

DOI: 10.7242/1999-6691/2014.7.2.18

УДК 539.376

ЧИСЛЕННАЯ МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРНОЙ КРИСТАЛЛИЗУЮЩЕЙСЯ СРЕДЫ С УЧЕТОМ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ

Р.Г. Куликов, Т.Г. Куликова

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

Разработаны методика и численный алгоритм решения краевых задач механики деформируемой кристаллизующейся упругой полимерной среды. Рассматривается класс задач, описывающих процессы, протекающие в полимерных изделиях при их производстве. В силу значительности усадочных деформаций постановка задач осуществляется в рамках теории конечных деформаций. Определяющие соотношения строятся с использованием потенциала Пенга–Ландела. Рассматривается «слабая» вариационная постановка. Предлагаемый алгоритм предполагает использование методики линеаризации, основанной на наложении малых деформаций на конечные. При этом процесс деформирования представляется как последовательность переходов между промежуточными конфигурациями в предположении малости деформаций на каждом переходе. Подобный подход позволяет свести решение рассматриваемой задачи к решению последовательности линеаризованных краевых задач. Численная методика строится на базе технологии метода конечных элементов. При этом в качестве узловых неизвестных принимаются приращения функций перемещений на текущем временном шаге. С помощью предлагаемого алгоритма решена задача деформирования полиэтиленовой трубы при ее изготовлении. Задача рассматривалась в осесимметричной постановке. Учитывалась зависимость теплофизических характеристик материала от температуры. Решение совмещенной температурно-конверсионной задачи найдено численно разностным методом. Конкретизированы линеаризованные геометрические и определяющие соотношения. Получены распределения полей перемещений, радиальных и окружных напряжений в зависимости от времени. Сформулированы основные достоинства предлагаемого алгоритма.

Ключевые слова: численный алгоритм, метод конечных элементов, полимеры, кристаллизация, конечные деформации, нелинейная задача, линеаризация

NUMERICAL METHODS FOR SOLVING THE PROBLEM OF POLYMER CRYSTALLIZING MEDIA DEFORMATION TAKING INTO ACCOUNT FINITE DEFORMATIONS

R.G. Kulikov and T.G. Kulikova

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

Methodology and numerical algorithm are developed for solving the boundary problems of elastic polymer crystallizing. A class of problems describing processes in polymer specimens in the course of their manufacturing is studied. Due to the significance of shrinking deformations, the problem is considered in the framework of the finite strain theory. Constitutive relations are derived using the Peng–Landel potential. A weak variational formulation based on Galerkin approach is considered. The proposed algorithm is based on linearization methodology when small deformations are applied to finite ones. The deformation process is represented as a sequence of transitions through intermediate configurations. This approach makes it possible to reduce the solution to a sequence of linearized problems for which effective numerical algorithms have been designed. A numerical technique is based on the finite element method. Displacement increments at the considered time step are taken to be nodal unknowns. The algorithm was applied to solve the problem of deformation of a polyethylene pipe during its manufacturing. The problem was considered in an axisymmetric formulation. The temperature dependence of material characteristics was taken into account. The solution of coupled temperature – conversional problem was obtained with finite difference methods. The linearized geometrical and constitutive relations were defined. Distributions of displacement, radial and circular stresses fields were obtained. The main advantages of the proposed algorithm are formulated.

Key words: numerical algorithm, finite element method, polymers, crystallization, finite deformations, nonlinear problem, linearization

Технологический процесс производства изделий из полимерных материалов, как правило, включает этап охлаждения, сопровождающийся кристаллизацией материала. Возникающие при этом напряжения могут достигать значительных величин и приводить к снижению эксплуатационных качеств изделий вследствие больших структурных усадочных деформаций, сопутствующих переходу материала из одного фазового состояния в другое. Для адекватного представления термомеханического поведения предлагаемые модели должны быть построены в рамках теории конечных деформаций, что приводит к нелинейной постановке задач. Решение подобных задач сопряжено с большими трудностями. Кроме того, свои проблемы привносит и учет реальных условий протекания технологических процессов. Таким образом, необходимость отображения этих особенностей делает возможным получение решения задач термомеханики только с использованием численных подходов. Поэтому разработка эффективного численного алгоритма решения краевых задач термомеханики кристаллизующейся среды является актуальной.

Вопросу моделирования механического поведения полимерной среды в условиях фазовых и релаксационных переходов исследователями уделяется достаточно большое внимание. Так, в работах [1, 2] рассматривается термомеханическое поведение кристаллизующейся полимерной среды в рамках линейной теории упругости. При этом определяющие соотношения основываются

на представлении среды в виде композиции расплавленного и полностью закристаллизованного материала и описывают историю непрерывного зарождения и деформирования новой фазы в интервале температур фазовых превращений. Развивают данный подход модели, принимающие во внимание вязкоупругое поведение материала. В работах [3, 4] предложены определяющие соотношения, которые предполагают упругое поведение аморфной составляющей и линейно-вязкоупругое — кристаллической. Краевые задачи термомеханики, построенные с использованием этих соотношений, являются линейными, поэтому разработка численных алгоритмов их решения не представляет каких-либо затруднений.

