

УДК 541.64:539.3

СТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ¹

© 2002 г. К. Р. Herrmann*, В. Г. Ошмян**, С. А. Тиман**,
М. Ю. Шамаев**

*Laboratory of Technical Mechanics, Paderborn University
D-33098 Paderborn, Pohlweg 47-49, Germany

**Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
119991 Москва, ул. Косягина, 4

Статья является обзором работ авторов по моделированию больших деформаций и разрушения полимерных материалов. Отличительной особенностью предлагаемого подхода является учет в рамках механики сплошной среды изменения структуры однофазного полимера в ходе деформирования и, одновременно, влияния структуры на его деформационно-прочностные характеристики. Структура задается функцией распределения полимерных фрагментов по ориентациям. Под полимерным фрагментом понимается анизотропная единица структуры, ответственная за деформационное поведение материала. В зависимости от типа полимера и стадии деформирования полимерному фрагменту может быть придан различный физический смысл. В частности, единицей структуры может служить кристаллит, мономерное звено гибкоцепного полимера, молекула жесткоцепного полимера. При этом может быть одновременно введено несколько типов полимерных фрагментов, например различные мономерные звенья сополимера. Принимая во внимание изменение ориентационных распределений в ходе деформирования и зависимость от них механических характеристик материала, удается объяснить ряд известных закономерностей деформирования полимеров: деформационное размягчение и упрочнение, изменение предела текучести со скоростью вытяжки и многие другие. Соотношения, определяющие большие деформации однофазного полимера, использованы для описания механических свойств неоднородных полимерных материалов, в частности композитов, содержащих жесткие и(или) мягкие включения. Приведены результаты моделирования пластического деформирования и вязкого разрушения неоднородных полимерных материалов в зависимости от условий деформирования, скоростей пластического течения и переориентации, а также от жесткости включений, их объемного содержания и взаимного расположения.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, характерной особенностью полимерных материалов является способность к большим, неразрушающим пластическим деформациям, в которых проявляется ряд специфических особенностей. Важнейшей является эволюция структуры полимера, т.е. появление текстуры, ориентации, и, как следствие, проявление анизотропии

механических свойств. Поэтому не вызывает сомнений актуальность построения континуальных уравнений, связывающих напряжение и деформации в полимерных материалах в сложном напряженном состоянии, определяющих соотношений, учитывающих изменения текстуры и не ограниченных допущениями о малости деформаций. Обзор работ авторов в указанной области составляет основное содержание настоящей статьи.

Общие принципы построения определяющих соотношений для больших деформаций сформулированы в серии публикаций [1–26]. Не зависящие от скоростей деформации, определяющие соотношения классической теории течения, предназначеннай

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 00-03-33169, 01-03-32043).

E-mail: oshmyan@center.chph.ras.ru (Ошмян Виктор Григорьевич).

для описания деформирования упругопластических материалов, обобщены на случай больших деформаций в работах [1, 2, 4, 5, 7, 18, 25]. Авторами работ [3, 9–12, 16–19, 20–22, 25, 27–29] предложены кинетические уравнения накопления пластических деформаций без ограничений на их величину. Эти уравнения моделируют течение вязкопластических сред, к которым относятся полимерные материалы.

Начиная с известной публикации 1968 г. [30], для описания деформационных σ - ϵ -диаграмм полимеров широко используются так называемые элементные модели, представляющие собой параллельное и(или) последовательное соединение вязких и упругих элементов. Выбор достаточно большого числа элементов, построение сложных схем их соединения и введение нелинейностей позволяют с высокой степенью точности подогнать деформационные диаграммы к эксперименту. Вместе с тем указанный подход обладает двумя существенными недостатками.

1. Предсказания элементных моделей могут оказаться ошибочными, если изучаемые условия нагружения (например, сдвиг) отличаются от базовых условий (например, одноосная вытяжка), использованных для подгонки деформационных кривых.

2. С помощью элементных моделей диаграммы σ - ϵ не могут быть объяснены с физической точки зрения. В частности, остаются в тени такие характерные особенности деформирования полимеров, как наличие либо отсутствие пика текучести, деформационное размягчение и упрочнение и, что наиболее важно, изменение структуры вследствие деформирования.

Закономерности пластического течения могут быть объяснены исходя из механизмов его реализации. Наиболее развитые представления о накоплении необратимых деформаций в кристаллах, в том числе и полимерных [28, 29], сегодня предлагают дислокационные теории пластичности (см., например, работу [31]). Согласно этим теориям, механизмом течения является скольжение вдоль кристаллографических плоскостей, обусловленное движением дислокаций. Специфический термоактивационный механизм течения стеклообразных полимеров предложен Argon [32]. Он состоит в рождении и аннигиляции кinkов в полимерных цепях. Развитые на его основе определяющие соотношения [27] позволили описать диаграммы вытяжки ПММА в широком скоростном и температурном диапазоне.

Большинство моделей деформирования как упругопластических, так и вязкопластических тел, в том числе и только что упомянутые уравнения работы [27], не учитывают обусловленной деформированием структуризации материалов. Изменениями структуры можно пренебречь в случае малых деформаций. Однако необходимость учета структурной зависимости определяющих соотношений и, обратно, реструктуризации материала при больших деформациях очевидна. Структура кристалла может быть естественным образом охарактеризована триадой векторов, определяющих его ориентацию в пространстве. Такой способ характеристики структуры в совокупности с эволюционными уравнениями, определяющими изменение структурной функции, предложен в работах [25, 33] для описания свойств поликристаллических металлов. Предполагается, что каждая материальная точка принадлежит одному определенным образом ориентированному структурному элементу – кристаллиту. Аналогичный поход использован Parks с соавторами [28, 29] для моделирования больших деформаций аморфно-кристаллических полимеров. Полимерные кристаллиты предлагаются рассматривать как включения в высокоэластической аморфной матрице, которые способны к необратимым деформациям по механизму скольжения вдоль кристаллографических плоскостей.

Указанный способ жестко детерминированного введения структуры обладает, с нашей точки зрения, рядом недостатков, наиболее ярко проявляющихся в случае полимерных материалов и обусловленных сложностью построения и использования соответствующего описания.

Во-первых, рассматриваемой точке полимерной среды затруднительно приписать фиксированную ориентацию структурного элемента в рамках континуальной механики. Одной из естественных физических интерпретаций структурного элемента, который в дальнейшем будет называться полимерным фрагментом, является ориентированный сегмент полимерной цепи. Переплетение макромолекул, распределение по молекулярной массе, наличие громоздких заместителей, разветвлений и зацеплений обуславливает естественность локальной характеристики структуры не фиксированной ориентацией полимерного фрагмента, а зависящим от точки распределением по ориентациям. Подобное описание структуры будем называть мезоскопическим в отличие от микроскопического, определяющего молекулярное строение, и от макроскопического, характеризующего

структуре в масштабе размеров полимерных образцов, изделий и конструкций.

Во-вторых, использование в качестве структурной функции распределения полимерных фрагментов по ориентациям позволит рассмотреть в рамках единой модели более широкий класс полимеров и стадий деформирования за счет придания широкого физического смысла понятию полимерного фрагмента. Например, на стадии переориентации кристаллитов в аморфно-кристаллическом полимере, когда еще не происходит заметного разрушения их структуры, естественно считать полимерным фрагментом кристаллит. Напротив, на стадии рекристаллизации термину “полимерный фрагмент” следует придать смысл ориентированного участка (сегмента) полимерной цепи. Гибкость предлагаемого подхода определяется также возможностью одновременного рассмотрения нескольких типов полимерных фрагментов (мультифрагментные модели), например, двух: кристаллиты и участки аморфных цепей в частично кристаллическом полимере.

В-третьих, использование детального детерминированного описания структуры приведет к необходимости построения сложных моделей деформирования неоднородной среды даже для однофазного полимера. Тем более затруднительным окажется моделирование больших деформаций многофазных полимерных систем, в частности полимерных композитов и смесей.

Предложенное авторами [34–36] мезоскопическое описание больших деформаций полимерных материалов составляет основное содержание настоящего обзора. Разработанные модели основаны на описании локальной структуры полимера с помощью распределения по ориентациям одного (монофрагментное описание) или нескольких (мультифрагментное описание) полимерных фрагментов. Одной из целей обзора являются демонстрация и анализ рассчитанных диаграмм деформирования для в сложных режимах нагружения и предсказываемых структурных изменений в однофазных полимерах, структура которых охарактеризована моно- и бифрагментным распределением по ориентациям. Во втором случае объектом моделирования является аморфно-кристаллический полимер.

Для описания деформирования неоднородных полимерных систем регулярного матричного строения (полимерных смесей и композитов) использованы два типа допущений относительно структуры изучаемых материалов: модель композитных сфер [37], называемая также полидисперсной, и периодическая модель. Выбор этих

структурных моделей продиктован тем, что они предоставляют возможность описания не только эффективных (осредненных по образцу) свойств, но и микромеханических аспектов деформирования, в отличие от широко используемых моделей самосогласования [38–42]. Моделирование физико-механических свойств сильно неоднородных материалов хаотического строения требует использования совершенно иных подходов и не будет затрагиваться в настоящем обзоре.

Двумерный вариант полидисперсной модели использовался в работе [36] для расчета диаграмм растяжения полимеров, содержащих включения и поры круглой формы. Предполагается, что включения имеют одинаковую форму, характеризуются широким распределением по размерам и расположены таким образом, что объем материала может быть разделен на подобные друг другу, не пересекающиеся оболочки. Радиусы оболочек пропорциональны радиусам включений и определяются их объемным содержанием. Допущения полидисперсной модели позволяют аппроксимировать задачу о деформировании композита, содержащего много включений, решением краевой задачи для одной сферической оболочки с однородными по деформациям условиями на ее внешней границе.

Вторая модель предполагает периодическую структуру материала. При проведении расчетов, результаты которых будут обсуждены в обзоре, рассматривались квадратные включения, центры которых расположены в узлах квадратной решетки. С середины 70-х годов XX века по настоящее время активно развивается математическая теория осреднения дифференциальных уравнений в периодически неоднородных средах [43–63]. Основным результатом теории является сведение проблемы описания механических полей, возникающих при деформировании композиционных материалов, к решению краевой задачи на одной ячейке периодичности. Преимущественно рассматривались линейные дифференциальные уравнения, соответствующие упругим определяющим соотношениям. В работах [53, 64–67] решены задачи на ячейке, соответствующие малым пластическим деформациям. Результаты моделирования больших деформаций и вязкого разрушения полимерных смесей и композитов, полученные с использованием допущения о периодичности структуры и подходов математической теории осреднения, также представлены и обсуждены в настоящем обзоре.

ФОРМУЛИРОВКИ И ДОПУЩЕНИЯ МОДЕЛИ

Кинематические рамки модели

Кинематика деформирования сплошной среды полностью определяется отображением исходных, лагранжевых, координат X в текущие, эйлеровы, координаты x деформируемого тела. Градиент этого отображения $\mathbf{F} = \partial x / \partial X$ естественно называть градиентом деформаций.

Кинематические рамки модели определяются используемым многими авторами (см., например, работы [2, 8, 12, 14, 27]) допущением о существовании промежуточного, свободного от напряжений состояния тела X_p , от которого следует отсчитывать мгновенно обратимые, т.е. упругие (гуковские), деформации. Математическая формулировка такого рассмотрения сводится к представлению отображения исходных координат в текущие $X \rightarrow x$ в виде композиции отображений

$$X \rightarrow X_p \rightarrow x, \quad (1)$$

первое из которых определяет пластические, а второе – упругие деформации.

Очевидным следствием представления (1) является мультиплекативное разложение градиента деформаций на упругую $\mathbf{F}_e = \partial x / \partial X_p$ и пластическую $\mathbf{F}_p = \partial X_p / \partial X$ составляющие

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_p \quad (2)$$

Основным возражением против сформулированного кинематического описания является неопределенность промежуточного состояния и соответственно представления (1) в общем случае неоднородных деформаций [25]. Однако для построения определяющих соотношений достаточно рассмотреть однородные деформации, для которых свободное от напряжений промежуточное состояние определимо. Неинтегрируемость мультиплекативного разложения (2) градиента деформаций, сохраняющего силу согласно модели и при неоднородных деформациях, отражает реальную возможность существования локальных напряжений в деформируемом пластическом теле после снятия макроскопических внешних нагрузок.

Использование известного представления произвольной матрицы A в виде правого ($A = A'U$) или левого ($A = UA'$) разложения на симметричный (A' либо A^T) и ортогональный (U) сомножители для упругого \mathbf{F}_e и пластического \mathbf{F}_p градиентов деформаций [68] позволяет переписать соотношение (2) в виде

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e' V \mathbf{F}_p^T, \quad (3)$$

т.е. считать упругий градиент симметрическим, а пластический – вычисляемым как композиция симметрического отображения и вращения тела как целого.

В соответствии с принятой в случае конечных деформаций методикой тензор упругих деформаций определяется в настоящей модели логарифмированием соответствующего градиента

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \ln \mathbf{F}_e \quad (4)$$

Структурное описание однофазного полимера

Структура полимера и, следовательно, его упругие и пластические свойства, определяются в модели единственной функцией, а именно ориентационным распределением выбранного структурного фрагмента $f(\mathbf{p})$. Через \mathbf{p} обозначено рассматриваемое направление, т.е. точка на сфере единичного радиуса. Величина $f(\mathbf{p})d\mathbf{p}$ определяет долю фрагментов, ориентированных в направлениях, содержащихся в окрестности площади $d\mathbf{p}$ точки \mathbf{p} на единичной сфере.

