

МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ИОНИЗИРУЮЩИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Л. А. Мерзиевский, М. С. Воронин

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск

При нагружении полимерные материалы демонстрируют сложное поведение, связанное с последовательной сменой микроструктурных механизмов деформирования по мере роста деформаций. Для аморфных полимеров различают три физических состояния – стеклообразное, высокоэластическое и вязкотекучее [1]. Каждому из перечисленных состояний соответствует свой набор микро-, мезо- и макроструктурных механизмов необратимого деформирования. При этом последовательно активируются механизмы деформирования, связанные не только с гибкостью макромолекул и конформационными переходами, но и с перемещениями и перестройками надмолекулярных образований. В квазистатических процессах переход из одного физического состояния в другое происходит при изменении температуры и сопровождается изменением микроскопических и макроскопических свойств.

При облучении полимеров существенно меняется их структура, что, в свою очередь, приводит к изменениям их физико-механических свойств. Основное влияние ионизирующего излучения на химическую структуру и физические свойства полимеров заключается в том, что при его воздействии главная цепь полимера может претерпевать разрывы или деструктурировать, то есть полимерные молекулы разрываются на более мелкие фрагменты. Кроме того, возможен и процесс сшивания – соединение соседних молекул друг с другом поперечными связями, в результате чего образуются молекулы более крупных размеров. Это открывает возможности целенаправленной модификации свойств полимеров с помощью ионизирующего излучения. В табл. 1 приводятся списки некоторых деструктурирующих и сшивающихся полимеров.

Таблица 1

Полимеры, преимущественно сшивающиеся	Полимеры, преимущественно деструктурирующие
Полиэтилен Полипропилен Поливинилхлорид Полистирол Натуральный каучук Синтетические каучуки (за исключением полиизобутилена) Полисилоксаны Полиамиды Полиэтиленоксид	Полиакрилонитрил Полиакриловая кислота и ее производные Поливинилпирролидон Поливиниловые эфиры Поливинилметилкетон Полиизобутилен Поливинилиденхлорид Политрифторхлорэтилен Политетрафторэтилен Полиметакрилонитрил Полиметакриловая кислота и ее производные Поли- α -метилстирол Полиэтилентерефталат Целлюлоза и ее производные

В этой связи является актуальным исследование влияния такого воздействия на механические свойства полимерных материалов. В работе [2] были проведены экспериментальные исследования влияния излучения на механические свойства ряда полимеров.

При построении моделей динамического деформирования полимеров используются разные подходы. Наиболее широкое распространение получили реологические модели, учитывающие ярко выраженный релаксационный характер поведения полимеров при деформировании [3]. В этом случае за основу принимаются канонические модели Максвелла [4] и Фойгта [5], а для согласования получаемых результатов с экспериментальными данными в количественном плане строятся модели, содержащие в качестве структурных элементов несколько последовательно и параллельно соединенных элементов упругости и вязкости [6]. Таким образом, формально в модель вводится несколько времен релаксации, каждое из которых соответствует определенному релаксационному механизму. По сути это означает введение в модель дополнительных эмпирических постоянных (подгоночных констант).

Результаты ряда работ по построению таких моделей, в основном базирующихся на принципах нелинейной вязкоупругости, обобщены в [7]. Экспериментальной основой этих работ стали данные [8, 9]. Несколько иной подход использован в [10]. Здесь результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными об ударной адиабате и распространении ударных импульсов [8].

Для учета особенностей поведения полимеров в широком диапазоне изменения условий нагружения целесообразно привлечь максвелловский подход к описанию необратимых процессов в сплошных средах. Как было показано автором ранее [11, 12], этот подход позволяет сочетать преимущества макроскопического описания с позиций механики сплошных сред с учетом микроструктурных механизмов необратимого деформирования.

В данной работе построена модель, описывающая изменение механических характеристик облученных образцов. Для учета влияния ионизирующего излучения на свойства полимеров строятся соответствующие определяющие соотношения, включающие уравнения состояния при нешаровом тензоре деформаций и зависимости для времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды. Проведены расчеты диаграмм деформирования исходных и облученных образцов. Результаты расчетов хорошо описывают полученные в [3] данные.

