УДК 677.022:19.86

ИССЛЕДОВАНИЕ РОБАСТНОСТИ СТАРЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ НИТЕЙ И ВОЛОКОН МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОЙ ИМИТАЦИИ

RESEARCH OF ROBUSTNESS OF AGING OF POLYMER THREADS AND FIBERS WITH COMPUTER SIMULATION

П.А. СЕВОСТЬЯНОВ, Т.А. САМОЙЛОВА, В.В. МОНАХОВ
P.A. SEVOSTYANOV, T.A. SAMOYLOVA, V.V. MONAKHOV

(Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство))
(Russian State University named after A.N. Kosygin (Technologies. Design. Art))
E-mail: petrsev46@yandex.ru

Приведены результаты анализа робастности на компьютерной модели старения полимерных нитей и волокон к распределениям и динамике потока дефектов и их интенсивности.

The article presents the results of the analysis of the robustness on a computer model of aging of polymeric threads and fibers to the distribution and flow dynamics of defects and their intensity.

Ключевые слова: полимерная нить, волокно, дефекты, распределения, робастность, числовые характеристики старения.

Keywords: polymer thread, fiber, defects, distribution, robustness, numerical characteristics of aging.

Исследования природы износа, старения, деструкции и разрушения полимерных нитей и волокон показали, что механизм этих явлений принципиально отличен от аналогичных процессов в кристаллических и аморфных телах. В основе этого механизма лежит разрушение межмолекулярных связей под действием внешних факторов, таких, например, как радиация, что проявляется в возникновении дефектов, количество которых постепенно увеличивается, а область действия нарастает [1], [2]. Накопление и распространение влияния дефектов на все большую часть нити ведет к изменению ее свойств и потере функциональности. Представляется перспективным использовать компьютерное моделирование как инструмент для теоретического анализа этих процессов [3].

Модель старения полимерной нити или волокна построена на следующих представлениях о механизме этого процесса. Возникающий в нити дефект захватывает некоторую область вокруг центра возникновения. Интенсивности дефектов и размеры области их влияния на свойства нити различны, причем интенсивность влияния тем меньше, чем дальше участок нити от центра дефекта. Обозначим n(t) число дефектов, возникших в нити к моменту времени t; D(i) – интенсивность, c(i) – координата и tc(i) – момент возникновения i-го дефекта; f (x, i, t) – распределение интенсивности i-го дефекта по длине L нити, $0 \le x \le L$. Вид этой функции зависит от механизма распространения дефекта по нити. Далее предполагаем, что эти функции одинаковы для всех дефектов и отличаются только параметрами для разных дефектов. Суммарная интенсивность дефектов на момент t в точке x нити равна:

$$\begin{aligned} d(x,t) &= \sum_{i=1}^{n(t)} D(i) f(\Delta x, \Delta t), \\ \Delta x &= x - c(i), \\ \Delta t &= t - tc(i). \end{aligned} \tag{1}$$

Например, если распределение дефекта f(x,i,t) моделировать распределением Лапласа [4] с зависящей от времени возникновения дефекта характерной длиной области влияния дефекта a(i,Δt), то формула (1) преобразуется к виду:

$$d(x,t) = 0{,}5 \sum_{i=1}^{n(t)} \frac{D(i)}{a(i,\Delta t)} \exp\left(-\frac{|\Delta x|}{a(i,\Delta t)} \right). \tag{2}$$

При диффузионном механизме распространения дефекта вдоль нити функция f(x,i,t) является нормальным распределением с модой в центре дефекта и дисперсией $S^2(i, t) = \sigma^2(i)\,\Delta t$, нарастающей с ростом времени [4]. В этом случае функция d(x,t) будет равна:

$$d(x,t) = \sum_{i=1}^{n(t)} \frac{D(i)}{\sigma(i)\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{(\Delta x)^2}{2\sigma^2(i)\Delta t} \right). \tag{3}$$

В тех случаях, когда область влияния дефекта не меняется со временем, параметры a(i,Δt) = a(i) и S(i,Δt) = S(i) не зависят от времени. Для любых распределений f(x, i, t) область распространения каждого дефекта много меньше длины нити L. Если в процессе эксплуатации или хранения нить находится в стационарных условиях, то можно принять, что моменты t(i) возникновения дефектов образуют пуассоновский поток со средним интервалом времени τSr между моментами появления дефектов. Одним из важных преимуществ моделирования является возможность использования условных единиц для параметров и переменных, что делает выводы из результатов моделирования более общими, пригодными для целых классов подобных моделируемых систем и процессов. Далее считаем, что длина нити L = 1000, центры дефектов xc(i) с одинаковой вероятностью могут возникать в любой точке длины нити, интервалы τ распределены по экспоненциальному закону со средним интервалом времени τSr = 1. Средняя интенсивность дефекта Dsr = 1, а интенсивности D(i) – случайные величины, также распределенные по экспоненциальному закону. Значения a(i) и S(i) у каждого дефекта – случайные величины, распределенные по треугольному закону распределения в пределах от нуля до максимального значения aMax = 2 и sMax = 2.