Упомянутые выше модели [1–4] «работают» в условиях малости деформаций. В то же время изучаемые процессы сопровождаются значительными температурными и усадочными деформациями (до 10 % [5]), которые необходимо отражать в определяющих уравнениях новых моделей. Одним из популярных подходов, позволяющих учитывать конечные деформации, является применение операции линеаризации, заключающейся в наложении малых деформаций на конечные [6–8]. При этом процесс деформирования представляется как последовательность переходов между промежуточными конфигурациями в предположении малости деформаций на каждом переходе. В итоге решение поставленной нелинейной задачи сводится к решению последовательности линеаризованных краевых задач [9] на основе известных эффективных численных алгоритмов.

Согласно этой методике ранее (см. [10, 11]) авторами данной работы были предложены определяющие соотношения, описывающие поведение материала в процессе кристаллизации. В настоящей работе рассматривается построение численного алгоритма решения краевой задачи термомеханики кристаллизующейся упругой полимерной среды с учетом больших деформаций.

В соответствии с [10] определяющие соотношения исследуемой среды имеют вид:

$$W(\hat{\mathbf{G}}_t^x) = (1 - \alpha(t))W_a(\hat{\mathbf{G}}_t^x) + \int_0^{\alpha(t)} W_{cr}(\hat{\mathbf{F}}_\tau^{-T} \cdot \hat{\mathbf{G}}_t^x \cdot \hat{\mathbf{F}}_\tau^{-1}) d\alpha(\tau), \quad (1)$$

где W — упругий потенциал изотропного тела; W_a , W_{cr} — упругие потенциалы аморфной и кристаллической фаз; $\hat{\mathbf{G}}_t^x$ — тензор меры деформаций Коши–Грина для момента времени t ; $\hat{\mathbf{F}}_\tau$ — тензор-градиент места, взятый относительно момента времени $\tau \in [0, t]$; $\alpha(t)$ — степень кристаллизации материала.

В качестве упругого потенциала используется двухконстантный потенциал Пенга–Ландела [12]. С учетом его вида (1) выражение связи тензора Пиолы–Кирхгофа второго рода $\hat{\mathbf{P}}_{II}$ с тензором меры деформаций Коши–Грина принимает вид:

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

где $\hat{\mathbf{G}}_{\tau-t}^x = \hat{\mathbf{F}}_\tau^{-T} \cdot \hat{\mathbf{G}}_t^x \cdot \hat{\mathbf{F}}_\tau^{-1}$; μ^a , B^a и μ^{cr} , B^{cr} — механические характеристики аморфной и закристаллизовавшейся частей материала соответственно; I_1 , I_3 — первый и третий главные инварианты тензора меры деформаций Коши–Грина; $\hat{\mathbf{g}}$ — метрический тензор.

Алгоритм вычислений удобнее строить на основе «слабой» вариационной постановки задачи [13], которая может быть получена с помощью метода Галеркина и в случае отсутствия внешних силовых воздействий принимает вид:

$$\int_{V_0} \hat{\mathbf{P}}_{II} \cdot \delta \hat{\mathbf{C}} dV_0 = 0, \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{C}} = (\hat{\mathbf{G}}_t^x - \hat{\mathbf{g}})/2$ — тензор деформаций Коши–Грина; V_0 — начальный объем тела. К достоинствам рассматриваемой постановки следует отнести то, что она формулируется в исходной конфигурации. Сложность получения решения задачи в форме (3) обусловлена как нелинейностью постановки, так и проблемами, связанными с необходимостью описания возникающих температурных и структурных деформаций. Обсуждаемый в данной работе алгоритм предполагает линеаризацию постановки (3),

что позволяет свести процедуру решения задачи к решению последовательности линейризованных упругих краевых задач в рамках теории малых деформаций.

Линеаризация участвующих в постановке геометрических соотношений может быть выполнена путем разложения исходного движения тела на совокупность малых движений, вызываемых малыми приращениями внешних воздействий. Согласно идее наложения малых деформаций на конечные [8, 14], перемещения тела в произвольный момент времени представимы в виде суммы накопленных и малых перемещений, изображающих переход из промежуточной конфигурации в конечную.

Рассмотрим движение тела из начальной недеформированной конфигурации C_0 , соответствующей моменту времени $t=0$, в конфигурацию C_t , которую тело приобретает в момент времени t , через промежуточную конфигурацию $C_{t-\Delta t}$. Положение некоторой точки в начальной конфигурации свяжем с радиус-вектором \mathbf{r} , в конфигурациях $C_{t-\Delta t}$ и C_t — радиус-векторами \mathbf{R}_0 и \mathbf{R} . Пусть \mathbf{U} и \mathbf{u} — векторы перемещений, описывающие переход из конфигурации C_0 в $C_{t-\Delta t}$ и из $C_{t-\Delta t}$ в C_t соответственно. Каждый из этих векторов является функцией обобщенных лагранжевых координат q^i ($i=1, 2, 3$). Предполагаем, что конфигурация $C_{t-\Delta t}$ близка к конечной и, следовательно, перемещения \mathbf{u} малы.

