

DOI: [10.7242/1999-6691/2021.14.1.5](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2021.14.1.5)

УДК 539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛАСТИНЫ С УЧЕТОМ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ

Р.Г. Куликов, Т.Г. Куликова, О.Ю. Сметанников

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

Рассматриваются вопросы моделирования термомеханического поведения полимерного материала в процессе охлаждения, сопровождающегося кристаллизацией. Предложенный подход применяется к задаче деформирования при охлаждении бесконечной пластины, изготовленной из полиэтилена низкого давления, в процессе его кристаллизации. Формулируются математические постановки теплокинетической и термомеханической краевых задач. Приводятся результаты численного решения связанной задачи, включающей нестационарное уравнение теплопроводности и уравнение кинетики кристаллизации, при условии зависимости характеристик материала от температуры. При решении краевой задачи термомеханики за основу берутся полученные авторами ранее феноменологические нелинейные определяющие соотношения, непрерывным образом описывающие поведение полимерного материала в широком интервале температур, включающем температурный диапазон фазовых превращений. Построение определяющих соотношений проведено с использованием потенциала Пенга–Ландела. Строится методом Галеркина слабая вариационная постановка краевой задачи. Осуществляется процедура линеаризации, позволяющая свести решение изначально нелинейной краевой задачи к решению последовательности линейных задач относительно малых приращений компонент вектора перемещений. При этом линеаризация геометрических соотношений выполняется посредством наложения малых приращений деформаций на конечные, линеаризация определяющих соотношений – путем их разложения в ряд Тейлора с последующим удержанием линейных слагаемых и в предположении малости приращений компонент тензора деформаций. Демонстрируется подход, при котором естественным образом учитываются возникающие в материале малые приращения температурных и структурных деформаций. Анализируются аспекты численной реализации созданного алгоритма на основе конечно-элементной технологии построения дискретного аналога рассматриваемой задачи. Приводятся и сравниваются результаты решений обсуждаемой задачи в линейной постановке в предположении малости деформаций и в нелинейной постановке.

Ключевые слова: термомеханика, полимер, кристаллизация, математическое моделирование, конечные деформации, линеаризация, численный подход

MODELING OF THE CRYSTALLIZATION PROCESS OF A POLYMER PLATE TAKING INTO ACCOUNT LARGE DEFORMATIONS

R.G. Kulikov, T.G. Kulikova and O.Y. Smetannikov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

The issues of modeling the thermomechanical behavior of a polymer material during cooling accompanied by crystallization are considered. The proposed approach is applied to the problem of deformation upon cooling of an infinite plate made of low-pressure polyethylene during crystallization. Mathematical formulations of thermal kinetic and thermomechanical boundary value problems are presented. The results of the numerical solution of a coupled heat-kinetic problem, including the non-stationary heat conduction equation and the crystallization kinetics equation obtained under the assumption that the characteristics of the material depend on temperature are given. When solving the boundary value problem of thermomechanics, the previously obtained phenomenological nonlinear constitutive relations are used, which continuously describe the behavior of a polymer material in a wide temperature range, including the range of phase transformations. The construction of constitutive relations was carried out using the Peng–Landel potential. A weak variational formulation of the boundary value problem, constructed using the Galerkin method, is presented. A linearization procedure is carried out, which makes it possible to reduce the solution of an initially nonlinear boundary value problem to solving a sequence of linear problems with relatively small increments of the displacement vector components. In this case, the linearization of geometric relations is performed by superimposing small increments of deformations on finite ones, linearization of the constitutive relations – expansion in a Taylor series with subsequent retention of linear terms under the assumption that the increment of the components of the strain tensor is small. An approach is demonstrated that naturally takes into account the small increments of temperature and structural deformations arising in the material. Some aspects of the numerical implementation of the created algorithm based on the finite element technology of constructing a discrete analogue of the problem under consideration are analyzed. The results of solving the problem under discussion in a linear formulation under the assumption of small deformations and in a nonlinear formulation are compared.

Key words: thermomechanics, polymers, crystallization, mathematic simulation, finite deformations, linearization, numerical approach

1. Введение

Изделия из полимерных материалов находят широкое применение в различных отраслях промышленности. Один из этапов производства изделий и конструкций из них — это этап принудительного охлаждения, сопровождающийся кристаллизацией материала. Высокие уровни технологических напряжений, формирующихся вследствие температурной и деформационной неоднородностей, зачастую приводят к снижению эксплуатационных качеств изделий и даже к их разрушению еще на стадии изготовления. В связи с этим актуальна задача моделирования термомеханических процессов в полимерных материалах в условиях фазовых переходов. Используемые

модели поведения таких сред должны включать определяющие соотношения, единым образом описывающие связь тензоров напряжений и деформаций в широком интервале температур, в том числе температур фазовых превращений. Вследствие сложности протекания реальных процессов и геометрического разнообразия форм изделий исследование закономерностей формирования полей технологических напряжений возможно только с помощью численных методов. Поэтому большое значение приобретает создание удобного для реализации численного алгоритма решения краевой задачи термомеханики кристаллизующейся полимерной среды.

Моделированию процессов в отверждающихся полимерных материалах посвящено большое количество публикаций, [1–20] лишь некоторые из них. Общей чертой моделей, предложенных в [1–3], является стремление получить возможность простой оценки остаточных напряжений. Некоторые авторы при построении моделей термомеханического поведения предполагают, что кристаллизующийся полимер показывает себя как упругий материал с малыми деформациями. Например, в [4] при этом предположении разработаны определяющие соотношения для аморфно-кристаллических полимеров. В [5–12] описание реакции полимера на термомеханическое воздействие выполнено в рамках конечных деформаций. Многие модели основаны на упруго-вязкопластическом подходе [7–9, 13] и предназначены или для конкретных полимерных материалов [5, 13], или учитывают только определенные виды напряженно-деформированного состояния. Например, в [6] модель нацелена на представление механического поведения полимера в диапазоне температур, включающем температуры стеклования, для случаев одноосного нагружения и плоского напряженного состояния. В [8] для моделирования зависимости отклика аморфных полимеров от скорости деформирования и температуры в условиях больших деформаций предложена связанная термомеханическая теория.

