



Theoretical and Numerical Investigation of Environmental Effects on Mechanical Behavior of Biodegradable Polymers

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Gholami M.¹ MSc,
Hassani A.*¹ PhD,
Afrasiab H.¹ PhD,
Kazemian M.¹ MSc

How to cite this article

Gholami M, Hassani A, Afrasiab H, Kazemian M. Theoretical and Numerical Investigation of Environmental Effects on Mechanical Behavior of Biodegradable Polymers. Modares Mechanical Engineering. 2019;19(12):2837-2846.

ABSTRACT

Biodegradable polymers have widespread usages in the biomedical field, such as stents, sutures, scaffolds, and implants. Due to the importance of behavior of these materials exposed to environmental effects, whether in nature or the human body, extensive researches have been carried out in the last decade that most of them are experimental results and very few are theoretical results. These researches have mainly been performed for specific loading and temperature conditions and so on. For this purpose, in addition to validating the theoretical and empirical relationships derived through the experimental results, the effects of more complex conditions can be considered using the finite element method and numerical solution. In this paper, an analytical relationship extraction method has been presented, as well as the abilities and weaknesses of biodegradable polymers have been investigated by presenting the experimental results of biodegradable polymers. A numerical and finite element analysis is also provided to analyze the behavior of biodegradable polymers. The theoretical analysis and numerical simulation of biodegradable polymers have been carried out using the neo-Hookean hyperelastic model. First, the relationship of stress, versus the stretch has been derived using the strain energy of neo-Hookean material. Next, by assuming a degradation parameter, changes in the properties of the material exposed to environmental effects, according to the time in Abaqus Umat subroutine have been applied to the model. Finally, the accuracy of the simulation has been studied by a comparison between the experimental results and theoretical analyses with numerical solutions.

Keywords Biodegradable Polymers; Hyperelasticity; Neo-Hookean; Abaqus Umat Subroutine

CITATION LINKS

[1] Mechanical study of PLA-PCL fibres during in vitro degradation [2] Constitutive modeling of biodegradable polymers for application in endovascular stents [3] Constitutive framework for biodegradable polymers with applications to biodegradable stents [4] Deformation-induced hydrolysis of a degradable polymeric cylindrical annulus [5] The finite anti-plane shear field near the tip of a crack for a class of incompressible elastic solids [6] Development of ligament tissue biodegradable devices: a review [7] Degradation and Viscoelastic properties of PLA-PCL, PGA-PCL, PDO and PGA fibres [8] Material model proposal for biodegradable materials [9] Visco-elastic-plastic properties of suture fibers made of PLA-PCL [10] Constitutive modeling of biodegradable polymers: hydrolytic degradation and time dependent behavior [11] A finite element strategy to investigate the free expansion behaviour of a biodegradable polymeric stent [12] A computational framework to model degradation of biocorrosible metal stents using an implicit finite element solver [13] Finite element modelling of biodegradable stents [14] Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering [15] Nonlinear finite elements for continua and structures [16] Effects of hygrothermal aging on the molar mass and thermal properties of recycled poly(ethylene terephthalate) and its short glass fibre composites [17] Processing characteristics of poly(ethylene terephthalate): Hydrolytic and thermal degradation [18] Investigations on thermal and hydrolytic degradation of poly(ethylene terephthalate) [19] Recent advances in the phenomenological theory of rubber elasticity [20] Non-linear elastic deformations [21] Strain-energy function of a hyper-elastic material in terms of the extension ratios [22] Strain controlled biaxial stretch: an experimental characterization of natural rubber [23] Nonlinear, finite deformation, finite element analysis. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik [24] Computational methods for plasticity: theory and application [25] Numerical approximation of tangent moduli for finite element implementations of nonlinear hyperelastic material models

¹Mechanical Engineering Faculty, Babol Noshirvani University of Technology, Babol, Iran

*Correspondence

Address: Babol Noshirvani University of Technology, Shariati Avenue, Babol, Mazandaran, Iran, Post Code: 4714871167
Phone: +98 (11) 32332071-4
Fax: +98 (11) 32332071-4
hassani@nit.ac.ir

Article History

Received: April 18, 2018

Accepted: May 26, 2019

ePublished: December 21, 2019

بررسی تئوری و عددی اثرات محیطی بر رفتار مکانیکی پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر

مقداد غلامی MSc

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران

علی حسینی PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران

حامد افراسیاب PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران

مهدی کاظمیان MSc

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران

چکیده

پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر در زمینه‌های زیست پزشکی مانند استنت‌ها، بخیه‌ها، داربست (استخوانی) و ایمپلنت‌ها به طور گسترده استفاده می‌شوند. با توجه به اهمیت رفتار این مواد در معرض اثرات محیطی، چه در طبیعت و چه در بدن انسان، در دهه اخیر تحقیقات گسترده‌ای صورت گرفته است که اکثر آنها نتایج آزمایشگاهی و تعداد بسیار کمی نتایج تئوری هستند. این تحقیقات عمدتاً برای شرایط خاص بارگذاری، دمایی و غیره صورت گرفته‌اند. به این منظور به کمک روش المان محدود و حل عددی، علاوه بر صحنه‌گذاری روابط تئوری و روابط مستخرج از نتایج آزمایشگاهی، می‌توان تأثیر شرایط پیچیده‌تر را نیز در نظر گرفت. در این مقاله، نحوه استخراج روابط تحلیلی ارائه شده است و همچنین با نشان دادن نتایج آزمایشگاهی پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر، نقاط قوت و ضعف آنها نیز بررسی شده است. علاوه بر این، یک حل عددی و المان محدود نیز برای تحلیل رفتار پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر ارائه شده است. تحلیل تئوری و شبیه‌سازی عددی پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر به کمک مدل هاپیرالاستیک نئو- هوکین صورت گرفته است. ابتدا با استفاده از رابطه انرژی کرنشی ماده نئو- هوکین، رابطه تنش برحسب کشیدگی محاسبه شده و سپس با فرض یک پارامتر تخریب، تغییرات خواص ماده در معرض اثرات محیطی برحسب زمان در سابروتین UMAT آباکوس به مدل اعمال شده است. در نهایت با مقایسه نتایج آزمایشگاهی و تحلیل تئوری با حل عددی، صحت مدل‌سازی صورت گرفته، مشخص شده است.

کلیدواژه‌ها: پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر، هاپیرالاستیک، نئو- هوکین، سابروتین UMAT آباکوس

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱/۲۹

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۳/۵

*نویسنده مسئول: hassani@nit.ac.ir

۱- مقدمه

مشکلات زیست‌محیطی ناشی از تجزیه‌ناپذیری مواد پلاستیکی مختلف، سبب رشد سریع و روزافزون استفاده از محصولات زیست‌تخریب‌پذیر به ویژه پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر شده است. امروزه این پلیمرها در شاخه‌های مختلف علوم پزشکی نیز مورد توجه قرار گرفته‌اند و در ساخت تجهیزات مانند استنت‌ها (Stent)، بخیه‌ها، داربست‌ها (استخوانی) و ایمپلنت‌ها کاربردی وسیع دارند. پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر به دو دسته آگرو- پلیمرها (Agro-Polymers) و پلی‌استرهای زیست‌تخریب‌پذیر (Biodegradable Polyesters) تقسیم‌بندی می‌شوند. پلی‌استرهای زیستی نیز به دو نوع میکرواورگانیزم و ترکیبی تقسیم می‌شوند. از رایج‌ترین پلیمرهای ترکیبی زیست‌تخریب‌پذیر، پلی‌استرهای آلیفاتیک مانند پلی‌لاکتیک اسید (Polylactic Acid; PLA) و پلی‌کاپرولاکتون (Polycaprolactone; PCL) می‌باشند. یکی از کاربردهای این دو پلیمر، استفاده به عنوان وسایل تقویت عضلانی (Ligament Augmentation Device; LAD) می‌باشد؛ به این خاطر که ترموپلاستیک‌هایی (Thermoplastic) آبدوست (Hydrophilic) با نرخ تخریب پایین می‌باشند^[1]. نظر

به اهمیت این مواد به خصوص در علم پزشکی، لازم است مدت زمان تخریب (Degradation) آن‌ها و نیز تغییرات خواص آن‌ها در فرآیند تخریب مشخص گردد.

