

УДК 539.3

КОНСТИТУТИВНАЯ МОДЕЛЬ ЧАСТИЧНО КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА. АЛГОРИТМ РЕАЛИЗАЦИИ ДЛЯ ПРЕДСТАВИТЕЛЬНОГО ОБЪЕМА МАКРОУРОВНЯ

Е.С. Нечаева, П.В. Трусов

Пермский государственный технический университет, Пермь, Россия

Описаны особенности алгоритма реализации конститутивной модели частично кристаллического полимерного материала при деформировании представительного объема макроуровня и при решении краевых задач. Предложен алгоритм для случая произвольного вида нагружения. В качестве примера рассмотрена задача одноосного растяжения–сжатия представительного объема материала на макроуровне.

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

CONSTITUTIVE MODEL OF SEMICRYSTALLINE POLYMER MATERIAL. IMPLEMENTATION ALGORITHM FOR MACRO LEVEL REPRESENTATIVE VOLUME

E.S. Nechaeva and P.V. Trusov

Perm State Technical University, Perm, Russia

This paper describes the peculiarities of the algorithm for implementation of the constitutive model of semicrystalline polymer material during deformation of a representative volume at the macro-level and for solution of boundary-value problems. The algorithm is designed for arbitrary loading conditions. As an example, the problem of uniaxial tension-compression of a representative volume of the material at the macro-level is considered.

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

1. Введение

В статье [1] авторами предложена многоуровневая конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала на примере полиэтилена низкого давления, описаны основные механизмы деформирования, присущие материалам данного класса, а также алгоритм разработанной модели на мезоуровне. В настоящей статье приведены постановка задачи деформирования представительного объема на макроуровне и особенности применения модели на данном масштабном уровне. Описан алгоритм ее реализации для случая произвольного вида нагружения. В качестве примера рассмотрена задача одноосного растяжения–сжатия для представительного объема макроуровня. Проведен анализ результатов моделирования, а также их качественное сопоставление с результатами натуральных экспериментов на одноосное растяжение образцов из полиэтилена низкого давления при различных скоростях деформирования.

2. Постановка задачи деформирования для представительного объема макроуровня

Рассматривается задача одноосного растяжения–сжатия представительного объема макроуровня частично кристаллического полимерного материала. Представительный объем состоит из N сферолитов, каждый сферолит, в свою очередь, — из n кристаллитов. Для определенности принимается, что растяжение–сжатие происходит вдоль оси OX_1 фиксированной лабораторной системы координат (ЛСК). Следует отметить, что в используемой многоуровневой вязкоупругой модели, основанной на гипотезе Фойхта, реализуется жесткое нагружение: на каждом шаге нагружения предписанным является градиент вектора скоростей перемещений. Однако условия реализации эксперимента не позволяют напрямую задать все компоненты данного тензора, то есть одноосное нагружение в исходной постановке нельзя вести чисто кинематически, поскольку граничные условия на макроуровне являются смешанными. В то же время для применения на мезоуровне алгоритма решения, основанного на гипотезе Фойхта, необходимо в каждый момент деформирования отыскивать градиент места (и градиент скорости перемещений). В связи с этим одноосное растяжение (сжатие) в рамках модели осуществляется следующим образом: предписанной является только одна компонента тензора градиента вектора скорости перемещений на макроуровне в ЛСК — $[\hat{\nabla}\vec{V}]_{11}^{ЛСК}(t)$, а остальные компоненты $\hat{\nabla}\vec{V}$ определяются в результате решения задачи исходя из необходимости обеспечения соответствующего одноосного напряженного состояния.

Постановка задачи одноосного растяжения–сжатия для представительного объема макроуровня выглядит следующим образом (далее всюду употребляются обозначения работы [1]):

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\dot{\Sigma}} = \underset{\approx}{C} : (\hat{D} - \hat{D}^{in}) + \hat{\Omega} \cdot \hat{\Sigma} - \hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega}, \quad 1 \\ \hat{D}^{in} = \langle \hat{a}_I^{in} \rangle + \underset{\approx}{C}^{-1} : \langle \underset{\approx}{c}^{I'} : \hat{a}_I^{in'} \rangle, \quad 2 \\ \hat{\Omega} = \langle \hat{\Omega}^I \rangle + \hat{\Sigma}^{-1} \cdot \langle \hat{\sigma}^{I'} \cdot \hat{\Omega}^{I'} \rangle, \quad 3 \\ \underset{\approx}{C} = \langle \underset{\approx}{c}^I \rangle, \quad 4 \\ \left[\hat{\dot{\Sigma}} \right]_{ij}^{ЛСК} = 0, \quad (ij) \neq (11), \quad 5 \\ \left[\hat{D} \right]_{11}^{ЛСК} = \left[\hat{D} \right]_{11}^{ЛСК \text{ предписанное}}, \quad 6 \\ \hat{D} = \frac{1}{2} (\hat{\nabla}\vec{V} + \hat{\nabla}\vec{V}^T), \quad 7 \\ \hat{W} = \frac{1}{2} (\hat{\nabla}\vec{V} - \hat{\nabla}\vec{V}^T) = 0. \quad 8 \end{array} \right. \quad (1)$$

Для представительного объема мезоуровня I используется (см. [1]) постановка задачи (10)–(11) в общем виде, для мезоуровня II — стандартная постановка (12) (см. [1]), записанная для кристаллита.

