

УДК 539.3

© 1999 г. И.Ф. ОБРАЗЦОВ, Ю.Г. ЯНОВСКИЙ

РОЛЬ ИЕРАРХИЧЕСКОГО АДАПТИВНОГО ПОДХОДА В МЕХАНИКЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

Для описания макромеханического поведения гетерогенных полимерных сред и композитов вводится иерархия структурно-параметрического описания по условиям детализации. Рассматриваются следующие примеры иерархически-адаптивного моделирования поведения ПМК:

1. иерархически-адаптивная модель для идентификации уравнений состояния вязкоупругих сред (феноменологическое приближение);
2. иерархические модели для описания структуры и макромеханических свойств межфазных слоев ПМК (молекулярное приближение);
3. иерархический подход в задачах численного моделирования макромеханических свойств ПМК (объектно-ориентированное программирование МКЭ).

На основе предложенных моделей гетерогенного материала, а также в рамках скейлингового подхода описаны релаксационные и механические свойства полимерного композита с высокоэластической матрицей в зависимости от молекулярных и структурных характеристик межфазного слоя и условий взаимодействия макромолекул полимерной матрицы с поверхностью частиц наполнителя. Полученные соотношения устанавливают взаимосвязь упругих свойств композита с молекулярными и структурными параметрами макромолекул (число сегментов, их размер). Предложенные уравнения могут быть также использованы и при решении ряда прикладных технологических задач, например при прогнозировании и оптимизации рецептур композитов (в частности, резин) при подборе рациональных параметров переработки, оценке устойчивости коллоидных дисперсий, стабилизированных полимерами, и др.

1. Введение. В последние годы бурно развиваются подходы, позволяющие строить модели сплошных сред с помощью последовательных естественных усложнений от макро- к микроуровню. Наглядным тому примером являются, в частности, работы, посвященные описанию и прогнозированию механических свойств композитов, в частности, полимерных матричных композитов (ПМК).

Полимерные матричные композиты, усиленные мелкодисперсным наполнителем – несомненно гетерогенные среды. Термин "гетерогенность" достаточно часто приводится в научной литературе и с позиций физики твердого тела определяется следующим образом: "Гетерогенная среда – это система, состоящая из физически или химически разнородных пространственно разделенных контактирующих между собой частей" [1]. С модельных позиций ПМК часто рассматривают как концентрированные дисперсные или пластично-дисперсные системы, состоящие из упругой, высокоэластичной или вязкоупругой полимерной матрицы (в зависимости от типа полимера и условий моделирования) и твердой фазы – наполнителя [2,3]. Макроскопические механические свойства полимерных матричных композитов существенным образом зависят от характеристик адгезионного взаимодействия полимерной матрицы с поверхностью частиц наполнителя.

Исследования на молекулярном уровне показывают, что с микроскопической

точки зрения, реальные контакты представляют собой протяженные в пространстве образования, механические свойства которых могут изменяться как вдоль границы, так и по толщине слоя [4]. Контакт полимерной матрицы с поверхностью наполнителя происходит в некоторых "активных" центрах, которые в общем случае могут быть распределены по поверхности неравномерно. Величина энергии взаимодействия макромолекул, составляющих полимерную матрицу, с поверхностью может быть различной в зависимости от их физико-химической природы и свойств самой поверхности. Кроме того, конформация макромолекул вблизи поверхности твердой фазы и на некотором расстоянии от нее значительно различаются. Указанные особенности обуславливают формирование межфазных (приповерхностных) полимерных слоев с определённой пространственной структурой и механическими свойствами (отличающимися от свойств полимерной матрицы).

При механическом воздействии на композит микроскопические размеры межфазного слоя и его специфические механические характеристики могут привести к возникновению в нем больших градиентов напряжений и деформаций, поэтому макроскопические механические свойства композита в целом определяются не только свойствами и объемными долями компонентов, но и характеристиками межфазных слоев. Анализ структуры и свойств межфазных слоев в рамках нано- и микромеханических приближений представляется весьма сложной и нетрадиционной, с точки зрения механики, задачей [5–8]. Моделирование необходимо проводить на молекулярном или макромолекулярном уровне с учетом физико-химической активности поверхности наполнителя и оценкой роли воздействия внешних сил и температуры на стадии "формования" материала (особенности технологий).

Итак, описание макромеханического поведения гетерогенных полимерных сред и композитов – многоступенчатая задача, которая требует последовательных микромеханических приближений по возрастающей степени сложности (иерархический подход).

Рассмотрим далее некоторые примеры иерархического моделирования поведения гетерогенных полимерных сред и композитов, представляющие определенный интерес в рамках темы данной работы.

2. Иерархическая адаптивная модель для идентификации уравнений состояния вязкоупругих полимерных сред (феноменологическое приближение). *2.1. Постановка задачи.* Известно, что вязкоупругое поведение полимерных сред при деформировании обусловлено спецификой их внутренней структуры (длинные макромолекулы, связанные друг с другом флуктуационными физическими зацеплениями или химическими сшитые). Реологические уравнения состояния способны предсказывать специфику деформирования таких сред [9–11].

Задача идентификации уравнения состояния вязкоупругой среды достаточно часто обсуждается в специальной литературе [12–16]. Известны многочисленные попытки предсказания закономерностей деформирования таких сред путем исследований на математических моделях. Широкое разнообразие предлагаемых здесь вариантов, как дифференциального, так и интегрального типов [9] не дает тем не менее четкого ответа на главные вопросы: какие типы сред та или иная тем не менее четкого ответа на главные вопросы: какие типы сред та или иная модель описывает с наилучшим приближением; в каком диапазоне параметров деформирования данная модель позволяет получать адекватные результаты; какие нелинейные эффекты модель способна предсказывать. Чрезвычайно важным с математической точки зрения является и вопрос об устойчивости решения, получаемого на базе такой модели. В общем случае необходимо рассматривать проблему корректности решения по Адамару [17].

Сказанное наводит на мысль о необходимости создания "самообучающихся" математических моделей, параметры которых могли бы автоматически устанавливаться в процессе адаптации модели к реальной среде путем решения совместной экспериментально-теоретической задачи. С практической точки зрения требуется разработать алгоритм, позволяющий на основе экспериментальной оценки ряда необходимых

материальных параметров и материальных функций построить обобщенную математическую модель вязкоупругой среды, предсказывающую поведение последней в широком диапазоне изменения параметров деформирования.

Практически задача сводится к хорошо известной в теории управления проблеме – созданию алгоритма управления процессом, в данном случае, процессом математического "синтеза" (конструирования) состояния вязкоупругой среды с учетом экспериментально определенных ее материальных параметров и материальных функций.

Проблему математического синтеза модели можно представить схемой, показанной на фиг. 1.

Пусть модель 1 (фиг. 1,а) объекта 2 связывает ее выход Y' со входом X и управлением 3 U зависимостью

$$Y' = F'(X, U) \quad (2.1)$$

где F' – модельный оператор объекта, моделирующий действительный оператор объекта F , который неизвестен. Процесс идентификации заключается в наиболее точной оценке оператора F по наблюдениям входов и выходов объекта при эксперименте. Эксперимент формирует информацию $S:(X, U, Y)$. Эффективность этапа идентификации определяется вариационной задачей

$$F'_0 = \arg \inf \Phi_1(F, F') : F' \in \Omega_1 \quad (2.2)$$

Поскольку оператор F неизвестен, задачу (2.2) подменяют задачей идентичности выходов объекта и его модели:

$$F'_0 = \arg \inf \Phi_2(Y, F'(X, U)) : F' \in \Omega_2 \quad (2.3)$$

Эта подмена опирается на интуитивный принцип: одинаковые последствия вызываются одинаковыми причинами.

На стадии принятия решения необходимо иметь синтезированную модель объекта, поставить цель управления и учесть возможные воздействия на объект. Решение – это выбор одной из возможностей, которая наилучшим образом с точки зрения имеющейся модели F' , приводит объект к намеченной цели Y^* .

Как и в задаче идентификации, оптимальное управление определяется вариационной задачей.

$$U^* = \arg \inf f(Y^*, F'(X, U)) : U \in \Omega_1 \quad (2.4)$$

Если объект охарактеризован с точностью до параметров $A = (a_1, \dots, a_k)$, а вход объекта изменяется по известному закону, то для идентификации достаточно решить систему уравнений

$$Y_i = F(X_i, U, A) : i = 1, \dots, q \geq k \quad (2.5)$$

относительно A , если, конечно, структура F позволяет это сделать.

В качестве примера рассмотрим структуру $y = x + au$. Путем изменения x не представляется возможным идентифицировать неизвестный параметр a . В последнем случае от пассивной идентификации (2.5), при которой $U = \text{const}$. Необходимо перейти к активной идентификации, при которой $U' = \{U_i\} \in \Omega_3$ и решать систему уравнений относительно A :

$$Y_j = F(X, U_j, A) : j = 1, \dots, q \geq k \quad (2.6)$$

На фиг. 1,б приведена наиболее простая блок-схема алгоритма управления, когда основная цель управления допускает декомпозицию на два этапа – идентификацию 4 и принятие решения 5. Простота его окупается приближенностью решения. Более точное решение можно получить, если схему управления рассматривать как дуальный процесс, состоящий из анализа объекта и синтеза управления, но направленный на достижение одной цели, которая должна быть реализована в объекте управления.

В качестве следующего примера рассмотрим течение вязкоупругой жидкости. В рамках общих представлений существующих теорий течение вязкоупругой жидкости в закрытых каналах описывается следующей замкнутой системой уравнений

$$\operatorname{div} V = 0, \quad \rho[\partial V / \partial t + (V, \nabla)V] = \nabla \tau - \nabla p$$

$$\tau = SC^{-1}, \quad C^{-1} = FV \quad (2.7)$$

где V – вектор скорости, ρ – плотность жидкости, p – давление, t – время, τ – тензор напряжений, C^{-1} – тензор скорости деформации Фингера. Операторы S и F имеют смысл материальных функций и определяются моделью течения, соответствующей данному классу анализируемой среды. Начальные и граничные условия при этом выбираются исходя из особенностей рассматриваемой проблемы.