Как отмечено во введении, структурной единице “полимерный фрагмент” может быть придан различный физический смысл. Под таким фрагментом понимается стабильное в рассматриваемых условиях анизотропное текстурное образование, обладающее определенными механическими свойствами и способное изменять лишь свою ориентацию, но не внутреннюю структуру. Предполагается, что фрагменты полимерных цепей настолько хорошо перемешаны, что в континуальном приближении механики сплошной среды структуру окрестности рассматриваемой точки естественно характеризовать не фиксированной ориентацией одного структурного элемента, а набором этих элементов и распределением по их ориентациям. В зависимости от природы полимера и стадии деформирования неразрушающимся элементом структуры является мономерный сегмент макромолекулы или стабильное кристаллическое образование, например ламель в сферолите.

Может оказаться необходимым изменить сущность, а следовательно, и свойства полимерного фрагмента в процессе деформирования. Например, кристаллит в аморфно-кристаллическом полимере остается стабильным только до определенной макроскопической деформации. При ее превышении начнется разрушение кристаллита, и полимерным фрагментом следует уже считать не кристаллит, а звено полимерной цепи, которое остается неразрушимым.

В ряде случаев целесообразно ввести в рассмотрение одновременно несколько видов полимерных фрагментов. Их роль могут играть различные мономерные звенья в сополимере, фрагменты кристаллических и аморфных областей и т.д. Различия в природе и, следовательно, в свойствах разных видов фрагментов приводят к необходимости использования нескольких ориентационных распределений для описания структуры. В частности, в следующем разделе анализируется бифрагментное описание больших деформаций аморфно-кристаллического полимера. Однако в целях сокращения записи уравнений все формулировки определяющих соотношений в обзоре используют монофрагментную структурную функцию.

Упругие соотношения модели

Предполагается, что возникающие при деформировании тела напряжения σ обусловлены только градиентом упругих деформаций F_e или, эквивалентно, тензором упругих деформаций ϵ .

Тензор упругих модулей C^0 полимера, все фрагменты которого ориентированы в направлении оси x_1 , предполагается известным. Тензор C^0 может характеризоваться произвольной симметрией. Однако в рамках принятого структурного представления имеет смысл ограничиться рассмотрением трансверсальной симметрии, определяемой направлением полимерного фрагмента.

Упругие свойства полимеров обычно характеризуются сильной анизотропией. В частности, упругий модуль в направлении ориентации полимерной цепи существенно превышает модуль в перпендикулярном направлении. Обозначим через $C(p)$ тензор упругих модулей полимерных фрагментов, ориентированных в направлении p . Он вычисляется через тензор C^0 по известному закону преобразования, обусловленного ортогональным поворотом системы координат, переводящим направление оси x_1 в направление полимерного фрагмента p .

Тензор упругих модулей полимера $C^{(f)}$, структура которого задается ориентационным распределением $f(p)$, определяется в модели осреднением по ориентациям

$$C^{(f)} = \int f(p) C^{(p)} dp, \quad (5)$$

что продиктовано допущением об идеальном перемешивании полимерных фрагментов (тем самым, совместности их деформаций), локализованных в рассматриваемой точке пространства.

Обратимые деформации определяются в модели упругим потенциалом $U_e = 1/2 \sum_{ijkl} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}$ в текущей системе координат x . Это с учетом логарифмического определения (4) задает следующую связь между тензорами напряжений и упругих деформаций:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U_e}{\partial \epsilon_{ij}} + U \delta_{ij} = C_{ijkl}^{(f)} \epsilon_{kl} + U \delta_{ij} \quad (6)$$

Очевидно, что в приближении малых деформаций уравнение (6) аппроксимируется известным соотношением линейной теории упругости.

Кинетика накопления остаточных деформаций

Кинетический закон накопления пластических деформаций, соответствующий текущей структуре (текущему ориентационному распределению $f(p)$), как и кинетические уравнения, определяющие эволюцию этой структуры, будет сформулирован в терминах приращений, т.е. изменения градиента пластических деформаций за малый промежуток времени Δt .

Согласно естественной последовательности зависящих от времени кинематических преобразований

исходное (ненапряженное) состояние
при $t = 0, X \rightarrow$

ненапряженное состояние в момент

времени $t, X_p(t) \rightarrow$
ненапряженное состояние в момент

времени $t + \Delta t, X_p(t + \Delta t) \rightarrow$
напряженное текущее состояние в момент

времени $t + \Delta t, x(t + \Delta t)$

и мультипликативному представлению (2), изменение градиента деформаций определяется следующим образом:

$$F(t + \Delta t) = F_e(t + \Delta t) F_p^a(\Delta t) F_p(t) \quad (8)$$

Тензор $F_p^a(\Delta t)$, описывающий накопление необратимых деформаций за время Δt , предполагается симметричным и соосным с градиентом упругих деформаций F_e . Соосность подразумевает одинаковый набор собственных векторов и, следовательно, коммутативность матриц.

Далее, в соответствии с большинством классических теорий пластичности, модель допускает только сдвиговое течение. Иначе говоря, остаточные

(свободные от напряжений) изменения объема в рассматриваемом варианте модели не допускаются

$$\det \mathbf{F}_p \equiv 1 \quad (9)$$

Это ограничение не является принципиальным, и в дальнейшем предполагается развитие теории, учитывающей свойственное пористым полимерным материалам дилатационное течение, характеризуемое необратимыми изменениями объема.

Скорость накопления остаточных деформаций обусловлена напряжениями в материале, однозначно связанными с градиентом упругих деформаций \mathbf{F}_e . Любой симметричный тензор, в том числе и \mathbf{F}_e , может быть разложен на произведение шаровой \mathbf{F}_e^b , и девиаторной \mathbf{F}_e^d составляющих:

$$\mathbf{F}_e = \mathbf{F}_e^b \cdot \mathbf{F}_e^d = \mathbf{U}_e \begin{pmatrix} \lambda^b & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^b & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^d & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^d & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^d \end{pmatrix} \mathbf{U}_e^T \quad (10)$$

$$\det \mathbf{F}_e^d = \prod_i \lambda_i^d = 1$$

Второе из представлений (10) соответствует выбору собственной системы координат, определяемой ортогональной матрицей \mathbf{U}_e . Для определенности $\lambda_1^d \geq 1$ считается наибольшим, а $\lambda_3^d \leq 1$ – наименьшим собственным значением девиаторной части градиента упругих деформаций. Согласно принятым допущениям, градиент приращений пластических деформаций \mathbf{F}_p^a в указанной системе координат также имеет диагональный вид

$$\mathbf{F}_p^a(\Delta t) = \mathbf{U}_e \begin{pmatrix} \lambda_1^a(\Delta t) & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^a(\Delta t) & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^a(\Delta t) \end{pmatrix} \mathbf{U}_e^T \quad (11)$$

В соответствии с кинематическими рамками модели (1)–(4), представляется естественным постулировать мультиплекативный закон “суммирования” вкладов каждого полимерного фрагмента в накопление необратимых деформаций

$$\begin{aligned} \lambda_i^a(\Delta t) &= \exp \{ \oint \ln(\gamma_i(\Delta t, \mathbf{p})) f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \} = \\ &= \prod_k \gamma_i^{f_k}(\Delta t, \mathbf{p}_k) \end{aligned} \quad (12)$$

Второе из равенств (12) подразумевает дискретное распределение полимерных фрагментов по ориентациям. Обозначение f_k используется в этом случае для относительной доли фрагментов, ориентированных в направлении \mathbf{p}_k .

Вклад $\gamma_i(\Delta t, \mathbf{p})$ полимерных фрагментов, ориентированных в направлении \mathbf{p} , в накопление пластических деформаций за малый промежуток времени Δt определяется, согласно модели сдвигового течения, компонентами λ_i^d девиатора градиента упругих деформаций (см. выражение (10)) и задается формулой

$$\gamma_i(\Delta t, \mathbf{p})^{\text{def}} = 1 + k_p q(\mathbf{p}) \ln \lambda_i^d \Delta t \quad (13)$$

Параметр k_p , называемый в дальнейшем константой скорости течения, определяет пластическую податливость полимера.

Введение ориентационного фактора $q(\mathbf{p})$ основывается на переформулировке принятого в теории пластичности кристаллов механизма течения путем накопления необратимых сдвигов вдоль кристаллографических осей. Во избежание громоздких формулировок, ограничимся, без потери общности, определением ориентационного фактора в двумерном случае. Предполагается, что механизмом течения ориентированного полимера является необратимый сдвиг полимерных фрагментов относительно друг друга. Через ψ (рис. 1) обозначим угол между осью деформирования и направлением полимерного фрагмента. Интенсивность сдвига считается пропорциональной интенсивности упругой сдвиговой деформации $\gamma(\psi) = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \sin \psi \cos \psi$ в этом направлении. Приведенная аргументация обосновывает определение ориентационного фактора формулой

$$q(\mathbf{p}) = p_1 p_2 = \sin \psi \cos \psi \quad (14)$$

Из соотношения (14) следует, что полимерные фрагменты, ориентированные вдоль или поперек направления макроскопических главных осей упругой деформации, т.е. фрагменты, для которых $\psi = 0^\circ, 90^\circ$, вносят нулевой вклад в пластическое течение. Максимальная способность к течению реализуется при $\psi = 45^\circ$.

Моделирование эволюции структуры полимера

Соотношения, управляющие изменением структуры однофазного полимерного материала при его деформировании, сводятся к следующему. Рассмотрим единичный вектор \mathbf{p} , описывающий ориентацию выбранного полимерного фрагмента (рис. 1).

Результат его упругого деформирования \mathbf{q} определяется градиентом упругих деформаций \mathbf{F}_e : $\mathbf{q} = \mathbf{F}_e \mathbf{p}$.

Предполагается, что направление \mathbf{p} необратимо изменяется, стремясь приблизиться к выделенному направлению $\bar{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/|\mathbf{q}|$ (прямые скобки используются для обозначения длины вектора), если упругая деформация “растягивает” \mathbf{p} ($|\mathbf{q}| > 1$). В случае “сжатия” ($|\mathbf{q}| < 1$) считается что направления необратимых изменений вектора \mathbf{p} лежат в пределах телесного угла $\Omega_{\bar{\mathbf{q}}}$ вокруг вектора $\bar{\mathbf{q}}$. Величина этого угла предполагается тем большей, чем интенсивнее сжатие: $\omega = \pi/2(1 - |\mathbf{q}|)$. В частности, телесный угол $\Omega_{\bar{\mathbf{q}}}$ охватывает множество всех возможных направлений, если вектор \mathbf{p} сжимается в точку.

Предполагается, что за промежуток времени Δt ориентация \mathbf{p} , соответствующая моменту времени t , приближается к одному из направлений ξ телесного угла $\Omega_{\bar{\mathbf{q}}}$ со скоростью, пропорциональной кинетическому параметру модели k_o , промежутку времени Δt и углу $\alpha_{\mathbf{p}, \xi}$ между векторами \mathbf{p} и ξ

$$\mathbf{p}_{\xi} = \mathbf{p} + k_o \alpha_{\mathbf{p}, \xi} \Delta t \mathbf{p}_{\text{ort}} \quad (15)$$

Через \mathbf{p}_{ort} обозначен вектор, перпендикулярный вектору \mathbf{p} и направленный к вектору ξ (рис. 1).

Введение в модель телесного угла направлений релаксации ориентаций отражает представление о полимерном фрагменте как об одномерном образовании (нити), растягивающемся и сохраняющим фиксированное направление при растяжении и формирующим спектр направлений вследствие сжатия. Рассмотрение только нулевой ширины телесного угла направлений релаксации $\Omega_{\bar{\mathbf{q}}}$ привело бы к сохранению идеальной ориентации полимерных фрагментов при сжатии, что не соответствует реальным закономерностям изменения структуры.

Структурная модель неоднородного полимерного материала

Задачи описания больших деформаций и разрушения неоднородных полимерных материалов решались в двумерной постановке, что обусловлено исключительно возможностями имеющейся в распоряжении авторов вычислительной техники. Постановка и решение трехмерных задач не встречает принципиальных ограничений. Кроме того, по мнению авторов, качественные различия двух- и трехмерных постановок маловероятны.

Как отмечено во введении, задача о взаимодействии механических полей многих включений

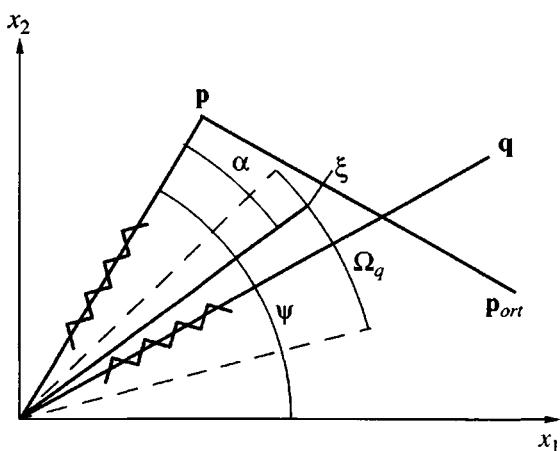


Рис. 1. Схема изменения ориентации полимерного фрагмента ($\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}$) при деформировании. Пояснения в тексте.

