http://pmse.scu.edu.cn

基于Isight自动化仿真的热塑性硫化胶细观回弹性能分析法

何承源[1]，马丽凤[1,2]

（1. 上海工程技术大学 机械与汽车工程学院，上海 201620；2. 四川大学 高分子科学与工程学院，四川 成都 610065）

摘要：热塑性硫化胶（TPV）以其低耗能和可回收的特性在取代传统橡胶方面具有显著优势，但其在动态密封领域的应用仍受回弹性能的限制。文中提出了一种研究TPV回弹性能的方法，通过Abaqus和Python软件建立了代表TPV细观结构的二维随机多粒子模型，编程提取仿真模型结构参数和仿真结果，并基于Isight平台自动化仿真流程，生成了材料仿真数据库，有效解决了TPV领域机器学习数据集不足的问题。结合K折交叉验证和随机森林算法对TPV的回弹性能进行了预测，并验证了模型准确性。通过特征重要性分析和二元偏相关图，发现基体塑性应变和橡塑比对TPV回弹性能影响最大，而橡胶粒子结构参数的影响有限。

关键词：热塑性硫化胶；Isight平台；机器学习；回弹性

中图分类号：TQ330.1 **文献标识码：**A **文章编号：**1000-7555（2025）07-0150-08

热塑性硫化胶(TPV)通常是由橡胶和塑料通过熔体共混伴随动态硫化制成，兼具高回弹和可回收等优点，广泛用于汽车密封和建筑建材等领域[1~5]。但目前，现有TPV在动态密封领域仍无法有效替代传统橡胶，制约其进一步应用的关键在于提升TPV的回弹性。因此有必要深入研究影响TPV回弹性的因素。

目前，传统在线实验方法是研究TPV回弹性能的主要手段，但这些方法存在成本高、研发周期长等缺点，且难以深入探讨影响TPV回弹因素之间的复杂关系[6~8]。因此，数值模拟和数据驱动方法逐渐成为研究的重点[9]。Liu等[10]利用代表性体积元建立了EPDM/PP TPV的微观力学模型，揭示了不同橡胶质量分数的力学性能。Xu等[11]等将机器学习与聚合物制备相结合，建立了高维工艺参数与力学性能之间的影响机理。然而，这些分析方法仍面临仿真参数调整低效、材料数据收集困难等问题，且在TPV微观尺度下的结构参数难以用于回弹性分析[12,13]。从而限制了数值模拟和数据驱动方法在TPV分析中的进一步应用。

本文通过Isight平台集成Abauqs和Python进行联合仿真。建立了代表TPV细观结构的二维随机多粒子模型，提取了粒子平均间距、粒子平均尺寸和基体平均塑性应变等材料参数作为特征，并通过Isight平台实现了仿真流程自动化，输出多组仿真数据作为数据集。随后，结合K折交叉验证和随机森林算法，构建了特征参数对TPV回弹性影响的预测模型。这种方法为指导TPV回弹性提升提供了一种新途径。

1 实验部分

1.1 原料和试剂

聚酰胺热塑性弹性体（TPAE）：牌号6510，中国沧州旭阳科技有限公司；三元乙丙橡胶（EPDM）：型号IP 4725P, 美国杜邦陶氏公司产品；三元乙丙橡胶接枝马来酸酐（EPDM-g-MAH）：型号IP 630P，MAH为0.8%~1.2%，美国杜邦陶氏公司产品；选择酚醛树脂（PF）和氯化亚锡（$SnCl_2$）作为TPAE/EPDM- g-

doi: 10.16865/j.cnki.1000-7555.2025.0134
收稿日期：2024-07-05
基金项目：国家自然科学基金资助项目（51903150）；上海学术/技术研究带头人项目（21XD1401100）
通讯联系人：马丽凤，主要从事新能源/智能汽车功能材料的结构设计、算法优化、仿真分析的研究，E-mail: ma.lifeng-scu@foxmail.com

