракции X_k от 70 до 90%, причем изменение ϕ и ψ довольно слабо влияет на положение оптимума. Справедливость этого вывода подтверждена дальнейшими расчетами на структурной модели и сравнением с известными опытными данными.

В главе II рассмотрены вопросы, связанные с разработкой основных теоретических положений и обоснований, необходимых для построения структурно-механической модели дисперсно наполненного эластомерного композита. Приведен обзор и анализ (с позиций структурного моделирования) современных методов расчета структурно-неоднородных материалов. Дано описание основных постулатов, лежащих в основе метода физической дискретизации.

Физическую дискретизацию композитной системы типа "мягкая полимерная матрица — жесткий дисперсный наполнитель" производили на основании общеизвестного факта, что при деформировании столь неоднородных материалов наибольшие нагрузки испытывают матричные прослойки между частицами. Можно сказать, что они являются как бы "пружинами", распределяющими внешнее усилие от включения к включению, в то время как остальная часть матрицы нагружена несравнимо слабее.

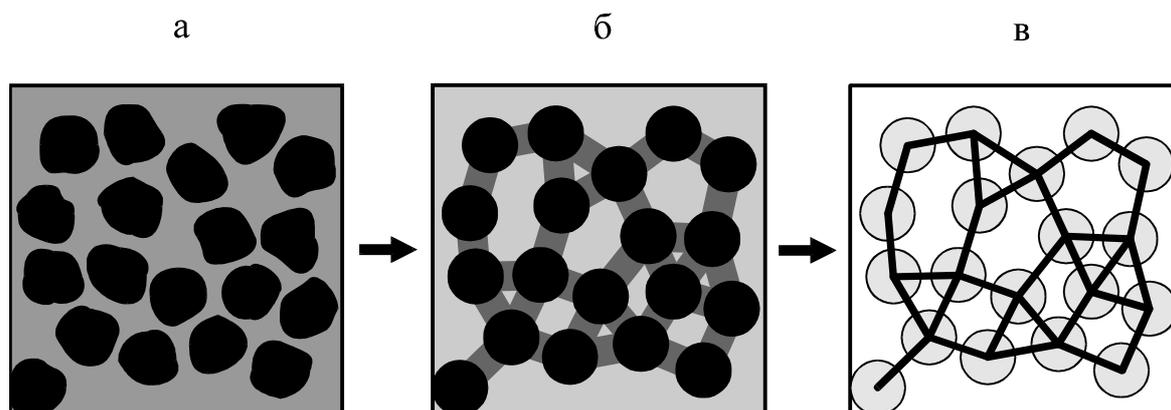


Рис. 2 Физическая дискретизация дисперсно наполненного композита

При построении модели реальный композит (рис. 2а) представляли в виде ограниченной области, содержащей конечное число жестких сфер, произвольно расположенных в упругой несжимаемой матрице. Эту область разбивали на структурные континуальные элементы типа "включение — матричная прослойка — включение" (рис. 2б) и рассматривали деформирование материала как процесс их взаимодействия. Каждый континуальный элемент заменяли соответствующим дискретным аналогом в виде упругого стержня с узлами в центрах включений. Его механические характеристики определяли из условия эквивалентности энергии деформации в аппроксимируемой и аппроксимирующей системах. В результате получали пространственную стержневую конструкцию (рис. 2в), на базе которой и производились все дальнейшие расчеты.

Континуальные элементы могли различаться толщиной прослоек, размерами включений, наличием или отсутствием в них повреждений и т. д. Соответственно было различным и их механическое поведение. Кроме того, свойства элемента в какой-то мере должны зависеть и от расположения близлежащих частиц. Из анализа решений плоских краевых задач о нагружении различных ансамблей из жестких дисков в упругой матрице установлено, что НДС непосредственно в зазоре слабо зависит от располо-

жения соседей (хотя в целом по области распределение напряжений, конечно, тесно связано с ее конфигурацией). Исходя из плоской аналогии считали, что схожая ситуация будет наблюдаться и для сферических включений (там она даже усугубится, так как возмущающие напряжения в трехмерном случае убывают при удалении от поверхности частицы намного быстрее, чем в плоском). Поэтому при построении модели влияние соседей не учитывали, оставаясь в рамках двухчастичной аппроксимации.

В полной постановке механическое поведение стержневого аналога описывается с помощью трех параметров (рис. 3а): G_L — жесткость на растяжение–сжатие, S_L и T_L — изгибная и крутильная жесткости. Показано, что для достаточно малых зазоров G_L является доминирующим по отношению к S_L и T_L параметром. Поэтому при расчетах использовали стержневые элементы с шарнирными узлами.

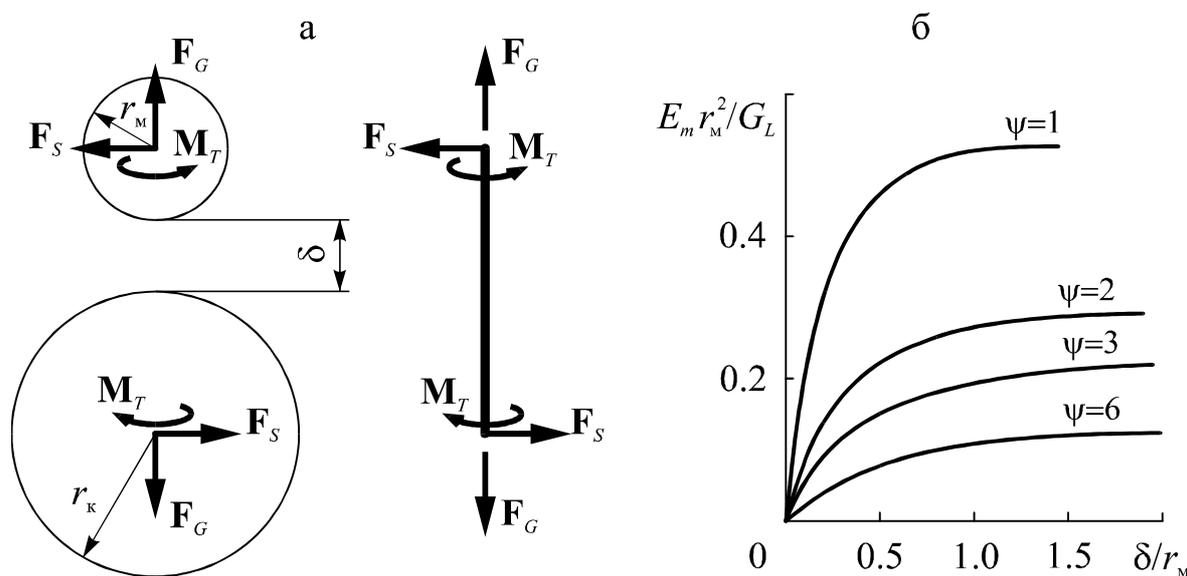


Рис. 3 Схема определения эквивалентных механических характеристик дискретного стержневого аналога (а) и зависимость его податливости $1/G_L$ от δ и ψ в континуальном элементе (б). E_m — модуль Юнга матрицы

Для того чтобы получить зависимость G_L от геометрии континуального элемента и механических свойств составляющих его компонентов была решена краевая задача об осесимметричном нагружении двух жестких сфер в линейно-упругой несжимаемой матрице. Решение искали в виде представления Папковича–Нейбера с разложением неизвестных функций в ряд по полиномам Лежандра. Для этого использовали итерационно-аналитический метод, специально разработанный для определения НДС в

линейно-упругих механически неоднородных системах типа "мягкая матрица с внедренными в нее жесткими дисперсными включениями". Полученные зависимости G_L от δ и $\psi=r_k/r_m$ представлены на рис 3б.

Расчет эффективных характеристик композита в рамках структурно-механической модели производили следующим образом: В случайной геометрической системе из жестких сфер "вырезали" представительный объем в виде параллелепипеда с перпендикулярными к координатным осям сторонами и производили физическую дискретизацию этой области, переходя к эквивалентной стержневой конструкции. Нижнюю грань неподвижно закрепляли, а противоположную ей смещали вверх, имитируя тем самым макрооднородное поле растягивающих напряжений. Рассматривали два варианта внешней нагрузки: 1) боковые поверхности "образца" оставались свободными; 2) чтобы как-то учесть несжимаемость композита в модельной стержневой конструкции, ее боковым граням навязывали такие перемещения, чтобы выполнялось условие неизменности объема "образца". Решив конечно-элементную стержневую задачу, определяли усилия и деформации, действующие в элементах модельной конструкции. Осредняя их проекции на координатные оси, и, зная размеры области, вычисляли значения компонент эффективных тензоров ε и σ .

Расчеты показали, что второй вариант приложения нагрузки давал некоторое возрастание общей жесткости системы, хотя в целом картина изменялась не очень существенно (примерно на 10÷15%). Было также установлено, что случайные структуры, содержащие порядка 300 частиц, являются вполне представительными для определения эффективных характеристик композита. В дальнейшем, для большей надежности рассматривали системы не менее чем из 600÷1000 включений.

В главе III представлены результаты по структурному моделированию деформационного и прочностного поведения дисперсно наполненного композита в зависимости от его внутреннего строения и свойств компонентов. Все приведенные здесь расчеты делали в рамках теории малых упругих деформаций (т. е. без геометрической перестройки структуры).