Необходимо отметить, что на макроуровне соотношения (1)₂₋₄ в рамках постановки задачи для представительного объема играют роль замыкающих уравнений и получаются

из условий согласования моделей различных масштабных уровней. Анализ соотношений (1)₂₋₃ показывает, что при установлении явных внутренних переменных \hat{D}^{in} и $\hat{\Omega}$ для обеспечения условий согласования различных масштабных уровней модели простого осреднения (по объему или иным способом) недостаточно. Так в уравнении (1)₃ при определении тензора спина $\hat{\Omega}$ появляется добавка, характеризующая влияние отклонений от средних значений напряжений и спинов элементов нижележащего масштабного уровня на ротацию элементов на макроуровне и порождаемая влиянием корреляций полей осцилляций напряжений и спинов на мезоуровне I. В соотношении (1)₂ для скоростей неупругих деформаций \hat{D}^{in} также появляется добавка, которая характеризует влияние отклонений от средних значений упругих свойств и скоростей неупругих деформаций на нижележащем масштабном уровне на скорости неупругих деформаций макроуровня. Добавка порождается влиянием корреляций полей осцилляций тензора упругих характеристик и тензора скоростей неупругих деформаций на мезоуровне I и получается из условий согласования масштабных уровней модели. Более подробно вопросы построения замыкающих уравнений в разработанной конститутивной модели будут обсуждаться в отдельной статье.

3. Особенности реализации поворотов

В силу использования гипотезы Фойхта для связи структурных уровней модели при жестком нагружении кристаллита на мезоуровне II в каждый момент деформирования известен градиент вектора скорости перемещений, по которому определяется тензор деформации скорости. Введение в многоуровневую модель материала модели материального поворота для описания ротационной моды деформации на мезоуровне II требует в каждый момент времени по тензору градиента вектора скоростей перемещений отыскивать тензор градиента места. Неголономную меру деформации можно получить интегрированием по времени тензора деформации скорости, другие меры, например Коши–Грина, — интегрированием поля скоростей перемещений и привлечением соответствующих кинематических соотношений. При рассмотрении задачи одноосного растяжения–сжатия представительного объема макроуровня или при других требованиях, накладываемых на напряженное состояние, ситуация несколько усложняется. В таком случае деформации необходимо устанавливать исходя из предписанного вида напряженного состояния. Однако к усложненной постановке задачи нужно прибегать только на макроуровне (чтобы обеспечить предписанный вид НДС), при этом на нижележащих масштабных уровнях никаких усложнений постановок и алгоритмов не требуется: здесь просто «работает» гипотеза Фойхта. Более того, если на макроуровне решается краевая задача (а не задача для представительного объема, алгоритм реализации которой будет описан в данной статье), то вообще нет необходимости в построении каких-либо дополнительных процедур: при решении краевой задачи на макроуровне, например, методом конечных элементов (МКЭ), для каждого КЭ в текущий момент времени определяется градиент вектора скорости перемещений, а далее при переходе на более глубокие масштабные уровни применяется гипотеза Фойхта.

Таким образом, при решении задачи одноосного растяжения–сжатия образца (представительного объема макроуровня) с учетом модели «материального» поворота решетки необходимо по известным деформациям (полю перемещений) вычислить градиент деформации \hat{F} для представительного объема макроуровня, который затем в силу использования расширенной гипотезы Фойхта передается на более глубокие масштабные уровни:

$$\hat{F}'' = \hat{F}' = \hat{F}. \quad (2)$$

В случае задачи одноосного растяжения–сжатия для представительного объема макроуровня определение тензора градиента места \hat{F} на уровне представительного макрообъема материала диктует необходимость введения в разрешающие уравнения дополнительного предположения о равенстве нулю тензора вихря (1)₈. Данное предположение можно сделать исходя из геометрического смысла тензора вихря \hat{W} , который характеризует мгновенную угловую скорость вращения материальных волокон, направленных вдоль главных осей тензора деформации скорости \hat{D} как жесткого целого [2]. В рассматриваемой задаче одна главная ось совпадает с направлением растяжения (сжатия) и фиксирована. Две другие главные оси можно выбрать ортогональными боковым граням образца (прямоугольного в поперечном сечении), причем по условиям нагружения боковые грани образца остаются параллельными оси нагружения и не испытывают поворотов. Таким образом, принятие гипотезы о равенстве нулю тензора вихря приводит к соотношению

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \left((\hat{\nabla} \vec{V})^T - \hat{\nabla} \vec{V} \right) = \frac{1}{2} (\hat{L} - \hat{L}^T) = 0, \quad (3)$$

откуда

$$(\hat{\nabla} \vec{V})^T = \hat{\nabla} \vec{V}, \quad (4)$$

$$\hat{\nabla} \vec{V} = \dot{\hat{F}} \cdot \hat{F}^{-1}. \quad (5)$$

Для определения тензора полного градиента места на макроуровне по тензору градиента скорости перемещений соотношение (5) необходимо преобразовать к виду

$$\dot{\hat{F}} = \hat{\nabla} \vec{V} \cdot \hat{F}. \quad (6)$$

Соотношение (6) записывается в компонентах в базисе ЛСК

$$\dot{F}_{ij}^{ЛСК} = (\hat{\nabla} \vec{V})_{ik}^{ЛСК} \cdot F_{kj}^{ЛСК}, \quad (7)$$

а затем интегрируется с применением явной схемы Эйлера. В результате отыскиваются компоненты тензора градиента места в ЛСК, отвечающие следующему временному срезу:

$$\frac{(F_{ij}^{ЛСК})^{n+1} - (F_{ij}^{ЛСК})^n}{\Delta t} = (\hat{\nabla} \vec{V})_{ik}^{ЛСК} \cdot (F_{kj}^{ЛСК})^n, \quad (8)$$

$$(F_{ij}^{ЛСК})^{n+1} = (F_{ij}^{ЛСК})^n + (\hat{\nabla} \vec{V})_{ik}^{ЛСК} \cdot (F_{kj}^{ЛСК})^n \Delta t. \quad (9)$$

4. Общая структура алгоритма реализации модели на макроуровне

Необходимо подчеркнуть, что в приведенной постановке задача является существенно нелинейной (физически и геометрически), в связи с чем при реализации алгоритма ее решения возникает необходимость в применении пошаговой процедуры,

