электронный журнал
МОЛОДЕЖНЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК
Издатель Общероссийская общественная организация "Академия инженерных наук им. А.М. Прохорова"
ISSN 2307-0609

03, сентябрь 2018

УДК 533.6.011.6

Математическое моделирование прямой и обратной задач прогнозирования разрушения полимеров и композиционных материалов на их основе

Жуган В.А., *бакалавр*
Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Вычислительная математика и математическая физика»
vishnia95@bk.ru

Научный руководитель: Валишин А.А., д-р физ.-мат. наук, профессор
Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Вычислительная математика и математическая физика»
enf@mail.ru

Аннотация: Решена прямая и обратная задача прогнозирования прочности и долговечности полимеров и композитов на их основе. Прямая задача: определение прочности и долговечности при переменном температурно-силовом режиме испытания по известным параметрам статической температурно-временной зависимости прочности (ТВЗП). Обратная задача: определение физических параметров статической ТВЗП по результатам испытаний в динамическом температурно-силовом режиме.

Ключевые слова: Температурно-временная зависимость прочности (ТВЗП), дисперсия воспроизводимости, остаточная дисперсия, регрессия, фактор, предиктор, отклик.

Введение

Для различных конструкционных, строительных и потребительских полимерных и композиционных материалов характерно явление температурно-временной зависимости прочности (ТВЗП), когда в статических условиях испытания или эксплуатации (постоянная температура и внешняя механическая нагрузка) время до разрушения определяется величиной нагрузки и температурой [1, 2].

На сегодняшний день экспериментально открыты и изучены четыре модели ТВЗП.

Модель Журкова: $$\tau = \tau_0 \exp\left[\frac{U_0 - \gamma\sigma}{kT}\right],$$

Модель Регеля-Ратнера: $\tau = \tau_0 \exp\left[(U_0 - \gamma\sigma)\left(\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_n} \right) \right]$,

Модель Ратнера: $\tau = \tau_0 \exp\left[\frac{U_0}{kT} - \alpha\sigma \right]$,

Модель Бартенева: $\tau = \tau_0 \sigma^{-m} \exp\left[\frac{U_0}{kT} \right]$,

которые содержат важные физические параметры, определяющие механизм разрушения. Знание этих параметров позволяет определить работоспособность материалов и проектировать изделия и конструкции из них [3].

* * *

Статические испытания материала на прочность требуют больших затрат, прежде всего, времени и других ресурсов. Кроме того, на практике изделия и конструкции из полимеров и композитов эксплуатируются, как правило, в динамических условиях переменных механических нагрузок и температуры [4]. Поэтому лабораторные и стендовые испытания материалов проводятся в кратковременном режиме на специальных установках.

Здесь возникают две проблемы:

1) Если на основании предварительных исследований принята какая-либо модель статической ТВЗП, то требуется рассчитать характеристики прочности и долговечности данного материала в требуемых температурно-силовых режимах, близких к эксплуатационным, не прибегая к реальным испытаниям. Это содержание прямой задачи прогнозирования [1, 2].

2) Известны результаты статических или динамических испытаний исследуемого материала для одного или различных температурно-силовых режимов. Требуется построить оптимальную модель ТВЗП и оценить её физические характеристики для последующего использования инженерами и проектировщиками. Если экспериментальные результаты не согласуются ни с одной из известных моделей, то построить новую модель. Это содержание обратной задачи прогнозирования [1, 2].

Тема статьи посвящена решению прямой и обратной проблемам прогнозирования прочности.

Сформулировано две задачи прогнозирования прочности:

1) Прямая задача.

Известны физические характеристики статической ТВЗП: τ_0, U_0, γ, T_n.

Требуется определить: характеристики долговечности t_p и прочности σ_p в заданном динамическом температурно-силовом режиме эксплуатации.

2) Обратная задача.

Известны динамические характеристики прочности в заданном температурно-силовом режиме: t_p, σ_p.

Необходимо найти оптимальную статистическую модель статической ТВЗП и ее физические параметры.

Прямая задача была решена на основе сформулированного обобщенного принципа суперпозиции внутренних повреждений [1].

$$\frac{t_p}{\tau(\sigma_0, T_0)} - \int_0^{t_p} \left(\frac{\partial \tau}{\partial \sigma} d\sigma(t) + \frac{\partial \tau}{\partial T} dT(t) \right) \cdot \frac{t_p - t}{\tau^2} = 1,$$

где t_p – время до разрушения в динамическом режиме, $\tau(\sigma_0, T_0)$ – статическая долговечность при начальных значения напряжения и температуры.

Например, для наиболее простого режима динамических испытаний с постоянной скоростью растяжения при постоянной температуре получены следующие результаты. Модель статической ТВЗП была выбрана в виде Регеля-Ратнера [5, 6].

$$\begin{cases} t_p = \left[(\sigma_k - \sigma_0) + \dfrac{\ln \tau_0 \gamma (y_0 - y_n)}{\gamma (y_0 - y_n)} \right] \dot{\sigma}^{-1} + \gamma^{-1} (y_0 - y_n)^{-1} \dfrac{\ln \dot{\sigma}}{\dot{\sigma}} \\ \sigma_k = \dfrac{U_0}{\gamma} \\ y_0 = \dfrac{1}{kT_0}, \; y_n = \dfrac{1}{kT_n} \end{cases}$$

Были выполнены расчеты для различных других режимов динамических испытаний с использованием всех моделей статической ТВЗП.