Для того, чтобы решение задачи (2.7) было адекватно реально исследуемой среде, необходимо знать ее уравнение состояния (или материальные параметры среды), или оценить их на основании экспериментов.

Из литературы известно множество различных уравнений состояния вязкоупругих сред [9], начиная с моделей Максвелла – Больцмана (1874). Широкую известность получили, например, модели типа К-ВКЗ [12]:

$$\tau(r, t) = \int_{-\infty}^t \sum (\alpha_k / \lambda_k) \exp(-(t-s)/\lambda_k) \frac{\alpha C_t^{-1}(r, s)}{(\alpha - 3) + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2} ds \quad (2.8)$$

где s – текущее время; α_k, λ_k – параметры модели; $\alpha > 0, 0 \leq \beta \leq 1, I_1 = \operatorname{tr} C_t^{-1}, I_2 = \operatorname{tr} C_t; F_t^T F_t = C_t^T$ – тензор Коши – Грина; $F_t(s)$ – матрица-функция Якоби. Например, для простого сдвига

$$v_{x_1}(x_2, t) = (\dot{\gamma} x_2, 0, 0), \quad F_t(s) = \begin{vmatrix} 1 & -\dot{\gamma}(t-s) & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

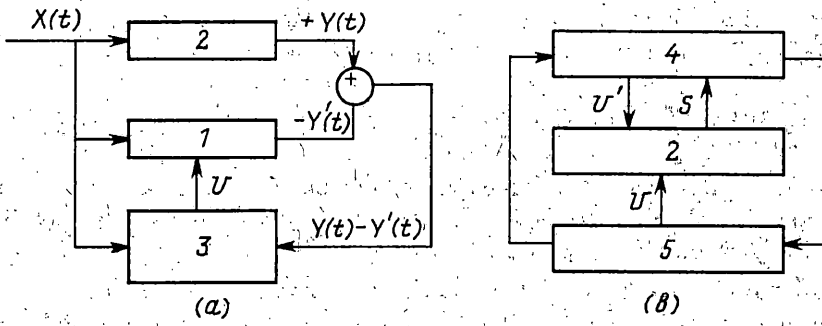
Нетрудно заметить, что модель (2.8) линейна относительно искомого решения $G(t-s) = \sum (\alpha_k / \lambda_k) \exp\{- (t-s) / \lambda_k\}$.

Анализируя вышеприведенные примеры, а также другие, широко рассматриваемые в литературе (см., например, [2,9]), можно констатировать, что имея реальную вязкоупругую среду и множество известных уравнений состояния, исследователь, тем не менее, не имеет критерия выбора адекватной модели. Неадекватность большинства известных моделей реальным средам неоднократно отмечалась авторами ряда работ при сопоставлении результатов численных расчетов с экспериментальными данными (см., например, [13, 16]).

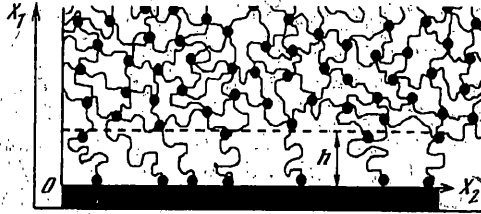
Рассмотрим далее подход, который открывает некоторые пути преодоления указанных противоречий [18].

2.2. Иерархическая интегральная адаптивная модель. Предлагаемая иерархическая адаптивная модель представляет собой последовательность усложняющихся интегральных уравнений для поиска уравнения, наиболее полно удовлетворяющего реальному физическому процессу в смысле (2.3). Переход с одного шага иерархии модели на следующий, определяется заданной точностью идентификации модели. Численно это задается значением точной нижней грани функционала качества из вариационной задачи (2.3).

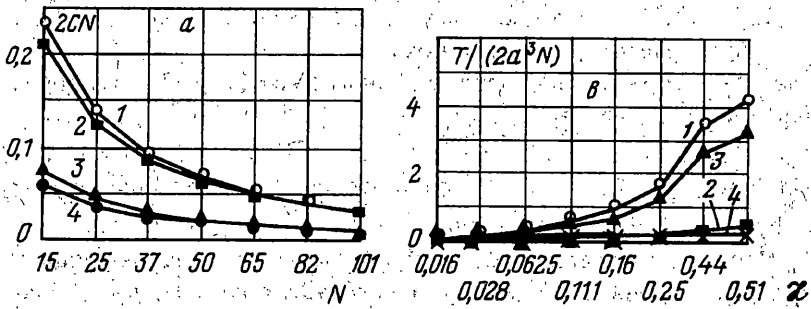
В данном варианте в качестве исходного объекта анализа (начальная степень иерархии) выберем модель (2.8). Не ставя своей целью изучение и идентификацию констант (α, β) , отметим, что входящая в (2.8) функция $G(t-s) = \sum (\alpha_k / \beta_k) \exp\{- (t-s) / \lambda_k\}$ положительна. Обозначим класс таких функций через D .



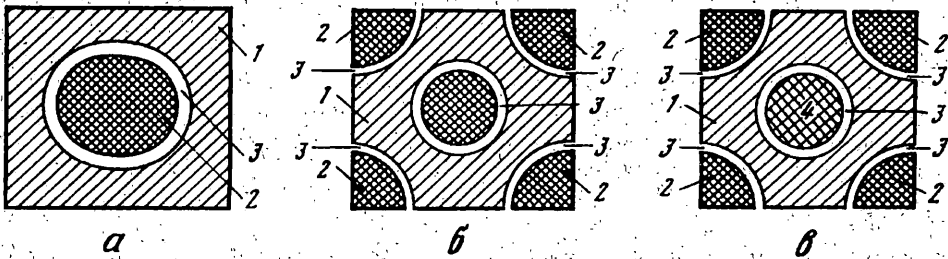
Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

(1). *Первый этап иерархии модели: приближение с известной функцией нелинейности $R(\cdot)$.* Рассмотрим интегральное уравнение вида

$$\tau(r, t) = \int_{-\infty}^t G(t-s)R[C_t^{-1}(r, s)]C_t^{-1}(r, s)ds \quad (2.9)$$

где $R(\cdot)$ – некоторая известная скалярная функция. Нетрудно заметить, что модель К-ВКЗ получается из (2.9) при равенстве $R(\cdot) = \alpha/[(\alpha-3) + \beta I_1 + (1-\beta)I_2]$, где инварианты I_1 и I_2 определены выше.

По экспериментальным данным τ , C_t^{-1} и известной функции $R(\cdot)$ требуется идентифицировать материальную функцию $G(\cdot)$ в соответствии с задачей (2.3).

Несмотря на то, что прямая задача (2.9) нелинейна, обратная задача (2.9) линейна. Однако, как будет показано ниже, она некорретна по Адамару и к ней следует применять специально разработанные для таких задач методы решения.

(2). *Второй шаг иерархии: приближение с неизвестной функцией нелинейности $R(\cdot)$.* На этом этапе требуется определить две функции из уравнения (2.9): функцию $G(\cdot)$ и функцию $R(\cdot)$. Однако теперь уравнение (2.9) не доопределено и не может быть разрешимо.

Для оценки указанных функций проведем несколько независимых экспериментов на одном и том же материале при одних и тех же условиях. В первом эксперименте, положив $R_1(\cdot) \equiv 1$, определим функцию $G_1(\cdot)$ путем решения уравнения

$$\tau(r, t) = \int_{-\infty}^t G(t-s)C_t^{-1}(r, s)R(r, s)ds \quad (2.10)$$

в классе положительных функций. Во втором эксперименте при фиксированном значении функции $G_1(\cdot)$ определяется функция $R_2(\cdot)$ путем решения уравнения (2.10). Процедура продолжается до тех пор, пока линейная комбинация чисел $\|G_k - G_{k-1}\|$ и $\|R_k - R_{k-1}\|$ не станет меньше некоторого заданного числа, характеризующего точность данного шага иерархии модели.

При необходимости идентификации модели К-ВКЗ (2.8) зависимость $R[\text{tr}C_t^{-1} + (1-\beta)\text{tr}C_t]$ аппроксимируется методом наименьших квадратов исходя из найденных значений функции R , например, в классе многочленов от комбинации $\xi = \text{tr}C_t^{-1} + (1-\beta)\text{tr}C_t$. Параметр β определяется из условий наилучшей аппроксимации.

Проверка адекватности модели осуществляется путем анализа задачи (2.3). В результате в базу данных записывается функция $G(\cdot)$ и параметры функции $R(\cdot)$, соответствующие конечному этапу эксперимента.

При неудовлетворительном качестве идентификации модели на втором этапе следует переходить к рассмотрению более сложных моделей – типа Гаммерштейна; или разложения нелинейных операторов в ряды по полиномиальным операторам Гильберта–Шмидта.

(3). *Третий шаг иерархии: введение операторов типа Гаммерштейна.* Пусть заданы нелинейное отображение $F: E_x \rightarrow E_z$ и линейное отображение $B: E_y \rightarrow E_z$, где E_x, E_y, E_z – некоторые векторные пространства. Тогда отображение $\Gamma = BF: E_x \rightarrow E_z$ называют оператором типа Гаммерштейна, а уравнение

$$BF(x) = z \quad (2.11)$$

называют уравнением типа Гаммерштейна. В частном случае оператор Немыцкого задается равенством $F(x) = g(x(t), t)$, где $g(x, t)$ – вещественная функция, непрерывная по $x \in (-\infty, \infty)$ почти при каждом фиксированном $t \in D$ и измеримая в D по t при всяком x . Здесь D измеримое множество положительной конечной или бесконечной Лебеговой меры, принадлежащее N -мерному евклидову пространству. Если выполняется неравенство $|g(x, t)| \leq a(t) + b|x|^{p-1}$, где $a(t) \in L_q(D)$, $b > 0$, $p > 1$, $(1/p) + (1/q) = 1$, то оператор

Немыцкого непрерывный, потенциальный и действует из пространства Лебега $L_p(D)$ в пространство Лебега $L_q(D)$. Его потенциал равен

$$f(x) = f_0 + \int_D dt \int_0^{x(t)} g(v, t) dv, \quad f_0 = \text{const}$$

Если $D \equiv R^1$, то уравнение Гаммерштейна примет вид

$$z(t) = \int_a^b K(t, s) F(x(s), s) ds \quad (2.12)$$

где $K(t, s)$ – Фредгольмово ядро оператора B .

