



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 1776696 B

(45) 授权公告日 2010. 09. 22

(21) 申请号 200510124690. 2

(22) 申请日 2005. 11. 07

(30) 优先权数据

2004-330846 2004. 11. 15 JP

(73) 专利权人 住友橡胶工业株式会社

地址 日本国兵库县

(72) 发明人 内藤正登

(74) 专利代理机构 上海市华诚律师事务所

31210

代理人 徐申民 董红曼

(51) Int. Cl.

G06F 17/50(2006. 01)

(56) 对比文件

US 2003/0055601 A1, 2003. 03. 20, 全文.

CN 1532034 A, 2004. 09. 29, 全文.

JP 特开 2002-365205 A, 2002. 12. 18, 全文.

审查员 李佳

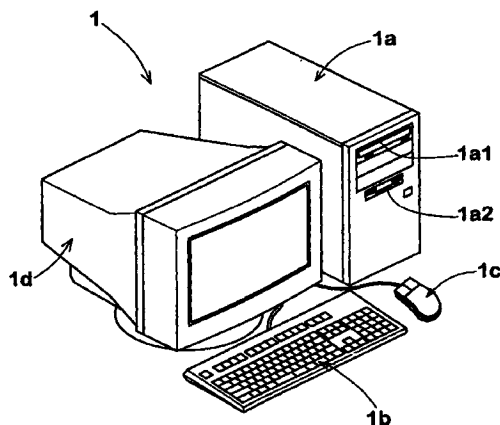
权利要求书 1 页 说明书 11 页 附图 19 页

(54) 发明名称

模拟橡胶材料形变的方法

(57) 摘要

一种模拟橡胶材料形变的方法,所述橡胶材料包含由至少一种填料粒子制成的填料部分和围绕该填料部分的橡胶部分,所述方法包括下面的步骤:将橡胶材料分离成一定数目的构成橡胶材料模型的基元;基于预设条件对橡胶材料模型进行形变计算;从形变计算中获取与所述橡胶模型的物理值分布相关的数据;以及显示所述数据;其中所述分离步骤包括如下步骤:将填料部分分离成一定数目个构成填料模型的基元;以及将橡胶部分分离成一定数目个位于填料模型周围的橡胶模型的基元,所述橡胶模型具有粘弹性随应变率变化的应变率相关性,其中所述橡胶模型包括:接触围绕着的所述填料模型并具有 1~20 nm 的厚度的界面模型和位于所述界面模型外围的基质模型,所述界面模型的粘弹性比所述基质模型的更软。



1. 一种模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述橡胶材料包含由至少一种填料粒子制成的填料部分和围绕该填料部分的橡胶部分,橡胶模型包含在橡胶材料模型中,所述方法包括下面的步骤:

将所述橡胶材料分离成一定数目的构成橡胶材料模型的基元;

基于预设条件对所述橡胶材料模型进行形变计算;

从所述形变计算中获取与橡胶模型的物理值分布相关的数据;以及

显示所述数据;其中

所述分离步骤包括如下步骤:

将所述填料部分分离成一定数目的构成填料模型的基元;以及

将所述橡胶部分分离成一定数目的位于所述填料模型周围的橡胶模型的基元,所述橡胶模型具有粘弹性随应变率变化的应变率相关性,其中所述橡胶模型包括:

接触围绕着的所述填料模型并具有 1 ~ 20nm 的厚度的界面模型和

位于所述界面模型外围的基质模型,所述界面模型的粘弹性比所述基质模型的更软。

2. 如权利要求 1 所述的模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述方法进一步包括以图形的方式显示所述至少一种数据的步骤。

3. 如权利要求 1 所述的模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述数据包括橡胶模型的每个基元的应力和 / 或能量损耗。

4. 如权利要求 1 所述的模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述应变率相关性仅被限定在所述界面模型中。

5. 如权利要求 1 所述的模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述界面模型的厚度设置在 5 ~ 10nm 的范围内。

6. 如权利要求 1 所述的模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述进行形变计算的步骤包括如下步骤:

在 10 ~ 100Hz 的低形变频率下,进行所述橡胶材料模型的第一次形变模拟;

通过使用第一次形变模拟的结果,计算表示所述橡胶材料模型的低速形变的指数 X1;

在 10^4 ~ 10^6 Hz 的高形变频率下,进行所述橡胶材料模型的第二次形变模拟;

通过使用第二次形变模拟的结果,计算表示所述橡胶材料模型的高速形变的指数 X2;

计算指数 X1 和 X2 的和;以及

重复所述第一次形变模拟和第二次形变模拟同时改变所述橡胶材料模型的至少一个参数,直至指数 X1 和 X2 的和为最大值。

7. 如权利要求 6 所述的模拟橡胶材料形变的方法,其特征在于,所述指数 X1 和 X2 根据如下公式计算:

$$X1 = K1 \cdot \tan \delta_L + K2 \cdot E_L^*^{-1} \text{ 和}$$

$$X2 = K3 \cdot \tan \delta_H, \text{ 其中}$$

“K1”、“K2”和“K3”为常数,“ $\tan \delta_L$ ”表示所述填料部分在 10 至 100Hz 范围的频率下的损耗角正切值,“ E_L^* ”表示所述填料部分在 10 至 100Hz 的形变频率下的复数弹性模量以及“ $\tan \delta_H$ ”表示所述填料部分在 10^4 至 10^6 Hz 的形变频率下的损耗角正切值。

模拟橡胶材料形变的方法

技术领域

[0001] 本发明涉及一种很精确模拟橡胶材料形变的方法,该橡胶材料含有:由至少一种填料粒子制成的填料部分;以及由橡胶制成并围绕着该填料部分的橡胶部分。

背景技术

[0002] 橡胶材料被广泛应用于轮胎和体育用品等工业制品。为减少实验生产的故障和成本,运用计算机对例如橡胶材料的形变过程进行了模拟。橡胶材料的传统模拟方法如下列文章所述。

[0003] (1) 橡胶弹性材料的大拉伸性能的三维构成模型, Ellen M. Arruda 和 Marry C. Boyce, 固体力学和物理杂志, 第 41 卷, 第 2 期, 389-412 页 (1993 年 2 月)。

[0004] (2) 弹性材料随时间的大应变性能的构成模型, J. S. BERGSTROM 和 M. C. BOYCE, 固体力学和物理杂志, 第 46 卷, 第 5 期, 931-954 页 (1998)。

[0005] 文献 (1) 描述了使用分子链网络模型理论分析橡胶材料的方法。然而, 根据文献中描述的方法, 一般的橡胶材料的应变率相关性不能重复。

[0006] 应变率相关性是显示橡胶材料根据其应变率的不同粘弹性特征的特征。也就是说, 当在同一橡胶试样上施以不同频率 (例如, 10Hz 和 1, 000Hz) 的振幅应变时, 各个频率下的能量损耗为不同的值。文献 (1) 没有考虑到这种应变率相关性。因此, 不同频率的材料特性不能由一种橡胶材料模型得出精确的判断。

[0007] 这里, 以充气轮胎作为橡胶制品的例子, 同时考虑其两个性能, 即燃油效率和抗滑性能 (指轮胎在加速和 / 或减速时对道路表面的贴合指数)。首先, 为了提高轮胎的燃油效率, 当车辆以一般的稳定速度行驶时, 其胎面橡胶采用小能量损耗的橡胶是有效的。也就是说, 当评价燃油效率时, 有必要检验橡胶在约从 10 到 100Hz 频率的低应变率下的能量损耗。

[0008] 另一方面, 为了提高抗滑性能, 胎面橡胶必须采用可形变橡胶, 以使橡胶在接触到路面的瞬间以其良好的突起和凹陷与路面相配合。由于这个目的, 为了提高抗滑性能, 橡胶在高速形变的时候最好具有高能量损耗。当评价抗滑性能时, 有必要检验橡胶在约从 10, 000 到 1, 000, 000Hz 频率的高应变率下的能量损耗。

[0009] 图 21 显示的是对轮胎用橡胶材料运用频率 - 温度换算定律计算得到的应变率频率和能量损耗之间的关系, 此关系用实线表示。如图所示, 如果频率变化, 能量损耗也发生大幅变化。但是根据文献 (1) 的方法, 即使橡胶模型的应变率发生变化, 只能获得如双短划线所示的相等的能量损耗。这样难以获得研发橡胶的有用数据。应变率是形变频率和应变的乘积。

[0010] 文献 (2) 中讲到, 橡胶模型是依照混合有填料的橡胶材料建立的, 并考虑了应变率相关性。当计算橡胶材料的形变时, 如何处理填料和橡胶之间的界面是个重要的问题。各种研究结果表明, 在界面中, 橡胶和填料之间的滑动或摩擦会导致较高的能量损耗。因此, 为了对橡胶材料进行精确的模拟, 分别对填料和橡胶建立模型是很重要的。

[0011] 然而, 根据文献 (2) 所描述的方法, 填料和橡胶被整体而不是分离的建立模型。按

照这种方法,并非没有可能获得例如橡胶和填料之间的界面状态和形变下的应力分布状态的信息。

[0012] 发明内容

[0013] 本发明的主要目的是提供一种通过包括填料和橡胶之间界面的状态而能够对橡胶材料的形变状态等进行精确模拟的方法。

[0014] 根据本发明,模拟包含由至少一种填料粒子制成的填料部分和围绕该填料部分的橡胶部分的橡胶材料的形变的方法包括下面的步骤:

[0015] 将橡胶材料分离为一定数目的构成橡胶材料模型的基元;

[0016] 基于预设条件对橡胶材料模型进行形变计算;

[0017] 从形变计算中获取与所述橡胶模型的物理值分布相关的数据;以及显示所述数据;其中所述分离步骤包括如下步骤:

[0018] 将填料部分分离成一定数目的构成填料模型的基元;以及

[0019] 将橡胶部分分离成一定数目的构成位于填料模型周围的橡胶模型的基元,所述橡胶模

[0020] 型具有粘弹性随应变率变化的应变率相关性,其中所述橡胶模型包括:接触围绕着的所述填料模型并具有1~20nm的厚度的界面模型和位于所述界面模型外围的基质模型,所述界面模型的粘弹性比所述基质模型的更软。

[0021] 根据本发明的模拟方法,用于形变计算的橡胶材料模型包括填料模型和围绕该填料模型的橡胶模型。因此,有可能知道填料周围的物性值分布(如应力和能量损耗)。因此,能够进行更详细和更具体的分析。这样的物性值数据被看作是一张分布表,这成为用于研发橡胶和/或填料材料的有用信息资料。

[0022] 此外,根据本发明的模拟方法,应变率相关性被限定在橡胶模型内。用一台物理性能测试仪对橡胶施加周期性的应变并测试其粘弹性。然而,电流测量方法,应变频率低至1,000Hz。这对于评价橡胶产品如胎面橡胶的抗滑性能来说是不够的。如果将应变率相关性应用于橡胶模型,不能通过测试仪测得的高尺度的粘弹性可被估计。

[0023] 橡胶模型优选包括界面模型和基质模型。混合有填料的橡胶在填料和橡胶之间具有物理界面。当填料是炭黑时,界面是一个物理耦合。当填料是二氧化硅时,界面是依靠偶合剂的化学耦合。这样的耦合将通过调整界面模型的橡胶的粘弹性以非真方式较精确地重复。因此,有可能充分研究和评价偶合剂。

[0024] 附图说明

[0025] 本发明的目的和优点可从通过参考以下对当前的最佳实施方式的描述并结合其中的附图得到最佳的理解:

[0026] 图1是本发明使用的计算机设备的一个例子的立体图;

[0027] 图2是根据本发明最佳实施方式的程序流程图;

[0028] 图3显示的是橡胶材料模型(微观结构)的一个最佳实施方式的图示;

[0029] 图4显示的是炭黑的形状图;

[0030] 图5是用来解释橡胶模型形变的图;

[0031] 图6是橡胶材料的放大图,包括一个分子链结构,一个放大的分子链,以及一个放大的链段;