Обратная задача решена на основе многомерного регрессионного анализа. Выполнено компьютерное моделирование динамических испытаний в широком диапазоне скоростей растяжения и температур для всех моделей ТВЗП. При этом искусственно варьировалось прецизионность экспериментальных результатов. Сформулированы требования к постановке динамического эксперимента для получения надежных результатов. Установлено, что в общем случае, варьируя только одну скорость напряжения, нельзя по изотермическим динамическим испытаниям однозначно оценить физические

параметры статической ТВЗП. Необходимо варьировать ещё один фактор, прежде всего температуру.

Дальнейшая работа была связана с компьютерным экспериментом.

В качестве тестового примера был выбран полимерный материал полиметилметакрилат (ПММА). Из имеющихся в литературе экспериментальных данных известно, что статическая ТВЗП ПММА описывается формулой Регеля-Ратнера [5,7].

В рамках прямой задачи по формулам для динамической долговечности, полученным при решении уравнения суперпозиции повреждений рассчитывалась динамическая долговечность ПММА. При этом варьировались в широком диапазоне параметры испытаний на разрывной машине: скорость изменения напряжения и температура.

При решении обратной задачи моделировались на компъютере экспериментальные результаты динамических испытаний. По формуле для динамической долговечности в режиме испытаний на разрывной машине, полученной при решении прямой задачи, рассчитывалась динамическая долговечность ПММА при различных скоростях изменения напряжения и различных температурах. Затем к полученым значениям динамической долговечности прибавлялась случайная ошибка различного уровня. Для этого с помощью генератора случайных чисел получались реализации нормально распределённой случайной величины с нулевым математическим ожиданием и с заданым средне квадратичным отклонением. Среднеквадратичное отклонение варьировалось от 0 до 10 сек. Тем самым мы получили квази-реальные экспериментальные данные динамических испытаний.

Для этих данных решается обратная задача. С помощью методов математической статистики, и прежде всего многомерного регрессионного анализа, выбирается модель, наилучшим образом соответствующая исходным экспериментальным данным и определяются её физические параметры.

Таблица 1

Оценки физических параметров для тестового материала ПММА

$\gamma = 3.7966258903517947 \times 10^{-27}$
$T_p = 667.758$
$U_0 = 3.617997714130408 \times 10^{-19}$
$\lg \tau_0 = -12.01$

Таблица 2

Погрешность восстановления параметров ТВЗП

Точные значения	Ошибка восстановления
$\gamma_T := 3.80 \cdot 10^{-27}$	$\varepsilon\gamma := \frac{(\gamma - \gamma_T) \cdot 100}{\gamma_T} = 0.089$
$T_{pT} := 666.7$	$\varepsilon T_p := \frac{(T_{pT} - \mathrm{T}_p) \cdot 100}{T_{pT}} = 0.159$
$U_{0T} := 3.62 \cdot 10^{-19}$	$\varepsilon U_0 := \frac{(\mathrm{U}_0 - U_{0T}) \cdot 100}{U_{0T}} = 0.055$
$\lg \tau_{0T} := -12$	$\varepsilon \lg \tau_0 := \frac{(\lg \tau_0 - \lg \tau_{0T}) \cdot 100}{\lg \tau_{0T}} = 0.01$

Выбор оптимальной модели статической ТВЗП

Конечная задача состоит в формулировке критерия, с помощью которого оценивается адекватность исходным экспериментальным данным той или иной модели.

Были предложены следующие критерии

1. Рассчитывалась остаточная сумма квадратов для каждой постулированной модели. Величина остаточной суммы квадратов определяется двумя факторами :

- случайными погрешностями воспроизводимости при повторных измнрениях динамической долговечности.

- неадекватностью постулированной модели статической ТВЗП.

Если постулированная модель ТВЗП на самом деле неадекватна, то второй фактор вносит определяющий вклад в величину остаточной суммы квадратов. Если же постулированная модель выбрана правильно, то есть адекватна экспериментальным данным, то роль второго фактора минимальна, и величина остаточной суммы квадратов отражает только чистую ошибку воспроизводимости. Поэтому из различных обследованных моделей выбиралась та, для которой остаточная сумма квадратов минимальна.

2. Рассчитываются выборочная дисперсия воспроизводимости повторных измерений динамической долговечности.

$$S_1^{\,2} = \frac{Q_1}{\sum_{j=1}^{N} p_j - N} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \sum_{i=1}^{p_j} (\mathrm{w}_{ij} - \bar{\mathrm{w}}_j^{\,2})}{\sum_{j=1}^{N} p_j - N},$$

здесь $Q_1 = \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{p_j}(\mathrm{w}_{ij} - \overline{\mathrm{w}}_j{}^2)$ - сумма квадратов отклонений отдельных измерений от их среднего значения в каждой эксперементальной точке, которая обусловленная только ошибками воспроизводимости.

