На правах рукописи

Салихова Нелли Камилевна

ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ И УПРУГИЕ СВОЙСТВА СЕТЧАТЫХ ЭЛАСТОМЕРОВ И ПОЛИМЕРНЫХ ГЕЛЕЙ С НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ РАСТВОРИТЕЛЯ

01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Пермь – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте механики сплошных сред Уральского отделения Российской Академии наук.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, доцент Денисюк Евгений Яковлевич, старший научный сотрудник Института механики сплошных сред УрО РАН
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Адамов Анатолий Арсангалеевич, ведущий научный сотрудник Института механики сплошных сред УрО РАН
	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Коробейников Сергей Николаевич, зав. лаб. механики разрушения материалов и конструкций Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН
Ведущая организация:	ФГБОУ ВПО "Тульский государственный университет"

Защита диссертации состоится 26 июня 2013 г. в   часов на заседании диссертационного совета Д 004.012.01 в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте механики сплошных сред УрО РАН по адресу: 614013, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королева, 1; тел.: (342)2378388; факс: (342)2378487; сайт: www.icmm.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института механики сплошных сред УрО РАН.

Автореферат разослан «   » мая 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор технических наук   Игорь Константинович Березин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Сетчатые эластомеры и полимерные гели способны поглощать органические и неорганические жидкости (растворители), многократно (в десятки и сотни раз) увеличиваясь в объеме. В набухшем состоянии они сохраняют свою форму и способность к большим обратимым упругим деформациям. Это явление называется ограниченным набуханием и объясняется молекулярной структурой данных материалов — они представляют собой пространственную полимерную сетку, состоящую из гибких макромолекулярных цепей, соединенных химическими связями.

Способность полимерных гелей поглощать жидкость, высвобождать ее и осуществлять интенсивный массообмен с внешней средой находит применение во многих современных технологиях: в биотехнологии (сепарация протеинов), в медицине и фармакологии (лекарственные гели), в биохимии и мембранных технологиях, в сельском хозяйстве (увлажнители почвы) и т.д. Что касается эластомеров, то эти полимеры часто предназначены для эксплуатации в агрессивных средах — органических растворителях и их парах.

В процессе набухания в полимере могут возникать сильно неоднородные концентрационные поля растворителя, которые порождают внутренние напряжения. Это явление в определенном смысле аналогично возникновению термических напряжений при неоднородном нагревании твердых тел. Однако в случае эластомеров и полимерных гелей поглощение растворителя вызывает многократное изменение объема материала, которое на много порядков превосходит термические деформации. Вследствие этого неоднородно набухшие сетчатые полимеры могут приобретать весьма сложные конфигурации.

Исследованию подобного рода явлений посвящена данная работа. В настоящее время – это малоизученная область механики деформируемого твердого тела. В то же время, эти исследования представляют интерес для многих приложений, основанных на эксплуатации полимерных материалов в среде растворителя. Изучение деформационного поведения сетчатых полимеров с неоднородным распределением растворителя интересно и с теоретической точки зрения, поскольку приводит к новому типу задач, которые являются естественным обобщением задач классической теории упругости.

Цель работы состоит в исследовании закономерностей деформационного поведения и напряженно-деформированного состояния высокоэластичных сетчатых полимеров — эластомеров и полимерных гелей с неоднородным распределением растворителя.

Научная новизна работы состоит в том, что автором впервые:

- сформулированы нелинейные краевые задачи, описывающие напряженно-деформированное состояние полимерных гелей и эластомеров, порожденное неоднородным распределением растворителя при конечных деформациях полимерной матрицы;

- для распределений растворителя, обладающих достаточно высокой симметрией и позволяющих исходную краевую задачу свести к одномерной, построены их точные аналитические решения;
- в рамках этих решений изучено деформационное поведение и упругие свойства неоднородно набухших сетчатых полимеров;
- установлены соотношения, позволяющие сравнивать упругую реакцию полимера в условиях одноосного растяжения с однородным и неоднородным распределением растворителя;
- на их основе предложен метод, позволяющий оценивать адекватность различных моделей высокоэластичности по экспериментальным данным, характеризующим упругие и деформационные свойства неоднородно набухшего материала;
- в рамках нелинейной задачи о сгибании плоского образца полимера продемонстрирована способность предложенной модели описывать явления, связанные с существенным изменением конфигурации неоднородно набухшего образца под действием внутренних напряжений, порожденных неоднородным распределением растворителя;
- предложены численные алгоритмы решения нелинейных и линеаризованных задач;
- для двумерной задачи, характеризующей напряженно-деформированное состояние неоднородно набухшего плоского слоя полимера, скрепленного с жестким основанием, осуществлена программная реализация предложенных алгоритмов;
- выполнена серия вычислительных экспериментов, с помощью которых подтверждена работоспособность предложенных алгоритмов и изучен характер напряженно-деформированного состояния материала, порождаемого различными видами распределений растворителя при больших и малых деформациях полимерной матрицы.

