

УДК 539.3

## КОНСТИТУТИВНАЯ МОДЕЛЬ ЧАСТИЧНО КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА. АЛГОРИТМ РЕАЛИЗАЦИИ МОДЕЛИ МЕЗОУРОВНЯ

Е.С. Нечаева, П.В. Трусов

*Пермский государственный технический университет, Пермь, Россия*

Предложена конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. При построении модели применяется многоуровневый подход, основанный на использовании в ее структуре внутренних переменных – параметров, характеризующих состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры материала. В основе модели лежит описание основных механизмов деформирования рассматриваемого класса материалов на мезоуровне: сдвиг по кристаллографическим системам скольжения в ламелях, межламеллярный сдвиг, механизм пространственного раздвижения–сжатия ламелей, квазитвердое движение элементов каждого из рассматриваемых масштабных уровней. Представлены общая структура конститутивной модели представительного объема частично кристаллического полимерного материала и алгоритм реализации модели на мезоуровне.

*Ключевые слова:* конститутивная многоуровневая модель, внутренние переменные, частично кристаллический полимер, неупругое деформирование

## CONSTITUTIVE MODEL OF SEMICRYSTALLINE POLYMER MATERIAL. IMPLEMENTATION ALGORITHM FOR MEZO LEVEL MODEL

E.S. Nechaeva and P.V. Trusov

*Perm State Technical University, Perm, Russia*

The authors present a constitutive model of a semicrystalline polymer material. To construct the model, a multilevel approach based on the use of internal variables in its structure – the parameters characterizing the state and evolution of meso- and microstructure of the material – has been applied. The model is based on the description of the main deformation mechanisms for this class of materials at the meso level: the shear along the crystallographic slip systems in lamellae, the interlamellar shear, the mechanism of spatial separation-compression for lamellae, and the quasi-rigid motion of the elements of each scale level. The general structure of the constitutive model of a representative volume for a semicrystalline polymer material and the algorithm of the model realization at the meso level are described.

*Key words:* constitutive multilevel model, internal variables, semicrystalline polymer, inelastic deformation

### 1. Введение

Частично кристаллические полимерные материалы широко используются во многих отраслях промышленности, составляя в последние годы реальную конкуренцию металлам, в частности, в силу их химической инертности, в установках, где присутствует контакт с химически агрессивными средами. В связи с этим все более актуальной становится задача построения моделей подобных материалов, способных описать процессы их неупругого деформирования при больших деформациях, в особенности — моделей текстурообразования.

На сегодняшний день в литературе представлено большое число моделей частично кристаллических полимерных материалов, в частности полиэтилена низкого давления. Так, в работе [1] рассматриваются модели различных типов, в [2–4] — макрофеноменологические, в [5–10] — структурномеханические, в [11–14] — микрокомпозитные. Вместе с тем, проблему построения наиболее полной модели неупругого деформирования частично кристаллического полимерного материала при различных условиях нагружения нельзя назвать полностью решенной [1], хотя в последние годы в этой области достигнуты несомненные успехи. Авторами данной работы предпринята попытка применения физических теорий пластичности поликристаллов к описанию неупругого деформирования частично кристаллического полимерного материала. Представляется, что выбранный подход имеет ряд преимуществ по сравнению с вышеперечисленными, поскольку дает возможность прямого включения в модель механизмов деформирования и их носителей, присущих в реальном материале различным структурным уровням деформирования [15–16], а следовательно, и различным масштабным уровням, которые в данном случае вводятся в структуру модели явным образом.

Авторами предложена конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала на примере полиэтилена низкого давления (ПЭНД). При построении модели применяется многоуровневый подход, основанный на использовании в структуре модели внутренних переменных. Суть данного подхода заключается в том, что в структуру определяющих соотношений явным образом вводятся параметры, характеризующие состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры материала (внутренние переменные), для этих параметров формулируются эволюционные (кинетические) уравнения. Внутренние переменные делятся на две группы — явные и скрытые. Явные внутренние переменные входят в структуру определяющего соотношения рассматриваемого масштабного уровня непосредственно, а скрытые внутренние переменные — в качестве параметров в эволюционные уравнения. Связь явных и скрытых внутренних переменных осуществляется с помощью замыкающих уравнений. При этом 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. Данная гипотеза позволяет отказаться от применения сложных определяющих соотношений в операторной форме (например в форме функционалов по времени) и в то же время сохранить свойство памяти материалов к предыстории воздействий, носителями которой являются эволюционирующие внутренние переменные.

В настоящей статье описана структура предложенной конститутивной модели, введены ее масштабные уровни, рассмотрен алгоритм реализации на мезоуровне. Авторами изучены особенности алгоритма реализации модели на макроуровне при решении задачи для представительного объема материала и для случая решения краевой задачи, но в силу ограниченности объема статьи эти результаты станут предметом последующей публикации.

В силу того, что задача является существенно нелинейной как физически, так и геометрически, в процессе решения возникает необходимость в использовании пошаговой процедуры, согласно которой весь интервал нагружения представляется совокупностью шагов по времени. На каждом временном срезе для определения всех внутренних переменных в рамках определяющих соотношений модели на макроуровне реализуется специального вида итерационная процедура, согласно которой последовательно повторяется использование моделей различных масштабных уровней и в результате определяются все параметры процесса деформирования в фиксированный момент времени с учетом условий согласования соответствующих характеристик на всех масштабах.

## 2. Механизмы деформирования частично кристаллического полимерного материала

При построении конститутивной модели представительного объема частично кристаллического полимера необходимым условием является учет морфологических особенностей структуры, определяющих поведение материалов этого класса. Анализ микроструктуры, в частности полиэтилена низкого давления (ПЭНД) высокой степени кристалличности, позволил установить, что в качестве основных морфологических образований можно выделить так называемые сферолиты и ламели. Сферолиты — это поликристаллические образования, состоящие из направленных по радиусу ламелей и аморфных участков (Рис. 1, *a*). Размер сферолита зависит от степени переохлаждения при кристаллизации. Для ПЭНД размер сферолита обычно составляет приблизительно 100 мкм [1]. Ламели — самые общие морфологические единицы частично кристаллического полимерного материала, представляют собой широкие тонкие длинные пластинки-кристаллиты, разделенные слоями аморфной фазы (Рис. 1, *a, б*).