В конфигурациях C_0 , $C_{t-\Delta t}$ обычным образом введем локальные основные и сопряженные базисы:

$$r_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i}, \quad R_{0i} = \frac{\partial \mathbf{R}_0}{\partial q^i}, \quad r^i = g^{ij} r_j, \quad R_0^i = G^{ij} R_{0j},$$

где g^{ij} и G^{ij} — контравариантные компоненты метрического тензора в начальной и промежуточной конфигурациях. Определим операторы Гамильтона в конфигурациях C_0 и $C_{t-\Delta t}$ как

$$\nabla = \bar{r}^s \frac{\partial}{\partial q^s}, \quad \overset{0}{\nabla} = \bar{R}_0^s \frac{\partial}{\partial q^s}.$$

Тогда тензоры-градиенты места, изображающие переход из начальной конфигурации в промежуточную, из промежуточной в конечную и из начальной в конечную могут быть записаны в виде:

$$\hat{\mathbf{F}}_0 = (\nabla \mathbf{R}_0)^T = (\nabla(\mathbf{r} + \mathbf{U}))^T, \quad \hat{\mathbf{f}} = \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{R} \right)^T = \left(\overset{0}{\nabla}(\mathbf{R}_0 + \mathbf{u}) \right)^T, \quad \hat{\mathbf{F}} = (\nabla \mathbf{R})^T = (\nabla(\mathbf{R}_0 + \mathbf{u}))^T.$$

Градиент места $\hat{\mathbf{F}}$ представим через тензоры $\hat{\mathbf{F}}_0$ и $\hat{\mathbf{f}}$: $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{f}} \cdot \hat{\mathbf{F}}_0$. Вследствие этого тензор меры деформаций Коши–Грина $\hat{\mathbf{G}}_t^\times$ для момента времени t примет вид: $\hat{\mathbf{G}}^\times = \hat{\mathbf{F}}^T \cdot \hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot \hat{\mathbf{f}}^T \cdot \hat{\mathbf{f}} \cdot \hat{\mathbf{F}}_0$, а тензор меры деформаций Коши–Грина $\overset{0}{\hat{\mathbf{G}}^\times} = \hat{\mathbf{f}}^T \cdot \hat{\mathbf{f}}$, описывающий переход из $C_{t-\Delta t}$ в C_t , с учетом малости \mathbf{u} , станет следующим:

$\overset{0}{\hat{\mathbf{G}}^\times} = 2\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{g}}$, где $\hat{\mathbf{e}} = \frac{1}{2} \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T \right)$ — тензор малых деформаций относительно конфигурации $C_{t-\Delta t}$.

Таким образом, тензор деформаций Коши–Грина, выражающий переход из начальной конфигурации в конечную, есть $\hat{\mathbf{C}} = (\hat{\mathbf{G}}^\times - \hat{\mathbf{g}})/2 = (\hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot \hat{\mathbf{F}}_0 - \hat{\mathbf{g}})/2 + \hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{F}}_0$ и может быть представлен как

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{C}} &= \hat{\mathbf{C}}_0 + \hat{\mathbf{C}}^*, \\ \hat{\mathbf{C}}_0 &= \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{U}_0 + (\nabla \mathbf{U}_0)^T + \nabla \mathbf{U}_0 (\nabla \mathbf{U}_0)^T \right), \\ \hat{\mathbf{C}}^* &= \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T + \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T + \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T + \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T + \\ &+ \mathbf{U}_0 \cdot \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T + \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T, \end{aligned}$$

где \mathbf{U}_0 — вектор перемещений из начальной конфигурации в промежуточную; \mathbf{u} — вектор малых перемещений из промежуточной конфигурации в конечную; ∇ , $\overset{0}{\nabla}$ — операторы Гамильтона относительно

исходной и промежуточной конфигураций; \hat{C}_0 и \hat{C}^* — тензоры, соответствующие деформациям, возникающим переходе из начальной конфигурации в промежуточную и из промежуточной в конечную.

При построении физических соотношений в случае использования нелинейных уравнений состояния существенным является вопрос учета температурных деформаций материала. Ряд авторов [15, 16] предлагает для этих целей вводить линейное слагаемое, зависящее от приращения температуры, аналогично тому, как это принято в случае использования линейных соотношений. В работе [17] используется подход, основанный на линеаризации физических соотношений в предположении малости температурных деформаций на рассматриваемом переходе. Очевидно, данная методика обладает большей общностью, хотя сразу стоит отметить существенные сложности реализации, связанные с необходимостью выделения упругой механической составляющей кинематики процесса.