согласно которой весь интервал нагружения представляется совокупностью «срезов» по времени. На каждом временном срезе известны (заданы либо получены из предыдущих расчетов): ориентационные тензоры элементов мезоуровня I и мезоуровня II (кристаллитов, сферолитов) в рамках представительного объема макроуровня; компоненты тензоров упругих свойств элементов всех масштабных уровней (зависящие от текущей ориентации элемента); условия нагружения (компоненты тензора градиента вектора скорости перемещений); напряжения для всех элементов системы в рассматриваемый момент времени. Требуется установить скорости неупругих деформаций и спины элементов на всех масштабных уровнях, а затем скорости изменения напряжений на макроуровне и в элементах мезоуровней. Далее с применением той или иной процедуры интегрирования находятся напряжения на следующем временном срезе и переопределяются ориентационные тензоры элементов на мезоуровне I и мезоуровне II (осуществляется процедура поворота элементов по найденным скоростям поворота, определяемым соответствующими тензорами спинов).

Существенно, что при решении задачи для представительного объема материала и в том случае, если нагружение ведется кинематически, на каждом временном срезе, действительно, априори известны (заданы) значения всех компонент тензора градиента скорости перемещений. При решении же краевой задачи или задачи для представительного объема материала (в случае, когда процесс нагружения нельзя вести чисто кинематически при необходимости обеспечения одноосного напряженного состояния на макроуровне) тензор градиента скорости перемещений (или некоторые его компоненты) должны находиться из решения задачи на макроуровне. Возникает проблема, заключающаяся в том, что в структуру определяющего соотношения на макроуровне входят явные внутренние переменные — неупругие составляющие тензора деформации скорости и спины, которые для выбранного временного среза устанавливаются на основе моделей, лежащих ниже масштабных уровней и априори не известны. С другой стороны, для использования той или иной модели поворота на мезоуровне II (модели Тейлора полного стеснения или модели «материального» поворота), например при отыскании тензора спина кристаллита с помощью модели поворота Тейлора, необходимо знать тензор градиента скорости перемещений в текущий момент времени (который, в свою очередь, определяется в результате решения краевой задачи на макроуровне и «спускается» на нижележащие масштабные уровни в соответствии с гипотезой Фойхта). В качестве одного из возможных решений вышеназванной проблемы в работе предлагается употребить специального вида итерационную процедуру, которая заключается в последовательном использовании модели макроуровня для вычисления градиента вектора скорости перемещений с текущими значениями скоростей неупругих деформаций и спина и моделей нижележащих масштабных уровней для переопределения явных внутренних переменных в законе Гука на макроуровне (тензора скоростей неупругих деформаций и тензора спина). Если на мезоуровне базовая модель представляет собой вязкоупругую (или упруго-вязкопластическую) модель, то критерием завершения предложенной итерационной процедуры на фиксированном срезе по времени служит достижение сходимости по компонентам тензора спина на макроуровне $\hat{\Omega}$ на двух соседних итерациях; для вычисления скоростей неупругих деформаций итерации не требуются. Более детально особенности реализации предложенной итерационной процедуры описаны далее.

5. Алгоритм решения задачи одноосного растяжения–сжатия для представительного объема макроуровня

При решении задачи одноосного растяжения–сжатия для представительного объема макроуровня исходными данными о нагружении для моделей мезоуровней I и II

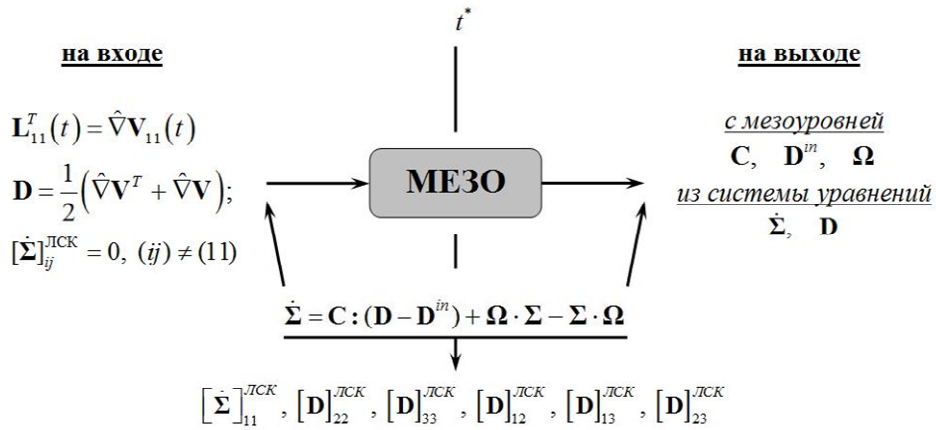


Рис. 1. Схема реализации алгоритма решения задачи одноосного растяжения–сжатия для макроуровня на срезе по времени

являются градиент вектора скорости перемещений и градиент места, найденные на макроуровне с использованием гипотезы Фойгта из соотношений (1) (см. [1]). Чтобы при этом обеспечить предписанный вид НДС (одноосность напряжений) на макроуровне, алгоритм реализации модели на макроуровне приобретает некоторые важные особенности. На уровне представительного макрообъема строится процедура определения всех неизвестных характеристик процесса неупругого деформирования в скоростях для фиксированного момента времени t^* (Рис. 1). Необходимые для этого скорость изменения напряжений и неизвестные компоненты тензора деформации скорости получаются из решения системы уравнений

$$\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{ij}^{ЛСК} = \left[\hat{C} : (\hat{D} - \hat{D}^{in}) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega} \cdot \hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega} \right]_{ij}^{ЛСК} \quad (10)$$