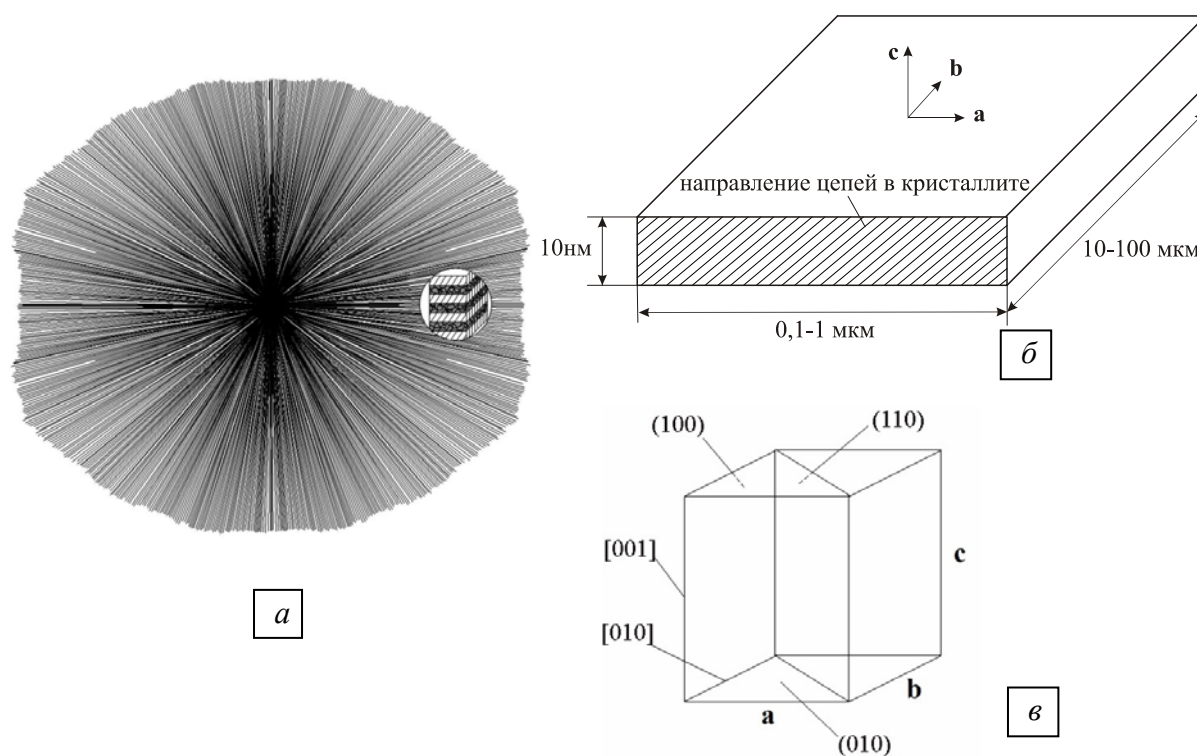


Рис. 1. Морфологические единицы в структуре ПЭНД: сферолит (*a*); ламель (*б*); ячейка орторомбического кристалла ПЭНД (*в*)

Процессы неупругого деформирования в кристаллитах частично кристаллических полимерных материалов реализуются за счет кристаллографических механизмов, похожих на таковые в неполимерных кристаллах. Как правило, выделяются следующие основные механизмы деформирования, наблюдающиеся в материалах такого класса (в частности в ПЭНД): межламеллярный сдвиг — сдвиг в плоскости, разделяющей две параллельные ламели (в аморфной фазе материала); нормальная мода межламеллярной деформации — пространственное раздвижение-сжатие ламелей; повороты блоков из нескольких параллельных ламелей; сдвиг по кристаллографическим системам скольжения в ламелях (Рис. 1, *в*); двойникование; мартенситные превращения. Количественный вклад механизмов двойникования и мартенситных превращений в макроскопическую неупругую деформацию в полиэтилене является незначительным [1]. Таким образом, при построении конститутивной модели авторами

в качестве основных механизмов неупругого деформирования для полиэтилена низкого давления введены следующие: межламеллярный сдвиг, пространственное раздвижение ламелей, сдвиг по кристаллографическим системам скольжения в ламелях, поворот пакета из нескольких параллельных ламелей как жесткого целого.

### 3. Общая структура конститутивной модели представительного объема частично кристаллического полимерного материала. Гипотезы модели

Для построения модели частично кристаллического полимерного материала в работе используется многоуровневый подход. Основная идея многоуровневого моделирования заключается в том, что процесс деформирования материала рассматривается не только на макроуровне (как это обычно делается в механике деформируемого твердого тела), но и на более глубоких масштабных (структурных) уровнях с введением в рассмотрение присущих этим уровням механизмов деформирования и их носителей [15–16]). Необходимое число рассматриваемых уровней выбирается в соответствии со структурой материала и определяется именно масштабом, на котором в реальном материале существуют носители деформационных механизмов, включение которых в модель представляется необходимым исходя из целей и задач моделирования. Связь уровней осуществляется за счет введения в структуру определяющих соотношений на каждом масштабном уровне явных внутренних переменных, которые находятся из замыкающих уравнений, описывающих процесс деформирования на более глубоких по отношению к рассматриваемому масштабных уровнях с применением той или иной кинематической гипотезы (например гипотезы Фойхта). С основными принципами использования многоуровневого подхода при построении конститутивных моделей более подробно можно ознакомиться в работах [17–19].

В соответствии с особенностями структуры и механизмами деформирования исследуемого материала, вносящими наибольший вклад в макродеформацию, в рассмотрение вводится три масштабных уровня: макроуровень — уровень представительного объема макромасштаба, мезоуровень I и мезоуровень II. Элементом мезоуровня I является один сферолит, а представительный объем макроуровня состоит из  $N$  сферолитов. Элементом мезоуровня II является кристаллит — стек — несколько параллельных ламелей с прослойками аморфной фазы материала. Соответственно, элемент мезоуровня I состоит из  $n$  элементов мезоуровня II. Для построения модели материала используются три системы координат: условно неподвижная лабораторная система координат (ЛСК); система координат, связанная со сферолитом — система координат сферолита (СКС) (в недеформированном состоянии полагается совпадающей с ЛСК); система координат, связанная с кристаллитом — кристаллографическая система координат (КСК) (ее ориентация относительно СКС в начальный момент времени выбирается случайной с заданным законом распределения).

Взаимодействие элементов различных масштабных уровней при переходе с макроуровня на более глубокие уровни учитывается в соответствии с гипотезой Фойхта об однородности полного градиента вектора скорости перемещений в рамках представительного объема каждого уровня. Таким образом, с использованием тензора градиента скорости перемещений макроуровня, полученного из решения краевой задачи макроуровня, находится тензор градиента скорости перемещений для каждого элемента мезоуровня I в рамках представительного объема макроуровня. Аналогично определяется тензор полного градиента скорости перемещений для каждого кристаллита (элемента мезоуровня II) в рамках элемента представительного объема мезоуровня I:

$$\hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}'(t) = \hat{\nabla} \bar{\mathbf{V}}(t), \quad \hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}''(t) = \hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}'(t), \quad (1)$$

где  $t$  — время (или неубывающий параметр нагружения);  $\hat{\nabla}\vec{\nabla}$  — тензор полного градиента скорости перемещений представительного объема материала макроуровня;  $\hat{\nabla}\vec{\nabla}^I$  и  $\hat{\nabla}\vec{\nabla}^{II}$  — тензоры полного градиента скорости перемещений элемента мезоуровней I и II, определенные в актуальной конфигурации.

В рамках представительного объема каждого масштабного уровня принимается гипотеза об аддитивности упругих и неупругих скоростей деформаций:

$$\hat{D}(t) = \hat{D}^e(t) + \hat{D}^{in}(t); \quad \hat{d}^I(t) = \hat{d}_I^e(t) + \hat{d}_I^{in}(t); \quad \hat{d}^{II}(t) = \hat{d}_{II}^e(t) + \hat{d}_{II}^{in}(t), \quad (2)$$

где  $\hat{D}$ ,  $\hat{D}^e$  и  $\hat{D}^{in}$  — тензоры скоростей полных, упругих и неупругих деформаций на уровне макро- представительного объема материала;  $\hat{d}^I$ ,  $\hat{d}_I^e$  и  $\hat{d}_I^{in}$  ( $\hat{d}^{II}$ ,  $\hat{d}_{II}^e$  и  $\hat{d}_{II}^{in}$ ) — тензоры скоростей полных, упругих и неупругих деформаций мезоуровня I (мезоуровня II).