В настоящей работе рассматривается построение численного алгоритма решения задач определенного класса (а именно алгоритма нахождения технологических напряжений, возникающих в процессе получения полимерных изделий), в которых деформации, будучи значительными по величине, тем не менее, не выходят за пределы порядка 10 %. Линеаризация физических соотношений проводится путем разложения тензора Пиолы–Кирхгофа \hat{P}_H (2) в ряд Тейлора с удержанием слагаемых нулевого и первого порядков. С учетом ограниченности деформаций, характерных для изучаемого процесса, предлагается ввести температурные и структурные составляющие в форме:

$$\hat{P}_H(t) = (\hat{P}_H)_0 + {}^4\hat{D}^a(\hat{C}_0) \cdot (\hat{F}_0^T \cdot (\hat{e} - \hat{e}_0) \cdot \hat{F}_0) (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} {}^4\hat{D}^{cr}(\hat{C}_{0\tau}) \cdot (\hat{F}_0^T \cdot (\hat{e} - \hat{e}_0) \cdot \hat{F}_0) d\alpha(\tau),$$

где \hat{e}_0 — тензор суммы малых температурных и структурных деформаций, сопровождающих переход из промежуточной конфигурации в конечную; тензор $\hat{C}_{0\tau}$ описывает переход из конфигурации, соответствующей моменту времени τ , в промежуточную; ${}^4\hat{D}^a$, ${}^4\hat{D}^{cr}$ — тензоры четвертого ранга «касательных жесткостей» аморфной и кристаллической фаз, компоненты которых зависят от \hat{C}_0 и $\hat{C}_{0\tau}$.

В результате выполнения операции линеаризации выражение (3) преобразуется к виду:

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

Таким образом, определение эволюции поля перемещений с течением времени сводится к решению последовательности линеаризованных задач относительно приращения вектора перемещений на рассматриваемых временных шагах.

Нахождение решения краевых задач механики для тел сложной пространственной конфигурации невозможно без использования численных методов. Среди существующих численных подходов в настоящее время наиболее широкое распространение получили те, в основе которых лежит метод конечных элементов [18]. Именно такой подход и был выбран для построения конечномерного аналога поставленной задачи. Его применение для аппроксимации выражения (4) приводит к линейным алгебраическим соотношениям, которые могут быть представлены в матричной форме [18].

Так, геометрические и физические соотношения для элемента в матричной форме выглядят следующим образом:

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

где $\{\delta^e\}$ — вектор узловых неизвестных (приращений перемещений на текущем шаге); $[B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]$ — матрица градиентов элемента; $\{\Delta C_0\}$ — вектор приращения температурных и структурных деформаций; $[D^a(\mathbf{U}_0)]$, $[D^{cr}(\mathbf{U}_0)]$ — матрицы «касательных» жесткостей аморфной и кристаллической фаз материала. Это соотношение может быть преобразовано к виду:

$$\{P\} = \{P_0\} + [D(\mathbf{U}_0)] [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)] \{\delta^e\} - [D(\mathbf{U}_0)] \{\Delta C_0\},$$

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

В целом для исследуемого тела соотношение (4) в матричной форме запишется как

$$\sum_e ([k]^e \delta^e - \{f_p\}^e - \{f_0\}^e) = 0,$$

где символ \sum_e означает суммирование по элементам; $[k]^e$ — локальная матрица жесткости элемента; $\{f_p\}^e$, $\{f_0\}^e$ — локальные векторы узловых сил, обусловленные накопленными напряжениями, температурными и структурными деформациями:

$$\begin{aligned} [k]^e &= \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]^T [D(\mathbf{U}_0)] [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)] dV, \\ \{f_p\}^e &= \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]^T \{P_0\} dV, \\ \{f_0\}^e &= - \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)]^T [D(\mathbf{U}_0)] \{\Delta C_0\} dV. \end{aligned}$$

После сборки всего ансамбля конечных элементов имеем глобальную систему:

$$[K(U_0)] \{u\} = \{F_p\} + \{F_0\}, \quad (5)$$

где $[K(U_0)]$ — глобальная матрица системы, обладающая симметрией и зависящая от вектора накопленных перемещений U_0 ; $\{F_p\}$, $\{F_0\}$ — глобальные векторы «фиктивных» усилий, обусловленные накопленными к моменту времени текущего шага напряжениями и возникающими на соответствующем переходе температурными и структурными деформациями. Таким образом, получаем последовательность линейных задач, сформулированных относительно приращений узловых перемещений. При этом оператор левой части соотношения (5) переопределяется на каждом шаге по времени, что обуславливает существенную вычислительную нагрузку при решении задач большой размерности.

Реализация предлагаемого алгоритма рассматривается на примере решения задачи охлаждения бесконечно длинной трубы, изготовленной из полимера низкого давления. Изначально материал тела нагрет до температуры, превышающей температуру плавления. Охлаждение внешней поверхности трубы производится струями холодной воды; тепловой поток на внутренней поверхности отсутствует. При охлаждении в материале протекают процессы кристаллизации, сопровождающиеся выделением тепла.