При формировании модели в реальном времени и в случае возникновения зависимости ядра уравнения от искомого решения следует использовать последующие шаги иерархий.

(4). Четвертый шаг иерархии: введение оператора Урысона–Вольтерра. На этом шаге иерархии уравнение (2.12) записывается в виде

$$z(t) = \int_a^t K(t, s, x(s), s) ds \quad (2.13)$$

где $K(\cdot)$ – непрерывная по совокупности аргументов функция, а $x(\cdot)$ – ограничена.

(5). Пятый шаг иерархии: введение оператора Ляпунова–Лихтенштейна (разложение по полиномиальным операторам Гильберта–Шмидта). Пусть D множество $\Pi_n(H, R^1)$ полиномов степени не выше n , определенных на H со значениями на действительной оси R^1 . Если H – сепарабельное гильбертово пространство, то в классе полилинейных форм можно выделить формы Гильберта–Шмидта, для которых нормы определяются равенством

$$\|K_n\|_{H_n}^2 = \sum_{i_1=1}^{\infty} \dots \sum_{i_n=1}^{\infty} \|K_n(e_{i_1}, \dots, e_{i_n})\|_V^2$$

где сумма не зависит от выбора конкретной ортонормальной системы. Класс n -линейных форм Гильберта–Шмидта образует гильбертово пространство $H_n(H, V)$ относительно нормы Гильберта–Шмидта. Это пространство сепарабельно независимо от того, сепарабельно V , или нет. Функцию $P_k(x): H \rightarrow V$ называют однородным полиномиальным оператором Гильберта–Шмидта степени k , если найдется симметричная k -линейная форма Гильберта–Шмидта, отображающая H в V такая, что

$$K_n(y, \dots, y) = \frac{1}{k!} \frac{d^k}{d\lambda_k} P_k(x + \lambda y)|_{\lambda=0}$$

для любых $x, y \in H$. Следовательно, если $f: H \rightarrow V$ аналитическая по Фреше (или по Гато) функция в области $D \subset H$, то для любой заранее заданной точки $x \in D$ справедливо разложение по полиномиальным операторам Гильберта–Шмидта

$$f(y) = f(x) + \sum_{k=1}^n P_k(x, h) + r_{n+1}(x, y) \quad (2.14)$$

Остаток $r_{n+1}(x, y)$ может быть определен либо в форме Пеано, либо в интегральной форме

$$r_{k+1}(x, y) = \frac{1}{k!} \int_0^1 f^{(k+1)}(x + \lambda h) h^{k+1} (1 - \lambda)^k d\lambda, \quad \lambda \in R^1$$

Например, если $H \equiv L_2[a, b]$, $V \equiv R^1$, то нелинейный оператор (2.14) примет вид

$$f(y) = f_0 + \sum_{k=1}^n \int \dots \int W_k(s, t_1, t_2, \dots, t_k) \prod_{i=1}^k y(t_i) dt_i + r_{n+1}(\cdot) \quad (2.15)$$

где функции ядра $\{W_k(\cdot)\}_{k=1}^n$ интегрируемы с квадратом и симметричны относительно своих аргументов на области определения.

2.3. *Алгоритмические аспекты. (1). Некорректность задачи идентификации по Адамару.* Как видно из 2.2 каждый этап иерархии предполагает решение обратной задачи, удовлетворяющей некоторым ограничениям на решение. Такие задачи относятся к классу некорректно поставленных по Адамару [17].

Рассмотрим задачу

$$Az = u; \quad z \in Z, \quad u \in U \quad (2.16)$$

Здесь Z и U – некоторые метрические пространства, а A – непрерывный оператор, переводящий элементы $z \in Z$ в элементы пространства U .

Следуя Адамару, введем определение корректно поставленной задачи.

Определение (1): Задача (2.16) называется корректной (или корректно поставленной), если выполнены три условия:

a) условие существования решения – решение задачи (2.16) существует для любого элемента $u \in U$;

b) условие единственности решения – из того, что $Az_1 = Az_2$ в метрике U , следует $z_1 = z_2$ в метрике Z ;

c) условие устойчивости решения – оператор A^{-1} непрерывен в U .

Последнее означает, что если $D_\delta = \{u_\delta \in U: \rho_U(u, u_\delta) \leq \delta\}$ – некоторая окрестность элемента $u \in U$ и $z_\delta = A^{-1}u_\delta$, то в силу условия c) имеем $\rho_Z(z_\delta, z) \rightarrow 0$ при $\delta \rightarrow 0$.

Условие (c) позволяет для решения таких задач широко использовать имеющиеся в литературе численные методы.

До недавнего времени некорректные задачи трактовались как лишённые физического смысла. Действительно, какую физическую интерпретацию может иметь неустойчивое решение? Тем не менее большинство используемых в настоящее время на практике уравнений некорректно поставлены [9] и для их решения необходимо строить специальные регуляризующие алгоритмы и программы.

(2). *Регуляризующий алгоритм и способы его построения.* Большинство известных методов решения некорректно поставленных задач основаны на синтезе регуляризующего алгоритма по Тихонову [19, 20]. Введем его определение, для чего рассмотрим некорректно поставленную задачу

$$Az = u, \quad z \in Z, \quad u \in U$$

Здесь Z и U – метрические пространства. Оператор A осуществляет взаимно однозначное отображение Z на $AZ \subseteq U$. Введем окрестность $D_\delta = \{u_\delta \in U: \rho_U(u, u_\delta) \leq \delta\}$. Заметим, что D_δ может быть шире $AZ: AZ \subseteq D_\delta \subseteq U$. Введем далее определение регуляризующего алгоритма:

Определение (2): Регуляризующим алгоритмом будем называть оператор R , удовлетворяющий следующим условиям:

a) начиная с некоторого δ_0 , он определен для всех $0 < \delta < \delta_0$ и для всех $u_\delta \in D_\delta$

b) каждой паре $\{u_\delta \in D_\delta, \delta\}$ оператор R ставит в соответствие элемент z_δ по соотношению $z_\delta = R(u_\delta, \delta) \in Z$;

c) для любого $\varepsilon > 0$ существует число $\delta(\varepsilon) > 0$ такое, что $\rho_Z(z_\delta, z) < \varepsilon$, как только $0 < \delta < \delta(\varepsilon)$.

В настоящее время существуют различные способы построения регуляризующего алгоритма. В [18] был проведен анализ трех из них, наиболее часто встречающихся в литературе, а именно: методов регуляризации на основе сглаживающего функционала Тихонова, оптимальной фильтрации и инверсной полосовой фильтрации [21–23].

Вычислительные эксперименты показывают, что лучшей эффективностью обладает метод оптимальной фильтрации. Однако на практике применение этого метода не всегда дает лучший результат из-за его высокой чувствительности к искажениям передаточной функции системы. При отсутствии достаточной априорной информации

о задаче обычно лучший результат достигается в методе сглаживающего функционала Тихонова [22].

2.4. Некоторые выводы. В развитие вышеизложенных идей авторами была предложена иерархическая адаптивная модель идентификации уравнений состояния вязкоупругих сред [18] путем вычисления материальных параметров и материальных функций конкретной вязкоупругой среды экспериментально-теоретическим способом — на основе простейших тестов. Модель содержит несколько шагов иерархии по возрастающей сложности интегральных уравнений (см. 2.2), адаптация которых производится автоматически в зависимости от заданной на решение точности, а внутри каждого шага иерархии производится адаптация модели по параметру регуляризации методами робастной статистики. При наличии аномальных выбросов в экспериментальных данных предусмотрен алгоритм их обнаружения и устранения, что существенно повышает точность решения. В предложенном варианте алгоритм адаптации по нелинейности пока не разработан. Функция нелинейности должна быть задана априори в варианте оператора Гаммерштейна. В варианте оператора Ляпунова — Лихтенштейна функция нелинейности не задается, но априори должны быть известны ядра до N -го порядка включительно (вязкоупругая среда N -го порядка нелинейности). Испытания модели на первом шаге иерархии показали более высокую точность ее идентификации по экспериментальным данным по сравнению с аналогичными известными из литературы моделями. Предложенная модель работоспособна и в условиях появления аномальных выбросов на экспериментальных данных, что, по нашему мнению, недоступно для аналогичных известных из литературы решений [25].

В заключение данного раздела отметим, что задача идентификации параметров уравнений состояния вязкоупругих сред представляет собой самостоятельную ветвь нового перспективного научного направления [26–29], которое в настоящее время бурно развивается. Авторы полагают, что в ближайшем будущем следует ожидать создания новых регуляризирующих алгоритмов и пакетов программ, в том числе и с адаптацией по нелинейности.

3. Иерархическая модель для идентификации структуры и микромеханических свойств межфазного слоя полимерных матричных композитов (макромолекулярное приближение).

3.1. Введение. Необходимость учета характеристик межфазных слоев и их микроструктуры при описании макроскопических механических свойств гетерогенных полимерных материалов, смесей разнородных полимеров, наполненных полимеров, композитов и т.п., достаточно давно и широко дискутируется в литературе. Из серии ранних работ в этой области можно отметить, к примеру, публикации [30, 31], в которых обобщены некоторые данные, накопленные в литературе к 70-м годам. Однако отсутствие прямой количественной информации об особенностях конформации макромолекул вблизи границы раздела фаз (например: полимер — твердый наполнитель), а следовательно и о структуре и свойствах таких пограничных образований вызывало принципиальные трудности в объективном разрешении проблемы. Обсуждаемые в литературе результаты были получены большей частью на основании косвенных оценок [32–35].

В связи с бурным развитием методов молекулярной физики (броуновская и молекулярная динамика) и появлением нового поколения вычислительной техники стали доступны прямые количественные исследования структуры и свойств межфазных слоев конкретных полимерных сред в ходе прямого численного моделирования [36–38]. Так, например, используя метод столкновительной молекулярной динамики (СМД) [37, 38], была получена важнейшая информация о структуре межфазных слоев, сформированных в процессе наложения сдвиговых нагрузок. Способ вычисления упругих характеристик межфазного полимерного слоя, состоящего из макромолекул, пришитых одним концом к жесткой поверхности, использующий данные СМД, был описан в [39].