Система основных уравнений модели имеет вид [13]:

$$\frac{du_i}{dt} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} = 0, \quad \frac{dE}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial r_j} = 0, \quad \frac{dG}{dt} + GW + W_0 G + \frac{1}{\tau} \left(G + \frac{3\rho}{2R} I \right) = 0,$$

$$G = \|g_{ij}\|, \quad W = \left\| \frac{\partial u_i}{\partial r_j} \right\|, \quad W_0 = \left\| \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right\|, \quad R = \frac{\partial \rho}{\partial g_{kk}}, \quad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial r_k},$$

$$\rho = \rho_0 \sqrt{\det G}, \quad \sigma_{ij} = -2\rho g_{ik} \frac{\partial E}{\partial g_{ki}}, \quad E = E(g_{ij}, S), \quad \tau = \tau(g_{ij}, S).$$

Здесь G – метрический тензор, σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, u_i – компоненты вектора скорости, ρ_0 , ρ – начальная и текущая плотности, E – удельная упругая (внутренняя) энергия, S – энтропия, τ – время релаксации касательных напряжений, t и r_j – время и пространственные координаты, $i, j = 1, 2, 3$, I – единичный тензор.

В данной работе будет использоваться одномерный вариант, для которого система принимает вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho r^{\nu})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u r^{\nu})}{\partial r} = 0; \\ \frac{\partial(\rho u r^{\nu})}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u^2 - \sigma_1) r^{\nu}]}{\partial r} + \nu r^{\nu-1} \sigma_2 = 0; \\ \frac{\partial[\rho(E + u^2/2) r^{\nu}]}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u(E + u^2/2) - \sigma_1 u) r^{\nu}]}{\partial r} = 0; \\ \frac{\partial h_2}{\partial t} + u \frac{\partial h_2}{\partial r} - \frac{\nu(3-\nu)u}{2} \frac{u}{r} = -\frac{d_2}{\tau}; \quad d_i = h_i - q; \\ \frac{\partial h_3}{\partial t} + u \frac{\partial h_3}{\partial r} - \frac{\nu(\nu-1)u}{2} \frac{u}{r} = -\frac{d_3}{\tau}; \quad q = \frac{1}{3}(h_1 + h_2 + h_3); \\ \sigma_i = \rho \frac{\partial E}{\partial h_i}; \quad T = \frac{\partial E}{\partial S}; \quad E = E(\delta, D, S); \quad \tau = \tau(\delta, D, S); \\ \delta = \frac{\rho}{\rho_0} = \exp(-h_1 - h_2 - h_3); \quad D = \frac{1}{2}(d_1^2 + d_2^2 + d_3^2). \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь t – время, r – пространственная координата, $\nu = 1, 2, 3$ в плоском, цилиндрическом и сферическом случаях соответственно, ρ – плотность, u – скорость, σ_i – главные напряжения, E – удельная внутренняя энергия, S – энтропия, h_i – логарифмы относительных удлинений элемента среды вдоль главных осей (компоненты тензора деформаций Генки), T – температура, τ – время релаксации касательных напряжений, δ, D – первый и второй инварианты тензора деформаций.

Для замыкания системы необходимо построение уравнения состояния, включающего в данном случае связь внутренней энергии при нешаровом тензоре деформаций и времени релаксации касательных напряжений с параметрами, характеризующими состояние среды. Принципы методики построения замыкающих соотношений описаны в [11, 12]. За основу принимается уравнение Ми-Грюнаизена, в которое добавляется слагаемое E_d , отвечающее за изменение энергии за счет работы на касательных напряжениях:

$$\begin{aligned} F(\delta, D, T) &= E_x(\delta) + E_d(\delta, D) + F_a(\delta, T) + F_e(\delta, T), \\ E_x(\delta) &= V_0 \left(\frac{a\delta^{m-1}}{m-1} + \frac{b\delta^{n-1}}{n-1} \right) - E_{x0} \Rightarrow P_x(\delta) = a\delta^m + b\delta^n - P_{x0}, \\ E_d(\delta, D) &= G(\delta)D = 2c_{0\perp}^2 \delta^{\xi_0} D, \\ F_a(\delta, T) + F_e(\delta, T) &= R_{\mu} T \sum_{i=1}^3 N_i \ln(1 - e^{-x_i}) + T N_e \ln(1 - e^{-x_e}), \\ x_i &= \frac{\Theta_i(\delta)}{T}, \quad \Theta_i = \Theta_{0i} \delta^{\gamma_{0i}}, \quad x_e = \frac{\theta_e(\delta)}{T}, \quad \theta_e = \theta_{0e} \delta^{\gamma_{0e}}, \end{aligned}$$

где $\delta = \rho/\rho_0$, D – второй инвариант тензора деформаций, c_{\perp} – поперечная скорость звука среды при $T = 0$, R_{μ} – универсальная газовая постоянная деленная на молярную массу, $a, b, m, n, \xi_0, \theta_{0e}, N_i, \Theta_{0i}, N_e, \theta_{0e}, \gamma_{0e}$ – константы, γ_{0i} – коэффициенты Грюнаизена (константы).

Выбор зависимости для времени релаксации касательных напряжений основывается на учете микроструктурных механизмов необратимых деформаций, реализующихся на различных структурных уровнях, причем зачастую одновременно. Это могут быть движения групп атомов, сегментов макромолекулы, каких-либо конгломератов или образований из сегментов, сворачивание или разворачивание молекулярных клубков и т. д. Каждый из таких элементов, вносящих свой вклад в процесс релаксации, является термоактивируемым, тогда зависимость времени релаксации от условий нагружения описывается соотношением Больцмана – Аррениуса [1]:

$$\tau(\hat{\sigma}, T) = \tau_0 \exp\left(\frac{U(\hat{\sigma}, T)}{RT}\right),$$

где τ_0 – некоторое характерное время релаксации данной кинетической единицы, U – энергия активации соответствующего процесса релаксации, $\hat{\sigma}$ – интенсивность касательных напряжений. Для учета механизмов разных масштабных уровней представим зависимость для τ в виде

$$\tau(\hat{\sigma}, T) = \sum_i \tau_i(\hat{\sigma}, T) = \sum_i \tau_{i0} \exp\left(\frac{U_i(\hat{\sigma}, T)}{RT}\right),$$

где каждое слагаемое соответствует механизму данного уровня.

Для определения параметров зависимости для времени релаксации касательных напряжений использован разработанный ранее метод [14].

Как было указано выше, облучение полимеров интенсивным высокоэнергетическим пучком приводит к изменениям в их структуре и меняет энергетические характеристики активации структурных механизмов деформирования. В соответствии с этим влияние облучения в рамках сформулированной модели можно учитывать через соответствующее изменение энергии активации. Ясно, что при деструкции молекул энергии уменьшаются, при сшивании – возрастают. В первом приближении будем считать, что изменение энергий активации линейно связано с дозой облучения:

$$U(\hat{\sigma}, T, I) = \hat{U}_0(I) - \alpha_0 \hat{\sigma} + \alpha_1 (\dot{\epsilon})(T - T_0)^n, \quad \hat{U}_0(I) = U_0 + \varphi_0 I,$$

где α_0 – свободный объем, α_1 – коэффициент упрочнения, зависящий от скорости деформации $\dot{\epsilon}$, T_0 – начальная температура, U_0 – начальная энергия активации, φ_0 – константа. Значения параметров в зависимостях определялись решением обратной задачи на основе минимизации отклонений расчетных диаграмм деформирования от экспериментальных.

На рис. 1 показаны графики линейной аппроксимации начальной энергии активации $\hat{U}_0(I)$ от дозы облучения для 1 – ПММА, 2 – СВМП, 3 – ПТФЭ. Значения найденных таким образом параметров приведены в табл. 2.