В качестве определяющего соотношения на каждом масштабном уровне используется обобщенный закон Гука в скоростной релаксационной форме

$$\hat{\Sigma}^r = \hat{\underline{\underline{C}}}:(\hat{D} - \hat{D}^{in}), \quad \hat{\Sigma}^r = \hat{\underline{\underline{\Sigma}}} - \hat{\underline{\underline{\Omega}}}\cdot\hat{\underline{\underline{\Sigma}}} + \hat{\underline{\underline{\Sigma}}}\cdot\hat{\underline{\underline{\Omega}}}, \quad (3)$$

$$(\hat{\sigma}^I)^r = \hat{\underline{\underline{c}}}:(\hat{d}^I - \hat{d}_I^{in}), \quad (\hat{\sigma}^I)^r = \hat{\underline{\underline{\sigma}}}' - \hat{\underline{\underline{\Omega}}}'\cdot\hat{\underline{\underline{\sigma}}}' + \hat{\underline{\underline{\sigma}}}'\cdot\hat{\underline{\underline{\Omega}}}', \quad (4)$$

$$(\hat{\sigma}^{II})^r = \hat{\underline{\underline{c}}}:(\hat{d}^{II} - \hat{d}_{II}^{in}), \quad (\hat{\sigma}^{II})^r = \hat{\underline{\underline{\sigma}}}' - \hat{\underline{\underline{\Omega}}}'\cdot\hat{\underline{\underline{\sigma}}}' + \hat{\underline{\underline{\sigma}}}'\cdot\hat{\underline{\underline{\Omega}}}'. \quad (5)$$

Здесь макроуровню, мезоуровню I и мезоуровню II соответствуют:  $\hat{\underline{\underline{\Sigma}}}$ ,  $\hat{\underline{\underline{\sigma}}}'$  и  $\hat{\underline{\underline{\sigma}}}'$  — тензоры напряжений Коши;  $\hat{\underline{\underline{C}}}$ ,  $\hat{\underline{\underline{c}}}'$  и  $\hat{\underline{\underline{c}}}'$  — тензоры упругих свойств элементов;  $\hat{\underline{\underline{\Omega}}}$ ,  $\hat{\underline{\underline{\Omega}}}'$  и  $\hat{\underline{\underline{\Omega}}}'$  — тензоры спина, характеризующие квазитвердое движение на соответствующем уровне. Символ  $r$  обозначает коротационную производную. В соотношениях (3)–(5) роль явных внутренних переменных на каждом уровне исполняют тензоры скоростей неупругих деформаций, тензоры спинов и тензоры четвертого ранга упругих свойств элементов представительного объема соответствующего масштабного уровня (макроуровня, мезоуровня I или мезоуровня II), которые определяются из замыкающих уравнений, отвечающих более глубоким уровням.

Следует отметить, что использование в качестве базового определяющего соотношения обобщенного закона Гука в скоростной релаксационной форме позволяет рассматривать существенно нелинейную (физически и геометрически) задачу, так как он включает вторую составляющую тензора скоростей деформаций — скоростей неупругих деформаций, и коротационную производную, характеризующую квазитвердое движение элементов на каждом из рассматриваемых масштабных уровней. Вместе с тем, в случае необходимости рассмотрения больших упругих деформаций, предложенная модель может быть легко модифицирована (обобщенный закон Гука заменяется гиперупругим нелинейным законом) без изменения общей ее структуры.

Для описания квазитвердого движения элементов каждого из рассматриваемых масштабных уровней в определяющих соотношениях каждого уровня используется отвечающая ему коротационная производная, содержащая тензор спина соответствующего элемента. На мезоуровне II тензор спина  $\hat{\underline{\underline{\Omega}}}'$  характеризует квазитвердое движение решетки кристаллита и устанавливается на основе модели поворота Тейлора [20]. На мезоуровне I тензор спина  $\hat{\underline{\underline{\Omega}}}'$  характеризует движение сферолитов как жесткого целого в процессе неупругого деформирования материала и определяется исходя из условий согласования моделей I-го и II-го мезоуровней.

На уровне макропредставительного объема тензор спина решетки  $\hat{\Omega}$  находится исходя из условий согласования моделей мезоуровня I и макроуровня и характеризует квазитвердое движение представительного объема макроуровня. Вопросы согласования моделей разных уровней подробнее обсуждаются ниже.

В таблице 1 перечислены параметры конститутивной модели материала, определяемые на разных масштабах. Здесь:  $\hat{Q}$  — ориентационный тензор сферолита, ортогональный тензор, характеризующий ориентацию сферолита по отношению к ЛСК и переводящий ЛСК в СКС;  $\hat{O}$  — ориентационный тензор кристаллита, ортогональный тензор, характеризующий ориентацию кристаллита по отношению к СКС и переводящий СКС в КСК;  $\tau_c^{(k)}$ ,  $\dot{\gamma}^{(k)}$ ,  $\gamma_\Sigma^{(k)}$  — критическое напряжение, скорость сдвига, суммарный накопленный сдвиг по  $k$ -ой системе скольжения в кристаллите.

Таблица 1. Параметры конститутивной модели материала на разных масштабах

	Параметры воздействия	Параметры, определяемые на соответствующем масштабном уровне		
		явные внутренние переменные	неявные внутренние переменные	реакция материала
Макроуровень	$\hat{L}^T(t) = \hat{V}\hat{V}^T(t)$	$\underline{C}$ $\hat{D}^{in}$ $\hat{\Omega}$	$\underline{c}^I$ $\hat{d}_I^{in}$ $\hat{\Omega}^I$	$\hat{\Sigma}$ $\hat{D}^e$
Мезоуровень I	$\hat{V}\hat{V}^I(t) = \hat{V}\hat{V}^T(t)$	$\underline{c}^I$ $\hat{d}_I^{in}$ $\hat{\Omega}^I$	$\underline{c}^{II}$ $\hat{d}_{II}^{in}$ $\hat{\Omega}^{II}$ $\hat{Q}$	$\hat{\sigma}^I$ $\hat{d}_I^e$
Мезоуровень II	$\hat{V}\hat{V}^{II}(t) = \hat{V}\hat{V}^I(t)$	$\underline{c}^{II}$ $\hat{d}_{II}^{in}$ $\hat{\Omega}^{II}$	$\tau_c^{(k)}$ $\dot{\gamma}^{(k)}$ $\gamma_\Sigma^{(k)}$ $\hat{O}$	$\hat{\sigma}^{II}$ $\hat{d}_{II}^e$

На мезоуровне II в качестве базовой модели деформирования кристаллита используется физическая вязкоупругая модель

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right|^{n_c} \text{sign}(\tau^{(k)}), \quad \sum_k \quad , \tag{6}$$

где  $\dot{\gamma}_0$  — скорость деформирования, являющаяся параметром материала и характеризующая скорость сдвига по системе скольжения при касательном напряжении, равном критическому напряжению сдвига;  $\tau^{(k)}$  — сдвиговое напряжение, действующее в системе скольжения  $k$ ;  $\tau_c^{(k)} > 0$  — сопротивление сдвигу в системе скольжения  $k$ , представляющее собой материальную функцию параметров нагружения;  $n_c = 1/m_c$  — константа материала, обратная чувствительности кристаллитов к скорости приложения нагрузки  $m_c$ , знак  $\sum_k$  означает отсутствие суммирования по указанному индексу  $k$ .

