

УДК 539.3

Е.С. Нечаева, П.В. Трусов

Пермский государственный технический университет (г. Пермь)

КОНСТИТУТИВНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ С ВНУТРЕННИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ: ОБЩАЯ СТРУКТУРА И МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМИРОВАНИЯ

Abstract

The constitutive model of high density polyethylene as a semicrystalline polymer material is developed. To construct the constitutive model the multilevel approach, based on using of internal variables – parameters, describing state and evolution of the material meso- and microstructure during deformation process, – in the model structure is applied. According to the material structural characteristics three scale levels are brought into the model. As basic mechanisms of inelastic deformation of the material at the meso-level the following ones are considered: the interlamellar shear, the shear on the crystallographic slip systems in crystallite-lamellae and the rotational mode of deformation. The common structure of the constitutive model and the algorithm of its numerical realization are developed, computational results are interpreted.

Частично кристаллические полимерные материалы, к которым относится полиэтилен низкого давления (ПЭНД), используются в различных отраслях промышленности. Например, в химической промышленности, нефтегазовой отрасли при строительстве трубопроводов для транспортировки агрессивных сред широкое распространение получили трубопроводы из композиционных материалов на основе полимерных матриц, армированные различными способами для увеличения несущей способности (например, полимерные армированные трубы, металлопластовые трубы и т.д.). В подобных приложениях материал конструкции, как правило, работает в условиях сложного напряженного состояния, часто при высоких скоростях приложения нагрузки, определяемых (например, для трубопровода) условиями работы напорного оборудования, при различных температурных условиях [1]. Все вышеперечисленные факторы оказывают существенное влияние на изменение физико-механических и прочностных свойств материала в процессе деформирования, что характерно для всех частично кристаллических полимерных материалов. В процессе деформирования (особенно при больших неупругих деформациях) вследствие появления наведенной анизотропии свойств за счет эволюции структуры материала на более глубоких масштабных уровнях (формирования текстуры) изменяются свойства материала в рамках представительного объема макроуровня. Таким образом, отклик материала при деформировании существенно зависит от истории воздействий, что должно найти свое отражение в структуре модели материала, применяемой для описания его деформационного поведения. Актуальной является разработка моделей частично кристаллических полимерных материалов, позволяющих описывать эволюцию их микроструктуры в процессе деформирования, которые могут быть использованы для теоретического исследования работоспособности элементов конструкций из подобных материалов с учетом влияния наведенной анизотропии свойств.

Конститутивные модели с внутренними переменными

В данной работе при построении модели материала используется подход, основанный на использовании в ее структуре внутренних переменных [2]. В отличие от использования определяющих соотношений (ОС) в операторной форме, когда предыстории воздействий учитываются путем введения достаточно сложных интегральных операторов над историей нагружения, при применении данного подхода

предыстории воздействий вводятся в рассмотрение в явном виде – их носителями являются дополнительно вводимые параметры – внутренние переменные, описывающие микроструктуру материала.

Принимается следующая гипотеза: реакция материала в представительном объеме рассматриваемого масштабного уровня в каждый момент времени полностью определяется значениями тензорзначных термомеханических характеристик материала, конечного набора внутренних переменных, параметров физико-механических воздействий и их производных по времени требуемого порядка в исследуемый момент времени.

Как показывают многочисленные экспериментальные исследования, процессы неупругого деформирования достаточно чувствительны к изменению мезо- и микроструктуры материала, которая существенным образом трансформируется в процессе деформирования. При этом, с одной стороны, макронагружения (макродеформации) являются источником изменения мезо- и микроструктуры, с другой стороны, эволюция мезо- и микроструктуры является фактором, определяющим поведение материала на макроуровне, вследствие чего при моделировании больших неупругих деформаций необходимо учитывать эволюцию мезо- и микроструктуры материала уже в процессе деформирования. Это возможно сделать неявным и явным способом. В первом случае в структуру ОС вводятся достаточно сложные операторы над историей макронагружения (макродеформации), неявным образом отражающие эволюцию мезо- и микроструктуры. Как правило, в этом случае трудно выявить и обосновать физический смысл, механизмы деформирования, описываемые различными операторами модели материала. В последние десятилетия все большее признание находит второй подход – явное введение в структуру определяющих соотношений параметров, описывающих состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры материала, с формулировкой эволюционных (кинетических) уравнений для этих параметров, называемых внутренними переменными. В литературе, посвященной различным теориям процессов необратимого деформирования, внутренними переменными называют параметры, отражающие структуру и механизмы деформирования на мезо- и микроуровнях.

К основным преимуществам данного подхода относятся ясность физической интерпретации эволюционных и определяющих соотношений, возможность прямой или косвенной проверки результатов анализа эволюции мезо- и микроструктуры, относительная простота совокупности уравнений модели (определяющих и эволюционных), широкие возможности обработки результатов решения эволюционных уравнений при переходе к макропеременным (с использованием различных операторов осреднения). Кроме того, поскольку эволюционные уравнения описывают фундаментальные физические механизмы, реализуемые в широком классе реальных материалов, модели данного типа обладают значительной универсальностью.

К основным недостаткам рассматриваемого подхода следует отнести: большое число внутренних переменных и соответствующих эволюционных уравнений, необходимых для адекватного описания процесса неупругого деформирования; трудности решения «проблемы замыкания» ОС; отсутствие в подавляющем большинстве случаев аналитических решений системы эволюционных и определяющих соотношений, что приводит к необходимости использования численных методов.