В [37–39] была разработана иерархическая модель для идентификации параметров межфазного слоя гетерогенных полимерных сред, которая включает несколько

уровней структурной иерархии. Приблизительно эти уровни описывают: поведение индивидуальной макромолекулы в некой гипотетической дискретной виртуальной среде; поведение ансамбля взаимодействующих между собой макромолекул, жестко зафиксированных – прикрепленных одним концом (химическими или физическими связями) к твердой поверхности; структуру и свойства ансамбля взаимодействующих между собой макромолекул, "пришитых" к поверхности с различной плотностью посадки; механические свойства межфазного слоя, состоящего из ансамбля "пришитых" к твердой поверхности макромолекул и объединенных в пространственную структурную сетку флуктуационными лабильными физическими узлами или химическими связями. Более высокие иерархии такой модели могут быть достроены путем введения естественных усложнений, обусловленных физико-химическими причинами – изменениями свойств поверхности, комбинации химически разнородных макромолекул, изменения строения макромолекул и т.п.

Рассмотрим далее некоторые этапы и результаты вычислений в рамках указанной выше модели, которые представляются нам полезными для анализа микромеханических характеристик межфазных слоев ПМК.

3.2. Идентификация конформационных особенностей макромолекул гетерогенной полимерной среды методом столкновительной молекулярной динамики (СМД). В методе СМД [38] модель полимерной макромолекулы представляет собой связанное в линейную цепь шарнирными связями равной длины N -е количество одинаковых бусин. (Следует отметить, что с физико-химических позиций бусина – прототип кинетического сегмента макромолекулы, а N – величина, пропорциональная молекулярной массе полимера [2].) Полимерная среда состоит из макромолекул и окружающего их растворителя. В методе СМД среда растворителя моделируется неявно, посредством виртуальных атомов (их плотность, масса, размеры и другие параметры определяются выбранной моделью), которые при столкновении с бусинами макромолекулы имитируют механизм воздействия окружения. В промежутках между столкновениями макромолекула движется в соответствии с уравнениями движения Ньютона; как и в традиционной молекулярной динамике: Результатом столкновения является мгновенное изменение скоростей бусин, которое определяется путем решения столкновительной задачи. Для моделирования процесса деформирования на случайное движение виртуальных атомов накладывается поле скоростей сдвигового потока.

Присутствие наполнителя в полимерной среде моделируется бесконечной твердой непроницаемой стенкой, что оправдано, поскольку размеры частиц наполнителя во много раз превышают размеры макромолекул.

В [37, 38] было проведено сравнительное исследование конформаций макромолекул, жестко скрепленных одним концом с непроницаемой для бусин поверхностью, и свободных цепей, находящихся в полимерной среде вдали от поверхности в зависимости от числа бусин N и величины градиента скорости сдвигового потока. Взаимодействие бусин между собой и с поверхностью задается потенциалом (в работах [37, 38] использовался потенциал Леннарда–Джонса). Вследствие ограниченных рамок настоящей работы рассмотрим далее результаты оценок конформации пришитых к поверхности и свободных макромолекул в зависимости от N и плотности их посадки на поверхности лишь при нулевом значении градиента скорости сдвига.

В табл. 1 приведены расстояния между концами макромолекул R , скрепленных с поверхностью и свободных (обозначено R°), в зависимости от величины N . Значения R и R° даны в единицах линейного размера сегмента макромолекулы. Видно, что стерическое препятствие в виде плоской поверхности изменяет конформацию прикрепленных к ней макромолекул. С учетом погрешности разность $\Delta = R - R^\circ$ монотонно возрастает с увеличением числа бусин (сегментов) макромолекулы N , вплоть до значений $N = 65$. Это согласуется с данными [35]. Отношение R/R° убывает с увеличением N .

Таблица 1

N	15	25	37	50	65	82	101
R^0	5,43	7,67	9,62	11,68	13,96	15,67	17,38
R	6,17	8,64	10,57	12,64	14,77	16,77	19,06

Таблица 2

χ	0,016	0,028	0,062	0,111	0,16	0,25	0,44	0,51
R_n	3,97	4,14	4,69	5,44	6,13	7,23	9,18	9,75

Важными являются также данные о зависимости величины R от плотности проходящихся на единицу поверхности макромолекул χ . Такие данные для сравнительно коротких макромолекул ($N = 15$) приведены в табл. 2.

В проведенных расчетах точки прикрепления цепей к поверхности (положение первых бусин) располагались регулярным образом в узлах квадратной решетки. В расчетной ячейке в форме прямоугольного цилиндра находилась $11 \times 11 = 121$ цепь. Вычислялась средняя проекция вектора расстояния между концами макромолекулы на направление перпендикуляра к поверхности R_n .

Как видно из табл. 2, величина R_n значительно возрастает с увеличением χ , что обусловлено стерическими причинами – прикрепленные к поверхности макромолекулы взаимодействуют между собой, при этом цепи вытягиваются перпендикулярно плоскости поверхности.

Опираясь на информацию, приведенную в табл. 1, 2, могут быть вычислены упругие характеристики слоя, так как это было предложено авторами в работе [39].

3.3. Упругие свойства межфазного слоя. Приближенно модель межфазного слоя ПМК может быть представлена так, как это показано на фиг. 2. Свободные концы закрепленных на поверхности макромолекул присоединены к узлам трехмерной полимерной сетки с известными механическими характеристиками, точки на поверхности – места закрепления концов макромолекул. Толщина межфазного слоя h . Точками также обозначены узлы полимерной сетки, образованной макромолекулами в результате зацеплений, перехлестов и т.п.

Учитывая приведенные выше данные (см. 3.2) о влиянии поверхности на конформацию макромолекул, формально можно принять, что деформация макромолекул вблизи поверхности вызывается некой силой. Такое представление позволяет использовать классическую зависимость напряжения от удлинения геометрически нелинейной теории упругости (теории высокоэластичности) и ввести некий феноменологический коэффициент (фронтфактор), учитывающий влияние поверхности. Идея введения фронтфактора была высказана, например, в [40] и использована в [39] для описания механических свойств межфазного слоя.

3.4. Аналитическое описание упругих свойств межфазного слоя. В соответствии с [39] физические значения компонентов тензора напряжения σ_{ls} межфазного слоя записываются в виде

$$\sigma_{ls} = 2C\lambda_{ln}\lambda_{sn}\alpha_{(n)}^2 - p\delta_{ls} - \sigma_{ls}^0, \quad C = T\kappa R^0{}^2 / (6Na^2h) \quad (3.1)$$

где C, T – абсолютная температура в энергетических единицах, κ – число присоединенных макромолекул к поверхности на единицу площади, $R^0{}^2$ – среднее квадратическое расстояние между концами макромолекулы вдали от поверхности, N – число

сегментов макромолекулы, a – линейный размер сегмента, $\lambda_{in} = \partial x'_i / \partial x_n$, x_n и x'_i – координаты точки межфазного слоя до и после деформации соответственно, $\alpha_{(n)}$ – относительное изменение координат точки межфазного слоя, связанное с влиянием поверхности (представлено в координатных осях фиг. 1), p – гидростатическое (всестороннее) давление, δ_{is} – символ Кронекера, σ_{is}° – компоненты начального поля напряжений в межфазном слое, вызванного влиянием поверхности. Величина κ связана с ранее введенной величиной χ соотношением $\chi = a^2 \kappa$.

В соответствии с принятой формой записи по дважды повторяющимся индексам идет суммирование, а индекс в круглых скобках исключает суммирование. Соотношение (3.1) записано для несжимаемого тела [11], при этом выполняются условия

$$a_2 = a_3 = a_1^{1/2} \quad (3.2)$$

Компоненты тензора напряжений σ_{is}° в системе координат фиг. 2 выражаются следующим образом:

$$\sigma_{11}^{\circ} = 2C(\alpha_1^2 - \alpha_2^2), \quad \sigma_{22}^{\circ} = \sigma_{33}^{\circ} = 0, \quad \sigma_{ik}^{\circ} = 0, \quad \text{если } i \neq k \quad (3.3)$$

Рассмотрим малые деформации межфазного слоя. Для этого запишем λ_{ik} в виде

$$\lambda_{ik} = \delta_{ik} + u_{i,k} \quad (3.4)$$

где $u_{i,k}$ – производная по координате x_k проекции на координатную ось X_i вектора смещения. Представим $u_{i,k}$ в виде симметричной ϵ_{ik} и антисимметричной ω_{ik} частей

$$u_{i,k} = \epsilon_{ik} + \omega_{ik}, \quad \epsilon_{ik} = \frac{1}{2}(u_{i,k} + u_{k,i}), \quad \omega_{ik} = \frac{1}{2}(u_{i,k} - u_{k,i}) \quad (3.5)$$

Из требования равенства нулю полного момента сил, действующих на элементарный объем межфазного слоя, вытекает условие $\omega_{ik} = 0$. Таким образом, соотношение (3.4) переписывается в виде

$$\lambda_{ik} = \delta_{ik} + \epsilon_{ik} \quad (3.6)$$

где по определению ϵ_{ik} – компоненты тензора малых деформаций.