На защиту выносятся следующие результаты:

- система уравнений и определяющих соотношений, описывающая состояние и упругие свойства неоднородно набухших в растворителе сетчатых полимеров при больших и малых деформациях полимерной матрицы;
- одномерные нелинейные краевые задачи и их аналитические решения, характеризующие напряженно-деформированное состояние образцов сетчатых полимеров канонической формы (плоского слоя, шара, цилиндра) с неоднородным распределением растворителя;

- соотношения, позволяющие сравнивать упругую реакцию полимера с однородным и неоднородным распределением растворителя в условиях одноосного растяжения;
- результаты моделирования деформационного поведения неоднородно набухших сетчатых полимеров в рамках нелинейных одномерных задач;
- численный алгоритм решения нелинейных задач, характеризующих состояние полимерного материала с распределением растворителя, зависящим от нескольких пространственных координат;
- результаты численного моделирования двумерной задачи, описывающей напряженно-деформированное состояние неоднородно набухшего плоского слоя полимера, скрепленного с жестким основанием.

Достоверность полученных результатов обеспечена тем, что система уравнений и определяющих соотношений для системы "полимер – растворитель" получена из базовых принципов механики и термодинамики растворов. Исследование деформационного поведения неоднородно набухших в растворителе сетчатых полимеров проводилось на основе краевых задач, которые последовательно выводились из общей теории. Адекватность используемого подхода проверялась экспериментально на модельных системах. Достоверность результатов численного моделирования подтверждалась на основе анализа сходимости и устойчивости используемых алгоритмов при различной степени дискретизации области, а также путем сравнения численных решений с имеющимися набором точных аналитических решений.

Практическая ценность работы состоит в том, что полученные в ней результаты расширяют представления о закономерностях деформационного поведения сетчатых полимеров. Они могут быть использованы для оценки работоспособности полимерных материалов и элементов конструкций, предназначенных для работы в физически агрессивных средах, а также при создании и совершенствовании технологий, основанных на применении полимерных гелей. Для механики и физико-химии полимеров могут представлять интерес новые подходы к исследованию упругих свойств сетчатых полимеров.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены на следующих научных конференциях: XVI, XVII, XVIII Зимняя школа по механике сплошных сред, Пермь (2009, 2011, 2013), Всероссийская конференция молодых ученых «Неравновесные процессы в сплошных средах», Пермь (2008, 2009, 2010, 2011, 2012, 2013), XVIII, XIX, XX Всероссийская школа-конференция молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках», Пермь (2009, 2010, 2011), II, III международная конференция «Техническая химия. От теории к практике», Пермь (2010, 2012), Всероссийская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы механики, математики, информатики», Пермь (2010, 2012), X Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Н. Новгород (2011).

Публикации. По теме диссертации опубликованы 24 работы, в том числе 2 статьи в журналах из списка ВАК [12,13], 2 статьи в рецензируемых журналах [3,4], 8 статей в трудах международных и российских конференций [1,2,5–7,14–16], 12 – в тезисах докладов конференций.

Личный вклад автора состоит в формулировке краевых задач, в построении их аналитических решений, в участии в планировании и постановке эксперимента, в обработке экспериментальных данных, в программной реализации численных алгоритмов решения краевых задач, в выполнении численных экспериментов и анализе численных решений.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка обозначений и списка использованной литературы (187 названий). Она содержит 139 страниц текста, в том числе 32 рисунка и 2 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается общая характеристика работы, обосновывается ее актуальность, формулируется основная цель исследования, излагается краткое содержание диссертации и приводятся положения, выносимые на защиту.

Первая глава носит обзорный характер. В ней описываются строение и основные свойства сетчатых эластомеров и полимерных гелей, их применение, излагаются основные закономерности деформационного поведения сетчатых полимеров, содержащих растворитель или взаимодействующих со средой растворителя. Дается обзор и анализ существующих теоретических моделей, описывающих упругие свойства таких систем. На основе выполненного анализа выясняются нерешенные проблемы и формулируются цели и задачи диссертационной работы.

Вторая глава посвящена построению общей системы уравнений и определяющих соотношений, характеризующих механическое поведение и упругие свойства набухших в растворителе сетчатых полимеров. Естественной моделью таких систем является смесь, представляющая собой нелинейно-упругий материал и растворенную в нем жидкость. Задача о механическом равновесии смеси формулируется следующим образом. Пусть Ω^0 — область пространства, занимаемая образцом сетчатого полимера в отсчетной конфигурации. Такой конфигурацией может служить любое механически ненагруженное состояние смеси, в котором жидкость равномерно распределена в объеме материала (или отсутствует). В этом состоянии вводится система материальных координат (q^1, q^2, q^3), которая связывается с упругой матрицей. Отсчетная конфигурация задается радиус-вектором $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q^1, q^2, q^3)$. В результате механического нагружения, а также поглощения растворителя, полимер переходит в деформированное состояние, описываемое радиусом-вектором $\mathbf{R} = \mathbf{R}(q^1, q^2, q^3)$. Пусть Ω — область пространства, занимаемая им в этом состоянии. Полагается, что на части границы образца $\Gamma_1 \subset \partial\Omega$ действуют поверхностные силы с плотностью $\mathbf{g}$, а положение остальной части его границы $\Gamma_0 = \partial\Omega \backslash \Gamma_1$ задано функцией $\mathbf{R} = \mathbf{R}_*(q^1, q^2, q^3)$.