Приведем общую структуру моделей материала, построенных на принятой гипотезе. Пусть Σ – произвольная мера напряженного состояния, Σ^r – ее объективная скорость изменения, $P_\alpha, \alpha = \overline{1, A}$ – параметры воздействия термомеханической (температура, мера деформированного состояния и т.д.) и нетермомеханической

(радиация, химические воздействия и т.д.) природы. Параметры \mathbf{P}_α содержат все или часть мер, характеризующих напряженное и деформированное состояние тела. В качестве внутренних переменных в общем случае используем тензорзначные переменные $\mathbf{J}_\beta, \beta = \overline{1, V}$. Часть внутренних переменных непосредственно входит в структуру ОС данного масштабного уровня, назовем их явными (explicit) внутренними переменными и обозначим $\mathbf{J}_\gamma^e, \gamma = \overline{1, V^e}$. Вторая группа внутренних переменных входит в качестве переменных в эволюционные уравнения (ЭУ). Переменные этой группы обозначим как $\mathbf{J}_\delta^i, \delta = \overline{1, V^i}$ и будем называть неявными или скрытыми (implicit) внутренними переменными. Скрытые внутренние переменные характеризуют изменение свойств материала в процессе деформирования на более глубоких масштабных уровнях. Таким образом, полная совокупность внутренних переменных определяется как

$$\{\mathbf{J}_\beta\} = \{\mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{J}_\delta^i\}, \beta = \overline{1, V}, \gamma = \overline{1, V^e}, \delta = \overline{1, V^i}, V = V^e + V^i. \quad (1)$$

Определяющее соотношение в общем виде может быть записано следующим образом в разрешенном относительно напряжений виде:

$$\Sigma(\mathbf{R}_0, t) = \mathbf{F}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha^{(1)}, \dots, \mathbf{P}_\alpha^{(n)}; \mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{J}_\gamma^{e(1)}, \dots, \mathbf{J}_\gamma^{e(m)}); \quad (2)$$

или в скоростной форме

$$\Sigma^r(\mathbf{R}_0, t) = \mathbf{F}^r(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha^{(1)}, \dots, \mathbf{P}_\alpha^{(n)}; \mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{J}_\gamma^{e(1)}, \dots, \mathbf{J}_\gamma^{e(m)}), \quad (3)$$

где $\mathbf{F}(\cdot), \mathbf{F}^r(\cdot)$ – тензорзначные (второго ранга) функции параметров $\mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{P}_\alpha$ и их производных (обычных или независящих от выбора системы отсчета) по времени в момент времени t ; в общем случае, область определения указанных параметров (по пространственной переменной) – все исследуемое тело V .

Определяющие соотношения (2) или (3) должны быть дополнены еще двумя группами соотношений – эволюционными и замыкающими. К эволюционным уравнениям относятся соотношения для скрытых внутренних переменных $\mathbf{J}_\delta^i, \delta = \overline{1, V^i}$. В общем виде изменение \mathbf{J}_δ^i может быть описано следующими эволюционными (кинетическими) уравнениями, которые можно записать разрешенными в терминах или самих внутренних переменных, или их объективных производных:

$$\dot{\mathbf{J}}_\delta^i(\mathbf{R}_0, t) = \mathbf{F}_\delta(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha^{(1)}, \mathbf{P}_\alpha^{(2)}, \dots, \mathbf{P}_\alpha^{(q)}, \mathbf{J}_\beta^i); \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_\delta^{ir}(\mathbf{R}_0, t) = \mathbf{F}_\delta^r(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha^{(1)}, \mathbf{P}_\alpha^{(2)}, \dots, \mathbf{P}_\alpha^{(q)}, \mathbf{J}_\beta^i). \quad (5)$$

Для замыкания модели материала используются уравнения, связывающие явные внутренние переменные, непосредственно входящие в структуру ОС рассматриваемого масштабного уровня, с параметрами воздействия и скрытыми внутренними переменными. Аналогично соотношениям (4)–(5) замыкающие уравнения (ЗУ) могут быть записаны в одном из двух видов:

$$\mathbf{J}_\gamma^e(\mathbf{R}_0, t) = \mathbf{F}_\gamma(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha^{(1)}, \mathbf{P}_\alpha^{(2)}, \dots, \mathbf{P}_\alpha^{(q)}, \mathbf{J}_\delta^i); \quad (6)$$

$$\mathbf{J}_\gamma^{er}(\mathbf{R}_0, t) = \mathbf{F}_\gamma^r(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha^{(1)}, \mathbf{P}_\alpha^{(2)}, \dots, \mathbf{P}_\alpha^{(q)}, \mathbf{J}_\delta^i), \quad (7)$$

в соотношениях (4)–(7) \mathbf{F}_δ (\mathbf{F}_δ^r) и \mathbf{F}_γ (\mathbf{F}_γ^r) – тензорзначные функции соответствующего ранга (или операторы простой структуры, например, дифференциальные), аргументы которых определяются в исследуемый момент времени t .

Для построения замыкающих уравнений используется один из возможных подходов, основанный на построении иерархической совокупности моделей нескольких масштабных уровней и установлении связей между однотипными характеристиками процесса деформирования соседних уровней. В этом случае феноменологические соотношения записываются для самого низкого масштабного уровня в принятой иерархической совокупности.

В качестве полной системы уравнений, описывающих поведение материала, будем рассматривать совокупность ОС (2) или (3), ЭУ (4) или (5) и ЗУ (6) или (7), которая называется конститутивной моделью (КМ) материала.