В настоящее время интерес к вопросам описания термомеханического поведения полимеров при фазовых превращениях обусловлен их широким использованием в тех случаях, когда у конструктивных материалов требуется наличие памяти формы. А в полимерах этот эффект связан именно с фазовыми или релаксационными переходами. В работе [14] моделируется термомеханическое поведение полимерных материалов в условиях релаксационных переходов. Исследованиям отклика полимеров, обладающих эффектом памяти формы, на деформационные воздействия, посвящены публикации [11, 12, 15–20]. Так, в [11, 12] строится модель поведения материала, испытывающего переход из высокоэластичного состояния в застеклованное и обратно в процессе деформирования и сопутствующего изменения температуры. Проводится сопоставление результатов вычислений с экспериментальными данными.

Стоит отметить, что нередко предлагаемые модели базируются на гипотезе малости деформаций и предназначаются для описания изменения свойств полимерных материалов в достаточно узком температурном диапазоне и при конкретном механизме достижения эффекта памяти формы и не могут отображать другие термомеханические эффекты.

2. Моделирование термомеханического поведения кристаллизующейся пластины

С целью иллюстрации возможностей предложенных авторами ранее определяющих соотношений (см. [21]), сформулированных для условий больших деформаций, в данной работе решалась модельная задача деформирования при охлаждении бесконечной плиты постоянной толщины, изготовленной из полиэтилена низкого давления. Изначально материал рассматриваемого тела нагревался до температуры, превышающей температуру плавления. Далее происходило охлаждение пластины, причем в материале протекали процессы кристаллизации, сопровождающиеся выделением тепла. Требовалось исследовать эволюцию деформированного состояния тела от воздействия возникающих в процессе охлаждения и кристаллизации температурных и усадочных деформаций.

Решение задачи осуществлялось в два этапа. На первом этапе решалась краевая задача нестационарной теплопроводности с учетом кристаллизации материала. На основе полученных данных об эволюции полей температуры и степени кристаллизации по толщине пластины с течением времени на втором этапе находилось решение краевой задачи механики кристаллизующегося полимера. Так как процесс деформирования пластины сопровождался большими температурными и усадочными деформациями, задача рассматривалась в рамках теории больших деформаций.

2.1. Решение теплокинетической задачи

Постановка задачи в рамках известной теплокинетической модели включала:

– нестационарное уравнение теплопроводности

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \rho(T)Q_k \dot{\alpha}(t), \quad x \in [0, L]; \quad (1)$$

– уравнение кинетики неизотермической кристаллизации [22, 23]

$$\frac{d\alpha}{dt} = K \exp\left(-\frac{U}{RT} - \frac{\Psi}{T_p - T}\right) (1 + A_0\alpha)(\alpha_p(T) - \alpha), \quad x \in [0, L]; \quad (2)$$

– граничные и начальные условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \lambda \frac{\partial T(L,t)}{\partial x} = -h(T(L,t) - T_{cp}(t)), \\ T(x,0) = T_n, \quad \alpha(x,0) = 0, \quad x \in [0, L]. \end{aligned} \quad (3)$$

В уравнениях (1)–(3) приняты обозначения: t — время; x — координата по толщине пластины; T — температура; ρ — плотность материала; c — удельная теплоемкость; λ — коэффициент теплопроводности; Q_k — тепловой эффект реакции кристаллизации; α — степень кристаллизации материала, которая в ходе процесса изменяется от нуля до некоторого предельного значения, зависящего от температуры и представляющего собой равновесную степень кристаллизации α_p , $\dot{\alpha} = \partial\alpha/\partial t$; R — универсальная газовая постоянная; K, U, ψ, A_0 — макрокинетические константы, определяемые экспериментально; h — коэффициент теплоотдачи; T_p — температура плавления; T_{cp} — температура окружающей среды; T_n — начальная температура; L — половина толщины пластины.

Численный расчет проведен для пластины из полиэтилена низкого давления. Значения его теплофизических и механических параметров брались из литературных источников [24–26], макрокинетические константы, входящие в уравнение кинетики неизотермической кристаллизации, приведены в таблице 1. При решении теплокинетической задачи учитывалась зависимость удельной теплоемкости, коэффициента теплопроводности, плотности и равновесной степени кристаллизации полиэтилена от температуры (Табл. 2) [24, 25].

Таблица 1. Значения макрокинетических констант

K, c^{-1}	$U, Дж/моль$	$\psi, К$	$T_p, К$	A_0	$Q_k, Дж/кг$
$2,33 \cdot 10^4$	30200	182	415	82	164000

Таблица 2. Значения теплофизических характеристик и равновесной степени кристаллизации в зависимости от температуры

$T, К$	$c, Дж/(кг \cdot К)$	$\lambda, Вт/(м \cdot К)$	$\rho, кг/м^3$	α_p
283	2250	0,228	947	0,9
341	2325	0,226	923	0,87
399	2395	0,182	832	0,41
457	2402	0,180	794	–