В задачах старения полимерных нитей наибольший интерес представляет время, за которое в результате накопления дефектов их суммарная интенсивность d (x, t) достигнет в некоторой точке нити предельного уровня D_{max}, превышение которого означает непригодность нити для дальнейшей эксплуатации. Первое достижение этой границы функцией d (x, t) к некоторому моменту T является случайным событием, а сама задача оценки T относится к категории задач о выбросах вероятностных процессов и достижении ими границ [4]. Аналитическое решение задачи в рассматриваемом случае возможно лишь в простейших частных случаях. Поэтому дальнейший анализ выполнен численными методами с применением метода Монте-Карло. Ниже приведен алгоритм оценки T.

1. Задание начальных значений $i = 0$; $t = 0$; $d(x, t) = 0$, $0 \le x \le L$.
2. Моделирование появления нового дефекта: $i = i + 1$. Генерация атрибутов i-го дефекта: $\tau(i)$; $D(i)$; $c(i)$; $a(i)$ или $S(i)$.
3. Переход к моменту времени появления нового дефекта: $t = t + \tau(i)$.
4. Вычисление суммы (2) или (3) с учетом i-го дефекта.
5. Поиск $dMax = \max\{d(x, t)\}$.
6. Если $dMax \le Dmax$, то возврат к п.2.
7. $T = t$. Вывод или сохранение значений T, $n = i$; dMax, $d(x, T)$.

Поскольку значения $\tau(n)$, $D(n)$ и $c(n)$ для каждого дефекта – случайные, то и результирующие значения T, n и dMax являются случайными.

Для робастной оценки статистических характеристик T, n и dMax в соответствии с методом Монте-Карло было выполнено Npovt прогонов алгоритма при следующих значениях параметров модели и условиях моделирования (все единицы измерения условные): $L = 2000$, число точек дискретизации длины нити $M = 10000$, величины интенсивности дефектов $D(i)$ и интервалы $\tau(i)$ распределены по экспоненциальному закону с соответствующими средними $Dsr=1$ и $TauSr = 1$, координаты центров дефектов распределены равномерно от 0 до L. Предельно допустимый уровень интенсивности дефектов $Dmax = 3$. Число повторных прогонов алгоритма составило $Npovt = 10000$. По выборкам T, n и dMax для моделей, основанных на формулах (2) и (3), найдены оценки числовых характеристик, приведенные в табл. 1. Это минимальное Min и максимальное Max значения выборочных данных, модальное Mod, медианное Med, среднее Sr, среднеквадратическое СКО значения, коэффициенты вариации CV, асимметрии КА и эксцесса КЭ. Была проверена гипотеза о незначимом различии между моделями (2) и (3) при прочих равных условиях моделирования. Гипотеза проверялась по критерию однородности Смирнова [5] по выборочным значениям случайных величин T и n не противоречит этим данным с вероятностью ошибки при отклонении гипотезы не менее 0,83. Поэтому далее рассматривалась только модель на основе формулы (3). Подбор наиболее близкого к выборкам типового распределения по критерию максимального правдоподобия показал, что наиболее близким является распределение Вейбулла [4], [5], что соответствует модели броуновского движения и достижения границы случайного блуждания. Отметим, что распределения величины dMax в отличие от T и n для формул (2) и (3) значимо отличаются друг от друга. Поэтому при исследовании этой величины необходимо располагать достаточно достоверной информацией о функции $f(x, i, t)$.