на макроуровне. Исходя из заданных условий нагружения на макроуровне, известной является компонента $\left[\hat{V} \vec{V} \right]_{11}^{ЛСК}$ тензора градиента вектора скорости перемещений, по которой определяется компонента $\left[\hat{D} \right]_{11}^{ЛСК}$ тензора деформации скорости; кроме того, все компоненты тензора $\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{ij}^{ЛСК}$, кроме $\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{11}^{ЛСК}$, являются нулевыми. Таким образом, из решения системы линейных алгебраических уравнений, построенной на основе соотношения (10), на фиксированном временном срезе устанавливаются следующие характеристики НДС в скоростях: $\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{11}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D} \right]_{22}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D} \right]_{33}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D} \right]_{12}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D} \right]_{13}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D} \right]_{23}^{ЛСК}$. Система линейных алгебраических уравнений записывается с учетом условий симметрии тензора напряжений, скоростей деформации и свойств тензора упругих характеристик следующим образом:

$$\left[\hat{C} : (\hat{D} - \hat{D}^{in}) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega} \cdot \hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega} \right]_{ij}^{ЛСК} = 0 \quad (ij) \neq (11),$$

$$\left[\hat{C} \right]_{ijkl}^{ЛСК} \left[\hat{D} \right]_{lk}^{ЛСК} = \left[\hat{C} \right]_{ijkl}^{ЛСК} \left[\hat{D}^{in} \right]_{lk}^{ЛСК} - \left[\hat{\Omega} \right]_{ik}^{ЛСК} \left[\hat{\Sigma} \right]_{kj}^{ЛСК} + \left[\hat{\Sigma} \right]_{ik}^{ЛСК} \left[\hat{\Omega} \right]_{kj}^{ЛСК}, \quad (11)$$

$$\mathbf{[B]}\{\mathbf{D}\} = \{\mathbf{R}\},$$

где $\{\mathbf{D}\}$ — вектор, компонентами которого являются неизвестные значения компонент тензора скоростей полных деформаций $[\hat{D}]_{22}^{JCK}$, $[\hat{D}]_{33}^{JCK}$, $[\hat{D}]_{12}^{JCK}$, $[\hat{D}]_{13}^{JCK}$, $[\hat{D}]_{23}^{JCK}$; $[\mathbf{B}]$ — матрица упругих свойств; $\{\mathbf{R}\}$ — вектор правых частей.

Таким образом, алгоритм решения задачи содержит пять этапов.

1) Установление скоростей неупругих деформаций и спина, входящих в определяющие соотношения макроуровня, на рассматриваемом временном срезе. Для этого на данном этапе используются модели лежащих ниже масштабных уровней, дающие возможность вычислить явные внутренние переменные (тензор скоростей неупругих деформаций и тензор спина) в законе Гука на всех масштабных уровнях, начиная с мезоуровня II.

2) Определение тензора градиента скорости перемещений на макроуровне, обеспечивающего одноосное напряженное состояние, отвечающее предписанному воздействию, из решения системы линейных алгебраических уравнений.

Важным обстоятельством является то, что в рамках разработанной итерационной процедуры этапы 1 и 2 алгоритма используются повторно (что и приводит к итерациям). Итерации необходимы в силу того, что при первом выполнении этапа 1 на срезе по времени неизвестно точное значение градиента вектора скорости перемещений (на первой итерации оно найдено из решения системы линейных алгебраических уравнений, записанной на макроуровне на основе закона Гука в упругом приближении при отсутствии поворотов). В результате выполнения 1-го этапа алгоритма на макроуровне становятся известными скорости неупругих деформаций и спин, которые при подстановке в определяющее соотношение обобщенного закона Гука позволяют в рамках выполнения 2-го этапа алгоритма уточнить значение градиента скорости перемещений на макроуровне. Итерационная процедура циклического повторения этапов 1 и 2 алгоритма продолжается до достижения сходимости по компонентам тензора спина на двух соседних итерациях.

3) Вычисление скоростей изменения напряжений из закона Гука на всех масштабных уровнях по найденным на предыдущих этапах значениям внутренних переменных (скоростей деформаций и спина: \hat{D}^m , $\hat{\Omega}$; \hat{d}_I^m , $\hat{\Omega}^I$; \hat{d}_{II}^m , $\hat{\Omega}^{II}$) и параметров воздействия (тензоров градиента скорости перемещений: $\hat{\nabla}\bar{\mathbf{v}}$; $\hat{\nabla}\bar{\mathbf{v}}^I$; $\hat{\nabla}\bar{\mathbf{v}}^{II}$).

4) Выполнение процедуры интегрирования с малым шагом по времени (при этом схема интегрирования может быть любой, на данный момент — это явная схема Эйлера).

5) Поворот элементов мезоуровней с «вмороженными» компонентами тензоров напряжений (кристаллитов и сферолитов) в соответствии с найденными значениями спинов элементов, переопределение тензоров упругих свойств в определяющих соотношениях на мезоуровне I и макроуровне.

Необходимо отметить, что процедура решения поставленной задачи на первом шаге по времени несколько отличается от общего алгоритма. Это связано с тем, что на нулевом временном срезе значения компонент тензора напряжений нулевые, а следовательно, процедура, описанная выше в пунктах 1 и 2, не используется, поскольку скорости сдвигов по системам скольжения в элементах мезоуровня II и все величины, устанавливаемые по ним, также будут нулевыми; следовательно, на первом шаге просто решается задача в упругом приближении. При этом первый расчетный шаг по времени задается меньшим по сравнению с остальными шагами, так как его цель — только выход на предел текучести. Для произвольного временного среза применяется общий алгоритм, состоящий из пяти вышеперечисленных этапов. Особенности реализации каждого из этапов описаны ниже.