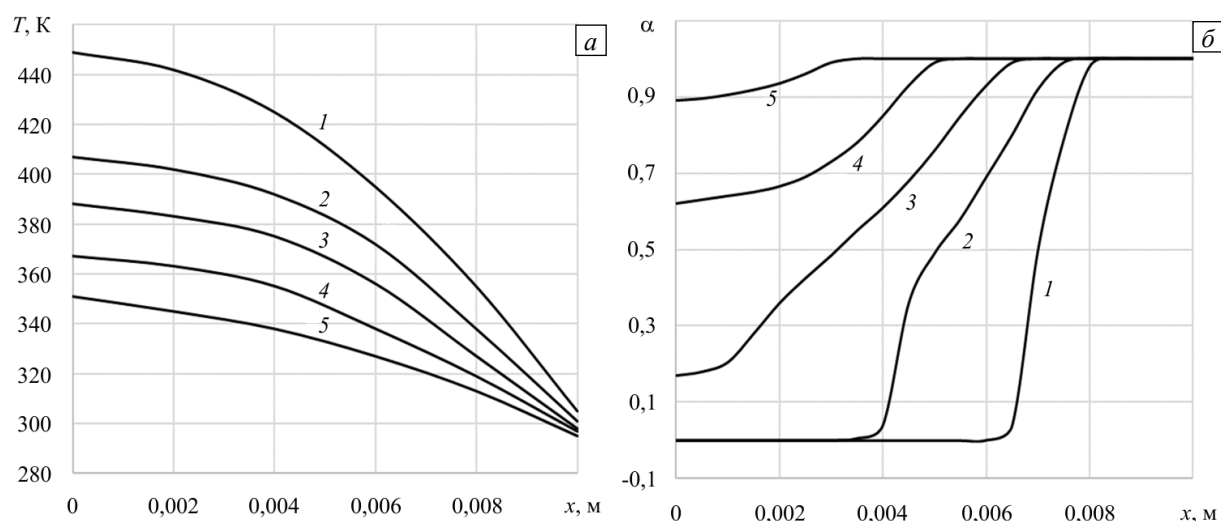


Рис. 1. Кривые распределения по толщине пластины температуры (а) и степени кристаллизации (б) в различные моменты времени t , с: 200 (кривые 1), 400 (2), 600 (3), 800 (4), 1000 (5)

Температурная краевая задача решалась численно, конечно-разностным методом. В силу симметрии рассматривалась только половина конструкции. Толщина пластины полагалась равной 20 мм, начальная температура тела составляла 450 К. Так как задача носит модельный характер, учет температурной зависимости коэффициента теплоотдачи не имеет принципиального значения для демонстрации возможностей предлагаемого подхода. Поэтому коэффициент теплоотдачи считался постоянным, приблизительно соответствующим случаю обтекания гладкой пластины ламинарным бесконечным потоком воды со скоростью 0,5 м/с [27]. Его величина равнялась 450 Вт/(м²·К). Используемая сетка содержала 100 узлов по координате x . Временной шаг составлял 0,5 с. Процесс счета прекращался при достижении во всех точках равновесной степени кристаллизации.

Решение уравнения кинетики неизотермической кристаллизации находилось на каждом шаге алгоритма решения краевой задачи и определялось численно методом Рунге–Кутты четвертого порядка [28]. Для обеспечения устойчивости счета временной шаг составлял при этом 0,005 с.

На рисунке 1 представлены кривые распределения температуры и степени кристаллизации для различных моментов времени.

2.2. Решение краевой задачи механики кристаллизующегося полимера

Для решения задачи механики использовалась «слабая» вариационная постановка, которая для обсуждаемого случая имеет вид [29]:

$$\int_{V_0} \mathbf{P}_H \cdot \delta \mathbf{C} dV_0 = 0, \quad (4)$$

где \mathbf{P}_H — тензор Пиолы–Кирхгофа второго рода, \mathbf{C} — тензор деформаций Коши–Грина, V_0 — начальный объем тела. К достоинствам вариационной постановки стоит отнести то, что она сформулирована в исходной конфигурации, что существенно упрощает построение численных алгоритмов расчета.

Связь тензора Пиолы–Кирхгофа, характеризующего напряженное состояние материала, с упругим потенциалом W определялась как

$$\mathbf{P}_H = 2\partial W(\mathbf{G}_t^x) / \partial \mathbf{G}_t^x,$$

где \mathbf{G}_t^x — тензор меры деформаций Коши–Грина в текущий момент времени t . Связь тензора меры деформаций Коши–Грина с тензором деформаций Коши–Грина задавалась выражением $\mathbf{C} = (\mathbf{G}_t^x - \mathbf{g})/2$, где \mathbf{g} — метрический тензор. Определяющие соотношения для упругого кристаллизующегося полимерного материала брались в форме [29]:

$$W(\mathbf{G}_t^x) = (1 - \alpha(t))W_a(\mathbf{G}_t^x) + \int_0^{\alpha(t)} W_{kp} \left((\mathbf{F}_\tau^T)^{-1} \cdot \mathbf{G}_t^x \cdot \mathbf{F}_\tau^{-1} \right) d\alpha(\tau). \quad (5)$$

В (5) $\mathbf{F}_\tau = \left(\nabla \mathfrak{R} \right)^T$ — тензор-градиент места, описывающий переход из конфигурации, соответствующей моменту времени τ , в текущую конфигурацию, ∇ — оператор Гамильтона, определенный относительно конфигурации, отвечающей моменту времени τ , \mathfrak{R} — радиус-вектор точки в текущей конфигурации, $(\mathbf{F}_\tau)^{-1}$, $(\mathbf{F}_\tau^T)^{-1}$ — обратные величины тензора-градиента места \mathbf{F}_τ и тензора, транспонированного по отношению к нему, W_a , W_{kp} — упругие потенциалы аморфной и кристаллической фаз материала.

Используя в качестве упругого потенциала двухконстантный потенциал Пенга–Ландела [30], выражение связи тензора Пиолы–Кирхгофа второго рода \mathbf{P}_H с тензором меры деформаций Коши–Грина записывали следующим образом:

$$\mathbf{P}_H(t) = \left\{ \mu^a \left[\left(I_3(\mathbf{G}_t^x) \right)^{-1/3} \cdot \left(\mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_t^x)}{3} (\mathbf{G}_t^x)^{-1} \right) \right] + B^a I_3(\mathbf{G}_t^x) \left(\mathbf{g} - \left(I_3(\mathbf{G}_t^x) \right)^{-1/2} (\mathbf{G}_t^x)^{-1} \right) \right\} (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \mu^{kp} \left[\left(I_3(\mathbf{G}_\tau^x) \right)^{-1/3} \cdot \left(\mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_\tau^x)}{3} (\mathbf{G}_\tau^x)^{-1} \right) \right] + B^{kp} I_3(\mathbf{G}_\tau^x) \left(\mathbf{g} - \left(I_3(\mathbf{G}_\tau^x) \right)^{-1/2} (\mathbf{G}_\tau^x)^{-1} \right) \right\} d\alpha(\tau), \quad (6)$$

где $\mathbf{G}_\tau^x = (\mathbf{F}_\tau^T)^{-1} \cdot \mathbf{G}_t^x \cdot (\mathbf{F}_\tau)^{-1}$, $\mu^a, B^a, \mu^{sp}, B^{sp}$, — механические характеристики аморфной и закристаллизовавшейся части материала соответственно, I_1, I_3 — первый и третий главные инварианты соответствующих тензоров второго ранга.