Для зернистых композитов с моно- и бидисперсной структурой были построены зависимости макромодуля от наполнения и фракционного состава. Для бинарных структур варьировали наполнение ϕ , объемную долю крупной фракции X_k и соотношение размеров частиц ψ . Полученные результаты оказались в удовлетворительном соответствии с известными опытными данными и теоретическими оценками (рис. 4).

Было установлено, что увеличение степени наполнения (при прочих равных условиях) ведет к возрастанию эффективного модуля композита (см. рис. 4а). Эта тенденция резко усиливается по мере приближения концентрации к предельному для данного фракционного состава значению, что объясняется появлением в структуре значительного числа близко расположенных и соприкасающихся включений.

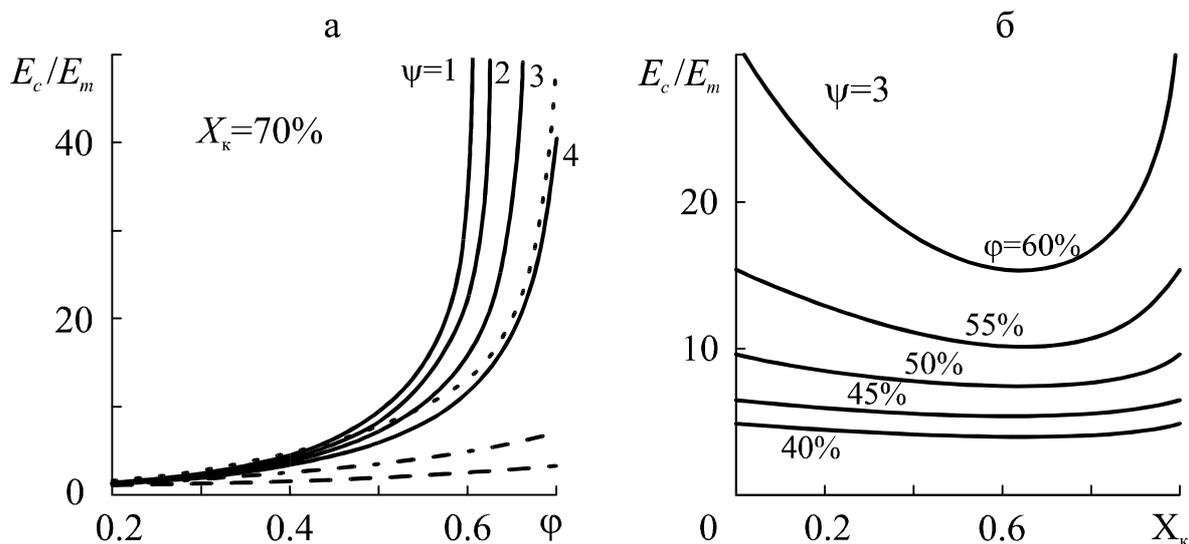
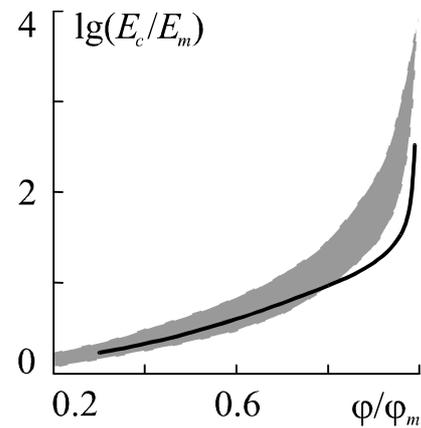


Рис. 4 а) Деформационные зависимости эффективного модуля для композитов с бинарным наполнением: пунктир — 3D гексагональная решетка; штриховая линия — нижняя оценка модуля по Рейссу; штрих-пунктир — по Хашину–Штрикману (E_m — модуль матрицы). б) Зависимость E_c/E_m от объемной доли крупной фракции X_k

Расчеты показали, что при малых и средних ϕ упругие характеристики композита довольно слабо зависят от фракционного состава. Однако при концентрациях, близких к предельным, ситуация меняется и ввод второй фракции позволяет существенно снизить макромодуль при том же наполнении (см. рис. 4б). Это обстоятельство весьма важно для технологов, так как позволяет выбрать оптимальные режимы производства и переработки таких материалов.

Проведенные исследования подтвердили предположение Чонга и Байера о том, что если перестроить концентрационные зависимости E_c/E_m как функцию отношения ϕ к ее максимальному для данного фракционного состава значению ϕ_m , то все они будут лежать в довольно узком диапазоне вблизи кривой, соответствующей монофракционной системе (рис. 5). (Во всяком случае, для рассматриваемых гранулометрических составов.)

Рис. 5 Зависимость E_c/E_m от относительной концентрации φ/φ_m : Затененная область — зона экспериментальных значений, сплошная линия — обобщенная расчетная кривая



Непосредственное численное моделирование распределения усилий по структурным элементам показало, что основную роль в формировании сопротивления внешнему усилию играют не более 10÷20% структурных элементов, образующих в объеме материала редкий, но жесткий пространственный каркас. Остальные же практически не нагружены и включаются в работу лишь при появлении локальных повреждений в системе, принимая на себя освободившуюся в результате этого нагрузку.

В той же III главе были исследованы закономерности развития поврежденности в зернистых композитах со слабоэластичной полимерной матрицей (в рамках теории линейно-упругих деформаций и без геометрической перестройки структуры). Приведен обзор наиболее характерных типов разрушения для таких композитных систем.

При моделировании процесса разрушения рассматривали только монофракционные системы с сильной и слабой адгезией между фазами. Жесткие включения считались неразрушаемыми элементами композитной системы, т. е. повреждаться могла только матрица. При этом предполагали, что возникшее в структурном элементе повреждение там же и локализуется, не затрагивая соседние участки.

В случае сильной адгезии (прочность скрепления матрицы и частиц выше прочности связующего) локальное повреждение моделировали в виде поперечного разрыва в толще матричной прослойки, что сразу приводило к полной потере несущей способности структурного элемента. Его возникновение задавали по критерию максимума главных растягивающих деформаций в наиболее опасной точке A (рис. 6) в центре зазора ϵ_1^A

$$\epsilon_1^A > \epsilon_m^b, \quad (1)$$

где ϵ_m^b — предельная деформация чистой матрицы, полученная из эксперимента на одноосное растяжение. Формула (2) определяет деформацию

аппроксимирующего стержневого элемента ε_L^b на момент выполнения условия локального разрыва (1).

$$\varepsilon_L = \frac{R - R_0}{R_0} > \varepsilon_L^b = 0.8\varepsilon_m^b \left(\frac{\delta}{r} \right)^{1.1125}, \quad (2)$$

где R_0 — длина стержневого структурного элемента в ненагруженном состоянии; R — его текущая длина.

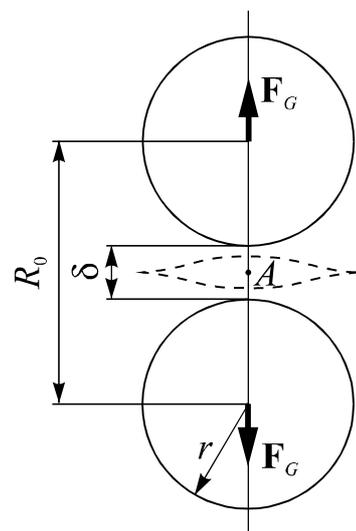


Рис. 6 Схема расчета опасных точек в континуальном структурном элементе с сильной адгезионной связью между фазами

На рис. 7а представлены модельные кривые растяжения для $\varphi = 40, 50$ и 60% , а на рис. 7б показаны сопутствующие зависимости степени поврежденности C (C — это отношение числа разрушенных элементов к их общему количеству).

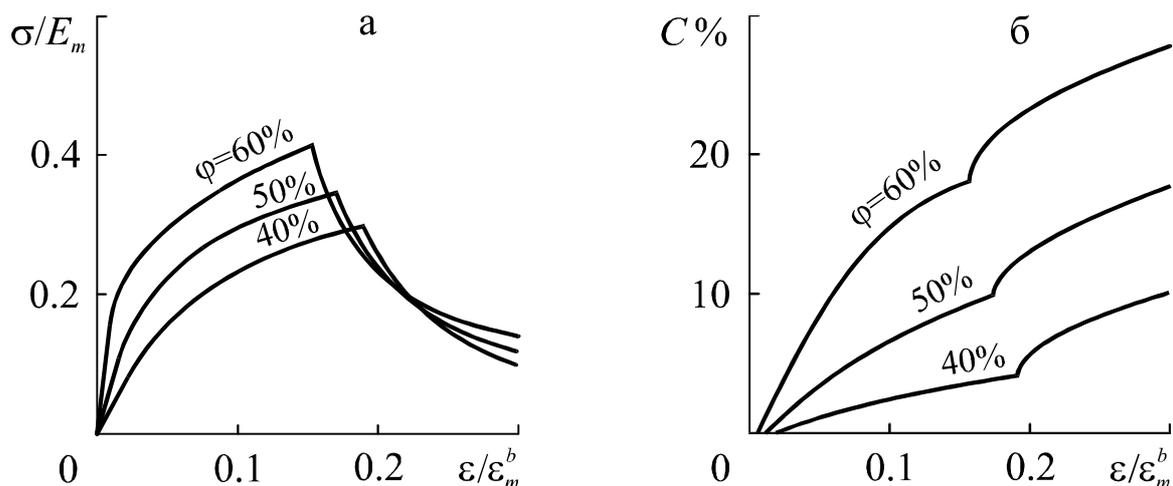


Рис. 7 Деформационные зависимости σ (а) и C (б) для композитов с

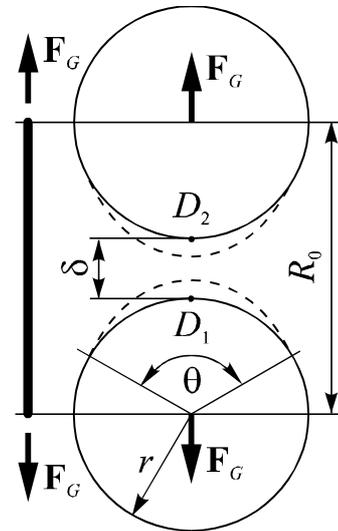
Все кривые по мере растяжения сначала испытывали плавный загиб в сторону уменьшения текущих значений E_c (диффузное накопление поврежденности с более-менее равномерным распределением микроповреж-

дений по объему структуры). При достижении некоторой критической точки происходил резкий скачок вниз, что квалифицировалось как глобальное разрушение модельного "образца" из-за потери им макрооднородности. Накопленная поврежденность на этот момент составляла от 5% ($\varphi = 40\%$) до 18% ($\varphi = 60\%$).