Итак, на первой итерации решается задача в упругом приближении при нулевом спине и при данных условиях из системы (10) определяются неизвестные компоненты

тензора скорости изменения напряжений и тензора деформации скорости. В упругом приближении система (10) преобразуется к виду

$$\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{ij}^{LCK} = \left[\underset{\sim}{C} : \hat{D} \right]_{ij}^{LCK}. \quad (12)$$

В силу предписанного вида нагружения для компонент тензора скорости изменения напряжений должно выполняться условие

$$\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{ij}^{LCK} = 0, (ij) \neq (11), \quad (13)$$

вследствие чего получается система уравнений для недостающих компонент тензоров $\hat{\nabla}\hat{\mathbf{V}}$ (или \hat{D}) и $\dot{\hat{\Sigma}}$ в ЛСК при первом входе в процедуру:

$$\begin{aligned} \left[\underset{\sim}{C} : \hat{D}^m \right]_{ij}^{LCK} &= 0, (ij) \neq (11), \\ \left[\dot{\hat{\Sigma}}^m \right]_{11}^{LCK} &= \left[\underset{\sim}{C} : \hat{D}^m \right]_{11}^{LCK}, \end{aligned} \quad (14)$$

где индекс m обозначает номер итерации; здесь и далее индексы временных шагов опускаются.

Из системы шести уравнений (14) в базисе ЛСК определяются пять неизвестных компонент тензора деформации скорости $\left[\hat{D}^m \right]_{22}^{LCK}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{33}^{LCK}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{12}^{LCK}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{13}^{LCK}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{23}^{LCK}$ и компонента $\left[\dot{\hat{\Sigma}}^m \right]_{11}^{LCK}$ тензора скорости изменения напряжений на срезе по времени. В результате по компонентам тензора деформации скорости $\left[\hat{D}^m \right]_{ij}^{LCK}$ с учетом условия (4) находится тензор градиента вектора скорости перемещений $\left[\hat{\nabla}\hat{\mathbf{V}}^m \right]_{ij}^{LCK}$ макроуровня. Далее в соответствии с гипотезой Фойхта информация о воздействии передается вниз по лестнице масштабов до мезоуровня II, то есть после установления параметров НДС на макроуровне в рамках процедуры реализуется переход на более глубокие масштабные уровни.

5.1. Этап 1: процедура отыскания явных внутренних переменных в определяющих соотношениях всех масштабных уровней

На произвольной итерации m процесс решения задачи начинается с мезоуровня II, где по известным значениям компонент тензора напряжений (которые берутся с предыдущего временного шага и не изменяются при итерировании) на основе соответствующих моделей рассчитываются скорости неупругих деформаций и спины элементов. Далее с использованием замыкающих уравнений осуществляется передача внутренних переменных модели на более высокие масштабные уровни (на мезоуровень I, а затем на макроуровень), при этом алгоритм включает в себя следующие пункты:

1) Применение модели мезоуровня II с текущими значениями компонент градиента вектора скоростей перемещений (заданное воздействие) $\left(\hat{\nabla}\hat{\mathbf{v}}^m \right)^{m-1}$, градиента места $\left(\hat{\mathbf{F}}^m \right)^{m-1}$ и скоростей деформаций $\left(\hat{d}^m \right)^{m-1}$ с предыдущей итерации $m-1$ и значениями

компонент тензора напряжений σ_{ij}^{II} для расчета на мезоуровне II тензора скоростей неупругих деформаций \hat{d}_{II}^{in} и тензора спина решетки $(\hat{\Omega}^{II})^m$ для каждого кристаллита на рассматриваемом временном срезе на текущей итерации m .

2) Определение из замыкающих уравнений явных внутренних переменных (скоростей неупругих деформаций и спина), входящих в определяющие соотношения на мезоуровне I и на макроуровне:

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

$$\hat{D}^m = \langle \hat{d}_I^{in} \rangle + \hat{C}^{-1} : \langle \hat{c}^{II'} : \hat{d}_I^{in'} \rangle, \quad \hat{\Omega}^m = \langle (\hat{\Omega}^I)^m \rangle + \hat{\Sigma}^{-1} \cdot \langle \hat{\sigma}^{II'} \cdot (\hat{\Omega}^I)^{m'} \rangle.$$

5.2. Этап 2: определение тензора градиента скорости перемещений на макроуровне, обеспечивающего одноосное напряженное состояние

На данном этапе из определяющего соотношения обобщенного закона Гука на макроуровне

$$\hat{\Sigma}^m = \hat{C} : (\hat{D}^m - \hat{D}^{in}) + \hat{\Omega}^m \cdot \hat{\Sigma} - \hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega}^m \quad (15)$$

с найденными значениями явных внутренних переменных модели на рассматриваемом срезе по времени находятся скорости изменения напряжений. В компонентах базиса ЛСК соотношение (15) преобразуется к виду

$$\left[\hat{\Sigma}^m \right]_{ij}^{ЛСК} = \left[\hat{C} : (\hat{D}^m - \hat{D}^{in}) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega}^m \cdot \hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega}^m \right]_{ij}^{ЛСК}. \quad (16)$$

При этом учитывается требование одноосности напряжений на макроуровне, что снова приводит к системе уравнений для отыскания неизвестных компонент градиента скорости перемещений $(\hat{\nabla} \vec{V})^m$ (или \hat{D}^m) на рассматриваемом срезе по времени:

$$\left[\hat{C} : (\hat{D}^m - \hat{D}^{in}) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega}^m \cdot \hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega}^m \right]_{ij}^{ЛСК} = 0 \quad (ij) \neq (11),$$

$$\left[\hat{\Sigma}^m \right]_{11}^{ЛСК} = \left[\hat{C} : (\hat{D}^m - \hat{D}^{in}) \right]_{11}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega}^m \cdot \hat{\Sigma} \right]_{11}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega}^m \right]_{11}^{ЛСК}. \quad (17)$$