Напряженно-деформированное состояние полимера с заданным распределением жидкости описывается системой уравнений и граничных условий:

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad \det \mathbf{F} = J_*(q^1, q^2, q^3), \tag{1}$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{g},\ (\mathbf{R} \in \Gamma_1), \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}_*(q^1, q^2, q^3),\ (\mathbf{R} \in \Gamma_0), \tag{2}$$

где $\mathbf{T}$ – тензор напряжений Коши, $\mathbf{F}$ – градиент деформации, $J = \det \mathbf{F}$ – его третий инвариант, характеризующий объемную деформацию материала, $J_*(q^1, q^2, q^3)$ – заданная функция, описывающая текущее распределение растворителя в материале, $\mathbf{n}$ - вектор внешней нормали. Соотношения (1)–(2) выведены из вариационного принципа, который, в свою очередь, является следствием известного в термодинамике утверждения о том, что свободная энергия системы в условиях равновесия достигает своего минимума.

Для описания деформированного состояния смеси используется мера деформации искажения формы и ее главные инварианты:

$$\hat{\mathbf{B}} = \mathbf{B}/J^{2/3}, \quad \hat{I}_1 = I_1/J^{2/3}, \quad \hat{I}_2 = I_2/J^{4/3},$$

где $\mathbf{B}$ – мера деформации Фингера, I_1, I_2, $I_3 = J^2$ – ее инварианты.

Полимер, растворитель и образуемая ими смесь здесь считаются несжимаемыми средами. В этом случае объемные доли растворителя ϕ_1 и полимера ϕ_2 связаны соотношением $\phi_1 + \phi_2 = 1$, а условие несжимаемости смеси выражается уравнением

$$\det \mathbf{F} = \phi_2^0/\phi_2, \tag{3}$$

где ϕ_2^0 – объемная доля полимера в отсчетной конфигурации. Оно означает, что единственной причиной изменения объема материала является поглощение растворителя. Из него следует, что распределение растворителя в полимере можно задать с помощью функции J_*, которая характеризует локальную объемную деформацию материала и фигурирует во втором уравнении (1).

Тензор напряжений Коши набухшего в растворителе полимера (в приближении несжимаемой смеси) можно представить в следующем виде:

$$\mathbf{T} = \xi_1 \left(\hat{\mathbf{B}} - \frac{1}{3}\hat{I}_1 \mathbf{E} \right) - \xi_2 \left(\hat{\mathbf{B}}^2 - \frac{1}{3} I_1(\hat{\mathbf{B}}^2)\mathbf{E} \right) - p\mathbf{E}, \tag{4}$$

$$\xi_1 = 2\left(\partial f/\partial \hat{I}_1 + \hat{I}_1 \partial f/\partial \hat{I}_2 \right), \qquad \xi_2 = 2\partial f/\partial \hat{I}_2, \quad f = f(\hat{I}_1,\, \hat{I}_2,\, n_1,\, n_2) \tag{5}$$

где f – плотность свободной энергии смеси, n_1, n_2 – мольные концентрации растворителя и цепей полимерной матрицы соответственно, $\mathbf{E}$ – единичный тензор, p – гидростатическое давление, которое в случае несжимаемой смеси имеет смысл лагранжева множителя.

Состояние полимера с неоднородным распределением растворителя определяется из решения краевой задачи (1)–(2), (4). Неизвестными и подлежащими определению функциями здесь являются $\mathbf{R}$ и p.

Для описания упругих свойств сетчатых полимеров, содержащих растворитель, использовано соотношение для тензора напряжений Коши, вытекающее из теории полимерных сеток Флори - Ренера:

$$\mathbf{T} = R_g T V_2^{-1} \phi_2^{1/3} \left(\hat{\mathbf{B}} - \frac{1}{3} \hat{I}_1 \mathbf{E} \right) - p\mathbf{E}, \tag{6}$$

где T – абсолютная температура; R_g – универсальная газовая постоянная; V_2 – мольный объем цепей полимерной сетки.

Более точное описание свойств сетчатых полимеров дает обобщенная модель Муни-Ривлина, основанная на потенциале свободной энергии, в котором упругие константы зависят от концентрации растворителя. Соответствующее выражение для тензора напряжений Коши имеет вид (4), где

$$\xi_1 = R_g T V_2^{-1} (\phi_2^{1/3} + C\phi_2^m \hat{I}_1), \quad \xi_2 = R_g T V_2^{-1} C \phi_2^m,$$

(m и C – материальные константы).

Сформулирована линейная теория, описывающая напряженно-деформированное состояние неоднородно набухшего материала в приближении малых деформаций упругой матрицы. Она получена путем линеаризации уравнений нелинейной теории. Соответствующая задача приобретает следующий вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = \theta_*(q^1, q^2, q^3), \quad \mathbf{T} = 2G_0 \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - p\mathbf{E}, \tag{7}$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{g}, \; (\mathbf{r} \in \Gamma_1), \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_*(q^1, q^2, q^3), \; (\mathbf{r} \in \Gamma_0), \tag{8}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ – линейный тензор деформации, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ – его девиатор, θ - объемная деформация материала, G_0 – модуль сдвига набухшего полимера. Задача сводится к поиску поля перемещений $\mathbf{u}$ и давления p.