[0032] 图 7 显示的是橡胶材料的网状结构的一个例子以及它的一个八链橡胶材料模型的放大图；

[0033] 图 8 是用来解释分子链的连接点断裂的图；

[0034] 图 9 是参数 λ_c 与单个分子链平均链段数 N 的关系图；

[0035] 图 10 显示的是作为基质模型和界面模型的模拟结果的实际应力 - 应变关系；

[0036] 图 11 是形变模拟的程序流程图；

[0037] 图 12 是用来解释均化法的整体结构和微观结构的关系图；

[0038] 图 13 显示的是作为橡胶材料模型（整体结构）的模拟结果的真实应力 - 应变关系图；

[0039] 图 14 是显示每个模型的模拟结果的真实应力 - 应变关系图；

[0040] 图 15 是显示橡胶材料模型的模拟结果的真实应力 - 应变关系图；

[0041] 图 16 是显示橡胶材料模型的能量损耗与硬度之间的关系图；

[0042] 图 17 橡胶材料模型的应力分布图；

[0043] 图 18 橡胶材料模型的能量损耗分布图；

[0044] 图 19 是应力分布图,其中 (A) 是低速形变, (B) 是高速形变；

[0045] 图 20 是胎面橡胶的开发程序流程图；以及

[0046] 图 21 显示的是使用频率 - 温度换算定律获得的橡胶材料的能量损耗与应变率之间的关系图。

[0047] 具体实施方式

[0048] 下面将结合附图对本发明的最佳实施方式加以描述。图 1 显示的是执行本发明模拟方法的计算机设备。计算机设备 1 包括主机 1a, 键盘 1b 和作为输入手段的鼠标 1c, 以及作为输出手段的显示器 1d。虽然未显示, 主机 1a 适当装备有中央处理器 (缩写为 CPU), 只读存储器 ROM, 暂时存储器, 大容量存储装置如磁盘, 以及驱动 1a1 和作为 CD-ROM 或软盘的 1a2。大容量存储装置其内存储用于执行方法的处理步骤 (即, 程序), 这将在后面描述。

[0049] 图 2 显示的是根据本发明模拟方法的处理步骤的一个实施例。在本实施方式中, 首先建立橡胶材料模型 (步骤 S1)。在图 3 中, 可以看到作为微观结构 (可被称作“单元”) 的橡胶材料模型 2 的一个例子。

[0050] 为了形成橡胶材料模型 2, 将待分析的包含由至少一种填料粒子制成的填料部分和围绕该填料部分的橡胶部分的橡胶材料的微观区域分离成一定数目的小基元 2a, 2b, 2c...。对每个基元 2a, 2b, 2c... 给出使用数值分析方法进行形变计算所必需的参数。数值分析法包括例如, 有限元法, 有限容积法, 有限差分运算, 或边界元法。

[0051] 参数包括例如, 网点坐标值, 基元形状, 和 / 或每个基元 2a, 2b, 2c... 的材料性能。此外, 作为例如二维平面的三角形或四边形基元和作为三维基元的四面或六方基元用于每个基元 2a, 2b, 2c...。因此, 橡胶材料模型 2 是计算机设备 1 可利用的的数值数据。在该实施例中, 显示了二维橡胶材料模型 2。

[0052] 本实施方式的橡胶材料模型 2 将在下文所描述的形变模拟中接受处于平面变形状态下的分析。因此, 橡胶材料模型 2 在 Z 方向 (垂直于图片的方向) 上没有应变。本实施方式的橡胶材料模型 2 的垂直和水平尺寸设定为 300×300 纳米。

[0053] 橡胶材料模型 2 包含至少一个填料模型 3, 其中填料部分被建模成一定数目的基

元,和一个橡胶模型 4,其中橡胶部分被建模成设置在填料模型周围的一定数目的基元。在所述最佳实施方式中,橡胶模型 4 包含至少一个与填料模型 3 周围接触的界面模型 5,和一个设置在界面模型外围的基质模型 6。换句话说,界面模型 5 将填料模型 3 和基质模型 6 之间的空间填充。在图 3 中,填料模型 3 用白色部分表示,基质模型 6 用深色部分表示,界面模型 5 用淡灰色部分表示。

[0054] 在本实施方式中,填料模型 3 是基于炭黑建立模型的。应当注意填料不局限于炭黑,而可以是例如二氧化硅等。在本例中,填料模型 3 的物理形状是根据用电子显微镜成像的填充在实际橡胶中的炭黑粒子的形状确定的。图 4 显示的是炭黑的二次颗粒 CB。更具体地说,二次颗粒 CB 的结构中,许多个各自自由直径约 10 纳米的碳原子组成的球形一次颗粒 7 不规则的三维键合。本实施方式的填料模型 3 被设为在上述炭黑的二次颗粒 CB 的平面形状中的标准。

[0055] 炭黑具有比基质橡胶硬几百倍的硬度(纵弹性模数)。因此,填料模型 3 被定义为以纵弹性模数作为材料性质的弹性体,应力和应变在形变计算中成正比,以至于在本实施方式中不产生能量损耗。一个单元中填料模型 3 的数目基于分析对象的橡胶材料的填料混合量来作适当设定。

[0056] 界面模型 5 不必限于连续地围绕填料模型 3,但是最好在整個范围内围绕填料模型 3。在本实施例中,界面模型 5 的厚度的较小。界面模型 5 的厚度 t 优选设置为从 1 至 20nm,进一步优选从 5 到 10nm。

[0057] 基质模型 6 包含一定数目的三角形和 / 或四边形基元,并在单元 U 中构成橡胶材料模型 2 的主要部分。

[0058] 在本发明中,在橡胶模型 4 中定义应变率相关性,其中根据应变率产生的应力是变化的。图 5 是用来解释具有应变率相关性的橡胶模型 4 的形变规律的概念图。橡胶模型 4 的每个基元可用一个模型表示,其中第一形变网络 A 和第二形变网络 B 彼此平行的连接。在整个系统中产生的应力 S 是在第一形变网络 A 中产生的应力与在第二形变网络 B 中产生的应力之和。由于网络 A 和 B 彼此并联耦合,在网络 A 和 B 中产生的应变(伸长)是相同的。

[0059] 第一形变网络 A 可以表示为等同于一个盘簧。在第一形变网络 A 中产生的应力设为是一个与弹簧的伸长(应变)成正比的值。此外,弹簧的伸长仅由于负重而产生。因此,不依靠应变率的应力产生于第一形变网络 A 中。

[0060] 第二形变网络 B 可表示为一个模型,其中盘簧 e 和减震器 p 以串联方式彼此相连。减震器 p 是一个减振设备,其中含有气缸密封液,以及一个带有开口的活塞在汽缸中移动。该流体遵守牛顿粘度定律,例如是油。减震器 e 中产生与活塞移动速度成正比的阻力。整个第二形变网络 B 的伸长(应变)等于弹簧 e 和减震器 p 的伸长之和。第二形变网络 B 中产生的应力等于相当于弹簧 e 的伸长(应变)之的值。然而,弹簧 e 的伸长不是简单地根据负重决定,伸长还受到与其应变率相关的减震器 p 的阻力的影响。也就是说,第二形变网络 B 产生取决于应变率的应力。

[0061] 下面,基于形变网络 A 和 B 解释应力计算方法。

[0062] 第一形变网络 A:

[0063] 为计算第一形变网络 A 的应力,使用的是基于分子链网络模型理论的八链橡胶弹

性模型。以速率型施加以下式 (1) 所示的应力。

$$[0064] \quad \overset{\nabla}{S}_{ij} = -\dot{p}\delta_{ij} + \frac{1}{3}C^R\sqrt{N}\left\{\left(\frac{\zeta}{\sqrt{N}} - \frac{\beta}{\lambda_c}\right)\frac{A_{ij}A_{kl}}{A_{mm}} + \frac{\beta}{\lambda_c}(\delta_{ik}A_{jl} + A_{ik}\delta_{jl})\right\}\dot{\epsilon}_{kl} \dots (1)$$

[0065] 其中

$$[0066] \quad C^R = n \cdot k_B \cdot T$$

[0067] n : 单位体积的分子链数;

[0068] k_B : 玻尔兹曼常数;

[0069] T : 绝对温度;

[0070] N : 每个分子链的平均链段数;

[0071] A_{ij} : 左柯西 - 格林 (Cauchy-Green) 形变张量;

$$[0072] \quad \lambda_c^2 = \frac{1}{3}(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2);$$

[0073] $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_3^2$: 每个方向上的伸长率;

$$[0074] \quad \beta = L^{-1}\left(\frac{\lambda_c}{\sqrt{N}}\right);$$

[0075] $L(x)$: 郎之万 (Langevin) 函数;

$$[0076] \quad \zeta = \frac{\beta^2}{1 - \beta_c^2 \operatorname{csch}^2 \beta};$$

[0077] 以及

$$[0078] \quad \dot{p} = 100.$$

[0079] 如图 6 所示, 根据上述分子链网络模型理论, 橡胶材料“a”具有如微观结构“da”的网状结构。橡胶材料的网状结构包括许多个连接于连接点 b 且排布无序的分子链 c。连接点 b 包括分子间的化学连接点, 例如化学交联点。

[0080] 一个分子链 c 包含多个链段 d。一个链段 d 是上述理论中的最小重复结构单元。此外, 一个链段 d 通过连接多个基元 f 而成, 基元 f 中碳原子以共价键连接。每个碳原子绕着碳原子之间的键轴彼此作自由旋转。因此, 链段 d 能够整体弯曲成不同的形状。

[0081] 在上述理论中, 对于原子的波动周期而言, 连接点 b 的平均位置长期不变化。因此, 可以忽略连接点 b 的干扰。此外, 在两端具有两个连接点 b, b 的分子链 c 的端到端矢量被认为是随着将分子链嵌入的橡胶材料“a”的连续体一同变形的。

[0082] 如图 7 所示, 该理论还认为, 橡胶材料的宏观结构包含立方网状结构体 h, 在其中聚集有微观八链橡胶弹性模型 g。在一个八链橡胶弹性模型 g 中, 分子链 c 从位于立方中心的一个连接点 b1 延伸到位于立方体每个顶角上的八个连接点 b2, 如图 7 中右边的放大图所示。通过使用这种模型来计算橡胶材料“a”中产生的应力。

[0083] 为能够进行很精确的模拟, 在第一形变网络“A”中, 对文献 (1) 中提出的普通八链橡胶弹性模型按以下方法作了改进并使用。

[0084] 通过拉伸, 橡胶材料能够容许达百分之好几百的巨大应变。发明人等假定, 橡胶材料的巨大应变是在当如杂乱相缠的分子链 c 的连接点 b 等部分松弛时产生的。也就是说, 如图 8 所示, 当箭头 Y 所示的拉伸应力加到与同一个连接点 b 相连的分子链 c1, c2, c3 和 c4 上时, 每个分子链 c1 至 c4 伸长, 连接点 b 受到巨大的应变并趋向于破裂 (消失)。如图

8 右边所示,两个分子链 c1 和 c2 形成一个长的分子链 c5。分子链 c3 和 c4 以同样的方式动作。在本实施方式的方法中,为获得一个精确的结果,还要把这种分子链 c 的连接点 b 的减少考虑到式 (1) 中,如下文所述。

[0085] 这里,在如图 7 所示的网状结构体 h 中, k 个八链橡胶弹性模型各自沿着轴、高度和深度的方向连接。应当注意 k 是一个充分大的数。在相关网状结构 h 中包含的连接点 b 的总数称为“结合数”。假定结合数为“m”,网状结构 h 中分子链 c 的数目(即单位体积基质模型 3 的分子链数)为“n”, m 和 n 分别用下面的式 (2) 和式 (3) 表示。

$$[0086] \quad m = (k+1)^3 + k^3 \quad \dots (2)$$

$$[0087] \quad n = 8k^3 \quad \dots (3)$$

[0088] 由于“k”是足够大的数,当略去除 k 的三次方以外的数项后,上述等式可分别用下面的式 (4) 和 (5) 表示:

$$[0089] \quad m = 2k^3 \quad \dots (4)$$

$$[0090] \quad n = 4m \quad \dots (5)$$

[0091] 此外,由于即使橡胶模型 4 发生形变,包含在橡胶模型 4 内的分子链的链段的总数 N_A 不变,因此式 (6), (7) 和 (8) 成立。

$$[0092] \quad N_A = n \cdot N \quad \dots (6)$$

$$[0093] \quad N = N_A/n \quad \dots (7)$$

$$[0094] \quad N = N_A/4m \quad \dots (8)$$

[0095] 由式 (8) 可见,当橡胶的分子链的结合数 m 因负荷变形而减少时,单个分子链的平均链段数 N 必增加。换句话说,通过使用平均链段数 N 作为根据形变而具有不同值的可变参数,因伸长导致的分子链的结合数 m 的减少可在模拟中体现出来。这能够更为精确的模拟橡胶的形变机制,并有助于改进计算精确性。这里,负载形变是橡胶模型 4 的形变在记录时间内增大的形变。