В композитах со слабой межфазной адгезией локальное разрушение носило многостадийный характер. Сначала происходили межфазные отслоения (рис. 8). В качестве "критерия отслоения" матрицы от одной из частиц (первая стадия) было принято условие максимума нормальных отрывных напряжений на ее поверхности в наиболее опасной точке D в полюсе $\sigma_{pp}^D > \sigma_{pp}^b$. Связь между ε_L и σ_{pp}^D задавали по формуле (3), полученной из аналитического решения краевой задачи о двух сферах в несжимаемой матрице

$$\varepsilon_L = \frac{R - R_0}{R_0} = \begin{cases} \frac{0.875\sigma_{pp}^D}{E_m} \left(\frac{\delta}{r}\right)^{1.65}, & 0 < \frac{\delta}{r} < 0.4, \\ \frac{\sigma_{pp}^D}{E_m} \left(0.858\frac{\delta}{r} - 0.148\right), & 0.4 < \frac{\delta}{r}. \end{cases} \quad (3)$$

Рис. 8 Схема расчета механических свойств стержневого аналога, эквивалентного континуальному структурному элементу с отслоением



Отслоение сразу разгружало матричную прослойку. G_L дискретного аналога резко падала (но не до нуля) и становилась практически независимой от геометрии аппроксимируемого континуального элемента. Появление второго отслоения в том же элементе (вторая стадия) вызывало дополнительное уменьшение G_L , но уже незначительное — общая картина менялась слабо. Окончательное разрушение континуального элемента (третья стадия) моделировали в виде поперечного разрыва в его матрице ($G_L \rightarrow 0$).

Условия перехода на 2 и 3-ю стадии локального разрушения задавали в виде соотношения

$$\varepsilon_L > \varepsilon_L^3 > \varepsilon_L^2 > \varepsilon_L^1(E_m, \delta/r, \sigma_{pp}^b), \quad (4)$$

где ε_L^i — предельная деформация стержня, соответствующая переходу на i -й этап повреждения, причем ε_L^2 и ε_L^3 уже не зависели от E_m , σ_{pp}^b и δ/r . При моделировании значения σ_{pp}^b , ε_L^2 и ε_L^3 подбирали так, чтобы наиболее полно выявить влияние каждого из этапов развития локальной поврежденности в структурных элементах на общую картину поведения столь сложного структурно неоднородного материала в целом.

G_L стержня, отображающего континуальный элемент с отслоением, определяли из решения конечно-элементной краевой задачи о двух жестких сферах в упругой матрице с различными условиями скрепления на границе раздела фаз.

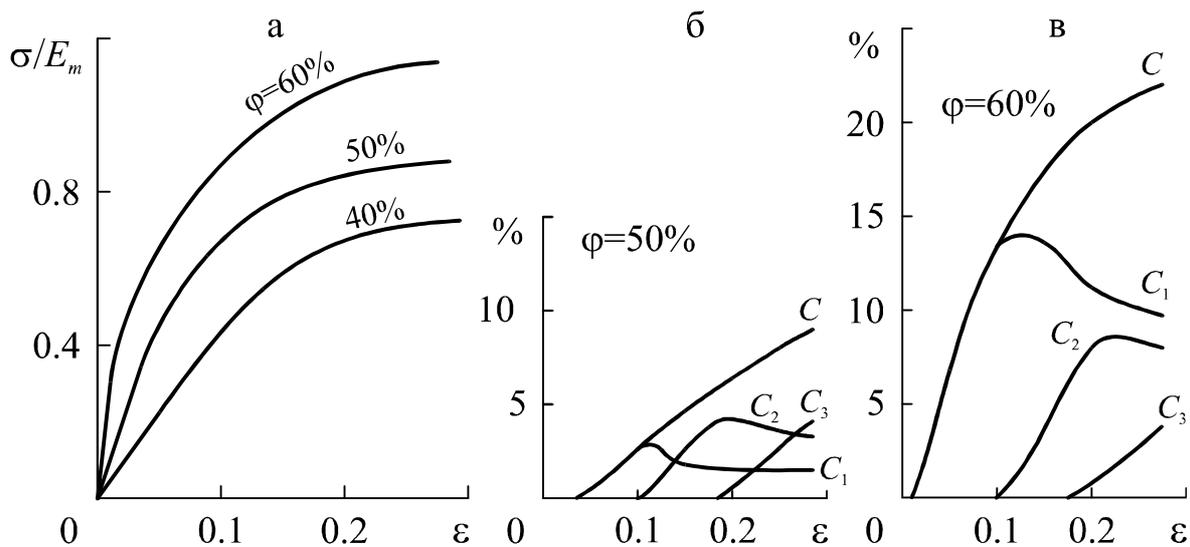


Рис. 9 Зависимости σ – ε (а) и кривые развития поврежденности (б) и (в) для композитов со слабой адгезией между фазами

На рис. 9а представлены кривые растяжения для систем со слабой межфазной адгезией, а на рис. 9б и 9в — сопутствующие зависимости развития поврежденности для $\varphi = 50\%$ и 60% . C_i — доля структурных элементов, находящихся на i -й стадии разрушения ($C = C_1 + C_2 + C_3$).

Расчеты показали, что появляющиеся отслоения разгружали самые напряженные участки структуры, так как возникали они преимущественно в более жестких элементах. Механическая однородность моделируемой композитной системы повышалась. Это в определенной степени препятст-

вовало развитию глобальной макротрещины, так что композит мог еще некоторое время "сопротивляться" внешней нагрузке без заметной потери эксплуатационных свойств.

В главе IV дано описание нового подхода к расчету нелинейно-упругих конечно деформируемых стержневых систем с неоднородной произвольно сформированной структурой.

Линейно-упругая модель позволила описать связь между микро- и макрохарактеристиками зернистых композитов, работающих в области малых деформаций. Однако, значительный научный и практический интерес представляют также дисперсно наполненные системы, способные испытывать большие упругие деформации с геометрической перестройкой структуры и развитием внутренней поврежденности. Предлагаемый подход позволил исследовать и такие материалы, но для этого пришлось значительно модернизировать модель.

Главная проблема состояла в разработке алгоритма поиска равновесия нелинейно-упругих стержневых систем с перестраиваемой при больших деформациях структурой. Разработанный автором специально для этого случая метод локальных итераций позволил достаточно эффективно решать задачи данного класса. В его основе лежит идея о возможности линеаризации физического уравнения локального равновесия для каждого узла структуры и сходимости итерационного процесса поиска равновесия всей системы при последовательном обходе узлов. Под локальным равновесием понимали такое положение узла (см. рис. 10), при котором суммы всех сил и моментов в сходящихся в нем структурных элементах равны нулю при условии, что соседние узлы считаются неподвижно закрепленными. Таким образом, на каждом шаге итераций задачу локального уравновешивания отдельно взятого узла можно свести к решению всего двух векторных уравнений: главного вектора сил (5) и главного момента. Если узел шарнирный, то достаточно одного уравнения (5), так как моментные усилия при таком сочленении не передаются.

$$\sum_{j=1}^N F^j(\mathbf{u}^i) \cos(\mathbf{k}_n, \mathbf{j}) = \sum_{j=1}^N F_n^j(\mathbf{u}^i) = 0, \quad (5)$$

где $F^j(\mathbf{u}^i)$ — усилие, действующее в j -м структурном элементе; \mathbf{k}_n и \mathbf{j} — направляющие векторы n -й координатной оси и j -го элемента соответственно; $F_n^j(\mathbf{u}^i)$ — проекция усилия в j -м стержневом элементе на n -ю ось координат; $\mathbf{u}^i = u_n^i \mathbf{k}_n$ — искомый вектор перемещений.