В результате из системы шести уравнений (17) снова находятся шесть неизвестных: пять компонент тензора деформации скорости $\left[\hat{D}^m \right]_{22}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{33}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{12}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{13}^{ЛСК}$, $\left[\hat{D}^m \right]_{23}^{ЛСК}$ и компонента $\left[\hat{\Sigma}^m \right]_{11}^{ЛСК}$ тензора скорости изменения напряжений на рассматриваемом срезе по времени для текущей итерации m . При этом значения компонент тензора скоростей неупругих деформаций, тензора напряжений и тензора упругих свойств устанавливаются для текущего среза по времени и в зависимости от итераций не меняются. Далее снова производится переход на нижележащие масштабные уровни, но уже с уточненными параметрами воздействия. Критериями завершения

описанной «итерационной» процедуры на срезе по времени могут служить следующие условия для двух последовательных проходов алгоритма

$$\left\| \left[\left(\hat{\nabla} \vec{V} \right)^m \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\left(\hat{\nabla} \vec{V} \right)^{m-1} \right]_{ij}^{ЛСК} \right\| < \varepsilon, \quad (18)$$

$$\left\| \left[\hat{\Omega}^m \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Omega}^{m-1} \right]_{ij}^{ЛСК} \right\| < \gamma, \quad (19)$$

где ε и γ — допустимые погрешности для компонент тензоров градиента скорости перемещений и спина макроуровня соответственно.

5.3. Этап 3: определение скоростей напряжений на всех масштабных уровнях

С учетом найденных значений параметров воздействия (компонент тензора градиента скоростей перемещений) и значений всех внутренних переменных в законе Гука на рассматриваемом срезе по времени вычисляются скорости напряжений

$$\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{ij}^{ЛСК} = \left[\hat{\underline{C}} : \left(\hat{D} - \hat{D}^{in} \right) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega} \cdot \hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega} \right]_{ij}^{ЛСК}. \quad (20)$$

При этом необходимо подчеркнуть, что все параметры в определяющих соотношениях соответствуют именно рассматриваемому моменту времени t^* (компоненты тензора упругих свойств $\hat{\underline{C}}$ известны, поскольку известны ориентации всех элементов на каждом масштабном уровне, тензоры скоростей неупругих деформаций \hat{D}^{in} и спина $\hat{\Omega}$ определены в результате реализации алгоритма на этапе 1).

Аналогично устанавливаются скорости изменения напряжений для элементов мезоуровня II или мезоуровня I, однако в этом случае преобразования осуществляются в локальной системе координат соответствующего элемента (кристаллографической системе координат — КСК или системе координат сферолита — СКС). Необходимо отметить, что при проведении расчетов на мезоуровне II удобнее работать в КСК кристаллита, связанной с решеткой, поскольку в этом случае относительно подвижного наблюдателя система уравнений упрощается. При проведении расчетов на мезоуровне I также представляется целесообразным работать в подвижной системе координат СКС, связанной со сферолитом.

5.4. Этап 4: интегрирование

На данном этапе выполняется интегрирование соотношения

$$\left[\dot{\hat{\Sigma}} \right]_{ij}^{ЛСК} = \left[\hat{\underline{C}} : \left(\hat{D} - \hat{D}^{in} \right) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega} \cdot \hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma} \cdot \hat{\Omega} \right]_{ij}^{ЛСК}$$

с малым шагом по времени одним из известных методов с целью определения компонент тензора напряжений в ЛСК $\left[\hat{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК}$ (то есть компоненты $\left[\hat{\Sigma} \right]_{11}^{ЛСК}$, поскольку остальные компоненты являются нулевыми в силу заданной схемы нагружения) на начало следующего шага, при этом схема интегрирования может быть любой. В случае использования явной схемы Эйлера последнее соотношение принимает вид:

$$\left[\hat{\Sigma}^{n+1} \right]_{ij}^{ЛСК} = \left[\hat{\Sigma}^n \right]_{ij}^{ЛСК} + \left(\left[\hat{C} : (\hat{D} - \hat{D}^{in}) \right]_{ij}^{ЛСК} + \left[\hat{\Omega} \cdot \hat{\Sigma}^n \right]_{ij}^{ЛСК} - \left[\hat{\Sigma}^n \cdot \hat{\Omega} \right]_{ij}^{ЛСК} \right) \Delta t, \quad (21)$$

где n — номер временного шага; компоненты тензора напряжений $\hat{\Sigma}^n$ на начало текущего шага найдены, компоненты тензора напряжений $\hat{\Sigma}^{n+1}$ определяются на начало следующего шага по времени.

Для установления НДС элементов мезоуровней I и II на начало следующего шага по времени при известных компонентах тензора градиента скорости перемещений на макроуровне и использовании гипотезы Фойхта следует возвратиться на мезоуровень I, затем на мезоуровень II и преобразовать матрицу компонент из ЛСК в СКС и в КСК соответственно. В КСК по известным значениям компонент тензоров скоростей полных и неупругих деформаций для каждого кристаллита вычисляются компоненты тензора напряжений кристаллита на начало следующего шага. Компоненты тензора скоростей полных и неупругих деформаций в КСК подставляются в соотношение (18)₁ (см. [1]), которое интегрируется с позиции подвижного наблюдателя, связанного с КСК (для интегрирования можно использовать любую схему, например, как здесь, явную схему Эйлера):

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

откуда

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

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

Аналогично определяются напряжения на мезоуровне I.

Особенности пятого этапа алгоритма реализации модели, в рамках которого осуществляется переопределение ориентационных тензоров всех элементов мезоуровня II и мезоуровня I в рамках представительного объема макроуровня в соответствии с найденными для данного временного среза ротациями элементов, устанавливаемыми по их спинам, подробно описаны в работе [1].