Формулировка (4) нелинейна, так как построена на основе нелинейных геометрических и физических соотношений. Для создания численного алгоритма определения деформированного состояния полимерной пластины при охлаждении с учетом как кристаллизации ее материала, так и возникающих температурных и структурных деформаций выполнялась линеаризация исходной постановки. Это позволило свести процедуру получения решения поставленной задачи к анализу последовательности решений линейно-упругих краевых задач в рамках теории малых деформаций. Наличие температурных и структурных деформаций материала, свойственных рассматриваемым процессам, является особенно важным при математической формулировке физических соотношений в случае использования нелинейных уравнений состояния. Так, в работе [31] описывается процедура, в основу которой положена линеаризация физических соотношений путем наложения малых деформаций на конечные в предположении малой величины температурных деформаций. При этом определяющие уравнения выводятся относительно промежуточной конфигурации, близкой к текущей.

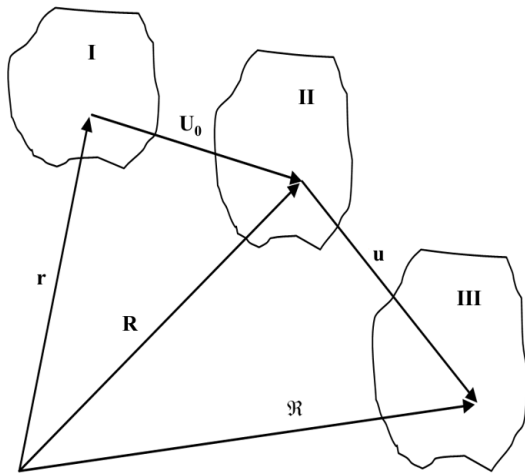


Рис. 2. Конфигурации, последовательно приобретаемые телом в процессе деформирования: I – начальная, II – промежуточная, III – конечная

Построение линеаризованных геометрических соотношений осуществляется следующим образом. Сначала исходное движение тела раскладывается на совокупность малых движений, вызываемых малыми приращениями внешних воздействий. Согласно идее наложения малых деформаций на конечные [32], движение тела из начальной конфигурации в конечную представляется как суперпозиция его движений через промежуточные конфигурации. При этом перемещения точек тела в произвольный момент времени записываются в виде суммы накопленных перемещений и малых перемещений при трансформации промежуточной конфигурации в конечную.

Предполагается, что в процессе деформирования тело последовательно проходит через три конфигурации (Рис. 2). Переход из начальной конфигурации в промежуточную определяется вектором перемещений \mathbf{U}_0 , а из промежуточной в конечную — вектором малых перемещений \mathbf{u} .

С учетом малости перемещений \mathbf{u} последнего перехода тензор упругих деформаций Коши–Грина, описывающий переход из начальной конфигурации в конечную, может быть представлен в виде суммы двух слагаемых:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_0 + \mathbf{F}_0^T \cdot \mathbf{e}_E \cdot \mathbf{F}_0 \quad (7)$$

Здесь: $\mathbf{C}_0, \mathbf{F}_0$ — тензор упругих деформаций и тензор-градиент места, описывающие переход из начальной конфигурации в промежуточную; $\mathbf{e}_E = \mathbf{e} - \mathbf{e}_\theta$ — тензор малых упругих деформаций, возникающих на переходе из промежуточной конфигурации в конечную, и представляемый как разность полных деформаций $\mathbf{e} = \left[\frac{\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \left(\frac{\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T}{2} \right]$ и деформаций \mathbf{e}_θ , для аморфной фазы обуславливаемых температурными деформациями, а для кристаллической фазы — как температурными, так и структурными деформациями материала на рассматриваемом переходе; оператор Гамильтона $\overset{0}{\nabla}$ записан относительно промежуточной конфигурации. Таким образом, полученные соотношения (7) стали линейно зависеть от вектора малых перемещений \mathbf{u} , определяющих переход в конечную конфигурацию.

Процедура линеаризации физических соотношений состояла в разложении выражения (6) в ряд Тейлора с учетом линейных слагаемых. В предположении ограниченности деформаций в рассматриваемом процессе линеаризованные физические соотношения записывались следующим образом:

$$\mathbf{P}_H(t) = (\mathbf{P}_H)^0 + {}^4\mathbf{D}^a(\mathbf{C}_0) \cdot (\mathbf{F}_0^T \cdot (\mathbf{e} - \mathbf{e}_\theta^a) \cdot \mathbf{F}_0) (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} {}^4\mathbf{D}^{sp}(\mathbf{C}_{\tau_0}) \cdot (\mathbf{F}_0^T \cdot (\mathbf{e} - \mathbf{e}_\theta^{sp} - \mathbf{e}_s^{sp}) \cdot \mathbf{F}_0) d\alpha(\tau) \quad (8)$$

Здесь: \mathbf{e}_0^a , \mathbf{e}_0^{kp} , \mathbf{e}_s^{kp} — тензоры, описывающие вклад малых температурных и структурных деформаций, возникающих при переходе из промежуточной конфигурации в конечную: $\mathbf{e}_0^a = K_T^a (T(t) - T_0) \mathbf{g}$, $\mathbf{e}_0^{kp} = K_T^{kp} (T(t) - T(\tau)) \mathbf{g}$, $\mathbf{e}_s^{kp} = k \mathbf{g}$; K_T^a , K_T^{kp} — коэффициенты температурного расширения для аморфной и кристаллической фаз; k — коэффициент структурной усадки; \mathbf{C}_{τ_0} — тензор перехода из конфигурации, соответствующей моменту времени τ , в промежуточную; ${}^4\mathbf{D}^a$, ${}^4\mathbf{D}^{kp}$ — тензоры четвертого ранга «касательных жесткостей» аморфной и кристаллической фаз, компоненты которых зависят от \mathbf{C}_0 и \mathbf{C}_{τ_0} и определяются в результате линеаризации соотношений (6).