[0096] 平均链段数 N 可用各种不同方法确定。例如,平均链段数 N 可在负载形变中基于与应变相关的参数增大。对与应变相关的参数没有特别限定,可以是例如应变,应变率,或应变的一次常量 I_1 。在本实施方式中,平均链段数 N 由下式 (9) 定义。该式显示,平均链段数 N 是相关橡胶模型 4 每个基元中的应变的一次常量 I_1 的函数(更具体地说,其参数 λ_c 平方根)。

$$[0097] \quad N(\lambda_c) = A + B \cdot \lambda_c + C \cdot \lambda_c^2 + D \cdot \lambda_c^3 + E \cdot \lambda_c^4 \quad \dots (9)$$

[0098] 式 (9) 是通过各种实验建立的一个例子,常数 A 至 E 可基于例如橡胶材料的单轴向拉伸测试的结果而方便的设置。例如,首先获得橡胶材料或分析对象的应力-应变曲线。随后,设定参数 n 和 N 使其沿着卸载时的曲线。从而可确定分子链的链段总数 $N_A (= n \cdot N)$ 。这里,由于分子链 c 的总链段数 N_A 在负载形变和卸载形变期间为同一值,因此推导出每个应变中的平均链段数 N,以在卸载期间符合该曲线。确定式 (9) 中的参数 A 至 E 以在负载时符合所确定的平均链段数 N。在本实施方式中, $N = 16$, 至于 N 在卸载形变期间的值,采用的是负载结束时的值。上述常数设置如下:

$$[0099] \quad A = +2.9493$$

$$[0100] \quad B = -5.8029$$

$$[0101] \quad C = +5.5220$$

[0102] $D = -1.3582$

[0103] $E = +0.1325.$

[0104] 在图 9 中显示了在橡胶模型 4 的每个基元的负载形变期间平均链段数 N 和参数 λ_c 之间的关系。当应变的相关参数 λ_c 增加时,平均链段数 N 也逐渐增加。在该例子中,参数 λ_c 的上限为 2.5。在下面描述的橡胶材料模型 2 的形变模拟中,在负载形变期间,橡胶模型 4 的每个基元的参数 λ_c 在恒定基础上计算。计算得到的 λ_c 代入式 (9) 中,并计算在相关基元的相关应变状态期间的平均链段数 N 。这里,平均链段数 N 的数值在橡胶模型 4 的卸载形变期间保持不变,其间负载在 1 分钟内持续降低。

[0105] 第二形变网络 B:

[0106] 基于分子链网络模型理论的八链橡胶弹性模型还应用于第二形变网络 B 的弹簧 e 中。因此,在第二形变网络 B 中产生的应力还使用上式 (1) 计算。然而,在第二形变网络 B 中产生了根据应变率的阻力,这对伸长比 λ_c 产生影响。

[0107] 伸长比 λ_c 是从在式 (1) 描述的条件下的分子链在每个方向上的主伸长计算得到的。在第二形变网络 B 中,每个主伸长 $\lambda_i^{(Be)}$ 按照下面的步骤计算。这里,下标“i”表示每个方向 ($i = 1, 2, \dots$),如果是二维,下标 i 表示 x 和 y。右上标“Be”是用来与第一形变网络 A 的主伸长区分的符号。

[0108] 首先,根据式 (10) 计算第二形变网络 B 中的相应剪切应力 $\tau^{(B)}$ 。在式 (10) 中, $\sigma^{(B)}$ 是在先前步骤中计算得到的第二形变网络 B 的相应应力。此外,减震器 p 的应变率通过使用相应剪切应力 $\tau^{(B)}$ 和 $\lambda_c^{(Bp)}$ 的值根据式 (11) 计算。式 (11) 中的 $\lambda_c^{(Bp)}$ 是减震器 p 的伸长比。该值是根据式 (1) 限定的方法,由最后的计算值 $\lambda_i^{(Bp)}$ (由下文所述的式 (14) 计算得到) 计算。

$$[0109] \quad \tau^{(B)} = \sqrt{\frac{1}{2}(\sigma^{(By)} \cdot \sigma^{(By)})} \quad \dots (10)$$

$$[0110] \quad \dot{\gamma}^{(Bp)} = \hat{c}_1 [\lambda_c^{(Bp)} - 1]^{c_2} \cdot \tau^{(B)m} \quad \dots (11)$$

[0111] 其中,参数 c_1 和 c_2 分别是根据橡胶材料确定的常数。

[0112] 减震器 p 的应变率 $D^{(Bp)}$ 由应变率通过下式 (12) 计算。减震器 p 的伸长由应变率 $D^{(Bp)}$ 通过下式 (13) 和 (14) 计算。这里,下标 t 表示时间步骤的计算, Δt 表示其增量。

$$[0113] \quad D^{(Bp)} = \dot{\gamma}^{(Bp)} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}\tau^{(B)}} \sigma^{(By)} \quad \dots (12)$$

$$[0114] \quad \dot{\lambda}_i^{(Bp)} \Big|_{t=t+\Delta t} = \lambda_c^{(Bp)} \Big|_{t=t} \cdot D_i^{(Bp)} \quad \dots (13)$$

$$[0115] \quad \lambda_i^{(Bp)} = \int \dot{\lambda}_i^{(Bp)} dt \quad \dots (14)$$

[0116] 第二形变网络 B 的弹簧 e 的每个伸长 $\lambda_i^{(Be)}$ 根据下式 (15) 计算。在式 (15) 中, λ_i 表示整个第二形变网络 B 的伸长比。

$$[0117] \quad \lambda_i^{(Be)} = \lambda_i / \lambda_i^{(Bp)} \quad \dots (15)$$

[0118] 第二形变网络 B 的应力通过将 $\lambda_i^{(Be)}$ 代入式 (1) 计算。将第一形变网络 A 的应力与第二形变网络 B 的应力相加,计算得到橡胶模型 4 的整体应力。该应力取决于应变率。这

种相关性基于式 (11) 中的每个材料常数 c_1 和 c_2 做调整。

[0119] 应变率相关性优选由界面模型 5 和基质模型 6 中至少一个、最好两个同时来确定。在本实施方式中,应变率相关性由界面模型 5 和基质模型 6 两者来确定。

[0120] 在本优选实施方式中,应当注意界面模型 5 具有不同于基质模型 6 的粘弹性。这里,粘弹性包括用任意形变率下的应力-应变曲线表示的特征,如图 10 所示。例如,本实施方式的界面模型 5 具有比基质模型 6 更软的粘弹性,这样对于界面模型 5 的应力-应变曲线相对于横轴的斜率比基质模型 6 的小,如图 10 所示。每个应力-应变曲线的滞后回线区域还是可变的。在应力相同的情况下,在本实施方式中,粘弹性特征被设置为界面模型 5 的应力比基质模型 6 的大。然而,并不局限于这样的实施方式。

[0121] 其次,使用所设置的橡胶材料模型 2 进行形变计算(模拟)(步骤 S3)。在图 11 中,显示了形变计算的具体程序的一个例子。在模拟中,首相将必要的输入数据输入计算机设备 1 中(步骤 S31)。输入数据包括,例如,用以构成橡胶材料模型 2 的数值数据,以及各种预置的边界条件。

[0122] 然后在计算机设备 1 中形成了每个基元的硬基质(步骤 S32),其后将整体结构的硬基质组装(步骤 S33)。整体结构的硬基质采用已知的节点位移和节点力(步骤 S34),并进行刚性式分析。确定未知的节点位移(步骤 S35),计算并输出物理量比如应变、应力,以及每个基元的主应力(步骤 S36 和 S37)。在步骤 S38 中,决定是否结束计算,如果计算不结束,重复步骤 S32 以后的步骤。

[0123] 形变计算可以使用工程系统分析应用软件(如,LS-DYNA 等,Livermore 软件技术公司(US)开发)和改进采用有限元法进行。

[0124] 在本实施方式中,为了模拟橡胶材料的形变,将橡胶整体模型 M 设置为如图 12 所示以用于均化法。整体模型 M 包含大量周期地设置的微观结构单元 U,其大小适合于计算机模拟。当用以模拟的区域由微观结构的重复而构成时,很难仅用有限元法直接分离。因此,均化方法被使用。该方法包括使用相当于分析区域的整体模型 M 对整体进行模拟的第一阶段,以及将结果转换到分析区域上任意点的微观结构(单元)上的第二阶段。

[0125] 此外,在均化方法中,采用了两组独立变量,表示整体模型 M 的宏观尺度的 x_1 和 x_2 ,以及表示橡胶材料模型 2 的单元 U 的微观尺度的 y_1 和 y_2 ,如图 12 所示。在均化方法中,不同尺度的各个独立量——微观尺度 y_1 , y_2 和宏观尺度 x_1 , x_2 ,被渐近展开。因此,能够获得周期地包括单元 U 在内的一定尺寸整体模型 M 的平均动态响应。渐近展开均化法是在数值计算方法中已经建立的方法。该方法在例如以下文献中有详细描述。

[0126] Higa, Y. 和 Tomita, Y. 著,具有 γ 主相沉淀物的镍基高温合金的机械性能计算预测,ICM8 学报(Victoria, B. C., 加拿大),先进材料和机械特征模型, (Ellyin, F., 和 Prove, J. W. 编著), III (1999), 1061-1066, Fleming 出版有限公司。

[0127] 在本实施方式中,式 (1) 和 (10) 的常数等设置如下:

$$[0128] \quad C_R = 0.268$$

$$[0129] \quad N = 6.6$$

$$[0130] \quad T = 296$$

$$[0131] \quad k_B = 1.38066 \times 10^{-29}$$

$$[0132] \quad N_A = 4.328 \times 10^{26}$$

[0133] 填料模型容积含量 :30%

[0134] 填料模型的纵向弹性模量 E :100MPa

[0135] 填料模型的泊松比 ν : 0.3。

[0136] 在形变模拟中,在整体模型 M 的分析区域内产生相等的单轴拉伸形变。使用两个张力条件,即,高速形变条件,其中应变率在如图 12 所示的 x_2 方向上等于 $1(/s)$,以及低速形变条件,其中应变率等于 $0.01(/s)$ 。在任何情况下,应变设为 0.15,然后,消除负载,材料在每个速度下变形。

[0137] 在形变计算中,如上所述,计算每个应变状态下的平均链段数 N ,再将此值代入式 (1) 中顺序进行计算。橡胶材料模型 2(整体模型 M) 采用的是 Aruuda 等的三维八链橡胶弹性模型,且不改变厚度的方向(图 3 中 Z 轴方向)。此外,基质模型 3 的平均链段数 N 和界面模型 5 设置如以下:

[0138] 界面模型:

[0139] 负载形变期间的平均链段数 N

[0140] $N = -5.9286 + 20.6175 \lambda_c - 21.8168 \lambda_c^2 + 10.8227 \lambda_c^3 - 1.9003 \lambda_c^4$ 分子链的链段总数 N_A (常数)

[0141] $N_A = 3.203 \times 10^{25}$

[0142] 基质模型:

[0143] 负载形变期间的平均链段数 N

[0144] $N = -3.2368 + 20.6175 \lambda_c - 21.8168 \lambda_c^2 + 10.8227 \lambda_c^3 - 1.9003 \lambda_c^4$ 分子链的链段总数 N_A (常数)

[0145] $N_A = 4.3281 \times 10^{26}$

[0146] 如果进行形变计算,有可能从形变计算结果得必要的的数据(步骤 S4),例如每个计算步骤的每次计时的物理量。图 13 是使用计算结果形成的橡胶材料模型的真实应力-应变关系图;由图可见,橡胶材料模型 2 根据应变率显示出不同的粘弹性特征。作为该模拟的结果,跟与在实际橡胶材料情况下的低速形变(虚线)相比,材料在高速形变下出现了硬化现象。就高速形变而言,已经证明能量损耗比低速形变时来得大。

[0147] 图 14 是本实施方式的另一个结果。在本实施方式中,仅在界面模型内定义了应变率相关性,而没有在基质模型中定义。填料的典型例子为炭黑和二氧化硅。它们之间的最大差异不在于填料本身,而在于填料表面和橡胶间的界面。一般认为位于界面附近的橡胶对材料特性的影响较为敏感,且与应变率的相关性很高。因此,通过改变界面模型和基质模型的应变率相关性,能够有效的获得如何将填料和聚合物彼此偶联的重要数据。

[0148] 在每个界面模型中,定义了如图 14 所示的应变率相关性。在这个例子中,含有炭黑的界面模型 1 具有大应变率相关性,且能量损耗也设置得较大。含有二氧化硅的界面模型 2 具有小应变率相关性,且能量损耗也设置得较小。图中,高速形变的应变率为 $1,000(/s)$ 和低速形变的应变率为 $0.1(/s)$ 。