Подставляя (3.6) в (3.1) и отбрасывая члены второго порядка малости по деформациям, получаем

$$\sigma_{is} = 2C(\delta_{in}\delta_{sn}\sigma_{(n)}^2 + \delta_{sn}\alpha_{(n)}^2\epsilon_{in} + \delta_{in}\alpha_{(n)}^2\epsilon_{sn}) - p\delta_{is} - \sigma_{is}^{\circ} \quad (3.7)$$

Рассмотрим одноосное растяжение вдоль координатной оси X_1 . В этом случае из (3.7) находим, что

$$\sigma_{11} = 2C(\alpha_1^2 + \alpha_1^2\epsilon_{11}) - p - \sigma_{11}^{\circ} \quad (3.8)$$

При этом $\sigma_{22} = \sigma_{33} = 0$, что позволяет найти выражение для p из соотношения

$$C(\alpha_2^2 + \alpha_3^2 + 2\alpha_2^2\epsilon_{22} + 2\alpha_3^2\epsilon_{33}) - p = 0 \quad (3.9)$$

Подставляя p из (3.9) в (3.8) и используя условия несжимаемости межфазного слоя

$$\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33} = 0 \quad (3.10)$$

а также соотношения (3.2) и (3.3) получаем

$$\sigma_{11} = 2C(2\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\epsilon_{11} \quad (3.11)$$

Из (3.11) находим упругий модуль межфазного слоя в направлении перпендикулярном плоскости поверхности наполнителя

$$E_1 = 2C(2\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \quad (3.12)$$

Из условия $\sigma_{22} = \sigma_{33} = 0$ также следует, что

$$p = 2C(\alpha_2^2 + 2\alpha_2^2 \varepsilon_{22}) = 2C(\alpha_3^2 + 2\alpha_3^2 \varepsilon_{33}) \quad (3.13)$$

Используя соотношение (3.13) и условие несжимаемости, получим следующие зависимости между деформациями вдоль и поперек осей растяжения, соответственно

$$\varepsilon_{11} = -2\varepsilon_{22} = -2\varepsilon_{33} \quad (3.14)$$

Откуда следует, что соответствующие коэффициенты Пуассона будут равны

$$\nu_{12} = \nu_{13} = 0,5 \quad (3.15)$$

Аналогично, для случая растяжения вдоль координатной оси X_2 , из выражения (3.7) находим

$$\sigma_{22} = 2C(\alpha_2^2 + 2\alpha_2^2 \varepsilon_{22}) - p \quad (3.16)$$

При условии $\sigma_{11} = \sigma_{33} = 0$, из соотношений (3.2), (3.3), (3.10) и (3.16) получаем, что

$$\sigma_{22} = 4C \frac{\alpha_2^2(2\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \varepsilon_{22} \quad (3.17)$$

Откуда определяем упругий модуль межфазного слоя в направлении оси X_2 , параллельной плоскости поверхности наполнителя

$$E_2 = 4C \frac{\alpha_2^2(2\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \quad (3.18)$$

Из условия $\sigma_{11} = \sigma_{33} = 0$ также следует, что

$$p = 2C(\alpha_2^2 + 2\alpha_1^2 \varepsilon_{11}) = 2C(\alpha_3^2 + 2\alpha_3^2 \varepsilon_{22}) \quad (3.19)$$

Используя соотношение (3.2), (3.19) и условие несжимаемости, получим следующие зависимости между деформациями вдоль и поперек осей растяжения, соответственно

$$\varepsilon_{22} = -\frac{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}{\alpha_2^2}, \quad \varepsilon_{11} = -\frac{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}{\alpha_2^2} \varepsilon_{33} \quad (3.20)$$

Откуда следует, что соответствующие коэффициенты Пуассона равны

$$\nu_{21} = \frac{\alpha_2^2}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}, \quad \nu_{23} = \frac{\alpha_1^2}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \quad (3.21)$$

Аналогично, для случая растяжения вдоль координатной оси X_3 , получаем, что упругий модуль межфазного слоя в направлении этой оси будет определяться по формуле

$$E_3 = 4C \frac{\alpha_2^2(2\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \quad (3.22)$$

а коэффициенты Пуассона по формулам

$$\nu_{31} = \frac{\alpha_2^2}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}, \quad \nu_{32} = \frac{\alpha_1^2}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \quad (3.23)$$

Из (3.1) и условий соответствующих чистых сдвиговых нагружений с использованием (3.2) следуют соотношения

$$\sigma_{12} = 2C(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\varepsilon_{12}, \quad \sigma_{13} = 2C(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\varepsilon_{13}, \quad \sigma_{23} = 4C\alpha_2^2\varepsilon_{23} \quad (3.24)$$

Откуда выражения для упругих модулей сдвига записываются как

$$G_{12} = G_{13} = C(\alpha_1^2 + \alpha_2^2), \quad G_{23} = 2C\alpha_2^2 \quad (3.25)$$

Заметим, что из полученных выражений упругие характеристики межфазного слоя могут быть вычислены согласно следующим соотношениям

$$E_2 = E_3, \quad \nu_{12} = \nu_{13}, \quad \nu_{21} = \nu_{31}, \quad \nu_{23} = \nu_{32}$$

$$\frac{\nu_{12}}{E_1} = \frac{\nu_{21}}{E_2}, \quad G_{23} = \frac{E_2}{2(1 + \nu_{23})}, \quad \nu_{12} + \nu_{23} + \nu_{31} = \frac{3}{2} \quad (3.26)$$

Таким образом, в рамках предложенной на фиг. 2 модели межфазный слой должен представлять собой несжимаемую трансверсально-изотропную среду с пятью независимыми константами $E_1, E_2, \nu_{12}, G_{12}$ и G_{23} . Очевидно, что такой межфазный слой нельзя описывать в рамках соотношений изотропной среды.

Введем следующие обозначения, справедливость которых подтверждается соотношениями (3.26)

$$E_{\perp} = E_1, \quad E_{\parallel} = E_2, \quad G_{\perp} = G_{12}, \quad G_{\parallel} = G_{23} \quad (3.27)$$

$$\nu_{\perp, \parallel} = \nu_{12}, \quad \nu_{\parallel, \perp} = \nu_{21}; \quad \nu_{\parallel, \parallel} = \nu_{23}$$

Используя введенные соотношения, связь между деформациями и напряжениями (обобщенный закон Гука) имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{11} = \frac{1}{E_{\perp}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{\perp, \parallel}}{E_{\perp}} \sigma_{22} - \frac{\nu_{\perp, \parallel}}{E_{\perp}} \sigma_{33} \\ \varepsilon_{22} = -\frac{\nu_{\perp, \parallel}}{E_{\perp}} \sigma_{11} + \frac{1}{E_{\parallel}} \sigma_{22} - \frac{\nu_{\parallel, \parallel}}{E_{\parallel}} \sigma_{33} \\ \varepsilon_{33} = -\frac{\nu_{\perp, \parallel}}{E_{\perp}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{\parallel, \parallel}}{E_{\parallel}} \sigma_{22} + \frac{1}{E_{\parallel}} \sigma_{33} \\ \varepsilon_{12} = \frac{1}{2G_{\perp}} \sigma_{12} \\ \varepsilon_{13} = \frac{1}{2G_{\perp}} \sigma_{13} \\ \varepsilon_{23} = \frac{1}{2G_{\parallel}} \sigma_{23} \end{array} \right. \quad (3.28)$$

Полученные выражения могут быть использованы при численных оценках упругих свойств полимерных матричных композитов с учетом характеристик межфазного слоя. При этом, значения α_n входят как параметр, который должен быть определен вне рамок данного подхода.

Далее проанализируем возможную зависимость упругих свойств межфазного слоя от его молекулярных и структурных характеристик.

3.5. Зависимость упругих характеристик межфазного слоя от его молекулярных и структурных параметров. Обозначив α_1 через α и воспользовавшись соотношениями (3.2) и (3.27), перепишем (3.12), (3.15), (3.18) и (3.25) в следующем виде:

$$\begin{aligned} E_{\perp} &= 2C \left(2\alpha^2 + \frac{1}{\alpha} \right), \quad E_{\parallel} = 4C \frac{1 + 2\alpha^3}{\alpha(1 + \alpha^3)} \\ G_{\perp} &= C \left(\alpha^2 + \frac{1}{\alpha} \right), \quad G_{\parallel} = 2C \frac{1}{\alpha}, \quad \nu_{\perp, \parallel} = 0,5 \end{aligned} \quad (3.29)$$

При отсутствии возмущающего действия поверхности $\alpha = 1$ уравнение (3.1) принимает

вид уравнения высокоэластичности для изотропного тела. Подставляя $\alpha = 1$ в соотношения (3.29), получаем выражения для упругих модулей изотропного тела (модуль Юнга и модуль сдвига):

$$E = 6C, \quad G = 2C \quad (3.30)$$

Видно, что модуль Юнга в три раза превышает модуль сдвига, что, как и положено, соответствует несжимаемому изотропному телу (коэффициент Пуассона $\nu = 0,5$).

В соответствии с выше сказанным введем фронтфакторы как отношение упругих характеристик межфазного слоя (3.29) к их значениям при отсутствии возмущающего влияния поверхности

$$\begin{aligned} q_1 = \frac{E_{\perp}}{6C} &= \frac{1}{3} \left(2\alpha^2 + \frac{1}{\alpha} \right), & q_2 = \frac{E_{\parallel}}{6C} &= \frac{2}{3} \frac{(1+2\alpha^3)}{\alpha(1+\alpha^3)} \\ q_3 = \frac{G_{\perp}}{2C} &= \frac{1}{2} \left(\alpha^2 + \frac{1}{\alpha} \right), & q_4 = \frac{G_{\parallel}}{2C} &= \frac{1}{\alpha} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Введение фронтфакторов q_i и величин C и α позволяют анализировать влияние поверхности на степень анизотропии. При таком подходе влияние молекулярных и структурных характеристик, таких как N , h , χ входящих в C стандартным образом можно исследовать независимо.

Сравнительные оценки упругих характеристик межфазного слоя, полученные нами в ходе вычислительных экспериментов с использованием соотношений (3.29)–(3.31) и данных табл 1 и 2, показали что с ростом длины макромолекулы (N) влияние поверхности ослабевает. Упругие характеристики межфазного слоя, образованного макромолекулами с редкой посадкой (не взаимодействующими между собой), отличаются от упругих свойств полимерной матрицы той же природы не более чем на 14% при значении $N < 50$, причем это различие нивелируется при $N > 50$. Ситуация резко меняется в случае плотной посадки макромолекул на поверхности. Так например, упругий модуль E_{\perp} вдоль оси X_1 возрастает в пять раз при изменении плотности посадки от 0,016 до 0,51. Такая же тенденция наблюдается и для модуля сдвига G_{\perp} . Модуль E_{\parallel} меняется примерно в два раза в указанном интервале значений χ , а модуль G_{\parallel} снижается более чем в два раза.