Структура и механизмы деформирования полиэтилена низкого давления

В качестве основных морфологических образований в структуре полиэтилена низкого давления рассматриваются сферолиты и ламели. Сферолиты – это поликристаллические образования, состоящие из направленных по радиусу ламелей и аморфных участков. Размер сферолита зависит от величины переохлаждения при кристаллизации. Для полиэтилена размер сферолита обычно составляет приблизительно 100 мкм [3]. Ламели – самые общие морфологические единицы частично кристаллического полимерного материала – представляют собой широкие тонкие длинные пластинки-кристаллиты, разделенные слоями аморфной фазы. При кристаллизации полиэтилена из расплава чаще всего образуются ламели в форме сравнительно тонких пластин, ламели полиэтилена скручены вдоль длинной оси. Кристаллитам полиэтилена присущи свойства трансляционной симметрии (орторомбическая решетка). Кристаллографические оси ламелей полиэтилена ориентированы следующим образом: ось b орторомбического кристалла параллельна направлению радиального роста, оси a и c перпендикулярны этому направлению.

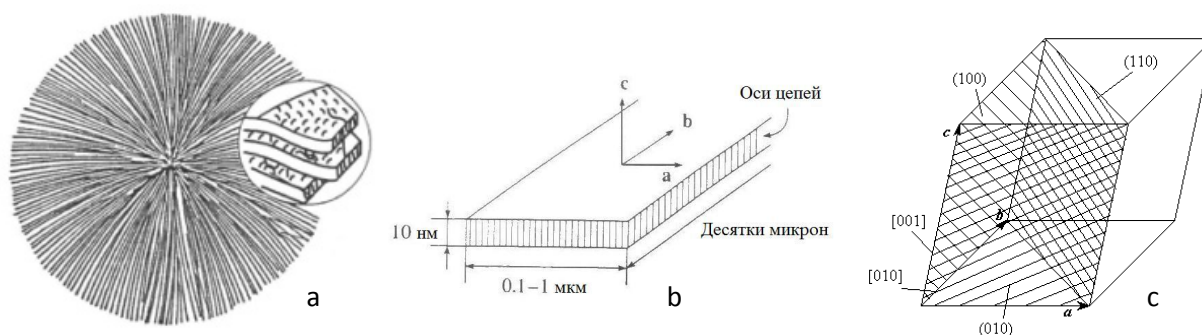


Рис. 1. Морфологические единицы в структуре ПЭНД: (а) – сферолит, (б) – ламель [3]; схема ячейки орторомбического кристалла ПЭНД (с)

Процессы неупругого деформирования в кристаллитах частично кристаллических полимерных материалов проходят по кристаллографическим механизмам, похожим на таковые в неполимерных кристаллах. Как правило, выделяют следующие основные механизмы деформирования, реализующиеся в частично кристаллическом полимере, в частности, в полиэтилене низкого давления: межламеллярный сдвиг – сдвиг в плоскости, разделяющей две параллельные ламели (в аморфной фазе материала); нормальная мода межламеллярного сдвига – пространственное раздвижение ламелей; повороты блоков из нескольких параллельных ламелей; сдвиг по кристаллографическим системам скольжения в ламелях; двойникование – образование в кристаллите областей с закономерно измененной

ориентацией кристаллической структуры (структуры двойниковых образований являются либо зеркальным отражением атомной структуры матрицы относительно определенной плоскости – плоскости двойникового, либо образуются поворотом структуры матрицы вокруг кристаллографической оси – оси двойникового – на некоторый угол, постоянный для данного материала); мартенситные превращения – полиморфные превращения, при которых изменение взаимного расположения составляющих кристаллит атомов происходит путем их упорядоченного перемещения. Количественный вклад механизмов двойникового и мартенситных превращений в макроскопическую неупругую деформацию в полиэтилене является незначительным [3]. Таким образом, в данной работе в качестве основных механизмов неупругого деформирования для полиэтилена низкого давления рассматриваются: межламеллярный сдвиг, сдвиг по кристаллографическим системам скольжения в ламелях, поворот пакета из нескольких параллельных ламелей как жесткого целого.

Структура конститутивной модели полиэтилена низкого давления

В соответствии с особенностями структуры материала и механизмами деформирования рассматриваемого материала в разрабатываемой модели вводятся три масштабных уровня: макроуровень – уровень представительного объема, мезоуровень I и мезоуровень II. Элементом мезоуровня I является один сферолит; представительный объем макроуровня, в свою очередь, состоит из N_s сферолитов. Элементом мезоуровня II является пакет, состоящий из нескольких параллельных ламелей с прослойками аморфной фазы; элемент мезоуровня I состоит из N_q^s элементов мезоуровня II.

При построении модели на каждом масштабном уровне принимаются следующие гипотезы:

1. Гипотеза Фойхта об однородности полных деформаций в рамках представительного объема рассматриваемого масштабного уровня. Таким образом, используя тензор скоростей полных деформаций макроуровня, определяем тензор скоростей полных деформаций для каждого элемента мезоуровня I в рамках представительного объема макроуровня. Аналогично определяем тензор скоростей полных деформаций для каждого пакета ламелей в рамках элемента представительного объема мезоуровня I:

$$\mathbf{d}_I^{(s)}(t) = \mathbf{D}(t), \quad s = \overline{1, N_s}; \quad \mathbf{d}_{II}^{(qs)}(t) = \mathbf{d}_I^{(s)}(t), \quad p = \overline{1, N_q^s}, \quad (8)$$

где s – номер сферолита, t – время или неубывающий параметр нагружения, p – номер пакета ламелей в объеме сферолита s , N_s – число сферолитов в рамках представительного объема макроуровня, N_q^s – число пакетов ламелей в рамках сферолита s , \mathbf{D} – тензор скоростей полных деформаций в рамках представительного объема материала на макроуровне, $\mathbf{d}_I^{(s)}$ – тензор скоростей полных деформаций сферолита s – элемента мезоуровня I, $\mathbf{d}_{II}^{(qs)}$ – тензор скоростей полных деформаций пакета ламелей q –элемента мезоуровня II – в рамках сферолита s .