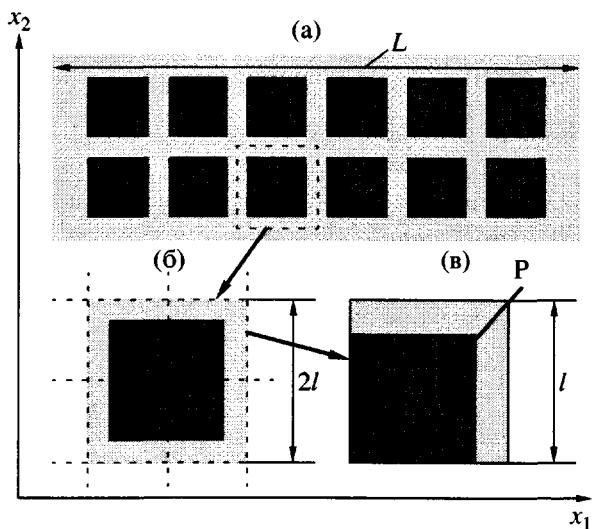


Рис. 2. Структурная модель композита (а), ячейка периодичности (б) и ее четверть (в). Пояснения в тексте.

решается в рамках периодической модели структуры неоднородного материала. Математическая теория осреднения [43–63] позволяет свести ее к краевой задаче на повторяющейся ячейке структуры.

С точки зрения численных алгоритмов удобно считать, что включения имеют квадратную форму, одинаковые размеры и расположены в узлах квадратной решетки периода $2l$ (рис. 2а). Через L обозначен макроскопический размер образца.

Очевидно, что кроме трансляций на величины, кратные периоду решетки, принятая структурная модель характеризуется набором зеркальных симметрий относительно семейства горизонтальных и вертикальных прямых, соединяющих цент-

ры включений и расположенных от них на равном расстоянии (штриховые линии на рис. 2б).

*Постановка краевой задачи
на структурной ячейке
неоднородного материала*

Математическая теория осреднения обосновывает асимптотический анализ в предположении о малости параметра $\gamma = l/L$, которое принимается в рамках настоящей работы. Асимптотический анализ сводит задачу описания механических полей в неоднородном материале периодической структуры к постановке краевой задачи в эффективно однородной среде в пределе $\gamma \rightarrow 0$. Соответствующие эффективные свойства и деформационные параметры определяются из решения так называемой "задачи на ячейке", т.е. краевой задачи для ячейки периодичности (рис. 2б).

В квазистатической постановке, не учитывающей инерционных слагаемых, и в отсутствие объемных сил следует решать уравнения равновесия в текущих координатах x совместно с условиями квазипериодичности, определяемыми градиентом макродеформаций $\hat{F}_{ij}(t)$. Они состоят в представлении текущих координат в виде суммы линейной $\sum_j \hat{F}_{ij}(t)X_j$ и периодической $\tilde{x}(t, X)$ по X функций.

В обзоре приведены и обсуждены результаты моделирования деформации неоднородных полимерных материалов в направлении осей симметрии структуры $\hat{F}_{ij} = \hat{\lambda}_{ij}\delta_{ij}$. Это позволяет, во-первых, сузить область решения задачи с ячейки периодичности (рис. 2б) до ее четверти (рис. 2в) и, во-вторых, заменить условия периодичности более простыми для численного решения стандартными краевыми условиями

$$\begin{aligned} x_i|_{X_i=0} &= 0, \quad x_i|_{X_i=l} = \hat{\lambda}_{ii}l, \\ \frac{\partial x_j}{\partial X_i}|_{X_i=0; l} &= 0, \quad i \neq j \end{aligned} \quad (16)$$

Необходимо отметить, что симметричное решение краевой задачи может быть неустойчивым. При этом возможно существование устойчивого несимметричного, но квазипериодического решения.

*Алгоритм решения краевых задач,
описывающих большие деформации
неоднородных полимерных материалов*

Для численного решения краевой задачи (16) в четверти ячейки периодичности P развит оригинальный алгоритм, основанный на методе конечных элементов. Область P разбивается на $n_1 \times n_2$ прямоугольников таким образом, чтобы границы прямоугольников включали межфазные границы. Каждый прямоугольник разделяется на треугольные конечные элементы диагоналями, соединяющими нижние левые и верхние правые вершины прямоугольников.

Отображения исходных координат в текущие интерполируются внутри каждого треугольника линейными функциями по значениям в узлах сетки (в вершинах конечных элементов). Линейность интерполяции обеспечивает однородность деформирования в пределах конечного элемента, в частности постоянство градиентов упругих и пластических деформаций (F_e и F_p) и ориентационного распределения $f(\mathbf{p})$.

Цель вычислений – нахождение текущих положений x узлов сетки. Наиболее сложным является решение упругой части задачи. На этом этапе градиенты пластической деформации $F_p^{(k)}$ и ориентационные распределения $f^{(k)}(\mathbf{p})$ в каждом k -м конечном элементе, достигнутые к рассматриваемому моменту времени t , считаются известными из результатов реализации предыдущих шагов алгоритма. В исходном состоянии ($t = 0$) предполагается отсутствие пластических деформаций, т.е. выполнение условия $F_p^{(k)} = \mathbf{I}$, где \mathbf{I} – единичный тензор, и изотропия структуры полимера, т.е. справедливость равенства $f^{(k)}(\mathbf{p}) = \text{const}$.

При заданных распределениях градиента пластической деформации и структурной функции определение текущего состояния сводится к решению нелинейно-упругой задачи, для вариационной постановки которой используется приведенное выше выражение для упругого потенциала U_e . Вариационная постановка краевой задачи (16) сводится к минимизации полной упругой энергии

$$\hat{U}_e = \iint_{P(t)} U_e(t, x) dx = \iint_P U_e(t, x(X)) \frac{\partial x}{\partial X} dX \quad (17)$$

Обозначение $P(t)$ используется для текущей конфигурации области P .

Однородность механических полей в пределах конечных элементов приводит к аппроксимации интеграла (17) суммой

$$\hat{U}_e = \tilde{U}_e = \sum_k U_e^{(k)} S^{(k)}, \quad (18)$$

в которой через $U_e^{(k)}$ и $S^{(k)}$ обозначены плотность упругой энергии и площадь k -го конечного элемента при текущей конфигурации узлов соответственно.

Искомые положения узлов находятся из условия равенства нулю производных энергии по всем текущим координатам узлов, за исключением тех, положение которых задается граничными условиями (16). Формируемая при этом система уравнений типична для метода конечных элементов. Однако применение оригинальных определяющих соотношений и существенная нелинейность больших деформаций обусловливают необходимость разработки нового алгоритма и программного обеспечения.

Выражения для производных упругой энергии \tilde{U}_e являются линейными, что значительно облегчает вычислительную процедуру, если \tilde{U}_e зависит от координат квадратично. Соответствующая аппроксимация энергии

$$\begin{aligned} \tilde{U}_e \approx \tilde{\bar{U}}_e = \tilde{U}_e(\bar{x}) + \sum_{(i,j)} \frac{\partial \tilde{U}_e}{\partial x_{ij}}(\bar{x}) D_{ij} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{(i,j)(k,l)} \frac{\partial^2 \tilde{U}_e}{\partial x_{ij} \partial x_{kl}}(\bar{x}) D_{ij} D_{kl} \end{aligned} \quad (19)$$

является одной из ключевых идей предлагаемого алгоритма. Первыми индексами пронумерованы узлы сетки, вторыми – компоненты величин. Чрез $D_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_{ij}$ обозначены приращения текущих положений узлов относительно некоторых выбранных значений \bar{x}_{ij} .

Разложение (19) используется в следующей итерационной процедуре.

1. Для начальной аппроксимации известное в предыдущий момент времени решение $x_{ij}(t - \Delta t)$ аффинно преобразуется в соответствии с макроскопическими степенями вытяжки $\hat{\lambda}_j$: $x_{ij}^{(0)}(t) = x_{ij}(t - \Delta t) \hat{\lambda}_j(t) / \hat{\lambda}_j(t - \Delta t)$.

2. ($s + 1$)-й шаг процедуры использует квадратичную аппроксимацию (19) при конфигурации узлов $\bar{x}_{ij} = x_{ij}^{(s)}$.

В каждом из анализируемых ниже примеров двух – четырех шагов процедуры оказалось достаточно для хорошей аппроксимации решения. Необходимые для выражения (19) производные вычислялись аналитически, что представляет собой наиболее трудоемкую часть алгоритма.

Система линейных уравнений, соответствующая каждому шагу итерационной процедуры, обращалась точно. Такая возможность обусловлена ленточной структурой матрицы, точнее, отличием от нуля элементов, которые расположены внутри окружающей главную диагональ ленты, имеющей ширину порядка линейного размера сетки. Ленточная структура обеспечивается фактом механического взаимодействия только таких узлов, которые одновременно являются вершинами одного конечного элемента. Разработанный алгоритм обращения требует минимального объема вычислений.

Следующими этапами алгоритма являются определение градиента пластической деформации $\mathbf{F}_p^{(k)}(t + \Delta t)$ и ориентационного распределения $f^{(k)}(t + \Delta t)$ для каждого k -го конечного элемента в следующий момент времени при заданных текущих координатах узлов. Эти две стадии чрезвычайно важны для описания деформационных свойств материала, но являются значительно менее трудоемкими с вычислительной точки зрения. Соответствующие кинетические соотношения описаны выше.

ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

*Анализируемые режимы нагружения
и значения упругих, пластических
и структурных параметров модели*

В качестве примеров мы обсудим результаты моделирования одноосного деформирования полимерных материалов. Они представлены в виде рассчитанных (с использованием двух- и трехмерных определяющих соотношений) диаграмм $\sigma - \epsilon$ и данных относительно эволюции структуры различных фаз полимерных материалов. Будут проанализированы предсказываемые моделью следствия изменения скоростей и знаков деформирования, наличия периодов релаксации напряжений, разгрузки материалов и восстановления деформаций.

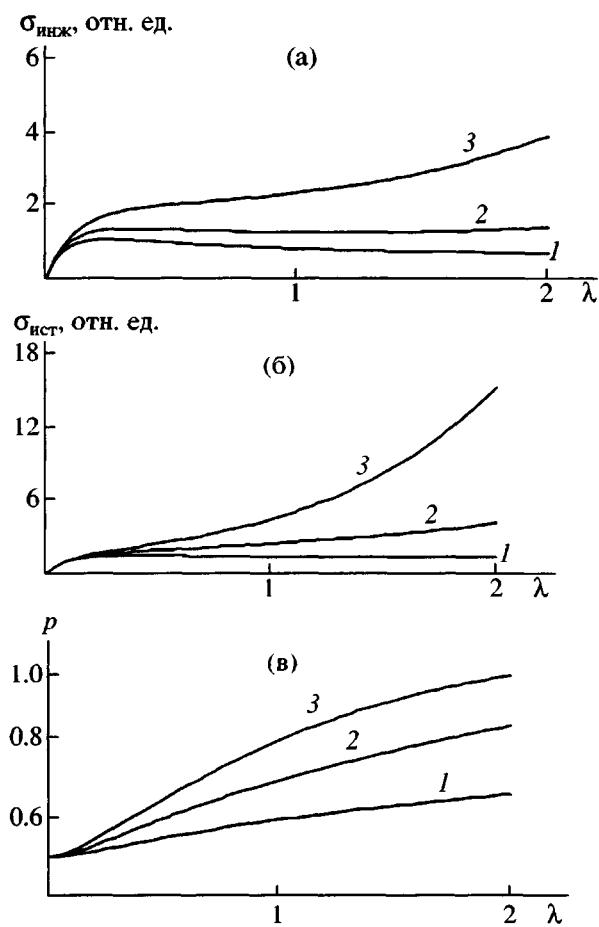


Рис. 3. Инженерные (а) и истинные (б) диаграммы напряжение–деформация, а также структурные диаграммы (в) для одноосного растяжения, рассчитанные с использованием трехмерной monoфрагментной модели. $k_o = 0.5$ (1), 1 (2) и 1.5 (3), $k_p = 2$; $d\lambda/dt = 0.1$. Степень вытяжки $\lambda = \Delta L/L_0$.

Тензор упругих модулей согласованно ориентированных фрагментов структуры задан следующими значениями упругих постоянных: $E_1 = 100$ отн. ед. (аксиальный модуль Юнга); $E_2 = 1$ отн. ед. (трансверсальный модуль Юнга); $G = 0.8$ отн. ед. (продольный модуль сдвига); $v_{12} = 0.3$ (коэффициент Пуассона трансверсального сжатия, обусловленного аксиальным растяжением); $v_{22} = 0.35$ (коэффициент Пуассона трансверсального сжатия, обусловленного трансверсальным растяжением). Обозначение размерности “отн. ед.” означает, что здесь и далее напряжения и модули упругости являются приведенными, т.е. задаются в единицах трансверсального модуля Юнга E_2 .

Кинетические параметры варьировались около значений 0.5 и 1.0 для константы скорости переориентации k_o в двух- и трехмерном случаях соответственно и около значения 2.0 для константы

k_p , определяющей скорости накопления пластических деформаций. Среднее значение скорости деформирования составляло 0.1. Значения кинетических параметров приведены в безразмерных единицах, которые соответствуют условным единицам времени, использованным при моделировании.

Необходимо отметить, что в статье не обсуждаются безусловно очень важные для полимеров температурные эффекты. Работа в этом направлении проводится в настоящее время.