Приведенные выше результаты относятся лишь к зависимости фронтфакторов от N и χ . Однако эти же величины определяют и значения константы C . Что касается зависимости толщины межфазного слоя h от α , N и χ , то эта величина по данным работ [42, 43] для средних значений плотности посадки макромолекул может быть вычислена согласно скейлинговой зависимости

$$h = aN\chi^{1/3} \quad (3.32)$$

Используя (3.32), выразим C через N и χ :

$$C \equiv T\chi^{2/3} / (2a^3 N) \quad (3.33)$$

Соотношение (3.33), а также независимые оценки величины a методом СМД, позволили построить зависимости E_1 , E_2 , G_{12} и G_{23} от N и χ в единицах $2CN$ и $T/2a^3N$ соответственно (см. фиг. 3).

3.6. Некоторые выводы. В заключение этого раздела можно отметить следующее:

1. Межфазный слой, образованный макромолекулами прикрепленными одним концом к активным центрам поверхности наполнителя, является трансверсально-изотропной средой.

2. Анизотропия структуры межфазного слоя объясняется как влиянием поверхности на конформацию макромолекул, так и взаимодействием макромолекул между собой при их плотной посадке.

Таблица 3

№ Модели	Тип матрицы	Тип наполнителя	% содержания наполнителя, объем	Тип ячейки периодичности при моделировании
1	Эпоксидная смола (эпоксифен)	Углеволокно	60	a
2	Эпоксидная смола (эпоксифен)	Стекловолокно (марка ВМП)	80	b
3	Эпоксидная смола (эпоксифен)	Углеволокно, стекловолокно (марка ВМП)	45 15	c

Таблица 4

№	Тип межфазного слоя	E, МПа	ν_i
1	Идеальный слой	3500	0,34
2	75%-й слой	2625	0,34
3	50%-й слой	1750	0,34
4	25%-й слой	875	0,34
5	Плохой слой	10	0,01

Таблица 5

Тип межфазного слоя	E_{11} , [МПа]	E_{22} , [МПа]	E_{33} , [МПа]	G_{12} , [МПа]	ν_{12}
Идеальный слой	15259	15257	57518	5858,8	0,2868
Плохой слой	11139	11146	57289	4299,2	0,3216

3. При низкой плотности посадки макромолекул на твердой поверхности анизотропия невелика. При высокой плотности посадки макромолекул наблюдается сильная анизотропия структуры, что существенно сказывается на упругих характеристиках межфазного слоя ПМК.

4. Иерархический подход в задачах численного моделирования макромеханических свойств гетерогенных микронесоднородных полимерных сред и композитов (приближение, построенное на объектно-ориентированной версии МКЭ). 4.1. *Постановка задачи.* При моделировании макромеханического поведения микронесоднородной среды достаточно распространенным является подход, основанный на рассмотрении однородной эквивалентной сплошной среды, элементарные объемы которой сохраняют особенности исходной микронесоднородной среды, связывающий поля напряжений и (или) деформаций, усредненные по представительным (т.е. содержащим все признаки микроструктуры исходного материала) объемам (элементам). Естественно при этом использовать численное моделирование на ячейках периодичности или представительных элементах структуры с последующим осреднением на макроуровне.

В [44] был предложен подход, позволяющий моделировать напряженно-деформированное поведение и предсказывать механические характеристики структурно-сложных и неоднородных полимерных сред и композитов с учетом структурной иерархии в микро-, мезо- и макромасштабе, используя, в частности, оригинальную объектно-ориентированную версию метода конечных элементов (МКЭ) [45].

Как известно, программы, построенные на методе конечных элементов, характеризуются большим количеством вычислений. Неудобства и сложности программирования МКЭ с использованием традиционных (не объектно-ориентированных) язы-

ков связано с недостаточной надежностью программного кода при больших объемах исходного текста. Такие программы очень трудно модифицировать и пополнять моделями, а также адаптировать к другим условиям (средам программирования, вычислительным системам). Избежать указанных затруднений позволяет объектно-ориентированный подход (ООП).

В качестве примера использования ООП можно указать оригинальную объектно-ориентированную версию МКЭ, реализованную в программном комплексе UNIVERS-4.0 [44]. Он разработан для анализа напряженно-деформированного состояния, устойчивости и прочности неоднородных сред, композитных материалов, грунтов и других гетерогенных материалов, а также для определения эффективных характеристик механических свойств. Библиотека конечных элементов включает одномерные, двумерные и трехмерные изопараметрические элементы. Для конечных элементов, моделирующих неоднородную среду предусмотрен ряд математических моделей, позволяющих учитывать особенности как линейной, так и нелинейного поведения таких сред при деформировании, а именно, модели изотропного, ортотропного поведения линейного и нелинейного упругого материалов, инкрементальная модель деформационного типа, модели упругопластического течения (Треска, Фон-Мизеса, Боткина и др.), модели вязкоупругого тела (Максвелла, Больцмана – Вольтерра и др.). Существенной особенностью программы является возможность одновременного использования нескольких типов различных моделей или их сочетания для описания свойств неоднородной среды.

4.2. Вычислительные эксперименты на ячейках периодичности структуры.

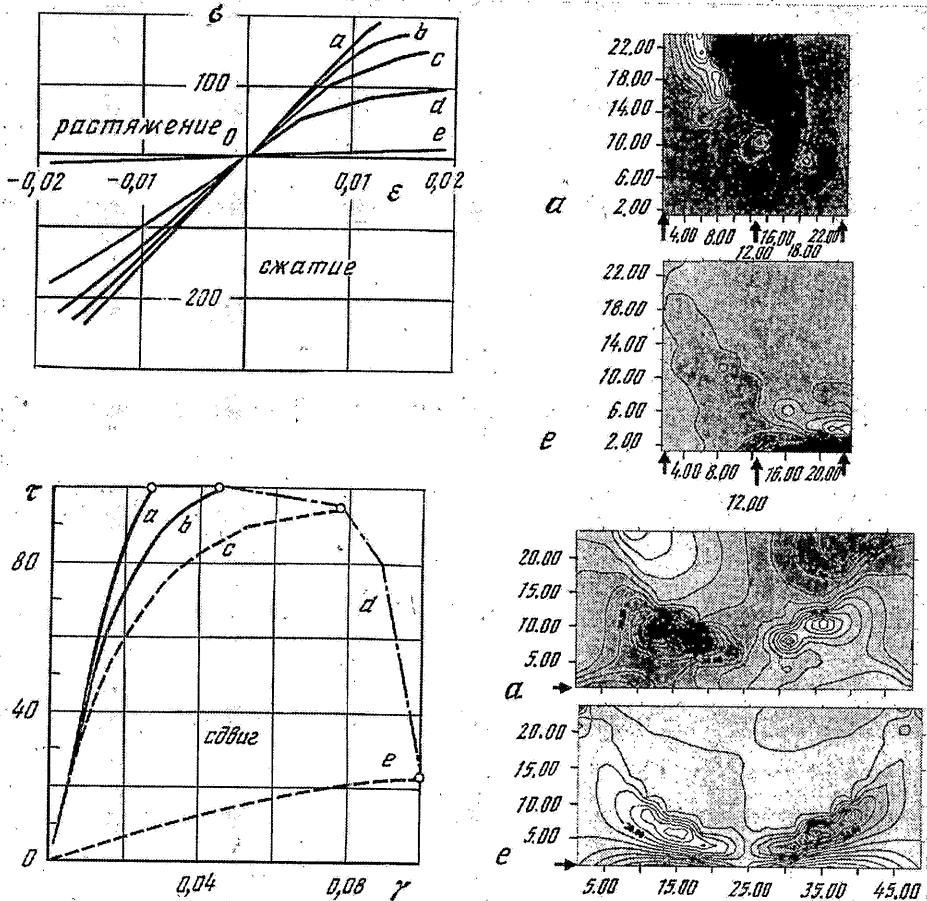
Специфика внутренней структуры ПМК вызывает необходимость использования нескольких типов различных моделей, например упругую для моделирования свойств наполнителей, упругопластическую для матриц и межфазного слоя с критерием прочности F по Боткину (этот критерий известен также в литературе как критерий Друккера–Прагера): $F = \alpha I_1 + \sqrt{J_2} - k = 0$, где I_1 – первый инвариант тензора напряжений; J_2 – второй инвариант девиатора напряжений; α, k – прочностные характеристики. Выбор этого критерия предпочтителен тем, что его частными случаями являются условия пластического течения Треска и Фон-Мизеса, а также, при условии плоской деформации, критерии разрушения Кулона и Мора – Кулона. (Описание можно проводить и в вязкоупругом приближении.)

В [46] рассматривали несколько вариантов ячеек периодичности структуры (фиг. 4): а) ячейку, моделирующую среды с невысокой степенью наполнения (не более ≈ 60 объем. %); б) ячейку, моделирующую среды с высокой степенью наполнения (порядка 80 объем. %); в) ячейку, моделирующую высоконаполненные разнородными наполнителями (гибридные наполнения) среды (1 – матрица, 2,4 – наполнитель, 3,5 – межфазные слои).

Рассмотрим в качестве примера некоторые результаты вычислительных экспериментов на ячейках периодичности структуры, полученные для гетерогенной модельной среды – эпоксиполимер (эпоксифен), наполненный углеволокном и стекловолокном [46]. Физико-механические характеристики отдельных компонентов такого материала описаны в литературе [47, 48] и таблицах 3 и 4.

В описываемых вычислительных экспериментах параметры межфазных слоев задавались согласно рекомендациям работ [4, 30, 31]. Толщина межфазного слоя принимались порядка 10% от диаметра частицы или волокна наполнителя, механические характеристики в пределах межфазного слоя не менялись, а их исходные максимальные значения выбирали согласно [48]. Модули упругости межфазного слоя изменялись в широких пределах, что моделировало различную величину адгезии полимерной матрицы к поверхности наполнителя (см. табл. 4).