2. Гипотеза об аддитивности упругих и неупругих скоростей деформаций в рамках представительного объема каждого масштабного уровня:

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{D}^e(t) + \mathbf{D}^{in}(t); \quad \mathbf{d}_I^{(s)}(t) = \mathbf{d}_I^{(s)e}(t) + \mathbf{d}_I^{(s)in}(t); \quad \mathbf{d}_{II}^{(qs)}(t) = \mathbf{d}_{II}^{(qs)e}(t) + \mathbf{d}_{II}^{(qs)in}(t), \quad (9)$$

где \mathbf{D}^e и \mathbf{D}^{in} – тензоры скоростей упругих и неупругих деформаций на уровне макропредставительного объема материала, $\mathbf{d}_I^{(s)e}$ и $\mathbf{d}_I^{(s)in}$ – тензоры скоростей упругих и

неупругих деформаций на мезоуровне I, $\mathbf{d}_{II}^{(qs)e}$ и $\mathbf{d}_{II}^{(qs)in}$ – тензоры скоростей упругих и неупругих деформаций на мезоуровне II.

3. В качестве определяющего соотношения на каждом масштабном уровне используется обобщенный закон Гука в релаксационной форме, в который в качестве явной внутренней переменной входит тензор скоростей неупругих деформаций соответствующего масштабного уровня, определяемый с более глубоких масштабных уровней:

$$\Sigma^r = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}); \quad \dot{\Sigma}^r = \dot{\Sigma} - \mathbf{W} \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \mathbf{W}. \quad (10)$$

На макроуровне и мезоуровне I тензоры скоростей неупругих деформаций определяются из замыкающих уравнений, на мезоуровне II – феноменологически, в результате моделирования процесса деформирования элемента мезоуровня II по выбранным деформационным модам. Тензоры упругих свойств в определяющих соотношениях на макроуровне и на мезоуровне I также являются явными внутренними переменными, определяются путем осреднения соответствующих характеристик с более глубоких масштабных уровней из эволюционных уравнений и характеризуют эволюцию физико-механических свойств материала на рассматриваемом масштабном уровне (формирование наведенной анизотропии свойств) в процессе неупругого деформирования.

На рис.2 представлена схема обмена данными между масштабными уровнями модели, характеризующая связи между уровнями.

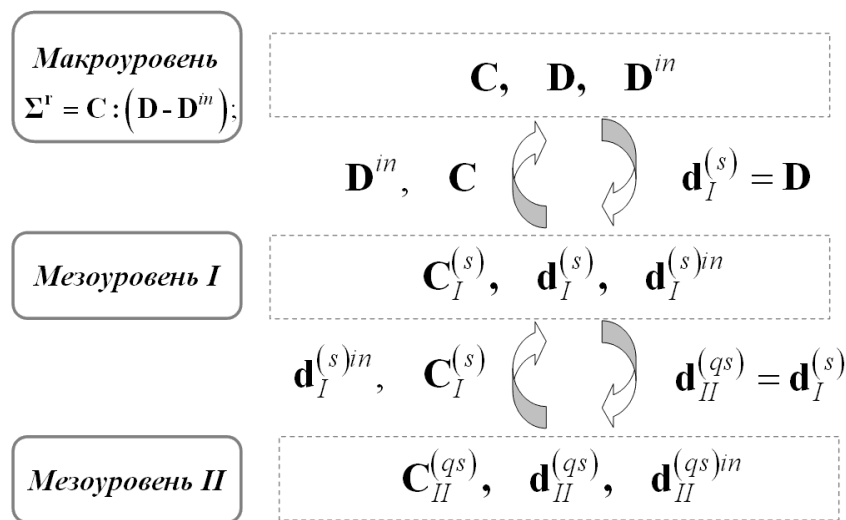


Рис. 2. Схема обмена данными между масштабными уровнями модели

4. В качестве базовой модели для элементов мезоуровня используется физическая упруго-вязкопластическая модель.

5. В элементе мезоуровня II вводится пять систем скольжения (СС) – четыре внутриламеллярных и одна межламеллярная. При этом считается, что на любом этапе процесса деформирования все системы скольжения являются активными.

6. Используя соотношения упруго-вязкопластической модели – зависимость скорости сдвига по СС (k) от сдвигового напряжения, действующего в данной СС, имеет вид нелинейного степенного закона, – на мезоуровне II определяем скорости сдвигов по каждой из СС следующим образом:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right|^{n_c} \text{sign}(\tau^{(k)}), \quad \sum_k \quad (11)$$

где $\dot{\gamma}_0$ – это «эталонная» скорость деформирования, являющаяся параметром материала и характеризующая скорость сдвига по системе скольжения при касательном напряжении, равном критическому напряжению сдвига, $\tau_c^{(k)} > 0$ – сопротивление сдвигу в системе скольжения (k); $n_c = \frac{1}{m_c}$ – величина, обратная чувствительности кристаллитов к скорости приложения нагрузки m_c , которая является константой материала.

7. Для учета упрочнения по системам скольжения в элементе мезоуровня II в процессе деформирования используются эволюционные уравнения, связывающие сопротивление сдвигу по каждой из систем скольжения с параметрами процесса (накопленными по системам скольжения сдвигами, напряжениями в системах скольжения). Для внутрислоистых систем скольжения

$$\tau_c^{(k)} = \tau_0^{(k)} - \mu_0 \sigma_n, \quad (12)$$

где σ_n – напряжение, нормальное к плоскости скольжения, $\tau_0^{(k)}$ – начальное критическое напряжение сдвига по соответствующей СС, μ_0 , $\tau_0^{(k)}$ – константы материала (табл. 1).