6. Обсуждение результатов

С применением разработанной конститутивной модели проведена серия тестовых расчетов, позволяющих проанализировать качественную зависимость результатов моделирования от параметров модели, а также серия вычислительных экспериментов на одноосное растяжение–сжатие для представительного объема макроуровня и мезоуровня I (выборка из 25 кристаллитов) и качественное сопоставление результатов вычислений и данных натуральных экспериментов. Значения ряда параметров модели — критических напряжений сдвига для систем скольжения в рамках элемента мезоуровня II, факторов чувствительности сдвига по системам скольжения к нормальному давлению для внутриламеллярных систем скольжения, компонент тензора упругих свойств кристаллитов — взяты из работ [3–5], в которых они определены для полиэтилена низкого давления. Значения критических напряжений сдвига и фактора чувствительности сдвига по системе скольжения к нормальному

давлению для внутриламеллярных систем скольжения приводятся в Таблице [3]. Критическое напряжение сдвига для межламеллярной системы скольжения принято равным 3,2 МПа [5], упругие константы для кристаллита полиэтилена низкого давления (орторомбическая решетка) были следующими [4]: $C_{11} = 7$; $C_{33} = 81$; $C_{12} = 3,8$; $C_{13} = 4,7$; $C_{44} = 1,5$; $C_{66} = 1,6$. Остальные параметры модели подлежали идентификации с учетом конкретной марки материала, используемой в экспериментах.

Таблица. Критические напряжения сдвига $\tau_0^{(k)}$ и коэффициенты $\mu_0^{(k)}$ (критерий текучести Кулона) для разных систем скольжения в кристаллах ПЭНД [3]

Система скольжения	$\tau_0^{(k)}$, МПа	$\mu_0^{(k)}$
(100) [001]	7,20	0,11
(010) [001]	15,60	0,20
(100) [010]	12,20	0,17

На рисунке 2 показаны результаты вычислительных экспериментов (зависимости интенсивности напряжений σ_i от интенсивности деформаций ϵ_i) с разработанной моделью на одноосное сжатие с использованием модели поворота для элементов мезоуровня II без учета поворотов и без упрочнения (в зависимости от нормального давления и от накопленных сдвигов) по системам скольжения.

Из представленных зависимостей видно, что если поворот для элементов мезоуровня II не учитывается, то, как в случае равных критических напряжений сдвига по всем системам скольжения в кристаллите (Рис. 2, а), так и в случае разных

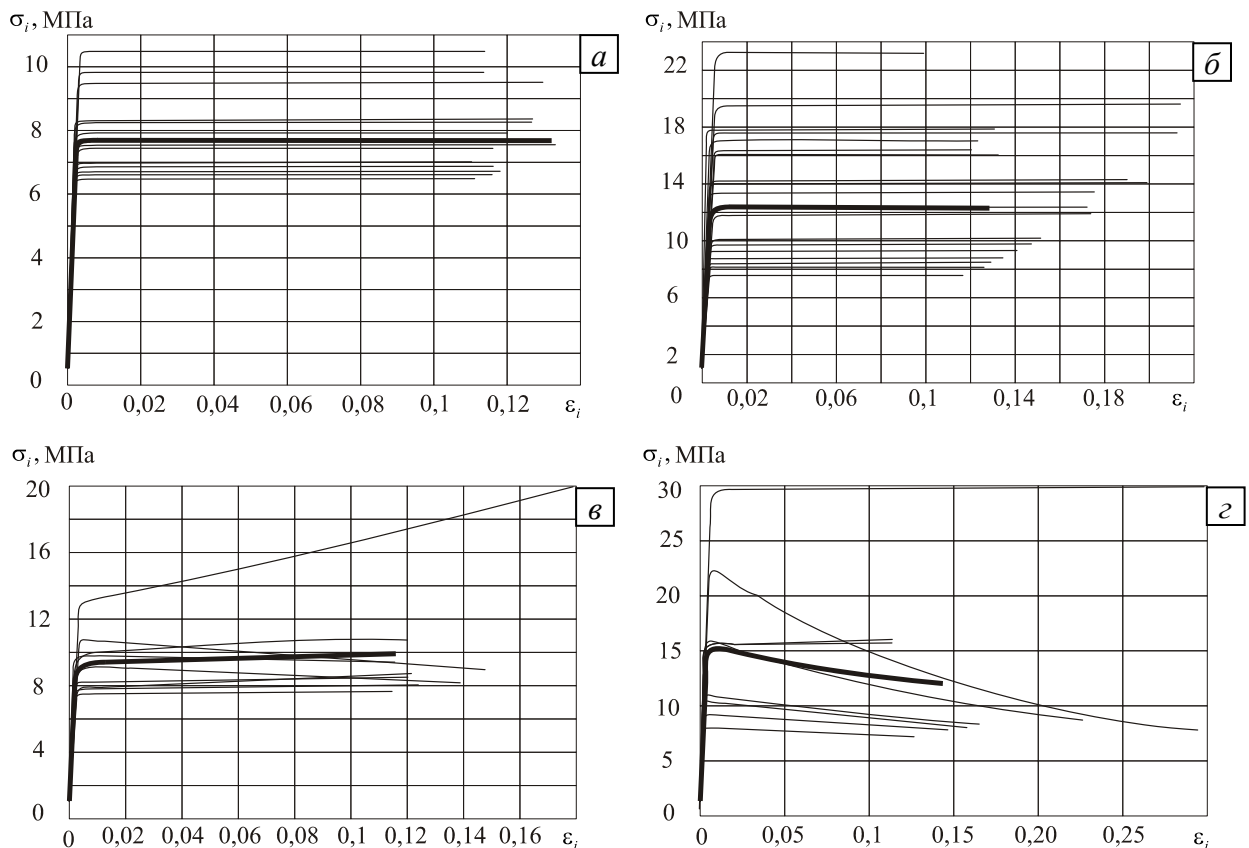


Рис. 2. Результаты вычислительных экспериментов по различным системам скольжения: с равными критическими напряжениями (3,2 МПа) без учета поворотов (а); с разными критическими напряжениями сдвига без учета поворотов (б); с равными критическими напряжениями (3,4 МПа) с учетом поворотов (в); с разными критическими напряжениями сдвига с учетом поворотов (г)