Силы, отнесенные к единице площади в текущем состоянии, называются напряжениями или истинными напряжениями. Термином “инженерное напряжение” обозначена сила, отнесенная к единице площади в исходном состоянии.

Информация относительно структуры полимерных материалов и ее изменения преимущественно представлена значениями средней аксиальной ориентации p полимерных фрагментов относительно оси деформирования: $p = \int \cos(\theta) f(p) dp$ (через θ обозначен острый угол между осью деформирования и направлением ориентации).

Описание деформации однофазного полимера в усложненных условиях вытяжки

На рис. 3–5 представлены результаты варьирования значений кинетических параметров k_o , k_p и скорости растяжения $\dot{\lambda}$, полученные с использованием трехмерных определяющих соотношений.

Инженерные, истинные и структурные диаграммы при различных значениях параметра k_o и фиксированных значениях k_p и $\dot{\lambda}$, а также при различных значениях k_o и фиксированных значениях k_p и $\dot{\lambda}$ представлены на рис. 3 и 4 соответственно.

Как и следовало ожидать, одноосная вытяжка полимера вызывает преимущественную ориентацию полимерных фрагментов в направлении растяжения. Равномерное ориентационное распределение характеризуется в трехмерном случае значением аксиальной ориентации $p = 0.5$ и обеспечивает изотропию свойств полимера. Максимальное значение, равное единице, достигается при идеальной ориентации в направлении вытяжки и соответствует сильно анизотропному материалу. Облегчение переориентации (увеличение параметра k_o) приводит к интенсификации структурных перестроек (рис. 3в). В свою очередь результатом ориентирования оказывается повышение аксиального модуля и напряжений (рис. 3а, 3б).

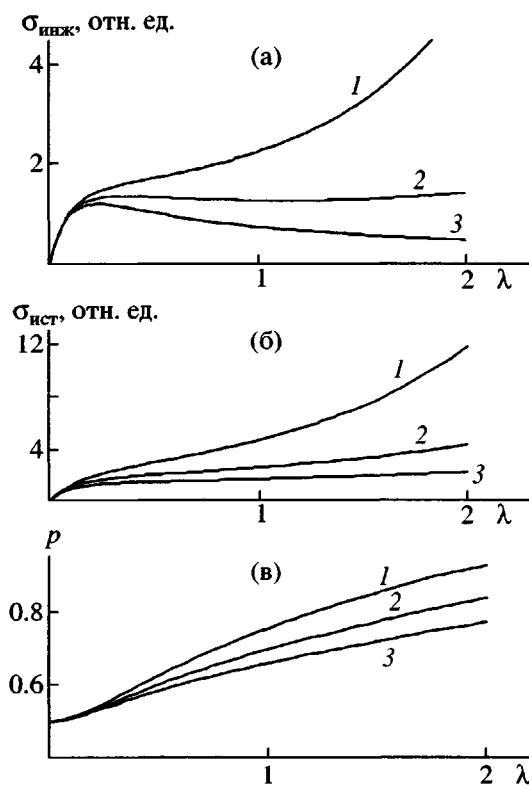


Рис. 4. Инженерные (а) и истинные (б) диаграммы напряжение–деформация, а также структурные диаграммы (в) для одноосного растяжения, рассчитанные с использованием трехмерной монофрагментной модели. $k_p = 1.5$ (1), 2 (2) и 2.5 (3), $k_o = 1$; $d\lambda/dt = 0.1$.

Напротив, облегчение пластического течения (увеличение параметра k_p) обусловливает размягчение материала (рис. 4а, 4б). Следствием уменьшения напряжений и, соответственно, упругих деформаций, управляющих ориентационными процессами, является снижение интенсивности протекания этих процессов (рис. 4в).

Влияние макроскопической скорости растяжения на деформационные диаграммы показано на рис. 5. Изменение скорости вытяжки означает одновременное изменение относительных значений кинетических параметров $k'_o = k_o/\dot{\lambda}$ и $k'_p = k_p/\dot{\lambda}$. Конкуренция между деформационным упрочнением (увеличение k'_o) и деформационным размягчением (увеличение k'_p) приводит к слабому влиянию скорости вытяжки на интенсивность эволюции структуры. По этой причине соответствующие структурные диаграммы не приведены на рис. 5. Повышение скорости растяжения ведет к росту напряжений, в частности напряжения течения, без заметного изменения формы диаграмм. Хоро-

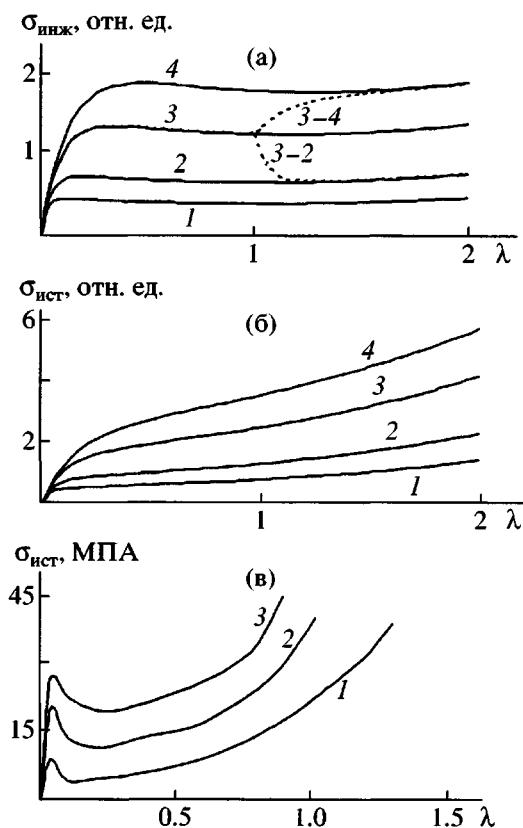


Рис. 5. Инженерные (а) и истинные (б, в) диаграммы одноосного растяжения. а, б – расчет с использованием трехмерной монофрагментной модели при $d\lambda/dt = 0.03$ (1), 0.05 (2), 0.1 (3) и 0.15 (4); в – экспериментальные данные для ПММА [70] при $d\lambda/dt = 0.0001$ (1), 0.01 (2), 1 s^{-1} (3); $T = 99^\circ\text{C}$. Штриховые кривые 3–2 и 3–4 отражают результаты моделирования скачкообразного изменения скоростей с 0.1 на 0.05 (1–2) и с 0.1 на 0.15 (3–4) при степени вытяжки $\lambda = 1$. $k_o = 1$, $k_p = 2$.

шо известно [69], что отмеченное влияние отражает свойства реальных полимеров. Указанное соответствие подтверждают и диаграммы вытяжки ПММА, измеренные в работе [70] при температуре 90°C и скоростях вытяжки 0.0001, 0.01 и 1 s^{-1} (рис. 5в). Тем не менее, интересно отметить два качественных различия между предсказываемыми моделью (рис. 5б) и измеренными (рис. 5в) диаграммами истинных напряжений.

Первое состоит в монотонности расчетных и экстремальном характере экспериментальных диаграмм. Эта свойство регулируется соотношением между скоростями структурной эволюции и пластического течения. Конкуренция между упрочнением и размягчением обуславливает монотонную (большое значение k_o , малое значение k_p) либо экстремальную (большое значение k_p , малое значение k_o) зависимость напряжений от дефор-

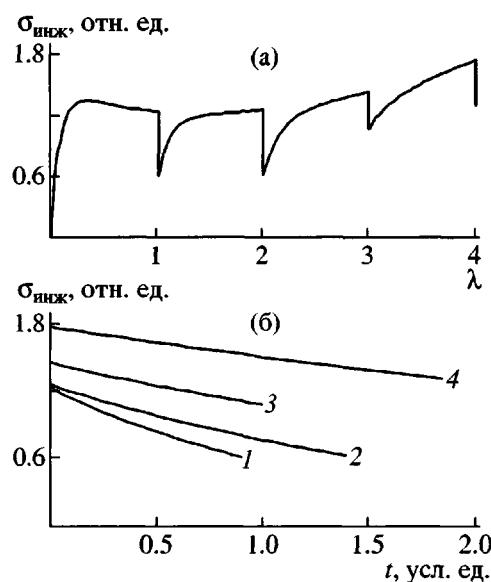


Рис. 6. Инженерная диаграмма одноосного растяжения с периодами релаксации напряжений (а) и кинетика релаксации напряжений (б) при степени вытяжки $\lambda = 1$ (1), 2 (2), 3 (3) и 4 (4), рассчитанные с использованием трехмерной монофрагментной модели. $d\lambda/dt = 0.1$; $k_o = 1$, $k_p = 2$.

маций. Поскольку площадь поперечного сечения образца уменьшается в процессе вытяжки, явление деформационного размягчения более выражено для инженерных диаграмм. Тем не менее, предложенные определяющие соотношения допускают так называемое физическое размягчение и в терминах истинных напряжений (например, кривая 1 на рис. 3б). Так что обсуждаемое различие в характере рассчитанных (рис. 5б) и измеренных (рис. 5в) диаграмм может быть устранено надлежащим выбором параметров модели k_o и k_p .

Второе несоответствие состоит в диапазоне скоростей деформаций, достаточном для заметного изменения диаграмм. Увеличение в несколько раз рассчитываемых напряжений вытяжки достигается таким же по порядку повышением ее скорости (рис. 5б). Достичь такого же по масштабу эффекта при вытяжке ПММА можно лишь при росте скорости на несколько порядков. Причина повышенной по сравнению с экспериментом чувствительности модели к скоростям деформирования заключается в следующем. Скорость пластического течения определяется уравнением (13), постулирующим ее пропорциональность упругим деформациям (4). Использование простейшего вида функциональной зависимости представляется нам оправданным на первом этапе моделирования, целью которого является анализ

принципиальных возможностей модели в плане описания особенностей деформационно-прочностного поведения полимерных материалов.

Итак, модель хорошо описывает все основные черты макроскопического отклика полимерных материалов с учетом эволюции структуры. Дальнейшее развитие модели предполагает использование более сложных, но при этом физически обоснованных соотношений. В частности, планируется задание скорости пластического течения и эволюции структуры полимера, основываясь на термофлуктуационном механизме необратимых перестроек, т.е. в виде $\dot{\lambda} = \dot{\lambda}_0 \exp(-(U - \gamma\sigma)/kT)$. Это позволит правильно оценить диапазон заметного влияния скоростей деформаций.

Некоторые результаты моделирования при усложненных условиях вытяжки продемонстрированы на рис. 5а (кривые 3–2, 3–4), 6 и 7. Тип вводимых усложнений продиктован работой [71], авторы которой детально исследовали особенности деформирования полимеров. Специальным образом приготовленные образцы ПЭВП, ПЭНП, ПВХ, Найлона-6, Найлона-66, Тефлона испытывали в усложненных режимах одноосного растяжения в диапазоне скоростей 10^{-4} – 10^{-1} с⁻¹ при комнатной температуре [71]. Форма образцов исключала возможность формирования шейки. Скорость раздвижения зажимов контролировали таким образом, чтобы обеспечить постоянство относительной скорости деформации.

При расчете диаграммы также предполагалась однородность деформирования (без шейки), однако, в отличие от работы [71], приведенные значения скоростей деформаций соответствуют не текущей, а начальной длине образца. Безусловно, моделирование могло быть проведено и в скоростных условиях указанной работы. Однако такое изменение методики расчетов представлялось нежелательным, поскольку все остальные диаграммы рассчитывали при фиксированной скорости движения зажимов. Кроме того, целью обзора является демонстрация возможностей модели, а не количественное описание экспериментальных результатов.

Первое усложнение условий вытяжки состоит в скачкообразном изменении ее скорости (рис. 5а). На рис. 6 приведены результаты расчета диаграмм при включении в процесс вытяжки периодов релаксации напряжений при фиксированных удлинениях в течение определенных временных промежутков, сменяющейся последующей вытяжкой с первоначальной скоростью. Третья серия модельных испытаний состояла в чередовании активного нагружения с участками мгновен-

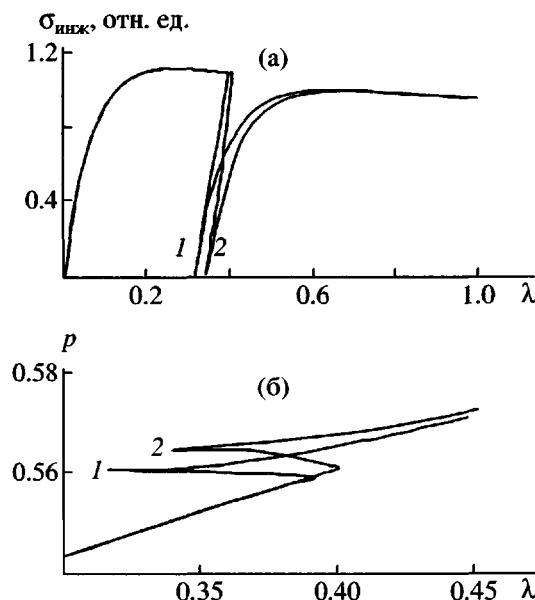


Рис. 7. Инженерные (а) и структурные (б) диаграммы одноосного растяжения полимера с участками мгновенного разгрузения (1) и разгрузки с конечной скоростью -0.1 (2) при $\lambda = 0.4$, рассчитанные с использованием трехмерной монофрагментной модели. $d\lambda/dt = 0.1$; $k_o = 1$, $k_p = 2$.

