

УДК 519.6

И.Н. Бояршинова

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ОПТИМИЗАЦИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СТЕКЛЮЩИХСЯ ПОЛИМЕРОВ

Рассматривается задача определения термомеханических характеристик полимеров. В основу методики положено решение задачи оптимизации. В качестве целевой функции выбрана сумма квадратов отклонений расчетных напряжений от известных экспериментальных значений. Ограничения формулируются как квазистатическая краевая задача термовязкоупругости, решение которой проводится методом конечных элементов. Минимизация целевой функции осуществляется методом Нелдера-Мида. Единственность решения проверяется путем спуска из нескольких начальных приближений.

Ключевые слова: оптимизация, целевая функция, краевая задача термовязкоупругости, стеклющийся полимер.

I.N. Boyarshinova

State National Research Polytechnic University of Perm, Perm, Russian Federation

THE USE OF OPTIMIZATION TECHNIQUES FOR DEFINITION OF THE THERMOMECHANICAL BEHAVIOR CHARACTERISTICS OF VITRIFYING POLYMERS

The problem of determining the thermomechanical properties of polymers is considered. The methodology supposed solution to the optimization problem. As the criterion function is selected the sum of squared deviations of the calculated stresses from the known experimental values. Restrictions formulated as a quasi-static boundary value problem of thermoviscoelasticity which solution is spent by the method of the finite elements. The criterion function minimization is carried out by the Nelder-Mead method. The uniqueness of the solutions is checked by the descent of several initial approximations.

Keywords: optimization, criterion function, the boundary value problem of thermoviscoelasticity, vitrifying polymer.

Ключевой проблемой при разработке технологии производства полимерных изделий является определение характеристик материала, связанное с проведением дорогостоящих экспериментов. Поэтому

крайне важно искать новые методы обработки и анализа данных измерений, позволяющих получить достоверные результаты в тех случаях, когда эксперимент не дает полной информации.

В качестве альтернативы натурным испытаниям для определения термомеханических характеристик материала предлагается применение методов оптимизации для использования результатов сравнительно небольшого числа экспериментов [1].

1. Постановка задачи МДТТ

Цилиндр из стеклующегося полимера (эпоксидная смола ЭДТ-10) с заданной геометрией равномерно разогрет, а затем охлаждается до комнатной температуры. По результатам экспериментального определения остаточных напряжений требуется определить параметры (физико-механические константы), адекватно отражающие термомеханическое поведение материала.

Математическая модель, описывающая термомеханическое поведение стеклующегося полимера, представлена в работах [1,2]. Для рассматриваемого полимера существует переходный процесс стеклования, который характеризуется степенью застеклованности $N(T(t))$, ($0 \leq N \leq 1$), показывающей «завершенность» процесса стеклования при температуре $T(t)$.

Математическая постановка квазистатической краевой задачи, описывающей термовязкоупругое поведение изделия, включает уравнения нестационарной задачи теплопроводности (1)–(3), уравнения равновесия (4), соотношения Коши (5), граничные условия (6) и физические соотношения (7).

$$c\rho \dot{T} = \lambda \Delta T(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in V, \quad t \in [0, t_K], \quad (1)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_H(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in (V \cup S_1), \quad (2)$$

$$\lambda \mathbf{n} \cdot \text{grad} T = -h(T(\mathbf{x}, t) - T_c), \quad \mathbf{x} \in S_2, \quad t \in [0, t_K], \quad (3)$$

где c, ρ, λ, h – теплоемкость, плотность, теплопроводность и коэффициент теплоотдачи в окружающую среду; \mathbf{x} – радиус-вектор произвольной точки области $V \cup S$; $S_1 \cup S_2 = S$; \mathbf{n} – вектор единичной внешней

нормали к границе S_2 ; T_H, T_c – начальная температура и температура среды.