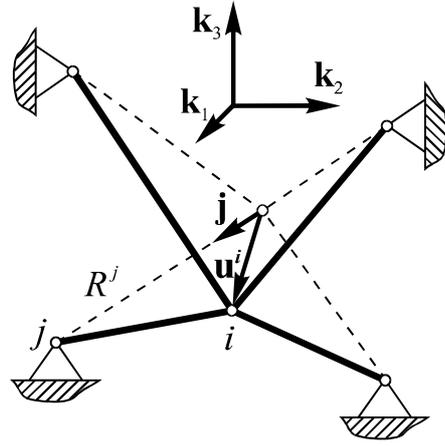


Рис. 10 Расчетная схема поиска локального равновесия i -го узла стержневой системы

Если считать, что i -й узел находится достаточно близко от положения равновесия, то, разлагая $F_n^j(\mathbf{u}^i)$ в ряд Тейлора по компонентам u_m^i , и, отбрасывая нелинейные члены, можно получить систему уже линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial F_n^j(\mathbf{u}^i)}{\partial u_m^i} \right|_0 u_m^i = - \sum_{j=1}^N \left. F_n^j(\mathbf{u}^i) \right|_0,$$

или в матричном виде $A_{nm} u_m^i = B_n$. Если F_n^j выразить как функцию от относительного удлинения элемента $\lambda_L^j = R^j / R_0^j$, то коэффициенты A_{nm} и B_n примут вид

$$A_{nm} = A_{mn} = \sum_{j=1}^N \left\{ -\frac{F^j}{R^j} \delta_{nm} + \left[\frac{F^j}{R^j} - \frac{1}{R_0^j} \frac{\partial F^j}{\partial \lambda_L^j} \right] \cos(\mathbf{k}_n, \mathbf{j}) \cos(\mathbf{k}_m, \mathbf{j}) \right\},$$

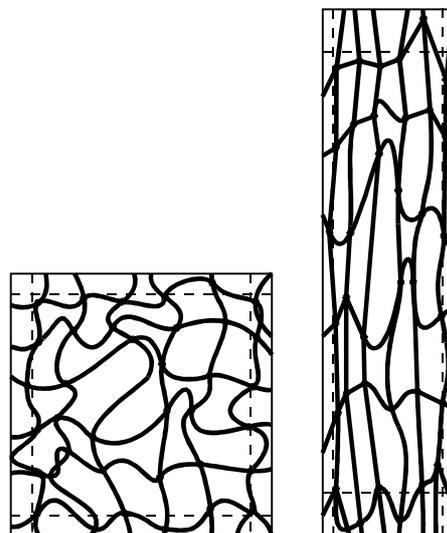
$$B_n = - \sum_{j=1}^N F^j \cos(\mathbf{k}_n, \mathbf{j}).$$

Процедуру поиска локального равновесия производили поочередно для всех узлов модельной конструкции до тех пор, пока ее общая энергия деформации (при данном уровне внешней нагрузки) достигала своего минимума.

Возможности метода были проверены на конкретных задачах по моделированию развития разрушения в конечно деформируемых линейно и нелинейно-упругих сетчатых системах. Так как основным компонентом, определяющим деформационное и прочностное поведение рассматриваемых в работе композитов, несомненно, является матрица, то было интересно с механических позиций оценить влияние неоднородности молекулярной структуры на свойства чистого эластомера. Для этого были разра-

ботаны две имитационные компьютерные модели (рис. 11), позволившие (пусть и в весьма грубой форме) учесть неоднородность и сложный топологический характер полимерной молекулярной сетки и дать некоторые количественные оценки их влияния на макросвойства.

Рис. 11 Модельная разупорядоченная сетчатая структура в нерастянутом и растянутом состоянии



В линейно-упругой структурной модели эластомера его молекулярную сетку имитировали в виде плоских или пространственных систем из линейно-упругих нитей (аналогов молекулярных цепочек), способных работать только на растяжение. Все они имели одинаковые жесткости G_L и предельные разрывные деформации ϵ_L^b . Соответственно, одинаковыми были и усилия разрыва $F_L^b = G_L \epsilon_L^b$. Различие между структурами заключалось только в топологии исходной решетки (в смысле функциональности узлов) и диапазоне разброса длин нитей R_0 , который задавали по равномерному закону распределения от R_0^{\min} до R_0^{\max} . Чтобы было ясно, на базе какой регулярной сетки синтезирована та или иная случайная система, в ее название добавляли приставку “псевдо-”, — псевдокубическая, псевдотреугольная и т. д. Степень поврежденности структуры S вычисляли как отношение числа разорванных нитей к их общему количеству.

На рис. 12а представлены типичные кривые растяжения для псевдокубических линейно-упругих сеток, а на рис. 12б — сопутствующие зависимости роста поврежденности S . Оказалось, что если зависимости $\sigma - \epsilon$ строить в координатных осях $\sigma \cdot (R_0^{\min})^2 / F_L^b - \epsilon / \epsilon_L^b$, то графики для структур, различающихся только значениями F_L^b , R_0^{\min} и ϵ_L^b , совпадают — рассматриваемые системы оказались масштабно инварианты по этим параметрам. Чем больше неоднородность, тем менее прочной была сетка, причем при 10-кратном разбросе длин нитей разрывные напряжения станови-

лись практически независимыми от дальнейшего роста этого соотношения, достигая значений примерно в половину от прочности регулярной системы. Окончательное разрушение происходило при весьма малых значениях накопленной поврежденности C^b (4÷6% для всех типов рассматриваемых сеток как плоских, так и пространственных).

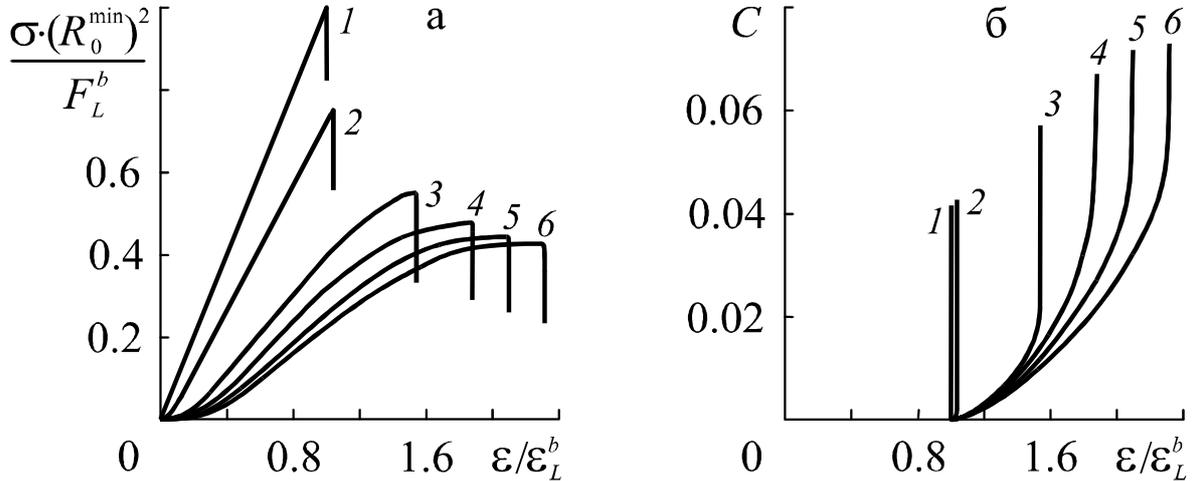


Рис. 12 Зависимости σ (а) и C (б) от ε для псевдокубических линейно-упругих конечно деформируемых сеток: 1 — регулярная сетка,

Нелинейно-упругая модель полимерной сетки была более "физична". Известно, что для свободно сочлененной полимерной цепи зависимость расстояния между ее концами R и величиной действующих на них сил реакции F описывается формулой Ланжевена: $R/L_0 = \text{cth}(F/\beta) - 1/(F/\beta)$, где $L_0 = Nl$ — контурная длина полимерной цепи из N "куновских" сегментов размером l каждый ($\beta = kT/l$). Именно это соотношение было взято в качестве жесткостной характеристики структурного элемента $F_L(\lambda)$

$$F_L = -\frac{\alpha}{(\lambda - \lambda_*)^\gamma} + \beta \left[3 \frac{\lambda}{\lambda_m} + \frac{(\lambda/\lambda_m)^3}{1 - \lambda/\lambda_m} \right],$$

где

$$\alpha = (1 - \lambda_*)^\gamma \frac{\beta}{\lambda_m} \left[3 + \frac{1}{\lambda_m(\lambda_m - 1)} \right].$$

Первое слагаемое отвечает за силы отталкивания (условие исключенного объема), а второе — аппроксимация обратной формулы Ланжевена относительно $\lambda/\lambda_m = R/L_0$.

Нелинейно-упругое поведение каждого структурного элемента описывали следующими параметрами (рис. 13): R_0 — его начальная длина,

равная исходному расстоянию между концами молекулярной цепи в момент полимеризации (т. е. межузловому расстоянию в недеформированной сетке); L_0 — контурная длина молекулярной цепи, моделируемой данным структурным элементом; $R_* = \lambda_* R_0$ — минимальное расстояние, на которое силы межмолекулярного отталкивания допускают схождение концов полимерной цепи. Элемент считался разорванным, если расстояние между узлами становилось больше 95% от L_0 .