به این منظور، در دهه اخیر تحقیقات آزمایشگاهی، تحلیلی و عددی بسیاری برای تخمین خواص این مواد صورت گرفته است. به عنوان مثال، سوارز در رساله دکتری خود با استفاده از روابط تحلیلی و نتایج آزمایشگاهی، به بررسی پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر در دو حالت، بدون درنظرگرفتن اثر تخریب و با درنظرگرفتن اثر تخریب زیستی، پرداخت. همچنین پدیده‌هایی نظیر تورم، انبساط، پیچش و برش یک جسم حلقوی استوانه‌ای تراکم‌ناپذیر زیست‌تخریب‌پذیر نیز در این رساله بررسی گردید^[2]. سوارز و همکاران^[3]، به کمک نتایج این رساله دکتری، یک مدل ساختاری بیان کننده نرخ تخریب ناشی از تغییر شکل برای تحلیل پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر با استفاده از تانسور کشیدگی یک ماده هاپیرالاستیک نئو- هوکین تراکم‌ناپذیر ارائه دادند. سوارز و همکاران^[4]، از رابطه ارائه شده برای تابع انرژی ذخیره شده یک ماده الاستیک تراکم‌ناپذیر توسط نولس^[5] استفاده کرده‌اند و به یک معادله ساختاری با دقت بیشتر برای تحلیل پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر مانند PLLA (Poly-L-lactide) (Acid) دست پیدا کردند. ویرا و همکاران^[1, 6-10]، ضمن ارائه نتایج آزمایشگاهی در زمینه پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر، یک رابطه تحلیلی برای گروه‌های استر پلیمری نظیر PLA-PCL، تحت آزمایش کشش ساده ارائه کردند که هم‌خوانی قابل قبولی با نتایج آزمایشگاهی داشت. دیوشر و همکاران^[11] با ارائه یک مدل المان محدود، رفتار مکانیکی استنت پلیمری زیست‌تخریب‌پذیر را به کمک حلگر المان محدود ضمنی (Implicit Finite-Element Solver) بررسی کردند. ضعف اصلی تحلیل انجام شده^[11]، درنظرنگرفتن تغییرات خواص ماده در طول فرآیند تخریب بود. لذا دیوشر و همکاران با انجام تحقیق دیگری^[12] با استفاده از روابط مربوط به خوردگی و همچنین حلگر المان محدود ضمنی، به بررسی رفتار استنت‌های فلزی زیست خورده شونده (Biocorrosible Metal Stents) پرداختند. دیوشر در رساله خود^[13]، با استفاده از نتایج آزمایشگاهی و نتایج تحقیقات ارائه شده در مراجع^[3, 12]، ضمن بررسی رفتار استنت فلزی زیست‌تخریب‌پذیری که در معرض خوردگی و تخریب سطحی قرار دارد، به ارائه روابط و روش حل المان محدود نیز پرداخته است. نتایج آزمایشگاهی و روابط تحلیلی، معمولاً با درنظرگرفتن شرایط خاصی نظیر بارگذاری ساده و ماده پلیمری خاص و عدم درنظرگرفتن تأثیر شرایط محیطی مانند دما و غیره، به دست می‌آیند. اما به کمک ارائه یک روش المان محدود و حل عددی، علاوه بر صحنه‌گذاری روابط تئوری و روابط مستخرج از نتایج آزمایشگاهی، می‌توان تأثیر شرایط پیچیده‌تر را نیز در نظر گرفت. در این مقاله سعی شده است تا ضمن ارائه نحوه استخراج روابط تحلیلی و همچنین ارائه نتایج آزمایشگاهی پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر، نقاط قوت و ضعف آن‌ها را بررسی کرده و ضمن ارائه یک حل عددی و المان محدود، صحت نتایج به دست آمده را نیز مشخص کرد.

۲- الاستیسیته پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر

۲-۱- ماده هاپیرالاستیک

دقت مدل الاستیک خطی برای توصیف رفتار بسیاری از مواد کافی نبوده و استفاده از مدل‌های ساختاری غیرخطی برای این مواد ضروری به نظر می‌رسد. یکی از مدل‌های ساختاری ایده‌آل برای مواد الاستیک (غیرخطی) مدل هاپیرالاستیک (Hyper Elastic) یا

$$C_{10} = \frac{\mu}{2} ; D_1 = \frac{\kappa}{2} ; \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} ; \kappa = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad (10)$$

۲-۲- انواع بارگذاری‌ها

برای به دست آوردن ثوابت الاستیسیته موجود در معادلات ساختاری، مدل را تحت بارگذاری‌های مختلف قرار می‌دهند. ساده‌ترین نوع بارگذاری، در آزمون کشش تک‌محوره اعمال می‌گردد. تانسور گرادیان جابجایی برای کشش تک‌محوره برحسب جهت‌های اصلی کشیدگی λ_i به صورت زیر است:

$$F = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} ; \lambda_i = 1 + \varepsilon_i \rightarrow B = FF^T = C = F^T F = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^2 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$I_{1B} = I_{1C} = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 ; I_{2B} = I_{2C} = \lambda_1^2 \lambda_2^2 + \lambda_2^2 \lambda_3^2 + \lambda_3^2 \lambda_1^2$$

اگر شرایط تراکم‌ناپذیری و هم‌دمایی (Isothermal) برقرار باشد، آنگاه $J = \det(F) = 1$ و در نتیجه $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$ بوده و با توجه به رابطه‌های ۷ و ۱۱ خواهیم داشت:

$$\bar{I}_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 ; \bar{I}_2 = \lambda_1^{-2} + \lambda_2^{-2} + \lambda_3^{-2} \quad (12)$$

و برای کشش تک‌محوره خواهیم داشت:

$$\lambda_1 = \lambda_U ; \lambda_2 = \lambda_3 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_U}} \rightarrow I_1 = \bar{I}_1 = \lambda_U^2 + 2/\lambda_U ; I_2 = \bar{I}_2 = 2\lambda_U + 1/\lambda_U^2 \quad (13)$$

نوع دیگر، بارگذاری برش خالص است که در آن لبه‌های بالایی ماده در جهت ۱ تحت کشش قرار گرفته و لبه‌های جانبی در جهت ۲ ثابت و در جهت ۱ بدون بار است و در جهت ۳ تغییر شکل ندارد. نوع دیگر بارگذاری یعنی کشش دوماحوره وقتی اتفاق می‌افتد که ماده در دو جهت تحت کشش قرار گیرد. برای برش خالص و کشش دوماحوره، کشیدگی‌های اصلی به شرح زیر هستند:

$$\lambda_1 = \lambda_U ; \lambda_2 = 1/\lambda_S ; \lambda_3 = 1 \quad (14)$$

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_B ; \lambda_3 = \frac{1}{\lambda_B^2} \text{ کشش دو محوره}$$

۳- توصیف رفتار مواد پلیمری زیست تخریب پذیر

در یک ماده پلیمری دو نوع زوال (Erosion) وجود دارد. اگر سرعت تخریب زیاد باشد (سرعت نفوذ آب درون ماده کم است)، آب روی سطح پلیمر به سرعت هیدرولیز (Hydrolysis - تخریب در اثر آب یا یک مایع دیگر) شده و باعث جلوگیری از نفوذ آب در داخل حجم ماده می‌شود. در این حالت زوال سطحی غیرهمگن وجود خواهد داشت. اگر سرعت فرآیند تخریب بسیار کم باشد، سرعت جذب آب و هیدرولیز کاهش یافته و نفوذ درون حجم ماده وجود خواهد داشت (سرعت نفوذ آب زیاد است). در این حالت زوال تدریجی وجود خواهد داشت که به تخریب همگن یا حجمی (Bulk Degradation) معروف است. نرخ انتشار (Diffusion Rate) آب درون ماده با استفاده از قانون دوم فیک (Fick's Second Law) برای پلیمرهای همسانگرد قابل بیان است [15].

$$\frac{dw}{dt} = D \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (15)$$

گرین الاستیک (Green Elastic) است که رفتار غیرخطی تنش- کرنش را تحت تغییر شکل‌های بزرگ پیش‌بینی می‌کند و در آن رابطه تنش- کرنش از یک تابع چگالی انرژی کرنشی به دست می‌آید. این تابع انرژی ذخیره شده (W) به گرادیان تغییر شکل (F) وابسته بوده و برای یک ماده هاپیرالاستیک همگن، رابطه تنش- کرنش را می‌توان به صورت زیر نوشت [14]:

$$P = \partial W(F) / \partial F \quad (1)$$

در رابطه فوق، P تانسور تنش پیولا- کیرشهف اول (Piola-Kirchhoff) است. تانسور تنش اول و تنش دوم پیولا- کیرشهف (S) و همچنین تانسور تنش کوشی (Cauchy Stress- σ) به کمک عملیات حرکت به جلو (Push-Forward) و حرکت به عقب (Pull-back) به یکدیگر تبدیل می‌شوند [14]:

$$PK_1 = P = J \sigma F^{-T} ; PK_2 = S = J F^{-1} \sigma F^{-T} \quad (2)$$

که در آن، گرادیان تغییر شکل برحسب موقعیت جاری (فضایی) x و مرجع (Current position-Reference position) (مادی) X و جابجایی (u) به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F = \nabla x = \frac{\partial x}{\partial X} = 1 + (\nabla u) \quad (3)$$

متداول‌ترین مدل‌های توصیف کننده رفتار یک ماده هاپیرالاستیک، مدل‌های نئو- هوکین (Neo-Hookean) و مونی- ریویلین (Mooney-Rivlin) می‌باشند که در آن‌ها تابع چگالی انرژی کرنشی با استفاده از ترکیب خطی پایاهای اصلی (Principal Invariants) تانسور تغییر شکل کوشی- گرین (Cauchy-Green Deformation Tensor) C و یا چپ (I_1 و I_2) محاسبه می‌شوند. تابع انرژی کرنشی (معادله ۴) که به دو بخش حجمی (Volumetric) و انحرافی (Deviatory) تقسیم می‌شود، برای یک ماده مونی- ریویلین (معادله ۵) و نئو- هوکین تراکم‌پذیر (معادله ۶) به صورت زیر تعریف می‌شود [14]:

$$W = W(I_1, I_2, J) = W_{dev}(\bar{I}_1, \bar{I}_2) + W_{vol}(J) \quad (4)$$

$$W = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + C_{01}(\bar{I}_2 - 3) + D_1(J - 1)^2 \quad (5)$$

$$W = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + D_1(J - 1)^2 \quad (6)$$