ной (рис. 7, кривая 1) и плавной (рис. 7, кривая 2) разгрузки.

Результаты моделирования качественно идентичны результатам аналогичных материальных испытаний [71] и характеризуются рядом закономерностей, из которых наиболее важными представляются следующие. Данной скорости вытяжки соответствует определенная базовая диаграмма. Смена скорости деформирования либо возвращение ее к предыдущему значению приводят к приближению к соответствующей базовой диаграмме. Значение восстановливающейся после разгрузки деформации увеличивается с ростом скорости разгрузки. Важно отметить, что ориентационные процессы продолжаются и в течение периода разгрузки. Тем самым уменьшение скорости разгрузки приводит к более эффективной структуризации материала (рис. 7б).

На рис. 8 представлены инженерные, истинные и структурные диаграммы сжатия. В противоположность одноосной вытяжке деформационное размягчение преимущественно наблюдается на истинных, а не на инженерных диаграммах, что соответствует эксперименту [72]. Очевидно, отмеченное различие объясняется ростом площади поперечного сечения при сжатии. Облегчение структурных перестроек (увеличение k_o) приводит к падению напряжений по мере увеличения

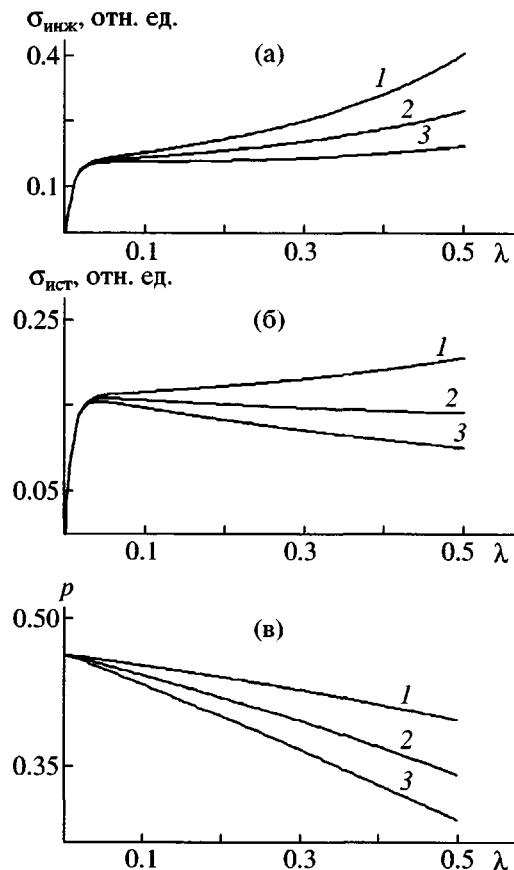


Рис. 8. Инженерные (а), истинные (б) и структурные (в) диаграммы одноосного сжатия, рассчитанные с использованием трехмерной монофрагментной модели. $k_o = 0.5$ (1), 1 (2) и 1.5 (3); $k_p = 2$; $d\lambda/dt = 0.1$.

степени сжатия по причине ориентации полимерных фрагментов в перпендикулярном направлении и обусловленного такой ориентацией уменьшения осевого модуля. Данные относительно варьирования других кинетических параметров (k_p и $\dot{\lambda}$) в статье не приводятся с целью экономии объема. Одновременное уменьшение релаксационных констант или повышение скорости сжатия практически не изменяет формы диаграмм, но приводит к увеличению напряжений.

Бифрагментная модель деформирования аморфно-кристаллического полимера

Как отмечалось в разделе “Формулировки и допущения модели”, мультифрагментный вариант соотношений, определяющих деформирование полимера, основан на рассмотрении не одного, а нескольких видов полимерных фрагментов различной физической природы и на описании структуры полимера соответствующими ориентацион-

ными распределениями. Типичным объектом, для которого такое описание может оказаться адекватным, является аморфно-кристаллический полимер, характеризующийся существованием как минимум двух компонент – аморфной и кристаллической. Попытка бифрагментного описания аморфно-кристаллического полимера и составляет содержание настоящего раздела.

Реальная структура таких материалов чрезвычайно сложна. Обсуждавшаяся до сих пор монофрагментная модель больших деформаций однородной полимерной фазы может оказаться перспективной в комплексе с представлениями о структуре аморфно-кристаллического полимера как о много (двух) фазной среде. Такое описание проводится в настоящее время. Однако в рамках настоящего обзора будут обсуждены результаты моделирования деформационных свойств аморфно-кристаллического полимера, полученные с использованием однофазной, но бифрагментной модели. Ее суть состоит в приближении идеального смещения аморфной и кристаллической фаз на континуальном уровне описания. При этом полимерные фрагменты аморфной и кристаллической компонент определяются рассмотрением двух структурных функций – двух распределений по ориентациям. Такое описание является с нашей точки зрения не только полезным собственно для аморфно-кристаллических полимеров, но и пожалуй, единственным возможным сегодня для моделирования больших деформаций композитов с частично кристаллической матрицей.

Итак, в соответствии с однофазным приближением предполагается, что фрагменты, характеризующие аморфную и кристаллическую компоненты, равномерно перемешаны в пространстве. По этой причине локально совпадают их градиенты деформаций, для которых будет использовано единое обозначение, $F = dx/dX$. Указанное допущение не распространяется на градиенты упругих и пластических деформаций в отдельности. В частности, аморфная фаза описывается в модели упругими определяющими соотношениями, что является также допущением модели больших деформаций аморфно-кристаллического полимера, предложенной в работе [29]. Безусловно, пренебрежение пластическими деформациями аморфной фазы является приближением, не всегда хорошо описывающим свойства реальных материалов. Однако это ограничение не является принципиальным, и пластические деформации аморфной фазы могут быть учтены.

В силу принятого допущения градиентом пластической деформации аморфной компоненты $F_p^{(a)}$ в разложении (3) может быть только не определяющая деформаций ортогональная матрица $V^{(a)}$.

Локальная однородность текущей конфигурации x относительно различным образом ориентированных фрагментов, представляющих как аморфную, так и кристаллическую фазы, обосновывает возможность аддитивного вычисления напряжений в текущих координатах. Тензор упругих модулей кристаллической компоненты $C^{(c)}$ (здесь и далее индексы “*c*” или “*a*” указывают на отношение величины к кристаллической либо аморфной фазе) сильно зависит от ориентационного распределения фрагментов в кристалле и описывается соотношением (5). Тензор упругих модулей аморфной фазы остается неизменным в ходе деформирования в силу пренебрежения пластическими деформациями, а его компоненты $C_{ijkl}^{(a)}$ предполагаются в k раз меньшими, чем компоненты $C_{ijkl}^{(c,iso)}$ упругого тензора кристаллической фазы в изотропном состоянии. Все вычисления, результаты которых обсуждаются в настоящей работе, проведены при двух соотношениях жесткостей: $k = 0.1$ и 0.02 . Соответствующие материалы будут классифицироваться как аморфно-кристаллические полимеры жесткого и мягкого типа. Тип полимера определяется прежде всего его природой, однако зависит также и от условий испытаний. В частности, если механические свойства аморфной фазы описываются теорией высокоэластичности (естественно, такое описание не всегда правомерно), то тип полимера может меняться с мягкого на жесткий при повышении температуры. Значения упругих и кинетических параметров кристаллической компоненты не варьировались и были выбраны такими как определено в разделе “Аналитические режимы нагружения и значения упругих, пластических и структурных параметров модели”. Скорость вытяжки составляла 0.1. Степень кристалличности также не варьировалась и составляла 50%.

Способность аморфно-кристаллических полимеров к восстановлению деформаций после снятия нагрузки не может быть объяснена обсуждавшейся выше монофрагментной моделью. Для демонстрации возможности объяснения явления бифрагментной моделью будет проанализирован режим одноосного растяжения в направлении оси x_1 с периодами разгрузки, пребывания системы в макроскопически ненапряженном состоянии и повторного активного нагружения. Полное (до нулевых макроскопических напряжений $\sigma = 0$) разгружение

начинается с определенной степени вытяжки $\bar{\lambda}$. После разгрузения аморфная фаза остается растянутой ($\sigma_{11}^{(a)} > 0$), а кристаллическая – сжатой ($\sigma_{11}^{(c)} < 0$), что и является источником восстановления деформаций в модели.

Инженерные и структурные (аксиальные ориентации кристаллической фазы) диаграммы вытяжки, вычисленные для аморфно-кристаллического полимера жесткого и мягкого типа, представлены на рис. 9. Согласно данным рис. 9а, бифрагментная модель описывает явление восстановления деформаций. Эффективность восстановления оказывается тем большей, чем жестче аморфная фаза (например, чем выше температура, если аморфная компонента находится в высокоэластическом состоянии).

Данные об изменении структуры кристаллической компоненты приведены на рис. 9б. Средняя ориентация увеличивается не только в условиях активного нагружения, но и продолжает возрастать на протяжении почти всего периода разгрузки. После изменения знака напряжения в кристаллической фазе, происходящего близко к завершению периода разгрузки, средняя ориентация начинает снижаться и уменьшается на протяжении периода восстановления деформаций, для этого 40 временных единиц. Исходное значение средней ориентации (0.5) почти восстанавливается, но все-таки не полностью. Это является причиной более резкого роста напряжений при повторном нагружении (рис. 9а) и, в частности, более высокого значения модуля. Анализ ориентационного распределения после разгрузки и восстановления деформаций показал, что при почти полном восстановлении средней ориентации “вымываются” направления, промежуточные между аксиальным и трансверсальным. Такое изменение формы распределения служит причиной заметного снижения скорости ориентации при повторном нагружении (рис. 9б). В свою очередь снижение скорости ориентации объясняет уменьшение напряжений при больших степенях повторной вытяжки по сравнению с первичной (рис. 9а).

Влияние предварительного нагружения на механическое поведение полимерных материалов является предметом многочисленных обсуждений в научной литературе. Наибольший интерес вызывают начальные участки диаграмм, в частности, модули упругости, предел текучести, форма диаграммы. Соответствующие предсказания модели можно суммировать следующим образом.

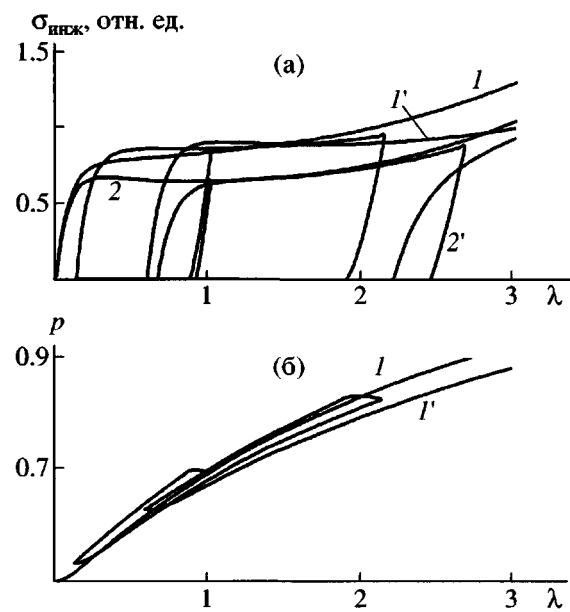


Рис. 9. Инженерные (а) и структурные (б) диаграммы растяжения частично кристаллического полимера, рассчитанные с использованием трехмерной бифрагментной модели, для жесткого (1, 1') и мягкого (2, 2') типов полимеров. Базовые диаграммы 1, 2 соответствуют активному нагружению. Диаграммы 1', 2' отвечают растяжению, включающему периоды разгрузки со скоростями, равными скоростям нагружения, при $\lambda = 1$ и 2 с периодами восстановления деформаций в течение 40 временных единиц.

Предварительное нагружение обуславливает появление определенной доли анизотропии, которая не может полностью исчезнуть. Предложенная модель отражает это явление (рис. 9б). Соответствующий модуль упругости после предварительного нагружения должен превосходить исходное значение. В отдельных публикациях приведены данные о некотором уменьшении модуля. Это уменьшение, по-видимому, возникает из-за отсутствия перенормировки оси удлинений. В результате не учитывается увеличение размера образца по сравнению с исходным за счет накопления необратимых деформаций. Так, диаграммы рис. 9а построены в едином (исходном) масштабе удлинений, и наклоны начальных участков первичного нагружения превышают наклоны начальных участков вторичного нагружения. Нормализация масштаба удлинений (рис. 10) приводит к обращению неравенства между наклонами.

Вторым следствием необратимого повышения длины образца является уменьшение относительной скорости растяжения при сохранении абсо-

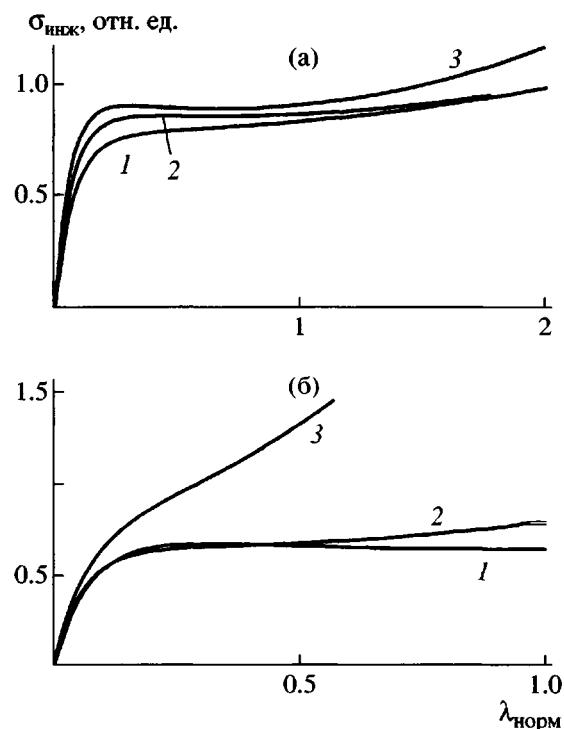


Рис. 10. Начальные участки диаграмм первичного (1) и повторного (2, 3) растяжения жесткого (а) и мягкого (б) типов аморфно-кристаллического полимера. Повторные нагружения осуществлялись после разгрузки при $\lambda = 1$ (2), затем при $\lambda = 2$ (а) и 2.7 (б) (3) с последующими периодами восстановления деформаций. $\lambda_{\text{норм}}$ – степень вытяжки, нормированная на длину образца в разгруженном состоянии.