В третьей главе поведение сетчатых полимеров с неоднородным распределением растворителя рассмотрено в рамках нелинейных одномерных задач. Такие задачи возникают в случае, когда распределение растворителя в материале зависит только от одной пространственной координаты, а сам образец и распределение растворителя в нем обладают достаточно высокой симметрией.

В рамках нелинейной теории сформулированы краевые задачи, описывающие напряженно-деформированное состояние образцов полимеров правильной геометрической формы (плоского слоя, шара и цилиндра) с симметричным распределением растворителя. Построены их аналитические решения.

В частности, рассмотрена задача о поведении неоднородно набухшего плоского образца полимера в условиях одноосного растяжения с симметричным (относительно продольной плоскости, проходящей через центр образца) распределением растворителя. Основной вопрос состоял в том, чтобы выяснить, чем отличается упругая реакция полимера с неоднородным распределением растворителя от поведения этого же образца с однородным распределением жидкости.

Для описания упругих свойств полимера использованы соотношения, вытекающие из модели Флори-Ренера и Муни-Ривлина. Получены выражения, характеризующие упругую реакцию полимера с неоднородным распределением растворителя. Для модели Муни-Ривлина они имеют следующий вид:

$$P = G_0(1+\hat{C}M_1\lambda_2^2)\left(\lambda_3 - \frac{1}{\lambda_2^2\lambda_3^2}\frac{M_2+\hat{C}M_3\lambda_2^2}{1+\hat{C}M_1\lambda_2^2}\right),\ \lambda_2^4 = \frac{1}{\lambda_3^2}\frac{M_2+\hat{C}M_3\lambda_3^2}{1+\hat{C}M_1\lambda_3^2}, \quad (9)$$

$$M_1 =< J^{-m_1}(x)>, \quad M_2 =< J^2(x)>, \quad M_3 =< J^{2-m_1}(x)>, \quad (10)$$
$$G_0 = R_gTV_2^{-1}(\phi_2^0)^{1/3}, \quad \hat{C} = C(\phi_2^0)^{m-1/3}, \quad m_1 = m+1/3,$$

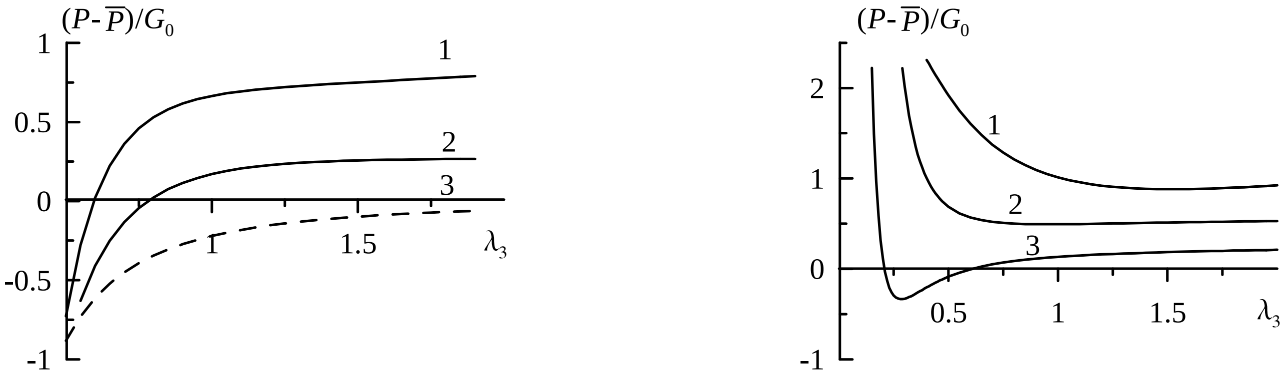
где P – средняя сила, действующая на единицу площади поперечного сечения образца в отсчетной конфигурации; λ_3 – заданная степень растяжения образца; λ_2 – продольное удлинение образца в направлении, вдоль которого нагрузка отсутствует; x – поперечная координата. Начало координат расположено в центре образца. Распределение растворителя описывается функцией вида $J(-x)=J(x)$. Угловые скобки означают операцию $<...>=(2h)^{-1}\int_{-h}^{h}...dx_1$; $2h$ – толщина образца. Соответствующие выражения для модели Флори-Ренера получаются из (9), если в них положить $\hat{C}=0$.

Показано, что согласно модели полимерных сеток Флори – Ренера, упругая реакция неоднородно набухшего полимера в условиях одноосного растяжения всегда меньше его реакции в состоянии с однородным распределением растворителя (при неизменном количестве растворенной в образце жидкости). Максимальная величина реакции достигается в однородном состоянии.