В результате процедур линеаризации вариационная постановка (4) сводилась к виду:

$$\int_{V_0} \left[(\mathbf{P}_H)^0 + {}^4\mathbf{D}^a(\mathbf{C}_0) \cdot (\mathbf{F}_0^T \cdot (\mathbf{e} - \mathbf{e}_0^a) \cdot \mathbf{F}_0) (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} {}^4\mathbf{D}^{kp}(\mathbf{C}_{\tau_0}) \cdot (\mathbf{F}_0^T \cdot (\mathbf{e} - \mathbf{e}_0^{kp} - \mathbf{e}_s) \cdot \mathbf{F}_0) d\alpha(\tau) \right] \cdot \delta \mathbf{C}^* dV_0 = 0, \quad (9)$$

где $\mathbf{C}^* = \mathbf{F}_0^T \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{F}_0$.

Выражение (9), сформулированное относительно приращения перемещений, возникающих вследствие малых приращений температурных и структурных деформаций, стало линейным. Определение эволюции поля перемещений свелось к решению последовательности линейных задач относительно приращений перемещений на временных шагах.

Получение решения краевых задач механики для тел сложной пространственной конфигурации невозможно без использования численных методик. Среди существующих численных подходов в настоящее время наиболее широко применяется метод конечных элементов [33], который и был выбран для построения дискретного аналога рассматриваемой задачи. Конечно-элементный подход к аппроксимации физических соотношений приводит к линейным алгебраическим соотношениям, которые в матричной форме имеют вид:

$$\{P\} = \{P_0\} + [D^a(\mathbf{U}_0)] \left([B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)] \{\delta^e\} - \{\Delta C_0^a\} \right) (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} [D^{kp}(\mathbf{U}_{0\tau})] \left([B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_{0\tau})] \{\delta^e\} - \{\Delta C_0^{kp}\} \right) d\alpha,$$

где $\{\delta^e\}$ — вектор узловых неизвестных (приращений перемещений на текущем временном шаге), $[B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]$ — матрица градиентов элемента, $\{\Delta C_0^a\}$ — вектор, учитывающий влияние приращений температурных деформаций для аморфной фазы; $\{\Delta C_0^{kp}\}$ — вектор, учитывающий влияние приращений температурных и структурных деформаций для кристаллической фазы, $[D^a(\mathbf{U}_0)]$, $[D^{kp}(\mathbf{U}_{0\tau})]$ — матрицы «касательных жесткостей» аморфной и кристаллической фаз материала.

Последнее соотношение может быть преобразовано к виду:

$$\{P\} = \{P_0\} + [D(\mathbf{U}_0)] [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)] \{\delta^e\} - [D^a(\mathbf{U}_0)] (1 - \alpha(t)) \{\Delta C_0^a\} - \int_0^{\alpha(t)} [D^{kp}(\mathbf{U}_{0\tau})] \{\Delta C_0^{kp}\} d\alpha,$$

где $[D(\mathbf{U}_0)] = [D^a(\mathbf{U}_0)] (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} [D^{kp}(\mathbf{U}_{0\tau})] d\alpha$.

Соотношение (9) тоже можно записать в матричной форме:

$$\sum_e \left([k]^e \delta^e - \{f_P\}^e - \{f_\Theta\}^e \right) = 0,$$

где символ \sum_e означает суммирование по элементам, $[k]^e$ — локальная матрица жесткости элемента, $\{f_P\}^e$, $\{f_\Theta\}^e$ — локальные векторы узловых сил, обусловленные накопленными напряжениями, температурными и структурными деформациями:

$$[k]^e = \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]^T [D(\mathbf{U}_0)] [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)] dV,$$

$$\{f_p\}^e = \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]^T \{P_0\} dV,$$

$$\{f_\Theta\}^e = - \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]^T \left([D^a(\mathbf{U}_0)](1 - \alpha(t)) \{\Delta C_\Theta^a\} - \int_0^{\alpha(t)} [D^{kp}(\mathbf{U}_{0\tau})] \{\Delta C_\Theta^{kp}\} d\alpha \right) dV.$$

В результате сборки для всего ансамбля конечных элементов, образующих сеточный аналог расчетной области, получается глобальная система:

$$[K(\mathbf{U}_0)]\{u\} = \{F_p\} + \{F_\Theta\}, \tag{10}$$

где $[K(\mathbf{U}_0)]$ — глобальная матрица перемещений системы, обладающая симметрией и зависящая от вектора накопленных перемещений \mathbf{U}_0 ; $\{F_p\}$, $\{F_\Theta\}$ — глобальные векторы «фиктивных» усилий, обусловленные накопленными к текущему шагу по времени напряжениями и возникающими на рассматриваемом переходе температурными и структурными деформациями.

Таким образом, определение эволюции деформированного состояния пластины при охлаждении с учетом кристаллизации материала в условиях больших деформаций свелось к решению последовательности линейных задач (10), сформулированных относительно приращений узловых перемещений. При этом оператор в левой части (10) следует переопределять на каждом шаге по времени. Изменения компонент тензора деформаций Коши–Грина и тензора Пиолы–Кирхгофа при переходе в очередную конфигурацию находятся из соотношений (7) и (8). Временную сетку при вычислении перемещений удобно брать совпадающей с временной сеткой температурной задачи.

Таблица 3. Значения механических констант

μ^a , Па	B^a , Па	μ^{kp} , Па	B^{kp} , Па
$4,19 \cdot 10^6$	$2,08 \cdot 10^8$	$5,93 \cdot 10^7$	$1,78 \cdot 10^8$

Значения параметров механической модели (6), использованные в расчетах, приведены в таблице 3. Были приняты следующие значения коэффициентов температурного расширения для аморфной и кристаллической фаз и коэффициента структурной усадки материала [24, 34]: $K_T^a = 2,8 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $K_T^{kp} = 0,9 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $k = -0,1$. Конечно-элементный аналог содержал 100 узлов. Временной шаг составлял 0,5 с.

Распределения перемещений по толщине пластины в различные моменты времени представлены на рисунке 3. Для сравнения приведены кривые, отвечающие решению аналогичной задачи на основе линейных физических и геометрических соотношений [22]. Как видно из графиков, с ростом времени расхождение результатов, полученных для нелинейной и линейной постановок рассматриваемой задачи, возрастает.