[0149] 使用了两种橡胶材料模型,即界面模型 1 和 2,且模拟以高速形变进行。图 15 显示的是模拟结果。纵坐标为应变,横坐标为真实应力。由此结果发现,虽然只是小厚度界面模型的应变率相关性发生了变化,但橡胶材料的粘弹性特征产生了大的差异。

[0150] 图 16 中,横坐标表示弹性模量(相对于图 15 的横坐标的斜率),纵坐标表示能量

损耗（滞后回线）。至于上述轮胎的抗滑性能，沿图中左上方向延伸的粘弹性特征更为可取。

[0151] 本实施方式的模拟包括形成并显示来自获得的数据的分布图的步骤（步骤 S5）。图 17 显示的是在高速形变时，在最大应变状态下，单元 U（是图 12 而不是图 3 中所示的单元 U）的每个基元中产生的应力分布图的一个例子。此外，还显示了单元 U 的外形轮廓的变化。形成分布图的步骤是通过用可视觉识别的信息如彩色信息（色饱和度，色调，亮度等）替代获得的每个基元的应力值来进行的。在图 17 中，色饱和度越大的地方应变越大。由此结果发现，应力越集中的地方填料模型 3 和 3 之间的间距越小。同时还发现，应力较高的地方以沿着拉伸方向成线形的在填料模型 3 中相连。

[0152] 图 18 是高速形变下单元 U 的每个基元内产生的能量损耗分布图。为获得能量损耗，以与每个应变率相同的速率卸下负载，从而获得了一个循环的应力-应变曲线。使用如图 17 所示的单元 U 的外形轮廓。还是在该分布图中，用色彩信息（色饱和度，色调，亮度等）替代所得到的每个基元的能量损耗。应变越大，色饱和度越大。由此结果同样发现，产生应力越大的地方填料模型 3 和 3 之间的间距越小。填料模型 3 被着色，但没有产生能量损耗。此外，分布图中使用的物理值等数据不局限于应力值或能量损耗，而是可以根据分析目的采用不同的值。

[0153] 图 19(A) 和 19(B) 分别是在高速形变和低速形变时，在最大应变状态下单元 U 的应力分布局部放大视图，其显示了应变相同条件下应力分布随形变频率差异而变化的状态。也就是说，在高速形变时，高应力产生在较宽范围内，并且这现象在填料模型 3 和 3 之间尤为明显。

[0154] 当填料和橡胶按文献 (2) 所示一起被建模时，单元的应力分布是均匀的，且模型仅在物理上变形为矩形。因此，这种分布图只在橡胶和用于被填入橡胶的填料被分离和建模之后才能获得。

[0155] 该分布图对开发实际橡胶材料提供了极为有用的信息。例如，在用于被填入橡胶的填料中，优选那些在形变时具有均匀应力分布的填料。为了开发这种用于填入橡胶材料的填料，重要的是首先知道当前的应力分布状态。由其结果，有可能改善填料的分布性质和物理形态，以尽可能减少填料之间间距的变化。使用该改进的填料模型，再次形成了单元，在计算机上反复的进行形变模拟直到获得更优的均布应力分布。

[0156] 当通过计算获得更均匀的应力分布时，单元的物理结构，即填料的颗粒形状、分布程度等最好能反应实际的制造。填料的分布状态尤其能够用三个参数控制，即填料在橡胶中的混合量，混合时间和混合温度。因此，如果能够获得理想填料模型 3 的分布性质，则有可能开发一种具有优秀抗滑的轮胎用橡胶组合物或在较短时间内具有优秀的燃油效率的橡胶材料。

[0157] 本发明的模拟方法可有效地被用于开发例如充气轮胎的胎面橡胶。如上所述，优选的是，如果复数弹性模量在橡胶低速形变时更大而能量损耗更小，胎面橡胶的燃油效率就更优秀。这里，胎面橡胶的燃油效率指数 X1 可用下式 (16) 表示，指数 X1 越大的橡胶更可取：

$$[0158] \quad X1 = K1 \cdot \tan \delta_L + K2 \cdot E_L^{-1} \quad \dots (16),$$

[0159] 其中，K1 和 K2 为常数， $\tan \delta_L$ 表示用于填入橡胶的填料在 10 至 100Hz 范围的特

定频率下的损耗角正切值, E_t^* 表示用于填入橡胶的填料在 10 至 100Hz 的特定形变频率范围下的复数弹性模量。

[0160] 另一方面, 橡胶在高速形变时的能量损耗越大, 胎面橡胶的抗滑性能越优秀。这里, 胎面橡胶的抗滑性能指数 X2 可用下式 (17) 表示, 指数 X2 越大的橡胶更可取:

$$[0161] \quad X2 = K3 \cdot \tan \delta_H \quad \dots (17),$$

[0162] 其中, K3 为常数, $\tan \delta_H$ 表示用于填入橡胶的填料在 10^4 至 10^6 Hz 的特定形变频率范围内的损耗角正切值。

[0163] 图 20 是使用本发明的模拟方法开发胎面橡胶的方法的一个例子的流程图。在本实施方式中, 首先建立橡胶材料模型 2 (步骤 Sa1), 并且基于此在低速形变下进行形变模拟。接着, 计算与燃油效率有关的指数 X1 (步骤 Sa2)。基于同一个橡胶材料模型 2, 在高速形变下进行形变模拟。接着, 计算与抗滑性能有关的指数 X2 (步骤 Sa3)。步骤 Sa2 和 Sa3 可并联进行或倒序进行。

[0164] 为了同时满足燃油效率和抗滑性能, 优选指数 X1 和 X2 之和越大越好。因此, 在本实施方式中, 要确定指数 X1 与 X2 之和是否达到最大值 (步骤 Sa4)。如果步骤 Sa4 中判断为真, 则根据所建立的橡胶材料模型 2 (单元 U) 原型化和设计实际填料和橡胶混合物。如果步骤 Sa4 中判断为假, 改变单元 U 的参数, 再次建立橡胶材料模型 2 (步骤 Sa1)。然后, 以同样方式重复进行形变模拟, 直到指数和 (X1+X2) 得到最大值。

[0165] 需要变化的参数的例子有应力-应变图的斜率 (式 (1) 中的参数如 C_R 和 N), 滞后回线的幅度 (图 9 中 λ_c 和 N 的斜率), 以及应变率相关性 (式 (11) 的材料常数)。如上所述, 本发明的模拟方法对开发具体各种不同的橡胶产品非常有用。