Таблица 1

Параметры внутрислоистых СС кристаллита ПЭНД [3]

№	Система скольжения	$\tau_0^{(k)}$, МПа	μ_0
1	(100)[001]	7,20	0,11
2	(010)[001]	15,60	0,20
3	(110)[001]	>13; (15,6)	–
4	(100)[010]	12,20	0,17

8. Для межслоистой СС в элементе мезоуровня II – аналогично:

$$\tau_c^{(l)} = \tau_0^{(l)} + f \left(\sum_{k=1}^K \alpha_k |\dot{\gamma}^{(k)}|, \alpha_l |\dot{\gamma}^{(l)}| \right); \quad \sum_{i=1}^I \alpha_i = 1, \quad (13)$$

где α_i – весовые коэффициенты, характеризующие вклад скорости сдвига по каждой из активных СС в упрочнение по межслоистой СС.

9. Касательные напряжения для каждой из СС пакета определяются из соотношения:

$$\mathbf{M}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} = \tau^{(k)}; \quad \mathbf{M}^{(k)} = \frac{(\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} + \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)})}{2}, \quad (14)$$

где (k) – номер системы скольжения, $\mathbf{M}^{(k)}$ – ориентационный тензор k -й системы скольжения. Значения компонент $\mathbf{n}^{(k)}$ и $\mathbf{b}^{(k)}$ приведены в табл.2.

Таблица 2

Компоненты векторов $\mathbf{n}^{(k)}$ и $\mathbf{b}^{(k)}$ для различных СС

СС	$n_1^{(k)}$	$n_2^{(k)}$	$n_3^{(k)}$	$b_1^{(k)}$	$b_2^{(k)}$	$b_3^{(k)}$
1	$\cos \alpha$	0	$-\sin \alpha$	$\sin \alpha$	0	$\cos \alpha$
2	0	1	0	$\sin \alpha$	0	$\cos \alpha$
3	$\frac{b \cos \alpha}{\sqrt{b^2 + a^2 \cos^2 \alpha}}$	$\frac{a \cos \alpha}{\sqrt{b^2 + a^2 \cos^2 \alpha}}$	$\frac{b \sin \alpha}{\sqrt{b^2 + a^2 \cos^2 \alpha}}$	$\sin \alpha$	0	$\cos \alpha$
4	$\cos \alpha$	0	$-\sin \alpha$	0	1	0
5	0	0	1	совпадает с направлением вектора касательных напряжений в межламеллярной плоскости		

где $\alpha = \angle(\vec{n}, \vec{c})$, где \vec{n} – нормаль к поверхности ламели; \vec{c} – вектор, определяющий направление молекулярных цепей в кристаллите; a, b и c – размеры ячейки периодичности кристаллита полиэтилена низкого давления. Угол α , константы a, b и c являются параметрами материала.

10. Тензор скоростей неупругих деформаций элемента мезоуровня II вычисляется с учетом сдвигов по всем СС в рассматриваемом элементе:

$$\mathbf{d}_{II}^{(ps)in} = \sum_{k=1}^K \mathbf{M}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} + \mathbf{M}^{(l)} \dot{\gamma}^{(l)}. \quad (15)$$

11. Для описания поворотов элементов мезоуровня II в рамках элемента мезоуровня I используется модель Тейлора полного стеснения:

$$\mathbf{w} = \sum_{k=1}^K \mathbf{N}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} + \mathbf{N}^{(l)} \dot{\gamma}^{(l)}; \quad \mathbf{N}^{(i)} = \frac{(\mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)} - \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{b}^{(i)})}{2}. \quad (16)$$

**Математическая постановка задачи
Макроуровень**

Для решения задачи на макроуровне используется стандартная система соотношений динамики сплошной среды, записанная в актуальной конфигурации [4] и включающая:

– уравнения равновесия (17)

$$\begin{aligned} \hat{\nabla} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \hat{\nabla} \mathbf{v} : \hat{\nabla} \boldsymbol{\sigma} + \hat{\mathbf{F}} + \hat{\mathbf{F}}_{in} &= 0, \quad \forall t \in (0, \infty); \\ \hat{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \hat{\mathbf{F}} + \hat{\mathbf{F}}_{in} &= 0, \quad t = 0, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\hat{\mathbf{F}}_{in} = -\rho \dot{\mathbf{v}}$ – инерционные силы;

– определяющее соотношение, а именно, обобщенный закон Гука в скоростной релаксационной форме (18)

$$\boldsymbol{\sigma}^r = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}); \quad (18)$$

– кинематические соотношения (19–20)

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\hat{\nabla} \mathbf{v} + \hat{\nabla} \mathbf{v}^T); \quad (19)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^{in}; \quad (20)$$

в совокупности с силовыми граничными (21) и начальными (22) условиями

$$\mathbf{n} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} - (\hat{\nabla} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + (\mathbf{n} \cdot \hat{\nabla} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hat{\mathbf{T}}, \quad \forall t \in (0, \infty), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_F; \quad (21)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hat{\mathbf{T}}, \quad t = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_F; \quad (22)$$

и кинематическими граничными условиями (23)

$$\mathbf{v} = \mathbf{V}, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_U. \quad (23)$$

Приняты следующие обозначения: $\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона в актуальной конфигурации, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, $\boldsymbol{\sigma}^r$ – объективная скорость изменения меры напряженного состояния, ρ – плотность материала, \mathbf{F} – вектор массовых сил, \mathbf{v} – вектор скоростей перемещений, \mathbf{C} – тензор упругих свойств элемента представительного макрообъема, \mathbf{D} – тензор деформации скорости, характеризующий полные деформации представительного макрообъема, $\mathbf{D}^e, \mathbf{D}^{in}$ – тензоры скоростей упругих и неупругих деформаций, \mathbf{T} – вектор поверхностных сил, \mathbf{n} – нормаль к границе, \mathbf{V} – вектор скоростей перемещений на границе.