که در آن‌ها C_{10} ، C_{01} و D_1 پارامترهای ماده هستند. در این رابطه $\bar{I}_1$ و $\bar{I}_2$ به ترتیب، اولین و دومین پایای قسمت حجم- ثابت (Isochoric Part) تانسور تغییر شکل کوشی- گرین راست و یا چپ برای مدل‌های نئو- هوکین و مونی- ریویلین می‌باشند:

$$\bar{I}_1 = J^{-\frac{2}{3}} I_1 ; \bar{I}_2 = J^{-\frac{4}{3}} I_2 ; \quad (7)$$

$$I_1 = tr(B) ; I_2 = \frac{1}{2} (I_1^2 - tr(B \cdot B))$$

روابط مربوط به تنش کوشی برای یک ماده نئو- هوکین تراکم‌پذیر عبارت است از [14]:

$$J \sigma = -p \bar{I} + J^{-\frac{2}{3}} 2 C_{10} dev(B) = 2 D_1 J (J - 1) \bar{I} + 2 C_{10} dev(\bar{B}) ; dev(\bar{B}) = \bar{B} - \frac{1}{3} \bar{I}_1 \bar{I} \quad (8)$$

$$\bar{B} = J^{-\frac{2}{3}} B = \bar{F} \bar{F}^T ; \bar{F} = J^{-\frac{1}{3}} F$$

برای ماده تراکم‌ناپذیر نئو- هوکین $J = \det(F) = 1$ و رابطه تابع چگالی انرژی کرنشی و تنش کوشی به فرم ساده شده زیر در می‌آید [14]:

$$W = C_{10}(I_1 - 3) ; \sigma = -p \bar{I} + 2 C_{10}(B) \quad (9)$$

در این رابطه $\bar{I}$ نشان دهنده ماتریس یکه می‌باشد. دو ثابت C_{10} و D_1 را می‌توان برحسب مدول برشی (μ) و مدول حجمی (κ) نوشت [14]:

$$\frac{\partial d}{\partial t}(d, I_1, I_2) = c(1 - d(t))[(I_1 - 3)^2 + (I_2 - 3)^2]^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

در این رابطه c عددی ثابت است. این رابطه نرخ تخریب را مانند شعاعی از یک دایره در صفحه I_1 و I_2 در نظر می‌گیرد. وقتی ماده بدون تغییر شکل باشد، آنگاه $I_1 = I_2 = 3$ می‌باشد و هیچ تخریبی صورت نمی‌گیرد.

وگدن به کمک معادله تعادل انرژی نشان داد که برای یک ماده تراکم‌ناپذیر همگن، تنش نامی N (P^T) زیر به صورت به دست می‌آید [19, 20]:

$$N = \frac{\partial W}{\partial F} - qF^{-1} \quad (19)$$

که پارامتر اسکالر q ضریب لاگرانژ می‌باشد. از آنجا که برای ماده تراکم‌ناپذیر J برابر واحد است با استفاده از روابط تبدیل تنش خواهیم داشت:

$$\sigma = J^{-1}FP^T = J^{-1}FN \rightarrow \sigma = J^{-1}F \frac{\partial W}{\partial F} - qJ^{-1}FI \rightarrow \sigma = F \frac{\partial W}{\partial F} - qI; \sigma_{ij} = F_{ik} \frac{\partial W}{\partial F_{jk}} - q\delta_{ij} \quad (20)$$

با توجه به مفهوم همگرایی، وقتی حرکت جسم صلب وجود داشته باشد انرژی ذخیره شده تغییر نمی‌کند یعنی W به تانسور کشیدگی راست (U) وابسته است ($W(F) = W(U)$). در نتیجه W به پایاهای تانسور U و متعاقباً پایاهای تانسور $C = U^2 = F^TF$ وابسته می‌باشد. اگر $\vec{n}$ و λ بردار و مقدار ویژه U باشند آنگاه $\vec{n}$ و λ^2 بردار و مقدار ویژه $C = U^2$ خواهند بود. پایاهای C برابر است با:

$$I_1 = \text{tr}(C); I_2 = \frac{1}{2} [I_1^2 - \text{tr}(C^2)]; I_3 = \det C = J^2 \quad (21)$$

برای ماده تراکم‌ناپذیر $I_3 = 1$ است، در نتیجه با استفاده از رابطه‌های ۱۱ و ۱۲ خواهیم داشت:

$$I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2; I_2 = \lambda_1^2\lambda_2^2 + \lambda_2^2\lambda_3^2 + \lambda_3^2\lambda_1^2; I_3 = \lambda_1^2\lambda_2^2\lambda_3^2 \quad (22)$$

وگدن [20] و وائلیس و لاندل [21] نشان دادند که انرژی یک ماده الاستیک همسانگرد را می‌توان برحسب تابعی از پایاهای اصلی I_1, I_2 و I_3 یا برحسب کشیدگی‌های اصلی λ_1, λ_2 و λ_3 تعریف کرد:

$$W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = f(\lambda_1) + f(\lambda_2) + f(\lambda_3) \quad (23)$$

در نتیجه با استفاده از رابطه‌های ۱۹ و ۲۰ خواهیم داشت:

$$\zeta_i = \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} - q\lambda_i^{-1}; \quad i = 1, 2, 3$$

$$\sigma_i = \lambda_i \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} - q; \quad i = 1, 2, 3 \quad (24)$$

که در آن ζ_i مقدار ویژه N می‌باشد. با استفاده از مفهوم تراکم‌ناپذیری $\lambda_3 = \left(\frac{1}{\lambda_1\lambda_2}\right)$ خواهد بود. بنابراین دو مقدار کشش اصلی مستقل وجود خواهند داشت که می‌توان رابطه انرژی را برحسب آن‌ها نوشت. در نتیجه پاسخ ماده را می‌توان به صورت $\tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2) = W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_1^{-1}\lambda_2^{-1})$ کرد. با استفاده از رابطه ۲۴ خواهیم داشت [22]:

$$\sigma_1 - \sigma_3 = \lambda_1 \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \lambda_1}; \quad \sigma_2 - \sigma_3 = \lambda_2 \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \lambda_2} \quad (25)$$

لازم به ذکر است که $\tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2)$ کل انرژی کرنشی شامل انرژی کرنشی مربوط به تغییر حجم (Changing-Volume-Isochoric) و حجم ثابت (Preserving-Volume-Volumetric) است.

که در آن w, D و x به ترتیب، تمرکز آب (Water Concentration)، ضریب انتشار (Diffusion Coefficient) و مکان را نشان می‌دهند. برای پلیمرهای آب‌گریز (Hydrophobic Polymers) که سرعت نفوذ آب پایینی دارند، تخریب در اثر آب (Hydrolytic Degradation) فقط در ناحیه محدود سطحی صورت می‌پذیرد. اما برای پلیمرهای آب‌دوست مثل PLA و PCL که پلی‌استر آلیفاتیک (Aliphatic Polyester) ترموپلاستیک زیست‌تخریب‌پذیر می‌باشند، نرخ نفوذ آب چندین برابر بزرگتر از سرعت‌های سینتیک (Kinetic) تجزیه (هیدرولیز) می‌باشد؛ بنابراین می‌توان فرض کرد که از همان ابتدای فرآیند هیدرولیز، آب به صورت یکنواخت در ماده پخش شده است، در نتیجه در معرض زوال حجمی قرار می‌گیرند [13]. مبنای تحلیل در این مقاله، توصیف رفتار مواد پلیمری در معرض تخریب همگن (حجمی) می‌باشد.

در دهه اخیر تحقیقات بسیاری در زمینه رفتار مواد زیست‌تخریب‌پذیر صورت گرفته که عمدتاً مبتنی بر نتایج آزمون‌های آزمایشگاهی بوده‌اند. در عمده این تحقیقات پاسخ ماده پلیمری زیست‌تخریب‌پذیر با اعمال بارگذاری‌های ساده به صورت تجربی به دست آمده و معادلات ساختاری حاکم استخراج شده است. ضمن اینکه تحقیقات محدودی در زمینه توصیف رفتار مواد زیست‌تخریب‌پذیر بر مبنای روابط الاستیسیته صورت گرفته است. رویکردهای مورد اشاره در قسمت زیر شرح داده شده است.

۳-۱- معادله ساختاری پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر بر مبنای روابط الاستیسیته

در این رویکرد یک میدان اسکالر برای توصیف کننده تخریب ماده در نظر گرفته شده و فرض می‌شود که خواص با تغییر شکل و زمان، تغییر می‌کند. به علت نفوذ آب به داخل ساختار پلیمری و تغییر شکل‌های ناشی از بارگذاری‌های مختلف، پیوندها دچار شکست هیدرولیکی (Hydrolytic Cleavage) شده و در نتیجه وزن مولکولی و خواص الاستیک کاهش می‌یابد [16-18]. طی این فرآیند، لغزش نسبی پیوندهای احاطه کننده مولکول‌ها، تغییر در ترکیب پیوندها و همچنین شکست پیوندهای شیمیایی، سبب اتلاف انرژی مکانیکی انتقال یافته به سیستم پلیمری شده و پدیده‌ای به نام پدیده واهلش (Relaxation Process) رخ می‌دهد که در نتیجه آن پس از اعمال اثر خارجی مانند انرژی مکانیکی در مدت زمان معین خواص مکانیکی مانند استحکام، مدول برشی و مدول یانگ با کاهش روبرو می‌شود. برای کمی‌سازی فرآیند تخریب از پارامتر تخریب (d) که تابعی از مکان و زمان است، استفاده می‌گردد. هرچه میزان کشیدگی ماده بیشتر باشد فاصله بین پیوندها بیشتر شده و پیوندها راحت‌تر تحت تأثیر ماده تخریب کننده شکسته می‌شوند در نتیجه هم سرعت و هم میزان تخریب زیاد می‌شود. مقدار پارامتر تخریب از صفر (بدون تخریب) تا ۱ (تخریب کامل) متغیر است. به عنوان نمونه، کاهش مدول برشی ماده برحسب پارامتر تخریب و مدول برشی اولیه ماده μ_0 به فرم زیر قابل بیان است [3]:

$$\mu = \mu_0(1 - d); \quad d = d(x, t) \quad (16)$$

با فرض همگرایی (Objectivity) و همسانگردی ماده، فرم کلی زیر برای نرخ پارامتر تخریب، به دست خواهد آمد [3]:

$$\frac{\partial d}{\partial t} = \mathcal{D}(d, I_1, I_2) \quad (17)$$

حال با توجه به اینکه میزان تخریب با افزایش کرنش و نیز با افزایش زمان اعمال کرنش بیشتر می‌شود رابطه زیر را می‌توان برای تخمین نرخ تخریب به کار گرفت [3]:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-u_s t} \quad (۳۴)$$

$$\rightarrow d(t) = 1 - \frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - e^{-u_s t} = 1 - e^{-kc_E wt} \quad (۳۵)$$