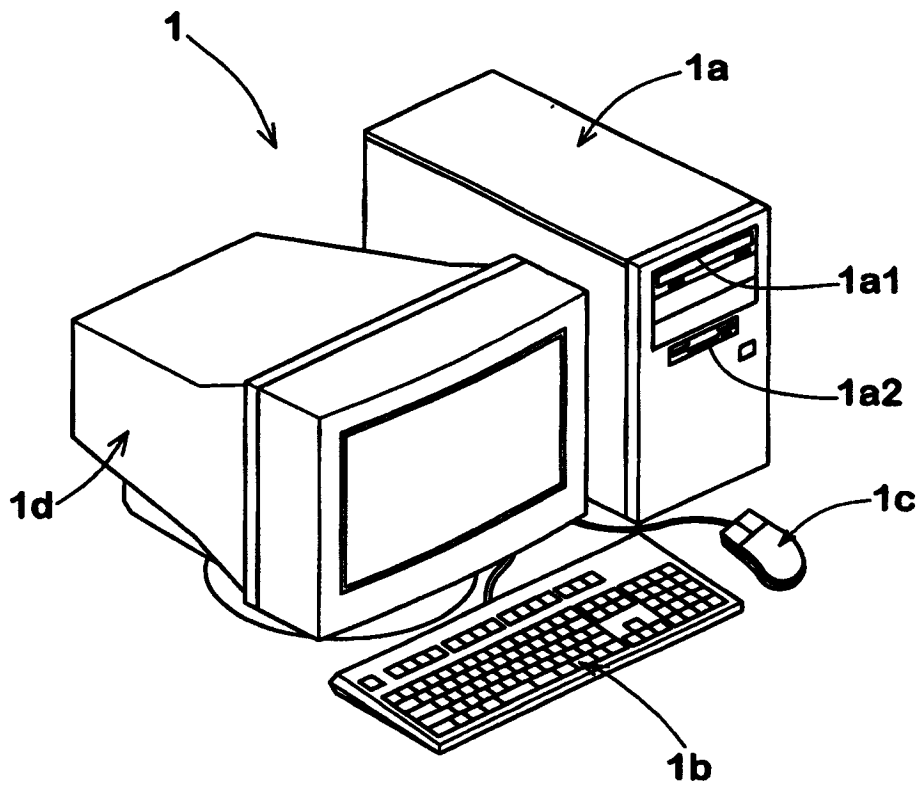


图 1

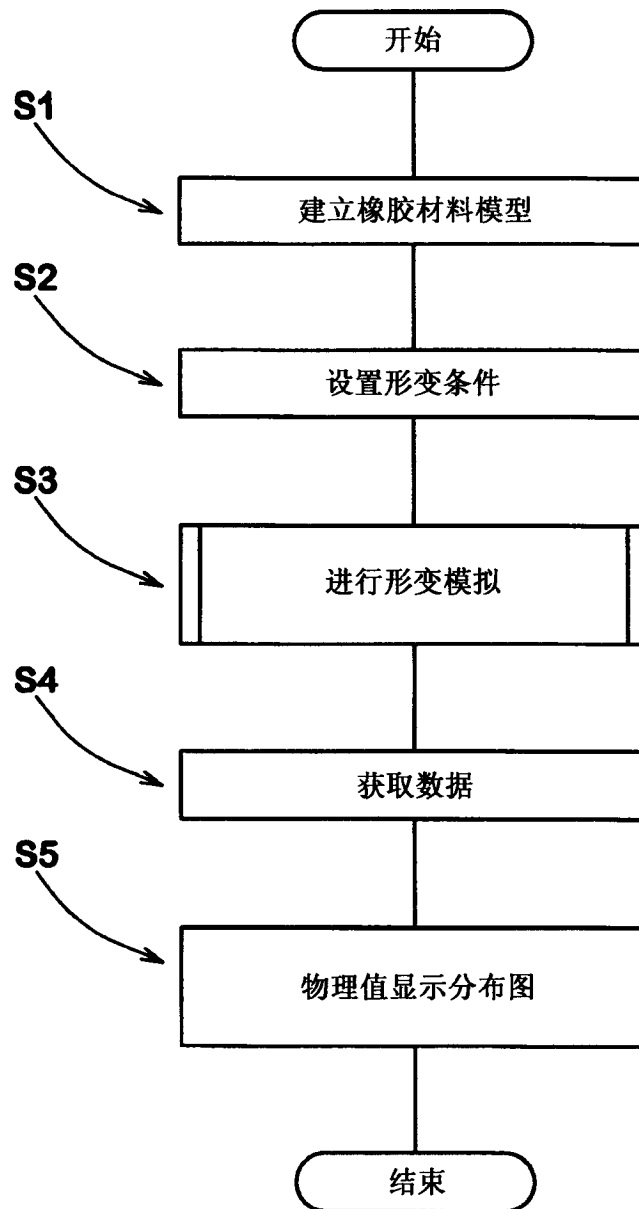


图 2

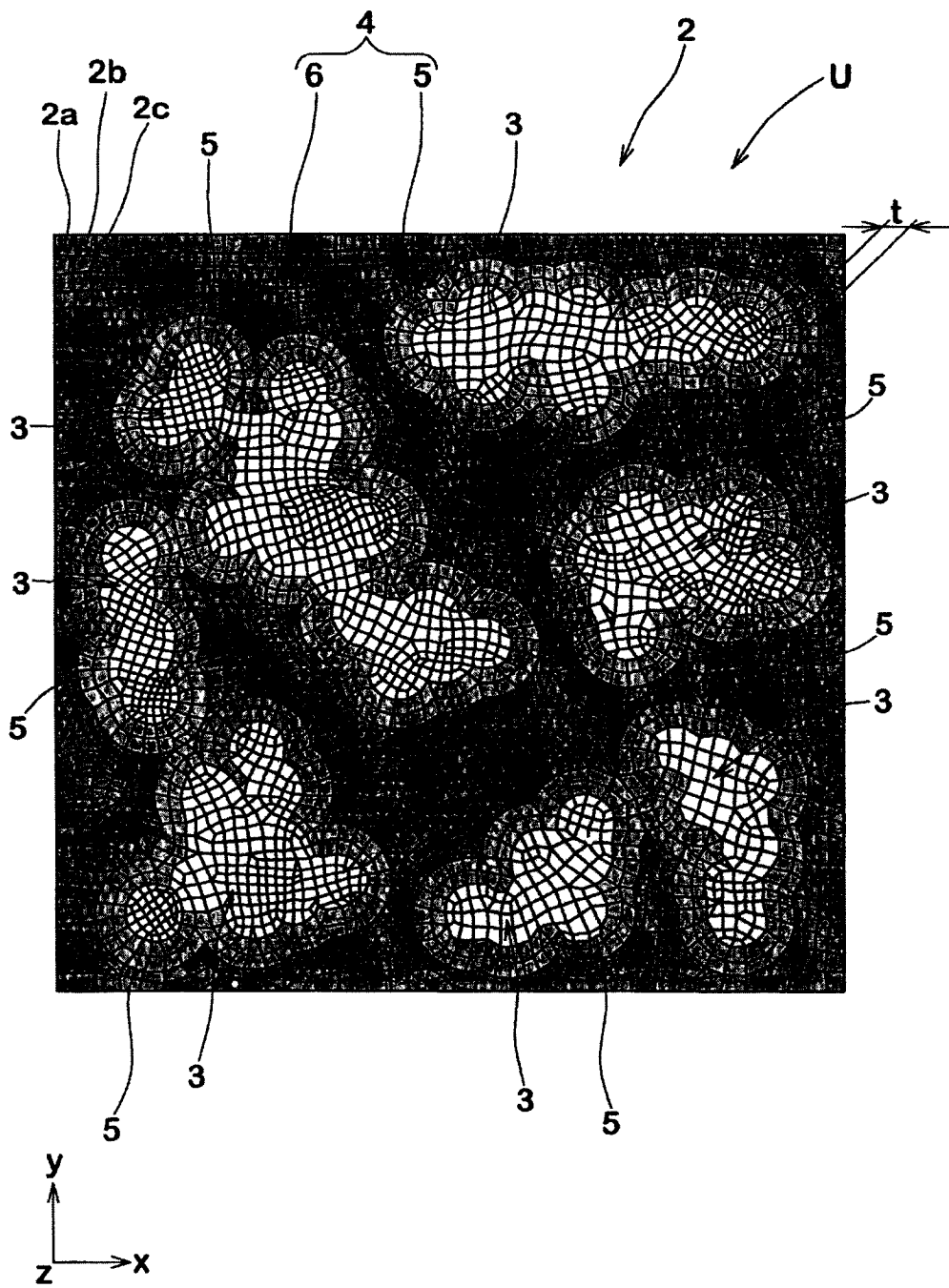


图 3

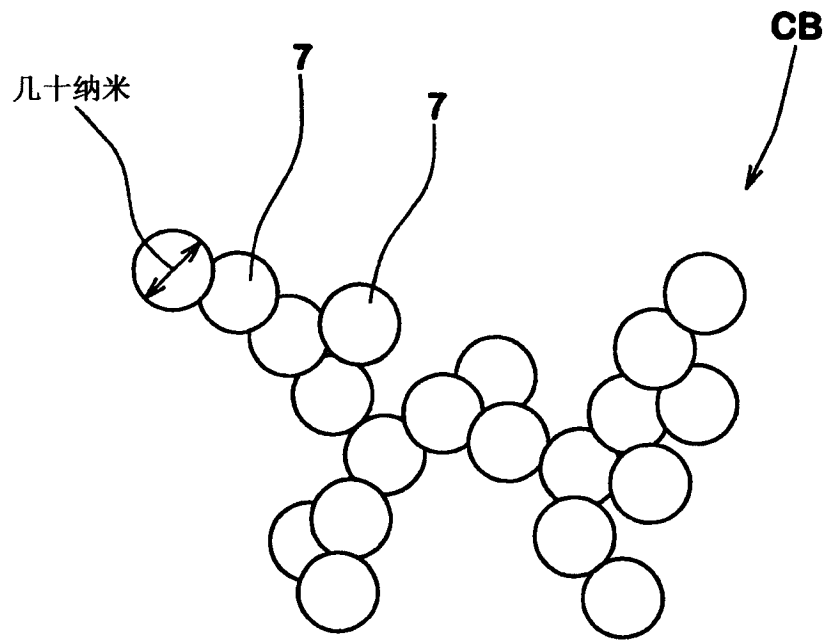


图 4

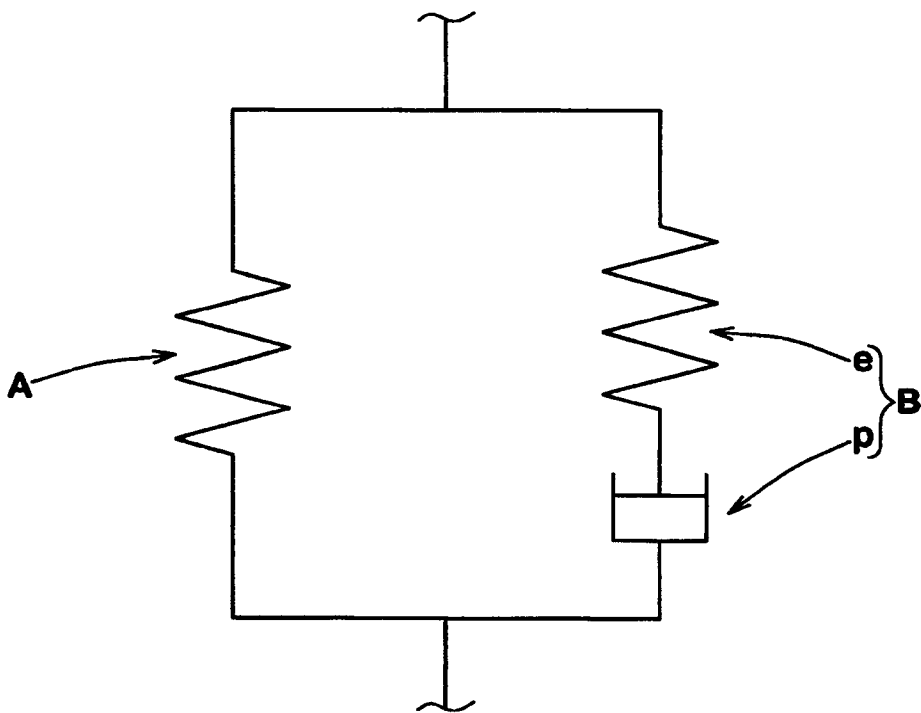


图 5