Таблица 1

Параметр	Выборка					
	T(2)	N(2)	dMax(2)	T(3)	N(3)	dMax(3)
Min	3,034e-4	1	3,00	0,0003	1	3,00
Max	61,81	63	438,03	52,55	57	576,23
Mod	3,037e-4	1	3,00	0,0003	1	3,00
Med	4,23	4	4,88	4,28	4	5,05
Sr	6,08	6,06	7,18	6,20	6,18	7,57
СКО	6,09	5,55	10,32	6,19	5,60	11,90
CV, %	100,1	91,5	143,8	99,9	90,7	157,2
КА	1,99	2,02	16,18	1,93	1,94	20,72
КЭ	9,00	9,32	468,4	8,13	8,32	735,0

Для анализа робастности модели было выполнено сравнение результатов моделирования по выборкам T, n и dMax, полученным при экспоненциальных и равномерных распределениях величин $\tau(i)$ и $D(i)$. Соответствующие выборки обозначены Tu, nu и dMaxu, когда $\tau(i)$ имеет равномерное распределение с тем же средним значением, и

Te, ne и dMaxe, когда D(i) имеет равномерное распределение, Tuu, nuu и dMaxuu, когда обе величины имеют равномерное распределение.

Выборки сравнивались попарно по критерию однородности Смирнова. Результаты оценки числовых параметров распределений T, n и dMax при проверке робастности модели приведены в табл. 2. Установлены значимые различия в распределениях выборочных значений T, n и dMax при разных модельных распределениях интервалов между моментами появления дефектов τ(i) и их интенсивностей D(i). Таким образом, обнаружена чувствительность результатов моделирования к выбору законов распределения параметров возникновения дефектов, приводящих к старению нитей и волокон.

Таблица 2

Параметр	Выборки								
	Tu	nu	dMaxu	Te	ne	dMaxe	Tuu	nuu	dMaxuu
Min	0,0002	1	3,001	0,0019	1	3,000	0,0021	1	3,000
Max	56,65	47	423,47	57,72	58	582,71	57,40	55	605,90
Mod	0,0002	1	3,001	0,0019	1	3,000	0,0021	1	3,000
Med	4,17	4	4,60	4,36	4	5,05	4,28	4	4,56
Sr	5,98	5,97	6,59	6,15	6,14	7,49	6,05	6,06	6,48
СКО	5,94	5,37	9,09	5,80	5,61	10,91	5,76	5,60	9,63
CV, %	99,3	89,93	138,0	94,3	91,3	145,7	95,1	92,3	148,6
КА	1,96	1,85	17,8	1,98	2,01	22,03	2,05	2,07	30,01
КЭ	8,54	7,53	581,8	9,03	9,14	913,5	9,20	9,20	1605,0

ВЫВОДЫ

1. Разработана компьютерная модель статистической динамики старения полимерных нитей и волокон на основе появления и распространения по длине нити дефектов с различной интенсивностью влияния на свойства нитей.
2. Установлено, что продолжительность срока службы нитей распределена по закону распределения Вейбулла.
3. Анализ робастности модели показал необходимость получения информации о законах распределения интервалов между моментами появления дефектов и интенсивностей дефектов. Вид этих распределений значимо сказывается на оценках показателей старения и износа полимерных нитей и волокон.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бокшицкий М.Н.* Длительная прочность полимеров. – М.: Химия, 1978.
2. *Бартенев Г.М.* Прочность и механизм разрушения полимеров. – М.: Химия. 1984.
3. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров //Отв. редактор к.ф.-м.н. В.А. Иванов, д.ф.-м.н. А.П. Рабинович, акад. А.Р. Хохлов. – М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2009.
4. *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения / Пер. с англ. Р.Л. Добрушина, А.А. Юшкевича, С.А. Молчанова. – т.1. – М.: Мир, 1967; т.2 – М.: Мир, 1967.
5. *Большев Л.Н.* Таблицы математической статистики. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1983.

REFERENCES

1. Bokshickij M.N. Dlitel'naja prochnost' polimerov. – M.: Himija, 1978.
2. Bartenev G.M. Prochnost' i mehanizm razrushenija polimerov. – M.: Himija. 1984.
3. Metody komp'juternogo modelirovanija dlja issledovanija polimerov i biopolimerov //Otv. redaktor k.f.-m.n. V.A. Ivanov, d.f.-m.n. A.P. Rabinovich, akad. A.R. Hohlov. – M.: Knizhnyj dom "LIBROKOM", 2009.
4. Feller V. Vvedenie v teoriju verojatnostej i ee prilozhenija / Per. s angl. R.L. Dobrushina, A.A. Jushkevicha, S.A. Molchanova. – t.1. – M.: Mir, 1967; t.2 – M.: Mir, 1967.
5. Bol'shev L.N. Tablicy matematicheskoj statistiki. – M.: Nauka. Glavnaja redakcija fiziko-matematicheskoj literatury, 1983.

Рекомендована кафедрой автоматизированных систем обработки информации и управления. Поступила 10.04.17.