лютной скорости раздвижения зажимов, что ведет, как уже отмечалось при обсуждении монофрагментной модели, к уменьшению жесткости.

Экспериментальные данные преимущественно указывают на снижение предела текучести в результате предварительного нагружения. Предсказания бифрагментной модели не столь однозначны. Так, предварительное нагружение до $\lambda = 1$ (рис. 10а, кривая 2) и до $\lambda = 2$ (рис. 10а, кривая 3) аморфно-кристаллического полимера жесткого типа обусловливает увеличение предела текучести. Качественно таким же является следствие предварительного нагружения полимера мягкого типа до высокой степени вытяжки $\lambda = 2.7$ (рис. 10б, кривая 3). Однако меньшее предварительное растяжение (до $\lambda = 1$) уменьшает предел текучести (рис. 10б, кривая 2).

Перечисленные следствия модели объясняются прежде всего тем, что предварительное нагружение приводит к невосстанавливаемым структурным изменениям. В частности, происходит не полностью восстанавливаемая ориентация поли-

мерных фрагментов в направлении растяжения. В результате повторное нагружение переводит материал в состояние, близкое к состоянию в момент разгружения, минуя начальный участок. Если базовая диаграмма активного нагружения монотонна (полимер жесткого типа, рис. 9а, 10а, кривые 1), то в результате предварительного нагружения предел текучести увеличивается (рис. 10а). Если базовая диаграмма характеризуется пиком текучести (полимер мягкого типа, рис. 9а, кривая 2; рис. 10б, кривая 1), то предварительное нагружение вызывает уменьшение предела текучести при условии, что напряжение разгрузки ниже базового значения предела текучести (рис. 10а, кривые 2, 2'; рис. 10б, кривая 2). Напротив, предел текучести увеличивается, если разгружение происходит на участке деформационного упрочнения при напряжении, превышающем высоту пика текучести (рис. 9а, кривые 2, 2'; рис. 10б, кривая 3).

Изменение формы диаграммы также обусловлено необратимыми структурными перестройками, осуществленными в полимере на протяжении первичного нагружения. Монотонным возвращением к состоянию, достигнутому к моменту разгрузки, объясняется исчезновение пика текучести, предсказываемого моделью для аморфно-кристаллического полимера мягкого типа (рис. 9а, кривые 2, 2'; рис. 10б). Эта закономерность свойственна ряду полимеров. Однако для полимера жесткого типа характерен противоположный эффект (рис. 9а, кривые 1, 1'; рис. 10а): начальные участки диаграмм становятся более резкими, и появляется пик текучести. Подобный эффект наблюдался экспериментально авторами работы [71]. По-видимому, он объясняется более интенсивным (по сравнению с полимером мягкого типа) восстановлением деформаций. В результате существенно изменяется форма ориентационного распределения, что в свою очередь вызывает задержку в эффективной повторной ориентации и, следовательно, наличие деформационного размягчения полимера.

Похожие закономерности восстановления деформаций предсказываются моделью в режиме одноосного сжатия (рис. 11). Различие состоит в уже обсуждавшемся отсутствии пика текучести на инженерных диаграммах сжатия. Кроме того, эффективность восстановления размеров образцов существенно выше в случае сжатия. Так, 40 временных единиц оказывается достаточно для почти полного восстановления образцов частично кристаллического полимера жесткого типа.

Неустойчивость больших деформаций однородного полимера как критерий разрушения полимерных материалов

Локальное достижение условий потери устойчивости при неоднородном деформировании полимерного материала принято в качестве критерия его разрушения.

Неустойчивость однородного деформирования материалов на развитых стадиях процессов, в частности пластического течения, хорошо известна. Формирование полос сдвига, крейзов, образование макроскопической шейки при одноосном растяжении являются примерами проявления указанной неустойчивости. Обобщенный критерий потери стабильности однородной деформации состоит в резком уменьшении наклона деформационных диаграмм.

В обзоре обсуждаются результаты моделирования деформационно-прочностных свойств в режиме вытяжки. Формирование и развитие шейки является классической модой потери устойчивости в этих условиях. Однако моделирование макроскопических неоднородностей не входит в число задач настоящего обзора: цель анализируемого этапа работы состоит в описании макроскопически однородных деформаций микронеоднородных полимерных материалов. Макроскопическая однородность гарантируется периодическими граничными условиями, тем не менее условия периодичности не исключают проявления неустойчивости в мезомасштабе повторяющейся ячейки структуры.

Анализ всех результатов вычислений, проведенных с использованием развитой модели, показывает, что необходимость численных схем обусловлена локальным достижением условий нестабильности однородных деформаций. Флуктуации, неизбежно формируемые за счет накопления ошибок вычислений, затухают в условиях устойчивости моделируемого напряженно-деформированного состояния и развиваются в неустойчивом случае.

Специально с целью анализа условий неустойчивости численный алгоритм, развитый для описания деформирования неоднородного материала, был использован для моделирования одноосной вытяжки однофазного полимера. Для этого при сохранении описанных в разделе "Структурная модель неоднородного полимерного материала" структурных допущений (рис. 2) были выбраны одинаковые механические параметры материалов матрицы и включения. Оказалось, что потеря устойчивости однородной вытяжки однофазного полимера сильно зависит от выбора значений кинетических параметров модели. Так, при $k_o = 0.7$, $k_p = 1$ (облегченная ориентация, затрудненное пластическое течение) потеря устойчиво-

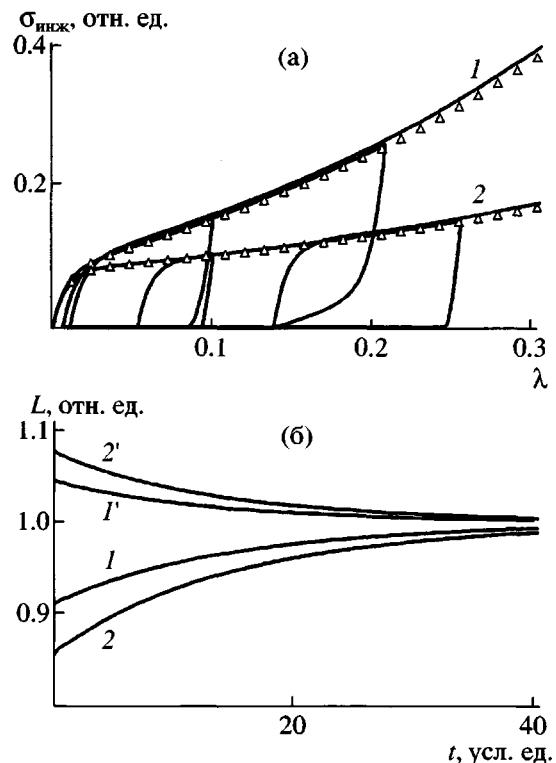


Рис. 11. Диаграммы одноосного сжатия (а) и кинетика восстановления аксиального (1 , 2) и трансверсального (Γ , $2'$) размеров образца L (б) для аморфно-кристаллического полимера жесткого (1 , Γ) и мягкого (2 , $2'$) типов. Степень кристалличности 50%. Базовые диаграммы изображены треугольными символами. Скорость нагружения и разгружения 0.01. Кинетика восстановления соответствует степени сжатия при разгрузении 0.1 (1 , $1'$) и 0.2 (2 , $2'$).

сти наступает при достижении степени вытяжки $\hat{\lambda} = 0.9$. При $k_o = 0.5$, $k_p = 2$ (облегченное пластическое течение, затрудненная ориентация) заметные отклонения от однородного напряженно-деформированного состояния наблюдаются при $\hat{\lambda} = 1.95$, однако они остаются стабильными вплоть до $\hat{\lambda} = 4-5$. Отмеченное влияние скоростей течения и реорганизации структуры полимера на продолжительность сохранения условий стабильности объясняется тем, что затруднение пластического течения приводит к увеличению доли упругих деформаций при сохранении суммарной степени вытяжки, а облегчение ориентации полимерных фрагментов обуславливает повышение анизотропии.

Для демонстрации механизма сформулированной причинной связи на рис. 12 приведены инженерные диаграммы одноосного растяжения упругого ортотропного материала при различной сте-

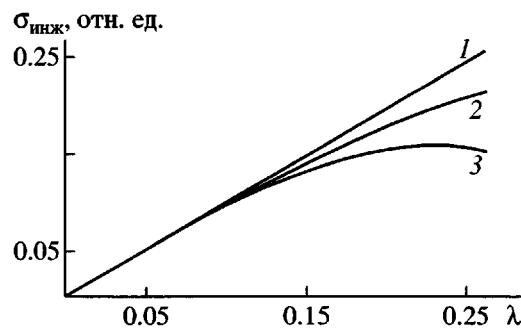


Рис. 12. Инженерные диаграммы одноосного растяжения ортотропного упругого материала при значениях коэффициента анизотропии $\alpha = 1$ (1), 6 (2) и 12 (3).

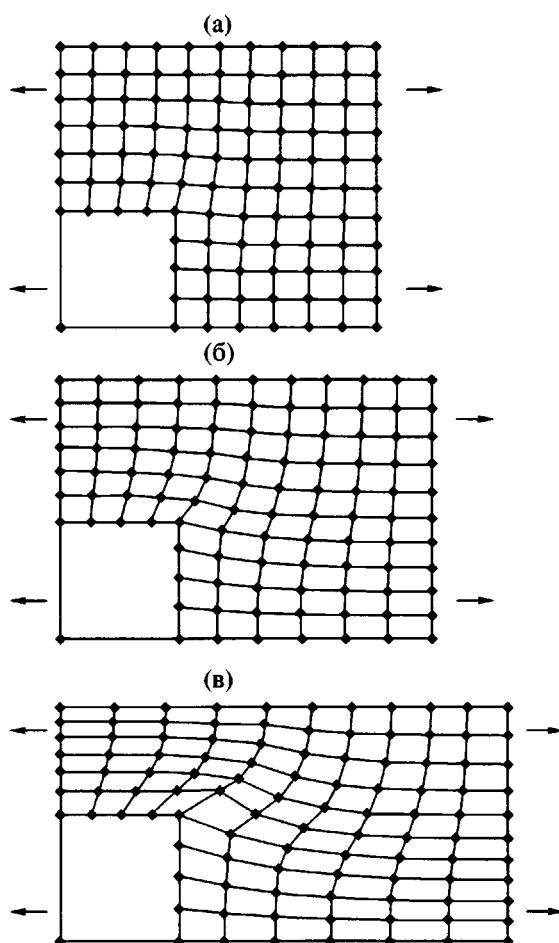


Рис. 13. Конфигурации узлов полимерной матрицы в четверти ячейки периодичности для композита, наполненного 16 об.% жестких включений, при степенях вытяжки 0.1 (а), 0.25 (б) и 0.5 (в).

пени анизотропии α . Связь между деформациями и напряжениями определяется соотношениями (6). Для удобства сравнения диаграмм значение аксиального модуля Юнга E_1 принято равным едини-

це. Значение коэффициента Пуассона v также не варьировалось, $v = 0.3$. Степень анизотропии определяется отношением продольного E_1 и поперечного E_2 модулей Юнга: $\alpha = E_1/E_2$.

Начальные участки диаграмм совпадают, и их наклоны соответствуют единичному значению модуля Юнга. Однако, чем более выражена анизотропия, тем заметнее становится уменьшение наклона. При $\epsilon \sim 30\%$ инженерная диаграмма сильно анизотропного материала ($\alpha = 12$) достигает максимума, что приводит к потере устойчивости однородной моды деформирования (рис. 12, кривая 3).

Как отмечалось выше, расхождение численной схемы, являющееся следствием локальной потери устойчивости, принято на данном этапе моделирования в качестве критерия разрушения неоднородного полимерного материала. Безусловно, проблема описания процессов разрушения в композиционных материалах нуждается в дальнейшей разработке. Тем не менее закономерности вязкого разрушения, предсказываемые моделью на основе принятого упрощенного критерия, являются информативными, правильно отражают и объясняют свойства реальных материалов, что будет продемонстрировано в следующем разделе.

Закономерности деформирования и разрушения композитов с полимерной матрицей и пористых полимеров

В данном разделе анализируются результаты моделирования влияния жестких включений и пор на микроскопические, деформационные и прочностные свойства композитов. С целью такого моделирования в рамках принятых допущений о периодическом расположении включений решены двумерные краевые задачи, соответствующие макроскопически однородной вытяжке с фиксированной относительной скоростью $\dot{\epsilon} = 0.1$. Значения кинетических параметров монофрагментной модели, определяющей деформирование однородной полимерной фазы, не варьировались и составляли $k_p = 2$, $k_o = 0.5$. Предметом обсуждения являются микромеханические аспекты деформирования, макроскопические зависимости напряжений и структуры от степени вытяжки, а также концентрационные зависимости удлинений при разрыве.