Касательные напряжения для каждой из систем скольжения элемента мезоуровня II определяются из соотношения:

$$\tau^{(k)} = \hat{M}^{(k)} : \hat{\sigma}; \quad \hat{M}^{(k)} = \left( \vec{n}^{(k)} \vec{b}^{(k)} + \vec{b}^{(k)} \vec{n}^{(k)} \right) / 2. \tag{7}$$

Здесь  $k$  — номер системы скольжения;  $\hat{M}^{(k)}$  — ориентационный тензор  $k$ -ой системы скольжения;  $\vec{n}^{(k)}$  — единичный вектор нормали к плоскости скольжения;  $\vec{b}^{(k)}$  — единичный вектор Бюргера, характеризующий направление скольжения. Значения

компонент  $\vec{n}^{(k)}$  и  $\vec{b}^{(k)}$  в КСК приведены в Таблице 2, где  $\alpha = \angle(\vec{n}, \vec{c})$  — угол между нормалью к поверхности ламели  $\vec{n}$  и вектором, определяющим направление молекулярных цепей в кристаллите  $\vec{c}$ ;  $a, b, c$  — размеры ячейки периодичности кристаллита ПЭНД. Угол  $\alpha$  и константы  $a, b, c$  являются параметрами материала. Для межламеллярной системы скольжения направление единичного вектора  $\vec{b}$  соответствует направлению касательного напряжения в рассматриваемой плоскости скольжения.

Таблица 2. Компоненты векторов  $\vec{n}^{(k)}$  и  $\vec{b}^{(k)}$  для различных систем скольжения

Система скольжения	$n_1^{(k)}$	$n_2^{(k)}$	$n_3^{(k)}$	$b_1^{(k)}$	$b_2^{(k)}$	$b_3^{(k)}$
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		

Для описания упрочнения по внутриламеллярным системам скольжения авторами предлагается использование эволюционного уравнения вида:

$$\tau_c^{(k)} = \tau_0^{(k)} - \mu_0^{(k)} \sigma_n^{(k)} + \left( \sum_{i=1}^I H_i^{*(k)} |\gamma_\Sigma^{(i)}| \right)^q, \quad \sigma_n^{(k)} = (\vec{n}^{(k)} \cdot \hat{\sigma} \cdot \vec{n}^{(k)}) = \sigma_{ij} n_i^{(k)} n_j^{(k)} \quad (k = \overline{1, K}), \quad (8)$$

где  $k$  — номер внутриламеллярной системы скольжения;  $\sigma_n^{(k)}$  — напряжение, нормальное к плоскости скольжения;  $\mu_0^{(k)}$  — фактор чувствительности сдвига к нормальному напряжению;  $\tau_0^{(k)}$  — критическое начальное напряжение сдвига;  $H_i^{*(k)}$  — модули упрочнения;  $q$  — показатель степени в степенном законе упрочнения, характеризующий нелинейность зависимости критического напряжения сдвига по  $k$ -ой системе скольжения от накопленных по системам скольжения сдвигов;  $\gamma_\Sigma^{(i)}$  — суммарный накопленный сдвиг по системе скольжения с номером  $(i)$ ; выполняется условие суммирования по повторяющимся индексам.

Согласно соотношению (8)<sub>1</sub> сопротивление сдвигу для внутриламеллярных систем скольжения в предположении анизотропии свойств систем скольжения в ламели (анизотропия определяется выбором различных значений констант материала для каждой системы скольжения) описывается с помощью линейного относительно напряжений закона упрочнения (2-е слагаемое в законе (8)<sub>1</sub>). Это связано с принятым допущением о том, что для рассматриваемого класса материалов нормальное напряжение является одним из наиболее существенных факторов, влияющих на подвижность дислокаций [1, 21]. Значит, чем выше нормальное (растягивающее) напряжение в плоскости скольжения, тем более подвижны дислокации в рассматриваемой плоскости и тем ниже критическое напряжение сдвига для системы скольжения в данной плоскости. И наоборот, если нормальное напряжение в плоскости скольжения

сжимающее, то это, согласно соотношению (8)<sub>1</sub>, приводит к возрастанию критического напряжения сдвига для системы скольжения в данной плоскости. Третье слагаемое в законе (8)<sub>1</sub> отражает упрочнение по системе скольжения в зависимости от накопленных в процессе неупругого деформирования сдвигов.

Для описания упрочнения по межламеллярной системе скольжения используется эволюционное уравнение вида

$$\tau_c^{(k)} = \left( \sum_{i=1}^I H_i^{(k)} |\gamma_\Sigma^{(i)}| \right)^r + \begin{cases} \tau_{\min}^{(k)} + A [\sigma_n^{(k)} - \sigma_n^{*(k)}]^p, & \text{если } \sigma_n^{(k)} \geq \sigma_n^{*(k)}, \\ \tau_0^{(k)} - \mu_0^{(k)} \sigma_n^{(k)}, & \text{если } \sigma_n^{(k)} < \sigma_n^{*(k)}, \end{cases} \quad (9)$$

где  $k = L$ ,  $\sigma_n^{(k)}$  — нормальное давление в межламеллярной плоскости;  $\sigma_n^{*(k)}$  — критическое нормальное напряжение — нормальное напряжение в плоскости скольжения, при котором соседние ламели максимально раздвинуты без образования разрывов проходных цепей (необходимо отметить, что в соотношениях (8), (9) нормальное к плоскости скольжения напряжение со знаком «+» является растягивающим, со знаком «-» — сжимающим);  $\mu_0^{(k)}$  — фактор чувствительности сдвига к нормальному напряжению;  $\tau_0^{(k)}$  — начальное критическое напряжение сдвига, соответствующее нулевому нормальному напряжению;  $\tau_{\min}^{(k)}$  — минимальное критическое напряжение сдвига — критическое напряжение сдвига, соответствующее нормальному напряжению  $\sigma_n^{*(k)}$ :  $\tau_{\min}^{(k)} = \tau_0^{(k)} - \mu_0^{(k)} \sigma_n^{*(k)}$ ;  $A, p$  — параметры закона упрочнения ( $A$  — модуль упрочнения,  $p$  — параметр степени), определяющие вид зависимости критического напряжения сдвига от нормального напряжения при превышении последним критического значения  $\sigma_n^{*(k)}$ ;  $H_i^{(k)}$  — матрица модулей упрочнения, характеризующих вклад суммарных накопленных сдвигов по каждой из систем скольжения в упрочнение по межламеллярной системе скольжения;  $\gamma_\Sigma^{(i)}$  — суммарный накопленный сдвиг по системе скольжения с номером  $i$ ;  $r$  — параметр степени в степенном законе упрочнения.

Закон (9) включает в себя две части, первая из которых отвечает за упрочнение в зависимости от накопленных по системам скольжения сдвигов, а вторая — позволяет включить в модель описание механизма пространственного раздвижения–сжатия ламелей. При сжатии ламелей (нормальное напряжение отрицательное) критическое напряжение сдвига в межламеллярной плоскости возрастает. В случае пространственного раздвижения ламелей (нормальное напряжение положительное) критическое напряжение сдвига снижается до достижения нормальным напряжением критического значения. Дальнейший рост нормального напряжения вызывает резкое увеличение до бесконечности критического напряжения сдвига, что соответствует ситуации, когда большое количество проходных полимерных цепей межламеллярного пространства оказываются уже полностью вытянутыми, и дальнейшее деформирование по моде пространственного раздвижения ламелей возможно лишь в результате разрыва некоторых из них.

#### 4. Математическая постановка задачи деформирования для представительного объема

В работе описание процесса деформирования частично кристаллического полимерного материала на более глубоких по отношению к макроуровню масштабных



уровнях осуществляется с помощью статистической модели; соответственно, на мезоуровнях краевая задача не решается. При решении задачи на мезоуровне I рассматривается его элемент (представительный объем мезоуровня I — один сферолит.) Элемент уровня I принимается состоящим из  $n$  элементов мезоуровня II — кристаллитов.