Модель Муни-Ривлина предсказывает более разнообразное поведение полимеров. При $m_1 \le 1$ или $m_1 \ge 2$ ($C>0$) функция $\delta(\lambda_3) = (P(\lambda_3) - \bar{P}(\lambda_3))/G_0$ (где $\bar{P}$ – реакция полимера с однородным распределением растворителя) является знакопеременной: она принимает как отрицательные значения (при достаточно малых λ_3), так и положительные значения (при достаточно больших λ_3). Такой тип поведения материала показан на рисунке 1, а.

Здесь же приведена зависимость $\delta(\lambda_3)$ для $C = 0$, которая отвечает модели Флори-Ренера.

При $1 < m_1 < 2$ ($C > 0$) функция $\delta(\lambda_3)$ демонстрирует другой тип поведения, изображенный на рисунке 1, б. Здесь возможны два случая: функция $\delta(\lambda_3)$ может быть как положительно определенной, так и знакопеременной. Конкретный тип поведения материала зависит от комбинации различных факторов: от конкретных значений констант m и C, от количества растворенной в материале жидкости, а также от характера ее распределения в образце.



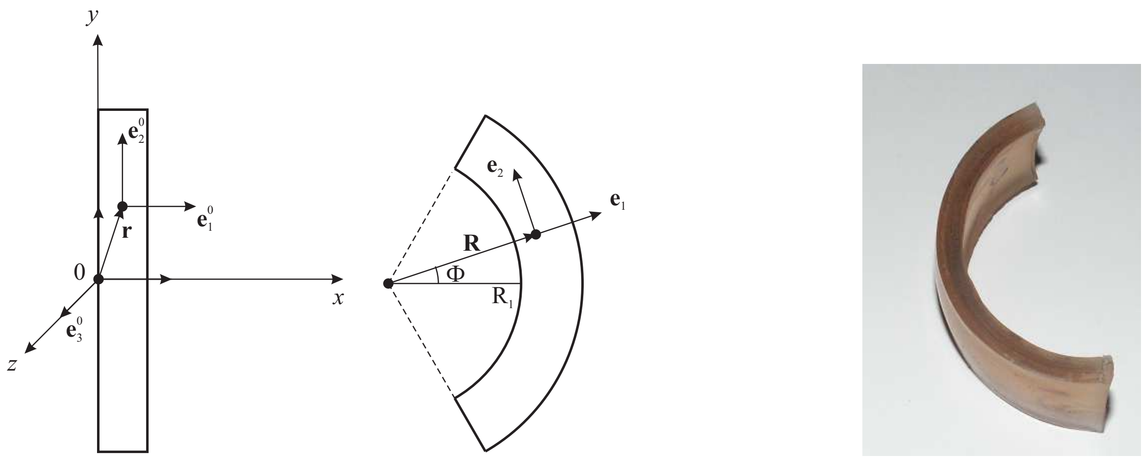
а б

Рисунок 1 – Разность упругих реакций одноосно деформированного полимера с неоднородным и однородным распределениями растворителя: а – $m_1 = 3.73 \geq 2$: 1 – $M_2 = 1.64$, 2 – $M_2 = 1.49$, кривая 3 отвечает модели Флори-Ренера; б – $1 < m_1 < 2$: 1 – $M_2 = 1.96$, $\phi_2^0 = 0.01$; 2 – $M_2 = 1.25$, $\phi_2^0 = 0.5$; 3 – $M_2 = 1.36$, $\phi_2^0 = 0.07$. Параметры: $m_1 = 1.3$, $C = 4$.

Теоретические результаты проверены экспериментально. В опытах использовались образцы полибутадиенуретанового (ПБУ) эластомера ($m_1 = 3.73$) и дибутилсебацинат (ДБС) в качестве растворителя. Установлено, что тип деформационного поведения данного полимера соответствует случаю $m_1 > 2$ и удовлетворительно описывается моделью Муни-Ривлина.

Поведение сетчатых полимеров с неоднородным распределением растворителя можно изучать в рамках других моделей полимерных сеток. Данные теоретического анализа можно проверять экспериментально в опытах с нелетучими жидкостями. Результаты такой проверки могут быть использованы для качественной и количественной оценки адекватности различных теорий высокоэластичности.

Из опыта известно, что неоднородное распределение растворителя в полимере может приводить к существенному изменению конфигурации образца. Примером может служить изгибание плоского образца полимера и приобретение им формы цилиндрического сегмента под действием внутренних напряжений, порожденных неоднородным и несимметричным распределением растворителя. Это явление показано на рисунке 2.



а б

Рисунок 2 – Изменение конфигурации полимера под действием внутренних напряжений, порожденных несимметричным распределением растворителя: а – схематическое изображение явления; б – конфигурация неоднородно набухшего в ДБС плоского образца полибутадиенуретанового эластомера.

Сформулирована нелинейная задача, моделирующая это явление. Она сведена к решению нелинейного алгебраического уравнения. Из него определяется безразмерный параметр, с помощью которого можно рассчитать все остальные величины, характеризующие напряженно-деформированное состояние образца и его текущую конфигурацию для произвольного распределения растворителя. Получены частные решения для конкретных распределений — экспоненциального и линейного. Данный режим деформирования проверен и подтвержден экспериментально.

В четвертой главе в рамках нелинейной и линейной теории сформулированы трехмерные и двумерные краевые задачи, описывающие состояние сетчатого полимера с неоднородным распределением растворителя достаточно произвольного вида. Предложены численные методы их решения.