Таблица 2

Полимер	U_0 , кДж/моль	φ_0 , кДж/(моль*К)
ПММА	98,128	-0,0218
ПТФЭ	60,618	0,0417
СВМПЭ	69,188	0,0649

Сравнение рассчитанных диаграмм деформирования (сплошные линии) с экспериментальными данными [3] (точки) для полиметилметакрилата (ПММА), фторопласта (ПТФЭ), сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМП) показано на рис. 2–4 (скорость деформации – 10^{-3} с^{-1}). На рис. 2 кривая 1 – необлученный материал, 2–4 – 25, 150 и 300 кГр соответственно. Как следует из диаграмм, модуль Юнга в исходном и облученном состоянии практически не изменился. Вместе с тем, дозы в 150 и 300 кГр вызвали охрупчивание плексигласа и его разрушение при деформации, около 10 %.

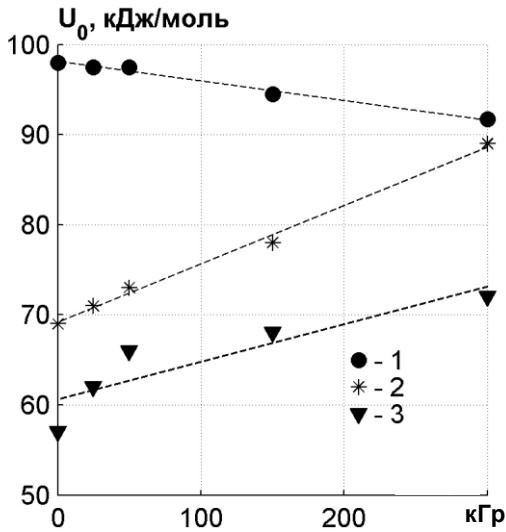


Рис. 1. Зависимость энергии активации от дозы облучения

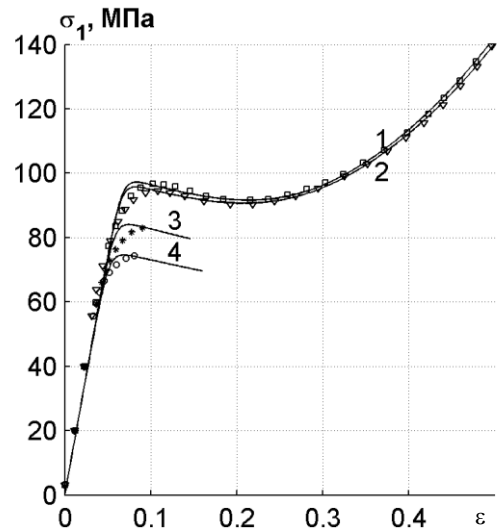


Рис. 2. Диаграммы деформирования облученного ПММА

На рис. 3–4 кривые 1 – необлученный материал, 2–5 – 25, 50, 150 и 300 кГр соответственно. В исследованном диапазоне для фторопласта облучение приводит к увеличению модуля Юнга и предела текучести с ростом дозы облучения.

В этом же диапазоне доз у сверхвысокомолекулярного полиэтилена происходит возрастание прочностных характеристик, что связано с сшиванием молекул под действием облучения.