И остаточная выборочная дисперсия

$$S_r{}^2 = \frac{Q_2}{N-q} = \frac{\sum_{j=1}^{N} p_j(\overline{\mathrm{w}}_j - \hat{\mathrm{w}}_j)^2}{N-q},$$

здесь q - число коэффициентов регрессии, $Q_2 = \sum_{j=1}^{N} p_j(\overline{\mathrm{w}}_j - \hat{\mathrm{w}}_j)^2$ - сумма квадратов отклонений относительно предсказанных по модели значений отклика, которая обусловленна неадекватностью модели, она называется остаточной суммой квадратов.

Сравнение выборочных дисперсий S_1^2 и S_r^2 осуществляется с помощью критерия Фишера следующим образом. Составляется отношение:

$$F = \frac{S_r^2}{S_1^2} \tag{1}$$

Статистика F имеет распределение Фишера со степенями свободы $V_r = N - q,$ $V_1 = \sum_{j=1}^{N} p_j - N$. Далее нужно задаться уровнем значимости γ и для этих чисел степеней свободы по таблицам распределения Фишера найти квантиль $F_T = F(1-\gamma, V_r, V_1)$. Затем вычисленное по формуле (1) наблюдаемое (то есть фактическое) значение статистики F сравнить с табличным F_T. Если $F < F_T$, то различие дисперсий незначимо и с надежностью $1-\gamma$ постулированная модель ТВЗП признаётся адекватной.

Если же $F_T < F$, то дисперсия $S_r{}^2$ значимо отличается от $S_1{}^2$, что свидетельствует о неадекватности постулированной модели ТВЗП. В этом случае постулируется другая модель ТВЗП, и все расчёты проделываются сначала. И так до тех пор, пока не будет найдена адекватная модель.

Для проводимого эксперемента, материала ПММА, мы воспользовались первым критерием выбора оптимальной модели статической ТВЗП.

Результаты для материала ПММА

Общая остаточная сумма квадратов в предположении модели Журкова

$$QrZ := Qr_1Z + Qr_2Z = 4.46830713230618 \times 10^4 \qquad \sqrt{QrZ} = 211.384$$

Общая остаточная сумма квадратов в предположении модели Регеля-Ратнера

$$QrR := Qr_1R + Qr_2R = 0.0776284215887608 \qquad \sqrt{QrR} = 0.279$$

Постулировав модель Журкова, мы получили очень большую остаточную сумму квадратов, во много раз большую, чем в случае предположения модели Регеля-Ратнера.

Следовательно, модель Журкова не адекватна исходным экспериментальным данным по динамической долговечности. Адекватна модель Регеля-Ратнера.

Заключение

На основе обобщённого принципа суперпозиций повреждений решена прямая задача прогнозирования для всех известных моделей статической ТВЗП (Журкова, Регеля-Ратнера, две модели Ратнера и модель Бартенева) в режиме испытаний на разрывной машине с постоянной скороста роста напряжений [1, 2].

Решена обратная задача прогнозирования: нахождение наиболее оптимальной модели статической ТВЗП по результатам кратковременных динамических испытаний на разрывной машине с постоянной скороста роста напряжений и при различных температурах. Установлен наименьший объём эксперимента, необходимый для однозначного решения обратной задачи прогнозирования. А именно необходимо варьировать температуру минимум на двух уровнях, и на каждой изотерме варьировать скорость нагружения тоже на двух уровнях. Увеличение числа изотерм и увеличения количества скоростей нагружения не приводит к существенному улучшению результатов.

Список литературы

[1]. Валишин А.А., Степанова Т.С. Проблема смещения полюса в температурно-временной зависимости прочности полимеров. Ч.1. Теория. // Пластические массы. 2008. № 2. С. 36-40.

[2]. Валишин А.А., Степанова Т.С. Проблема смещения полюса в температурно-временной зависимости прочности полимеров. Ч. 2. Вычислительный эксперимент. // Пластические массы. 2008. № 7. С. 29-33.

[3]. Карташов Э.М. Современные представления кинетической термофлуктуационной теории прочности полимеров. // Итоги науки. Сер. Химия и технология высокомолекулярных соединений. ВИНИТИ. М.: Наука. 1991. Т.27. 110 с.

[4]. Партон В.З. Механика разрушения. М.: Наука. 1990. 239 с.

[5]. Регель В.Р., Слуцкер А.И., Томашевский Э.Е. Кинетическая природа прочности твёрдых тел. М.: Наука. 1974. 560 с.
[6]. Валишин А.А., Карташов Э.М. Нелинейные эффекты в кинетике разрушения полимеров и композитов. // Проблемы прочности. 1993. №6. С. 13-16.
[7]. Карташов Э.М. Аналитические методы в теории теплопроводности твёрдых тел. Изд. 3-е, перераб. и доп. М.: Высшая школа. 2001. 550 с.