Линейная задача (7)–(8) рассмотрена для случая $\mathbf{u}_* = 0$. В слабой форме она формулируется следующим образом: при заданных $\theta \in L_2(\Omega)$ и $\mathbf{g} \in L_2(\Gamma_1)$ найти $\mathbf{u} \in V(\Omega)$ и $q \in L_2(\Omega)$ такие, что для любых $\mathbf{w} \in V(\Omega)$ и $\psi \in L_2(\Omega)$ выполнялись уравнения

$$2\int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w})\, dV - \int_\Omega q \nabla\cdot\mathbf{w}\, dV = \int_{\Gamma_1} \mathbf{g}\cdot\mathbf{w}\, dS, \quad \int_\Omega \psi(\nabla\cdot\mathbf{u} - \theta)\, dV = 0, \quad (11)$$

где $V(\Omega) = \{\mathbf{v} \in H^1(\Omega) :\ \mathbf{v} = 0 \text{ на } \Gamma_0\}$ – подпространство соболевского класса функций $H^1(\Omega)$, $q = p + 2/3 I_1(\boldsymbol{\varepsilon})$. В качестве единицы измерения давления здесь используется величина G_0.

Задача (11) относится к классу седловых задач и для ее решения использован метод Удзавы. Установлена область значений параметра релаксации, при котором итерационный процесс Удзавы сходится к решению задачи.

Для решения нелинейной задачи применялась комбинация двух методов: метода продолжения по параметру и метода Ньютона. Основная идея данного подхода заключается в следующем. Исходная задача параметризуется:

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{w}^T : \mathbf{P}\, dV - \tau \int_{\Gamma_1} \mathbf{w} \cdot \mathbf{g}\, dS = 0, \quad \int_{\Omega} \psi(\det \mathbf{F} - 1)\, dV = \tau \int_{\Omega} \psi \theta\, dV, \quad (12)$$

где $\tau \in [0, 1]$ – вещественный параметр, $\mathbf{P} = \mathbf{F} - q(\det \mathbf{F})\mathbf{F}^{-T}$ – тензор напряжений Пиолы (это выражение вытекает из модели Флори-Ренера), $q = p + 1/3I_1$. Задача записана в отсчетной конфигурации.

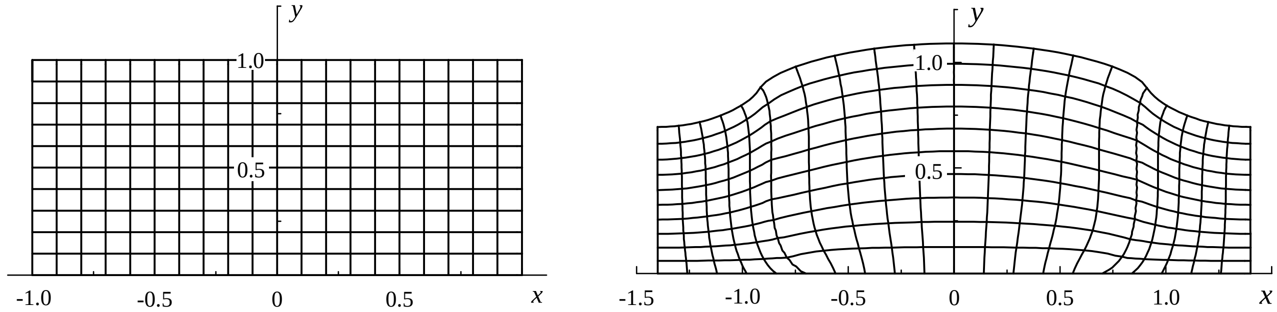
Решение задачи (12) зависит от параметра τ, причем, значению $\tau = 1$ соответствует искомое решение, а $\tau = 0$ отвечает исходному состоянию полимера, которое известно. Область изменения τ подвергается разбиению на конечное число отрезков вида $[\tau_i, \tau_{i+1}]$. Если решение задачи (12) при τ_i уже найдено, то ее решение в точке τ_{i+1} определяется с помощью метода Ньютона, согласно которому приближение на $s+1$-й итерации представляется в виде $\mathbf{u}^{s+1} = \mathbf{u}^s + \delta \mathbf{u}^{s+1}$, $q^{s+1} = q^s + \delta q^{s+1}$. Полагая, что функции $\mathbf{u}^s$ и q^s уже известны, уравнения (12) линеаризуются (в соответствии с методом Ньютона) относительно переменных $\delta \mathbf{u}^{s+1}$ и δq^{s+1}. Полученная система линейных уравнений относительно неизвестных $\delta \mathbf{u}^{s+1}$ и δq^{s+1}, которая также принадлежит к классу седловых задач и для их решения используется метод Удзавы.

Используя достаточно мелкое разбиение области изменения параметра τ, можно обеспечить "попадание" в область сходимости итерационного процесса Ньютона на каждом шаге по τ. Это позволяет моделировать поведение неоднородно набухшего материала при больших деформациях полимерной матрицы.