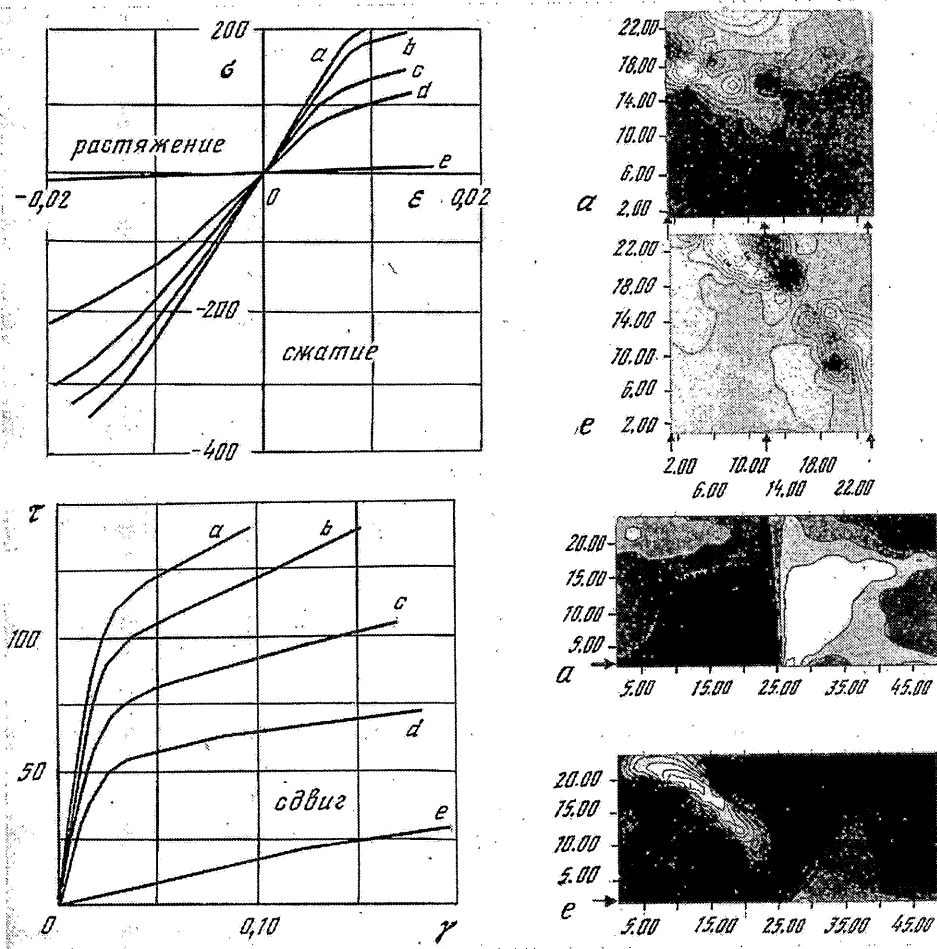
В этой части работы преднамеренно выбиралась для обсуждения достаточно грубая и упрощенная схема структуры межфазных слоев; чтобы приближенно оценить влияние, которое могут оказывать их свойства на макромеханическое поведение описываемой модельной среды.



Фиг. 5

На фиг. 5, 6 в качестве примера представлены данные, полученные с помощью комплекса UNIVERS, для случаев растяжения-сжатия и сдвига для моделей 1 и 3 (см. табл. 3), соответственно. Кривые а-д соответственно: идеальный, 75%, 50%, 25% и плохой межфазные слои. Здесь же приведены поля напряжений, возникающих в материалах с различным межфазным слоем при заданных нагрузках (сдвиг, сжатие), стрелкой указано направление действия нагрузки. Поля напряжений были сняты в точках предшествующих разрушению ячейки.

Не обсуждая количественные параметры (они достаточно хорошо прослеживаются на приведенных диаграммах напряжение-деформация ($\sigma(\epsilon)$ [МПа] или $\tau(\gamma)$ [МПа])), даже на качественном уровне видно, что именно характеристики межфазного слоя определяют картину микромеханического поведения материала в относительно широком диапазоне величин деформаций. В случае плохого контакта между компонентами такой гетерогенной среды (межфазный слой с невысокими упругими характеристиками) наблюдается резкое изменение микромеханического поведения и свойств такого материала при деформировании. Предельно допустимые, близкие к разрушающим, величины напряжений (крайние точки на кривых $\sigma(\epsilon)$ и $\tau(\gamma)$) снижаются в десятки раз, причем особенно резко при растяжении (анализируется



Фиг. 6

картина деформирования в плоскости, перпендикулярной сечению микроволокон). Видно, что плохое "качество" межфазного слоя не позволяет использовать прочностные преимущества высокомодульного наполнителя, например микроволокон, так как, судя по картине распределения напряжений, в этом случае концентрация опасных, близких к предельным разрушающим, напряжений возникает именно в межфазных слоях (сравни, например, случаи *a* и *d* на фиг. 5, 6). Вследствие этого перераспределение напряжений при нагружении от низко модульной матрицы к высоко модульному наполнителю не происходит, и материал разрушается при относительно невысоких нагрузках.

Сопоставление случаев для растяжения – сжатия и сдвига, которые различаются количественно, не меняет качественную оценку ситуации в целом. Сравнение зависимостей $\sigma(\epsilon)$ и $\tau(\gamma)$, полученных для различных моделей показывает, что увеличение прочности угле- и стекловолокна в несколько раз не вызывает адекватного увеличения механических характеристик композита. Это можно объяснить тем, что прочностные особенности индивидуальных компонентов наполнителя могут реализоваться в материале в полной мере лишь в случае благоприятных контактных условий на их границах, т.е. при формировании межфазного слоя определенного "качества".

В [46] было также установлено, что при "хорошей" адгезии между наполнителем и матрицей увеличение концентрации наполнителя приводит к росту механических характеристик материала. Это и понятно, т.к. в этих условиях напряжения в материале перераспределяются от матрицы к наполнителю, и материал "работает" как усиленный композит. Однако, по мере ухудшения "качества" межфазного слоя эти преимущества теряются и прочность материала уже в меньшей степени зависит от концентрации наполнителя. В случае "плохого" слоя концентрация наполнителя не играет существенной роли.

4.3. Эффективные деформационные характеристики. Из литературы известны различные подходы, предлагаемые для расчета эффективных характеристик микро-неоднородных сред (см., например, [49–55])

В [46] авторы применили подход, основанный на использовании метода асимптотического усреднения дифференциальных уравнений в частных производных с быстроосциллирующими коэффициентами [56]. Наряду с цитированными выше работами он представляется как достаточно надежный и удобный в реализации.

Для определения эффективных деформационных характеристик микро-неоднородной среды решались следующие задачи на ячейках периодичности структуры

$$(c_{i\beta\gamma} u_{jkl,\gamma})_{,\beta} + c_{i\beta kl,\beta} = 0, \quad \langle u_{jkl,\gamma} \rangle = 0, \quad \langle u_{jkl} \rangle = 0 \quad (4.1)$$

где $c_{i\beta\gamma}$ – компоненты тензора жесткости ячейки периодичности структуры, рассматриваемые как функции координат $(i, j, k, l, \beta, \gamma = 1, 2, 3)$. При этом использовали общепринятые правила: суммирование проводится по повторяющимся индексам, индексы после запятой означают производную по соответствующей координате, а $\langle * \rangle$ означает операцию усреднения по объему ячейки периодичности V структуры, а именно:

$$\langle * \rangle = \frac{1}{V} \int_V (*) dv$$

Заметим также, что компоненты тензора жесткости для изотропных тел выражаются через материальные характеристики (модуль Юнга E и коэффициент Пуассона ν) следующим образом:

$$c_{ijkl} = 0,5[E/(1+\nu)][2\nu\delta_{ij}\delta_{kl}/(1-2\nu) + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}] \quad (4.2)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера ($\delta_{ij} = 1$ при $i = j$; $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$).

Задачи (4.1) легко сводятся к задачам теории упругости на ячейке с соответствующими граничными условиями и условиями на контактах раздела фаз композитного материала [54]. Используя условия симметрии на ячейке периодичности можно избавиться от задания контактных условий, что существенно упрощает решение задач (4.1) [53]. Решая эти задачи, находим локальные функции u_{jkl} . Затем, по локальным функциям вычисляется так называемый тензор жесткости нулевого приближения, компоненты которого выражаются следующим образом:

$$\tilde{c}_{ijkl} = c_{ijkl} + c_{ijmn} u_{mkl,n} \quad (4.3)$$

Определение эффективных характеристик деформационных свойств сводится к усреднению по ячейке периодичности структуры тензора жесткости нулевого приближения (4.3). Таким образом, эффективные характеристики определяются следующим образом:

$$\hat{c}_{ijkl} = \langle \tilde{c}_{ijkl} \rangle = \langle c_{ijkl} \rangle + \langle c_{ijmn} u_{mkl,n} \rangle \quad (4.4)$$

Описанный выше метод был использован для расчета эффективных деформационных характеристик материала, результаты расчетов для модели 1 представлены в табл. 5 для идеального – плохого слоев. Видно, что особенности микромеханического поведения, описанные в ходе вычислительных экспериментов на ячейках периодичности структуры, существенно влияют и на макромеханические свойства композита, модули упругости которого при сжатии и сдвиге существенно различаются в зависимости от "качества" межфазного слоя.

Необходимо еще раз подчеркнуть, что в обсуждаемом случае характеристики межфазного слоя задавались из модельных соображений. Однако, как показывают результаты, приведенные в п. 3, структурные параметры межфазного слоя могут варьироваться в очень широких пределах, а модули E и G при этом будут изменяться в сотни раз. Нетрудно видеть, что именно здесь заключены огромные возможности для прогнозирования технологии получения высокопрочных полимерных матричных композитов.