критических напряжений сдвига (Рис. 2, б), модель демонстрирует идеально-пластическое поведение с различными пределами текучести. При этом если повороты элементов мезоуровня II принимаются во внимание (Рис. 2, в, г), то в первом случае (равные критические напряжения сдвига по всем системам скольжения) на осредненной диаграмме наблюдается упрочнение, то есть элементы разворачиваются таким образом, чтобы повысить сопротивление деформации. Во втором случае (разные критические напряжения сдвига по всем системам скольжения) учет поворота для элементов мезоуровня II приводит к разупрочнению, наблюдаемому на осредненной диаграмме, то есть элементы согласно модели поворота Тейлора разворачиваются таким образом, чтобы сдвиг осуществлялся по системам скольжения с меньшими критическими напряжениями сдвига.

Кроме того, была проведена серия вычислительных экспериментов на одноосное растяжение, результаты которых сопоставлялись с результатами экспериментов на одноосное растяжение образцов из полиэтилена низкого давления, реализованных в Центре экспериментальной механики Пермского государственного технического университета [6]. В ходе натурных испытаний авторами работы [6] показана существенная зависимость механического поведения полиэтилена низкого давления от скорости деформирования, которая отмечается и в других работах, например в [7], и является характерной для рассматриваемого класса материалов. Результаты расчетов с разработанной конститутивной моделью подтверждают проявление аналогичной зависимости. На рисунке 3 приведены результаты натурального и вычислительного экспериментов при различных значениях скорости деформирования. Видно, что с увеличением скорости деформирования наблюдается рост напряжений, что на осредненной диаграмме приводит к смещению диаграммы вверх.

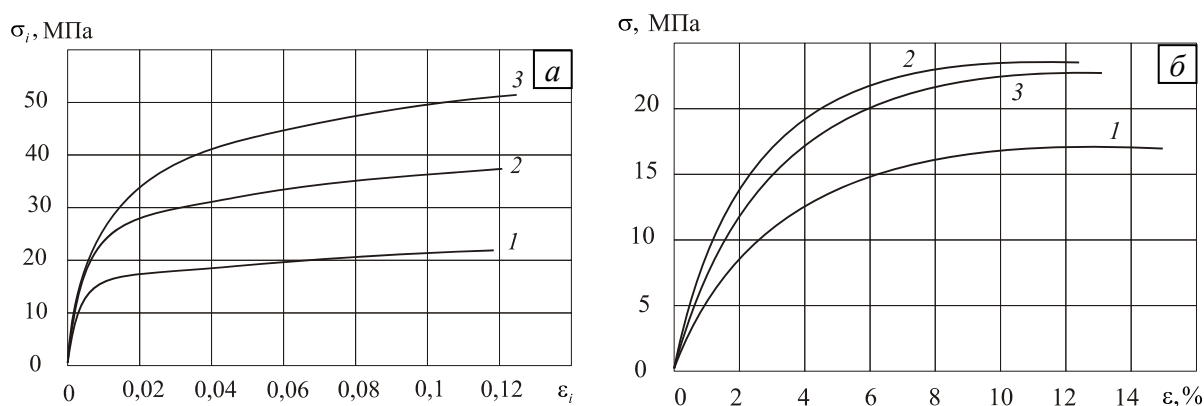


Рис. 3. Результаты вычислительного (а) и натурального [4] (б) экспериментов на одноосное растяжение при различных скоростях нагружения, $[c^{-1}]$: $9,8 \cdot 10^{-4}$ (1); $9,8 \cdot 10^{-2}$ (2); 0,22 (3)

7. Заключение

Таким образом, авторами работы предложена многоуровневая конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала, основанная на использовании физических теорий и описании базовых механизмов деформирования, реализующихся в материале на уровне кристаллитов (сдвиг по кристаллографическим системам скольжения в ламелях, межламеллярный сдвиг, механизм пространственного раздвижения–сжатия ламелей, а также квазитвердое движение элементов каждого из рассматриваемых масштабных уровней). Модель демонстрирует качественное согласование результатов вычислений с данными натурных экспериментов с точки

зрения зависимости поведения материала на макроуровне от скорости деформирования (данная зависимость наблюдается на полиэтилене низкого давления как при лабораторных испытаниях, так и в модельных расчетах). Применение разработанной модели для описания процесса деформирования конкретного материала требует дополнительных экспериментальных данных для идентификации модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96010-р_Урал_а, 10-08-00156_а).

Литература

1. *Нечаева Е.С., Трусов П.В.* Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации модели мезоуровня // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2011. – Т. 4, № 1. – С. 74-89.
2. *Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И.* Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
3. *Олейник Э.Ф.* Пластичность частично-кристаллических гибкоцепных полимеров на микро- и мезоуровнях // Высокомолекулярные соединения. Серия С. – 2003. – Т. 45, № 12. – С. 2137-2264.
4. *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.
5. *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.
6. *Сальников А.Ф., Словиков С.В., Аношкин А.Н., Вильдеман В.Э.* Влияние динамических нагрузок на полимерные армированные трубы // Газовая промышленность. – 2010. – Т. 647, № 6. – С. 38-40.
7. *Addiego F., Dahoume A., G'Sell C., Hiver J.-M.* Characterization of volume strain at large deformation under uniaxial tension in high-density polyethylene // Polymer. – 2006. – V. 47. – P. 4387-4399.

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