در این رابطه k ثابت سینتیک هیدرولیز، c_E تمرکز گروه استر، w تمرکز آب در پلیمر و t زمان تخریب است. آنها با بهره‌گیری از نتایج آزمایشگاهی و همچنین رابطه انرژی کرنشی برحسب پارامترهای ماده و کشیدگی، رابطه زیر را برای ماده پلیمری PLA-PCL در حین فرآیند تخریب به‌دست آورده‌اند:

$$2C_{10} = -163.75d + 440.46 \quad \text{نئو - هوکین} \quad (۳۶)$$

$$2C_{10} = -206.57d + 81.074 \quad \text{مونو - ریویلین}$$

همچنین، طی مدت زمان ۰، ۲، ۴، ۸ و ۱۶ هفته تخریب، به ترتیب مقادیر ۰/۳۳، ۰/۵۵، ۰/۸ و ۰/۱۸ برای پارامتر C_{10} و ۰/۹۲، ۰/۹۵، ۰/۱۰۳ و ۰/۱۸۲ به‌دست آوردند. روش ذکر شده در این قسمت فقط برای مواد نازک و همچنین برای مراحل اولیه فرآیند زوال و بدون در نظر گرفتن تغییرات نرخ تخریب نسبت به تغییر دما و تغییرات محیطی کاربرد دارد.

ویرا و همکاران [۷] با استفاده از نتایج آزمایشگاهی مقدار u_s را برای ماده پلیمری گروه پلی استر PLA-PC در سه محیط مختلف آب، NaCl و PBS (Solution Phosphate Buffer) به ترتیب برابر با ۰/۹۲، ۰/۹۵ و ۰/۱۰۳ به‌دست آوردند. روش ذکر شده در این قسمت فقط برای مواد نازک و همچنین برای مراحل اولیه فرآیند زوال و بدون در نظر گرفتن تغییرات نرخ تخریب نسبت به تغییر دما و تغییرات محیطی کاربرد دارد. با افزایش میزان کشیدگی و تعداد هفته‌های تخریب، در قسمت انتهایی نمودار تنش-کرنش، رفتار ماده به صورت الاستیک خطی خواهد بود و در نتیجه سفتی ثابت می‌ماند [۱]. به همین دلیل در قسمت انتهایی تخریب (۱۶ هفته)، C_{10} به شدت افزایش می‌یابد. چون در این قسمت، رابطه پارامتریک بر پایه نتایج آزمایشگاهی به‌دست آمده است که عمدتاً تغییر شکل الاستیک خطی دارند و تقریب آن با یک مدل الاستیک غیرخطی منجر به‌دست آمدن نتیجه اشتباه شده است. اگر از قسمت انتهایی فرآیند تخریب صرف نظر شود می‌توان دید که C_{10} به صورت خطی با پارامتر آسیب هیدرولیک (d) رابطه دارد، همان گونه که در رابطه ۳۶ آورده شده است.

۳-۳- نقاط قوت و ضعف‌های تحلیل تئوری و روابط تجربی مستخرج از نتایج آزمایشگاهی

هر کدام از روش‌های قبلی، دارای نقاط قوت و ضعفی هستند. تخریب‌پذیری یک پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر به عوامل مهمی چون خاصیت ماده زمینه، خاصیت ماده تخریب‌کننده و کشیدگی وابسته است. در مدل پیشنهادی بر اساس روش تحلیل تئوری ارائه شده در مرجع [۳]، خاصیت ماده زمینه و کشیدگی بررسی شده است؛ ولی خاصیت ماده تخریب‌کننده در رابطه دیده نمی‌شود. ضمن اینکه روابط ذکر شده در مقاله [۳] برای یک بارگذاری خاص (کشیدگی ثابت تک‌محوره) به دست آمده‌اند و نیاز بر این بود که توصیف رفتار ماده در معرض بارگذاری‌های مختلف به‌دست آیند که این کار در قسمت ۳-۱ انجام شد. برای اعمال خواص ماده تخریب‌کننده نیز می‌توان آن را در ثابت C موجود در معادلات دیفرانسیل ۲۸، ۳۰ و ۳۲ تأثیر داد. به این منظور نیاز است با انجام آزمایش برای مواد تخریب‌کننده مختلف و مقایسه با نتایج تئوری مقدار C را به‌دست آورد. در روش مبتنی بر نتایج آزمایشگاهی در مرجع [۱]، خواص ماده زمینه و خواص ماده تخریب‌کننده در نظر گرفته شده است ولی این نتایج برای چند آزمایش خاص (با شرایط آزمایشگاهی خاص) به‌دست آمده است. لذا برای توصیف رفتار ماده تحت شرایط و بارگذاری‌های مختلف نیاز است دوباره آزمایش‌هایی صورت گیرد. بنابراین به یک روش جامع

برای یک ماده تراکم‌ناپذیر، اضافه کردن یک تنش هیدرواستاتیک منجر به ایجاد کرنش نخواهد شد. بنابراین برای تغییر شکل‌های صفحه‌ای دوماحوره، تنش‌های اصلی به‌صورت $\sigma_1 = \lambda_1 \frac{\partial \bar{W}}{\partial \lambda_1}$ و $\sigma_2 = \lambda_2 \frac{\partial \bar{W}}{\partial \lambda_2}$ قابل بیان می‌باشند [۲۲]. برای ماده نئو-هوکین تابع انرژی کرنشی $\bar{W} = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3)$ می‌باشد. اگر ماده تحت کشش ساده قرار گیرد با توجه به رابطه‌های ۱۳، ۲۲ و ۲۵ تنش کوشی برابر خواهد بود با:

$$\sigma_1 = \sigma = \lambda \frac{d\bar{W}(\lambda)}{d\lambda}; \quad \sigma_2 = \sigma_3 = 0 \rightarrow \sigma_1 = \sigma = \lambda \frac{d(\frac{\mu}{2}(\lambda^2 + \frac{2}{\lambda} - 3))}{d\lambda} = \mu(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda}) \quad (۲۶)$$

مشاهده می‌شود این رابطه دقیقاً برابر با رابطه ذکر شده در مرجع [۳] برای پلیمرهای زیست‌تخریب‌پذیر تحت کشش ثابت می‌باشد که با استفاده از معادله تعادل مومنوم خطی زیر به‌دست آمده است.

$$\text{div } T = \rho \frac{dv}{dt} \rightarrow \text{div}[-qI + \mu_0(1-d)B] = \rho \frac{d^2x}{dt^2} \quad (۲۷)$$

با استفاده از رابطه‌های ۱۴، ۲۲ و ۲۵ نرخ تخریب برابر خواهد بود با:

$$\frac{d}{dt}d(t) = c(1-d(t)) \frac{(\lambda(t)-1)^2}{\lambda(t)^2} \times (\lambda(t)^4 + 4\lambda(t)^3 + 8\lambda(t)^2 + 4\lambda(t) + 1)^{1/2} \quad (۲۸)$$

به همین ترتیب می‌توان روابط مربوط به ماده تحت برش خالص و کشش دوماحوره را به‌دست آورد. به این منظور برای ماده تحت برش خالص با استفاده از رابطه خواهیم داشت:

$$\lambda_1 = \lambda; \lambda_2 = \lambda^{-1}; \lambda_3 = 1 \rightarrow \bar{W}(\lambda) = \bar{W}(\lambda, \lambda^{-1}) \rightarrow \sigma_1 = \lambda_1 \frac{\partial \bar{W}}{\partial \lambda_1} = \lambda \frac{d\bar{W}(\lambda)}{d\lambda} = \sigma; \quad \sigma_2 = 0 \quad (۲۹)$$

$$\sigma_1 = \frac{\mu\lambda d(\lambda^2 + \frac{1}{\lambda^2} - 2)}{2} = \mu(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda^2})$$

نرخ تخریب با استفاده از رابطه‌های ۱۴، ۱۸ و ۲۲ محاسبه می‌شود:

$$\frac{d}{dt}d(t) = c(1-d(t)) \frac{\sqrt{2}(\lambda(t)^2 - 1)^2}{\lambda(t)^2} \quad (۳۰)$$

همچنین برای کشش دوماحوره با توجه به رابطه ۲۳، روابط زیر حاصل می‌گردد:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda \rightarrow \bar{W}(\lambda) = \bar{W}(\lambda, \lambda) \rightarrow \sigma_1 = \lambda_1 \frac{\partial \bar{W}}{\partial \lambda_1} = \frac{\lambda}{2} \frac{d\bar{W}(\lambda)}{d\lambda} = \sigma_2 = \sigma; \quad \sigma_3 = 0 \quad (۳۱)$$

$$\rightarrow \sigma = \frac{\mu\lambda d(2\lambda^2 + \frac{1}{\lambda^4} - 3)}{4} = \mu(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda^4})$$

$$\frac{d}{dt}d(t) = \frac{c(1-d(t))(\lambda(t)^2 - 1)^2}{\lambda(t)^4} \times (\lambda(t)^8 + 4\lambda(t)^6 + 8\lambda(t)^4 + 4\lambda(t)^2 + 1)^{1/2} \quad (۳۲)$$

در نهایت با حل معادلات دیفرانسیل داده شده در روابط ۲۸، ۳۰ و ۳۲ به‌دست آوردن رابطه پارامتر تخریب برحسب زمان و قرار دادن آن به ترتیب در ۲۶، ۲۹ و ۳۱ تنش به‌دست خواهد آمد. این روابط فرم کلی معادلات مربوط به پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر می‌باشند.