Для решения задачи на мезоуровне I используется определяющее соотношение в виде обобщенного закона Гука в скоростной релаксационной форме (4). Определяющие соотношения мезоуровня I содержат три явные внутренние переменные — тензор упругих свойств сферолита  $\underline{\underline{c}}^I$ , тензор скоростей неупругих деформаций сферолита  $\hat{d}_I^{in}$  и тензор спина сферолита  $\hat{\Omega}^I$ , значения компонент которых в текущей конфигурации определяются из замыкающих уравнений. В простейшем случае компоненты можно записать в виде законов осреднения:

$$\underline{\underline{c}}^I(t) = \langle \underline{\underline{c}}^II(t) \rangle; \quad \hat{d}_I^{in}(t) = \langle \hat{d}_{II}^{in}(t) \rangle; \quad \hat{\Omega}^I(t) = \langle \hat{\Omega}^{II}(t) \rangle, \quad (10)$$

где символ  $\langle \cdot \rangle$  означает осреднение соответствующих величин при переходе на более высокий масштабный уровень. Необходимо отметить, что вопрос о способе осреднения при вычислении эффективных характеристик среды в процессе перехода на более высокий масштабный уровень является одним из ключевых, например, в механике композиционных материалов. В предлагаемой работе, на данный момент, способ осреднения не является предметом исследования и потому не обсуждается, а используется простейший вариант — осреднение по объему. Замыкающие уравнения (10)<sub>2,3</sub> могут быть использованы не для всех классов материалов. Вопрос выбора замыкающих уравнений требует отдельного рассмотрения. Здесь же необходимо отметить, что исходя из условий согласования моделей разных масштабных уровней замыкающие уравнения (10)<sub>2,3</sub> преобразуются к виду

$$\hat{d}_I^{in} = \langle \hat{d}_{II}^{in} \rangle + (\underline{\underline{c}}^I)^{-1} : \langle \underline{\underline{c}}^{III} : \hat{d}_{II}^{in'} \rangle, \quad \hat{\Omega}^I = \langle \hat{\Omega}^{II} \rangle + (\hat{\sigma}^I)^{-1} \cdot \langle \hat{\sigma}^{III} \cdot \hat{\Omega}^{III} \rangle, \quad (11)$$

где символ «'» обозначает флуктуации соответствующих величин по отношению к своим средним значениям по представительному объему рассматриваемого масштабного уровня.

В качестве неявных внутренних переменных модели на мезоуровне I, входящих в замыкающие уравнения, используются тензоры упругих свойств  $\underline{\underline{c}}^II(t)$ , тензоры скоростей неупругих деформаций  $\hat{d}_{II}^{in}(t)$  и тензоры спинов  $\hat{\Omega}^{II}(t)$  элементов мезоуровня II. Роль эволюционных уравнений, в которых вышеперечисленные тензорные характеристики фигурируют в качестве переменных, играют соотношения модели нижележащего по шкале масштабов уровня — мезоуровня II.

При решении задачи на мезоуровне II рассматривается один элемент представительного объема мезоуровня II, то есть один кристаллит. В используемой вязкоупругой модели, основанной на расширенной гипотезе Фойгта, реализуется жесткое нагружение: с мезоуровня I передается градиент вектора скорости перемещений. Для одного элемента мезоуровня II полная система уравнений, которую необходимо разрешить, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^{II} &= \underline{\underline{c}}^{II} : (\hat{d}^{II} - \hat{d}_{II}^{in}) + \hat{\Omega}^{II} \cdot \hat{\sigma} - \hat{\sigma} \cdot \hat{\Omega}^{II}; & 1 \\ \hat{d}_{II}^{in} &= \sum_{k=1}^K \hat{M}^k \dot{\gamma}^k; & 2 \end{aligned}$$

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right|^{n_c} \text{sign}(\tau^{(k)}), \quad \sum_k \quad ; \quad 3$$

$$\tau_c^{(k)} = \begin{cases} \tau_0^{(k)} - \mu_0^{(k)} \sigma_n^{(k)}, \quad \sigma_n^{(k)} = (\mathbf{n}^{(k)} \cdot \hat{\sigma}^{\parallel} \cdot \mathbf{n}^{(k)}) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}^{\parallel} n_i^{(k)} n_j^{(k)}, \\ k = \overline{1, K} \text{ — для внутриламеллярных систем скольжения;} \\ f(\tau_0^{(k)}, \mu_0^{(k)}, \sigma_n^{(k)}, \sigma_n^{*(k)}, \gamma_{\Sigma}^{(i)}, H_i^{(k)}, r, A, p), \\ k = L, \quad i = \overline{1, K} \text{ — для межламеллярной системы скольжения;} \end{cases} \quad 4 \quad (12)$$

$$\hat{d}^{\parallel} = \frac{1}{2} (\hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}^{\parallel} + (\hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}^{\parallel})^T); \quad 5$$

$$\text{уравнения для определения спина решетки } \hat{\Omega}^{\parallel}. \quad 6$$

Уравнения (12)<sub>3</sub>–(12)<sub>4</sub> — соотношения физической вязкоупругой модели (6), где (12)<sub>4</sub> представляют собой законы упрочнения для внутриламеллярных (8) и межламеллярной (9) систем скольжения соответственно; (12)<sub>1</sub> — закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности (5); (12)<sub>2</sub>, (12)<sub>5</sub> — кинематическое соотношение и соотношение для определения тензора деформации скорости (соотношение (12)<sub>2</sub> играет роль замыкающего уравнения для скоростей сдвигов в рамках представительного объема мезоуровня II); (12)<sub>6</sub> — соотношения той или иной модели поворота, в данном случае используется модель поворота Тейлора. При использовании модели Тейлора тензор спина решетки кристаллита для случая произвольного нагружения определяется как разность тензора вихря  $\hat{W}^{\parallel}$  и антисимметричной части тензора скоростей неупругих сдвигов по системам скольжения в элементе мезоуровня II:

$$\hat{\Omega}^{\parallel} = \hat{W}^{\parallel} - \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^{(i)} (\bar{\mathbf{b}}^{(i)} \bar{\mathbf{n}}^{(i)} - \bar{\mathbf{n}}^{(i)} \bar{\mathbf{b}}^{(i)}), \quad (13)$$

$$\hat{W}^{\parallel} = \frac{1}{2} ((\hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}^{\parallel})^T - \hat{\nabla} \bar{\mathbf{v}}^{\parallel}). \quad (14)$$

В определяющие соотношения мезоуровня II входят три явные внутренние переменные — тензор скоростей неупругих деформаций кристаллита  $\hat{d}_{II}^m$ , тензор спина решетки кристаллита  $\hat{\Omega}^{\parallel}$  и тензор упругих свойств, который для неподвижного наблюдателя (например в базисе ЛСК) меняется в результате вращений элемента мезоуровня II. Роль неявных внутренних переменных на данном масштабном уровне играют критические напряжения сдвига по внутриламеллярным и межламеллярной системам скольжения  $\tau_c^{(k)}$  и скорости сдвигов по системам скольжения в элементе мезоуровня II  $\dot{\gamma}^{(k)}$ . Для них записываются эволюционные уравнения: для критических напряжений сдвига — соотношения (12)<sub>4</sub>, для скоростей сдвигов по системам скольжения — (12)<sub>3</sub>. Явные внутренние переменные модели связываются с неявными с помощью замыкающих уравнений. В системе (12) роль замыкающего уравнения играет соотношение (12)<sub>2</sub>, связывающее тензор скоростей неупругих деформаций элемента мезоуровня II со скоростями сдвигов по системам скольжения в рамках данного элемента. Кроме того, к неявным внутренним переменным мезоуровня II относятся ориентационные тензоры элементов данного масштабного уровня, характеризующие ориентации решеток кристаллитов и их изменение в процессе неупругого

деформирования. В качестве эволюционных уравнений для них выступают соотношения, описывающие изменение ориентации решетки элемента мезоуровня II. Изменение ориентации (ротация) элемента определяется по его спину в результате интегрирования соотношения

$$\hat{\Omega}'' = \dot{\hat{R}}'' \cdot (\hat{R}'')^T, \quad (15)$$

где  $\hat{R}''$  — тензор ротации решетки кристаллита.