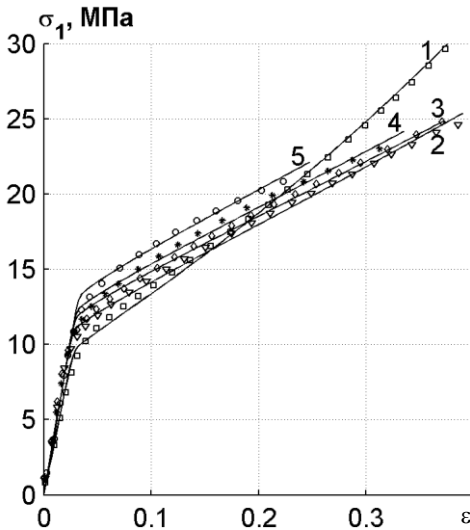


Рис. 3. Диаграммы деформирования облученного ПТФЭ

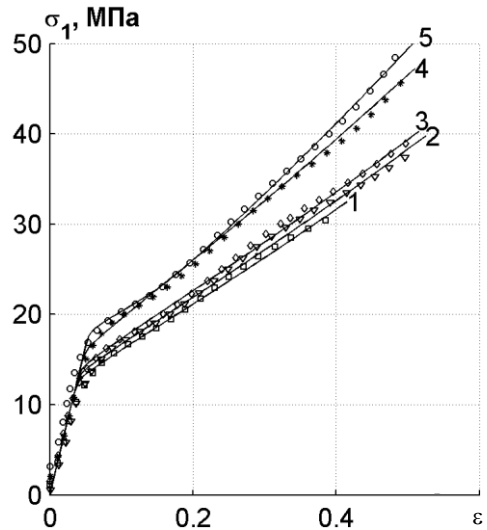


Рис. 4. Диаграммы деформирования облученного СВМП

Приведенные результаты характеризуют влияние облучения на поведение полимеров при квазистатических нагрузках. Представляет интерес проведение оценок влияния изменений структуры под действием облучения на протекание динамических и ударно-волновых процессов. С этой целью был решен ряд одномерных задач, в которых сравнивались процессы распространения ударных импульсов по исходному и облученному материалам. На рис. 5 показаны профили массовой скорости в распространяющихся стационарных ударных импульсах двух различных амплитуд (СВМП,

сплошные линии – необлученный, точки – облученный материалы, доза – 300 кГр). Рис. 6 иллюстрирует процесс затухания ударной волны при взаимодействии с догоняющей волной разрежения, обозначения те же, что и на рис. 5. Как следует из приведенных и аналогичных результатов расчетов, в рамках сформулированных моделей облучение не оказывает влияния на поведение материалов в ударно-волновых процессах. Представляется важным провести соответствующие экспериментальные исследования.

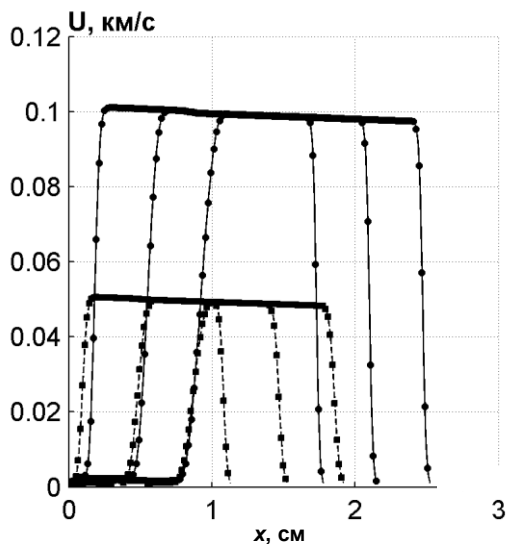


Рис. 5. Профили массовой скорости в стационарном ударном импульсе

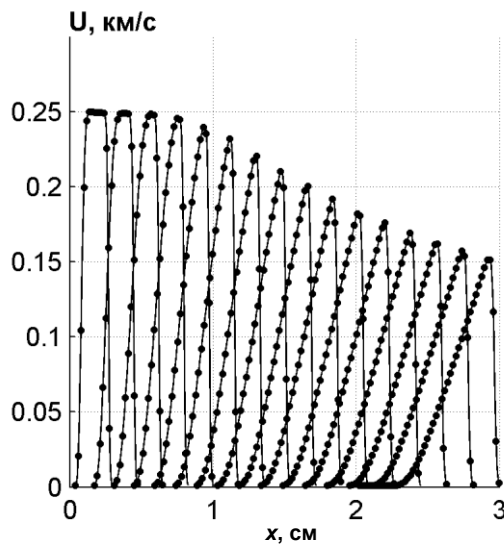


Рис. 6. Профили массовой скорости в затухающем ударном импульсе

Работа выполнена при поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 64 и гранта РФФИ № 12-01-00726.