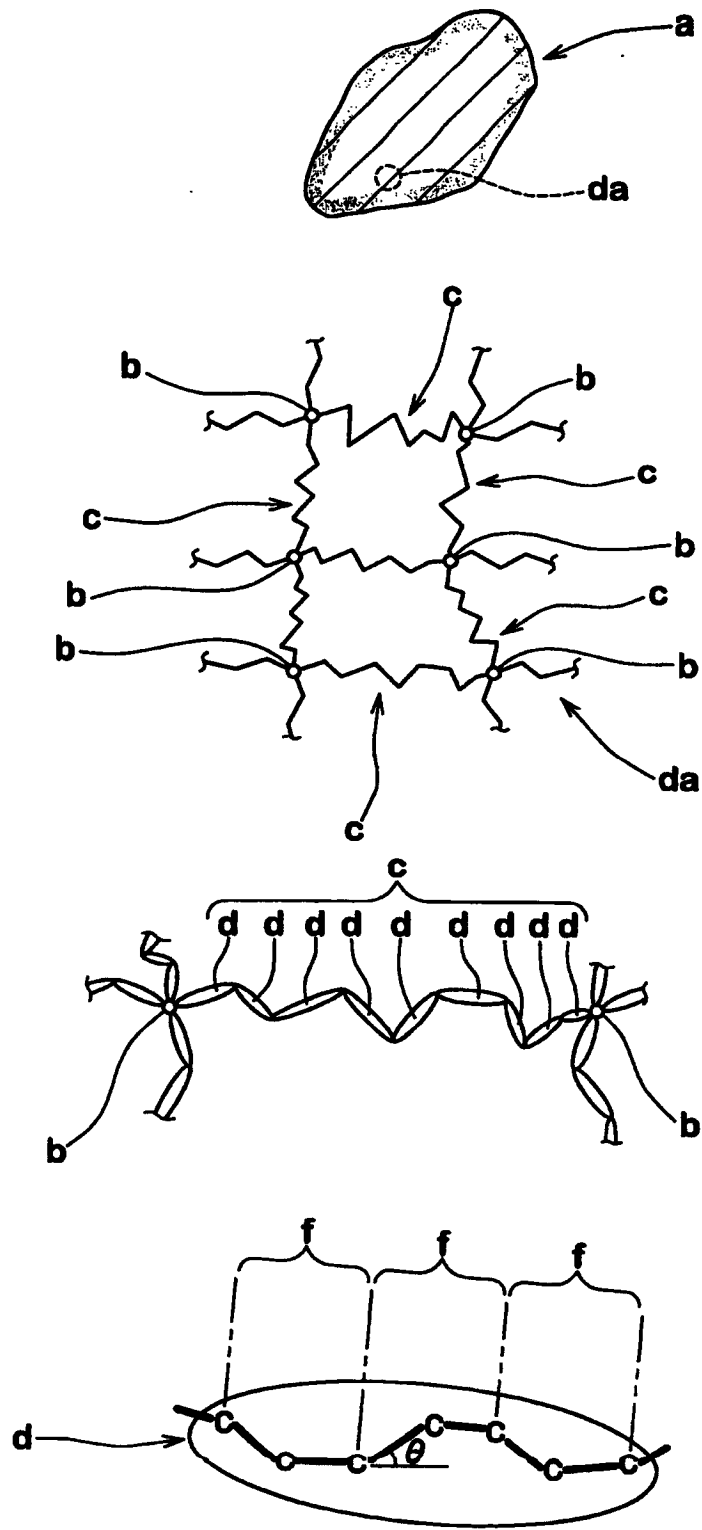


图 6

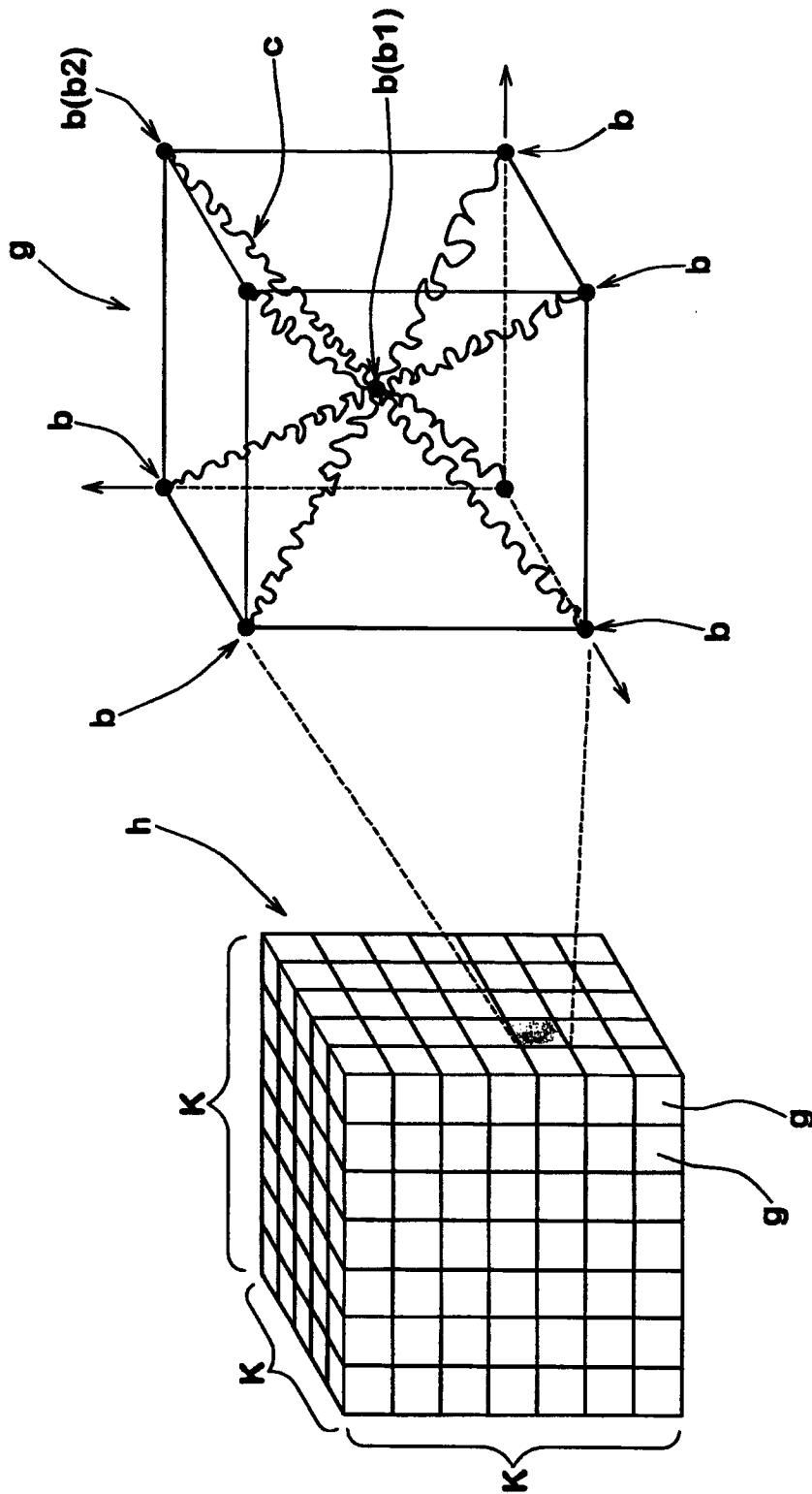


图7

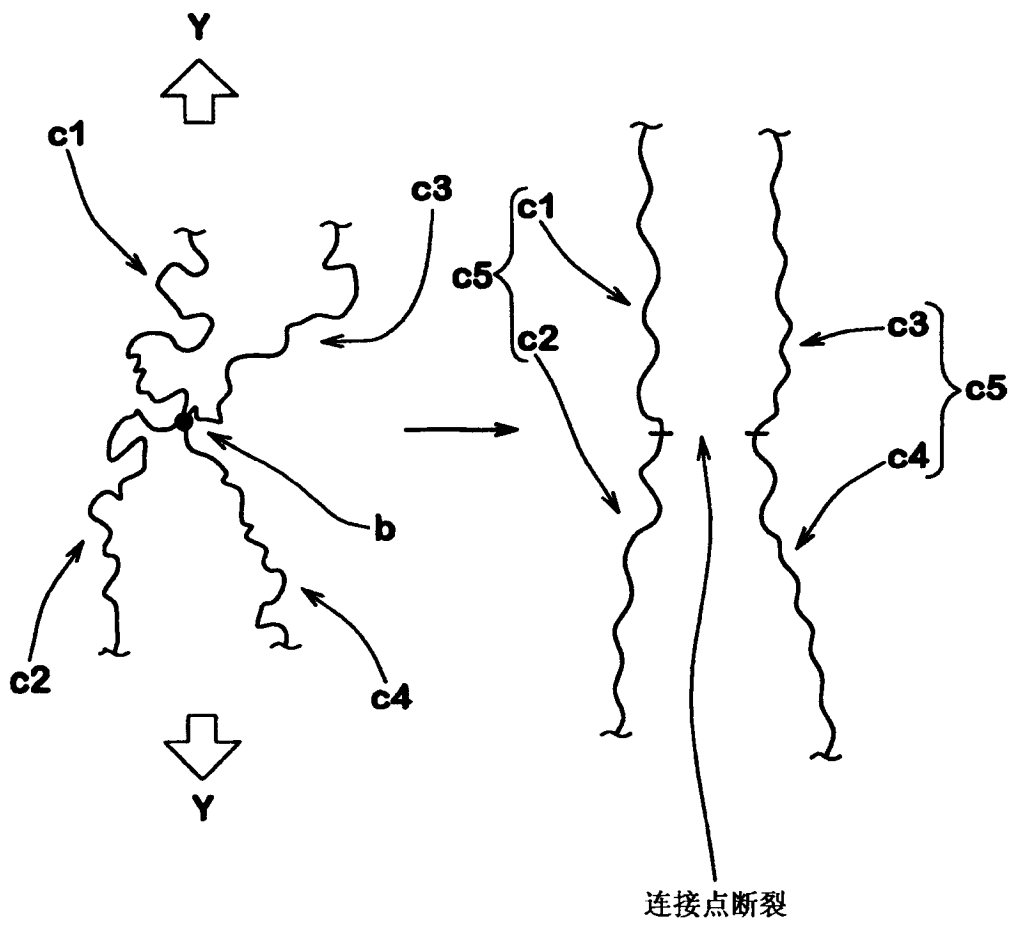


图 8

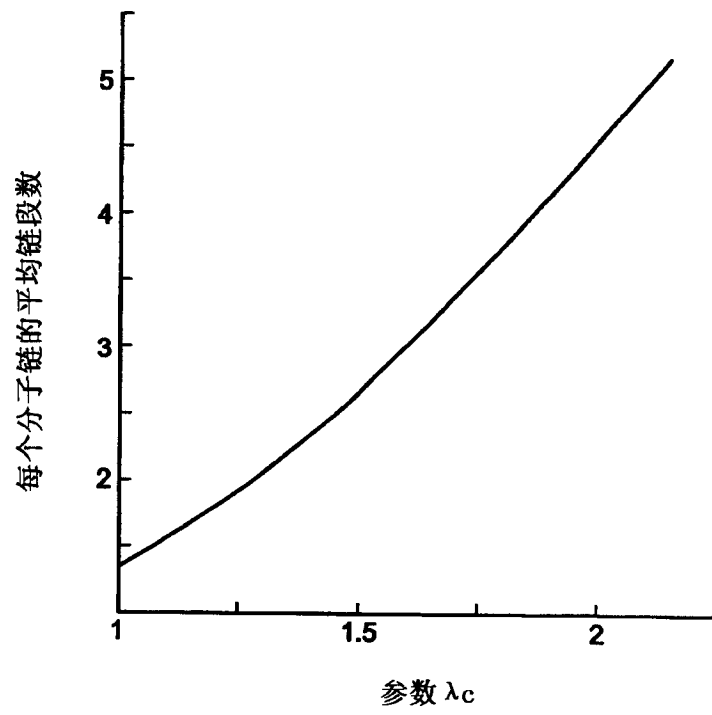


图 9

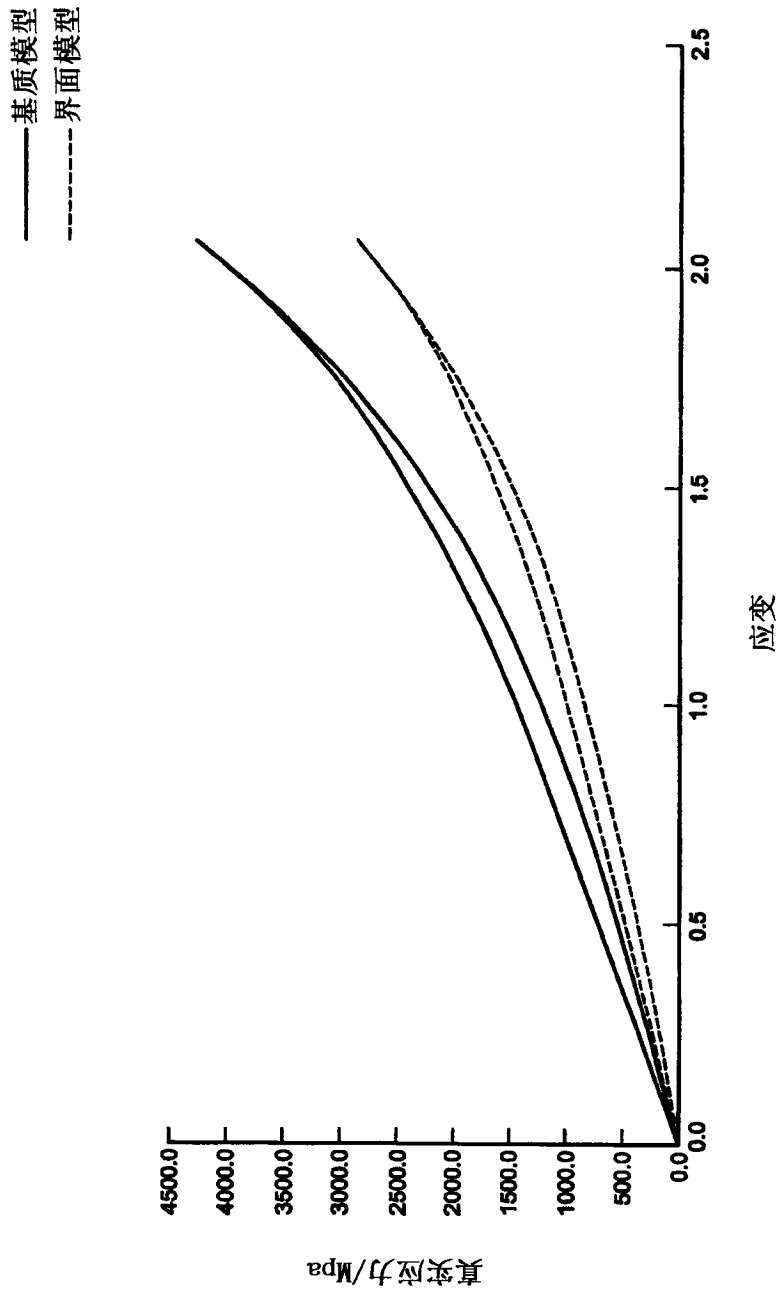


图 10

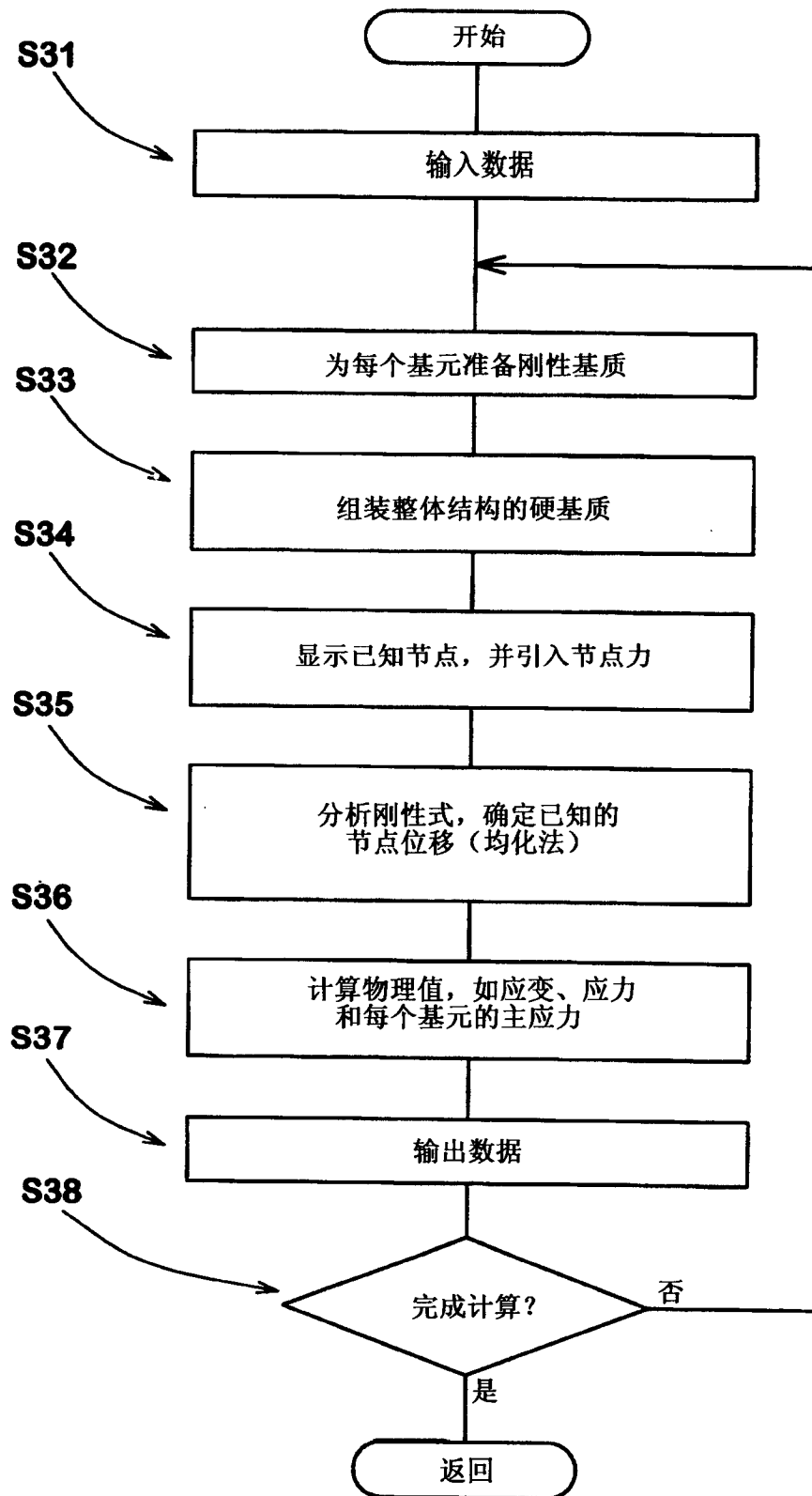