MAH/EPDM TPV的硫化体系。

1.2　实验过程

将TPAE,EPDM和EPDM-g-MAH按50∶30∶20的质量比在XSS-300型转矩流变仪(上海昌凯转矩流变仪/CTR-T200)中熔融共混,转子转速为120 r/min,设定温度为220 °C。PF和$SnCl_2$的含量分别占共混物质量的2%和0.4%。最后将纯TPAE、纯EPDM和TPV在220 °C,10 MPa压力下压缩成型为厚度1 mm的板材。

1.3　测试与表征

1.3.1　*力学性能测试*:使用Instron公司5567型万能力学试验机进行单轴拉伸试验。样条长度为35 mm,拉伸速度为20 mm/min,每次试验至少使用5个样条并取平均值。

1.3.2　*形貌表征和粒径分析*:采用透射电镜(TEM, Philips CM120)对样品的相形貌进行表征。加速电压为100 kV,在−130 °C将样品冷冻切成100 nm的薄片,然后用四氧化二钌蒸汽染色30 min。通过Image Pro Plus图像分析软件定量分析EPDM颗粒尺寸,通过TEM照片统计分散相粒径,采集的分散EPDM颗粒数为300~600个。

Tab. 1　Ogden-3 constitutive model parameters

I	μ_i	α_i	D_i
1	−0.0081	2.0092	0
2	0.2314	3.9367	0
3	2.1975	−2.0012	0

1.4　有限元建模及仿真自动化

1.4.1　EPDM本构模型:EPDM具有典型的超弹性材料特征,将EPDM单轴拉伸试验获得的应力-应变曲线导入Abaqus软件内置模块,拟合后即可得到EPDM的超弹性本构。本文选用Ogden-3模型用于精确反映EPDM的超弹性力学行为。该模型的应变能函数W可表达为

$$W=\sum_{i=1}^{N}\frac{2\mu_i}{\alpha_i^2}(\lambda_1^{\alpha_i}+\lambda_2^{\alpha_i}+\lambda_3^{\alpha_i}-3)+\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{D_1}(J_{el}-1)^{2i} \tag{1}$$

式中:W——单位体积应变势能;μ_i和α_i——橡胶剪切应变的相关参数;λ_i——主拉伸比;考虑到橡胶材料的不可压缩性,D_i通常为1,其弹性体积比J_{el}=1。Ogden-3本构模型单轴拉伸试验参数如Tab.1所示。

1.4.2　TPAE本构模型:TPAE具有类似弹塑性的拉伸行为,因此可根据J2理论将其表征为各向同性硬化弹塑性材料[14]。总应变分别由弹性应变分量和塑性应变分量求得

$$\varepsilon=\varepsilon_e+\varepsilon_{pl} \tag{2}$$

$$\sigma=D:\varepsilon_e \tag{3}$$

$$\sigma_{eq}=\sqrt{\frac{2}{3}S:S} \tag{4}$$

式中:ε_{pl}——塑性应变分量;ε_e——弹性应变分量;刚度张量(D)由泊松比、弹性模量和切向模量的增量决定。等效应力(σ_{eq})用偏应力张量(S)定义。假设材料不考虑后续硬化,内部J2速率无关塑性模型的变量为等效塑性应变(α),则屈服准则为

$$f=\sigma_{eq}-\sigma_y(\alpha) \tag{5}$$

$$\alpha=\int\sqrt{\frac{3}{2}\dot{\varepsilon}_{pl}:\dot{\varepsilon}_{pl}}\,dt \tag{6}$$

式中:$\sigma_y(\alpha)$——屈服应力;$\dot{\varepsilon}_{pl}$——等效塑性应变率。根据上述理论即可得到TPAE材料性能参数,如

Tab. 2　TPAE yield stress and equivalent plastic strain

Yield stress and equivalent plastic strain of PP			
Yield stress/MPa	0.823	1.176	1.485
Equivalent plastic strain/%	0	0.001	0.004
Yield stress/MPa	1.795	2.101	2.417
Equivalent plastic strain/%	0.012	0.022	0.046
Yield stress/MPa	2.707	2.846	3.125
Equivalent plastic strain/%	0.104	0.123	0.175
Yield stress/MPa	3.371	3.610	4.144
Equivalent plastic strain/%	0.238	3.047	0.557