Литература

1. Бартенев Г. М., Френкель С. Я. Физика полимеров. Ленинград: Химия, 1990.
2. Степанов В. А., Песчанская Н. Н., Шпейзман В. В. Прочность и релаксационные явления в твердых телах. Л.: Наука, 1984.
3. Мержиевский Л. А., Карпов Е. В., Авсейко Е. О. и др. Влияние ионизирующего излучения на механические свойства полимеров // Труды V Российской научно-технической конференции Ресурс и диагностика материалов и конструкций. [Электронный ресурс]. Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН, 2011. Электрон. оптич. диск, вкладка «Публикации».
4. Максвелл Д. К. Строение тел // Статьи и речи. М.: Наука, 1968. С. 182–192.
5. Voigt W. Ueber innere Reibung fester Korper, insbesondere der Metalle // Annalen der Physik. 1892. Vol. 283. P. 671–693.
6. Mulliken A. D., Boyce M. C. Mechanics of the rate-dependent elastic-plastic deformation of glassy polymers from low to high strain rates // International Journal of Solids and Structures. 2006. Vol. 43, N 5. P. 1331–1356.
7. Schuler K. W., Nunziato J. W., Walsh E. K. Recent results in nonlinear viscoelastic wave propagation // International Journal of Solids and Structures. 1973. Vol. 9. P. 1237–1281.
8. Barker L. M., Hollenbach R. E. Shock-Wave Studies of PMMA, Fused Silica, and Sapphire // J. of App. Phys. 1970. Vol. 41, N 10. P. 4208–4226.
9. Schuler K. W. Propagation of steady shock waves in polymethyl methacrylate // J. Mech. Phys. Solids. 1970. Vol. 18. P. 277–293.

10. Menikoff R. Constitutive model for polymethyl methacrylate at high pressure // J. of App. Phys. 2004. Vol. 96, N 12. P. 7696–7704.
11. Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д. Численное моделирование ударно-волновых процессов в металлах // ФГВ. 1984. Т. 20, № 5. С. 114–122.
12. Мержиевский Л.А. Моделирование динамического сжатия поликристаллического Al_2O_3 // ФГВ. 1998. Т. 34, № 6. С. 85–94.
13. Годунов С. К. Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978.
14. Мержиевский Л. А., Шамонин С. А. Построение зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды // ПМТФ. 1980. № 5. С. 170–179.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТАНДАРТОВ OpenMP И MPI ПРИ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИИ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

А. В. Миронов

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Введение

В 2007 году в математическом отделении ИТМФ была создана методика С-007 [1], предназначенная для решения методом Монте-Карло системы спектральных нестационарных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов в трехмерной неподвижной геометрии. Параллельный вариант программ методики был ориентирован на многопроцессорные вычислительные комплексы с распределенной памятью. Поэтому использовалась библиотека межпроцессорных обменов MPI [2].

Существуют задачи переноса излучения, геометрические данные которых занимают слишком большой объем памяти. При использовании стандарта MPI для каждого ядра процессора создается своя копия рабочих данных, что увеличивает риск переполнения оперативной памяти узла вычислительной системы. При этом большой объем данных, включающий в себя информацию о геометрии задачи и массивы констант, описывающих свойства изотопов, является одинаковым для каждого ядра. С точки зрения экономии оперативной памяти такое избыточное копирование нецелесообразно.

Узлы современной вычислительной системы, имеющие многоядерные процессоры и большой объем оперативной памяти, а также применение стандарта OpenMP [3] для создания параллельных программ на многопроцессорных системах с общей памятью позволяют решить вышеизложенную проблему нехватки ресурсов. Объявление не изменяющихся в процессе счета и одинаковых для каждого ядра данных «общими» (public) приводит к созданию единственной копии этих данных для каждого узла (или для каждого многоядерного процессора) многопроцессорной вычислительной системы. Применение стандартов MPI для обмена сообщениями между узлами (или между многоядерными процессорами) вычислительной системы и OpenMP на узле (процессоре) дает возможность более эффективно использовать оперативную память и решать ресурсоемкие задачи.

Вышеописанное решение было применено к процедурам методики С-007 путем изменения их кода с использованием программного интерфейса OpenMP.

В работе представлена общая схема изменений, внесенных в код процедур методики С-007, необходимых для реализации комбинированного подхода к распараллеливанию решения систем уравнений переноса. Исследуется влияние некоторых конструкций кода на скорость работы программ методики. Особое внимание уделено вопросам использования модульных переменных, опи-