۳-۲- معادلات ساختاری پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر بر مبنای نتایج آزمایشگاهی

ویرا و همکاران [۶] آسیب (Damage) هیدرولیز را به صورت زیر تعریف کردند:

$$d = 1 - \frac{\sigma}{\sigma_0} \quad (۳۳)$$

ویرا و همکاران [۱] با بهره‌گیری از نتایج آزمایشگاهی نشان دادند که استحکام با نرخ کاهش استحکام ماده (u_s) و زمان به صورت نمایی رابطه دارد:

برای مدل سازی پلیمرهای زیست تخریب پذیر نیاز است که تأثیر همه این عوامل در مدل پیشنهادی بررسی گردد.

۴- مدل سازی عددی پلیمر زیست تخریب پذیر

۴-۱- روش مدل سازی

خواص پلیمرهای زیست تخریب پذیر با زمان تغییر می کند. این تغییر خواص را نمی توان به صورت مستقیم به نرم افزار داد، چون نرم افزار خواصی که به صورت معمول برای آن تعریف می شود تا انتهای حل ثابت در نظر می گیرد. برای لحاظ کردن تغییر خواص در حین حل می توان از سابروتین (Subroutine) پیش بینی شده یومت و ویومت (UMAT, VUMAT) در نرم افزار المان محدود آباکوس استفاده کرد. به این صورت که روابط ساختاری متغیر با زمان (که در آن ها خواص، تنش و کرنش با زمان تغییر می کنند) را می توان به صورت یک کد به زبان برنامه نویسی فرترن (Fortran) نوشته و به صورت جداگانه به آباکوس داد تا تغییرات خواص در حین حل در نرم افزار لحاظ گردد. ضمن اینکه برای مدل سازی می توان از زبان برنامه نویسی پایتون (Python) در محیط کدنویسی پیش بینی شده در خود آباکوس استفاده نمود.

۴-۲- رابطه ساختاری ماده نئو- هوکین

تابع چگالی انرژی کرنشی برای یک ماده نئو- هوکین در نرم افزار آباکوس به صورت زیر تعریف می شود:

$$W = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + \frac{1}{D_1}(J^{el} - 1)^2; \mu = 2C_{10}; \kappa_0 = \frac{2}{D_1} \quad (37)$$

که در آن μ_0 و κ_0 مدول برشی و حجمی اولیه می باشند. همچنین J^{el} نسبت حجمی الاستیک است که به نسبت حجمی مجموع J (دترمینان گرادیان تغییر شکل) و نسبت حجمی دمایی J^{th} بستگی دارد:

$$J^{el} = \frac{J}{J^{th}}; J^{th} = (1 + \epsilon^{th})^3 \quad (38)$$

در صورتی که کرنش حرارتی ϵ^{th} وجود نداشته باشد (تغییرات دمایی صفر است) $J^{el} = J$ خواهد بود. پارامترهای ماده یعنی C_{10} و D_1 وابسته به دما و خواص هستند لذا می توان تأثیر شرایط پیچیده نظیر تأثیرات دمایی را در مدل اعمال نمود. ذکر این نکته ضروری است که تعریف D_1 در نرم افزار آباکوس (رابطه ۳۷) با رابطه ۶ تفاوت دارد؛ اما در نهایت تعریف واحدی برحسب مدول حجمی دارند (رابطه ۱۰ و ۳۷). با استفاده از رابطه ۸، تنش کوشی مستقیماً برحسب گرادیان تغییر شکل محاسبه خواهد شد:

$$\sigma_{ij} = \frac{2}{J}C_{10}\left(\bar{B}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\bar{B}_{kk}\right) + \frac{2}{D_1}(J - 1)\delta_{ij}; \quad (39)$$

برای رفتارهای غیرخطی ماده، نیاز است رابطه ساختاری به صورت نموی (فرم نرخی) تعریف شود. با استفاده از تکنیک خطی سازی، مسائل غیرخطی تبدیل به یک مساله خطی با تعداد زیادی گام زمانی کوچک خواهد شد. با توجه به اینکه مشتق زمانی همگر نیست، نیاز است از مشتق های زمانی همگر نظیر مشتق زمانی لی (میدان فضایی)، گرین- نقدی (Green-Naghdi)، تروزدل (Truesdell) و جامان (Jaumann) استفاده کرد [14, 15]. یکی از مقیاس های مزدوج (Conjugate) تنش- کرنش که در فرم نرخی کار مجازی (و معادلات ساختاری) استفاده می شود، تنش کیرشلف $(T = J\sigma)$ و تانسور نرخ تغییر شکل D (که همگر است) می باشد. فرم خطی تانسور تنش کیرشلف (T) به صورت زیر خواهد بود [14]:

$$\Delta T = \Delta(J\sigma) = J\mathbb{C}:grad(\Delta u) \quad (40)$$

نمو ΔT (Δ نمو حل است) تابع مقدار تانسوری خطی T می باشد. به کمک روابط الاستیسیته و با در نظر گرفتن تقارن تانسور الاستیسیته فضایی C ، رابطه ۴۰ به صورت مشتق زمانی لی، L_v زیر به دست می آید [14]:

$$L_v(T) = J\mathbb{C}:D \quad (41)$$

$$L_v(T) = \dot{T} - L.T - T.L^T; L = D + W \quad (42)$$

$$L = D + W = \dot{F}F^{-1}; D = \frac{1}{2}(L + L^T); W = \frac{1}{2}(L - L^T) \quad (43)$$

که در آن L گرادیان سرعت و W تانسور چرخش (Virtual Spin Tensor) می باشند. بنابراین برای نوشتن رابطه ساختاری با استفاده از مقیاس تنش- کرنش $J\sigma$ و D ، نیاز است مشتق زمانی لی تنش کیرشلف ارائه شود. یکی دیگر از مقیاس های تنش- کرنش قابل استفاده در رابطه ساختاری، تانسور تنش پیولا- کیرشلف دوم (S) و نرخ کرنش گرین- لاگرانژ $\dot{E}$ است. به کمک $T = FSF^T$ تانسور تنش پیولا- کیرشلف دوم خطی سازی شده، تبدیل به تانسور تنش کیرشلف خطی سازی شده می شود. در نتیجه به کمک این رابطه، نرخ تغییر تنش کیرشلف برابر خواهد بود با [14]:

$$\dot{T} = L.T + T.L^T + F\left(\frac{\partial S}{\partial E}:\dot{E}\right)F^T; E = \frac{1}{2}(F^TF - I) \rightarrow \dot{T} - L.T - T.L^T = \quad (44)$$

$$F\left(\frac{\partial S}{\partial E}:\dot{E}\right)F^T; \dot{E} = F^TD F$$

سمت چپ معادله فوق همان نرخ لی تنش کیرشلف است. با استفاده از رابطه های ۴۳ و ۴۴ خواهیم داشت:

$$\dot{T} + T.W - W.T = F\left(\frac{\partial S}{\partial E}:F^TD F\right)F^T + D.T + T.D \quad (45)$$

اما در سابروتین یومت، معادله ساختاری بر پایه نرخ جامان تنش کیرشلف نوشته می شود (سمت چپ رابطه ۴۵). در نتیجه برای به هنگام سازی نموی تنش نیاز است که از ماتریس ژاکوبین پیوسته (Consistent Jacobian) ماده یعنی DDSDE بر پایه نرخ جامان تنش کیرشلف و یا ماتریس سفتی مماسی (Tangent Stiffness Matrix) C^e (مدول مماسی ماده) بر پایه نرخ جامان تنش کوشی مدل ساختاری استفاده کرد که در زبان برنامه نویسی یومت به صورت زیر بیان می گردد:

$$\begin{aligned} STRESS &= STRESS + \\ (DDSDE \text{ or } C^e):DSTRAN \\ STRAN &= STRAN + DSTRAN \end{aligned} \quad (46)$$

که در آن $STRAN$ مقیاس کرنش یعنی ϵ و $DSTRAN$ گام کرنش یعنی $\Delta\epsilon$ است. سرعت همگرایی نرخ جامان تنش کیرشلف نسبت به تنش کوشی بیشتر است [23]؛ بنابراین در اینجا از معادله ساختاری بر پایه نرخ جامان تنش کیرشلف استفاده می شود [23, 24]:

$$T^{[v]} = \dot{T} + T.W - W.T = J(DDSDE):D \quad (47)$$

در نتیجه با استفاده از رابطه های ۴۵ و ۴۸، ماتریس ژاکوبین پیوسته مورد نیاز برای سابروتین یومت محاسبه خواهد شد [23]:

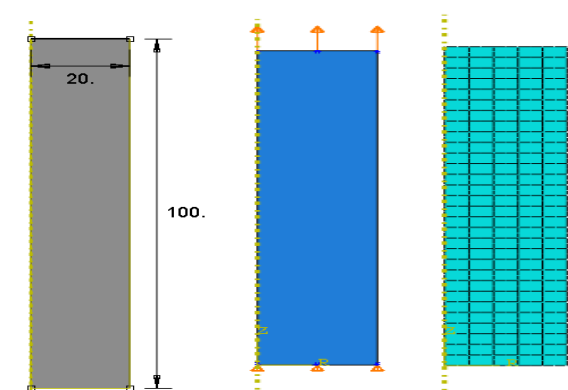
$$\begin{aligned} DDSDE_{ipqh} &= \frac{1}{J}F_{iM}F_{qI}F_{pK}F_{hL}\frac{\partial S_{MI}}{\partial E_{KL}} + \\ &\frac{1}{2}(\sigma_{ip}\delta_{qh} + \sigma_{qh}\delta_{ip} + \sigma_{ih}\delta_{qp} + \sigma_{qp}\delta_{ih}) \end{aligned} \quad (48)$$