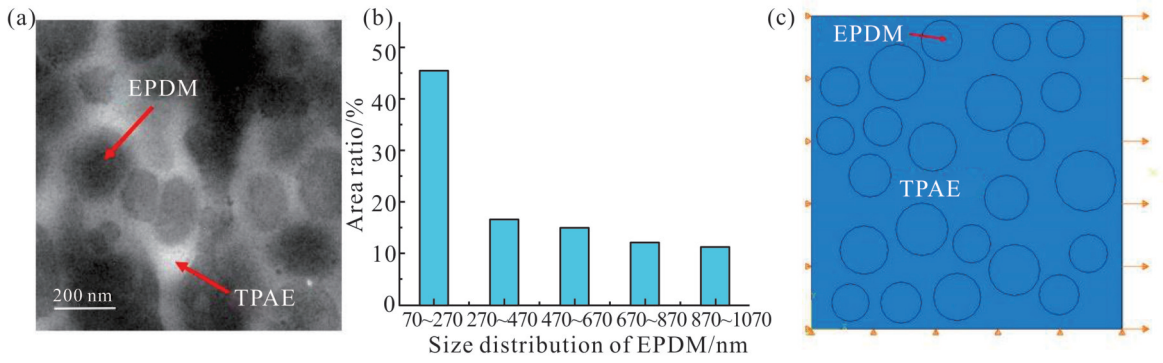


Fig. 1 (a) TEM image of TPV; (b) EPDM particle size distribution; (c) two-dimensional random multi-particle model

Tab.2所示。

1.4.3 二维随机多粒子模型的建模：为了模拟橡胶粒子在TPV中的分布情况，并提高模型计算效率，本文在Abaqus软件中导入python脚本，建立了二维随机多粒子模型来代表TPV的微观结构。通过TPV-M的TEM图像(Fig.1(a))统计出分散相EPDM颗粒尺寸，统计结果如Fig.1(b)所示。可以明显看到，EPDM的颗粒直径主要分布在70 ~270 nm之间。为了提高仿真模型的准确性，将均质化方法应用于模型中，首先取平均粒径R_1(0.1 μm)，将其作为粒子尺寸的上限，其次在粒径概率最大的区域设置另一个粒径R_2(0.07 μm)，作为粒子尺寸的下限，这一步骤考虑了TPV中橡胶粒子的尺寸分布[15]。随机模型的橡胶含量占TPV的35.5%±4%。TPAE的模量为27.5 MPa，泊松比为0.43。拉伸应变为模型长度的50%。最终的仿真模型如Fig.1(c)所示。

1.5 Isight联合Abauqs仿真流程

1.5.1 TPV参数提取：众所周知，TPV的橡胶相在动态硫化过程中被剪切破碎成分散的颗粒，研究人员也通过传统实验方法揭示了橡胶粒子间距、粒径、橡塑比对TPV力学性能的影响[16]。然而，Abaqus仿真软件通常只能实现模型参数的简单输入，难以从现有随机模型中提取该类结构参数，进而无法深入探讨其对TPV性能的影响机制。

为满足不同用户的需求，Abaqus提供了二次开发接口，用户可以利用Python语言进行前、后处理开发。前处理开发包括参数化建模，生成二维随机多粒子模型，计算平均粒子间距、平均粒径、颗粒分散性(PDI)、体积比，其中平均颗粒间距计算公式为[17]

$$d=\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2} \tag{7}$$

式中：d——两圆心间距。

$$d^*=\frac{\sum_{n=1}^{i} d_n}{i} \tag{8}$$

式中：d^*——平均粒子间距；i——相邻粒子的个数；d_n——与第n个相邻粒子间的间距。

$$r_a=\frac{\sum r}{c} \tag{9}$$

式中：r_a——平均粒子半径；r——粒子半径；c——粒子数目。

在颗粒学中，颗粒分散指数(PDI)可被用来描述颗粒样品中粒径分布的均一性。PDI越小，表示颗粒尺寸越接近；反之则表示颗粒尺寸分布宽，本文将其作为TPV橡胶相的结构特征，可表示为

$$\mathrm{PDI}=\frac{\sigma^2}{r_a^2} \tag{10}$$

$$\sigma=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{c}(d_i-2r_a)^2}{c}} \tag{11}$$