图 11

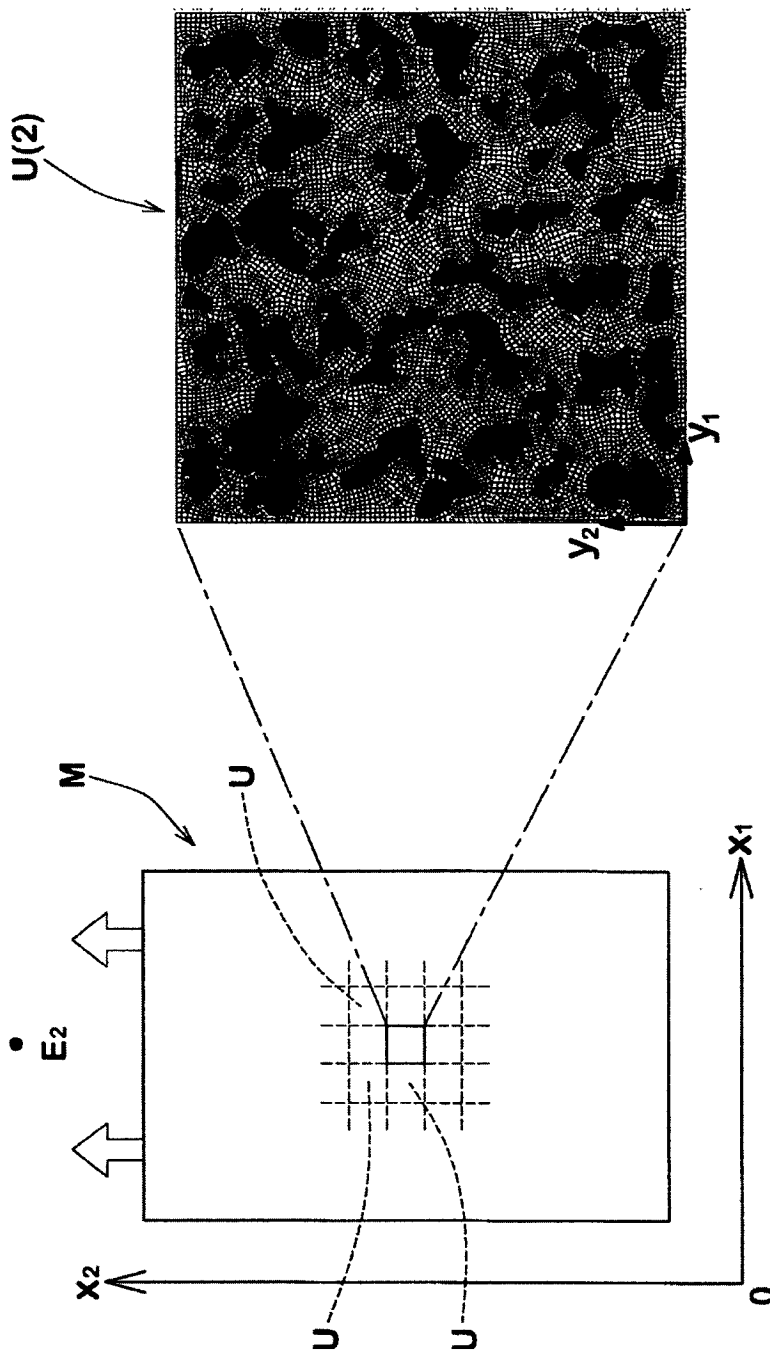


图 12

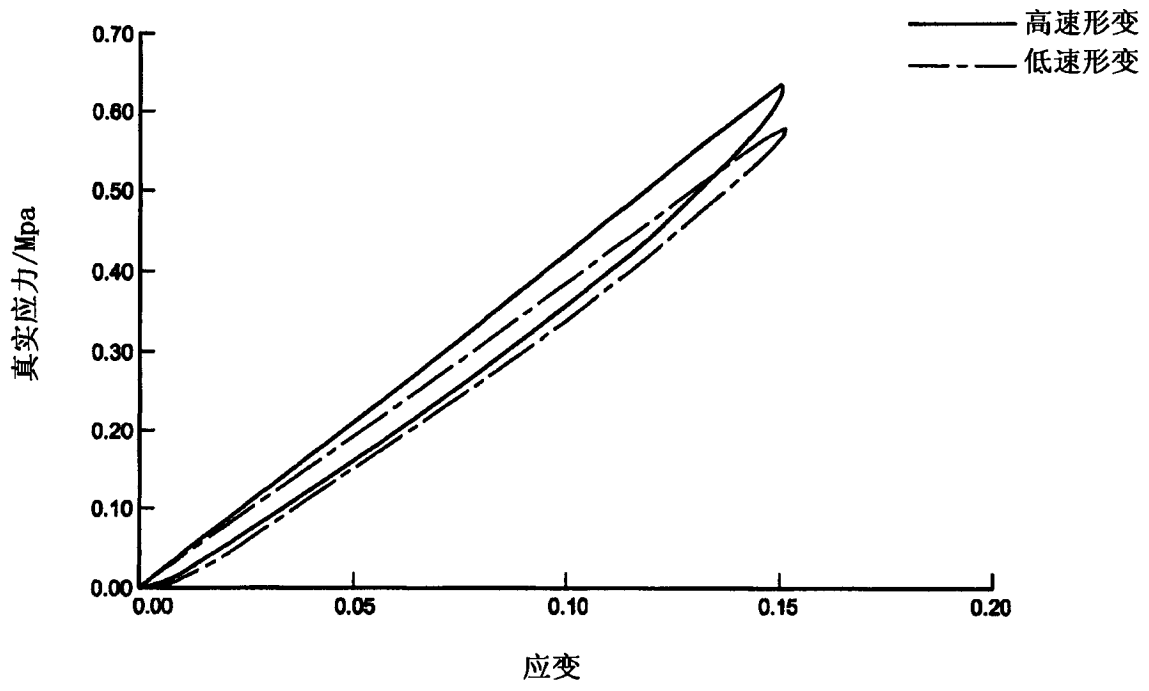


图 13

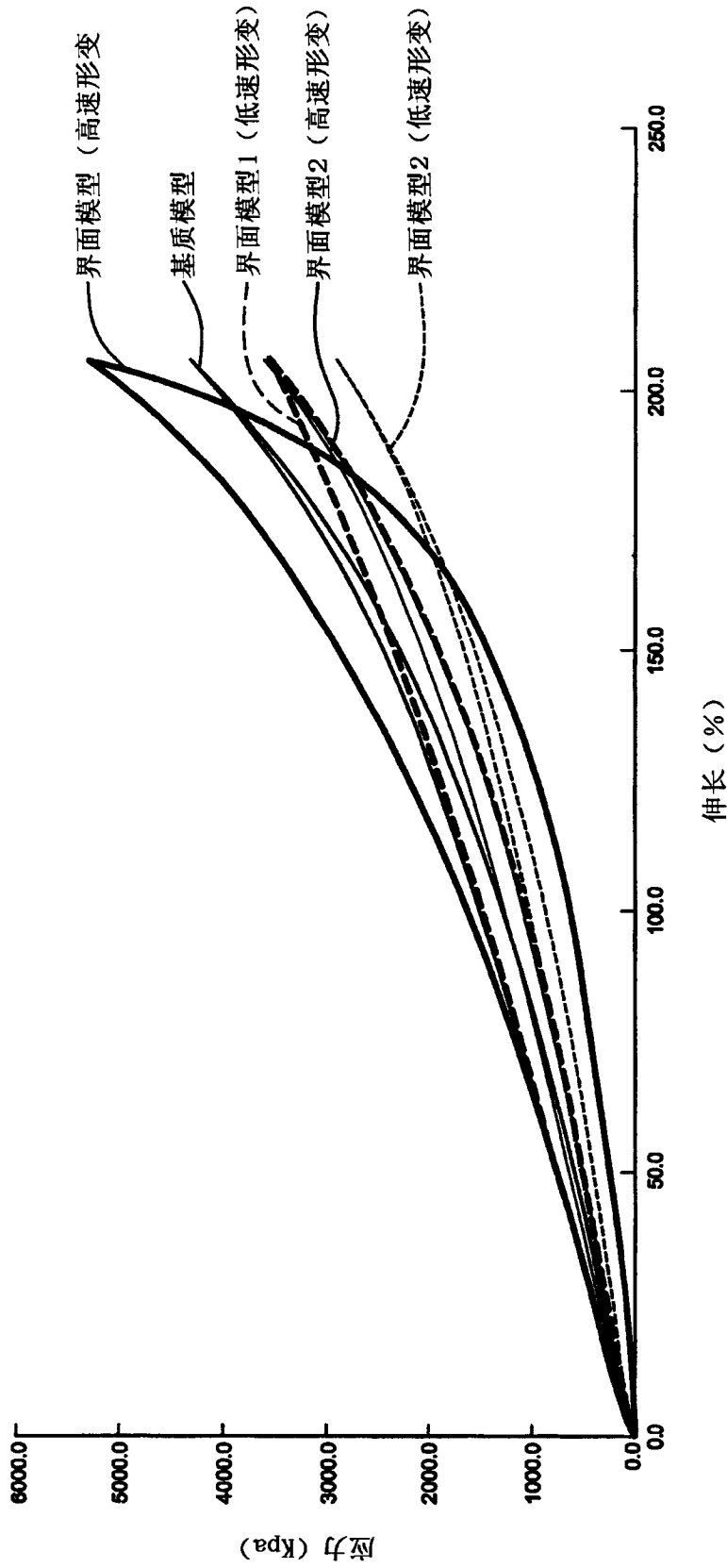


图 14

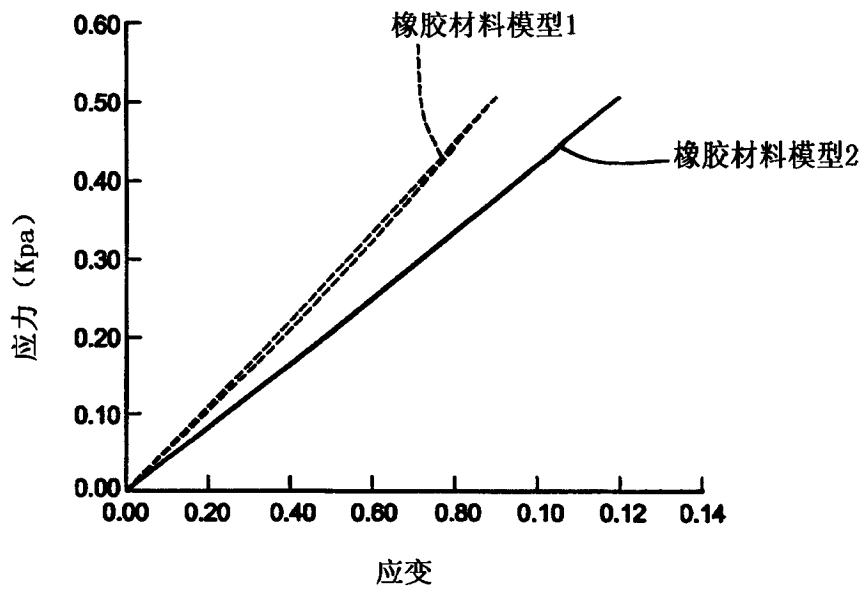


图 15

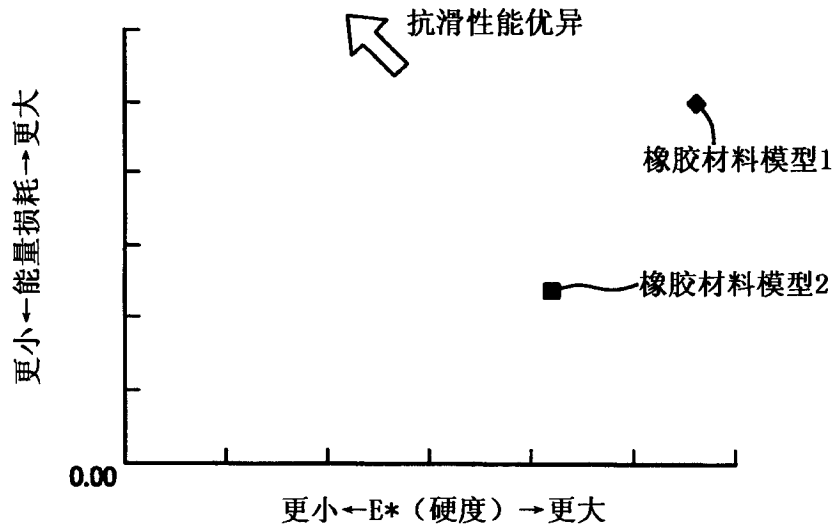