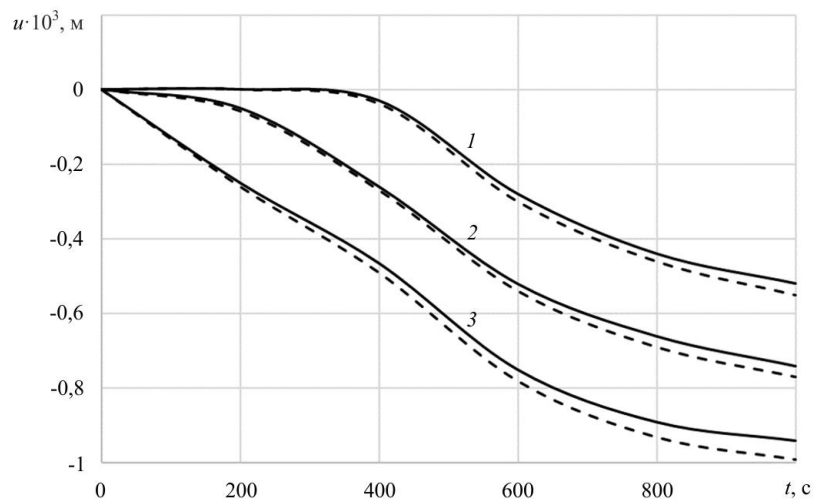


Рис. 3. Зависимости от времени перемещений характерных точек, имеющих различную координату x , м: 0,005 (кривые 1), 0,0075 (2), 0,01 (3); сплошные линии соответствуют результатам, полученным по нелинейной модели, пунктирные — по линейной

3. Выводы

С использованием предложенного подхода, основанного на процедуре линеаризации вариационной постановки краевой задачи термомеханики кристаллизующейся среды, исследован процесс эволюции деформированного состояния охлаждаемой полимерной плиты в условиях больших деформаций. Полученные результаты свидетельствуют, что к моменту завершения процесса кристаллизации деформации в пластине достигают 9,8%, что говорит о необходимости решения рассматриваемой задачи в рамках теории конечных деформаций. Выявлено, что данные, рассчитанные по нелинейным определяющим соотношениям, построенным авторами ранее, отличаются от данных, вычисленных в рамках линейной модели, при этом их расхождение увеличивается в течение всего процесса кристаллизации.

Литература

1. Korotkov V.N., Turusov R.A., Dzhavadyan E.A., Rozenberg B.A. Production stresses during the solidification of cylindrical articles formed from polymer composite materials // *Mech. Compos. Mater.* 1986. Vol. 22. P. 99-103. <https://doi.org/10.1007/BF00606015>
2. Shaffer B.W., Lewitsky M. Thermoelastic constitutive equation for chemically hardening materials // *J. Appl. Mech.* 1974. Vol. 41. P. 652-657. <https://doi.org/10.1115/1.3423365>
3. Lewitsky M., Shaffer B.W. Residual thermal stresses in a solid sphere cast from a thermosetting material // *J. Appl. Mech.* 1975. Vol. 42. P. 651-655. <https://doi.org/10.1115/1.3423658>
4. Голотина Л.А., Матвеевко В.П., Шардаков И.Н. Анализ особенностей деформационных процессов в аморфно-кристаллических полимерах // *Изв. РАН. МТТ.* 2012. № 6. С. 44-51. (English version <https://doi.org/10.3103/S0025654412060040>)
5. Boyce M.C., Socrate S., Llanas P.G. Constitutive model for the finite deformation stress-strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition // *Polymer.* 2000. Vol. 41. P. 2183-2201. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(99\)00406-1](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(99)00406-1)
6. Dupaix R.B., Boyce M.C. Constitutive modeling of the finite strain behavior of amorphous polymers in and above the glass transition // *Mech. Mater.* 2007. Vol. 39. P. 39-52. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2006.02.006>
7. Richeton J., Ahzi S., Vecchio K.S., Jiang F.C., Makradi A. Modeling and validation of the large deformation inelastic response of amorphous polymers over a wide range of temperatures and strain-rates // *Int. J. Solid. Struct.* 2007. Vol. 44. P. 7938-7954. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2007.05.018>
8. Anand L., Ames N.M., Srivastava V., Chester S.A. A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation // *Int. J. Plast.* 2009. Vol. 25. P. 1474-1494. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2008.11.004>
9. Srivastava V., Chester S.A., Ames N.M., Anand L. A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition // *Int. J. Plast.* 2010. Vol. 26. P. 1138-1182. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2010.01.004>
10. Тихомирова К.А., Труфанов Н.А., Шардаков И.Н. Численное и экспериментальное исследование термомеханического поведения стеклющихся полимеров в случае больших деформаций // *Вычисл. мех. сплош. сред.* 2013. Т. 6, № 4. С. 475-482. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2013.6.4.52>
11. Роговой А.А., Столбова О.С. Конечные деформации в сплавах и полимерах с памятью формы // *Ученые записки КНАГТУ.* 2018. Т. 1, № 3(35). С. 6-17.
12. Роговой А.А., Столбова О.С. Моделирование термомеханических процессов в полимерах с памятью формы при конечных деформациях // *ПМТФ.* 2015. Т. 56, № 6. С. 143-157. <https://doi.org/10.15372/PMTF20150616>
13. Varghese A.G., Batra R.C. Constitutive equations for thermomechanical deformations of glassy polymers // *Int. J. Solid. Struct.* 2009. Vol. 46. P. 4079-4094. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2009.08.006>
14. Матвеевко В.П., Сметаников О.Ю., Труфанов Н.А., Шардаков И.Н. Термомеханика полимерных материалов в условиях релаксационного перехода. М.: Физматлит, 2009. 176 с.
15. Qi H.J., Nguyen T.D., Castroa F., Yakacki C.M., Shandas R. Finite deformation thermo-mechanical behavior of thermally induced shape memory polymers // *J. Mech. Phys. Solid.* 2008. Vol. 56. P. 1730-1751. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2007.12.002>
16. Liu C., Qin H., Mather P.T. Review of progress in shape-memory polymers // *J. Mater. Chem.* 2007. Vol. 17. P. 1543-1558. <https://doi.org/10.1039/b615954k>
17. Liu Y., Gall K., Dunn M.L., Greenberg A.R., Diani J. Thermomechanics of shape memory polymers: Uniaxial experiments and constitutive modeling // *Int. J. Plast.* 2006. Vol. 22. P. 279-313. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2005.03.004>
18. Dietsch B., Tong T. A review: Features and benefits of shape memory polymers (SMPs) // *J. Adv. Mater.* 2007. Vol. 39, No. 2. P. 3-12.
19. Gunes I.S., Jana S.C. Shape memory polymers and their nanocomposites: a review of science and technology of new multifunctional materials // *J. Nanosci. Nanotechnol.* 2008. Vol. 8. P. 1616-1637.
20. Тихомирова К.А., Труфанов Н.А. Экспериментальное обоснование определяющих соотношений для аморфного полимера с памятью формы при больших деформациях // *Вестник ПНИПУ. Механика.* 2015. № 2. С. 151-163. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2015.2.10>
21. Куликова Т.Г. К описанию деформирования кристаллизующегося полимерного материала с учетом больших деформаций // *Вестник ПГТУ. Механика.* 2010. № 3. С. 55-71.
22. Shardakov I.N., Matveyenko V.P., Pistsov N.V., Beghishev V.P. Simulation of thermomechanical processes in crystallising polymer // *Polymer Eng. Sci.* 1997. Vol. 37. P. 1270-1279. <https://doi.org/10.1002/pen.11772>