به کمک رابطه های ۲، ۳۹، ۴۸ و انجام عملیات ریاضی، ماتریس ژاکوبین پیوسته مربوط به مدل نئو- هوکین به صورت زیر به دست می آید [25]:

آوردن گرادیان تغییر شکل $\bar{F}$ گام بعدی حل خواهد بود ($\bar{F} = J^{-1/3} F$) سپس با کمک آن، قسمت انحرافی تانسور کوشی-گرین چپ $\bar{B} = \bar{F} \bar{F}^T$ محاسبه خواهد شد ($\bar{B}_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \bar{B}_{kk}$). البته می‌توان به صورت مستقیم با استفاده از رابطه تانسور کوشی-گرین چپ ($B = FF^T$) و رابطه ۸، قسمت انحرافی تانسور کوشی-گرین چپ را محاسبه کرد. بعد از آن با کمک روابط ۳۹ و ۴۹، تانسور تنش کوشی σ_{ij} و ماتریس ژاکوبین مدل ساختاری نئو-هوکین ($DDSDDE_{ijkl}$)، به‌دست خواهد آمد. نکته مهم در کدنویسی یومت این است که خواص الاستیسیته آن با زمان تغییر می‌کند و در هر گام حل مقدار زمان آن گام زمانی در معادلات قرار داده می‌شود.

۵- نتایج و بحث

در این قسمت نتایج مدل‌سازی عددی دو پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر PLA و PLA-PCL که به‌کمک کدنویسی در محیط یومت آباکوس انجام شده، ارائه می‌گردد. در مراجع [۲، ۷] از روش‌های آزمایشگاهی و تحلیلی برای مطالعه رفتار این دو پلیمر استفاده شده است. مدل‌سازی به صورت متقارن محوری و با بهره‌گیری از المان (8-Node Biquadratic Axisymmetric CAX8RH Quadrilateral, Hybrid, Linear Pressure, Reduced Integration) انجام گردیده است. طول و شعاع مدل ۱۰۰ و ۲۰ میلی‌متر می‌باشند. شکل ۲، ابعاد، شرایط مرزی، بارگذاری و شبکه اجزای محدود ایجاد شده برای مدل



شکل ۲) ابعاد، شرایط مرزی، بارگذاری و شبکه اجزای محدود ایجاد شده برای مدل

مدول الاستیسیته ماده PLA در محدوده ۳ تا ۴ گیگاپاسکال (GPa) قرار دارد. اغلب این ماده به صورت ترکیبی با PCL به کار می‌رود که نرخ تخریب پایینی داشته و ماده‌ای نرم (Ductile) است. سفتی PCL پایین بوده و مدول الاستیسیته آن در محدوده ۰/۲۱ تا ۰/۴۴ گیگاپاسکال قرار دارد [۱].

۵-۱- پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر PLA تحت کشیدگی ثابت

در این مدل‌سازی، مدول یانگ و ضریب پواسون به ترتیب برابر ۳/۵ گیگاپاسکال و ۰/۴۷۵ فرض شده است. نتایج به‌دست آمده از تحلیل تئوری ارائه شده در مرجع [۳] و نتایج حل عددی پژوهش حاضر برای تغییرات تنش کوشی (بی‌بعد) برحسب زمان برای مدل تحت کشیدگی ثابت ۱/۳، ۱/۷۵ و ۲ در جدول ۱ و همچنین به ترتیب در نمودارهای ۱ تا ۳ نشان داده شده است.

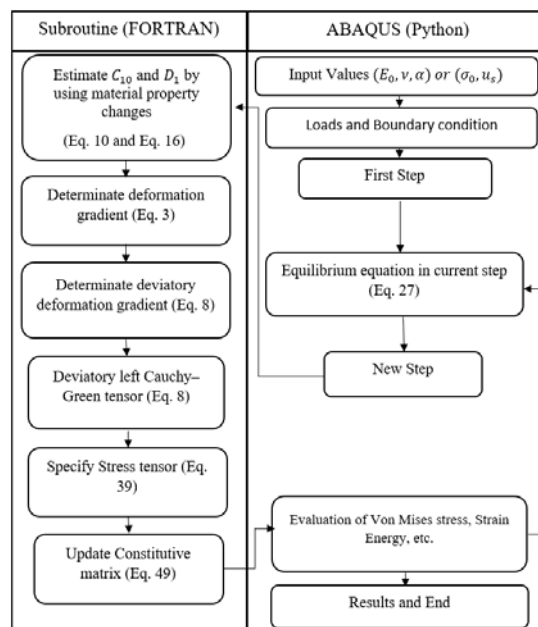
همچنین نتایج حاصل از حل عددی برای تغییرات تنش کوشی در حین تخریب پلیمر، در نمودارهای ۴ تا ۶ آورده شده است. مطابق با نمودارهای ۱ تا ۳، نتایج تئوری و حل عددی همخوانی خوبی با هم دارند. مقدار تنش کوشی کاملاً به میزان کشیدگی وابسته می‌باشد؛

$$DDSDDE_{ijkl} = \frac{2C_{10}}{J} \left(\frac{1}{2} (\delta_{ik} \bar{B}_{jl} + \bar{B}_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \bar{B}_{jk} + \bar{B}_{il} \delta_{jk}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{B}_{kl} - \frac{2}{3} \bar{B}_{ij} \delta_{kl} + \frac{2}{9} \delta_{ij} \delta_{kl} \bar{B}_{mm} \right) + \frac{2}{D_1} (2J - 1) \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (49)$$

ماتریس ژاکوبین به‌علت استفاده از فرم نرخی (نموی) و خطی شده، سرعت همگرا شدن را (به خصوص در مسائل پیچیده) افزایش می‌دهد. اما کرنش و در نتیجه تنش را می‌توان مستقیماً از گرادیان تغییر شکل به‌دست آورد. بنابراین تنش مستقیماً به‌کمک رابطه ۳۹ محاسبه می‌شود. تغییر خواص نیز با استفاده از رابطه‌های ۳۷ و ۳۸ و با در نظر گرفتن رابطه‌های $C_{10} = \frac{\mu}{2} = \frac{E}{4(1+\nu)}$ ، $D_1 = \frac{6(1-2\nu)}{E}$ ، $E = E_0(1-d)$ و $\mu = \mu_0(1-d)$ می‌شود. به این منظور ابتدا باید رابطه پارامتر تخریب d برحسب زمان و مکان به‌دست آید.

۴-۳- پیاده‌سازی رابطه ساختاری متغیر با زمان در سابروتین

کدنویسی رابطه ساختاری ذکر شده در قسمت قبل در محیط سابروتین ماده کاربر (یومت) آباکوس صورت می‌گیرد. الگوریتم شبیه‌سازی عددی پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر در آباکوس در شکل ۱ نشان داده شده است.



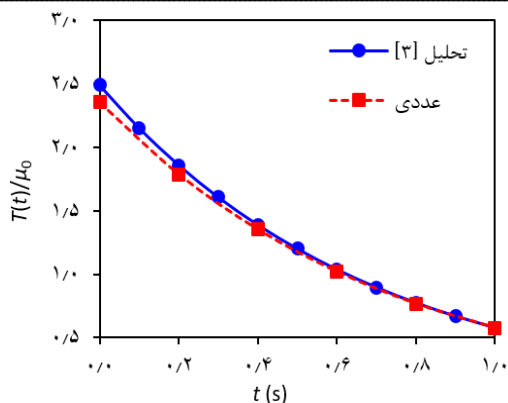
شکل ۱) الگوریتم شبیه‌سازی عددی پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر در آباکوس

به‌این منظور ابتدا پارامترهای ورودی مانند مدول یانگ اولیه (E_0)، ضریب پواسون (ν)، کشیدگی (α) برای حالت کشیدگی ثابت، استحکام اولیه (σ_0) و نرخ هیدرولیز ماده (u_s) معرفی می‌گردد. ماده تقریباً تراکم‌ناپذیر (در آباکوس $\nu = 0.475$) در نظر گرفته شده و به‌کمک آن $D_1 = 6(1-2\nu)/E$ محاسبه می‌شود. در گام بعد معادلات دیفرانسیل داده شده در معادلات ۲۸، ۳۰ و ۳۲ حل می‌شوند. با حل این معادلات دیفرانسیل، رابطه پارامتر تخریب $d(t)$ برحسب زمان به‌دست می‌آید. البته با کمک نتایج آزمایشگاهی نیز می‌توان این رابطه را برای یک ماده پلیمری خاص به‌دست آورد (مانند رابطه ۳۵). با بهره‌گیری از رابطه تغییرات d با زمان و همچنین ترکیب روابط ۱۰ و ۱۶، ضرایب C_{10} و D_1 از مدول برشی و مدول حجمی محاسبه خواهند شد. سپس با استفاده از گرادیان تغییر شکل (رابطه ۳)، J به‌دست خواهد آمد ($J = \det(F)$). به‌دست

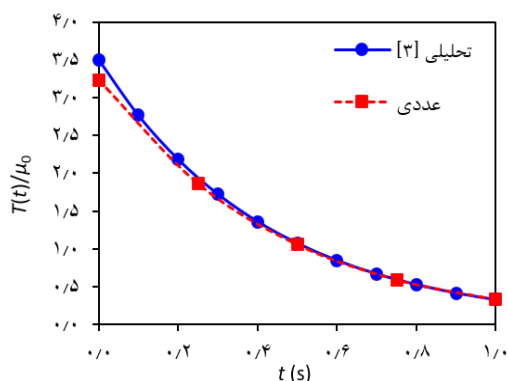
هر چه میزان کشیدگی بیشتر باشد، نرخ کاهش خواص در اثر تخریب بالاتر خواهد بود، چون در مقادیر کشیدگی بالاتر، فاصله مولکولی افزایش پیدا کرده و پیوندها با سرعت بیشتری شکسته می‌شوند و در نتیجه تخریب سریع‌تر صورت می‌گیرد (نرخ تغییر پارامتر تخریب بر حسب زمان افزایش پیدا می‌کند).