Нахождение решения осуществлялось в два этапа. На первом этапе решалась краевая задача нестационарной теплопроводности с учетом кристаллизации материала. В данной работе, в силу ограниченности возникающих деформаций, изменение конфигурации тела при решении температурной задачи игнорировалось. В результате решения температурной задачи получены данные об эволюции полей температуры и степени кристаллизации по толщине трубы с течением времени. Установленные данные использовались далее на втором этапе, на котором осуществлялось решение краевой задачи механики кристаллизующегося полимера. Временная и пространственная сетки были одними и теми же на обоих этапах. И температурная задача, и задача кристаллизации рассматривались в осесимметричной постановке.

Постановка связанной теплокинетической задачи включает:

– нестационарное уравнение теплопроводности

$$c(T)\rho(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho(T) Q_k \dot{\alpha}(t), \quad r \in [r_1, r_2];$$

– уравнение кинетики неизотермической кристаллизации [1]

$$\frac{d\alpha}{dt} = K_1 \exp \left(-\frac{U_1}{RT} - \frac{\Psi}{T_m - T} \right) (1 + A_0 \alpha) (\alpha_c(T) - \alpha), \quad r \in [r_1, r_2];$$

– граничные и начальные условия

$$\frac{\partial T(r_1, t)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T(r_2, t)}{\partial r} = -\frac{h}{\lambda(T)}(T(r_2, t) - T_{en}), \quad T(r, 0) = T_0, \quad \alpha(r, 0) = 0, \quad r \in [r_1, r_2],$$

где r_1, r_2 — внутренний и внешний радиусы трубы; Q_k — тепловой эффект реакции кристаллизации; T — температура; t — время; ρ — плотность материала; c — удельная теплоемкость; λ — коэффициент теплопроводности; α_e — равновесная степень кристаллизации; T_m — температура плавления; h — коэффициент теплоотдачи на поверхности; T_{en} — температура окружающей среды; T_0 — начальная температура тела; R — универсальная газовая постоянная; K_1, U_1, ψ, A_0 — макрокинетические константы, устанавливаемые экспериментально.

Значения теплофизических и механических параметров, зависимость удельной теплоемкости, коэффициента теплопроводности и плотности полиэтилена от температуры взяты из литературных источников [5, 19–21]. Численное решение теплокинетической задачи получено разностным методом. Внутренний радиус трубы полагался равным 0,1 м, толщина стенки — 0,01 м, начальная температура тела — 470 К. При решении температурной задачи конечномерный аналог содержал 50 узлов. Временной шаг при решении задачи теплопроводности составлял 1 с. Процесс расчета прекращался при достижении во всех точках тела равновесной степени кристаллизации. Рассматриваемый временной интервал составлял 750 секунд. Решение уравнения кинетики неизотермической кристаллизации определялось численно на каждом шаге алгоритма решения краевой задачи методом Рунге–Кутты четвертого порядка, причем для обеспечения устойчивости счета временной шаг принимался равным 0,02 с. В результате решения теплокинетической задачи были получены данные о распределении температуры и степени кристаллизации для различных моментов времени.

При решении задачи термомеханики постановка предполагала реализацию плоского деформированного состояния с условием осевой симметрии. С учетом этого операторы Гамильтона записывались следующим образом:

$$\nabla \mathbf{U}_0 = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_r}{\partial r} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{U_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} / \left(1 + \frac{\partial U_r}{\partial r}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u_r}{r^3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где U_r, u_r — радиальные компоненты векторов \mathbf{U}_0 и \mathbf{u} соответственно. Окончательно выражения для радиальной и окружной компонент тензора деформаций Коши–Грина принимают вид:

$$c_{rr} = \frac{\partial U_r}{\partial r} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_r}{\partial r} \right)^2 + \left(1 + \frac{\partial U_r}{\partial r} \right) \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad c_{\phi\phi} = \frac{1}{r} \left(U_r + \frac{U_r^2}{2r} + \left(1 + \frac{U_r}{r} \right)^2 u_r \right).$$

При построении конечно-элементного алгебраического аналога использовался двухузловой осесимметричный конечный элемент с линейной аппроксимацией узловых неизвестных, в качестве которых выступали перемещения. Все соотношения получены в базисе исходной конфигурации. Матрица градиентов элемента, вектор температурных и структурных деформаций элемента определяются по формулам

$$[\mathbf{B}(\mathbf{x}, \mathbf{U}_0)] = \frac{1}{r_j - r_i} \begin{bmatrix} -\left(1 + \frac{dU_r}{dr}\right) & \left(1 + \frac{dU_r}{dr}\right) \\ \left(1 + \frac{dU_r}{dr}\right)^2 \frac{r_j - r}{r} & \left(1 + \frac{dU_r}{dr}\right)^2 \frac{r - r_i}{r} \end{bmatrix}, \quad \{\Delta \mathbf{C}_0\} = \begin{Bmatrix} \left(1 + \frac{\partial U_r}{\partial r}\right)^2 \\ \left(1 + \frac{U_r}{r}\right)^2 \end{Bmatrix} (\beta_T \Delta T + e_c),$$

где β_T — коэффициент температурного расширения; $\Delta T, e_c$ — приращение температуры и структурные деформации на текущем временном шаге; r_i, r_j — радиальные координаты узлов элемента.