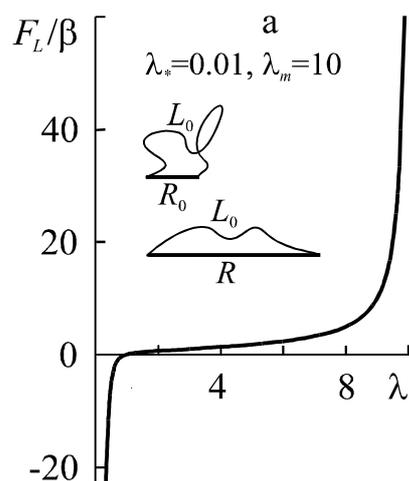


Рис. 13 Зависимость силы реакции F_L в нелинейно-упругом структурном элементе, моделирующем полимерную цепь от кратности λ

Неоднородность нелинейно-упругой сетки задавали двумя способами: 1) За счет случайного разброса контурных длин молекулярных цепей $L_0^{\min} < L_0 < L_0^{\max}$, привязанных к упорядоченно расположенным узлам. В соответствии с известными из литературы опытными данными наибольший разброс L_0 задавали от 2 до 15. Фактически это “хаотизация” структуры по жесткостным и прочностным характеристикам элементов. 2) За счет геометрической “хаотизации”, когда вокруг каждого узла изначально регулярной сетки (с межузловым расстоянием D_0) выделяли “область случайных подвижек” размером $k_D \cdot D_0$, в пределах которой производили его случайное смещение. При $k_D=0$ структура оставалась геометрически регулярной, а при $k_D=1$ — максимально разупорядоченной. Все случайные величины моделировали по равномерному закону распределения.

На рис. 14а представлены кривые $\sigma - \epsilon$, полученные на псевдоквадратных сетках с разной степенью разупорядоченности, а на рис. 14б — сопутствующие зависимости роста поврежденности S . Критические значения S^b для плоских систем доходили до 9%, а для трехмерных — до 15%, т. е. были выше, чем в линейной модели. Для всех типов исследованных нелинейно-упругих сеток ввод неоднородности позволил добиться не более чем в 4÷5-кратного разупрочнения по сравнению с регулярными. В то же время известно, что прочность реальных полимеров обычно на порядок

и более отличается от рассчитанной, исходя из предположения об их идеальном строении. Напрашивается вывод, что в них имеется значительно большая дефектность, т. е. она должна носить многоуровневый иерархический характер.

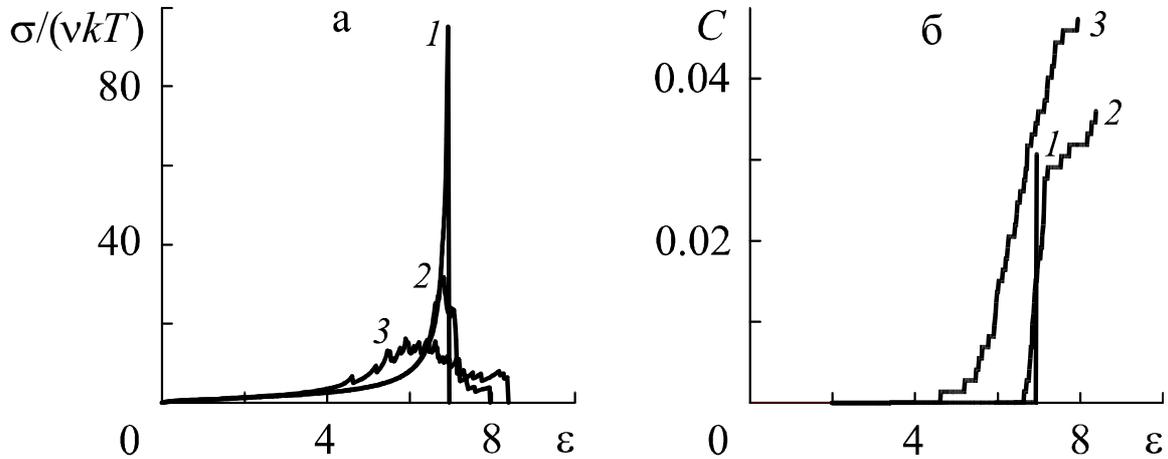


Рис. 14 Зависимости σ (а) и C (б) от ε для нелинейно-упругих псевдоквадратных сеток: 1 — регулярная сетка ($L_0^{\min} = L_0^{\max} = 8$, $k_D = 0$), 2 — геометрическая неупорядоченность ($L_0^{\min} = L_0^{\max} = 8$, $k_D = 1$), 3 — полная разупорядоченность ($L_0^{\min} = 2$, $L_0^{\max} = 15$, $k_D = 1$).

v — объемная концентрация полимерных цепочек, k — константа Больцмана, T — абсолютная температура

В главе V сделано обобщение метода физической дискретизации на случай моделирования механического поведения дисперсно наполненных эластомеров, способных испытывать большие нелинейно-упругие деформации (со значительной геометрической перестройкой структуры). Для определения деформационных и прочностных характеристик высокоэластичного стержневого элемента использовали решение нелинейно-упругой краевой задачи о растяжении структурной ячейки композита в виде цилиндра из неогуковой матрицы с жесткой сферой в центре (рис.15а). Высота цилиндра равнялась его диаметру, а разность диаметров ячейки и включения — зазору между соседними частицами. Из соображений симметрии, нетрудно убедиться, что континуальный элемент из частиц одного размера и структурная ячейка должны быть идентичны по своему механическому поведению. Геометрию ячейки характеризовали ее локальной концентрацией φ_L , равной отношению объемов сферы V_s и цилиндра V_c , умноженному на коэффициент 0.907 (для учета дополнительного материала матрицы между цилиндрами)

$$\varphi_L = 0.907 \cdot V_s / V_c = 0.605 / (1 + 0.5\delta/r)^3 .$$

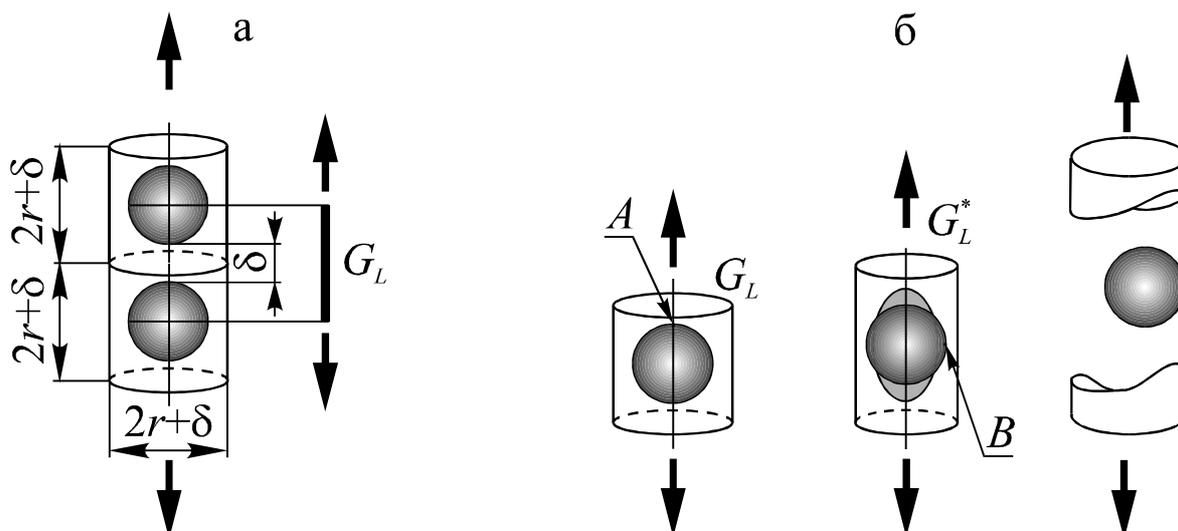


Рис. 15 Схема перехода от структурной ячейки композита к дискретному аналогу (а) и различные стадии "жизненного цикла" фибры

Считали, что "жизненный цикл" высокоэластичного структурного элемента при его деформировании можно разделить на три стадии: Изначально поверхность частицы полностью скреплена с матрицей (I стадия). При растяжении напряжения в системе нарастают и какой-то критический момент в районе полюсов сферы (точка "A" на рис. 15б) образуются межфазные отслоения (II стадия). Появление вакуолей вызывает ослабление действующих в матричных прослойках градиентов напряжений. Жесткость структурного элемента падает, но он продолжает сопротивляться дальнейшему растяжению вплоть до возникновения в нем вторичного повреждения в виде поперечных разрывов матрицы в наиболее деформированной зоне (точка "B" на рис. 15б) — III заключительная стадия.

Расчеты по одноосному растяжению композитной ячейки в условиях больших деформаций на всех стадиях ее "жизненного цикла" были проделаны В.В. Мошевым и Л.Л. Кожевниковой на основе разработанного А.А. Роговым и Л.Л. Кожевниковой комплекса конечно-элементных программ. Рассматривали только равновесные стационарные процессы. Начальную жесткость стержневого аналога G_L определяли из условия эквивалентности энергии деформации в континуальной и дискретной системах

$$G_L = 19.87 E_m r^2 (\delta / r)^{0.15 \ln(\delta / r) - 0.08} .$$

Для повреждаемой деформированием эластомерной матрицы задавали две критические характеристики: 1) предельное среднее растягивающее напряжение σ_m^b , как мера гидростатического сопротивления порообразова-

нию (первичные повреждения); 2) разрывная деформация матрицы при одноосном растяжении ϵ_m^b , как критерий возникновения в ней поперечных разрывов (вторичные повреждения).