В определяющие соотношения макроуровня входят две явные внутренние переменные – тензор упругих свойств \mathbf{C} и тензор скоростей неупругих деформаций \mathbf{D}^{in} , значения компонент которых в текущей конфигурации определяются из замыкающих уравнений (24):

$$\langle \mathbf{C}_{ijkl} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{C}_{ijkl}^{(s)}(t); \quad \langle \mathbf{D}^{in} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{d}_I^{(s)in}(t). \quad (24)$$

Роль эволюционных уравнений играют модели нижележащих (по шкале масштабов) уровней – мезоуровней I и II.

Мезоуровень

Для решения задачи на мезоуровне II используется следующая система определяющих соотношений, эволюционных и замыкающих уравнений:

– определяющие соотношения

$$\boldsymbol{\sigma}_{II}^{(qs)r}(t) = \mathbf{C}_{II}^{(qs)} : (\mathbf{d}_{II}^{(qs)} - \mathbf{d}_{II}^{(qs)in}); \quad \boldsymbol{\sigma}_{II}^{(qs)r} = \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{II}^{(qs)} - \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{II}^{(qs)} + \boldsymbol{\sigma}_{II}^{(qs)} \cdot \mathbf{w}; \quad (25)$$

– эволюционные уравнения для скрытых внутренних переменных (11-13);

– замыкающие уравнения, связывающие явные внутренние переменные мезоуровня II со скрытыми внутренними переменными данного масштабного уровня (15).

В качестве основного механизма деформирования на мезоуровне I в модели рассматривается ротационная мода. Повороты элементов мезоуровня II в рамках элемента мезоуровня I описываются с использованием соотношений модели Тейлора полного стеснения (16).

После определения тензоров спина для каждого пакета в рамках представительного объема мезоуровня I переопределяем их ориентационные тензоры $\mathbf{R}^{(qs)}$, интегрируя соотношение

$$\dot{\mathbf{R}}^{(qs)} = \mathbf{R}^{(qs)} \cdot \mathbf{w}^T. \quad (26)$$

Поскольку в результате интегрирования за счет погрешности ориентационный тензор может стать неортогональным, соотношение для его определения модифицировано:

$$\dot{\mathbf{R}}^{(qs)} = \left[\mathbf{R}^{(qs)} - \delta \left(\mathbf{R}^{(qs)} \cdot \mathbf{R}^{(qs)T} - \mathbf{E} \right) \right] \cdot \mathbf{w}^T, \quad (27)$$

где $(\mathbf{R}^{(qs)} \cdot \mathbf{R}^{(qs)T} - \mathbf{E})$ – невязка ортогонального ориентационного тензора; \mathbf{E} – единичный тензор; δ – декремент затухания – параметр, имеющий смысл «скорости» затухания ошибки.

В качестве замыкающих уравнений мезоуровня I используются соотношения

$$\langle \mathbf{C}_{I_{ijkl}}^{(s)} \rangle = \frac{1}{N_q^s} \sum_{q=1}^{N_q^s} \mathbf{C}_{II_{ijkl}}^{(qs)}(t); \quad \langle \mathbf{d}_I^{(s)in} \rangle = \frac{1}{N_q^s} \sum_{q=1}^{N_q^s} \mathbf{d}_{II}^{(qs)in}(t). \quad (28)$$

Результаты моделирования

Для качественного анализа разработанной конститутивной модели проведен вычислительный эксперимент на простой сдвиг. Рассматривается сдвиг в плоскости x_1-x_2 лабораторной системы координат:

$$v_1=2\beta x_2; \quad 2\beta=10^{-3} \text{ с}^{-1}; \quad v_2=0; \quad v_3=0. \quad (29)$$

Для каждого элемента мезоуровня II используется тензор упругих свойств вида [5] (компоненты тензора записаны в локальной системе координат пакета):

$$[\mathbf{C}_{II_{ijkl}}^{(qs)}] = \begin{bmatrix} 7 & 3.8 & 4.7 & 0 & 0 & 0 \\ 3.8 & 7 & 4.7 & 0 & 0 & 0 \\ 4.7 & 4.7 & 81 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.6 \end{bmatrix} \quad [\text{ГПа}].$$

Значения остальных параметров материала при проведении расчетов взяты из работ [6, 7] и представлены ниже и в табл.1:

$$\dot{\gamma}_0=10^{-3} \text{ сек.}^{-1}; \quad \tau_0^{(l)} = 3.4 \text{ МПа}; \quad a=7.4 \text{ \AA}; \quad b=4.93 \text{ \AA}; \quad c=2.54 \text{ \AA}; \quad \alpha=34.4^\circ. \quad (30)$$

Параметры скоростной чувствительности кристаллитов m_a и m_c приняты равными 1/3.

Проведена серия расчетов для начальной стадии процесса деформирования – деформации до 0,5 по интенсивности. Рассмотрено три случая: моделирование деформационного поведения материала: 1) без упрочнения по системам скольжения с учетом поворотов (эксперимент №1, рис.3), 2) с упрочнением по внутривламеллярным системам скольжения без поворотов (эксперимент №2, рис.4), 3) с учетом упрочнения по внутривламеллярным системам скольжения и ротационной моды (эксперимент №3, рис.5). Проанализирована относительная активность различных механизмов деформирования элемента мезоуровня II: сдвиг вдоль направления молекулярных цепей в пакете (направление [001]), поперечный сдвиг (направление [010]), межламеллярный сдвиг.