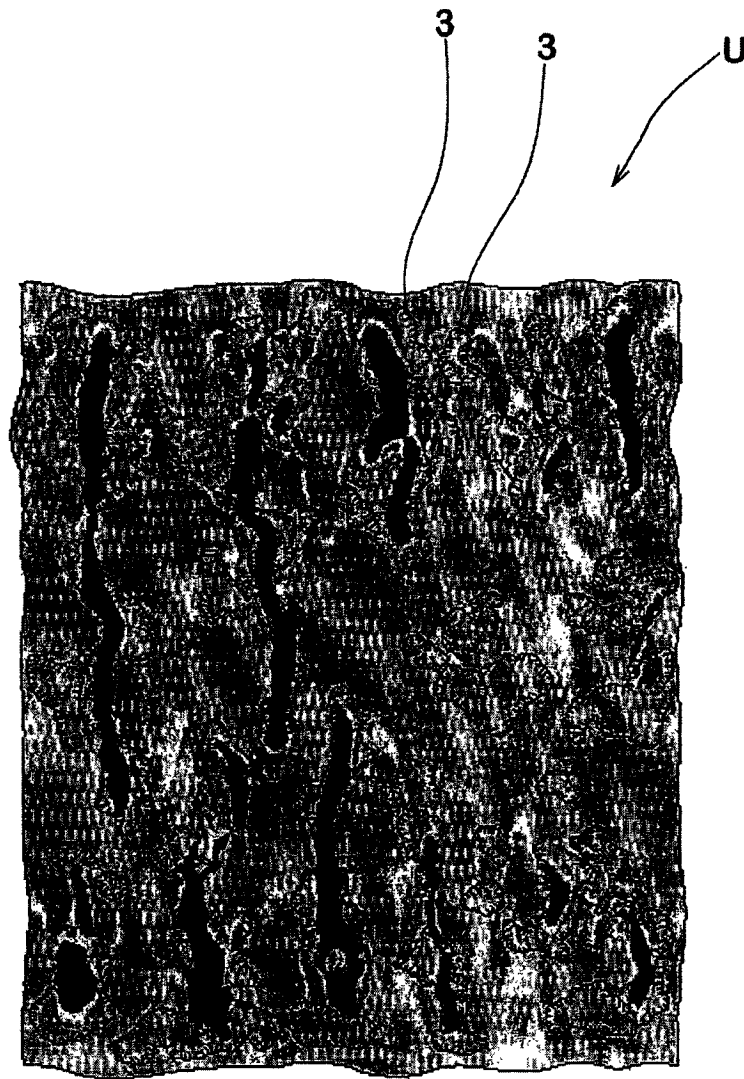
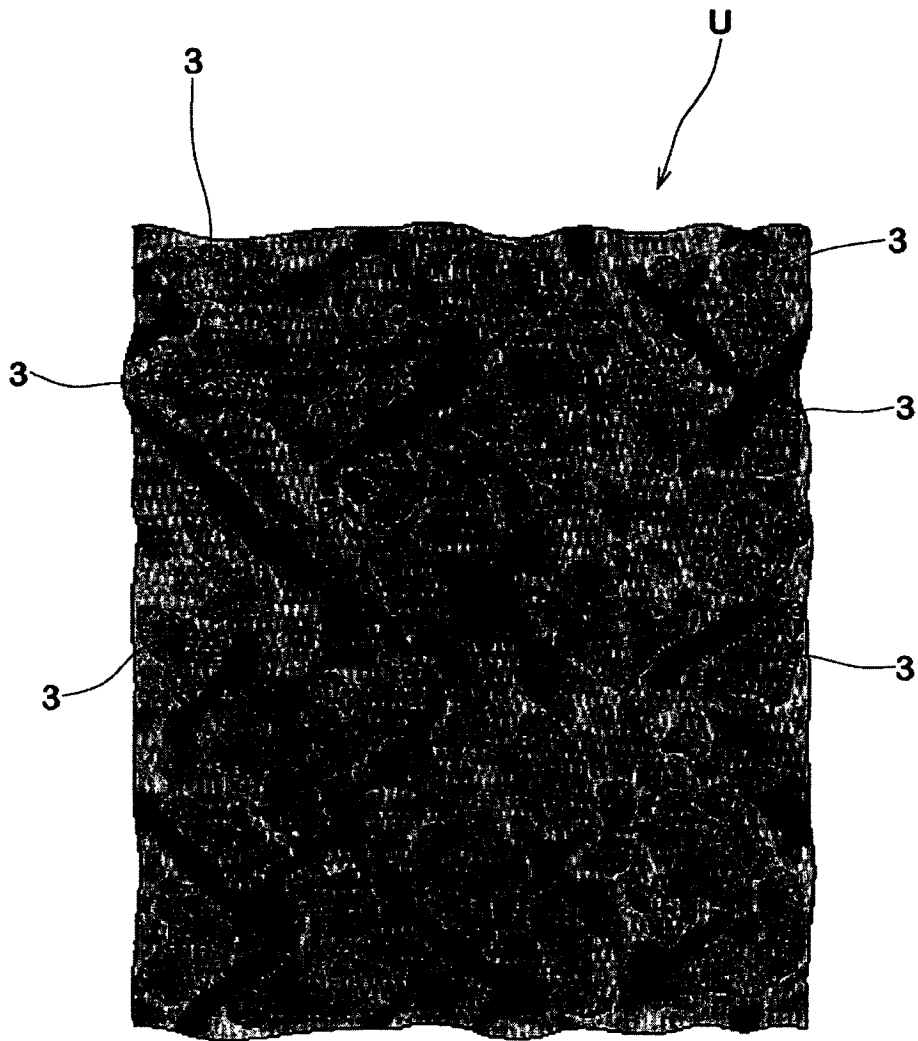


图 16



应力分布图
形变频率 10^6Hz

图 17



能量损耗分布图
形变频率 10^6Hz

图 18

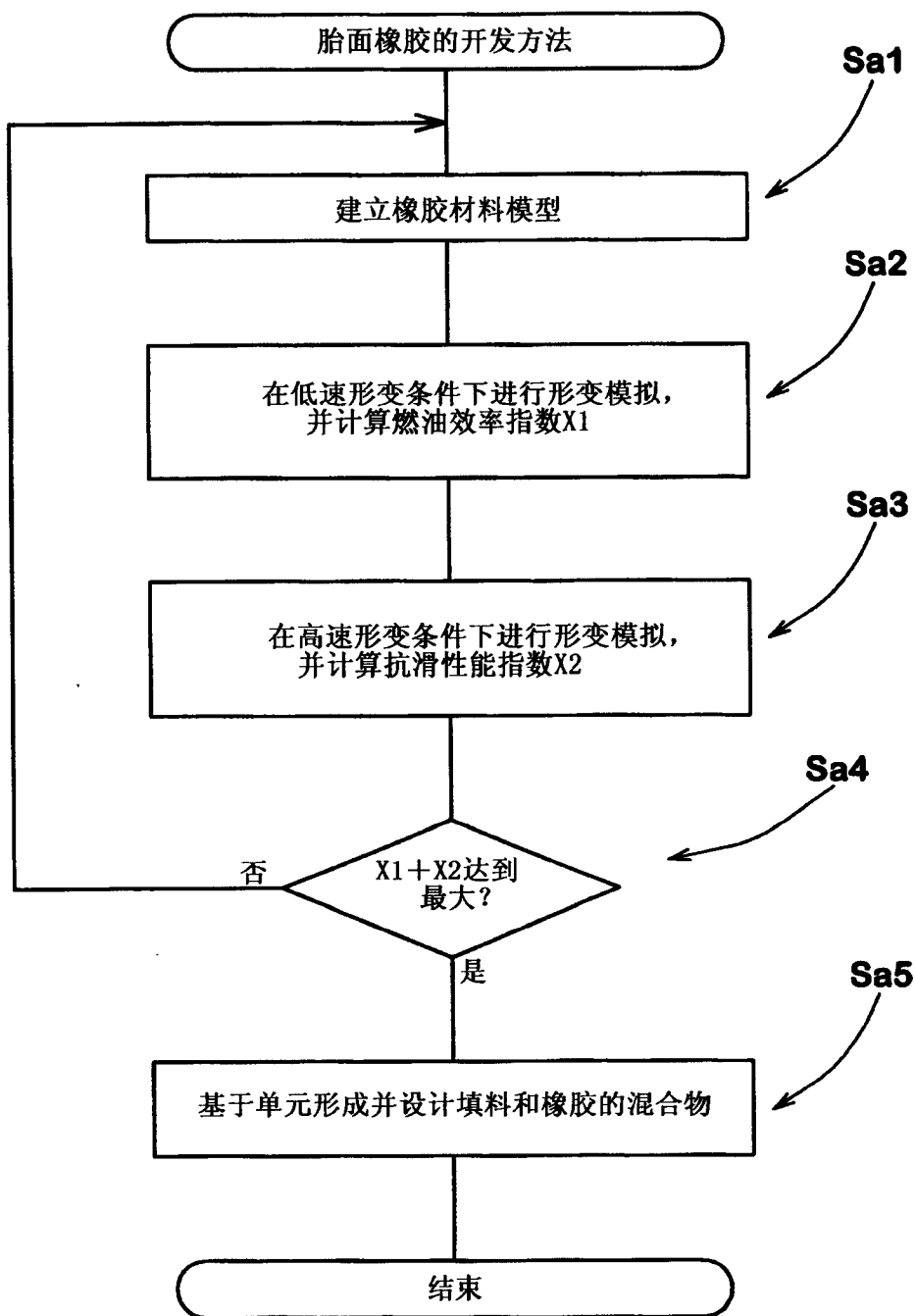


图 20

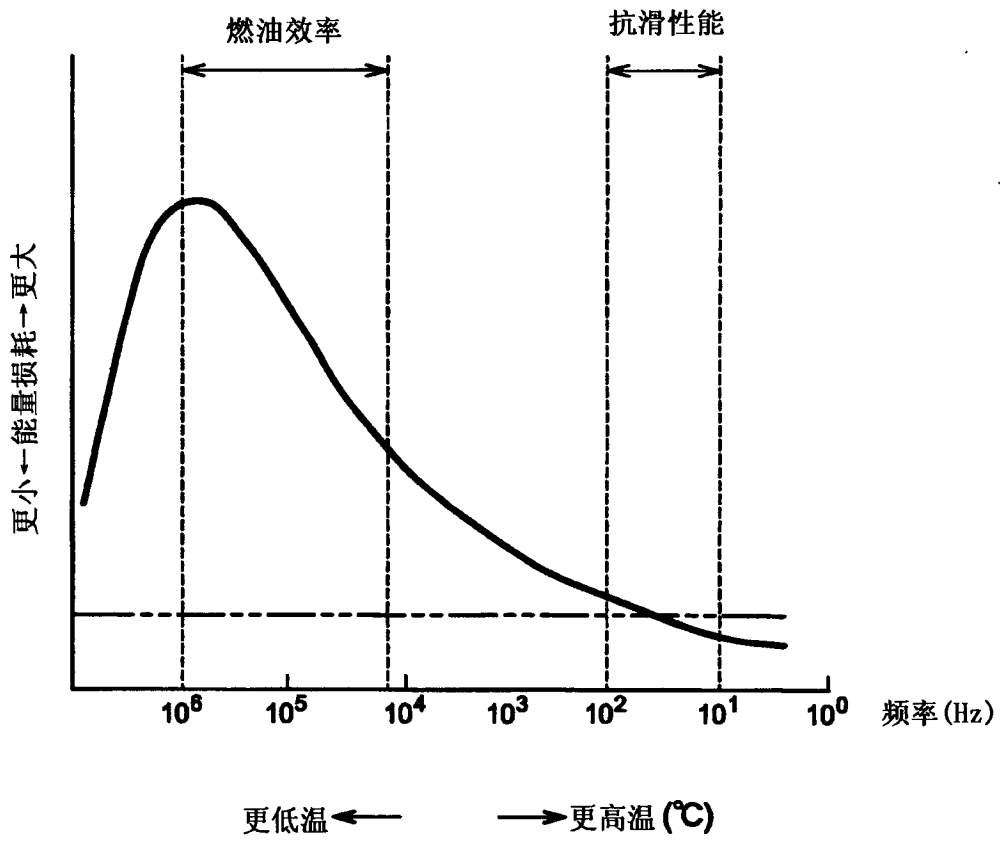


图 21