Перечисленные выше алгоритмы реализованы на основе смешанного метода конечных элементов для двумерных задач, описывающих состояние плоского слоя полимера с неоднородным распределением растворителя. Полимер представляет собой бесконечно протяженную полосу прямоугольного сечения $\Omega = \{\mathbf{r} = (x, y) \in \mathbb{R}^2 : \ |x| < L, \ 0 < y < 1\}$, которая вдоль границы $\Gamma_0 = \{(x, y) : \ x \in [-L, L], \ y = 0\}$ скреплена с жестким, недеформируемым основанием, а $\Gamma_1 = \{(x, y) : \ x \in [-L, L], \ y = 1\}$ отвечает свободной поверхности полимера. На боковых границах $x = \pm L$ полосы ставятся периодические граничные условия. Распределение растворителя в полимере зависит только от двух координат – от x и y.

Использовались треугольные элементы типа $P_2 - P_0$, дающие квадратичную аппроксимацию поля перемещений и кусочно-постоянную аппроксимацию давления. Такой выбор объясняется тем, что данный тип конечных элементов удовлетворяет так называемому inf-sup-условию, что обеспечивает корректную конечно-элементную аппроксимацию исходной краевой задачи, разрешимость конечно-элементных уравнений и равномерную сходимость конечно-элементного решения к решению континуальной задачи при стремлении к нулю параметра дискретизации области [Brezzi F., Fortin M. Mixed and Hybrid FEM. Springer, 1991].

На рисунке 3 приведен результат решения нелинейной задачи для ступенчатого распределения растворителя вида: $\theta = 0.8$ при $x \leq 0.5$ и $\theta = -0.18$ при $x > 0.5$. Полагалось, что полимер был предварительно подвергнут растяжению вдоль оси x с относительным удлинением $\lambda_1 = 1.4$.



а б

Рисунок 3 – Исходная (а) и текущая (б) конфигурации плоского слоя полимера с неоднородным распределением растворителя.

С помощью численных экспериментов изучены вопросы, касающиеся точности алгоритмов и скорости их сходимости.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Дана общая постановка задач, описывающих напряженно-деформированное состояние нелинейно-упругого материала с неоднородным распределением жидкости при конечных деформациях упругой матрицы. Показано, что эти задачи являются естественным обобщением классических задач нелинейной теории упругости. С помощью линеаризации уравнений нелинейной теории построена линейная теория, описывающая состояние неоднородно набухшего материала в приближении малых деформаций упругой матрицы.
2. Сформулированы одномерные нелинейные задачи, описывающие напряженно-деформированное состояние образцов сетчатых полимеров правильной геометрической формы с неоднородным распределением растворителя. Получены их аналитические решения.
3. Установлены соотношения, позволяющие сравнивать упругую реакцию полимера с однородным и неоднородным распределением растворителя. На их основе предложен новый метод, позволяющий оценивать адекватность различных моделей высокоэластичности по экспериментальным данным, характеризующим упругие и деформационные свойства неоднородно набухшего материала.

4. Изучены явления, связанные с существенным изменением исходной конфигурации неоднородно набухшего материала. Это сделано в рамках нелинейной задачи о сгибании плоского образца полимера под действием внутренних напряжений, порожденных неоднородным распределением растворителя. Получено аналитическое решение данной задачи. Физическая реализуемость конфигурации, описываемой теоретическим решением, подтверждена экспериментально.
5. В рамках нелинейной и линейной теории рассмотрены двумерные и трехмерные краевые задачи, описывающие напряженно-деформированное состояние полимеров, неоднородно набухших в растворителе.
6. Для плоского слоя полимера построено аналитическое решение двумерной линейной задачи. На основе смешанного метода конечных элементов и алгоритма Удзавы предложен метод численного решения линейных задач механики неоднородно набухших полимеров.
7. Для решения нелинейных задач предложена комбинация двух методов: метода продолжения по параметру и метода Ньютона, позволяющих свести исходную нелинейную проблему к решению последовательности линейных задач. Осуществлена программная реализация данных алгоритмов. Выполнена серия вычислительных экспериментов. С их помощью произведена оценка сходимости и точности вычислительных алгоритмов, а также изучены эффекты и явления, возникающие в сетчатых полимерах при взаимодействии неоднородных концентрационных полей растворителя с полями механических напряжений и деформаций.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Денисюк, Е. Я. Упругая реакция и деформационное поведение неоднородно набухшего плоского слоя полимерного геля в условиях одноосного растяжения / Е. Я. Денисюк, Н. К. Салихова // Неравновесные процессы в сплошных средах. Материалы Всероссийской конференции молодых ученых. – Пермь, 2008. – С. 102–105.
2. Денисюк, Е. Я. Исследование упругих свойств неоднородно набухших сетчатых полимеров в рамках обобщенной модели высокоэластичности Муни-Ривлина / Е. Я. Денисюк, Н. К. Салихова // Труды XVI Зимней школы по механике сплошных сред [Электронный ресурс]. – Пермь-Екатеринбург, 2009. – электрон. опт. диск (CD-ROM).
3. Денисюк, Е.Я. Упругие свойства и механическое поведение неоднородно набухших сетчатых эластомеров и полимерных гелей / Е.Я. Денисюк, Н.К. Салихова // Вестник ПГТУ. Мат. моделир. систем и процессов.– 2009.– С. 58–65.