Коэффициент относительной активности соответствующего механизма $\lambda \in [0, 1]$ вычисляется как отношение числа активных систем скольжения соответствующего типа к общему числу систем скольжения данного типа во всех пакетах в рамках представительного объема. Система скольжения здесь и далее считается активной, если

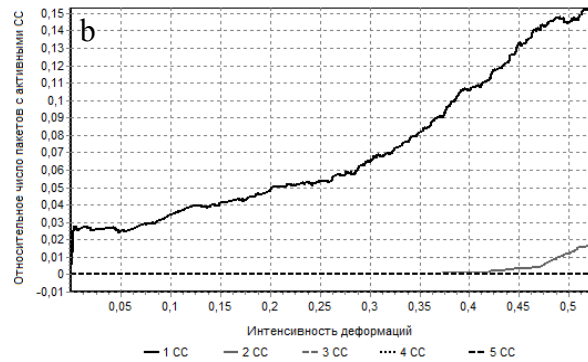
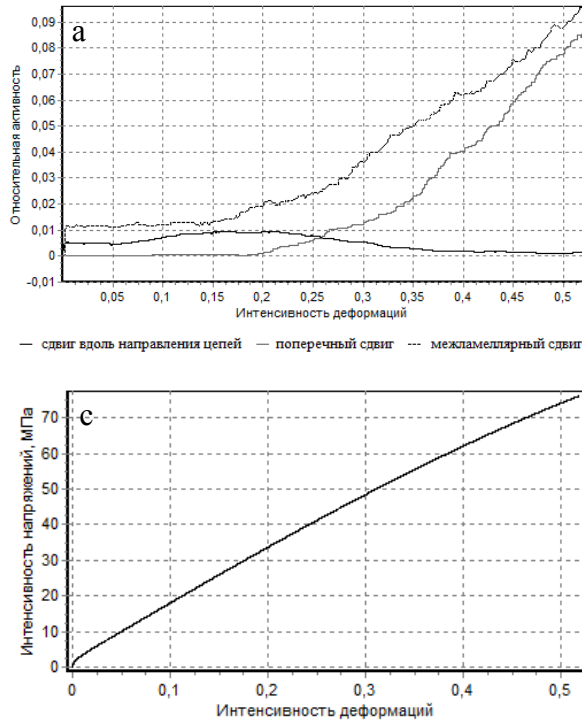


Рис. 3. Результаты вычислительного эксперимента без упрочнения с учетом поворотов: (а) относительная активность различных механизмов деформирования в элементе мезоуровня II; (б) относительное число пакетов с активными СС в зависимости от их количества; (с) диаграмма интенсивности напряжений в зависимости от интенсивности

для нее выполняется условие $\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \geq 1$; следует отметить, что хотя в вязкой модели все

системы скольжения на любом этапе процесса деформирования являются активными, однако если последнее условие не выполняется, то сдвиги по ним пренебрежительно малы. Кроме того, проанализировано относительное число пакетов, в которых активными в вышеописанном смысле являются одна, две, три, четыре или пять систем скольжения соответственно.

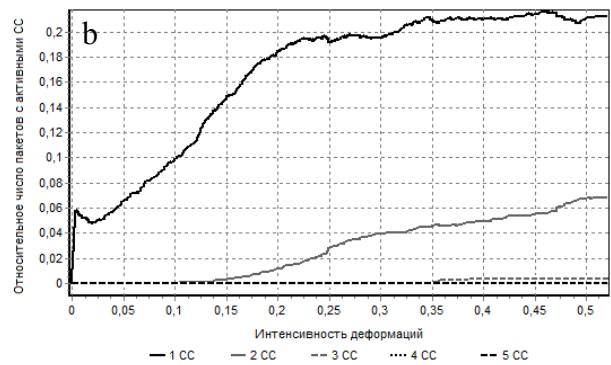
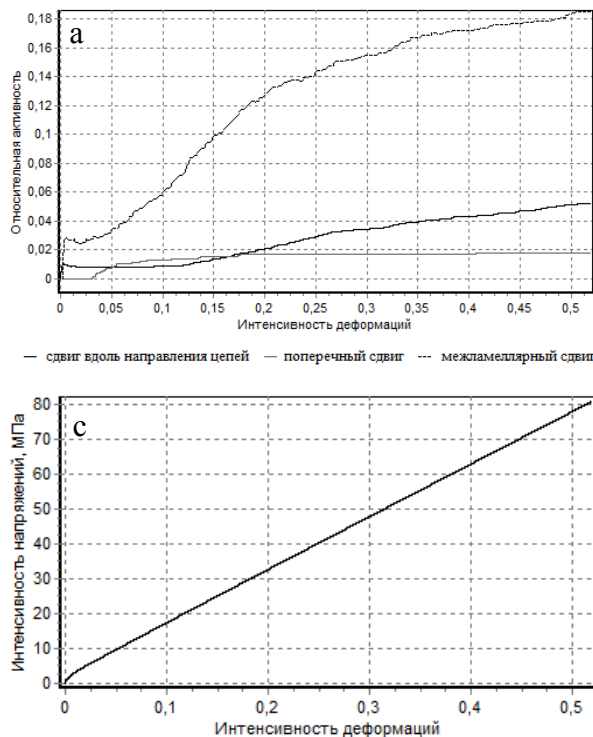


Рис. 4. Результаты вычислительного эксперимента с упрочнением без учета поворотов: (а) относительная активность различных механизмов деформирования в элементе мезоуровня II; (б) относительное число пакетов с активными СС в зависимости от их количества; (с) диаграмма интенсивности напряжений в зависимости от интенсивности