式中：σ——标准偏差；d_i——第i个粒子的粒径。

通过Python编程，后处理开发主要是将前处理涉及到的各种结构参数以及平均塑性应变、残余变形等仿真结果输出到.txt文件中。后处理的部分源代码如下：

```
cpFile.write('average_plastic_strain='+str(average_plastic_strain) + "\n") # 平均塑性应变
cpFile.write('average_distance ='+str(average_distance) + "\n") # 平均粒子间距
```

```
cpFile.write('average radius ='+str(average_radius) + "\n") # 平均粒子半径
cpFile.write('PDI ='+str(pdi) + "\n") # 粒子分散指数
```

1.5.2 Isight自动化仿真流程:为了评估上述特征参数对TPV回弹性的影响,可以采用机器学习的方法进行分析。然而,机器学习的准确性通常依赖大量的数据集,并且每个有限元模型一次只能获得一个样本,手动获取大量样本非常耗时。因此,使用Isight软件集成Abaqus和Python软件,通过软件内置的Simcode组件和DOE(Design of experiments)试验设计组件,构建了联合仿真流程,如Fig.2所示。此流程能够自动化仿真过程,从而生成多组样本结果,大大提高了效率,确保了数据的多样性和充分性,更有助于后续的分析评估[18]。

Simcode组件是一个通用接口,它包含了DataExchanger(修改程序输入文件)、OS command(执行应用程序)及另一个DataExchanger(读取程序输出文件)[19]。在修改程序输入文件环节需要导入完整的.py文件,包含Abaqus的全部仿真过程。在执行应用程序环节,通过导入.bat批处理文件,以非界面模式(NO GUI)启动ABAQUS/CAE,并同时调用输入文件进行模型的仿真分析。最后,在读取程序输出文件环节导入生成的.txt文件,即可识别所有特征参数及仿真实验结果。

DOE试验设计提供了一种系统且有效的方法来分析设计空间,为设计变量筛选、评估设计变量影响提供了必要的信息[20]。Isight中包含的DOE技术有正交阵列、中心复合设计、拉丁超立方设计,全因子设计等。为了充分覆盖设计变量的范围,采用拉丁超立方设计对相关设计变量进行500次采样,并运行获得500组数据样本。Isight运行过程示意图如Fig.3所示。