Текущие положения узлов полимерной матрицы в четверти ячейки периодичности (рис. 2в), соответствующие различным степеням вытяжки, показаны на рис. 13 и 14 для случаев жестких включений и пор соответственно. Сравнитель-

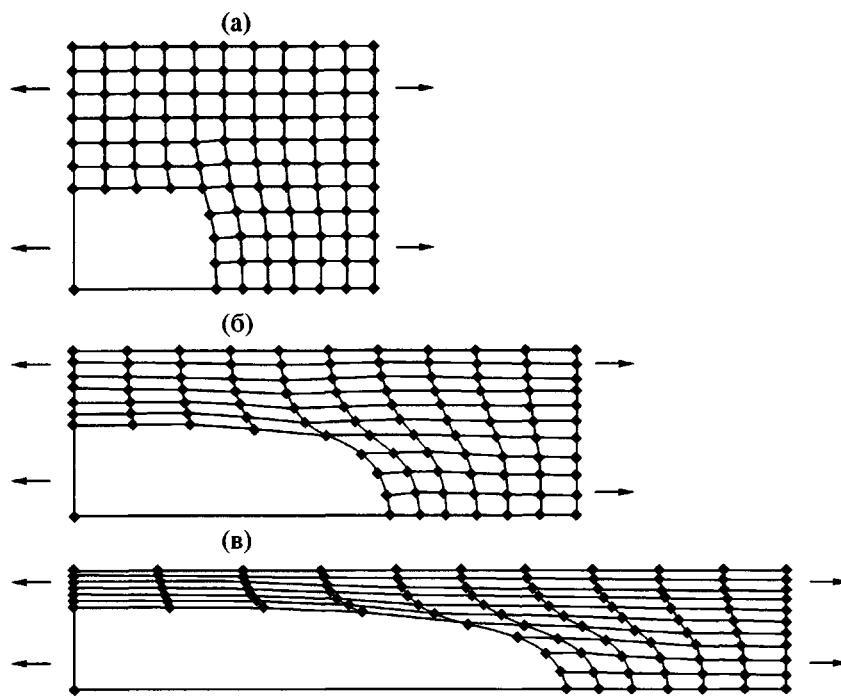


Рис. 14. Конфигурации узлов полимерной матрицы в четверти ячейки периодичности для материала, содержащего 16 об.% пор, при степенях вытяжки 0.2 (а), 1 (б) и 2 (в).

ный анализ микродеформационных процессов выявляет две особенности. Первая состоит в том, что в случае жестких включений преимущественному деформированию подвергается материал матрицы в окрестностях "полярных" по отношению к направлению вытяжки точек включений. Увеличение степени наполнения или, эквивалентно, уменьшение толщины матричных прослоек, приводит к увеличению степени их вытяжки. Напротив, в случае пористого материала преимущественно деформируются области, соседние с "экваториальными" точками включений. Очевидно, увеличение пористости также эквивалентно уменьшению толщины соответствующих областей. Однако это уменьшение не вызывает резкой локализации деформаций, поскольку вытяжка осуществляется в направлении протяженного размера.

Вторая отличительная особенность состоит в том, что в случае жестких включений значительным сдвиговым деформациям подвергаются окрестности угловых точек межфазной границы (рис. 13). В областях, прилегающих к свободной поверхности пор, наблюдается облегчение пластического течения, в результате которого при высоких степенях вытяжки сглаживаются углы межфазной границы (рис. 14). По этой причине нерегулярность формы межфазной границы, точнее наличие на ней угловых точек, оказывает существенно менее критичным в смысле кон-

центрации напряжений и разрушения в случае мягких включений и пор по сравнению с жестким наполнителем, если материал матрицы способен к пластическому течению.

Общим следствием отмеченных микродеформационных особенностей должно являться более резкое уменьшение предельных удлинений высокопластичного полимера при введении в него жестких включений по сравнению с мягкими включениями и порами. Это предсказание находится в полном согласии с закономерностями разрушения композиционных материалов и подтверждается макроскопическим анализом в пределах предлагаемой модели.

На рис. 15 представлены истинные и инженерные диаграммы растяжения, вычисленные с использованием модели для дисперсно наполненных и пористых полимеров. Видно, что напряжения растут с повышением содержания жестких включений и уменьшаются с увеличением пористости. Концентрационные зависимости модуля Юнга (рис. 16) и предела текучести (рис. 17) согласуются со сформулированной тенденцией. Остается дискуссионным вопрос о возрастающей концентрационной зависимости предела текучести композита с жесткими включениями при идеальной адгезионной связанности. Все экспериментальные данные указывают на увеличение предела текучести с повышением адгезионной

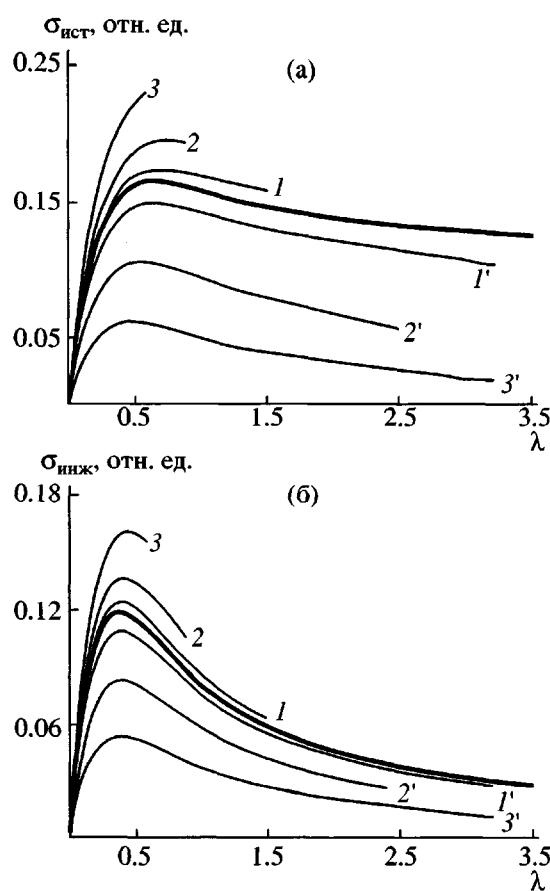


Рис. 15. Истинные (а) и инженерные (б) диаграммы растяжения, вычисленные для исходного полимера (выделенная линия) и полимера, содержащего 1 (1), 4 (2), 9 об.% (3) жестких включений и 4 (1'), 16 (2'), 36 об.% пор (3').

прочности. Однако большинство из них не подтверждает рост обсуждаемой характеристики со степенью наполнения. Измеренные концентрационные зависимости характеризуются менее резким убыванием или почти постоянством. С нашей точки зрения отмеченное расхождение свя-

зано с проблематичностью обеспечения идеальной адгезионной связаннысти, т.е. все-таки с наличием кавитации, хотя и менее интенсивной.

Предложенные определяющие соотношения не допускают необратимых локальных изменений объема. Очевидно, что объем жестких включений также сохраняется в процессе деформирования в отличие от объема пор. Тем самым отношение объема дисперсно наполненного композита к объему ненаполненного полимера должно оставаться практически не зависящим от степени вытяжки. Напротив, чем выше пористость и степень вытяжки, тем большим должно быть относительное увеличение объема, что демонстрируют данные рис. 18.

Включения любой природы обусловливают неоднородность деформирования, т.е. наличие в полимерной матрице как нагруженных, так и разгруженных областей. Большие степени вытяжки в окрестности полюсов жестких включений вызывают локальное повышение ориентации полимерных фрагментов. Экваториальные области оказываются слабо деформированными. Соответственно, интенсивность протекающих в них ориентационных процессов мала. Жесткие включения не деформируются. По этой причине осреднение деформаций по композиту эквивалентно их осреднению по матрице. В результате средние ориентации полимера в композите должны слабо отличаться от аксиальной ориентации чистого полимера при одинаковых степенях вытяжки, что подтверждается анализом рассчитанных распределений.

Перераспределение деформаций имеет место и в случае мягких включений либо пор. Однако мягкие включения сами испытывают значительные деформации. Тем самым средние по полимерной матрице деформации меньше деформаций, средних по композиту. По той же причине, введение в полимер мягких включений либо пор

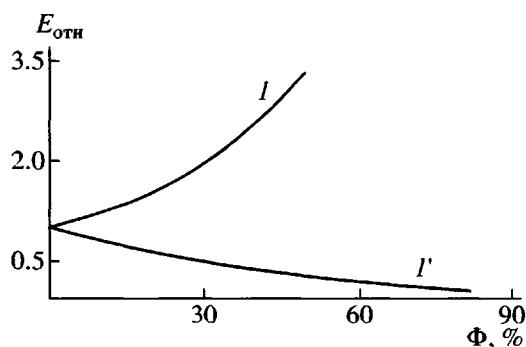


Рис. 16. Зависимости относительного модуля Юнга композитов $E_{\text{отн}}$ от объемной степени наполнения Φ в случае жестких частиц (1) и пор (1').

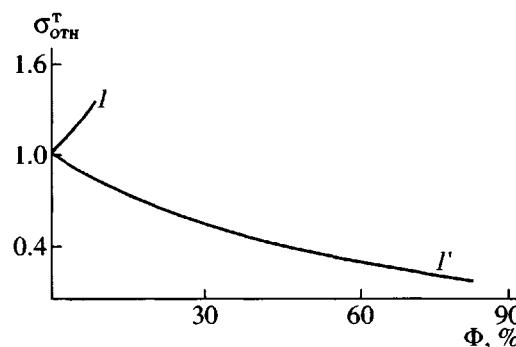


Рис. 17. Зависимости относительного предела текучести композита $\sigma_{\text{отн}}^T$ от объемной степени наполнения Φ в случае жестких частиц (1) и пор (1').

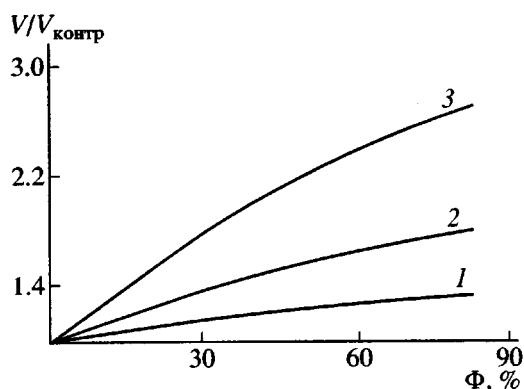


Рис. 18. Зависимость отношения $V/V_{\text{контр}}$ объема пористого композита к объему контрольного полимерного образца от объемной доли пор Φ в исходном состоянии при степенях вытяжки 50 (1), 100 (2) и 200% (3).

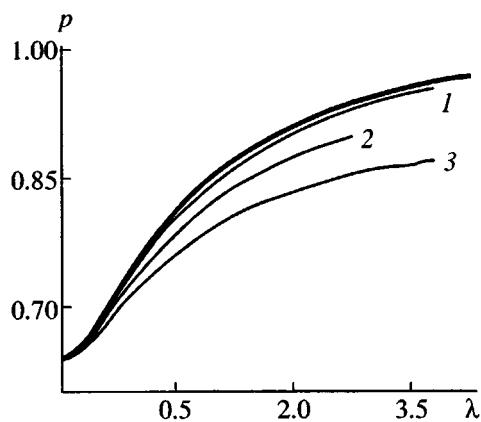


Рис. 19. Зависимость средней ориентации полимерных фрагментов p от степени вытяжки λ для ненаполненного (полужирная кривая) и пористого полимера, содержащего 4 (1), 16 (2) и 36 об.% пор (3).

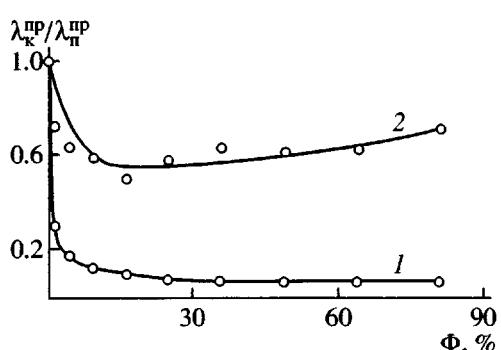


Рис. 20. Зависимость отношения $\lambda_k^{\text{пр}}/\lambda_n^{\text{пр}}$ предельного удлинения композита к предельному удлинению полимера от объемной доли Φ жесткого наполнителя (1) и пор (2).

должно приводить к уменьшению средней степени ориентации полимерных фрагментов в направлении вытяжки, что наглядно демонстрируют структурные диаграммы рис. 19.

На рис. 20 представлены концентрационные зависимости предельных удлинений композитов в масштабе предельных удлинений ненаполненного полимера. Модель предсказывает резкое уменьшение предельных удлинений полимера при наполнении его материала жесткими включениями при условиях прочного межфазного взаимодействия. Введение в полимер мягких включений или пор приводит к плавному уменьшению удлинений при разрыве. Более того, при превышении определенной концентрации таких включений анализируемый показатель увеличивается. Первый эффект хорошо известен и подтвержден данными, полученными на многих системах. Второй тип концентрационных зависимостей характерен для полимеров и композитов, в которых облегчено формирование пор.