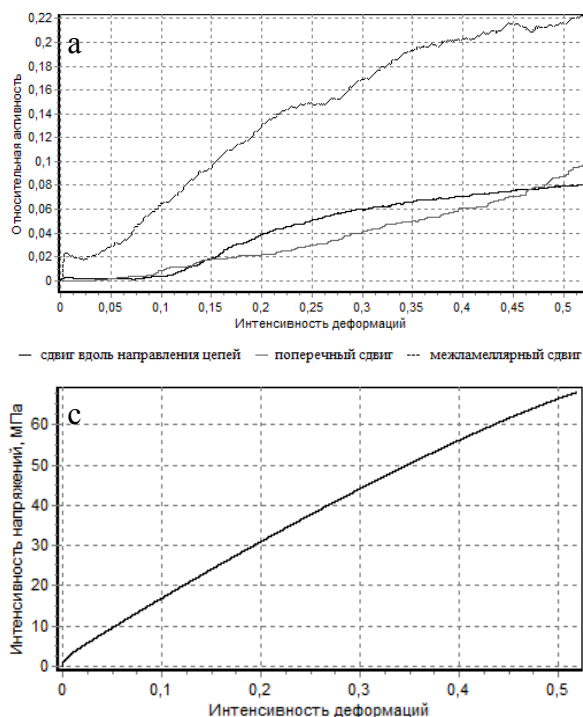


Рис. 5. Результаты вычислительного эксперимента с упрочнением с учетом поворотов: (а) относительная активность различных механизмов деформирования в элементе мезоуровня II; (б) относительное число пакетов с активными СС в зависимости от их количества; (с) диаграмма интенсивности напряжений в зависимости от интенсивности

Анализ результатов моделирования показал, что на начальной стадии процесса деформирования нелинейный характер диаграммы деформирования преимущественно связан с реализацией ротационной моды. В эксперименте №1, реализованном без учета упрочнения по системам скольжения в элементе мезоуровня II, но с учетом поворотов, наиболее легко активируемыми являются моды межламеллярного и поперечного сдвига. При этом характерно, что до деформаций 0,4 по интенсивности во всех элементах мезоуровня II, испытывающих неупругие деформации, активной является одна система скольжения. Следовательно, деформируемые пакеты поворачиваются таким образом, чтобы реализовать наиболее легко активируемый механизм деформирования межламеллярного сдвига, минимизируя тем самым напряжения. Напротив, в эксперименте №2, с упрочнением по внутриламеллярным системам скольжения без учета поворотов, в силу упрочнения мода поперечного сдвига в пакете является сравнительно менее активной. Поскольку повороты пакетов запрещены, при сравнительно меньших, чем в эксперименте №1, деформациях (0,1 по интенсивности) появляются пакеты, в которых активными являются две системы скольжения, а при деформациях 0,35 по интенсивности – три системы скольжения. Результаты вычислительного эксперимента №3 с учетом упрочнения по внутриламеллярным системам скольжения и с учетом поворотов пакетов показывают, что, несмотря на упрочнение, моды сдвига вдоль направления молекулярных цепей и поперечного сдвига являются значительно более активными, чем в эксперименте №2. Таким образом, можно сделать вывод о том, что элементы мезоуровня II при данных условиях поворачиваются таким образом, чтобы облегчить сдвиг по системам скольжения, которые уже являются активными. Об этом свидетельствует и тот факт, что, как и в эксперименте №2, пакеты с двумя активными системами скольжения появляются при деформациях 0,1 по интенсивности; однако при учете поворотов элементов на рассматриваемом участке деформирования пакетов с тремя активными системами скольжения не появляется.

Таким образом, разработана конститутивная модель полиэтилена низкого давления как частично кристаллического полимерного материала. Примененный для построения модели материала подход основан на использовании в ее структуре внутренних переменных – параметров, являющихся носителями предыстории воздействий и характеризующих микроструктуру материала и ее эволюцию в процессе деформирования. В соответствии со структурой и механизмами деформирования рассматриваемого материала в модели введено три масштабных уровня. Разработана общая структура конститутивной модели на каждом масштабном уровне, предложен алгоритм ее численной реализации на мезоуровне, приведены и проанализированы результаты расчетов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №07-08-96024-р-Урал а).

Библиографический список

1. Нечаева Е.С. Применение структурного подхода при оценке работоспособности полимерных армированных труб / Е.С. Нечаева, А.Ф. Сальников, П.В. Трусов // Динамика сплошной среды: сб. науч. тр. / РАН Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. – Новосибирск: 2007. – Вып. 125. – С.73-75.
2. Трусов П.В. Теория определяющих соотношений. Ч.II: Теория пластичности / П.В. Трусов, А.И. Швейкин. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2008. – 243 с.
3. Олейник Э.Ф. Пластичность частично-кристаллических гибкоцепных полимеров на микро- и мезоуровнях. / Э.Ф. Олейник // Высокомолекулярные соединения. Серия С. – 2003. – Т.45 – № 12 – С.2137–2264
4. Поздеев А.А. Большие упруго-пластические деформации: теория, алгоритмы, приложения / А.А. Поздеев, П.В. Трусов, Ю.И. Няшин – М.: Наука, 1986. – 232 с.
5. Van Dommelen J.A.W Micromechanical modeling of the elasto-viscoplastic behavior of semi-crystalline polymers / J.A.W. Van Dommelen, D.M. Parks, M.C. Boyce, W.A.M. Brekelmans, F.P.T. Baaijens.// J. Mech. Phys. Solids – 2003. – Vol.51. – P. 519–541.
6. Nikolov S. Self-consistent modeling of large plastic deformation, texture and morphology evolution in semi-crystalline polymers / S. Nikolov, R.A. Lebensohn, D. Raabe // J. Mech. Phys. Solids – 2006. – Vol.54. – P. 1350–1375.
7. Nikolov S. Multi-scale constitutive modeling of the small deformations of semi-crystalline polymers / S. Nikolov, I. Doghri., O. Pierard., L. Zealouk, A. Goldberg // J. Mech. Phys. Solids – 2002. – Vol. 50. – P. 2275–2302.

Получено 15.09.2008