

УДК 539.376

**Т.Г. Куликова**

Пермский государственный технический университет

## **К ОПИСАНИЮ ДЕФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЗУЮЩЕГОСЯ ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА С УЧЕТОМ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ**

Предлагаются определяющие соотношения для кристаллизующегося упругого материала с учетом конечных деформаций. Рассматривается процедура линеаризации при решении краевых задач с большими деформациями, позволяющая ввести в рассмотрение температурные деформации и деформации структурной усадки материала. Работоспособность модели тестируется на задачах простого сдвига и одноосного деформирования.

**Ключевые слова:** кристаллизация, конечные деформации, линеаризация.

Технологический процесс по производству значительной части полимерных изделий и конструкций содержит этап охлаждения материала, сопровождающийся его кристаллизацией. Технологические и остаточные напряжения, формирующиеся в таких изделиях вследствие температурной и деформационной неоднородностей, могут приводить к снижению эксплуатационных качеств изделий и даже их разрушению еще на стадии изготовления. Поэтому актуальной становится проблема описания термомеханических процессов в полимерных материалах в условиях фазового перехода. Учитывая, что многие полимеры претерпевают существенную структурную усадку, связанную с переходом из одного фазового состояния в другое, определяющие соотношения для описания таких термомеханических процессов, по возможности, должны быть построены для случая больших деформаций.

Построению определяющих соотношений для кристаллизующихся сред посвящено достаточно большое количество работ. Ряд из них рассматривают кристаллизующуюся среду в каждой точке как двухкомпонентную смесь аморфной фазы и полностью закристаллизовавшегося продукта [1–3], не выделяя фронт кристаллизации, что характерно для большинства кристаллизующихся полимерных материалов. К настоящему времени предложены определяющие соотношения для кристаллизующейся среды, построенные для случая малых дефор-

маций с учетом [3] и без учета [1] вязкоупругих свойств материала. В работе [2] предложен вариант определяющих соотношений, которые описывают связь напряженно-деформированного состояния с процессами кристаллизации и стеклования, позволяют описать эффекты вынужденной высокоэластичности, но не учитывают конечных деформаций. Соотношения, которые приводятся в данной публикации, являются развитием соотношений, предложенных в работах [1, 3], на случай учета конечных деформаций материала. При построении соотношений учет конечных деформаций осуществлен по аналогии с подходами, изложенными в работах [4, 5], в которых соотношения получены на основе кинематики наложения малых деформаций на конечные деформации безотносительно процесса кристаллизации.

При получении определяющих соотношений с учетом конечных деформаций для кристаллизующегося материала использованы понятия начальной (соответствующей моменту времени  $t = 0$ ) и текущей (соответствующей моменту времени  $t$ ) конфигураций [5]. Наряду с текущей и начальной конфигурациями тела в рассмотрение введена некоторая промежуточная конфигурация (соответствующая моменту времени  $\tau$ ,  $0 < \tau < t$ ). Начальная конфигурация определяется радиус-вектором  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(x, y, z)$ , текущая конфигурация – радиус-вектором

$\mathbf{R} = \mathbf{R}(x, y, z)$ , а промежуточная – радиус-вектором  $\overset{\tau}{\mathbf{R}} = \overset{\tau}{\mathbf{R}}(x, y, z)$  (рис. 1). В каждой из конфигураций введены в рассмотрение основные и взаимные базисы:  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{r}^i$ ,  $\mathbf{R}_i$ ,  $\mathbf{R}^i$ ,  $\overset{\tau}{\mathbf{R}}_i$ ,  $\overset{\tau}{\mathbf{R}}^i$ .

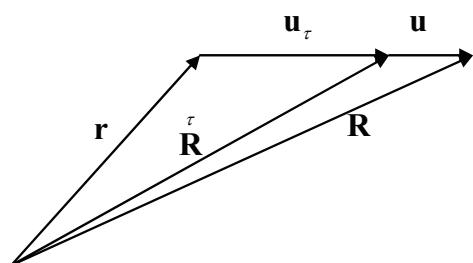


Рис. 1. Связь начальной, промежуточной и текущей конфигураций

При получении определяющих соотношений кристаллизующаяся из расплава система рассматривается как двухкомпонентная смесь исходного и конечного продуктов, доля которых в общем объеме определяется степенью кристаллизации полимера  $\alpha(t)$ .

Упругий потенциал кристаллизующейся системы может быть представлен в виде суммы упругого потенциала для аморфной фазы и упругого потенциала для кристаллической фазы следующим образом [6]:

$$W(\mathbf{G}_t^\times) = (1 - \alpha(t)) W_a(\mathbf{G}_t^\times) + W_{kp}^1 + W_{kp}^2 + \dots + W_{kp}^n, \quad (1)$$

где  $W_{kp}^i = W_{kp}(\mathbf{G}_{t_i-t}^\times) \Delta \alpha_i$  – доля потенциала, которую привносит в общий потенциал часть кристаллической фазы, соответствующая приращению степени кристаллизации  $\Delta \alpha_i$  в момент времени  $t_i$ ;  $\mathbf{G}_t^\times = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$  – тензор меры деформаций Коши-Грина [5], соответствующий деформированию от начального до текущего момента времени;  $\mathbf{F}$  – градиент места из начальной конфигурации в текущую конфигурацию;  $\mathbf{G}_{t_i-t}^\times = \mathbf{F}_i^T \cdot \mathbf{F}_i$  – тензор меры деформаций Коши-Грина, соответствующий деформированию от момента времени  $t_i$  до текущего момента времени;  $\mathbf{F}_i$  – градиент места из конфигурации, в которой появилась доля кристаллической фазы  $\Delta \alpha_i$ , в текущую конфигурацию;  $W_a(\mathbf{G}_t^\times)$  – упругий потенциал аморфной фазы.

Учитывая, что  $\mathbf{G}_{t_i-t}^\times = \mathbf{f}_{t_i}^{-T} \cdot \mathbf{G}_t^\times \cdot \mathbf{f}_{t_i}^{-1}$  [6], после осуществления предельного перехода в соотношении (1) по степени кристаллизации выражение для упругого потенциала можно записать в виде

$$W(\mathbf{G}_t^\times) = (1 - \alpha(t)) W_a(\mathbf{G}_t^\times) + \int_0^{\alpha(t)} W_{kp}(\mathbf{f}_\tau^{-T} \cdot \mathbf{G}_t^\times \cdot \mathbf{f}_\tau^{-1}) d\alpha(\tau),$$

где  $\mathbf{f}_\tau$  – градиент места из начальной конфигурации в конфигурацию, соответствующую моменту времени  $\tau$ .

Потенциал  $W(\mathbf{G}_t^\times)$  позволяет получить определяющие соотношения в виде

$$\mathbf{Q} = J^{-1} \mathbf{P}_II,$$

где  $\mathbf{Q} = t^{ij} \mathbf{r}_i \mathbf{r}_j$  – энергетический тензор напряжений;  $J = \sqrt{G/g}$ ;  $G = \det(G_{ij})$  – определитель матрицы ковариантных компонент метрического тензора в текущей конфигурации;  $g = \det(g_{ij})$  – определитель матрицы ковариантных компонент метрического тензора в начальной конфигурации  $\mathbf{g}$ ;  $\mathbf{P}_II = 2\partial W(\mathbf{G}_t^\times)/\partial \mathbf{G}_t^\times$  – тензор Пиола–Кирхгофа 2-го рода.

В работе [7] рекомендуется в качестве упругого потенциала для полимерных материалов вариант двухконстантного потенциала Пенга–Ландела

$$W = \frac{1}{2}\mu(I_1 I_3^{-1/3} - 3) + \frac{1}{2}B(I_3^{1/2} - 1)^2.$$

В этом случае, суммируя напряжения от аморфной и кристаллической фаз ( $\mathbf{Q}_a = 2J^{-1}\partial W_a(\mathbf{G}_t^\times)/\partial \mathbf{G}_t^\times$  и  $\mathbf{Q}_{kp} = 2J^{-1}\partial \bar{W}_{kp}(\mathbf{G}_t^\times)/\partial \mathbf{G}_t^\times$ ,

$$\bar{W}_{kp}(\mathbf{G}_t^\times) = \int_0^{\alpha(t)} W_{kp}(\mathbf{f}_\tau^{-T} \cdot \mathbf{G}_t^\times \cdot \mathbf{f}_\tau^{-1}) d\alpha(\tau),$$

с учетом правил дифференци-

рования тензорных функций [8], получаем определяющие соотношения в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(t) = & \left\{ \mu^a \left[ \left( I_3(\mathbf{G}_t^\times) \right)^{-5/6} \left( \mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_t^\times)}{3} \mathbf{G}_t^{\times-1} \right) \right] + B^a \left( \theta(\mathbf{G}_t^\times) \mathbf{G}_t^{\times-1} \right) \right\} (1 - \alpha(t)) + \\ & + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \mu^{kp} \left[ \left( I_3(\mathbf{G}_{\tau-t}^\times) \right)^{-5/6} \left( \mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_{\tau-t}^\times)}{3} \mathbf{G}_{\tau-t}^{\times-1} \right) \right] + B^{kp} \left( \theta(\mathbf{G}_{\tau-t}^\times) \mathbf{G}_{\tau-t}^{\times-1} \right) \right\} d\alpha(\tau) + \\ & + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \mu^a \left[ \left( I_3(\mathbf{G}_\tau^\times) \right)^{-5/6} \left( \mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_\tau^\times)}{3} \mathbf{G}_\tau^{\times-1} \right) \right] + B^a \left( \theta(\mathbf{G}_\tau^\times) \mathbf{G}_\tau^{\times-1} \right) \right\} d\alpha(\tau), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\mu^a, B^a, B^{kp}, \mu^{kp}$  – константы материала для аморфной и кристаллической фазы соответственно;  $\theta$  – относительное изменение объема;  $I_1, I_2, I_3$  – главные инварианты тензора второго ранга, определяемые обычным образом [7];  $(\mathbf{G}_t^\times)^{-1}$  – тензор, обратный к тензору меры деформаций Коши–Грина.

На практике часто используют процедуру линеаризации нелинейных соотношений для решения задач с большими упругими деформациями. Процедура линеаризации дает возможность конструировать алгоритм численного решения краевой задачи механики как многошаговый процесс с линейными физическими соотношениями на каждом шаге, что позволяет ввести в рассмотрение температурные деформации и деформации структурной усадки известным образом:

в виде суперпозиции на каждом шаге тензора малых деформаций, тензоров температурных и усадочных деформаций. Проиллюстрируем определяющие соотношения (2) и возможность их линеаризации на примере некоторых случаев простого деформирования в декартовой системе координат.

### Простой сдвиг

Пусть вектор перемещений точек тела определен составляющими

$$u_x = sty, \quad u_y = 0, \quad u_z = 0,$$

где  $u_i$  – компоненты вектора перемещений,  $s$  – скалярная величина,  $t$  – время,  $x, y, z$  – декартовы координаты.

Радиус-векторы произвольной точки тела в начальной и текущей конфигурации имеют вид

$$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k},$$

$$\mathbf{R} = (sty + x)\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k},$$

где  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  – базисные векторы декартовой системы координат.

Базисные векторы основных базисов начальной и текущей конфигураций определяются следующим образом:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{i}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{j}, \quad \mathbf{r}_3 = \mathbf{k};$$

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{i}, \quad \mathbf{R}_2 = sty\mathbf{i} + \mathbf{j}, \quad \mathbf{R}_3 = \mathbf{k}.$$

Базис  $\mathbf{R}_i$  определяет ковариантные компоненты метрического тензора в текущей конфигурации:

$$G_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & st & 0 \\ st & s^2t^2 + 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad G = \det(G_{ij}) = 1.$$

Контравариантные компоненты метрического тензора в текущей конфигурации, полученные по ковариантным компонентам, позволяют определить взаимный базис текущей конфигурации:

$$\mathbf{R}^1 = \mathbf{i} - st\mathbf{j}, \quad \mathbf{R}^2 = \mathbf{j}, \quad \mathbf{R}^3 = \mathbf{k}.$$

Взаимный базис начальной конфигурации совпадает с основным.

Основной и взаимный базисы текущей конфигурации позволяют определить операторы Гамильтона относительно начальной и проме-

жуточной конфигураций в базисе начальной системы координат, применительно к вектору перемещений произвольной точки  $\mathbf{u}$  относительно соответствующей конфигурации:

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ st & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = sty\mathbf{i}; \quad (3)$$

$$\bar{\nabla} \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ s(t-\tau) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = s(t-\tau)y\mathbf{i}.$$

Определим градиент места из начальной конфигурации в текущую, используя соотношение (3)

$$\mathbf{F}_t = (\nabla \mathbf{R})^T = \mathbf{g} + (\nabla \mathbf{u})^T, \quad (4)$$

где  $\mathbf{g}$  – метрический тензор, определенный в начальной конфигурации, совпадающий с единичным тензором,  $g = \det(g_{ij}) = 1$ .

Используя (4), получим тензор меры деформаций Коши-Грина, соответствующий деформированию тела от начального до текущего момента времени и обратный к нему тензор в базисе начальной конфигурации

$$\mathbf{G}_t^\times = \mathbf{F}_t^T \cdot \mathbf{F}_t = \begin{pmatrix} 1 & st & 0 \\ st & 1+s^2t^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{G}_t^\times)^{-1} = \begin{pmatrix} 1+s^2t^2 & -st & 0 \\ -st & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Инварианты  $\mathbf{G}_t^\times$  имеют вид

$$I_1(\mathbf{G}_t^\times) = 3 + s^2t^2, \quad I_3(\mathbf{G}_t^\times) = 1, \quad \theta(\mathbf{G}_t^\times) = 0, \quad (6)$$

что отражает специфику деформирования и соответствует нулевому изменению объема.

Аналогично определим все величины, соответствующие деформированию тела от промежуточного момента времени  $\tau$  до текущего момента времени  $t$ :

$$\mathbf{G}_{\tau-t}^\times = \begin{pmatrix} 1 & s(t-\tau) & 0 \\ s(t-\tau) & 1+s^2(t-\tau)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$\left(\mathbf{G}_{\tau-t}^{\times}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 1+s^2(t-\tau)^2 & -s(t-\tau) & 0 \\ -s(t-\tau) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$I_1(\mathbf{G}_{\tau-t}^{\times}) = 3 + s^2(t-\tau)^2, \quad I_3(\mathbf{G}_{\tau-t}^{\times}) = 1, \quad \theta(\mathbf{G}_{\tau-t}^{\times}) = 0. \quad (9)$$

С учетом (5)–(9) соотношение (2) конкретизируем в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(t) = & \mu_a \left[ \mathbf{g} - \left( 1 + \frac{s^2 t^2}{3} \right) \begin{pmatrix} 1+s^2 t^2 & -st & 0 \\ -st & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] (1 - \alpha(t)) + \\ & + \int_0^{\alpha(t)} \mu_{kp} \left[ \mathbf{g} - \left( 1 + \frac{s^2 (t-\tau)^2}{3} \right) \begin{pmatrix} 1+s^2 (t-\tau)^2 & -s(t-\tau) & 0 \\ -s(t-\tau) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] d\alpha(\tau) + \\ & + \int_0^{\alpha(t)} \mu_a \left[ \mathbf{g} - \left( 1 + \frac{s^2 \tau^2}{3} \right) \begin{pmatrix} 1+s^2 \tau^2 & -s\tau & 0 \\ -s\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] d\alpha(\tau). \quad (10) \end{aligned}$$

Соотношения (10) – нелинейные физические соотношения для кристаллизующейся упругой среды, учитывающие конечные деформации материала, для случая простого сдвига.

Для линеаризации уравнения введем в рассмотрение промежуточную конфигурацию, близкую к текущей [5]. Близость конфигураций определяется равенством  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 + \varepsilon \mathbf{u}$ , где  $\mathbf{u}$  – вектор перемещения точки;  $\varepsilon$  – малый формальный параметр;  $\mathbf{R}_0$  – радиус-вектор точки в промежуточной конфигурации, близкой к текущей;  $\mathbf{R}$  – радиус-вектор точки в текущей конфигурации. Связь радиус-векторов промежуточной и текущей конфигураций позволяет получить представления всех кинематических величин, определяющих (2), удерживая слагаемые, линейные относительно параметра  $\varepsilon$ :

$$\mathbf{G}_t^{\times} = \mathbf{G}_{t_0}^{\times} + 2\varepsilon \mathbf{e}^*,$$

$$\left(\mathbf{G}_t^{\times}\right)^{-1} = \left(\mathbf{G}_{t_0}^{\times}\right)^{-1} - 2\varepsilon \left(\mathbf{G}_{t_0}^{\times}\right)^{-1} \cdot \mathbf{e}^* \left(\mathbf{G}_{t_0}^{\times}\right)^{-1},$$

$$I_1(\mathbf{G}_t^{\times}) = I_1(\mathbf{G}_{t_0}^{\times}) + 2\varepsilon I_1(\mathbf{e}^*),$$

$$I_3(\mathbf{G}_t^\times) = I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times) + I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times)(\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-T} \cdot 2\mathbf{e}^*, \quad (11)$$

$$I_3^{-5/6}(\mathbf{G}_t^\times) = I_3^{-5/6}(\mathbf{G}_{t_0}^\times) - \frac{10}{6}\varepsilon I_3^{-5/6}(\mathbf{G}_{t_0}^\times)(\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-T} \cdot \mathbf{e}^*,$$

$$\theta(\mathbf{G}_t^\times) = \theta(\mathbf{G}_{t_0}^\times) + \frac{\varepsilon}{\sqrt{I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}} \varepsilon I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times)(\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-T} \cdot \mathbf{e}^*,$$

где  $\mathbf{e} = (\mathbf{h} + \mathbf{h}^T)/2$ ,  $\mathbf{e}^* = \mathbf{F}_{t_0}^T \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{F}_{t_0}$ ,  $\mathbf{h} = (\nabla_0 \mathbf{u})^T$ ,  $\nabla_0$  – оператор Гамильтона относительно промежуточной конфигурации, близкой к текущей.

Подставляя соотношения (11) в (2) и также удерживая только линейные слагаемые относительно параметра  $\varepsilon$ , получаем линеаризованные определяющие соотношения, представленные в работе [6], в которые входят уже известные на текущий момент кинематические величины в промежуточной конфигурации и тензор малых деформаций  $\mathbf{e}^*$ .

Для рассматриваемого случая деформирования все необходимые тензорные и скалярные величины имеют вид

$$\begin{aligned} \nabla_0 \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ s(t-t_0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_{t_0-t}^\times = \begin{pmatrix} 1 & s(t-t_0) & 0 \\ s(t-t_0) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ 2\mathbf{e} &= \begin{pmatrix} 0 & s(t-t_0) & 0 \\ s(t-t_0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ 2\mathbf{e}^* &= \begin{pmatrix} 0 & s(t-t_0) & 0 \\ s(t-t_0) & 2s^2(t-t_0)t_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times) &= 1, \quad \theta(\mathbf{G}_{t_0}^\times) = 0. \end{aligned}$$

С учетом полученных соотношений линеаризованные определяющие соотношения для случая простого сдвига имеют вид

$$\mathbf{Q}(t) = \mathbf{Q}(t_0) - \mu_a \left[ \mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \right] (\alpha(t) - \alpha(t_0)) +$$

$$\begin{aligned}
& + \mu_a \left[ 2 \frac{I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \cdot \mathbf{e}^* \cdot (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} - \frac{2}{3} I_1(\mathbf{e}^*) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \right] (1 - \alpha(t)) + \\
& + \mu_{kp} \mathbf{g} (\alpha(t) - \alpha(t_0)) + \\
& + \mu_{kp} \int_0^{\alpha(t_0)} \left[ 2 \frac{I_1(\mathbf{G}_{\tau-t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{\tau-t_0}^\times)^{-1} \cdot \mathbf{e}^* \cdot (\mathbf{G}_{\tau-t_0}^\times)^{-1} - \frac{2}{3} I_1(\mathbf{e}^*) (\mathbf{G}_{\tau-t_0}^\times)^{-1} \right] d\alpha(\tau) + \\
& + \mu_a \frac{\mathbf{g} - \frac{I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} + \frac{2I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \cdot \mathbf{e}^* \cdot (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} - \frac{2}{3} I_1(\mathbf{e}^*) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1}}{(\alpha(t) - \alpha(t_0))^{-1}}.
\end{aligned}$$

Рассмотрим частный случай: материал подвергается простому сдвигу, находясь в аморфном состоянии при температуре выше температуры фазового превращения ( $\alpha(t) = 0$ ).

Тогда получаем нелинеаризованные и линеаризованные определяющие соотношения в виде

$$\mathbf{Q}(t) = \mu_a \left[ \mathbf{g} - \left( 1 + \frac{s^2 t^2}{3} \right) \begin{pmatrix} 1 + s^2 t^2 & -st & 0 \\ -st & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right], \quad (12)$$

$$\mathbf{Q}(t) = \mathbf{Q}(t_0) + \mu_a \left[ 2 \frac{I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \cdot \mathbf{e}^* \cdot (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} - \frac{2}{3} I_1(\mathbf{e}^*) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \right]. \quad (13)$$

### Одноосная деформация

Пусть растяжение происходит в направлении оси  $Ox$ . Компоненты вектора перемещений и радиус-векторы произвольной точки тела в начальной и текущей конфигурации имеют вид

$$u_x = stx, \quad u_y = 0, \quad u_z = 0,$$

$$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k},$$

$$\mathbf{R} = (stx + x)\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}.$$

Аналогичным способом получаем все величины, входящие в исходные соотношения.

$$\mathbf{G}_t^{\times} = \begin{pmatrix} (1+st)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, (\mathbf{G}_t^{\times})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+st)^2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$I_1(\mathbf{G}_t^{\times}) = (1+st)^2 + 2, I_3(\mathbf{G}_t^{\times}) = (1+st)^2, \theta(\mathbf{G}_t^{\times}) = st,$$

$$\mathbf{G}_{\tau-t}^x = \begin{pmatrix} \left(\frac{1+st}{1+s\tau}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, (\mathbf{G}_{\tau-t}^x)^{-1} = \begin{pmatrix} \left(\frac{1+s\tau}{1+st}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$I_1(\mathbf{G}_{\tau-t}^x) = \left(\frac{1+st}{1+s\tau}\right)^2 + 2, I_3(\mathbf{G}_{\tau-t}^x) = \left(\frac{1+st}{1+s\tau}\right)^2, \theta(\mathbf{G}_{\tau-t}^x) = \frac{s(t-\tau)}{1+s\tau}.$$

Нелинейные определяющие соотношения (2) для случая одноосного растяжения конкретизируем в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(t) = & \mu_a (1+st)^{-5/3} \left[ \mathbf{g} - \frac{(1+st)^2 + 2}{3} \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+st)^2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} (1-\alpha(t)) + \right. \\ & \left. + B_a st \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+st)^2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} (1-\alpha(t)) + \right. \\ & \left. + \int_0^{\alpha(t)} \mu_{kp} \left(\frac{1+st}{1+s\tau}\right)^{-5/3} \left[ \mathbf{g} - \frac{\left(\frac{1+st}{1+s\tau}\right)^2 + 2}{3} \begin{pmatrix} \left(\frac{1+s\tau}{1+st}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} d\alpha(\tau) + \right] \right] \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^{\alpha(t)} B_{kp} \frac{s(t-\tau)}{1+s\tau} \begin{pmatrix} \left(\frac{1+s\tau}{1+st}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} d\alpha(\tau) + \\
& + \int_0^{\alpha(t)} \mu_a (1+s\tau)^{-5/3} \left[ \mathbf{g} - \frac{(1+s\tau)^2 + 2}{3} \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{1+s\tau}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] d\alpha(\tau) + \\
& + \int_0^{\alpha(t)} B_a s\tau \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{1+s\tau}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} d\alpha(\tau). \tag{14}
\end{aligned}$$

Линеаризуя соотношения (14) также для частного случая (материал подвергается одноосному растяжению, находясь в аморфном состоянии при температуре выше температуры фазового превращения ( $\alpha(t)=0$ )), получаем нелинеаризованные и линеаризованные определяющие соотношения в виде

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}(t) = & \mu_a (1+st)^{-5/3} \left[ \mathbf{g} - \frac{(1+st)^2 + 2}{3} \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+st)^2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] + \\
& + B_a st \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+st)^2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}(t) = & \mathbf{Q}(t_0) - \mu_a \left[ \frac{10}{6} I_3^{-5/6} (\mathbf{G}_{t_0}^\times) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-T} \cdot \bar{\mathbf{e}}_a^* \left( g - \frac{I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \right) \right] + \\
& + \mu_a I_3^{-5/6} (\mathbf{G}_{t_0}^\times) \left[ 2 \frac{I_1(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}{3} (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \cdot \bar{\mathbf{e}}_a^* \cdot (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} - \frac{2}{3} I_1(\bar{\mathbf{e}}_a^*) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \right] + \\
& + B_a \left[ \frac{1}{\sqrt{I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}} I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-T} \cdot \bar{\mathbf{e}}_a^* (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} - 2\theta(\mathbf{G}_{t_0}^\times) (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \cdot \bar{\mathbf{e}}_a^* \cdot (\mathbf{G}_{t_0}^\times)^{-1} \right],
\end{aligned}$$

где

$$\mathbf{G}_{t_0-t}^\times = \begin{pmatrix} \left( \frac{1+st}{1+st_0} \right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{e}}^* = \frac{(\mathbf{h} + \mathbf{h}^T)/2}{\sqrt{I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times)}}, \quad I_3(\mathbf{G}_{t_0}^\times) = (1+st_0)^2, \quad \theta(\mathbf{G}_t^\times) = st_0.$$

На примере рассмотренных процессов деформирования для частного случая (материал является полностью аморфным) показано (рис. 2, 6), что в случае малых деформаций (скорость деформирования  $s = 0,001$ ) напряжения, полученные в рамках теории конечных деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений, практически совпадают с напряжениями, полученными в рамках теории малых деформаций. На рис. 3, 4, 7, 8 приведено сопоставление результатов расчета, полученных в рамках теории конечных деформаций с использованием линеаризованных и нелинеаризованных определяющих соотношений. Рис. 5 и 9 иллюстрируют сходимость результатов, полученных с использованием линеаризованных соотношений, с увеличением количества шагов по времени к точному решению. Все расчеты проведены для модуля продольной упругости  $E = 10^8 \text{ Н/м}^2$ , коэффициента Пуассона  $\nu = 0,3$ .

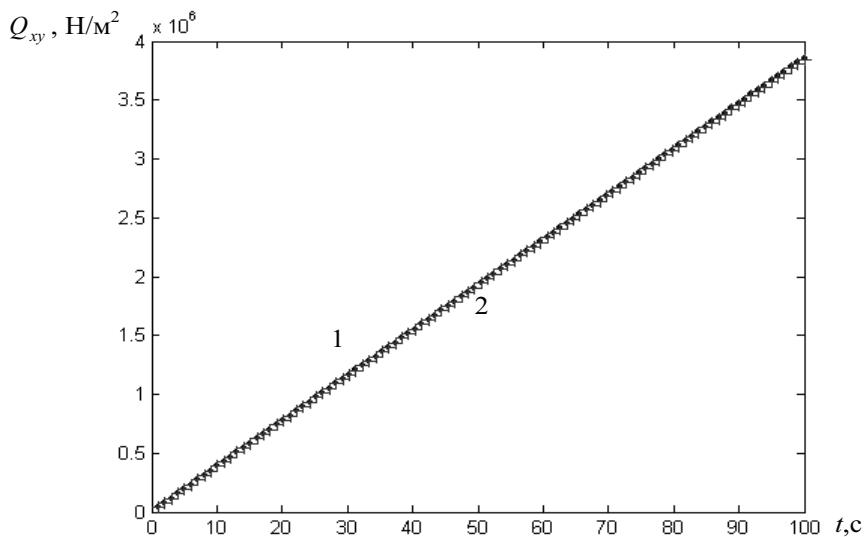


Рис. 2. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xy}$   
для аморфного полимера от времени:  $s = 0,001$ ;  
1 – в рамках теории больших деформаций с использованием  
линеаризованных определяющих соотношений;  
2 – в рамках теории малых деформаций

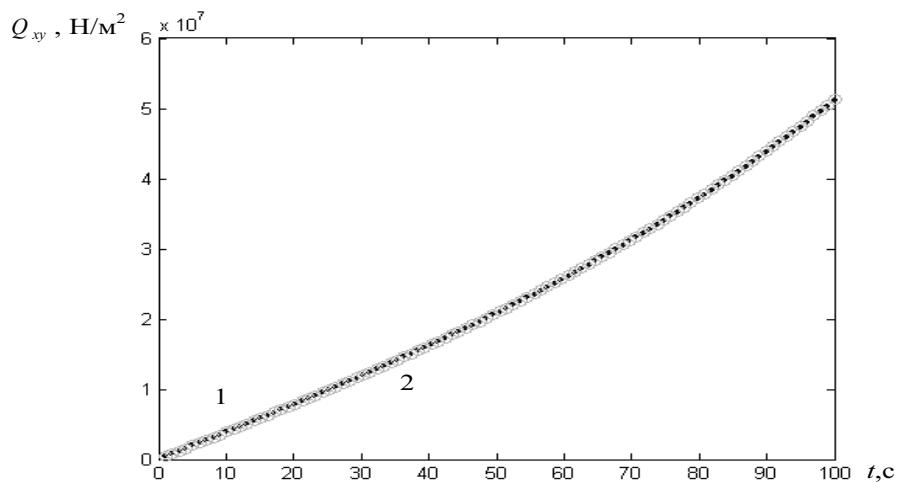


Рис. 3. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xy}$   
для аморфного полимера от времени:  $s = 0,01$ ;  
1 – в рамках теории больших деформаций с использованием  
нелинеаризованных определяющих соотношений;  
2 – в рамках теории больших деформаций с использованием  
линеаризованных определяющих соотношений

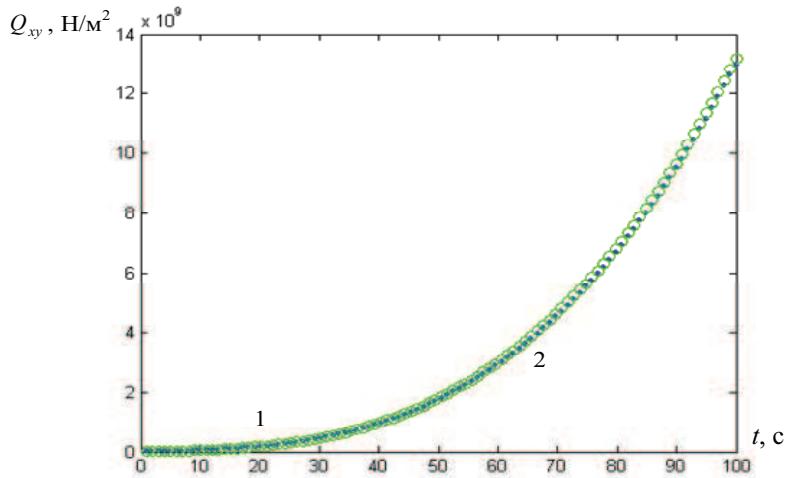


Рис. 4. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xy}$  для аморфного полимера от времени:  $s = 0,1$ ;  
 1 – в рамках теории больших деформаций с использованием нелинеаризованных определяющих соотношений;  
 2 – в рамках теории больших деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений

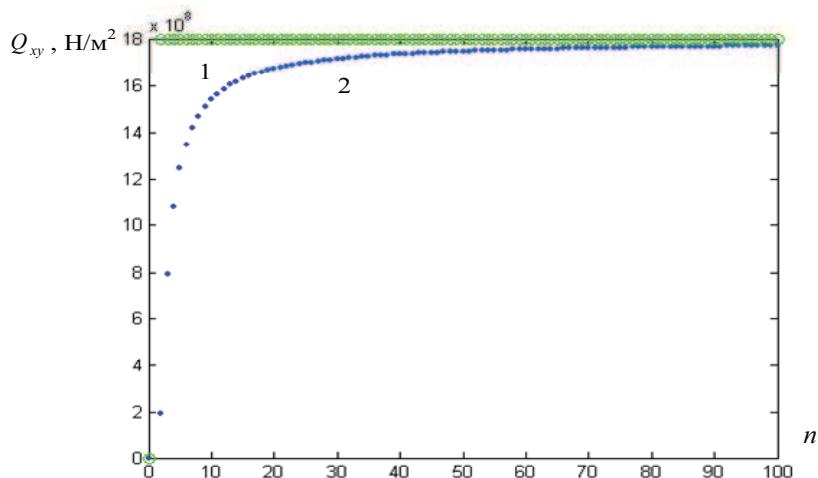


Рис. 5. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xy}$  для аморфного полимера от количества шагов по времени на момент времени:  $t = 100$  с,  $s = 0,1$ ;  
 1 – в рамках теории больших деформаций с использованием нелинеаризованных определяющих соотношений;  
 2 – в рамках теории больших деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений

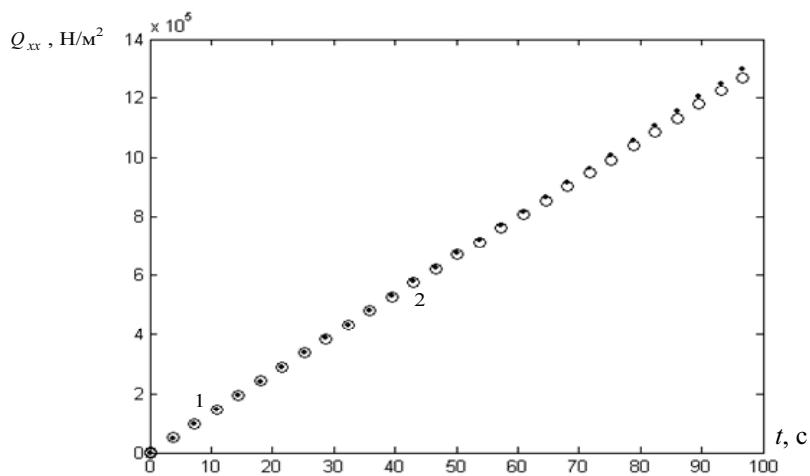


Рис. 6. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xx}$  для аморфного полимера от времени:  $s = 0,001$ ;

1 – в рамках теории больших деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений;  
2 – в рамках теории малых деформаций

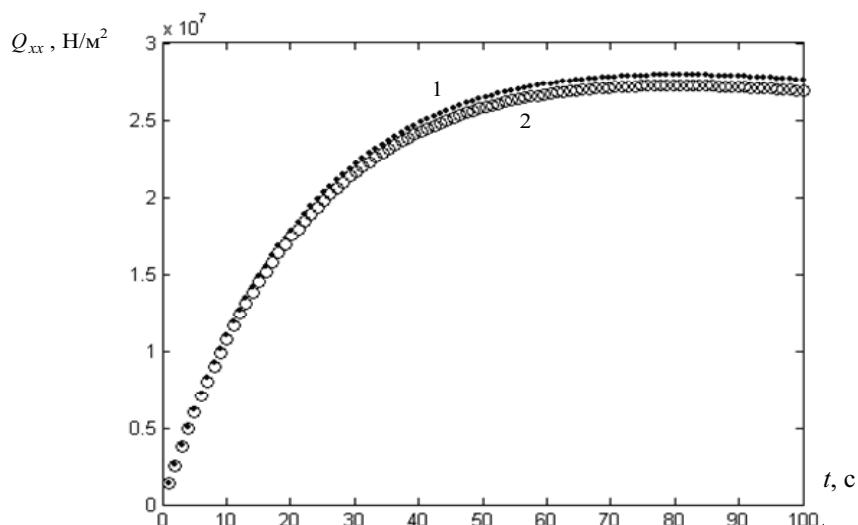


Рис. 7. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xx}$  для аморфного полимера от времени:  $s = 0,001$ ;

1 – в рамках теории больших деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений;  
2 – в рамках теории больших деформаций с использованием нелинеаризованных определяющих соотношений

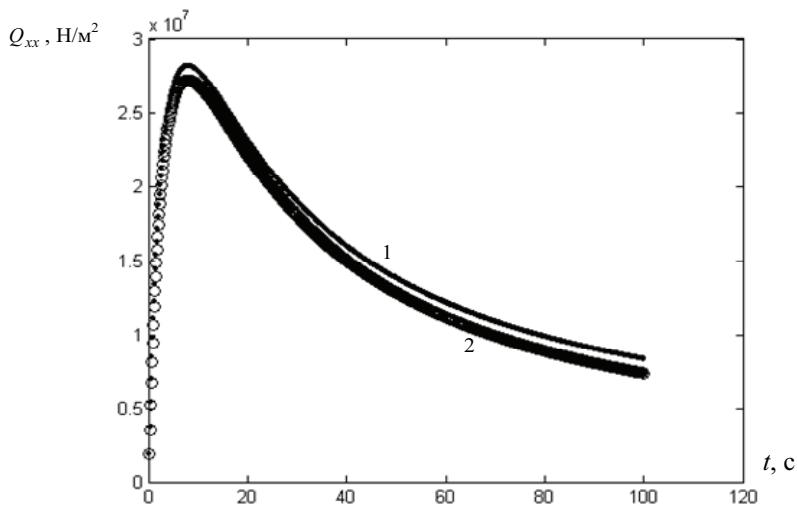


Рис. 8. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xx}$  для аморфного полимера от времени:  $s = 0,1$ ;  
 1 – в рамках теории больших деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений;  
 2 – в рамках теории больших деформаций с использованием нелинеаризованных определяющих соотношений

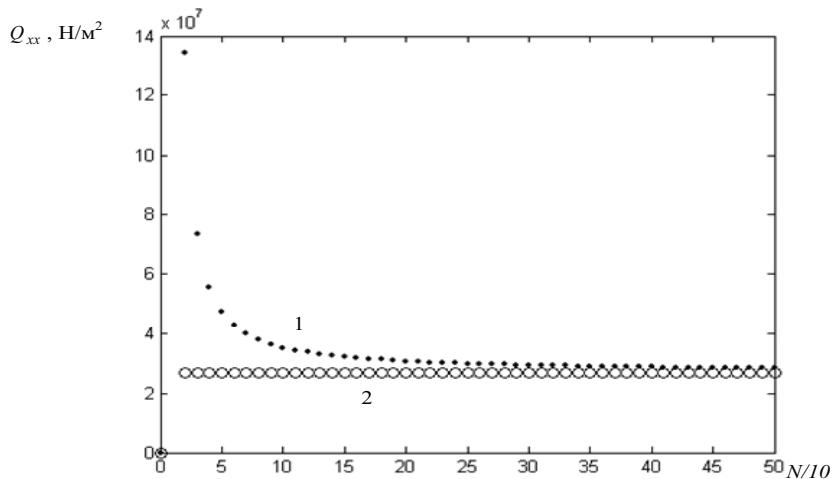


Рис. 9. Зависимость компоненты тензора напряжений  $Q_{xx}$  для аморфного полимера от количества шагов по времени  $N$  на момент времени  $t = 100$  с,  $s = 0,1$ ; 1 – в рамках теории больших деформаций с использованием линеаризованных определяющих соотношений; 2 – в рамках теории больших деформаций с использованием нелинеаризованных определяющих соотношений

Результаты расчетов показали возможность использования процедуры линеаризации при решении краевых задач с большими деформациями. Процедура линеаризации позволяет конструировать алгоритм численного решения краевой задачи механики, включающей линеаризованные определяющие соотношения как многошаговый процесс с линейными физическими соотношениями на каждом шаге, поэтому можно ввести в рассмотрение температурные деформации и деформации структурной усадки известным образом: в виде суперпозиции на каждом шаге тензора малых деформаций  $\epsilon^*$ , тензоров температурных и усадочных деформаций (последняя возникает только в кристаллической фазе материала).

### **Библиографический список**

1. Simulation of thermomechanical processes in crystallising polymer / I.N. Shardakov [et al.] // Polym. Engng and Sci. – 1997. – Vol. 37, No. 8. – P. 1270–1279.
2. Шардаков И.Н., Голотина Л.А. Моделирование деформационных процессов в аморфно-кристаллических полимерах // Вычислительная механика сплошных сред. – 2009. – Т. 2, № 3. – С. 106–113.
3. 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.
4. Новокшанов Р.С., Роговой А.А. Эволюционные определяющие соотношения для конечных вязкоупругих деформаций // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2005. – № 4. – С. 122–140.
5. Новокшанов Р.С., Роговой А.А. О построении зволяционных определяющих соотношений для конечных деформаций // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2002. – № 4. – С. 77–94.
6. Куликова Т.Г., Труфанов Н.А. Определяющие соотношения для кристаллизующегося полимерного материала и пошаговая процедура решения с учетом конечных деформаций // Вычислительная механика: сб. науч. тр. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2008. – № 7. – С. 170–180.
7. Методы прикладной вязкоупругости. / Адамов А.А. [и др.]; УрО РАН. – Екатеринбург, 2003. – 411 с.
8. Роговой А.А. Дифференцирование скалярных и тензорных функций тензорного аргумента // Вестник ПГТУ. Динамика и прочность машин. – 2001. – № 2. – С. 83–90.

Получено 10.11.2010