В соответствии с опытами Джента было принято, что отслоение произойдет в момент, когда гидростатическое напряжение в полюсе частицы (точка "А" на рис. 15б) превысит модуль Юнга матрицы $\sigma_{\text{гидр}} > \sigma_m^b = E_m$. Соответствующая критическая деформация стержня вычислялась как

$$\epsilon_L > \epsilon_L^* = 0.59 \exp(-3.55\varphi_L) - 0.065.$$

При этом жесткость элемента уменьшали до некоторого нового значения G_L^* , рассчитанного в соответствии с изменившимся напряженно-деформированным состоянием в континуальном элементе,

$$G_L^* = \frac{(1 - 0.97\varphi_L^{0.54})}{\left(1 + \frac{1.25\varphi_L}{1 - \varphi_L/0.605}\right)^2} G_L.$$

В качестве критерия окончательного локального разрушения было принято условие максимума главных растягивающих деформаций в наиболее нагруженной части матрицы (точка "В" на рис. 15б) $\epsilon_m > \epsilon_m^b$ или

$$\epsilon_m = (1.5 + 6.53\varphi_L^3 + 2\varphi_L [1 - \exp(-4.5\epsilon_L)]) \cdot \epsilon_L > \epsilon_m^b.$$

На базе данной ячейки были разработаны два взаимодополняющих подхода к структурному моделированию свойств зернистых эластомерных композитов — структурно-статистический (для быстрых оценочных расчетов) и структурно-механический (для углубленных исследований).

В структурно-статистической модели композит представляли как систему из N_C последовательно соединенных пакетов ("сечений"), содержащих наборы из N_L произвольно ориентированных стержневых элементов с реальным распределением G_L , которое получали численно генерируя случайные пространственные системы из жестких сфер и производя их физическую дискретизацию. Эти данные представляли в виде статистических распределений и эмпирических формул, которые затем использовали при синтезе модельного "образца" (рис. 16). (Отсюда, кстати, и название данного подхода.)

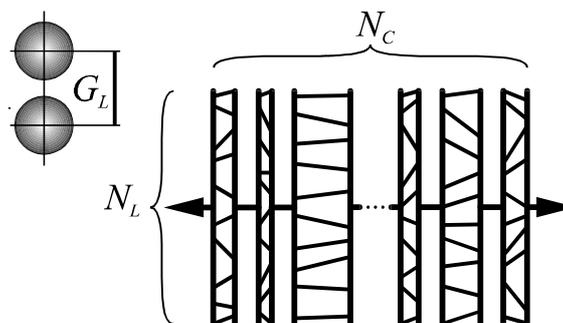


Рис. 16 Расчетная схема структурно-статистической модели

При вытяжке структурные элементы могли поворачиваться, ориентируясь вдоль оси нагрузки, и, тем самым, изменять свой вклад в формирование общей упругой реакции. Стержни с текущим углом наклона $> 60^\circ$ считали сжатыми (проверено на трехмерной модели) и при расчетах общей жесткости сечения не учитывали. Таким образом, моделировали изменение эффективных свойств композита при переходе из макроизотропного в ориентированное состояние.

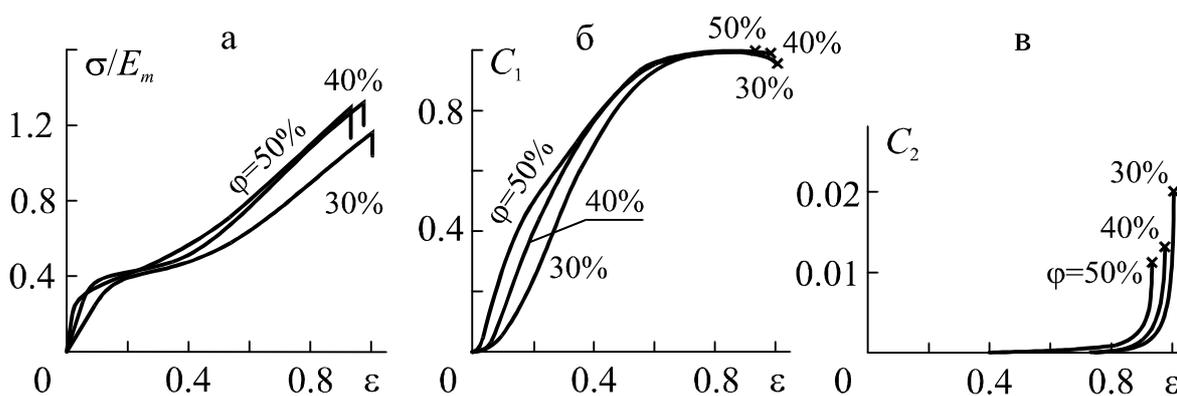


Рис. 17 Зависимости σ (а), C_1 (б) и C_2 (в) от ϵ , полученные на структурно-статистической модели

На рис. 17 представлены кривые растяжения $\sigma - \epsilon$ (условные напряжения) и сопутствующие им зависимости первичной (C_1) и вторичной (C_2) поврежденности для случая $\epsilon_m^b = 200\%$, $N_C = 100$, $N_L = 500$. Интересно, что в системах, где стержни могли менять только свою ориентацию (но не взаимное расположение), наблюдалась почти 100%-я отслоенность. Так как отслоенные структурные элементы с различной геометрией имели значительно более близкие жесткости (чем не отслоенные), то это приводило к такому росту механической однородности системы, что для ее окончательного разрушения было достаточно появления всего $2 \div 3\%$ окончательно разрушенных элементов.

Нелинейная структурно-механическая модель высокоэластичного композита (рис. 18) является дальнейшим развитием линейно-упругой мо-

дели. Ее основные отличия состояли в следующем: 1) жесткостные характеристики структурных элементов были нелинейными; 2) деформирование стержневой системы сопровождалось значительной геометрической перестройкой ее структуры (с учетом условия исключенного объема и развитием внутренней поврежденности); 3) поиск глобального равновесия модельной конструкции осуществляли методом локальных итераций.

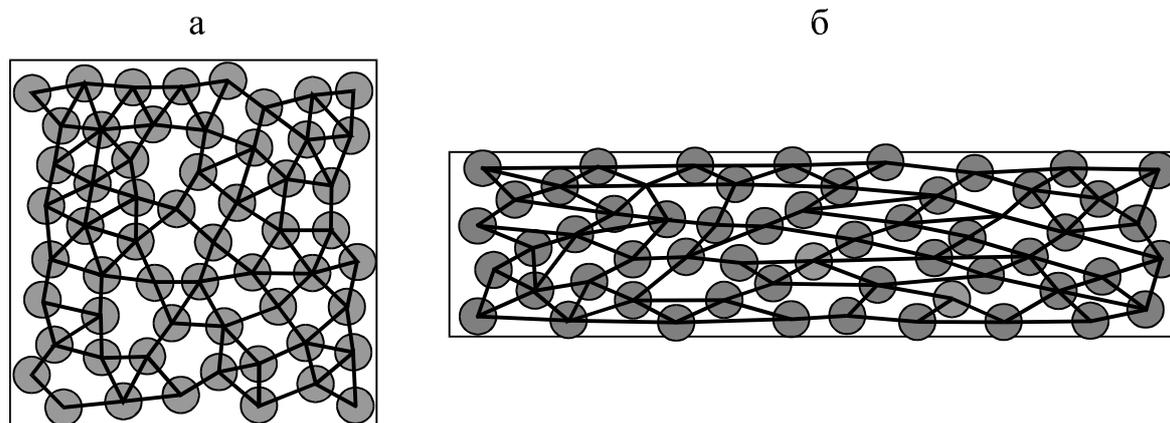


Рис. 18 Структура высокоэластичного композита в свободном (а) и растянутом (б) состоянии

Для отдельно взятого стержневого аналога условие исключенного объема означало, что его узлы не могли сближаться на расстояние, меньшее суммы радиусов частиц, входящих в отображаемый им континуальный элемент. Поэтому, если величина зазора становилась равной примерно $(0.1 \div 0.2)$ от исходного, то в действие вступали мощные "штрафные" силы, препятствующие взаимопроникновению включений. Это ограничение, конечно, не решает полностью проблему исключенного объема, так как в возможны также пересечения и "несоседних" включений, т. е. не входящих в один элемент, но оказавшихся поблизости в процессе перестройки всей системы. Однако непосредственная проверка показала, что в растягиваемой структуре число таких пересечений относительно невелико и их можно не учитывать. При малых и средних деформациях их появление маловероятно из-за того, что перестройка геометрии системы еще не достигла уровня, когда рядом могут оказаться изначально далекие друг от друга включения. При больших деформациях структура становится настолько вытянутой, что в ней вообще мало близко расположенных частиц.

С помощью нелинейной модели были исследованы процессы развития поврежденности в зернистых высокоэластичных композитах (вплоть до полного разрушения). Рассматривали структуры с наполнением ϕ от 20

до 60% и деформативной прочностью матрицы ϵ_m^b от 200 до 500%. На рис. 19 показаны осредненные (не менее чем по 10 независимым реализациям каждая) деформационные зависимости условных напряжений σ , а также сопутствующих первичной (C_1) и вторичной (C_2) поврежденности для композитов с ϕ от 20 до 50% и $\epsilon_m^b = 200\%$, а на рис. 20 для $\epsilon_m^b = 400\%$. Аналогичные зависимости для высоконаполненных систем ($\phi = 60\%$) с разными ϵ_m^b приведены на рис. 21.

В отличие от структурно-статистической модели, где допускалась только переориентация элементов в процессе вытяжки "образца", в данном случае происходило также и изменение взаимного расположения частиц. В результате этого предельная накопленная отслоенность C_1^b в таких системах колебалась от 20% ($\epsilon_m^b = 200\%$) до 55% ($\epsilon_m^b = 500\%$) и никогда не достигала 100%-го уровня. Значения предельной вторичной поврежденности C_2^b на момент глобального разрушения были выше, доходя примерно до 10÷12% (что говорит о включении дополнительных компенсационных механизмов, связанных с перераспределением усилий на ранее слабо нагруженные структурные элементы). Таким образом, можно утверждать, что геометрическая перестройка структуры самым существенным образом сказывается на формировании эффективного поведения дисперсно наполненных эластомеров, работающих в условиях больших деформаций.