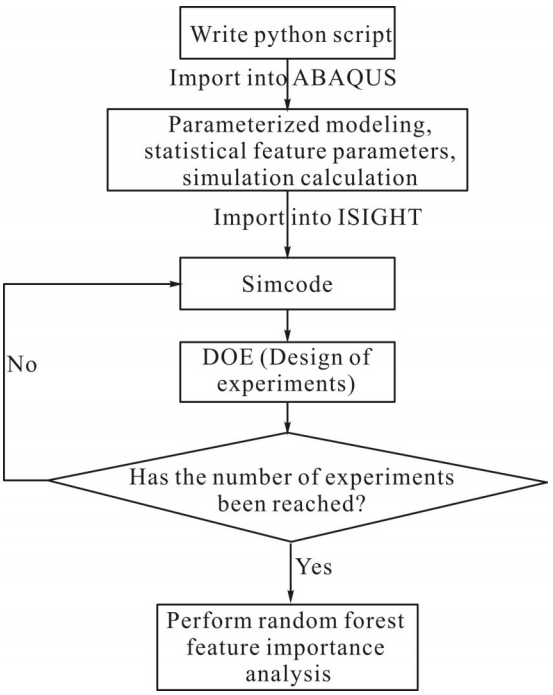


Fig. 2 Flowchart of automated simulation process combining Isight and Abaqus

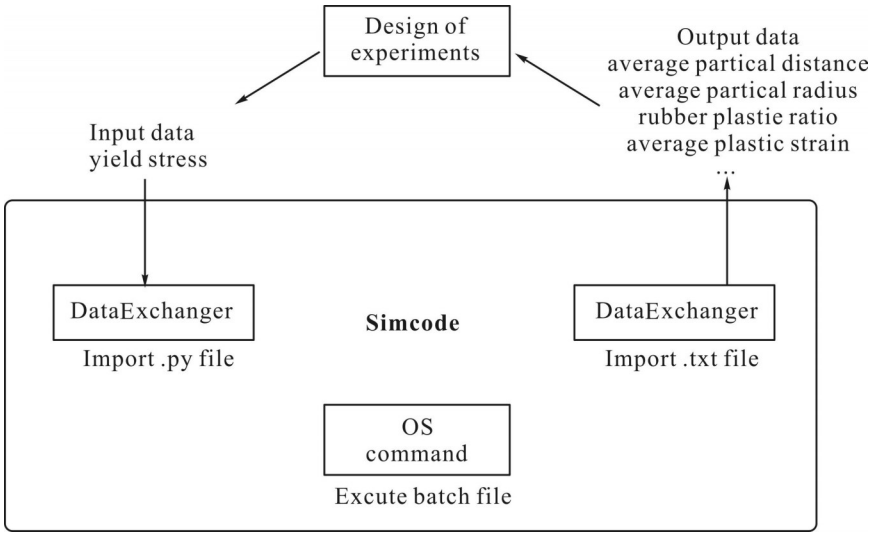


Fig. 3 Diagram of Isight workflow

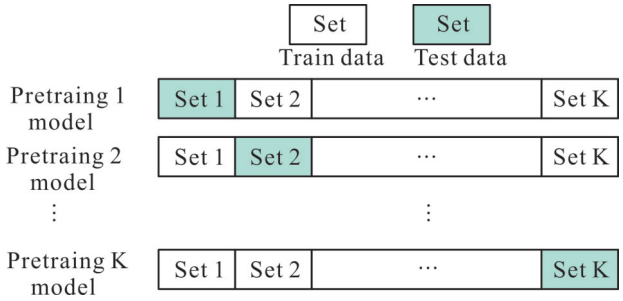


Fig. 4 K-fold cross-validation

2 结果与讨论

2.1 基于随机森林算法的模型构建与评估

本文基于随机森林算法构建了TPV残余变形的预测模型。首先，利用Isight集成Abaqus和Python获取了500组仿真样本作为数据集，并且为了探讨样本数量对TPV预测模型的影响，随机将数据集划分成Case1，Case2，Case3和Case4，分别含有100，200，300和500个样本。此外，将TPAE基体屈服强度、粒子平均半径、粒子分散相、粒子平均间距、橡塑比、平均塑性应变作为特征参数，残余变形作为目标参数。将数据集按8:2的比例划分为两部分，分别作为训练集和测试集。

在模型训练前，采用K折交叉验证的方式对数据集作预训练处理，这种方法能够提高模型预测结果的可信度[21]。如Fig.4所示，数据集被随机分为K个互不重叠的子集，这些子集也称为折叠。接着进行K次模型训练，每次训练时保留1个折叠作为测试数据，其余K-1个折叠用于训练数据。每次训练使用不同的折叠作为训练集。然后，选择测试误差最小的模型，并保留期网络结构和参数进行学习，最终训练模型。

预测模型的准确性通常由决定系数(R^2)、平均绝对误差(MAE)确定。R^2用于检验预测模型对样本数据的拟合情况，其数值越接近1，表明预测效果越好；平均绝对误差表示预测值与实际值之间的平均偏离程度,其值越小越好。随机森林算法在预测TPV残余变形时的误差结果如Tab.3所示，Case1训练集的R^2达到了0.981，显著高于测试集的0.882，这表明模型存在过拟合现象，导致其在实际测试时的泛化能力较差。随着Case 2，Case 3和Case 4逐渐增加样本数量，过拟合现象逐渐减弱，最终，Case 4的训练集与测试集R^2差值仅有0.058，表明模型过拟合程度很低，具有良好的实用效果。

Tab. 3 Prediction model error results

Prediction model		R^2	*MAE*
Case 1	Train set	0.981	0.036
	Test set	0.882	0.081
Case 2	Train set	0.971	0.037
	Test set	0.903	0.071
Case 3	Train set	0.973	0.037
	Test set	0.914	0.063
Case 4	Train set	0.977	0.034
	Test set	0.919	0.069