## 5. Алгоритм реализации разработанной модели на мезоуровнях

Алгоритм реализации предложенной модели для представительного объема макроуровня (то есть без решения задачи на макроуровне) состоит в следующем. С макроуровня на более глубокие масштабные уровни передается воздействие (градиент вектора скорости перемещений). В результате решения задачи на мезоуровне и использования замыкающих уравнений определяются не только значения всех внутренних переменных, входящих в определяющее соотношение макроуровня (как это и необходимо делать при решении краевой задачи), но и собственно отклик материала, который затем осредняется для всех элементов в рамках представительного объема. В данном разделе приведен алгоритм реализации предложенной модели на мезоуровнях.

Необходимо отметить, что, поскольку задача является геометрически и физически нелинейной, при реализации алгоритма используется пошаговая процедура нагружения: весь временной интервал представляется совокупностью срезов по времени, но в общем случае величины шагов между срезами заранее не известны. Алгоритм решения задачи на каждом из мезоуровней для среза по времени состоит из трех этапов:

- 1) определения скоростей неупругих деформаций и спинов элементов с использованием разработанной модели данного масштабного уровня;
- 2) процедуры интегрирования для определения параметров процесса (напряжений, изменения ориентации элементов) на следующем временном срезе;
- 3) изменения ориентаций элементов рассматриваемого масштабного уровня; переопределение явных внутренних переменных в определяющих соотношениях более высокого масштабного уровня из замыкающих уравнений.

В качестве «входной» информации на каждом временном срезе выступает информация о внешнем воздействии — градиенте вектора скорости перемещений, а также определенные на конец предыдущего шага параметры процесса нагружения — напряжения в элементах всех масштабных уровней, и тензоры упругих свойств, переопределенные к рассматриваемому моменту времени с учетом изменения ориентации элементов.

В результате использования моделей на каждом из мезоуровней на «выходе» определяются скорости неупругих деформаций соответствующих элементов (кристаллитов и сферолитов)  $\hat{d}_{II}^{in}$  и  $\hat{d}_I^{in}$ , тензоры спина  $\hat{\Omega}''$  и  $\hat{\Omega}'$ , скорости изменения напряжений  $\hat{\sigma}''$  и  $\hat{\sigma}'$ , а также переопределяются тензоры упругих свойств элементов с учетом ротации.

## 6. Мезоуровень II

### 6.1. Этап 1: решение задачи в скоростях

В качестве элемента мезоуровня II рассматривается кристаллит. Использование в рамках модели расширенной гипотезы Фойхта приводит к соотношению:

$$\left[ \hat{\nabla} \vec{v} \right]_{ij}^{LCK} = \left[ \hat{\nabla} \vec{v} \right]_{ij}^{LCK \text{ предписанное}}, \quad \hat{\nabla} \vec{v}^{II}(t) = \hat{\nabla} \vec{v}^I(t) = \hat{\nabla} \vec{v}(t). \quad (16)$$

Поскольку на макроуровне компоненты градиента вектора скорости перемещений определены в ЛСК, для задания воздействия на мезоуровне II необходимо осуществить их преобразование в КСК с помощью соотношений

$$\left[ \hat{\nabla} \vec{v}^{II} \right]_{ij}^{KCK} = O_{ki} O_{mk} \left[ \hat{\nabla} \vec{v} \right]_{mn}^{LCK} O_{nl} O_{lj}. \quad (17)$$

Для общего случая нагружения алгоритм реализации предложенной конститутивной модели элемента мезоуровня II заключается в построении эффективной процедуры решения системы (12) для одного кристаллита на рассматриваемом срезе по времени. При этом на рассматриваемом срезе предполагаются известными:

- градиент вектора скорости перемещений элемента мезоуровня II;
- напряжения в элементе мезоуровня II, определенные на конец предыдущего шага;
- накопленные в процессе деформирования сдвиги по системам скольжения в элементе мезоуровня II.

Система уравнений (12) на срезе по времени разрешается в скоростях. Для упрощения записи (особенно это касается компонент тензора упругих свойств кристаллита) соотношения (12)<sub>1</sub>, (12)<sub>2</sub>, (12)<sub>3</sub>, (12)<sub>4</sub> записываются в КСК:

$$\begin{aligned} \left[ \dot{\hat{\sigma}}^{II} \right]_{ij}^{KCK} &= \left[ \underline{\xi}^{II} \right]_{ijkl}^{KCK} \left( \left[ \hat{d}^{II} \right]_{lk}^{KCK} - \left[ \hat{d}_{II}^{in} \right]_{lk}^{KCK} \right); & 1 \\ \left[ \hat{d}_{II}^{in} \right]_{ij}^{KCK} &= \sum_{k=1}^K M_{ij}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}; & 2 \\ \dot{\gamma}^{(k)} &= \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right|^{n_c} \text{sign}(\tau^{(k)}), \quad \sum_k \dot{\gamma}^{(k)} = 0; & 3 \\ \tau_c^{(k)} &= \begin{cases} \tau_0^{(k)} - \mu_0^{(k)} \sigma_n^{(k)}, \quad \sigma_n^{(k)} = (\vec{n}^{(k)} \cdot \hat{\sigma}^{II} \cdot \vec{n}^{(k)}) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left[ \hat{\sigma}^{II} \right]_{ij}^{KCK} n_i^{(k)} n_j^{(k)}, \\ k = \overline{1, K} \text{ — для внутриламеллярных систем скольжения;} \\ f(\tau_0^{(k)}, \mu_0^{(k)}, \sigma_n^{(k)}, \sigma_n^{*(k)}, \gamma_\Sigma^{(i)}, H_i^{(k)}, r, A, p), \\ k = L, \quad i = \overline{1, K} \text{ — для межламеллярной системы скольжения;} \end{cases} & 4 \quad (18) \\ \left[ \hat{d}^{II} \right]_{ij}^{KCK} &= \frac{1}{2} \left( \left[ \hat{\nabla} \vec{v}^{II} \right]_{ji}^{KCK} + \left[ \hat{\nabla} \vec{v}^{II} \right]_{ij}^{KCK} \right); & 5 \\ & \text{уравнения для определения спина решетки } \hat{\Omega}^{II}. & 6 \end{aligned}$$

Вследствие этого последние два члена правой части (12)<sub>1</sub> исчезают, поскольку физический смысл коротационной производной — скорость изменения компонент тензора по отношению к подвижному наблюдателю (в данном случае связанному с КСК). В соотношениях системы (19) приняты обозначения:  $c_{ijkl}^{II}$  — известные компоненты (в КСК) тензора упругих свойств кристаллита;  $M_{ij}^{(k)}$  — известные компоненты ориентационных тензоров систем скольжения в элементе мезоуровня II;  $\left[ \hat{\sigma}^{II} \right]_{ij}^{KCK}$  — компоненты тензора напряжений кристаллита в КСК на текущем срезе по времени (на конец предыдущего шага).