С ростом концентрации частиц эффективная жесткость модельных "образцов" возрастала, а разрывные деформации ϵ^b падали. Для наполненных систем по сравнению с чистым эластомером они уменьшались примерно в 2.5÷4 раза (рис. 22а).

Для модельных "образцов" с одинаковой ϵ_m^b и ϕ , изменявшейся от 20 до 50%, значения σ^b (на момент глобального разрыва) оказались довольно близки (рис. 22б), что не противоречит известным экспериментальным результатам. Для концентраций, стремящихся к предельно возможным значениям ($\phi = 60\%$), напряжения разрыва оказались выше. Это объясняется наличием в таких системах большого числа контактов и малых зазоров между частицами. В результате структура получается очень жесткая и неоднородная, — она плохо деформируется и разрушается при весьма малых вытяжках, даже если в качестве связующего используется прочный высокоэластичный материал. Вид кривых нагружения также вполне соответствует известным опытным зависимостям.

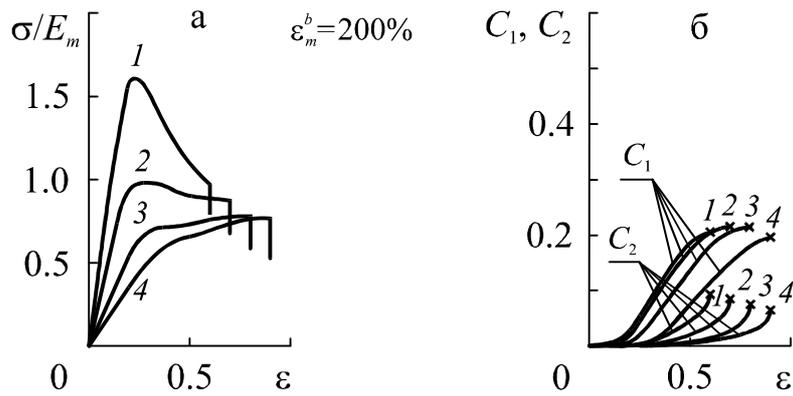


Рис. 19 Зависимости σ , C_1 и C_2 от ϵ и ϕ ($\epsilon_m^b = 200\%$): 1 — $\phi = 50\%$, 2 — 40%, 3 — 30%, 4 — 20%

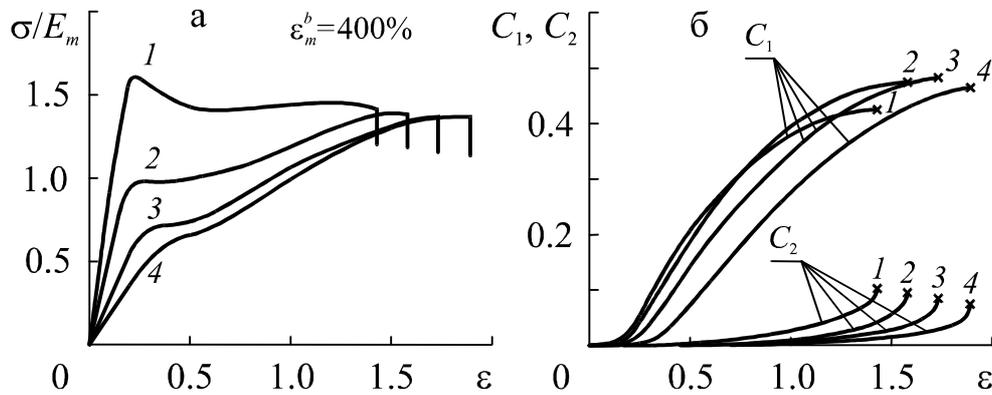


Рис. 20 Зависимости σ , C_1 и C_2 от ϵ и ϕ ($\epsilon_m^b = 400\%$): 1 — $\phi = 50\%$, 2 — 40%, 3 — 30%, 4 — 20%

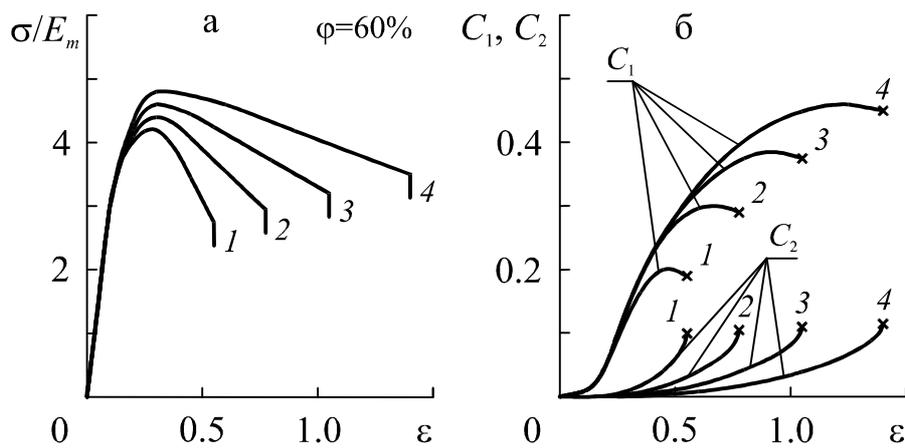


Рис. 21 Зависимости σ , C_1 и C_2 от ϵ и ϵ_m^b ($\phi = 60\%$): 1 — $\epsilon_m^b = 200\%$, 2 — 300%, 3 — 400%, 4 — 500%

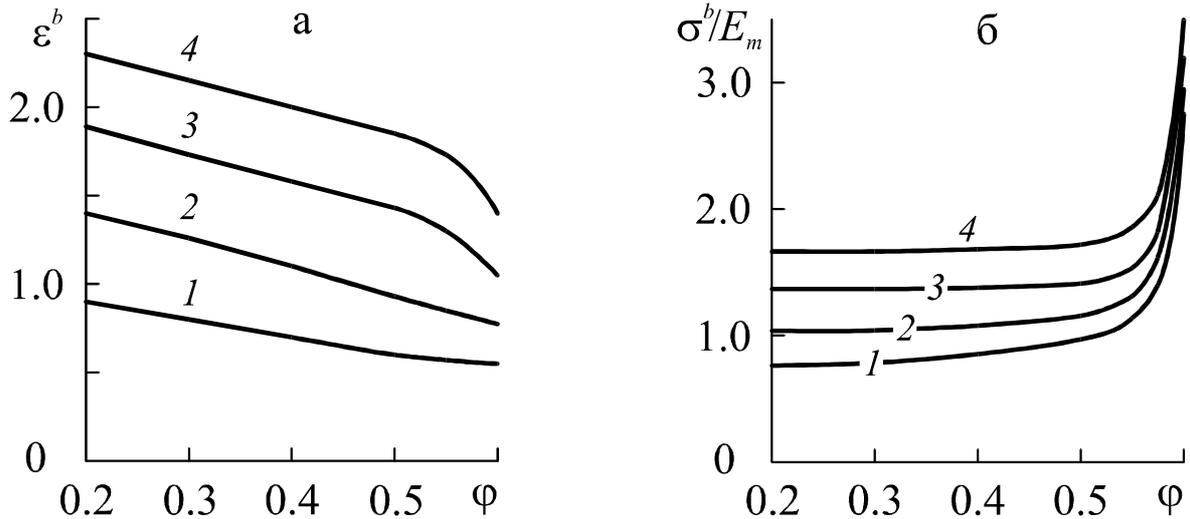


Рис. 22 Зависимости ε^b (а) и σ^b (б) от ϕ для разных ε_m^b : 1 — $\varepsilon_m^b = 200\%$

На базе имеющихся расчетных данных определены диапазоны разброса прочностных характеристик. Было установлено, что он зависел в основном от степени наполнения, причем, чем больше наполнение, тем сильнее был разброс. Деформативная прочность на его величину влияла значительно слабее. На рис. 23 показаны кривые разброса зависимостей $\sigma - \varepsilon$ для случая $\varepsilon_m^b = 300\%$, $\phi = 30, 40$ и 50% . Для других значений этих параметров они имели аналогичный вид. На начальных стадиях растяжения (до появления локальных повреждений) различные по геометрии случайные реализации композитной структуры с одинаковыми исходными характеристиками давали практически одни и те же результаты, что говорит о хорошей представительности исследуемых случайных выборок. В дальнейшем расхождение увеличивалось и в предразрывном состоянии достигало максимума (как по напряжениям, так и по деформациям).

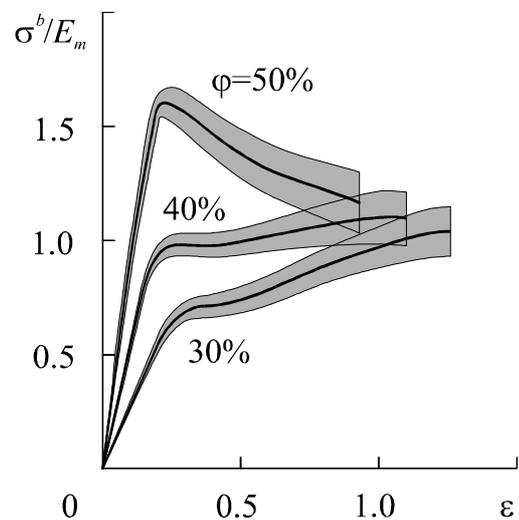


Рис. 23 Кривые разброса $\sigma - \varepsilon$ для композитов с $\varepsilon_m^b = 300\%$: сплошные линии — осредненные кривые; затенение — разброс

Заключение. Сформулированы основные результаты выполненных исследований и сделаны обобщающие выводы, вытекающие из их анализа. Определены перспективные пути развития данного научного направления.