Fig.5展示了实际值与预测值之间的关系，提供了直观的可视化信息。随着模型样本数量增加，可以明显观察到预测模型整体的R^2值逐渐增加，这进一步表明，随机森林预测模型对残余变形的预测结果具有较高的可靠性。

2.2 基于随机森林的特征重要性分析

随机森林预测模型通过评估每个特征参数对目标参数的贡献度来进行特征重要性分析。Fig.6展示了Case 4中6种特征参数对残余变形的贡献情况。分析表明，热塑相基体的平均塑性应变是影响TPV残余变形的最重要因素，其相对重要性高达81%，这表明热塑性相的塑性变形是抑制TPV回弹性提高的主要原因。在橡塑比变化程度较小的情况下，对残余变形的影响不如平均塑性应变显著。此外，热塑相基体进入屈服阶段时，强度的变化对残余变形几乎没有影响，这说明基体屈服强度与仿真模型的回弹性无关。平均粒子半径、平均粒子间距和PDI这3

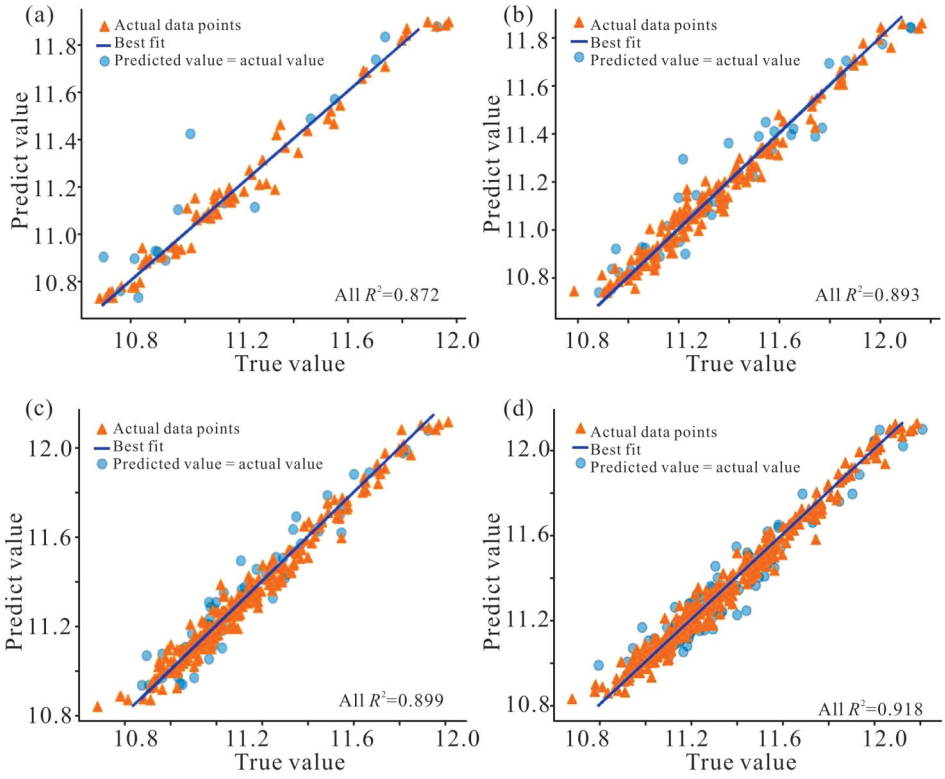


Fig. 5 Joint scatter plot of actual and predicted values for residual deformation using the Random Forest model: (a) Case 1; (b) Case 2; (c) Case 3; (d) Case 4