Макроскопические закономерности разрушения композитов определяются обсужденными выше микроскопическими особенностями деформирования. Отметим также, что, несмотря на использование упрощенного критерия разрушения, предсказания модели хорошо согласуются с тенденциями, свойственными реальным материалам. Так, наполнение высокопластичных полимеров жесткими частицами приводит к резкому охрупчиванию в случае сильного адгезионного взаимодействия. Уменьшение предельных удлинений оказывается плавным, если включения являются мягкими, порами или если поры легко формируются в процессе деформирования (например, в дисперсно наполненных композитах при слабой адгезии). Также хорошо известен и широко используется эффект повышения вязкости разрушения путем модификации полимера мягкой эластичной фазой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложены оригинальные двух- и трехмерный варианты соотношений, определяющих большие деформации однофазного полимерного материала. Модель позволяет проследить за изменением текстуры полимера в ходе деформирования и, обратно, описать влияние текстуры на его деформирование и разрушение. Текстура полимера описывается (в отличие от других структурно чувствительных моделей) распределением полимерных фрагментов по ориентациям. Подразумевается гибкая физическая интерпретация указанного элемента структуры (сегмент, кристал-

лит и т.д.), а также предоставляется возможность мультиструктурного (мультифрагментного) описания, зависящего от конкретного полимерного материала, его состояния, условий и стадий деформирования.

Модель позволяет описать деформационные диаграммы и эволюцию структуры без ограничений на величины деформаций и режимы нагружения. Изменение параметров модели приводит к различным формам и характеристикам диаграмм: модулю, напряжению и деформации текучести, интенсивностям деформационного упрочнения и размягчения. Изменения диаграмм с изменением условий нагружения, в частности скорости вытяжки, правильно отражают экспериментально известные закономерности.

Бифрагментный (кристаллическая и аморфная фазы) вариант модели использован для формирования представлений о деформационных свойствах частично кристаллических полимеров. Предложенные соотношения позволяют описать влияние степени кристалличности и отношений деформационных параметров компонент на механическое поведение материала, в частности на эффективность восстановления деформаций и на изменение диаграммы деформирования при повторном нагружении.

Определяющие соотношения больших деформаций однородной полимерной фазы использованы для численного моделирования механического поведения полимерных смесей и композитов в рамках модели составных сфер и периодической модели строения неоднородного материала. Для постановки краевых задач использованы методы математической теории осреднения. Для решения краевых задач разработаны оригинальные алгоритмы и программы, основанные на конечноэлементном разбиении представительной ячейки структуры. Впервые получено микромеханическое описание больших деформаций неоднородных полимерных материалов.

В качестве примеров использования модели рассчитаны и обсуждены микродеформационные, макромеханические, ориентационные и прочностные характеристики дисперсно наполненных и пористых полимеров в режиме одноосного нагружения при фиксированной скорости вытяжки. Приведенные результаты расчетов описывают и объясняют известные эффекты изменения модулей, пределов текучести и удлинений при разрыве со степенью наполнения либо степенью пористости.

Модель допускает дальнейшее развитие, в частности учет температурных зависимостей упругих и релаксационных параметров материала,

рассмотрение многофазных смесей, развитие критериев и моделей разрушения.

Авторы искренне признательны Э.Ф. Олейникову и С.Л. Баженову за многочисленные полезные обсуждения. В.Г. Ошмян благодарит также Немецкий фонд исследований и Лабораторию технической механики Падерборнского Университета (проф. К.П. Герман) за предоставление чрезвычайно благоприятных условий для работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Green A.E., Naghdi P.M. // Arch. Rat. Mech. Anal. 1965. V. 18. P. 251.
2. Lee E.H., Lui D.T. // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 19.
3. Besseling J.F. // Proc. IUTAM Symp. on Irreversible Aspects of Continuum Mechanics. Vienna: Springer, 1968. P. 16.
4. Lee E.H. // J. Appl. Mech. 1969. V. 36. P. 1.
5. Kratochvil J. // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. P. 1104.
6. Rice J.R. // J. Mech. Phys. Solids. 1971. V. 19. P. 433.
7. Kratochvil J. // Acta Mech. 1973. V. 16. P. 127.
8. Mandel J. // Int. J. Solids Structures. 1973. V. 9. P. 725.
9. Astaria G., Marrucci G. Principles of Non-Newtonian Fluid Mechanics. London: McGraw-Hill, 1974.
10. Leonov A.I. // Rheologica Acta. 1976. V. 15. P. 85.
11. Asaro J.R. // Adv. Appl. Mech. 1983. V. 23. P. 1.
12. Loret B. // Mech. Mater. 1983. V. 2. P. 287.
13. Besseling J.F. // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 97.
14. Dafalias Y.F. // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 135.
15. Drucker D.C. // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 47.
16. Kleiber M., Raniecki B. // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 3.
17. Lee E.H. // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 61.
18. Nemat-Nasser S. // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 85.
19. Asaro J.R., Needelman A. // Acta Metallurgica. 1985. V. 33. P. 923.
20. Dafalias Y.F. // Acta Mech. 1987. V. 69. P. 119.
21. Dafalias Y.F. // Acta Mech. 1988. V. 73. P. 121.

22. *Van der Giessen E.* // Eur. J. Mech. A. 1989. V. 8. P. 15.
23. *Naghdi P.M.* // J. Appl. Math. Phys. 1990. V. 41. P. 315.
24. *Besseling J.F., Van der Giessen E.* Mathematical Modeling of Inelastic Deformation. Ser. Applied Mathematics and Mathematical Computation 5. New York: Chapman and Hall, 1994.
25. *Rubin M.R.* // Int. J. Solids Structures. 1994. V. 31. P. 2635.
26. *Nemat-Nasser S.* // J. Mech. Phys. Solids. 2000. V. 48. P. 1389.
27. *Boyce M.C., Parks D.M., Argon A.S.* // Mechanics of Materials. 1988. V. 7. P. 15.
28. *Parks D.M., Ahzi S.* // J. Mech. Phys. Solids. 1990. V. 38. P. 701.
29. *Lee B.J., Argon A.S., Parks D.M., Ahzi S., Bartczak Z.* // Polymer. 1993. V. 34. P. 3555.
30. *Haward R.N., Thackray G.* // Proc. Roy. Soc. A. 1968. V. 302. P. 453.
31. Судзуки Т., Есинага К., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989.
32. *Argon A.S.* // Phil. Magazine. B. 1973. V. 28. № 4. P. 839.
33. *Zaoui A.* // Proc. Int. Symp. "Plasticity Today-Modeling, Methods and Applications". London; New York: Elsevier, 1985. P. 451.
34. *Oshman V.G.* // Proc. 2 Eur. Solid Mechanics Conf. EUROMECH. Genova, 1994 P. H36.
35. *Ошмян В.Г.* // Высокомолек. соед. Б. 1995. Т. 37. № 1. С. 154.
36. *Muravin D.K., Oshmyan V.G.* // J. Macromol. Sci. B. 1999. V. 38. P. 749.
37. *Hashin Z.* // Trans. ASME J. Appl. Mech. 1962. V. 29. P. 143.
38. *Hill R.* // J. Mech. Phys. Solids. 1965. V. 13. P. 213.
39. *Budiansky B.* // J. Mech. Phys. Solids. 1965. V. 13. P. 223.
40. *Hashin Z.* // J. Appl. Mech. 1983. V. 50. P. 481.
41. *Christensen R.M., Lo K.H.* // J. Mech. Phys. Solids. 1979. V. 27. № 4. P. 315.
42. Левин В.М. // Докл. АН СССР. 1975. Т. 220. № 5. С. 1042.
43. *Nayfeh A.H.* Perturbation Methods. New York: Wiley, 1973.
44. *Марченко В.А., Хруслов С.Я.* Краевые задачи в областях с мелкозернистой границей. Киев: Наукова думка, 1974.
45. *Van Dyke M.* Perturbation Methods in Fluid Mechanics. Stanford, California: The Parabolic Press, 1975.
46. *Babuska I.* // Lectures Notes in Econ. and Math. Systems. 1976. V. 134. P. 137.
47. *Lions J.-L.* // Rocky Mountain J. Math. 1980. V. 10. P. 125.
48. *Sanchez-Palencia E.* Non-Homogeneous Media and Vibration Theory. Berlin; Heidelberg; New York: Springer, 1980.
49. *Nayfeh A.H.* Introduction to Perturbation Techniques. New York: Wiley, 1981.
50. *Suquet P.M.* // Methodes de homogeneisation en mechanique des solides. Cah. Groupe Franc. Rheol. 1981. P. 87.
51. *Lions J.-L.* // Proc. 4 Int. Conf. "Continuum models of discrete systems". Stockholm: 29.6–3.7 1981. P. 81.
52. Бердичевский В.Л. Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, 1983.
53. *Suquet P.M.* Elements of Homogenization Theory for Inelastic Solid Mechanics. Homogenization Techniques for Composite Media. Berlin; Heidelberg; New York: Springer, 1985. P. 194.
54. *Oleynik O.A., Shamaev A.S., Yosif'yan G.A.* // Current Topics in Partial Differential Equations. Tokyo: Kinokunia. 1986. P. 87.
55. *Sanchez-Palencia E.* Homogenization Techniques for Composite Media. Berlin; Heidelberg; New York: Springer, 1987.
56. *Nayfeh A.H.* // Comput Struct. 1988. V. 30. P. 185.
57. *Bakhvalov N.S., Panasenko G.P.* Averaging Processes in Periodic Media. Mathematical Problems in Mechanics of Composite Materials. Dordrecht: Kluwer Academic, 1989.
58. *Tartar L.* // Proc. R. Soc. Edinburg. A. 1990. V. 115. P. 193.
59. *Van Dyke M.* Mathematical Approaches in Hydrodynamics. Philadelphia: SIAM, 1991.
60. *Oleynik O.A., Shamaev A.S., Yosif'yan G.A.* Mathematical Problems in Elasticity and Homogenization. Amsterdam: North-Holland, 1992.
61. *Zhikov V.V., Kozlov S.M., Oleynik O.A.* Homogenization Operators and Integral Functionals. New York; Berlin; Heidelberg: Springer, 1994.
62. *Bakhvalov N.S., Panasenko G.P., Shtaras A.L.* // Partial Differential Equations V. Asymptotic Methods for Partial Differential Equations. Encyclopedia of Mathematical Sciences. New York; Berlin; Heidelberg: Springer, 1999. V. 34.
63. *Kozlov V., Maz'ya V., Movchan A.* Asymptotic Analysis of Fields in Multi-structure. Oxford: Oxford Univ. Press, 1999.
64. *Adams D.F.* Plastic Behavior of Composites. Composite Materials. New York: Acad. Press, 1974. V. 2. P. 196.

65. Маневич Л.И., Ошмян В.Г., Товмасян Ю.М., Тополкараев В.А. // Докл. АН СССР. 1983. Т. 270. № 4. С. 806.
66. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. М.: МГУ, 1984.
67. Горбунова Н.В., Кнунианц Н.Н., Маневич Л.И., Ошмян В.Г., Тополкараев В.А. // Механика композитных материалов. 1990. № 2. С. 336.
68. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1966.
69. Ward I.M. Mechanical Properties of Solid Polymers. Chichester: Wiley, 1990.
70. Hope P.S., Duckett R.A., Ward I.M. // J Appl. Polym. Sci. 1980. V. 25. P. 1373.
71. G'Sell C., Jonas J.J. // J. Mater. Sci. 1981. V. 16. P. 1956.
72. Олейник Э.Ф., Саламатина О.Б., Руднев С.Н., Шеногин С.В. // Высокомолек. соед. А. 1993. Т. 35. № 11. С. 1819.

A Structural Model for High Strains in Polymer Materials

K. P. Herrmann*, V. G. Oshmyan**, S. A. Timan**, and M. Yu. Shamaev**

*Laboratory of Technical Mechanics, Paderborn University,
D-33098 Paderborn, Pohlweg 47-49, Germany

**Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
ul. Kosygina 4, Moscow, 119991 Russia

Abstract—The publications on the modeling of high strains and fracture in polymer materials are reviewed. The distinctive feature of this approach concerns the account for structural changes taking place in a single-phase polymer upon its deformation and, in parallel, the effect of polymer structure on its stress-strain characteristics as treated within the framework of continuum mechanics. The structure is defined by the function of the orientation distribution of polymer fragments. In this case, a polymer fragment is modeled as an anisotropic structural unit responsible for the stress-strain behavior of the material. Depending on the type of a polymer and the stage of its deformation, a polymer fragment may be associated with a certain physical meaning. In particular, a structural unit may be presented by a crystallite, monomer unit of a flexible-chain polymer, or molecule of a rigid-chain polymer. In some cases, several types of polymer fragments, for example, various monomer units of a copolymer, may be introduced. Taking into account variations in the orientation distribution upon deformation and the related changes in the mechanical characteristics of the material, one may rationalize some specific features of polymer deformation such as strain softening and strain hardening, changes in the yield point with varying the strain rate, and many others. The relationships relating the high strains of a single-phase polymer were used to describe the mechanical properties of heterogeneous polymer materials, in particular, composites containing rigid and/or soft inclusions. This review presents the results of the modeling of the plastic deformation and ductile fracture of heterogeneous polymer materials depending on the deformation conditions, rates of plastic flow and reorientation, as well as the rigidity of inclusions and their volume content and mutual arrangement.