Система (20) на рассматриваемом срезе по времени разрешается следующим образом:

- по известным компонентам тензора напряжений кристаллита в КСК  $\left[ \hat{\sigma}^{II} \right]_{ij}^{KCK}$ , определенным для текущего среза по времени, и суммарным накопленным сдвигам для каждой системы скольжения в рамках кристаллита в соответствии с эволюционными уравнениями (21)<sub>4</sub> вычисляются критические напряжения сдвига, а затем касательные напряжения по системам скольжения согласно (7)<sub>1</sub>;
- в соответствии с (22)<sub>3</sub> устанавливаются скорости сдвигов для каждой системы скольжения в кристаллите;
- далее из соотношения (23)<sub>2</sub> находятся компоненты тензора скоростей неупругих деформаций кристаллита в КСК;
- на основе модели поворота Тейлора по известным скоростям сдвигов устанавливается спин;
- на основе (24)<sub>5</sub> рассчитываются компоненты тензора деформации скорости кристаллита в КСК.

## 6.2. Этап 2: интегрирование

В результате интегрирования соотношения (25)<sub>1</sub> в КСК по известным значениям компонент тензоров скоростей полных и неупругих деформаций для каждого кристаллита вычисляются компоненты тензора напряжений кристаллита на следующем временном срезе. Компоненты тензора скоростей полных и неупругих деформаций в КСК подставляются в соотношение (26)<sub>1</sub>, которое интегрируется с позиции подвижного наблюдателя, связанного с КСК (для интегрирования можно использовать любую схему, в данном случае применяется явная схема Эйлера):

$$\left( \sigma_{ij}^{II} \right)^{n+1} = \left( \sigma_{ij}^{II} \right)^n + c_{ijkl}^{II} \left( d_{lk}^{II} - \left[ \hat{d}_{II}^{in} \right]_{lk} \right) \Delta t,$$

где  $\left( \sigma_{ij}^{II} \right)^n$  — напряжения кристаллита на начало текущего шага;  $\left( \sigma_{ij}^{II} \right)^{n+1}$  — напряжения в элементе мезоуровня II на начало следующего шага;  $\Delta t$  — шаг по времени. Далее реализуется пересчет компонент тензора напряжений кристаллита из КСК в СКС и ЛСК.

## 6.3. Этап 3: переопределение ориентационных тензоров элементов на мезоуровнях

Переход к следующему временному срезе нуждается в переопределении ориентационных тензоров всех элементов каждого масштабного уровня (кристаллитов, сферолитов) в рамках представительного объема макроуровня. В силу однотипности алгоритмов для каждого из мезоуровней и во избежание повторов алгоритм рассматривается на двух мезоуровнях. Для выбранного элемента на мезоуровне II (кристаллита) или на мезоуровне I (сферолита) определяется тензор ротации, соответственно, за шаг  $\Delta \hat{R}^{II}$  или  $\Delta \hat{R}^I$ . Тензор ротации устанавливается по спину соответствующего элемента (кристаллита или сферолита), найденному на Этапе 1 алгоритма в результате интегрирования соотношения (далее индекс мезоуровня I или II опускается)  $\hat{\Omega} = \hat{R} \cdot \hat{R}^T$ . Алгоритмически это означает, что необходимо определить вектор угловой скорости  $\bar{\omega}$  как ассоциированный вектор для тензора спина  $\Omega$ :  $\bar{\omega} = \frac{1}{2} \epsilon : \hat{\Omega}$  ( $\epsilon$  — тензор Леви-Чивиты, по которому определяется единичный вектор оси скорости (приращения) поворота  $\bar{e} = \Delta \bar{r} / |\Delta \bar{r}|$  ( $\Delta \bar{r} = \bar{\omega} \Delta t$ )  $\Delta \bar{r} = \bar{\omega} \Delta t$  и угол  $\varphi$ , на который необходимо повернуть решетку из текущего положения.

Ортогональный тензор ротации  $\Delta\hat{R}$  восстанавливается по найденным значениям компонент вектора  $\vec{e}$ , относительно которого тензор ротации  $\Delta\hat{R}$  поворачивает все пространство, и угла такого поворота  $\varphi$ :  $\Delta\hat{R} = \cos\varphi\hat{I} + (1 - \cos\varphi)\vec{e}\vec{e} + \sin\varphi\vec{e} \times \hat{I}$ , где  $\hat{I}$  — единичный тензор. С использованием найденного тензора ротации за шаг  $\Delta\hat{R}$  переопределяется ориентационный тензор элемента (кристаллита на мезоуровне II или сферолита на мезоуровне I соответственно):  $\hat{O} = \Delta\hat{R} \cdot \hat{O}^*$ , где  $\hat{O}^*$  — ориентационный тензор элемента на срезе по времени (в начале шага),  $\hat{O}$  — ориентационный тензор элемента на следующем срезе по времени. По известным новым ориентационным тензорам элементов переопределяются компоненты тензора упругих свойств элементов, входящего в определяющие соотношения закона Гука на мезоуровне I и на макроуровне, в СКС и ЛСК соответственно, как результат осреднения аналогичных характеристик с нижележащего масштабного уровня:  $\underline{\underline{c}}^I = \langle \underline{\underline{c}}^II \rangle$ ;  $\underline{\underline{C}} = \langle \underline{\underline{c}}^I \rangle$ . Необходимо отметить, что при реализации преобразования поворота для элементов всех мезоуровней на срезе по времени поворот осуществляется «вместе» с найденными на конец шага напряжениями, то есть компоненты тензора напряжений считаются «вмороженными».

Таким образом, в результате расчетов на мезоуровне II для каждого кристаллита определяется тензор скоростей неупругих деформаций, компоненты которого преобразуются из КСК в СКС с использованием соотношения вида

$$\left[ \hat{d}_{II}^{in} \right]_{kl}^{CKC} = O_{ki} \left[ \hat{d}_{II}^{in} \right]_{ij}^{KCK} O_{lj} \quad (27)$$

и осредняются по всем кристаллитам в рамках представительного объема мезоуровня I. Тогда из соотношения (11)<sub>1</sub> находятся:

- скорости неупругих деформаций для рассматриваемого сферолита;
- компоненты тензора упругих свойств в СКС

$$\left[ c^{II} \right]_{mnpq}^{CKC} = O_{mi} O_{nj} \left[ c^{II} \right]_{ijkl}^{KCK} O_{pk} O_{ql}, \quad (28)$$

из осреднения которых по представительному объему мезоуровня I получаются компоненты тензора упругих свойств элемента мезоуровня I;

- компоненты тензора спина решетки кристаллита в СКС

$$\left[ \Omega^{II} \right]_{kl}^{CKC} = O_{ki} \left[ \Omega^{II} \right]_{ij}^{KCK} O_{lj}, \quad (29)$$

по которым из замыкающего уравнения (11)<sub>2</sub> устанавливается спин элемента мезоуровня I.

Таким образом, в результате использования модели мезоуровня II определяются и передаются на мезоуровень I осредненные по представительному объему мезоуровня I упругие характеристики (найденные с учетом изменения ориентации решеток элементов мезоуровня I в рамках рассматриваемого представительного объема) (10)<sub>1</sub>. Скорости неупругих деформаций и тензоры спина решетки для элементов мезоуровня I вычисляются из замыкающих уравнений (11).

## 7. Мезоуровень I

Мезоуровень I является «промежуточным» уровнем в алгоритме реализации модели. При «прямом ходе» — с макроуровня вниз по шкале масштабов

на мезоуровень I (и далее на мезоуровень II), передается градиент вектора скорости перемещений. При «обратном ходе» — с мезоуровня II вверх по шкале масштабов на мезоуровень I, передаются определенные на более глубоком масштабном уровне тензор упругих свойств  $\underline{\underline{c}}^I(t)$  и тензор скоростей неупругих деформаций  $\hat{d}_I^{in}(t)$  элемента мезоуровня I, а также тензор спина  $\hat{\Omega}^I(t)$ , характеризующий квазитвердое движение на данном масштабном уровне.