В соответствии с (2) компоненты матриц жесткостей имеют вид:

$$\begin{aligned} [D_{1,1}^{a,cr}] &= \frac{1}{2} \mu^{a,cr} \left(-\frac{2}{3} I_3^{-4/3} (2 + 4c_{\varphi\varphi}) - \frac{1}{3} \left(2I_3^{-4/3} - \frac{4}{3} I_1 I_3^{-7/3} (2 + 4c_{\varphi\varphi}) \right) (2 + 4c_{\varphi\varphi}) \right) + \frac{1}{4} B^{a,cr} I_3^{-3/2} (2 + 4c_{\varphi\varphi})^2, \\ [D_{1,2}^{a,cr}] &= [D_{2,1}^{a,cr}] = \frac{1}{2} \mu^{a,cr} \left(-\frac{2}{3} I_3^{-4/3} (4 + 4c_{rr} + 4c_{\varphi\varphi}) - \frac{1}{3} \left(-\frac{4}{3} I_1 I_3^{-7/3} (2 + 4c_{rr}) (2 + 4c_{\varphi\varphi}) + 4I_1 I_3^{-4/3} \right) \right) + \\ &\quad + \frac{1}{4} B^{a,cr} I_3^{-3/2} (2 + 4c_{rr}) (2 + 4c_{\varphi\varphi}) + 2B^{a,cr} (1 - I_3^{-1/2}), \\ [D_{2,2}^{a,cr}] &= \frac{1}{2} \mu^{a,cr} \left(-\frac{2}{3} I_3^{-4/3} (2 + 4c_{rr}) - \frac{1}{3} \left(2I_3^{-4/3} - \frac{4}{3} I_1 I_3^{-7/3} (2 + 4c_{rr}) \right) (2 + 4c_{rr}) \right) + \frac{1}{4} B^{a,cr} I_3^{-3/2} (2 + 4c_{rr})^2, \end{aligned}$$

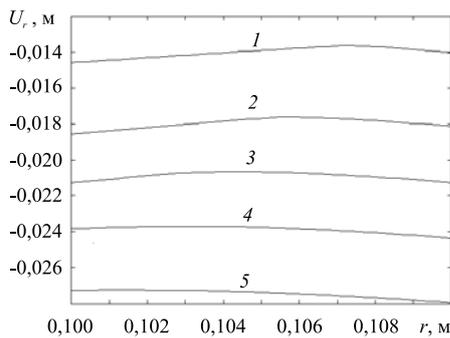


Рис. 1. Распределение радиального перемещения трубы для различных моментов времени, с: 150 (кривая 1); 300 (2); 450 (3); 600 (4); 750 (5)

где c_{rr} , $c_{\varphi\varphi}$, I_1 , I_3 — радиальная и окружная компоненты, а также первый и третий инварианты тензора деформаций Коши–Грина \hat{C} .

При определении напряженно-деформированного состояния конечномерный аналог расчетной области также содержал 50 узлов. Временной шаг составлял 1 секунду при длине рассматриваемого интервала в 750 секунд. На рисунке 1 представлены кривые распределения радиальных перемещений по толщине стенки трубы для различных моментов времени.

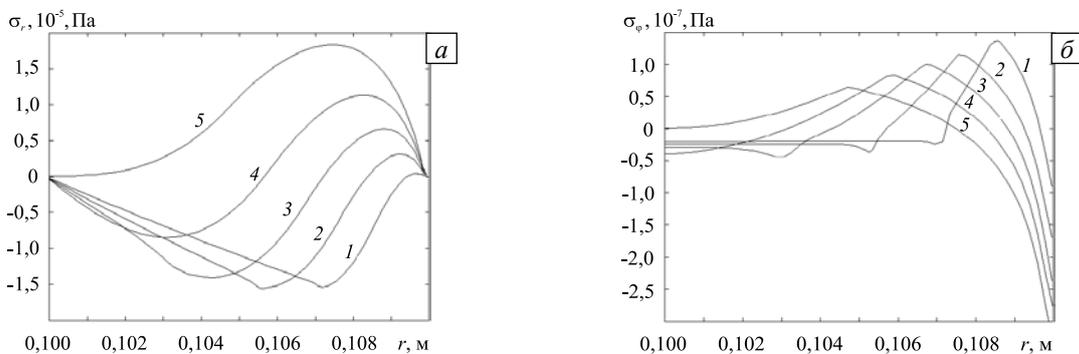


Рис. 2. Кривые распределения радиальных (а) и окружных (б) напряжений Коши по толщине стенки трубы для различных моментов времени, с: 150 (кривая 1); 300 (2); 450 (3); 600 (4); 750 (5)

На рисунке 2 показана эволюция полей радиальных и окружных напряжений с течением времени. На начальном этапе охлаждения происходит резкая усадка внешних слоев изделия, что приводит к появлению сжимающих радиальных напряжений по всей толщине стенки трубы. В окружном направлении материал претерпевает растяжение в наружных слоях и сжатие — во внутренних. В дальнейшем происходит постепенное охлаждение и усадка материала, которой оказывают сопротивление затвердевшие внешние слои. Материал изделия в радиальном направлении постепенно переходит в зону растяжения, окружные напряжения вблизи внешней стенки становятся сжимающими. Видно, что по абсолютной величине окружные напряжения превышают радиальные на два порядка. С течением времени окружные напряжения достигают на внешнем радиусе величины, превышающей 30 МПа.

Итак, предложена методика и разработан численный алгоритм решения краевых задач термомеханики кристаллизующейся полимерной среды, которая основывается на сведении решения начальной нелинейной задачи к решению последовательности линеаризованных краевых задач. Принимаются во внимание возникающие в процессе охлаждения температурные и структурные деформации. Построены конечно-элементная аппроксимация метода и вычислительный алгоритм. Рассматривается применение предлагаемого подхода к решению задачи деформирования полимерной трубы при ее изготовлении с учетом больших деформаций и кристаллизации материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 13-01-00553-а, 13-01-96038-р_урал_а).

Литература

1. *Бегисhev В.П., Матвееvко В.П., Писцов Н.В., Шардаков И.Н.* Моделирование термомеханических процессов в кристаллизующемся полимере // МТТ. – 1997. – № 4. – С. 120-132. DOI
2. *Шардаков И.Н., Голотина Л.А.* Моделирование деформационных процессов в аморфно-кристаллических полимерах // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2009. – Т. 2, № 3. – С. 106-113. DOI
3. *Завьялова Т.Г., Труфанов Н.А.* Определяющие соотношения для вязкоупругого тела в условиях кристаллизации // ПМТФ. – 2005. – Т. 46, № 4. – С. 78-87. DOI
4. *Куликова Т.Г., Труфанов Н.А.* Численное решение краевой задачи термомеханики для кристаллизующегося вязкоупругого полимера // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 2. – С. 38-52. DOI
5. *Малкин А.Я., Бегисhev В.П.* Химическое формирование полимеров. – М.: Химия, 1991. – 540 с.
6. *Anand L., Ames L.M., Srivastava V., Chester S.A.* A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation // Int. J. Plasticity. – 2009. – Vol. 25, no. 8. – P. 1474-1494. DOI
7. *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, no. 1. – P. 39-52. DOI
8. *Роговой А.А.* Определяющие соотношения для конечных упруго-неупругих деформаций // ПМТФ. – 2005. – Т. 46, № 5. – С. 138-149. DOI
9. *Куликов Р.Г., Звягин А.А.* Использование параллельных вычислительных технологий при решении задачи одноосного деформирования в рамках нелинейной теории упругости // Научно-технический вестник Поволжья. – 2013. – № 2. – С. 27-31.
10. *Куликова Т.Г.* К описанию деформирования кристаллизующегося полимерного материала с учетом больших деформаций // Вестник ПГТУ. Механика. – 2010. – № 3. – С. 67-85.
11. *Куликова Т.Г., Труфанов Н.А.* Определяющие соотношения для кристаллизующегося полимерного материала и пошаговая процедура решения с учетом конечных деформаций // Вычислительная механика: Сборник научных трудов. – 2008. – № 7. – С. 170-178.
12. *Адамов А.А., Матвееvко В.П., Труфанов Н.А., Шардаков И.Н.* Методы прикладной вязкоупругости. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 411 с.
13. *Лурье А.И.* Нелинейная теория упругости. – М.: Наука, 1970. – 940 с.
14. *Куликов Р.Г., Куликова Т.Г.* К вопросу определения деформированного состояния кристаллизующейся полимерной среды с учетом больших деформаций // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2012. – № 1. – С. 62-72.
15. *Srivastava V., Chester S.A., Anand L.* Thermally actuated shape-memory polymers: Experiments, theory and numerical simulations // J. Mech. Phys. Solids. – 2010. – Vol. 58, no. 8. – P. 1100-1124. DOI
16. *Адамов А.А.* Исследование и моделирование нестационарного термомеханического поведения вязкоупругих резиноподобных материалов и элементов конструкций при конечных деформациях // Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.02.04. – Пермь, ИМСС УрО РАН, 2004. – 303 с.
17. *Rogovoy A.A.* Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations // Continuum Mech. Therm. – 2012. – Vol. 24, no. 2. – P. 81-114. DOI
18. *Зенкевич О.* Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 542 с.
19. *Теплофизические и реологические характеристики полимеров: Справочник / Под ред. Ю.С. Липатова.* – Киев: Наукова думка, 1977. – 244 с.
20. *Пивень А.Н., Гречаная Н.А., Чернобыльский И.И.* Теплофизические свойства полимерных материалов. – Киев: Вища школа, 1976. – 180 с.
21. *Нильсен Л.* Механические свойства полимеров и полимерных композиций. – М.: Химия, 1978. – 312 с.

References

1. *Shardakov I.N., Matveenko V.P., Pistsov N.V., Begishev V.P.* Simulation of thermomechanical processes in crystallizing polymer. *Polym. Eng. Sci.*, 1997, vol. 37, no. 8, pp. 1270-1279. DOI
2. *Shardakov I.N., Golotina L.A.* Modeling of deformation processes in amorphous-crystalline polymers. *Vycisl. meh. splos. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2009, vol. 2, no. 3, pp. 106-113. DOI
3. *Zav'yalova T.G., Trufanov N.A.* Constitutive relations for a viscoelastic body under crystallization conditions. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2005, vol. 46, no. 4, pp. 523-530. DOI
4. *Kulikova T.G., Trufanov N.A.* Numerical solution of a thermomechanical boundary-value problem for crystallizing viscoelastic polymer. *Vycisl. meh. splos. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2008, vol. 1, no. 2, pp. 38-52. DOI
5. *Malkin A.Ya., Begishev V.P.* *Khimicheskoe formovanie polimerov* [Chemical forming of polymers]. Moscow: Khimiya, 1991. 540 p.
6. *Anand L., Ames L.M., Srivastava V., Chester S.A.* A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation. *Int. J. Plasticity*, 2009, vol. 25, no. 8, pp. 1474-1494. DOI
7. *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, no. 1, pp. 39-52. DOI
8. *Rogovoi A.A.* Defining relations for finite elastic-inelastic deformations. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2005, vol. 46, no. 5, pp. 730-739. DOI
9. *Kulikov R.G., Zvyagin A.A.* Ispol'zovanie parallel'nykh vychislitel'nykh tekhnologii pri reshenii zadachi odnoosnogo deformirovaniya v ramkakh nelineinoi teorii uprugosti [Application of parallel computing technologies to solution of nonlinear elastic uniaxial deformation boundary problem]. *Nauchno-tekhnikeskii vestnik Povolzh'ya – Scientific and Technical Bulletin of Volga Region*, 2013, no. 2, pp. 27-31.

10. Kulikova T.G. К описанию деформирования кристаллизующегося полимерного материала с учетом больших деформаций [To the description of crystallizing polymer material's deformation with regard to large deformations]. *PSTU Mechanics Bulletin*, 2010, no. 3, pp. 67-85.
11. Kulikova T.G., Trufanov N.A. Opredelyayushchie sootnosheniya dlya kristallizuyushchegosya polimernogo materiala i poshagovaya protsedura resheniya s uchetom konechnykh deformatsii [Constitutive relations for crystallizing polymer material and stepwise solution procedure taking into account finite deformations]. *Vychislitel'naya mekhanika: Sbornik nauchnykh trudov – Computational Mechanics: Proceedings*, 2008, no. 7, pp. 170-178.
12. Adamov A.A., Matveenko V.P., Trufanov N.A., Shardakov I.N. *Metody prikladnoi vyzkouprugosti* [Methods of applied viscoelasticity]. Ekaterinburg: UB RAS, 2003. 411 p.
13. Lur'e A.I. *Nelineinaya teoriya uprugosti* [Nonlinear theory of elasticity]. Moscow: Nauka, 1970. 940 p.
14. Kulikov R.G., Kulikova T.G. К вопросу определения деформированного состояния кристаллизующегося полимерного материала с учетом больших деформаций [On the question of definition of crystallizing polymer media deformed state accounting big deformations]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2012, no. 1, pp. 62-72.
15. Srivastava V., Chester S.A., Anand L. Thermally actuated shape-memory polymers: Experiments, theory and numerical simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 2010, vol. 58, no. 8, pp. 1100-1124. DOI
16. Adamov A.A. *Issledovanie i modelirovanie nestatsionarnogo termomekhanicheskogo povedeniya vyzkouprugikh rezinopodobnykh materialov i elementov konstruktсии pri konechnykh deformatsiyakh* [Investigation and modeling of nonstationary thermomechanical behavior of viscoelastic rubber-like materials and structural elements at finite strains]. PhD Dissertation, Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, 2004. 303 p.
17. Rogovoy A.A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations. *Continuum Mech. Therm.*, 2012, vol. 24, no. 2, pp. 81-114. DOI
18. Zenkevich O. *Metod konechnykh elementov v tekhnike* [The finite element method in engineering]. Moscow: Mir, 1975. 542 p.
19. *Teplofizicheskie i reologicheskie kharakteristiki polimerov: Spravochnik* [Thermophysical and rheological characteristics of polymers: A handbook], ed. Yu.S. Lipatov. Kiev: Naukova dumka, 1977. 244 p.
20. Piven' A.N., Grechanaya N.A., Chernobyl'skii I.I. *Teplofizicheskie svoistva polimernykh materialov* [Thermophysical properties of polymer materials]. Kiev: Vishcha shkola, 1976. 180 p.
21. Nielsen L.E. *Mechanical properties of polymers and composites*. Marsel Dekker Inc., 1974. 272 p.

Поступила в редакцию 12.02.2014; опубликована в электронном виде 24.06.2014