种结构参数对残余变形的贡献同样较低。因此,相比于降低材料本身的塑性,通过改善这类结构参数难以显著提升TPV回弹性。

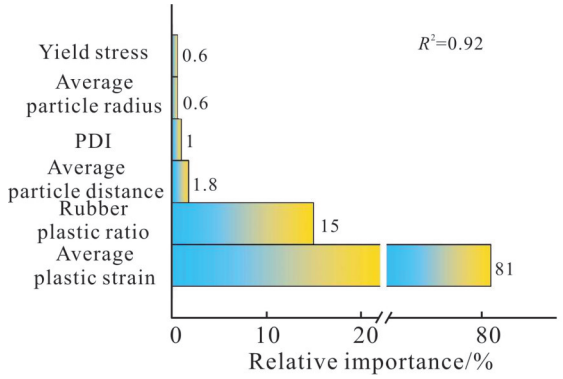


Fig. 6 Importance of different characteristic parameters on the residual deformation of TPV

基于特征重要性分析结果,选取平均塑性应变与橡塑比绘制了关于残余变形的二元偏相关图,如Fig.7所示。可以明显观察到,随着平均塑性应变的增加以及橡塑比减小,仿真模型的残余变形逐渐增加,这表明TPV回弹性变差。因此,降低TPV在拉伸过程中的塑性应变以及合理调控橡塑组成比是有效提高TPV回弹性的关键因素。

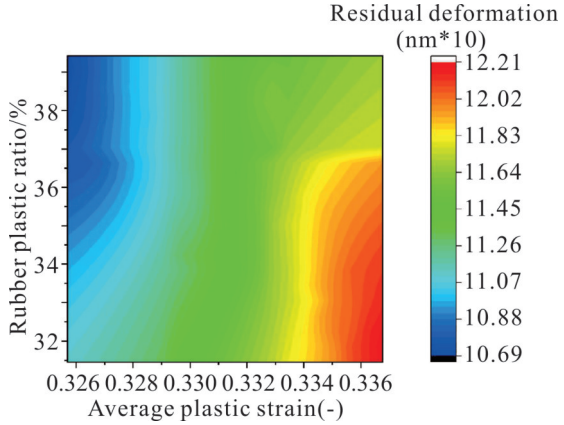


Fig. 7 Binary partial correlation diagram of important features

3 结论

本文提出了一种基于数据驱动的TPV回弹性能的预测方法。通过实现TPV微观结构参数提取和自动化仿真流程,生成了多组特征参数作为数据集,并使用K折交叉验证与随机森林算法构建预测模型,

揭示了6种特征参数对TPV残余变形的贡献情况。结果表明，TPV粒子的结构参数对回弹性的影响较小，而基体的平均塑性应变与橡塑比是影响TPV回弹性的关键因素。该研究方法同样适用于深度挖掘TPV的其它材料性能，为研发高性能TPV提供了理论指导。

参考文献：

[1] Leblanc J L. Nonlinear viscoelastic characterization of molten thermoplastic vulcanizates (TPV) through large amplitude harmonic experiments[J]. Rheologica Acta, 2007, 46: 1013-1027.

[2] Ma L, Li C, Liu C. Construct the relationship of the interface structure-properties for TPV via micromechanical method based on cohesive zone model[J]. Polymer, 2023, 286: 126348.

[3] Ghahramani N, Iyer K A, Doufas A K, *et al*. Rheology of thermoplastic vulcanizates (TPVs)[J]. Journal of Rheology, 2020, 64: 1325-1341.

[4] Li S, Tian H, Hu G H, *et al*. Effects of shear during injection molding on the anisotropic microstructure and properties of EPDM/PP TPV containing rubber nanoparticle agglomerates[J]. Polymer, 2021, 229: 124008.

[5] Shen Y, Tian H, Pan W, *et al*. Unexpected improvement of both mechanical strength and elasticity of EPDM/PP thermoplastic vulcanizates by introducing β-nucleating agents[J]. Macromolecules, 2021, 54: 2835-2843.

[6] Sahu V K, Sonkusare R, Biswas K, *et al*. In situ experiments: paving ways for rapid development of structural metallic materials for a sustainable future[J]. Journal of the Indian Institute of Science, 2022, 102: 173-210.

[7] Ma L, Yang W, Jiang C. Stretchable conductors of multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) filled thermoplastic vulcanizate (TPV) composites with enhanced electromagnetic interference shielding performance[J]. Composites Science and Technology, 2020, 195: 108195.