جدول (۱) تنش کوشی بی‌بعد $\frac{T(t)}{\mu_0}$ برای کشیدگی ثابت ۱/۳، ۱/۷۵ و ۲ در حین تخریب با استفاده از تحلیل تئوری مرجع [۳] و حل عددی پژوهش حاضر

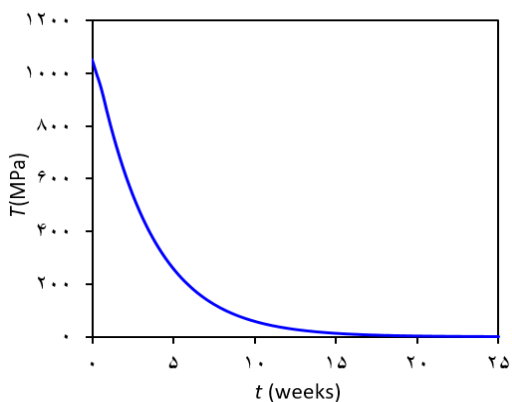
کشیدگی	زمان	تحلیلی	عددی
۱/۳	۰	۰/۹۲۰	۰/۹۰۱
	۰/۱	۰/۸۹۳	---
	۰/۲	۰/۸۶۷	۰/۸۵۱
	۰/۳	۰/۸۴۱	---
	۰/۴	۰/۸۱۷	۰/۸۰۳
	۰/۵	۰/۷۹۳	---
	۰/۶	۰/۷۶۷	۰/۷۵۸
	۰/۷	۰/۷۴۷	---
	۰/۸	۰/۷۲۵	۰/۷۱۶
	۰/۹	۰/۷۰۴	---
۱/۷۵	۱	۰/۶۸۳	۰/۶۷۵
	۰	۲/۴۹۱	۲/۳۵۴
	۰/۱	۲/۱۵۲	---
	۰/۲	۱/۸۵۹	۱/۷۸۸
	۰/۳	۱/۶۰۶	---
	۰/۴	۱/۳۸۸	۱/۳۵۳
	۰/۵	۱/۱۹۹	---
	۰/۶	۱/۰۳۶	۱/۰۲۰
	۰/۷	۰/۸۹۵	---
	۰/۸	۰/۷۷۳	۰/۷۶۸
۲	۰/۹	۰/۶۶۸	---
	۱	۰/۵۷۷	۰/۵۷۷
	۰	۳/۵	۳/۲۳۵
	۰/۱	۲/۷۶۴	---
	۰/۲	۲/۱۸۳	---
	۰/۲۵	---	۱/۸۶۷
	۰/۳	۱/۷۲۵	---
	۰/۴	۱/۳۶۲	---
	۰/۵	۱/۰۷۶	۱/۰۶۶
	۰/۶	۰/۸۵۰	---
	۰/۷	۰/۶۷۱	---
	۰/۷۵	---	۰/۷۹۶
	۰/۸	۰/۵۳	---
	۰/۹	۰/۴۱۹	---
	۱	۰/۳۳۰	۰/۳۳۳



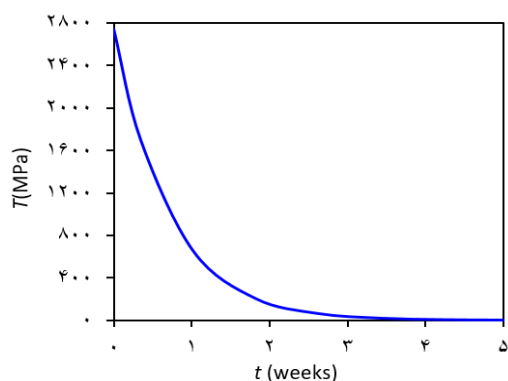
نمودار (۲) تنش کوشی بی‌بعد $\frac{T(t)}{\mu_0}$ برای کشیدگی ثابت ۱/۷۵ در حین تخریب با استفاده از تحلیل تئوری مرجع [۳] و حل عددی پژوهش حاضر



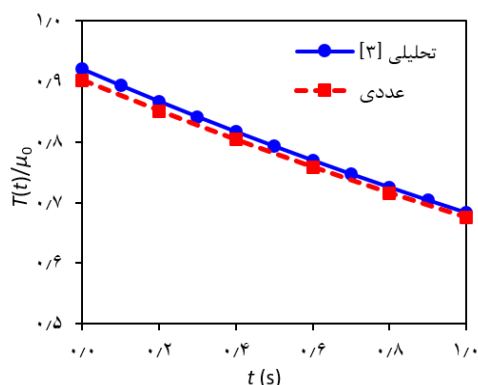
نمودار (۳) تنش کوشی بی‌بعد $\frac{T(t)}{\mu_0}$ برای کشیدگی ثابت ۲ در حین تخریب با استفاده از تحلیل تئوری مرجع [۳] و حل عددی پژوهش حاضر



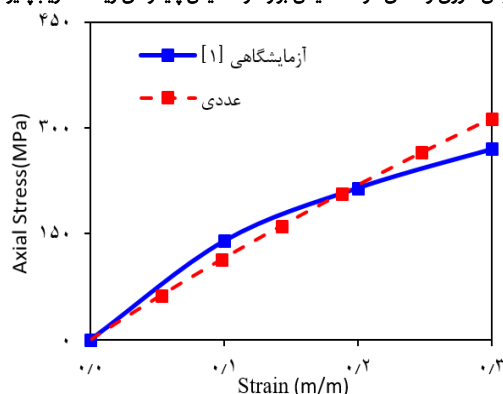
نمودار (۴) تنش کوشی T (GPa) برای کشیدگی ثابت ۱/۳ در حین تخریب پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر با استفاده از حل عددی



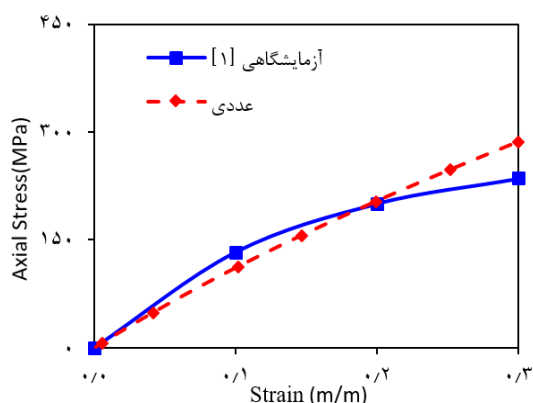
نمودار (۵) تنش کوشی T (GPa) برای کشیدگی ثابت ۱/۷۵ در حین تخریب پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر با استفاده از حل عددی



نمودار (۱) تنش کوشی بی‌بعد $\frac{T(t)}{\mu_0}$ برای کشیدگی ثابت ۱/۳ با استفاده از تحلیل تئوری مرجع [۳] و حل عددی پژوهش حاضر



نمودار ۸) تنش محوری برحسب کرنش بعد از ۴ هفته تخریب پلیمر زیست تخریب پذیر PLA-PCL



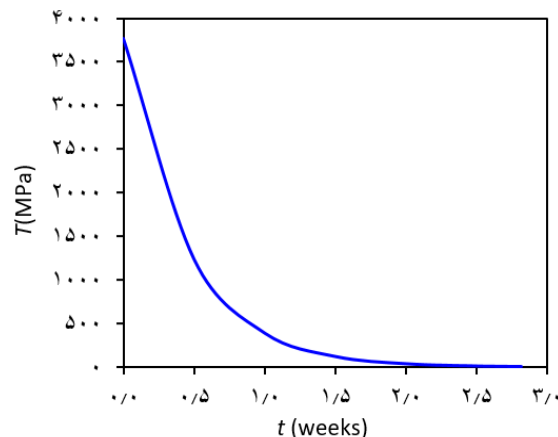
نمودار ۹) تنش محوری برحسب کرنش بعد از ۸ هفته تخریب پلیمر زیست تخریب پذیر PLA-PCL

مشاهده می شود که نتایج حل عددی و آزمایشگاهی برای زمان تخریب ۲ و ۴ به هم نزدیکند، اما بعد از ۸ هفته تخریب دچار اختلافی حدود ۱۷ درصد می شوند. همانطور که در انتهای قسمت ۳-۲ نیز اشاره شد در قسمت انتهایی نمودار تنش-کرنش، وقتی میزان کشیدگی و یا تعداد هفته ها افزایش پیدا کنند رفتار ماده به صورت الاستیک خطی خواهد شد^[۱] و تقریب آن با یک مدل الاستیک غیرخطی منتهی از رابطه ۳۶ آن گونه که در حل عددی فرض می شود نتایج را کمی از واقعیت دور می کند. ضمن اینکه یکی از دلایل اختلاف نتایج حل عددی برگرفته از مدل نئو-هوکین با نتایج حل تجربی در کشیدگی های بیشتر، این است که حل نئو-هوکین مدل رفتاری مناسبی برای کشیدگی های زیاد نیست. برای کشیدگی زیادتر باید از مدل های مناسب مانند مدل مونی-ریولین و مدل اوگدن استفاده کرد.