5. Заключение. Разработка многоуровневой (иерархической) стратегии, позволяющей на базе компьютерного моделирования прогнозировать необходимую оптимальную структуру гетерогенной неметаллической среды с учетом параметров межфазного взаимодействия на границах компонентов открывает пути компьютерного конструирования перспективных композиционных материалов с требуемыми характеристиками. Очевидно, что в рамках одной, даже значительной по объему работы невозможно остановиться на многих важных деталях рассмотренных подходов и моделей. Большинство из них базируется на современных достижениях математики, физики, вычислительной механики и других областей знаний и их дальнейшее развитие потребует привлечения широкого круга специалистов. Следует отметить, что компьютерные технологии, к которым, в частности, можно отнести и проблему компьютерного конструирования новых материалов, согласно аналитическим прогнозам ученых будут доминировать в XXI веке. В этой связи построение иерархических моделей, способных описывать механические свойства и поведение гетерогенных сред, а также прогнозировать деформационно-прочностные характеристики материалов нового поколения является весьма перспективной фундаментальной научной задачей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физика твердого тела. Энциклопедический словарь. Т. 1. / Под ред. В.Г. Барьяхтар. Киев: Наук. думка, 1996. 656 с.
2. Yanovsky Yu.G. Polymer Rheology: Theory and Practice. Amsterdam: Elsevier, 1993. 308 p.
3. Привалко В.П., Новиков В.В., Яновский Ю.Г. Основы теплофизики и реофизики полимерных материалов. Киев: Наук. думка, 1991. 232 с.
4. Lunamov Ю.С. Межфазные явления в полимерах. Киев: Наук. думка, 1980. 259 с.
5. Theocaris P.S. The Mesophase Concept in Composites. Berlin: Acad. Verlag, 1987. 292 p.
6. Hashin Z. Composite materials with interphase: thermoelastic and inelastic effects // Inelastic Deformation of Composite Materials // Ed. G. Dvorak. N.Y. et al.: Springer, 1991. P. 3–34.
7. Cardon A.H. From micro- to macroproperties of polymer based composite systems by integration of the characteristics of the interphase regions // Composite Structures. 1993. V. 24, № 3. P. 213–217.
8. Yanovsky Yu.G. Some Numerical approaches to describing of physico-mechanical properties of rubber composites // Proc. Intern. Rubber-94 Conf. Moscow, 1994. V. 1. P. 167–172.
9. Joseph D.D. Fluid Dynamics of Viscoelastic Fluids. N.Y. et al.: Springer, 1990. 755 p.
10. Пышнограй Г.В., Покровский В.Н., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н., Образцов И.Ф. Определяющее уравнение нелинейных вязкоупругих (полимерных) сред в нулевом приближении по параметрам молекулярной теории и следствия для сдвига и растяжения // Докл. РАН. 1994. Т. 339. № 5. С. 612–615.
11. Yanovsky Yu.G., Pokrovsky V.N., Altukhov Yu.A., Pyshnograй G.V. Properties of constitutive equations for undiluted linear polymers based on the molecular theory // Intern. J. Polymeric Mater. 1997. V. 36. № 1. P. 75–117.

12. Papanastasiou A.C., Soriven L.E., Macosko C.W. An integral constitutive equation for mixed flows: viscoelastic characterization // *J. Rheol.* 1983. V. 27. № 4. P. 387–410.
13. Park H.J., Mitsoulis E.J. Numerical simulation of circular entry flows of fluid M1 using an integral constitutive equation // *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics.* 1992. V. 42. № 3. P. 301–314.
14. Басистов Ю.А., Яновский Ю.Г., Образцов И.Ф. Модифицированный метод регуляризации вычисления релаксационных функций вязкоупругих сред // *Механика композит. материалов.* 1994. Т. 30. № 4. С. 482–493.
15. Yanovsky Yu.G., Basistov Yu.A. A new method of calculation of polymer media relaxation functions from rheological experimental data // *Polymer Testing.* 1995. V. 14. № 4. P. 315–328.
16. Yanovsky Yu.G., Basistov Yu.A., Siginer D.A. Linear inverse problems in viscoelastic continua and a minimax method for Fredholm equations of the first kind // *Intern. J. Engng Sci.* 1996. V. 34. № 11. P. 1221–1245.
17. Hadamard J. Le problème de Cauchy et les equations aux dérivées partielles lineaires hyperboliques. Paris: Hermann, 1932. 542 p.
18. Басистов Ю.А., Яновский Ю.Г. Иерархически-адаптивная модель для идентификации уравнений состояния вязкоупругих сред // *Механика композ. материалов и конструкций.* 1996. Т. 2. № 3–4. С. 24–57.
19. Тихонов А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач // *Докл. АН СССР.* 1963. Т. 153. № 1. С. 49–52.
20. Тихонов А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации. Докл. АН СССР. 1963. Т. 151. № 3. С. 501–504.
21. Арсенин В.Я., Иванов В.В. Об оптимальной регуляризации // *Докл. АН СССР.* 1968. Т. 182. № 1. С. 9–12.
22. Гончарский А.В., Леонов А.С., Ягола А.Г. Обобщенный принцип невязки // *Ж. вычисл. математики и мат. физики.* 1973. Т. 13. № 2. С. 294–302.
23. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974. 223 с.
24. Nathan R. Image processing for electron microscopy: 1. Enhancement procedures // *Advances in Optical and Electro-Optical Microscopy.* L., N.Y.: Acad. Press, 1971. P. 85–125.
25. Honerkamp J., Weese J. Tikhonovs regularization method for ill-posed-problems. A comparison of different methods for the determination of the regularization parameter. *Continuum Mech. Thermodyn.* 1990. V. 2. № 1. P. 17–30.
26. *Advances in Structured and Heterogeneous Continua* / Eds. D. Siginer and Yu. Yanovsky. N.Y.: Allerton Press, 1994. 575 p.
27. Образцов И.Ф., Басистов Ю.А., Яновский Ю.Г. Применение метода минимакса для идентификации уравнения состояния вязкоупругих сред // *Докл. РАН.* 1994. Т. 335. № 4. С. 455–458.
28. Yanovsky Yu.G., Basistov Yu.A. Application of minimax method for calculation of viscoelastic material functions and relaxation spectra of polymer melts and solutions // *Intern. J. Polymeric Mater.* 1996. V. 33. № 1/2. P. 235–256.
29. Yanovsky Yu.G., Obratsov I.F. Computational modeling of structure and mechanical properties of polymer composites // *Proc. 4th World Congr. on Computational Mechanics – New Trends and Application* / Ed. S. Idelson et al. / Intern. Center on Numerical Methods in Engineering, Barcelona. 1998. Pt. 3. Sect. 5. 13 p.
30. Липатов Ю.С., Сергеева Л.М. Адсорбция полимеров. Киев: Наук. думка, 1972. 195 с.
31. Структура и свойства поверхностных слоев полимеров / Под ред. Ю.С. Липатова. Киев: Наук. думка, 1972. 295 с.
32. De Gennes P.G. *Scaling Concepts in Polymer Physics.* Ithaca: Cornell Univ. Press, 1979. 324 с.
33. Халатур П.Г. Структура полимерных монослоев // *Коллоид. ж.* 1982. Т. 44. № 2. С. 299–304.
34. Неннер Д. Стабилизация коллоидных дисперсий полимеров. М.: Мир, 1986. 487 с.
35. Халатур П.Г. Структура полимерных монослоев. 3. Машинные эксперименты с моделями ориентированных поверхностных монослоев, образованных гибкими полимерными цепями // *Коллоид. ж.* 1983. Т. 55. № 6. С. 1171–1176.
36. Халатур П.Г. К теории стабилизации дисперсных систем макромолекулами // *Коллоид. ж.* 1984. Т. 56. № 3. С. 517–521.

37. Лемак А.С., Балабаев Н.К., Карнет Ю.Н., Яновский Ю.Г. Молекулярная динамика полимерной цепи вблизи твердой поверхности // Механика композ. материалов и конструкций. 1995. Т. 1. № 2. С. 152–161.
38. Lemak A.S., Balabaev N.K., Karnet Yu.N., Yanovsky Yu.G. The effect of a solid wall on polymer chain behavior under shear flow // J. Chem. Physics. 1998. V. 108. № 2. P. 797–806.
39. Заевский В.Э., Яновский Ю.Г. Механические характеристики слоя макромолекул вблизи поверхности наполнителя // Механика композ. материалов и конструкций. 1997. Т. 3. № 1. С. 105–112.
40. Гросберг А.Ю., Хохлово А.П. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989. С. 342.
41. Заевский В.Э., Яновский Ю.Г., Власов А.Н., Балабаев Н.К., Карнет Ю.Н. Структура и микромеханические свойства межфазных слоев полимерных матричных композитов // Механика композ. материалов и конструкций. 1999. Т. 5. № 2. С. 109–122.
42. Khalatur P.G. Computer simulation of thin polymer layers // Macromol. Chem. Macromol. Symp. 1991. V. 44. P. 23–32.
43. Grest G.S. Grafted polymer brushes in polymeric matrices // J. Chem. Phys. 1996. V. 105. № 13. P. 5532–5541.
44. Власов А.Н., Потапов В.Н., Яновский Ю.Г. Объектно-ориентированное программирование метода конечных элементов для задач механики неоднородных сред. Ч. 1. Идеология объектно-ориентированного подхода и его приложение к методу конечных элементов // Механика композ. материалов и конструкций. 1996. Т. 2. № 1. С. 94–109.
45. Zimmerman T., Dubois-Pelerin Y., Vomme P. Object-oriented finite element programming: 1. Governing principles // Computer Methods Appl. Mech. Engng. 1992. V. 98. № 2. P. 291–303.
46. Яновский Ю.Г., Власов А.Н., Воронин А.В. Моделирование механического поведения и свойств микрон неоднородных полимерных сред и композитов с учетом характеристик межфазных слоев // Механика композ. материалов и конструкций. 1996. Т. 2. № 3–4. С. 125–143.
47. Композиционные материалы / Под ред. В.В. Васильева и Ю.В. Тарнопольского, М.: Машиностроение, 1990. 512 с.
48. Новиков В.У. Полимерные материалы для строительства. М.: Высш. шк., 1995. 448 с.
49. Шермергор Т.Д. Теория упругости микрон неоднородных сред. М.: Наука, 1977. 399 с.
50. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. М.: Мир, 1982. 334 с.
51. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 623 с.
52. Mal A.K., Chatterjee A.K. The elastic moduli a fiber-reinforced composite // Trans. ASME. J. Appl. Mech. 1977. V. 44. № 1. P. 61–67.
53. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит., 1963. 247 с.
54. Соколкин Ю.В., Ташкинов А.А. Механика деформирования и разрушения структурно неоднородных тел. М.: Наука, 1984. 115 с.
55. Zimmerman R.W. Elastic moduli of solid with spherical pores: new self-consistent method // J. Rock. Mech. Min. Sci. Geomech. Abstr. 1984. V. 21. № 6. P. 339–343.
56. Бахвалов Н.С., Папасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984. 352 с.

Москва

Поступила в редакцию
12.02.1999