4. Денисюк, Е. Я. Напряженно-деформированное состояние неоднородно набухшего образца сетчатого полимера сферической формы / Е. Я. Денисюк, Н. К. Салихова // Вестник ПГТУ. Механика. – 2010. – № 1.– С. 50–58.
5. Денисюк, Е.Я. Анализ деформационного поведения неоднородно набухших полимерных гелей в рамках различных моделей высокоэластичности/Е.Я. Денисюк, Н.К. Салихова//Неравновесные процессы в сплошных средах. Материалы Всерос. конф. молодых ученых.– Пермь, 2009.– С. 280–283.
6. Денисюк, Е.Я. Задача о механическом поведении полимерного геля цилиндрической формы с неоднородным распределением растворителя/ Е.Я. Денисюк, Н.К. Салихова//Неравновесные процессы в сплошных средах. Материалы Всерос. конф. молодых ученых.– Пермь, 2010.–С.75–78.
7. Денисюк, Е. Я. Напряженно-деформированное состояние плоского образца полимерного геля с несимметричным распределением растворителя / Е. Я. Денисюк, Н. К. Салихова // Труды XVII Зимней школы по механике сплошных сред [Электронный ресурс]. – Пермь, 2011. – электрон. опт. диск (CD-ROM).
8. Денисюк, Е. Я. Механические свойства сетчатых полимеров, набухших в растворителе / Е. Я. Денисюк, Н. К. Салихова // Математическое моделирование в естественных науках: тезисы докладов XVIII Всероссийской школы-конференции молодых ученых и студентов. – Пермь, 2009. – С. 81.
9. Денисюк, Е.Я. Конечно-элементный анализ напряженно-деформированного состояния полимерного геля с неоднородным распределением растворителя / Е.Я. Денисюк, Н.К. Салихова // Актуальные проблемы механики, математики, информатики: сб. тез. науч.-практ. конф. – Пермь, 2012. – С. 75.
10. Денисюк, Е.Я. Численный метод расчета напряженно-деформированного состояния набухших в растворителе сетчатых полимеров / Е. Я. Денисюк, Н. К. Салихова // Неравновесные процессы в сплошных средах: тез. докл. Всеросс. конф. мол. уч. – Пермь, 2012. – С. 64.
11. Денисюк, Е.Я. Конечно-элементный алгоритм расчета напряженно-деформированного состояния геля, порожденного неоднородном распределением растворителя/Е.Я. Денисюк, Н.К. Салихова//Механика сплошных сред как основа современных технологий: тезисы докл. XVIII Зимней школы по механике сплошных сред.– Пермь-Екатеринбург, 2013.– С. 115.
12. Салихова, Н. К. Механика высокоэластичных полимерных материалов, содержащих растворитель / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2011. – № 4, ч. 5. – С. 2474–2476.

13. Салихова, Н. К. Механическое поведение и упругая реакция неоднородно набухшего цилиндрического образца полимерного геля с аксиально-симметричным распределением растворителя / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Вычисл. мех. сплош. сред.– 2012.– Т. 5, № 2.– С. 178–183.
14. Салихова, Н. К. Эволюция напряженно-деформированного состояния неоднородно набухшего образца полимерного геля, порождаемая диффузией растворителя в объеме материала / Н. К. Салихова, Д. В. Баталова, Е. Я. Денисюк // Техническая химия. От теории к практике. Материалы международной конференции. – Пермь, 2010. – С. 67–71.
15. Салихова, Н. К. Деформационное поведение неоднородно набухших в растворителе сетчатых полимеров в условиях одноосного растяжения / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Техническая химия. От теории к практике. Материалы международной конференции. – Пермь, 2010. – С. 398–402.
16. Салихова, Н. К. Численное моделирование напряженно-деформированного состояния полимерного покрытия, набухшего в растворителе / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Техническая химия. От теории к практике. Материалы международной конференции. – Пермь, 2012. – С. 273–278.
17. Салихова, Н. К. Деформирование плоского образца сетчатого полимера с несимметричным распределением растворителя / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Математическое моделирование в естественных науках: тезисы докладов XIX Всероссийской школы-конференции молодых ученых и студентов. – Пермь, 2010. – С. 89.
18. Салихова, Н. К. О механике полимерных гелей / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Актуальные проблемы механики, математики, информатики: сб. тез. науч.-практ. конф. – Пермь, 2010. – С. 192.
19. Салихова, Н.К. Механика высокоэластичных полимерных материалов, содержащих растворитель / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // X Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Вторая Всероссийская школа молодых ученых-механиков. Тезисы докладов. – Нижний Новгород, 2011. – С. 149.
20. Салихова, Н. К. Численное исследование напряженно-деформированного состояния неоднородно набухшего полимерного геля в рамках линейной теории / Н. К. Салихова, Е. Я. Денисюк // Математическое моделирование в естественных науках: тезисы докладов XX Всероссийской школы-конференции молодых ученых и студентов. – Пермь, 2011. – С. 87–88.