В приложении представлены справки о практическом использовании результатов диссертационной работы в ФГУП "Научно-исследовательский институт шинной промышленности" (Москва) и в ФГУП "Научно-исследовательский институт полимерных материалов" (Пермь).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан алгоритм компьютерного синтеза моно- и полифракционных случайных структур из частиц круглой формы (как плотно упакованных, так и разреженных) — метод "радиального гравитационного поля". Показано, что эти структуры вполне адекватно отображают геометрию внутреннего строения дисперсно наполненных композитов.

2. Сформулировано представление о структурном элементе зернистого эластомерного композита, состоящем из двух близкорасположенных жестких сферических частиц, помещенных в упругую несжимаемую матрицу. Получено численно-аналитическое решение краевой задачи об осесимметричном нагружении двух жестких сфер в несжимаемой линейно-упругой матрице, что позволило определить механические характеристики элементов аппроксимирующей композит модельной стержневой системы.

3. Построена структурно-механическая модель дисперсно наполненного композита с сильно выраженной механической неоднородностью свойств матрицы и включений, позволяющая в явном виде исследовать эффективное деформационное и прочностное поведение таких материалов в зависимости от их структуры и свойств компонентов.

4. Рассчитаны концентрационные зависимости эффективного модуля для композитов с моно- и бидисперсным наполнением. Определены оптимальные (с точки зрения соотношения жесткости и степени наполнения) фракционные составы. Показано, что модельные результаты находятся в удовлетворительном соответствии с известными опытными данными.

5. Исследованы закономерности возникновения и развития поврежденности в монофракционных зернистых композитах со слабоэластичным связующим в случае сильной и слабой адгезионной связи между матрицей и включениями.

6. Разработан алгоритм, предназначенный для решения задач о нагружении нелинейно-упругих конечно деформируемых стержневых систем с неоднородной произвольно сформированной структурой, — метод ло-

кальных итераций. На примере расчетов по растяжению и разрушению линейно и нелинейно-упругих сетчатых систем показана практическая эффективность и надежность метода, особенно когда структура сеток неоднородна, а макродеформация может достигать сотен процентов.

7. Разработаны линейно и нелинейно-упругие структурные модели, предназначенные для описания механического поведения высокоэластичной молекулярной сетки. Исследовано деформационное и прочностное поведение полимера в зависимости от топологии структуры его молекулярной сетки и ее неоднородности.

8. Предложена структурно-статистическая модель зернистого композита с высокоэластичной матрицей, предназначенная для проведения быстрых оценочных расчетов. С ее помощью исследованы зависимости предельных напряжений и деформаций от концентрации наполнителя и размеров модельного "образца".

9. Сделано обобщение структурно-механической модели дисперсно наполненного эластомерного композита на случай больших упругих деформаций. Для композитных систем с различным наполнением и деформативной прочностью матрицы исследованы процессы развития поврежденности, определены эффективные разрывные напряжения и деформации, установлены диапазоны их разброса.

ВАЖНЕЙШИЕ ПУБЛИКАЦИИ

Содержание диссертации изложено в монографии "Мошев В.В., Свистков А.Л., Гаришин О.К., и др. Структурные механизмы формирования механических свойств и прочности зернистых полимерных композитов. — Екатеринбург: УрО РАН, 1997. — 508 с." и в приведенных ниже печатных работах.

Статьи в российских периодических научных изданиях, рекомендованных ВАК для публикации основных результатов диссертационных исследований на соискание ученой степени доктора наук:

1. Гаришин О.К. Структурное моделирование упругих свойств наполненных эластомеров // Каучук и резина. — 1998. — № 6. — С. 35–39.
2. Свистков А.Л., Гаришин О.К., Евлампиева С.Е., Лебедев С.Н. Итерационный метод расчета напряженно-деформированного состояния в ансамблях включений // Механика композиционных материалов и конструкций. — 1999. — Т. 5, № 2. — С. 17–28.
3. Гаришин О.К. Структурно-статистическая модель наполненного композита и ее применение для исследования процессов разрушения // Каучук и резина. — 2000. — № 6. — С. 16–18.

4. Гаришин О.К. Математическое моделирование процессов разрушения в высокоэластичных разупорядоченных сетках // Высокомолек. соед. — Сер. А. — 2001. — Т. 43, № 8. — С. 1407–1415.
5. Гаришин О.К., Лебедев С.Н. Математическое моделирование механических свойств разупорядоченных сетчатых структур // Каучук и резина. — 2001. — № 5. — С. 26–30.
6. Гаришин О.К. Структурно-механическая модель зернистого композита с высокоэластичной повреждаемой деформированием матрицей // Высокомолек. соед. — Сер. А. — 2002. — Т. 44, № 4. — С. 666–674.
7. Комар Л.А., Гаришин О.К., Свистков А.Л. Моделирование процессов возникновения микроповреждений в зернистых эластомерных композитах с учетом размеров частиц наполнителя и скорости нагружения // Механика композиционных материалов и конструкций. — 2002. — Т. 8, № 3. — С. 358–364.

Прочие публикации по теме диссертации:

1. Гаришин О.К. Моделирование структуры двухфракционных высоконаполненных композитов // Структурно-механическое исследование материалов и конструкций. — Свердловск: УНЦ АН СССР, 1984. — С. 23–26.
2. Гаришин О.К. Оптимизация двухфракционных упаковок из частиц круглой формы // Деформирование и разрушение композитов. — Свердловск: УНЦ АН СССР, 1985. — С. 14–17.
3. Гаришин О.К. Структурный подход к пространственной модели высоконаполненных зернистых композитов // Механика микронеоднородных структур. — Свердловск: УрО АН СССР, 1988. — С. 23–37.
4. Гаришин О.К. Исследование упругих свойств высоконаполненных зернистых композитов с помощью структурно-механической модели // Деформирование и разрушение структурно-неоднородных материалов и конструкций. — Свердловск: УрО АН СССР, 1989. — С. 86–91.
5. Гаришин О.К. Структурное моделирование процессов разрушения в наполненных зернистых композитах // Деформирование и разрушение структурно-неоднородных материалов. — Свердловск: УрО АН СССР, 1992. — С. 32–40.
6. Гаришин О.К. Обобщение структурно-механической модели наполненных зернистых композитов на случай конечных упругих деформаций (дельта-метод) // V Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов.: Труды. — Москва, 1993. — С. 34–38.
7. Гаришин О.К. Структурное моделирование механических свойств высоконаполненных зернистых эластомеров с учетом перестройки структуры при их деформировании // Международная конференция по каучуку и резинам "IRC'94": Труды. — Москва, 1994. — Т. 4. — С. 400–407.

8. Гаришин О.К. Структурное моделирование эффективных упругих свойств наполненных зернистых композитов с несжимаемой эластомерной матрицей // Международная конференция по внутрикамерным процессам и горению "ICOS-96": Труды. — Ижевск, 1997. — Т. 2. — С. 383–389.
9. Гаришин О.К. Структурно-статистическая модель наполненного композита и ее применение для исследования процессов разрушения // IX Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов ": Труды. — Москва, 1998. — Т. 1. — С. 67–74.
10. Гаришин О.К., Лебедев С.Н. Структурное моделирование прочностных свойств упругих сетчатых систем в зависимости от их разупорядоченности // XI Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов": Труды. — Москва, 2000. — Т. 1. — С. 184–188.
11. Гаришин О.К. Компьютерное моделирование развития поврежденности в высокоэластичных наполненных эластомерах // XII Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов": Труды. — Москва, 2001. — Т. 1. — С. 139–146.
12. Комар Л.А., Гаришин О.К., Свистков А.Л. Компьютерное моделирование развития поврежденности в высокоэластичных наполненных эластомерах // XII Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов": Труды. — Москва, 2001. — Т. 1. — С. 219–226.
13. Гаришин О.К., Комар Л.А. Масштабный эффект прочности в дисперсно наполненных полимерных композитах // XIII Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов": Труды. — Москва, 2002. — Т. 1. — С. 92–98.
14. Moshev V.V., Garishin O.C. Physical discretization approach to evaluation of elastic module of highly filled granular composites // *Int. J. Solids and Structures*. — 1993. — V. 30, № 17. — P. 2347–2355.
15. Moshev V.V., Golotina L.A., Garishin O.C., Kozhevnikova L.L. Structural approach in continuum modeling damageable particulate composites // *PROBAMAT - 21st CENTURY: Probabilities and Materials. NATO ASI series: Proceedings*. — Perm, 1997. — Dordrecht, Netherlands, 1998. — V. 3/46. — P. 311–316.
16. Moshev V.V., Golotina L.A., Garishin O.C. Continuum models for damageable particulate composites based on structural formulations // *J. Adhesion*. — 1998. — V. 65. — P. 207–216.
17. Garishin O.C., Moshev V.V. Computer modeling of mechanical behavior of damageable particulate composites // *J. Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. — 1999. — V. 31. — P. 61–66.
18. Garishin O.C., Moshev V.V. Damage model of elastic rubber particulate composites // *J. Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. — 2002. — V. 38. — P. 63–69.