23. Malkin A.Ya., Bolgov S.A., Begishev V.P., Mazalov O.S. Estimation of the crystallinity degree of the polymer obtained from melt at different cooling rates // ИФЖ. 1991. Т. 61, № 3. С. 399-402. <https://doi.org/10.1007/BF00872884>
24. Теплофизические и реологические характеристики полимеров: Справочник / Под ред. Ю.С. Липатова. Киев: Наукова думка, 1977. 244 с.
25. Пивень А.Н., Гречаная Н.А., Чернобыльский Н.И. Теплофизические свойства полимерных материалов. Киев: Вища школа, 1976. 180 с.
26. Нильсен Л. Механические свойства полимеров и полимерных композиций. М.: Химия, 1978. 312 с.
27. Цветков Ф.Ф., Григорьев Б.А. Теплообмен. М.: Издательство МЭИ, 2005. 550 с.
28. Бахалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001. 630 с.
29. Куликов Р.Г., Куликова Т.Г., Сметанников О.Ю. Численное исследование термомеханического поведения кристаллизующейся полимерной среды с учетом больших деформаций // Вестник ПНИПУ. Механика. 2018. № 1. С. 18-28. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2018.1.02>
30. Адамов А.А., Матвеев В.П., Труфанов Н.А., Шардаков И.Н. Методы прикладной вязкоупругости. Екатеринбург: ИМСС УрО РАН, 2003. 411 с.
31. Rogovoy A.A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations // Continuum Mech. Thermodyn. 2012. Vol. 24. P. 81-114. <http://dx.doi.org/10.1007/s00161-011-0220-y>
32. Rogovoy A.A. Определяющие соотношения для конечных упруго-неупругих деформаций // ПМТФ. 2005. Т. 46, № 5. С. 138-149. (English version <https://doi.org/10.1007/s10808-005-0130-5>)
33. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. The finite element method. Vol. 1. The basis. Butterworth-Heinemann, 2000. 708 p.
34. Малкин А.Я., Безишев В.П. Химическое формирование полимеров. М.: Химия, 1991. 240 с.

References

1. Korotkov V.N., Turusov R.A., Dzhavadyan E.A., Rozenberg B.A. Production stresses during the solidification of cylindrical articles formed from polymer composite materials. *Mech. Compos. Mater.*, 1986, vol. 22, pp. 99-103. <https://doi.org/10.1007/BF00606015>
2. Shaffer B.W., Lewitsky M. Thermoelastic constitutive equation for chemically hardening materials. *J. Appl. Mech.*, 1974, vol. 41, pp. 652-657. <https://doi.org/10.1115/1.3423365>
3. Lewitsky M., Shaffer B.W. Residual thermal stresses in a solid sphere cast from a thermosetting material. *J. Appl. Mech.*, 1975, vol. 42, pp. 651-655. <https://doi.org/10.1115/1.3423658>
4. Golotina L.A., Matveenko V.P., Shardakov I.N. Analysis of deformation process characteristics in amorphous-crystalline polymers. *Mech. Solids*, 2012, vol. 47, pp. 634-640. <https://doi.org/10.3103/S0025654412060040>
5. Boyce M.C., Socrate S., Llana P.G. Constitutive model for the finite deformation stress-strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition. *Polymer*, 2000, vol. 41, pp. 2183-2201. [https://doi.org/10.1016/S0032-3861\(99\)00406-1](https://doi.org/10.1016/S0032-3861(99)00406-1)
6. Dupaix R.B., Boyce M.C. Constitutive modeling of the finite strain behavior of amorphous polymers in and above the glass transition. *Mech. Mater.*, 2007, vol. 39, pp. 39-52. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2006.02.006>
7. Richeton J., Ahzi S., Vecchio K.S., Jiang F.C., Makradi A. Modeling and validation of the large deformation inelastic response of amorphous polymers over a wide range of temperatures and strain-rates. *Int. J. Solid. Struct.*, 2007, vol. 44, pp. 7938-7954. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2007.05.018>
8. Anand L., Ames N.M., Srivastava V., Chester S.A. A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation. *Int. J. Plast.*, 2009, vol. 25, pp. 1474-1494. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2008.11.004>
9. Srivastava V., Chester S.A., Ames N.M., Anand L. A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition. *Int. J. Plast.*, 2010, vol. 26, pp. 1138-1182. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2010.01.004>
10. Tikhomirova K.A., Trufanov N.A., Shardakov I.N. Numerical and experimental study of thermomechanical behavior of glassy polymers in the case of large deformations. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2013, vol. 6, no 4, pp. 475-482. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2013.6.4.52>
11. Rogovoi A.A., Stolbova O.S. Final deformations in alloys and polymers with memory of the shape. *Uchenyye zapiski KnAGTU – Scholarly Notes of Komsomolsk-na-Amure State Technical University*, 2018, vol. 1, no. 3(35), pp. 6-17.
12. Rogovoi A.A., Stolbova O.S. Modeling thermomechanical processes in shape memory polymers under finite deformations. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2015, vol. 56, pp. 1059-1070. <https://doi.org/10.1134/S0021894415060164>
13. Varghese A.G., Batra R.C. Constitutive equations for thermomechanical deformations of glassy polymers. *Int. J. Solid. Struct.*, 2009, vol. 46, pp. 4079-4094. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2009.08.006>
14. Matveenko V.P., Smetannikov O.Yu., Trufanov N.A., Shardakov I.N. *Termomekhanika polimernykh materialov v usloviyakh relaksatsionnogo perekhoda* [Thermomechanics of polymer materials in a relaxation transition]. Moscow, Fizmatlit, 2009. 176 p.
15. Qi H.J., Nguyen T.D., Castroa F., Yakacki C.M., Shandas R. Finite deformation thermo-mechanical behavior of thermally induced shape memory polymers. *J. Mech. Phys. Solid.*, 2008, vol. 56, pp. 1730-1751. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2007.12.002>
16. Liu C., Qin H., Mather P.T. Review of progress in shape-memory polymers. *J. Mater. Chem.*, 2007, vol. 17, pp. 1543-1558. <https://doi.org/10.1039/b615954k>
17. Liu Y., Gall K., Dunn M.L., Greenberg A.R., Diani J. Thermomechanics of shape memory polymers: Uniaxial experiments and constitutive modeling. *Int. J. Plast.*, 2006, vol. 22, pp. 279-313. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2005.03.004>
18. Dietsch B., Tong T. A review: Features and benefits of shape memory polymers (SMPs). *J. Adv. Mater.*, 2007, vol. 39, no. 2, pp. 3-12.

19. Gunes I.S., Jana S.C. Shape memory polymers and their nanocomposites: a review of science and technology of new multifunctional materials. *J. Nanosci. Nanotechnol.*, 2008, vol. 8, pp. 1616-1637.
20. Tikhomirova K.A., Trufanov N.A. Experimental calibration of constitutive model for an amorphous shape memory polymer under large deformations. *Vestnik PNIPU. Mekhanika – PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015, no. 2, pp. 151-163. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2015.2.10>
21. Kulikova T.G. To the description of crystallizing polymer material's deformation with regard to large deformations. *Vestnik PGTU. Mekhanika – Bulletin of Perm State Technical University. Mechanics*, 2010, no. 3, pp. 55-71.
22. Shardakov I.N., Matveyenko V.P., Pistsov N.V., Beghishev V.P. Simulation of thermomechanical processes in crystallising polymer. *Polymer Eng. Sci.*, 1997, vol. 37, pp. 1270-1279. <https://doi.org/10.1002/pen.11772>
23. Malkin A.Ya., Bolgov S.A., Begishev V.P., Mazalov O.S. Degree of crystalline structure of polymer obtained from melt at various cooling rates. *Journal of Engineering Physics*, 1991, vol. 61, pp. 1092-1095. <https://doi.org/10.1007/BF00872884>
24. Lipatov Yu.S. (ed.) *Teplofizicheskiye i reologicheskiye kharakteristiki polimerov: Spravochnik* [Thermophysical and rheological characteristics of polymers: Handbook]. Kiev, Naukova dumka, 1977. 244 p.
25. Piven' A.N., Grechanaya N.A., Chernobyl'skiy N.I. *Teplofizicheskiye svoystva polimernykh materialov* [Thermophysical properties of polymeric materials]. Kiev, Vishcha shkola, 1976. 180 p.
26. Nielsen L.E. *Mechanical properties of polymers and composites*. New York, Marcel Dekker, INC., 1974. 274 p.
27. Tsvetkov F.F., Grigor'yev B.A. *Teplomassoobmen* [Heat and mass transfer]. Moscow, Izdatel'stvo MEI, 2005. 550 p.
28. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. *Chislennyye metody* [Numerical methods]. Moscow, Laboratoriya Bazovykh Znaniy, 2001. 630 p.
29. Kulikov R.G., Kulikova T.G., Smetannikov O.Yu. Numerical study of a thermomechanical behavior of a crystallizing polymer medium with regard to finite deformations. *Vestnik PNIPU. Mekhanika – PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no. 1, pp. 18-28. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2018.1.02>
30. Adamov A.A., Matveyenko V.P., Trufanov N.A., Shardakov I.N. *Metody prikladnoy vyazkouprugosti* [Applied viscoelasticity methods]. Ekaterinburg, ICMM UB RAS, 2003. 411 p.
31. Rogovoy A.A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 2012, vol. 24, pp. 81-114. <http://dx.doi.org/10.1007/s00161-011-0220-y>
32. Rogovoi A.A. Constitutive relations for finite elastic-inelastic strains. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2005, vol. 46, pp. 730-739. <https://doi.org/10.1007/s10808-005-0130-5>
33. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. *The finite element method. Vol. 1. The basis*. Butterworth-Heinemann, 2000. 708 p.
34. Malkin A.Ya., Begishev V.P. *Khimicheskoye formovaniye polimerov* [Chemical molding of polymers]. Moscow, Khimiya, 1991. 240 p.

Поступила в редакцию 10.02.2021; после доработки 20.03.2021; принята к опубликованию 20.03.2021

Сведения об авторах

Куликов Роман Георгиевич, кфмн, доц., Пермский государственный национальный исследовательский университет (ПНИПУ), 614990, г. Пермь, Комсомольский пр-т, д. 29; e-mail: kulrtg@mail.ru

Куликова Татьяна Георгиевна, кфмн, доц., ПНИПУ; e-mail: kulrtg2@mail.ru

Сметанников Олег Юрьевич, дтн, доц., ПНИПУ; e-mail: sou2009@mail.ru