۶- جمع بندی

در این مقاله:

- نحوه استخراج روابط تحلیلی پلیمرهای زیست تخریب پذیر ارائه شد و نقاط قوت و ضعف روابط مستخرج از نتایج آزمایشگاهی و روابط تحلیلی نیز بررسی شد.
- یک حل عددی و المان محدود نیز برای تحلیل رفتار پلیمرهای زیست تخریب پذیر ارائه شد که این کار با استفاده از رابطه انرژی کرنشی مدل هایپرالاستیک نئو-هوکین صورت گرفت.
- با استفاده از تعریف یک پارامتر تخریب، تغییرات خواص ماده در معرض اثرات محیطی برحسب زمان در سابروتین یومت تعریف شد.



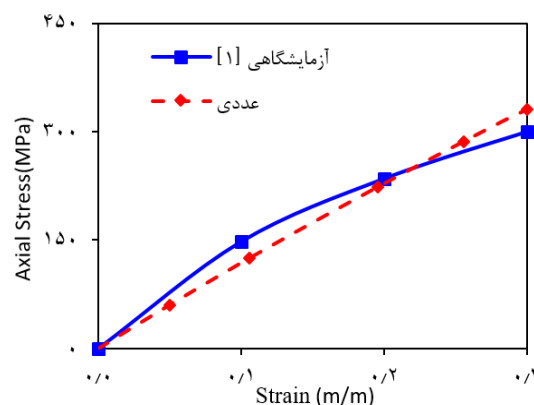
نمودار ۶) تنش کوشی T (GPa) برای کشیدگی ثابت ۲ در حین تخریب پلیمر زیست تخریب پذیر با استفاده از حل عددی

۵-۲- پلیمر زیست تخریب پذیر PLA-PCL تحت کشش تک محوره

در مطالعه انجام شده توسط ویرا و همکاران در مرجع^[۲]، اطلاعات مربوط به پلیمر زیست تخریب پذیر ترکیبی PLA-PCL (با ترکیب ۹۰:۱۰) به روش تجربی استخراج گردیده است. جدول ۲ و همچنین نمودارهای ۷ تا ۹ نتایج آزمون های تجربی ارائه شده در مرجع^[۱] و نتایج حل عددی پژوهش حاضر را برای تغییرات تنش محوری برحسب کرنش بعد از زمان های تخریب ۲، ۴ و ۸ هفته نمایش می دهد.

جدول ۲) تنش محوری برحسب کرنش بعد از ۲، ۴ و ۸ هفته تخریب پلیمر زیست تخریب پذیر PLA-PCL

هفته	کرنش	تنش (MPa)	
		آزمایشگاهی	عددی
۲	۰/۱	۱۴۸	۱۲۴/۶۳
	۰/۲	۲۳۵	۲۲۵
	۰/۳	۳۰۰	۳۳۰/۴۳
۴	۰/۱	۱۴۰	۱۱۵
	۰/۲	۲۱۵	۲۲۱/۸
	۰/۳	۲۷۰	۳۱۲/۵
۸	۰/۱	۱۳۳	۱۱۲/۵۷
	۰/۲	۲۰۰	۲۰۳/۱۳
	۰/۳	۲۳۵	۲۸۵/۷۵



نمودار ۷) تنش محوری برحسب کرنش بعد از ۲ هفته تخریب پلیمر زیست تخریب پذیر PLA-PCL

- 9- Vieira AC, Medeiros R, Marques AT, Guedes RM, Tita V. Visco-elastic-plastic properties of suture fibers made of PLA-PCL. *Materials Science Forum*. 2013;730-732(1):56-61.
- 10- Vieira AC, Guedes RM, Tita V. Constitutive modeling of biodegradable polymers: hydrolytic degradation and time dependent behavior. *International Journal of Solids and Structures*. 2014;51(5):1164-1174.
- 11- Debusschere N, Segers P, Dubruel P, Verhegghe B, De Beule M. A finite element strategy to investigate the free expansion behaviour of a biodegradable polymeric stent. *Journal of Biomechanics*. 2015;48(10):2012-2018.
- 12- Debusschere N, Segers P, Dubruel P, Verhegghe B, De Beule M. A computational framework to model degradation of biocorrosible metal stents using an implicit finite element solver. *Annals of Biomedical Engineering*. 2016;44(2):382-390.
- 13- Debusschere N. Finite element modelling of biodegradable stents [Dissertation]. Ghent: Ghent University; 2016.
- 14- Holzapfel GA. *Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering*. 1st Edition. Chichester: John Wiley & Sons; 2000. p. 179-304.
- 15- Belytdchko T, Liu WK, Moran B. *Nonlinear finite elements for continua and structures*. 1st Edition. New York: John Wiley & Sons; 2000. p. 215-308.
- 16- Pegoretti A, Penati A. Effects of hygrothermal aging on the molar mass and thermal properties of recycled poly(ethylene terephthalate) and its short glass fibre composites. *Polymer Degradation and Stability*. 2004;86(2):233-243.
- 17- Al-AbdulRazzak S, Jabarin SA. Processing characteristics of poly(ethylene terephthalate): Hydrolytic and thermal degradation. *Polymer International*. 2002;51(2):164-173.
- 18- Zimmerman H, Kim NT. Investigations on thermal and hydrolytic degradation of poly(ethylene terephthalate). *Polymer Engineering and Science*. 1980;20(10):680-683.
- 19- Ogden RW. Recent advances in the phenomenological theory of rubber elasticity. *Rubber Chemistry and Technology*. 1986;59(3):361-383.
- 20- Ogden RW. *Non-linear elastic deformations*. 1st Edition. New York: Dover Publications, Inc; 1997.
- 21- Valanis KC, Landel RF. Strain-energy function of a hyper-elastic material in terms of the extension ratios. *Journal of Applied Physics*. 1967;38(7):2997-3002.
- 22- Pancheri FQ, Dorfmann L. Strain controlled biaxial stretch: an experimental characterization of natural rubber. *OCCAM, Oxford Centre for Collaborative Applied Mathematics*. 2012;(28):1-26.
- 23- Nguyen N, Waas AM. Nonlinear, finite deformation, finite element analysis. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*. 2016;67(3):1-24.
- 24- de Souza Neto E, Peric D, Owen D. *Computational methods for plasticity: theory and application*. 1st Edition. London: John Wiley & Sons; 2008. p. 215-308.
- 25- Sun W, Chaikof EL, Levenston ME. Numerical approximation of tangent moduli for finite element implementations of nonlinear hyperelastic material models. *Journal of Biomechanical Engineering*. 2008;130(6):061003.

با مقایسه نتایج آزمایشگاهی و تحلیل تئوری با حل عددی، صحت مدل‌سازی صورت گرفته مشخص شد. علت استفاده از یک شبیه‌سازی عددی مناسب (مزیت‌ها) برای بررسی رفتار یک پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر این است که:

- علاوه بر مشاهده رفتار یک پلیمر زیست‌تخریب‌پذیر در حین فرآیند تخریب، می‌توان تأثیرات دمایی، شرایط پیچیده بارگذاری، مرزی و غیره را نیز بررسی کرد.
- برای کوچک‌ترین تغییر در شرایط، لازم نیست آزمایش را از ابتدا و برای هفته‌های طولانی انجام داد.
- در هزینه و وقت صرفه‌جویی می‌شود.
- می‌توان از این شبیه‌سازی، برای تحلیل مواد دیگری که خواص آن با گذر زمان دچار تغییر می‌شوند نیز استفاده کرد.

تشکر و قدردانی: نویسندگان این مورد را بیان نکردند.

تأییدیه اخلاقی: این مقاله تاکنون در نشریه دیگری (به طور کامل یا بخشی از آن) به چاپ نرسیده است. همچنین برای بررسی یا چاپ به نشریه دیگری ارسال نشده است. محتویات علمی مقاله حاصل فعالیت علمی نویسندگان بوده است.

تعارض منافع: در مورد پژوهش حاضر، هیچ‌گونه تعارض منافع با سازمان یا اشخاص حقیقی و حقوقی وجود ندارد.

سهام نویسندگان: نویسندگان این مورد را بیان نکردند.

منابع مالی: منبع مالی خاصی برای انجام این تحقیق استفاده نشده است.

منابع

- 1- Vieira AC, Vieira JC, Ferra JM, Magalhães FD, Guedes RM, Marques AT. Mechanical study of PLA-PCL fibres during in vitro degradation. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. 2011;4(3):451-460.
- 2- Soares JS. Constitutive modeling of biodegradable polymers for application in endovascular stents [Dissertation]. College Station, Texas: Texas A&M University; 2008.
- 3- Soares JS, Moore JE, Rajagopal KR. Constitutive framework for biodegradable polymers with applications to biodegradable stents. *ASAIO Journal*. 2008;54(3):295-301.
- 4- Soares JS, Rajagopal KR, Moore JE. Deformation-induced hydrolysis of a degradable polymeric cylindrical annulus. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*. 2010;9(2):177-186.
- 5- Knowles JK. The finite anti-plane shear field near the tip of a crack for a class of incompressible elastic solids. *International Journal of Fracture*. 1977;13(5):611-639.
- 6- Vieira AC, Guedes RM, Marques AT. Development of ligament tissue biodegradable devices: a review. *Journal of Biomechanics*. 2009;42(15):2421-30.
- 7- Vieira AC, Vieira JC, Guedes RM, Marques AT. Degradation and Viscoelastic properties of PLA-PCL, PGA-PCL, PDO and PGA fibres. *Materials Science Forum*. 2010;636-637(1):825-832.
- 8- Vieira AC, Marques AT, Guedes RM, Tita V. Material model proposal for biodegradable materials. *Procedia Engineering*. 2011;10:1597-1602.