[8] Thongnuanchan B, Nantayos W, Lopattananon N, *et al*. New thermoplastic vulcanizate based on acetoacetoxy functionalized natural rubber/polyamide12 blend filled with carbon black[J]. Journal of Polymers and the Environment, 2019, 27: 1807-1820.

[9] Liu Y, Niu C, Wang Z, *et al*. Machine learning in materials genome initiative: a review[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2020, 57: 113-122.

[10] Liu C, Ma L, He C, *et al*. Prediction of comprehensive mechanical properties of thermoplastic vulcanizate (TPV) with various composition ratios based on a micromechanical method [J]. Modern Physics Letters B, 2023, 37: 2250230.

[11] Xu X, Ma L, Guo H, *et al*. A predictive model for the relationship between processing conditions and properties of thermoplastic vulcanizates (TPVs) via machine learning[J]. Composites Science and Technology, 2023, 240: 110095.

[12] Guo K, Yang Z, Yu C H, *et al*. Artificial intelligence and machine learning in design of mechanical materials[J]. Materials Horizons, 2021, 8: 1153-1172.

[13] Qi Z, Zhang N, Liu Y, *et al*. Prediction of mechanical properties of carbon fiber based on cross-scale FEM and machine learning [J]. Composite Structures, 2019, 212: 199-206.

[14] Davis L C. Flow rule for the plastic deformation of particiulate metal-matrix composites[J]. Computational Materials Science, 1996, 6: 310-318.

[15] Tian W, Qi L, Liang J, *et al*. Evaluation for elastic properties of metal matrix composites with randomly distributed fibers: two-step mean-field homogenization procedure versus FE homogenization method[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2016, 658: 241-247.

[16] L'abee R M A, Van D M, Spoelstra A B, *et al*. The rubber particle size to control the properties-processing balance of thermoplastic/cross-linked elastomer blends[J]. Soft Matter, 2010, 6: 1758.

[17] Ganesh R, Dude D P, Kuna M, *et al*. ProCrackPlast: a finite element tool to simulate 3D fatigue crack growth under large plastic deformations[J]. International Journal of Fracture, 2023, 243: 65-90.

[18] 谢显晨. 基于ISIGHT的FSAE.车前后翼气动特性分析及优化[D]. 扬州: 扬州大学, 2019.
Xie X C. Aerodynamic characteristic analysis and optimization of front and rear wings of an fsae car based on Isight[D]. Yangzhou: Yangzhou University, 2019.

[19] 刘锦武. 某汽车悬架K_C鲁棒性设计及其实现研究[D]. 桂林: 广西科技大学, 2017.
Liu J W. Robustness design and implementation of a vehicle suspension K&C[D]. Guilin: Guangxi University of Science and Technology, 2017.

[20] Koch P N, Evans J P, Powell D. Interdigitation for effective design space exploration using Isight[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2002, 23: 111-126.

[21] Wong T T, Yeh P Y. Reliable accuracy estimates from *k*-fold cross validation[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2020, 32: 1586-1594.

One Method for Analyzing Thermoplastic Vulcanizates Microscopic Resilience Performance Based on Isight Automated Simulation

Chengyuan He[1], Lifeng Ma[1,2]

(*1. School of Mechanical and Automotive Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China; 2. College of Materials Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China*)

ABSTRACT: Thermoplastic vulcanizates (TPVs) have significant advantages in replacing traditional rubber due to their low energy consumption and recyclability, but their application in dynamic sealing is still limited by their resilience performance. This study proposed a method for investigating the resilience performance of TPV. A 2D random multi-particle model representing the microstructure of TPV was established through Abaqus and Python. Simulation model parameters and results were extracted through programming, and an automated simulation process on the Isight platform generated a material simulation database, effectively addressing the lack of machine learning datasets in the TPV field. The resilience performance of TPVs was predicted using K-fold cross-validation and random forest algorithms, and the model accuracy was verified. Feature importance analysis and bivariate partial correlation plots reveal that the matrix plastic strain and rubber-plastic ratio have the greatest impact on the resilience performance of TPV, while the influence of the structural parameters of rubber particles is limited.

Keywords: thermoplastic vulcanized rubber; Isight platform; machine learning; elastic recovery