Этапы решения задачи на мезоуровне I во многом аналогичны соответствующим этапам решения задачи на мезоуровне II, в связи с чем в данной статье отмечаются лишь некоторые характерные особенности их реализации. В качестве основного соотношения модели на мезоуровне I выступает определяющее соотношение (4) — обобщенный закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности

$$\dot{\hat{\sigma}}^I = \underline{\underline{c}}^I : (\hat{d}^I - \hat{d}_I^{in}) + \hat{\Omega}^I \cdot \hat{\sigma}^I - \hat{\sigma}^I \cdot \hat{\Omega}^I. \quad (30)$$

В результате решения задачи на мезоуровне II в фиксированный момент времени находятся явные внутренние переменные, входящие в соотношение (30): тензор упругих свойств  $\underline{\underline{c}}^I$ , тензор скоростей неупругих деформаций  $\hat{d}_I^{in}$  и тензор спина  $\hat{\Omega}^I$ . Для упрощения реализации соотношение (30) разрешается в локальной системе координат сферолита СКС, при этом в компонентах СКС последнее соотношение преобразуется к виду:

$$\left[ \dot{\hat{\sigma}}^I \right]_{ij}^{CKC} = \left[ \underline{\underline{c}}^I \right]_{ijkl}^{CKC} \left( \left[ \hat{d}^I \right]_{lk}^{CKC} - \left[ \hat{d}_I^{in} \right]_{lk}^{CKC} \right). \quad (31)$$

На этапе решения задачи (30) в скоростях из соотношения (31) определяются скорости изменения напряжений. Интегрирование на мезоуровне I осуществляется по аналогии с мезоуровнем II: здесь для интегрирования соотношения (31) также может использоваться любая схема, например, для простоты, явная схема Эйлера. Далее, в соответствии с описанным выше на Этапе 3 алгоритмом реализуется поворот элементов мезоуровня I вместе с напряжениями, что приводит к переопределению их ориентационных тензоров. Далее с учетом поворотов в результате использования операции замыкания и осреднения по всем элементам мезоуровня I в рамках представительного объема макроуровня вычисляются явные внутренние переменные в обобщенном законе Гука: матрицы компонент тензора скоростей неупругих деформаций, тензора упругих свойств и тензора спина, входящего в выражение для коротационной производной, для представительного объема макроуровня.

## 8. Заключение

Таким образом, в предлагаемой статье рассмотрены общая структура многоуровневой конститутивной модели полукристаллического полимера, моделей различных масштабных уровней, учитывающих эволюционирующую структуру материала; анализируются связи однотипных характеристик соседних уровней; предложен алгоритм реализации модели при решении задачи на мезоуровне. Алгоритм и результаты решения задачи исследования деформирования представительного объема макроуровня выходят за рамки настоящей статьи и войдут в готовящуюся публикацию.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96010-р\_Урал\_a, 10-08-00156\_a).

## Литература

1. Олейник Э.Ф. Пластичность частично-кристаллических гибкоцепных полимеров на микро- и мезоуровнях // Высокомолекулярные соединения. Серия С. – 2003. – Т. 45, № 12. – С. 2137-2264.
2. Drozdov A.D., Christiansen J.deC. Cyclic viscoplasticity of high-density polyethylene: Experiments and modeling // Computational Materials Science. – 2007. – V. 39. – P. 465-480.
3. Regrain C., Laiarinandrasana L., Toillon S., Sai K. Multi-mechanism models for semi-crystalline polymer: constitutive relations and finite element implementation // Int. J. of Plasticity. – 2009. – V. 25. – P. 1253-1279.
4. Zairi F., Aour B., Gloaguen J.M., Nait-Abdelaziz M., Lefebvre J.M. Numerical modeling of elastic-viscoplastic equal channel angular extrusion process of a polymer // Computational Materials Science. – 2006. – V. 38. – P. 202-216.
5. Dusunceli N., Colak O.U. Modelling effects of degree of crystallinity on mechanical behavior of semicrystalline polymers // Int. J. of Plasticity. – 2008. – V. 24. – P. 1224-1242.
6. Lai D., Yakimets I., Guigon M. A non-linear viscoelastic model developed for semi-crystalline polymer deformed at small strains with loading and unloading paths // Material Science and Engineering: A. – 2005. – V. 405. – P. 266-271.
7. Морозов И.А., Свистков А.Л. Структурно-феноменологическая модель механического поведения резины // Мех. композиц. материалов и конструкций. – 2008. – Т. 14, № 4. – С. 583-596.
8. Свистков А.Л., Комар Л.А. Моделирование релаксационных процессов в наполненных эластомерных материалах // Высокомолекулярные соединения. – 2005. – Т. 47, №4. – С. 630-636.
9. Свистков А.Л. Континуально-молекулярная модель формирования областей ориентированного полимера в эластомерном нанокомпозите // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2010. – № 4. – С. 82-96.
10. Гаршин О.К., Мошев В.В. Структурная перестройка дисперсно наполненных эластомерных композитов и ее влияние на механические свойства // Высокомолекулярные соединения. – 2005. – Т. 47, №4. – С. 669-675.
11. Bedoui F., Diani J., Regnier G., Seiler W. Micromechanical modeling of isotropic elastic behavior of semicrystalline polymers // Acta Materialia. – 2006. – V. 54. – P. 1513-1523.
12. Van Dommelen J.A.W., Parks D.M., Boyce M.C., Brekelmans W.A.M., Baaijens F.P.T. Micromechanical modeling of intraspherulitic deformation of semicrystalline polymers // Polymer. – 2003. – V. 44. – P. 6089-6101.
13. Nikolov S., Lebensohn R.A., Raabe D. Self-consistent modeling of large plastic deformation, texture and morphology evolution in semi-crystalline polymers // J. Mech. Phys. Solids. – 2006. – V. 54, № 7. – P. 1350-1375.
14. Van Dommelen J.A.W., Parks D.M., M.C. Boyce, Brekelmans W.A.M., Baaijens F.P.T. Micromechanical modeling of the elasto-viscoplastic behavior of semi-crystalline polymers // J. Mech. Phys. Solids. – 2003. – V. 51. – P. 519-541.
15. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т. // Под ред. В.Е. Панина. – Новосибирск: Наука, 1995. – Т. 1. – 298с.
16. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т. // Под ред. В.Е. Панина. – Новосибирск: Наука, 1995. – Т. 2. – 320с.
17. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И. О физических теориях пластичности и их применении для описания эволюции микроструктуры // Современные проблемы термовязкопластичности: Труды II школы-семинара. – Москва: МАМИ, 2007. – С. 128–147.
18. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И. Конститутивные соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // Физ. мезомех. – 2009. – Т. 12, № 3. – С. 61-71.
19. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // Мех. композиц. материалов и конструкций. – 2009. – Т. 15, № 3. – С. 327-344.
20. Van Houtte P., Li S., Seefeldt M., Delannay L. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model // Int. J. Plasticity. – 2005. – V. 21. – P. 589-624.
21. Lin L., Argon A.S. Structure and plastic deformation of polyethylene // J. Mater. Sci. – 1994. – V. 29, № 2. – P. 294-323.

Поступила в редакцию 18.01.11

## Сведения об авторах

Нечаева Елена Сергеевна, ст.преп., Пермский государственный технический университет (ПГТУ), 614990, Пермь, Комсомольский проспект, д.29; E-mail: helen\_ses@perm.ru

Трусов Петр Валентинович, дфмн, проф., зав.каф. ПГТУ; E-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru