

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ТЕРМОМЕХАНИКИ ДЛЯ КРИСТАЛЛИЗУЮЩЕГОСЯ ВЯЗКОУПРУГОГО ПОЛИМЕРА

Т.Г. Куликова, Н.А. Труфанов

Пермский государственный технический университет, Пермь, 614600, Россия

Приводится постановка краевой задачи термомеханики кристаллизующейся полимерной среды, включающая физические соотношения, учитывающие вязкоупругие свойства полимера. Рассматриваются алгоритмы численной реализации теплокинетической задачи и задачи определения напряженно-деформированного состояния затвердевающей системы для осесимметричного случая. Обсуждаются особенности численной реализации решения механической задачи. Приведено решение задачи о формировании технологических напряжений в неразъемном соединении стальной и полиэтиленовой труб.

NUMERICAL SOLUTION OF A THERMOMECHANICAL BOUNDARY-VALUE PROBLEM FOR CRYSTALLIZING VISCOELASTIC POLYMER

T.G. Kulikova and N.A. Trufanov

Perm State Technical University, Perm, 614600, Russia

A formulation of the thermomechanical boundary-value problem for crystallizing polymeric media considering the viscoelastic properties of the polymer is presented. The algorithms for numerical realization of thermo-kinetic and mechanical problems of a solidifying system in axisymmetric case are considered. The peculiarities of the numerical solution of the mechanical problem are discussed. The solution to the problem of technological stress formation at a permanent joint of steel and polyethylene pipes is given.

Технологический процесс производства значительной части полимерных изделий и конструкций содержит этап охлаждения материала, сопровождающийся его кристаллизацией. Вследствие температурной и деформационной неоднородности в таких изделиях формируются технологические и остаточные напряжения, которые могут приводить к снижению эксплуатационных качеств изделий и даже их разрушению еще на стадии изготовления. Поэтому проблема описания термомеханических процессов в полимерных материалах в условиях фазового перехода является актуальной. При этом в силу сложности математического описания реальных процессов и изделий решение задач термомеханики для кристаллизующегося вязкоупругого полимера возможно только численными методами.

В настоящей статье используются приведенные в работе [1] феноменологические определяющие соотношения для кристаллизующегося вязкоупругого полимера, непрерывным образом отражающие связь тензоров напряжений и деформаций в широком диапазоне изменения температур. Соотношения основаны на представлении среды в виде композиции расплавленного и полностью закристаллизованного материала с учетом истории непрерывного зарождения и деформирования новой фазы в интервале температур фазовых превращений. Для определения материальных функций и констант предполагается использование экспериментов на образцах при температурах, соответствующих отдельным фазовым состояниям.

1. Постановка краевой термомеханической задачи для кристаллизующегося полимера

В предположении, что технологические напряжения не влияют на температуру и протекание процесса кристаллизации, возможно разделение исходной задачи на две самостоятельные задачи:

1) задачу определения полей распределения температуры и степени кристаллизации, или теплокинетическую задачу;

2) краевую задачу определения напряженно-деформированного состояния (НДС) затвердевающей системы.

Интенсивное тепловыделение при кристаллизации и теплоотдача в окружающую среду, низкая теплопроводность полимерных материалов, зависимость процесса кристаллизации от температуры приводят в процессе изготовления изделий из полимеров к существенно неоднородным полям температуры и степени кристаллизации. Прогнозирование температурного и конверсионного полей в ходе процесса может быть осуществлено в рамках известной теплокинетической модели, согласно которой постановка задачи включает [2]:

– нестационарное уравнение теплопроводности с переменными коэффициентами

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda(T)\operatorname{grad}(T(\mathbf{x},t))) + \rho(T)\dot{Q}, \quad \mathbf{x} \in V; \quad (1)$$

– уравнение кинетики неизотермической кристаллизации

$$\frac{d\alpha(\mathbf{x},t)}{dt} = K_1 \exp\left(-\frac{U_1}{RT(\mathbf{x},t)} - \frac{\Psi}{T_p - T(\mathbf{x},t)}\right) (1 + A_0\alpha(\mathbf{x},t)) (\alpha_p(T) - \alpha(\mathbf{x},t)), \quad \mathbf{x} \in V; \quad (2)$$

– начальные условия

$$\alpha(\mathbf{x},0) = 0, \quad T(\mathbf{x},0) = T_0; \quad (3)$$

– граничные условия

$$\lambda(T)\mathbf{n} \cdot \operatorname{grad}(T(\mathbf{x},t)) = h(T(\mathbf{x},t) - T_{cp}), \quad \mathbf{x} \in S_1; \quad \mathbf{n} \cdot \operatorname{grad}(T(\mathbf{x},t)) = 0, \quad \mathbf{x} \in S_2; \quad (4)$$

$$T(\mathbf{x},t) = T^*(\mathbf{x},t), \quad \mathbf{x} \in S_3. \quad (5)$$

Здесь c – удельная теплоемкость; ρ – плотность материала; λ – коэффициент теплопроводности; T – температура; t – время; \mathbf{x} – радиус-вектор произвольной точки тела; \mathbf{n} – вектор внешней единичной нормали к поверхности тела; $\dot{Q} = Q_k d\alpha/dt$ – скорость выделения тепла в ходе протекания реакции кристаллизации [2]; Q_k – тепловой эффект реакции кристаллизации; α – степень кристаллизации материала, которая в ходе процесса принимает значения в пределах от нуля до некоторого предельного значения, зависящего от температуры и представляющего собой равновесную степень кристаллизации α_p ; R – универсальная газовая постоянная; T_p – температура плавления; K_1, U_1, Ψ, A_0 – макрокинетические константы, определяемые экспериментально; V – область затвердевающего полимера; h – коэффициент

конвективного теплообмена с окружающей средой; T_{cp} – температура окружающей среды; T^* – заданная температура; S_1 – часть поверхности, на которой заданы условия конвективного теплообмена; S_2 – часть поверхности, на которой отсутствует теплообмен; S_3 – часть поверхности, на которой задан закон изменения температуры.

Уравнения (1) и (2) образуют связанную систему уравнений и потому решаются совместно. Результатом решения теплокинетической задачи являются пространственно-временные поля распределения температуры и степени кристаллизации, с учетом которых далее решается задача определения НДС изделия.

Постановка краевой квазистатической задачи определения НДС затвердевающей системы включает:

– уравнение равновесия

$$\operatorname{div} \hat{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in V; \quad (6)$$

– краевые условия

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in S_u, \quad (7)$$

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{p}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in S_\sigma; \quad (8)$$

– соотношения Коши

$$\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^T \right), \quad \mathbf{x} \in V; \quad (9)$$

– физические соотношения [1]

$$\hat{\sigma}(\mathbf{x}, t) - \sigma(\mathbf{x}, t) \hat{E} = \int_0^{\alpha(t)} \left[\int_\omega^t R_1(t - \omega, \tau - \omega) d \left(\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{3} \theta(\mathbf{x}, \tau) \hat{E} \right) \right] d\alpha(\omega), \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{x}, t) = & B_a^\infty (\theta(\mathbf{x}, t) - \theta_T^a(\mathbf{x}, t)) (1 - \alpha(\mathbf{x}, t)) + \\ & + \int_0^{\alpha(t)} \left[\int_\omega^t R_2(t - \omega, \tau - \omega) d (\theta(\mathbf{x}, \tau) - \theta_T^{sp}(\mathbf{x}, \tau)) + 3kR_2(t - \omega, 0) \right] d\alpha(\omega) + \\ & + B_a^\infty \int_0^{\alpha(t)} (\theta(\mathbf{x}, \tau) - \theta_T^a(\mathbf{x}, \tau)) d\alpha(\tau), \quad \mathbf{x} \in V. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь \mathbf{u} , \mathbf{f} , \mathbf{p} – векторы перемещений, массовых и поверхностных сил соответственно; \mathbf{U} – заданный вектор перемещений; S_u , S_σ – границы области V , на которых заданы краевые условия по перемещениям и по нагрузкам соответственно; $\hat{\sigma}$, $\hat{\varepsilon}$ – тензоры напряжений и деформаций соответственно; $R_1(t, \tau)$, $R_2(t, \tau)$ – независимые функции сдвиговой и объемной релаксации кристаллической фазы; $\theta = \varepsilon_{kk}$ – объемная деформация; \hat{E} – единичный тензор; $\sigma = \sigma_{kk} / 3$ – среднее нормальное напряжение; B_a^∞ – длительный объемный модуль аморфной фазы; θ_T^a , θ_T^{sp} –

температурные объемные деформации полимера в аморфном и кристаллическом состоянии; k – коэффициент структурной усадки.

Механические свойства полимеров зависят от температуры. Если в состоянии, соответствующем равновесной степени кристалличности, материал проявляет терморологически простое поведение в опытах на сдвиговую и объемную релаксацию (или ползучесть), то возможно использование принципа температурно-временной аналогии с двумя независимыми функциями температурно-временного сдвига.

2. Численный алгоритм решения теплокинетической задачи

Изделия из полимерных материалов во многих случаях имеют цилиндрическую форму. Рассмотрим алгоритм численной реализации задачи (1)–(11) для осесимметричного случая в цилиндрической системе координат.

Нестационарное уравнение теплопроводности конкретизируем следующим образом [3]:

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right) + \rho(T)Q_k\dot{\alpha}(t), \quad (12)$$

где r, z – соответственно радиальная и осевая координаты.

С вариационной точки зрения решение краевой задачи для уравнения (12) заключается в отыскании такой функции $T(r, z, t)$, которая минимизирует следующий функционал [3]:

$$\chi = \int_V \frac{1}{2} \left[\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)^2 + \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 - 2 \left(\rho Q_k \dot{\alpha} - c \rho \frac{\partial T}{\partial t} \right) T \right] dV + \int_{S_1} \frac{h}{2} (T - T_{cp})^2 dS. \quad (13)$$

Решение задачи будем искать, используя метод конечных элементов в традиционной формулировке, следуя, например, работе [3]. В результате на каждом новом временном шаге t_{i+1} получаем систему линейных алгебраических уравнений относительно температуры в узлах конечно-элементной сетки.

Задачу Коши для дифференциального уравнения кинетики кристаллизации (2) в каждом узле конечно-элементной сетки k для момента времени t_{i+1} решаем методом Рунге-Кутты четвертого порядка [4]:

$$\alpha_k^{i+1} = \alpha_k^i + \frac{\tau_\alpha}{6} (b_1 + 2b_2 + 2b_3 + b_4), \quad b_1 = f(T_k^i, \alpha_k^i), \quad b_2 = f\left(\frac{T_k^i + T_k^{i+1}}{2}, \alpha_k^i + \frac{\tau_\alpha}{2} b_1\right),$$

$$b_3 = f\left(\frac{T_k^i + T_k^{i+1}}{2}, \alpha_k^i + \frac{\tau_\alpha}{2} b_2\right), \quad b_4 = f(T_k^{i+1}, \alpha_k^i + \tau_\alpha b_3),$$

где $f(T_k^i, \alpha_k^i) = K_1 \exp\left(-\frac{U_1}{RT_k^i} - \frac{\psi}{T_p - T_k^i}\right) (1 + A_0 \alpha_k^i) (\alpha_p(T_k^i) - \alpha_k^i)$; $\alpha_k^0 = 0$; $k = \overline{1, M_y}$

(M_y – количество узлов конечно-элементной сетки). В связи с тем, что скорость изменения степени кристаллизации существенно выше скорости изменения температуры, интегрирование уравнения (2) должно проводиться с более мелким шагом. В

рассматриваемой ниже задаче шаг временной сетки для численного решения уравнения (2) выберем в десять раз мельче, чем для уравнения (1).

3. Численный алгоритм решения краевой задачи термовязкоупругости для кристаллизующегося полимерного материала

Решение краевой задачи (6)–(11) осуществляем с использованием вариационного принципа возможных перемещений.

Искомые тензоры деформаций и напряжений содержат следующие компоненты: $\{\sigma\}^T = (\sigma_r, \sigma_\varphi, \sigma_z, \tau_{rz})$, $\{\varepsilon\}^T = (\varepsilon_r, \varepsilon_\varphi, \varepsilon_z, \gamma_{rz})$. Соотношения связи между деформациями и перемещениями имеют вид: $\varepsilon_r = \partial u_r / \partial r$, $\varepsilon_z = \partial u_z / \partial z$, $\varepsilon_\varphi = u_r / r$, $\gamma_{rz} = \partial u_r / \partial z + \partial u_z / \partial r$. Здесь u_r, u_z – перемещения точек среды в радиальном и осевом направлениях соответственно.

В матричной форме физические соотношения для рассматриваемой задачи согласно (10)–(11) могут быть записаны следующим образом:

$$\{\sigma\} = [A_1]\{\varepsilon\} + \{A_2\},$$

$$\text{где } [A_1] = B_a^\infty (1 - \alpha) \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix};$$

$$\{A_2\} = \begin{Bmatrix} \sigma_0^r \\ \sigma_0^\varphi \\ \sigma_0^z \\ \tau_0^{rz} \end{Bmatrix} = -3B_a^\infty a_a (1 - \alpha) (T - T_0) \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} - \int_0^t \int_0^\tau R_1(t - \omega, \tau - \omega) \frac{\dot{\theta}(\tau)}{3} \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} +$$

$$+ \begin{Bmatrix} \int_0^t \int_0^\tau R_1(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\varepsilon}_r(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \\ \int_0^t \int_0^\tau R_1(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\varepsilon}_\varphi(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \\ \int_0^t \int_0^\tau R_1(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\varepsilon}_z(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \\ \int_0^t \int_0^\tau R_1(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\gamma}_{rz}(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \end{Bmatrix} + \int_0^t \int_0^\tau R_2(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\theta}(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} +$$

$$+ 3k \int_0^t R_2(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\alpha}(\tau) d\tau \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} - \int_0^t \int_0^\tau R_2(t - \omega, \tau - \omega) 3a_{\text{кр}} \dot{T}(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} +$$

$$+ B_a^\infty \left(\int_0^t (\theta(\tau) - 3a_a(T(\tau) - T_0)) \dot{\alpha}(\tau) d\tau \right) (1, 1, 1, 0)^T.$$

Здесь $a_a, a_{кр}$ – коэффициенты линейного температурного расширения аморфной и кристаллической фазы, T_0 – начальная температура материала.

Интегралы, входящие в физические соотношения, приводят к необходимости пошагового вычисления НДС конструкции и пересчету интегралов на каждом временном шаге. Если $R_1(t - \omega, \tau - \omega) = R_1(t - \tau)$ и $R_2(t - \omega, \tau - \omega) = R_2(t - \tau)$, то двойные интегралы, входящие в состав $\{A_2\}$, могут быть сведены к однократным путем изменения порядка интегрирования. Тогда, например,

$$\int_0^t \int_0^\tau R_2(t - \omega, \tau - \omega) \dot{\theta}(\tau) \dot{\alpha}(\omega) d\tau d\omega = \int_0^t R_2(t - \tau) \alpha(\tau) \dot{\theta}(\tau) d\tau. \quad (14)$$

Для решения задачи применим метод конечных элементов с использованием пошаговой по времени процедуры сведения исходной задачи к последовательности упругих задач. Для этого физические соотношения запишем в форме:

$$\{\sigma\} = [D]\{\varepsilon\} + \{\sigma_0\},$$

где матрица $[D]$ представляет собой аналог матрицы упругих констант для упругой постановки, а $\{\sigma_0\}$ – аналог вектора начальных напряжений.

Процесс кристаллизации системы проходит две пограничные стадии. На первой стадии полимер является полностью аморфным ($\alpha = 0$), на второй – завершается процесс кристаллизации (степень превращения достигает максимально возможного значения). Поэтому матрица $[D]$ должна быть сформирована таким образом, чтобы, как в пограничных случаях, так и в промежутке между ними, она могла обеспечить хорошую обусловленность глобальной матрицы жесткости, получаемой в методе конечных элементов, и корректность поставленной задачи относительно нахождения узловых неизвестных из системы линейных алгебраических уравнений.

Выбор матрицы $[D]$ в виде $[A_1]$ недопустим, поскольку в этом случае определитель глобальной матрицы жесткости равен нулю.

Для обеспечения хорошей обусловленности матрицы $[D]$ на начальном этапе процесса используем прием введения в физические соотношения некоторой малой сдвиговой жесткости для расплава полимера. Тогда матрица $[D]$ принимает вид:

$$[D] = (1 - \alpha) \begin{bmatrix} B_a^\infty + \frac{4}{3}\mu_a & B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a & B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a & 0 \\ B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a & B_a^\infty + \frac{4}{3}\mu_a & B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a & 0 \\ B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a & B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a & B_a^\infty + \frac{4}{3}\mu_a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu_a \end{bmatrix},$$

где μ_a – параметр Ламе для расплава полимера. Кроме того, матрица $[D]$ должна содержать мгновенные модули для кристаллической фазы, что позволит обеспечить хорошую обусловленность глобальной матрицы жесткости по мере увеличения процентного содержания кристаллической фазы в общем объеме материала. С этой целью при замене наследственных интегралов типа (14) конечными суммами следует ориентироваться на то, чтобы последние включали слагаемые, содержащие компоненты тензора деформаций в рассматриваемый момент времени. Множители при неизвестных компонентах тензора деформаций также участвуют в формировании матрицы $[D]$.

Так как температура материала изменяется со временем, то и мгновенные модули полимера в кристаллическом состоянии также изменяются со временем. Кроме того, в ходе процесса растет степень кристаллизации. Поэтому матрицу $[D]$ уточняем на каждом временном шаге. Например, при использовании формулы трапеций для численного интегрирования наследственных интегралов в физических соотношениях получаем $[D]$ и $\{\sigma_0\}$ в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 [D(t)] &= \begin{bmatrix} d_1(t) & d_2(t) & d_2(t) & 0 \\ d_2(t) & d_1(t) & d_2(t) & 0 \\ d_2(t) & d_2(t) & d_1(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_3(t) \end{bmatrix}, \\
 \{\sigma_0(t)\} &= [-3B_a^\infty a_a (1 - \alpha(t))(T(t) - T_0) - \sum_{i=1}^n C_i R_1(\bar{t}_i) \alpha(\tau_i) \frac{\Delta\theta(\tau_i)}{3} + \\
 &+ \sum_{i=1}^n C_i R_2(\bar{t}_i) \alpha(\tau_i) \Delta\theta(\tau_i) + \\
 &+ \sum_{i=1}^n C_i 3kR_2(\bar{t}_i) \Delta\alpha(\tau_i) - \sum_{i=1}^{n+1} C_i R_2(\bar{t}_i) 3a_{\text{кр}} \alpha(\tau_i) \Delta T(\tau_i) + \sum_{i=1}^{n+1} C_i B_a^\infty \theta(\tau_i) \Delta\alpha(\tau_i) - \\
 &- \sum_{i=1}^{n+1} C_i B_a^\infty \theta(\tau_i) \Delta\alpha(\tau_i) - \sum_{i=1}^{n+1} C_i B_a^\infty 3a_a (T(\tau_i) - T_0) \Delta\alpha(\tau_i)] (1, 1, 1, 0)^T + \\
 &+ \left. \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n C_i R_1(\bar{t}_i) \alpha(\tau_i) \Delta\epsilon_r(\tau_i) \\ \sum_{i=1}^n C_i R_1(\bar{t}_i) \alpha(\tau_i) \Delta\epsilon_\varphi(\tau_i) \\ \sum_{i=1}^n C_i R_1(\bar{t}_i) \alpha(\tau_i) \Delta\epsilon_z(\tau_i) \\ \sum_{i=1}^n C_i R_1(\bar{t}_i) \alpha(\tau_i) \Delta\epsilon_{rz}(\tau_i) \end{array} \right\} - \\
 &- \frac{\alpha(t)}{2} \begin{bmatrix} R_2(\bar{t}_0) + \frac{2}{3} R_1(\bar{t}_0) & R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3} R_1(\bar{t}_0) & R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3} R_1(\bar{t}_0) & 0 \\ R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3} R_1(\bar{t}_0) & R_2(\bar{t}_0) + \frac{2}{3} R_1(\bar{t}_0) & R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3} R_1(\bar{t}_0) & 0 \\ R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3} R_1(\bar{t}_0) & R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3} R_1(\bar{t}_0) & R_2(\bar{t}_0) + \frac{2}{3} R_1(\bar{t}_0) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_1(\bar{t}_0) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_r(\tau_n) \\ \epsilon_\varphi(\tau_n) \\ \epsilon_z(\tau_n) \\ \gamma_{rz}(\tau_n) \end{Bmatrix}, \quad (15)
 \end{aligned}$$

где $d_1(t) = (B_a^\infty + \frac{4}{3}\mu_a)(1 - \alpha(t)) + \frac{1}{2}(R_2(\bar{t}_0) + \frac{2}{3}R_1(\bar{t}_0))\alpha(t)$; $d_2(t) = (B_a^\infty - \frac{2}{3}\mu_a)(1 - \alpha(t)) + \frac{1}{2}(R_2(\bar{t}_0) - \frac{1}{3}R_1(\bar{t}_0))\alpha(t)$; $d_3(t) = 2\mu_a(1 - \alpha(t)) + \frac{1}{2}R_1(\bar{t}_0)\alpha(t)$; n – целочисленный параметр, определяющий число шагов, сделанных по процессу на момент времени t ;

C_i – числовой параметр, определяемый как $C_i = \begin{cases} 1/2, & i = 1, n+1 \\ 1, & i = 2, n \end{cases}$; $t_i = t_0(T(\tau_i)) + t_*(t, \tau_i)$;

$\bar{t}_0 = t_0(T(t))$; τ_i – время на i -ом шаге по времени; $t_*(t, \tau_i)$ – приращение модифицированного времени (использован метод температурно-временной аналогии для учета зависимости механических свойств в закристаллизованном состоянии от температуры); $\Delta\theta(\tau_i)$, $\Delta\varepsilon_r(\tau_i)$, $\Delta\varepsilon_\varphi(\tau_i)$, $\Delta\varepsilon_z(\tau_i)$, $\Delta\gamma_{rz}(\tau_i)$, $\Delta\alpha(\tau_i)$, $\Delta T(\tau_i)$ – приращения объемной деформации, радиальной, угловой, осевой, сдвиговой компонент тензора деформаций, степени кристаллизации, температуры материала соответственно, произошедшие в момент времени τ_i ; $\varepsilon_m(\tau_n)$ – деформации, найденные на предыдущем шаге по времени; $m = r, \varphi, z, rz$.

Для получения конечно-элементных соотношений и сведения вариационного уравнения к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно неизвестных узловых перемещений используем традиционный подход [3]. Полученную СЛАУ решаем методом Гаусса. Напряжения внутри каждого элемента определяем согласно (15) по найденным значениям узловых перемещений.

4. Особенности численного решения термомеханической задачи

Большие градиенты температуры и высокая скорость протекания кристаллизационных процессов в поверхностных слоях приводят к большой погрешности вычислений при решении краевой задачи определения НДС. В частности, возникает проблема невыполнения естественных граничных условий по напряжениям.

На примере решения тестовой задачи для кристаллизующегося из полиэтилена полого цилиндра конечной длины (Рис. 1) исследовано влияние на сходимость численного решения следующих факторов: измельчения шага по времени, введения неравномерной конечно-элементной сетки в области больших градиентов температуры.

НДС цилиндра определено при следующих условиях: начальная температура полиэтилена $T_0 = 400^\circ\text{K}$; скорость охлаждения внешней цилиндрической поверхности $0,2^\circ\text{K/s}$; на остальных поверхностях цилиндра заданы условия отсутствия теплообмена.

В ходе численной реализации при уменьшении шага по времени на один порядок заметных улучшений в результатах решения механической задачи достигнуть не удалось. Дальнейшее измельчение временного шага признано нецелесообразным, так как на каждом временном шаге в рамках вязкоупругой постановки требуется хранение истории изменения напряжений для всех конечных элементов. Таким образом, повышение дискретизации задачи по времени приводит к резкому увеличению требуемых для численной реализации задачи ресурсов памяти ЭВМ и возрастанию временных затрат. Гораздо более эффективным оказалось сгущение конечно-элементной сетки в направлении поверхности теплоотдачи. Для иллюстрации влияния сгущения сетки на сходимость численного решения термомеханической задачи последняя решена для трех вариантов конечно-элементного разбиения цилиндра (Рис. 2, 3). Степень сгущения сетки зависит от величины градиентов температуры, степени кристаллизации, деформаций и напряжений, которые, в свою очередь, зависят от особенностей исследуемого технологического процесса и определяются эмпирическим путем.

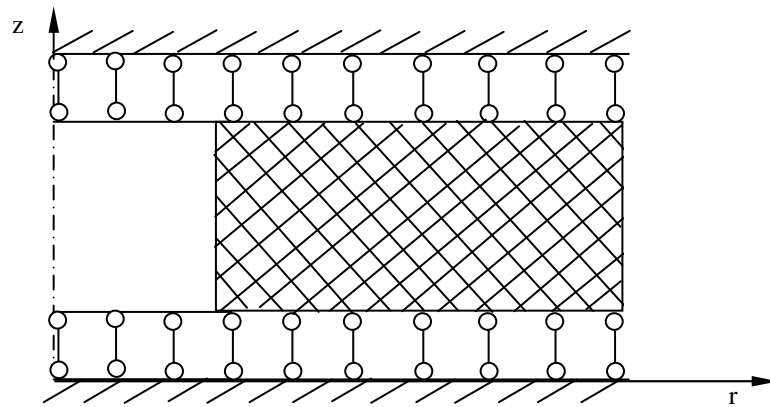


Рис. 1. Расчетная схема цилиндра

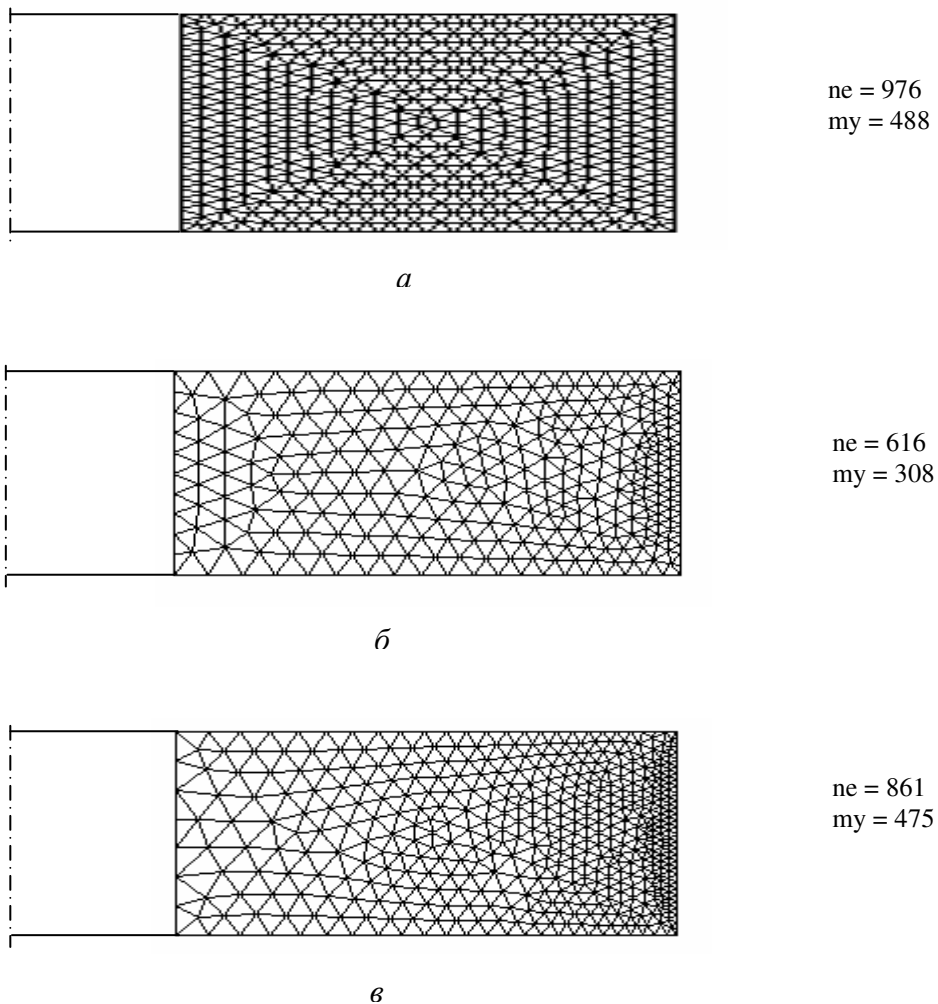


Рис. 2. Варианты сгущения конечно-элементной сетки по толщине трубы в направлении поверхности теплоотдачи: а – без сгущения; б – с коэффициентом сгущения 1:2; в – с коэффициентом сгущения 1:3
 n_e – количество конечных элементов; n_y – количество узлов сетки

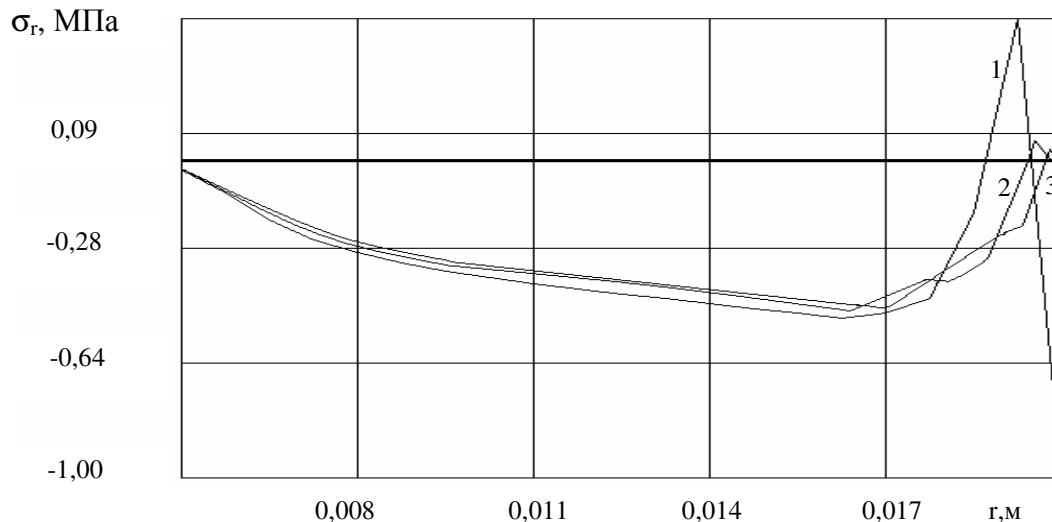


Рис. 3. Зависимость радиальных напряжений от времени через 200 с после начала охлаждения для различных сеток (см. Рис. 2).
Кривая 1 – сетка *a*; 2 – сетка *б*; 3 – сетка *в*; 4 – нулевой уровень.

5. Численное исследование технологических напряжений в неразъемном соединении стальной и полиэтиленовой труб

Рассмотренный алгоритм численного решения задачи (1)–(11) реализован для технологического процесса получения неразъемного соединения стальной и полиэтиленовой труб. Полиэтилен, предварительно нагретый до необходимой температуры, нагнетается в форму, в которую предварительно помещается участок стальной трубы. Температура литьевой формы поддерживается постоянной, равной 40°C. Начальная температура стального участка соединения равна температуре литьевой формы. Поэтому в данном случае уравнение теплопроводности (12) замыкается следующими граничными условиями:

$$T(x, t) = T^*, \quad x = x(r, z) \in S_3,$$

где S_3 – поверхность охлаждения соединения.

Характерные размеры соединения: $L = 0,11$ м; $L_1 = 0,055$ м; $L_2 = 0,03$ м; $L_3 = 0,04$ м; $d = 0,09$ м; $D = 0,11$ м; $d_1 = 0,01$ м; $d_2 = 0,013$ м; $\gamma = 45^\circ$. Расчетная схема соединения приведена на рисунке 4.

Вычисления выполнены при следующих значениях теплофизических и механических параметров для полиэтилена низкого давления: $K_1 = 2,33 \cdot 10^4$ с⁻¹; $U_1 = 30200$ Дж/моль; $\Psi = 182^\circ\text{K}$; $T_p = 415^\circ\text{K}$; $A_0 = 82$; $Q_k = 164000$ Дж/кг; $k = 0,1$ [2, 5]; $B_a^\infty = 2,08 \cdot 10^8$ Па; $\mu_a = 4,19 \cdot 10^6$ Па; $a_a = 2,8 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1}$; $B_{кр} = 1,78 \cdot 10^8$ Па; $a_{кр} = 0,9 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1}$ [6–10]. Здесь $B_{кр}$ – модуль объемного сжатия кристаллической фазы. В доступной авторам литературе не удалось найти информацию о функции объемной релаксации для данного материала, поэтому в расчете предполагалось, что связь шаровых частей тензоров напряжений и деформаций осуществляется в рамках теории упругости. Обобщенная кривая сдвиговой релаксации для полиэтилена низкого давления была получена с использованием данных работы [8]. Зависимость механических свойств

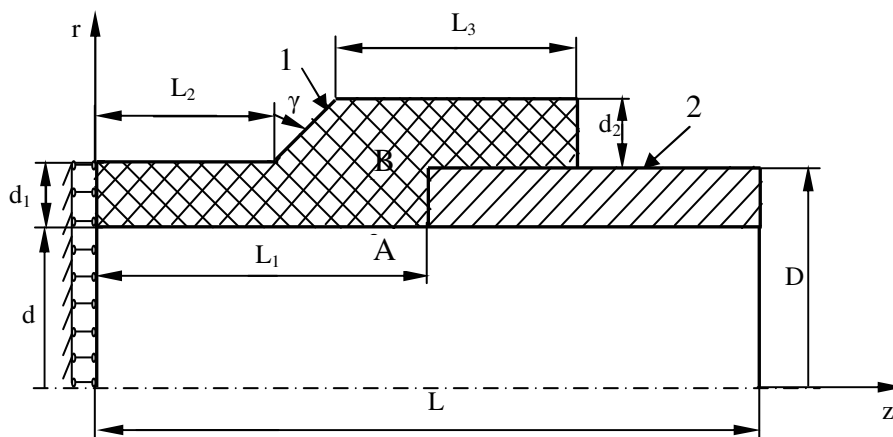


Рис. 4. Расчетная схема неразъемного соединения полиэтиленовой (1) и стальной (2) трубы для подземных газопроводов

полиэтилена от температуры учитывалась с применением принципа температурно-временной аналогии [8]. Зависимости теплоемкости, коэффициента теплопроводности, плотности, равновесной степени кристаллизации полиэтилена от температуры взяты из работ [2, 5–7]. Значения теплофизических и механических характеристик стали взяты в работе [11].

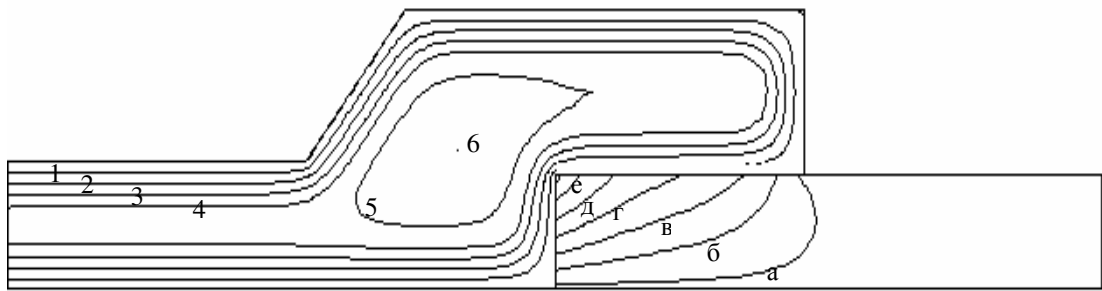
Результаты решения теплокинетической задачи для соединения представлены изолиниями температуры и степени кристаллизации для различных моментов времени на рисунках 5 и 6. На основании полученных пространственно-временных полей (температурного и конверсионного) решена задача определения НДС соединения. На рисунке 7 приведены изолинии интенсивности напряжений

$$\sigma_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_\varphi - \sigma_r)^2 + (\sigma_z - \sigma_r)^2 + (\sigma_\varphi - \sigma_z)^2 + 6\tau_{rz}^2}$$

на момент завершения процесса кристаллизации. Как видно из рисунков, в поверхностных слоях полиэтилена уровень интенсивности напряжений более высок, что связано с большими градиентами температуры и высокой скоростью протекания процесса кристаллизации вблизи поверхности теплоотдачи.

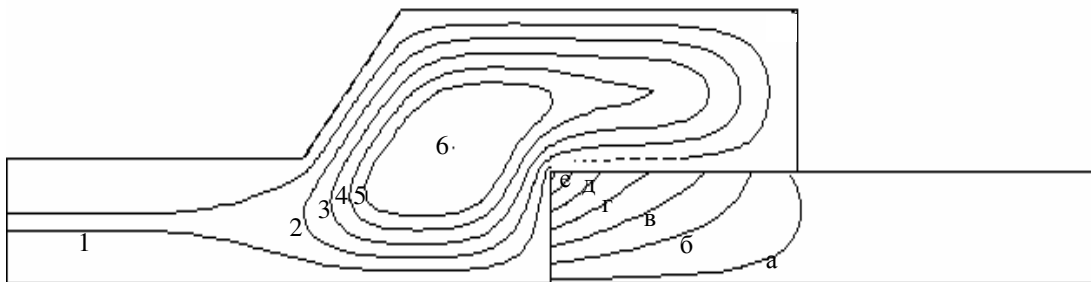
Для представления более полной картины развития НДС в изделии построены кривые зависимости интенсивности напряжений от времени в различных точках изделия в случаях упругой и вязкоупругой аппроксимаций механических свойств кристаллической фазы. Полученные численные результаты свидетельствуют о том, что использование для описания механического поведения кристаллизующегося полимера упругих физических соотношений (в отличие от вязкоупругих) может привести к получению более низких расчетных уровней интенсивности напряжений на отдельных этапах процесса кристаллизации (Рис. 8) и, соответственно, к получению завышенной оценки запаса прочности полимерного изделия.

Таким образом, предложен и реализован алгоритм численного решения краевой задачи термомеханики в осесимметричной постановке для кристаллизующейся полимерной среды с учетом вязкоупругих свойств кристаллической фазы. Исследованы закономерности и отличия в эволюции НДС для кристаллизующейся полимерной среды в случае упругой и вязкоупругой аппроксимации механических свойств полимера в закристаллизованном состоянии.



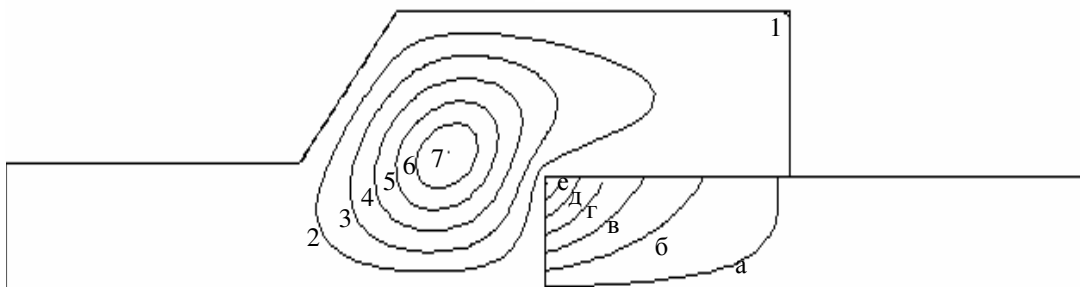
1 – 57,3; 2 – 74,7; 3 – 92; 4 – 109,3; 5 – 126,7; 6 – 144 (°C);
а – 40,2; б – 40,8; в – 41,5; г – 42,1; д – 42,7; е – 43,4 (°C)

a



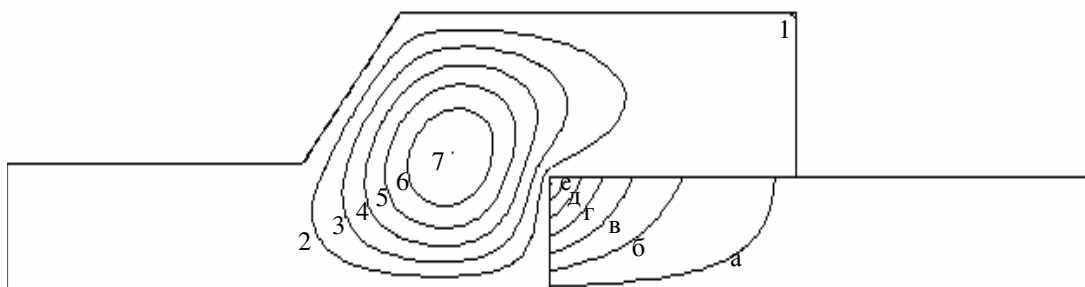
1 – 53,1; 2 – 66,3; 3 – 79,4; 4 – 92,5; 5 – 105,7; 6 – 118,8 (°C);
а – 40,1; б – 40,5; в – 40,8; г – 41,2; д – 41,6; е – 41,9 (°C)

б



1 – 40; 2 – 52,7; 3 – 65,4; 4 – 78,1; 5 – 90,8; 6 – 103,5; 7 – 116,2 (°C);
а – 40; б – 40,2; в – 40,4; г – 40,6; д – 40,8; е – 41 (°C)

в



1 – 40; 2 – 45,1; 3 – 50,1; 4 – 55,2; 5 – 60,2; 6 – 65,3; 7 – 70,3 (°C);
а – 40; б – 40,1; в – 40,2; г – 40,3; д – 40,4; е – 40,5 (°C)

г

Рис. 5. Изолинии температуры для различных моментов времени (*с*) (цифры соответствуют изолиниям в полиэтилене низкого давления, буквы – изолиниям в стали):

a – 100; *б* – 300; *в* – 500; *г* – 706

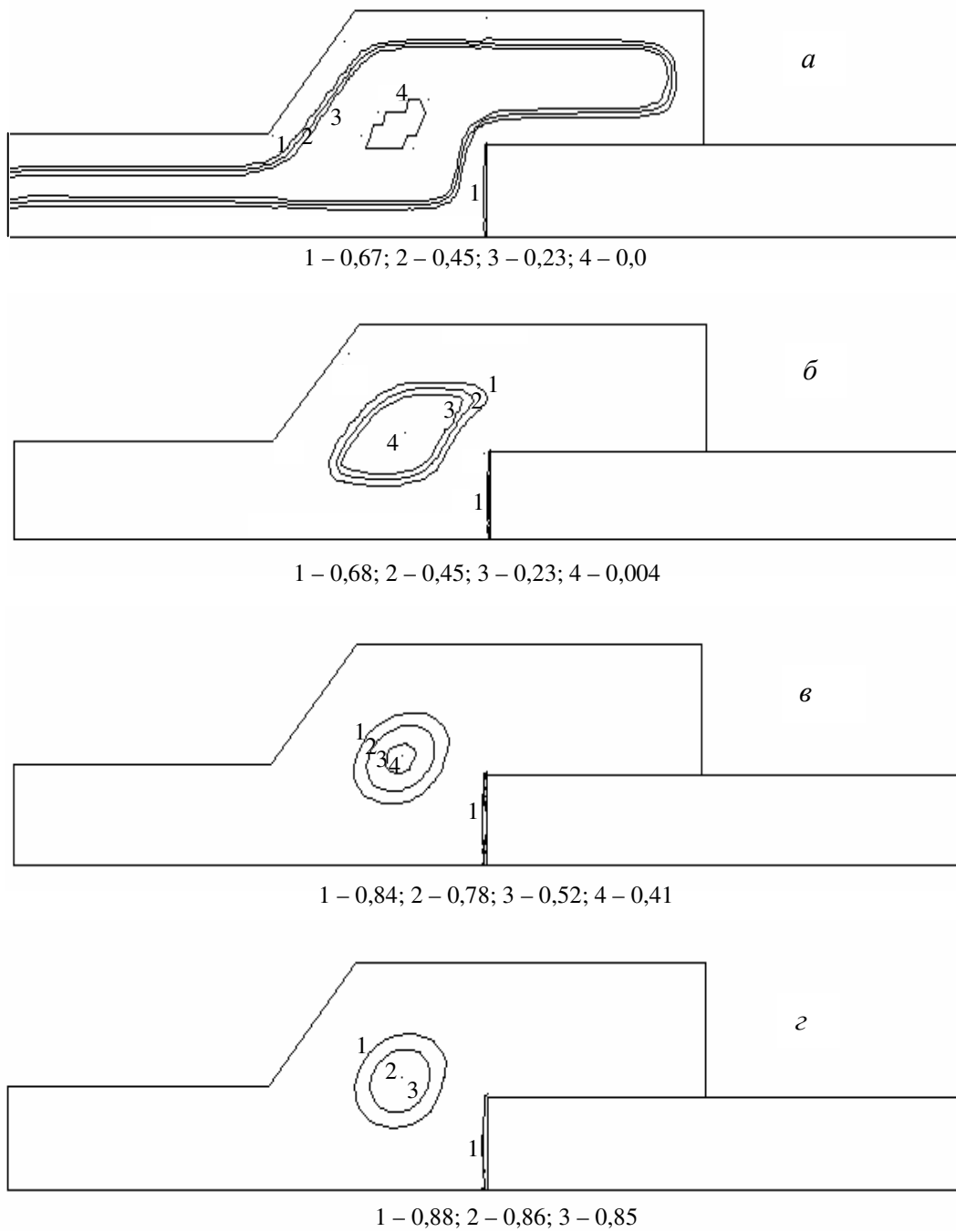


Рис. 6. Изолинии степени кристаллизации для различных моментов времени (t):
a – 100; *б* – 300; *в* – 500; *г* – 600

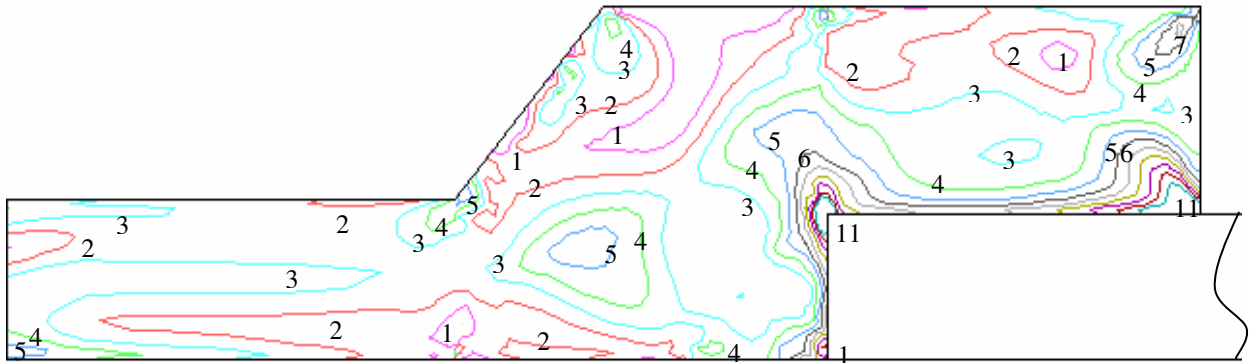


Рис. 7. Изолинии интенсивности напряжений (МПа) в полиэтилене на момент окончания процесса кристаллизации (706 с): 1 – 1,77; 2 – 2,70; 3 – 3,62; 4 – 4,54; 5 – 5,47; 6 – 6,39; 7 – 7,32; 8 – 8,24

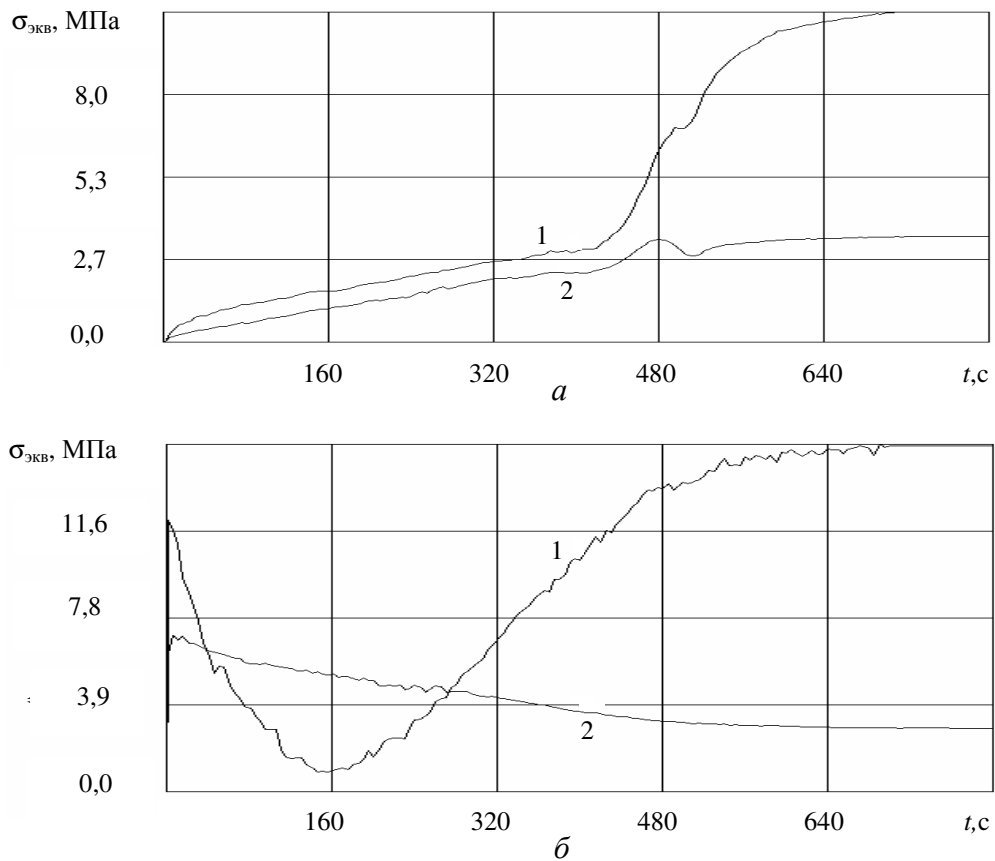


Рис. 8. Зависимость интенсивности напряжений от времени в точках В (а) и А (б) конструкции:
1 – без учета вязкоупругих свойств;
2 – с учетом вязкоупругих свойств кристаллической фазы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 07-01-96009).

Литература

1. *Завьялова Т.Г., Труфанов Н.А.* Определяющие соотношения для вязкоупругого тела в условиях кристаллизации // Прикладная механика и техническая физика. – 2005. – Т.46, №4. – С.78-87.
2. *Малкин А.Я., Бегишев В.П.* Химическое формование полимеров. – М.: Химия, 1991. – 540с.
3. *Сегерлинд Л.* Применение метода конечных элементов. – М.: Мир, 1979. – 392с.
4. *Мак-Кракен Д., Дорн У.* Численные методы и программирование на Фортране. – М.: Мир, 1977. – 584с.
5. *Берлин А.А., Вольфсон С.А., Ениколопан Н.С.* Кинетика полимеризационных процессов. – М.: Химия, 1978. – 320с.
6. Теплофизические и реологические характеристики полимеров. Справочник / Под ред. Липатова Ю.С. – Киев: Наукова думка, 1977. – 244с.
7. *Пивень А.Н., Гречанная Н.А., Чернобыльский Н.И.* Теплофизические свойства полимерных материалов. – Киев: Вища школа, 1976. – 180с.
8. *Гольдман А.Я.* Прогнозирование деформационно-прочностных свойств полимерных и композиционных материалов. – Л.: Химия, 1988. – 272с.
9. Энциклопедия полимеров: В 3-х т. – М.: Советская энциклопедия, 1972.
10. *Нильсен Л.* Механические свойства полимеров и полимерных композиций. – М.: Химия, 1978. – 312с.
11. Физические свойства сталей и сплавов, применяемых в энергетике. Справочник / Под ред. Неймарк Б.Е. – М.-Л.: Энергия, 1967.– 240с.