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \rho \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in V, \quad t \in [0, t_K], \quad (4)$$

$$2\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \nabla, \quad \mathbf{x} \in V, \quad t \in [0, t_K], \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= 0, \quad \mathbf{x} \in S_\sigma, \quad t \in [0, t_K], \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{U}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in S_u, \quad t \in [0, t_K]. \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(t) &= \left[\mathbf{K}_1(T(t)) - \frac{2}{3} \mathbf{G}_1(T(t)) \right] \cdot \Theta(t) \mathbf{g} + 2\mathbf{G}_1(T(t)) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t) - \\ &- 3\mathbf{K}_1(T(t)) \cdot \int_{T_H}^{T(t)} \boldsymbol{\alpha}(T) dT(\tau) + \left[\mathbf{K}_2(T(t)) - \frac{2}{3} \mathbf{G}_2(T(t)) \right] \cdot \int_{T_H}^{T(t)} [\Theta(t) - \Theta^*(\tau)] \mathbf{g} dN(T(\tau)) + \\ &+ 2\mathbf{G}_2(T(t)) \cdot \int_{T_H}^{T(t)} [\boldsymbol{\varepsilon}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}^*(\tau)] dN(T(\tau)) - \\ &- 3\mathbf{K}_2(T(t)) \cdot \int_{T_H}^{T(t)} \left[\int_{T_H}^{T(s)} \boldsymbol{\alpha}(T(s)) dT(s) - \int_{T_H}^{T(\tau)} \boldsymbol{\alpha}(T(s)) dT(s) \right] dN(T(\tau)), \end{aligned} \quad (7)$$

где \mathbf{U}, \mathbf{f} – векторы перемещений и объемных сил; \mathbf{n} – вектор единичной внешней нормали к границе $S = S_\sigma \cup S_u$ области V ; S_σ, S_u – части границы S , на которой заданы соответственно поверхностные силы и перемещения; $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2$ – тензоры сдвиговых и объемных модулей материала в высокоэластическом и застеклованном состояниях; $\boldsymbol{\alpha}(T)$ – тензор коэффициентов линейного температурного расширения; \mathbf{g} – метрический тензор; T – температура; t, τ – время.

Физические соотношения могут быть представлены с использованием разложения на девиаторные (8) и шаровые (9) части тензоров напряжений и деформаций:

$$\mathbf{S}(t) = 2\mathbf{G}_1(T(t)) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t) + 2\mathbf{G}_2(T(t)) \cdot \int_{T_H}^{T(t)} (\boldsymbol{\varepsilon}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}(\tau)) dN(T(\tau)) \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(t) = & \mathbf{K}_1(T(t)) \cdot \left[\Theta(t) \mathbf{g} - 3 \int_{T_H}^{T(t)} \boldsymbol{\alpha}(T) dT(\tau) \right] + \\ & + \mathbf{K}_2(t) \cdot \int_{T_H}^{T(t)} \left\{ \left[\Theta(t) \mathbf{g} - 3 \int_{T_H}^{T(t)} \boldsymbol{\alpha}(T) dT(s) \right] - \left[\Theta(\tau) \mathbf{g} - 3 \int_{T_H}^{T(\tau)} \boldsymbol{\alpha}(T) dT(s) \right] \right\} dN(\tau), \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{e}(t) = \boldsymbol{\varepsilon}(t) - \Theta(t) \mathbf{g}, \quad \Theta(t) = \frac{1}{3} \text{Sp} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{3} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{g}, \\ \mathbf{s}(t) = \boldsymbol{\sigma}(t) - \sigma(t) \mathbf{g}, \quad \sigma(t) = \frac{1}{3} \text{Sp} \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{g}. \end{aligned}$$

Здесь $\boldsymbol{\alpha}(T)$ – коэффициент линейного температурного расширения, T – температура, t, τ – время.

Зависимость степени застеклованности от температуры в соответствии с экспериментальными результатами характеризуется двумя параметрами T_g и γ и может быть записана в виде

$$\frac{dN}{dT} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{T-T_g}{\gamma}\right)^2\right). \quad (10)$$

Предполагается, что для девiatorной и шаровой частей тензоров зависимости степени застеклованности от температуры могут быть различными, а следовательно, будут определяться четырьмя параметрами – $T'_g, \gamma', T''_g, \gamma''$.

$$\begin{aligned} \frac{dN'}{dT(t)} = \frac{-1}{\sqrt{2\pi\gamma'}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T(t)-T'_g}{\gamma'}\right)^2\right], \\ \frac{dN''}{dT(t)} = \frac{-1}{\sqrt{2\pi\gamma''}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T(t)-T''_g}{\gamma''}\right)^2\right]. \end{aligned} \quad (11)$$

2. Постановка задачи оптимизации

В качестве критерия оптимизации выбрана функция, представляющая собой сумму квадратов отклонений напряжений, полученных в результате решения задачи (1)–(7) с заданными параметрами, от со-

ответствующих напряжений, найденных экспериментально [1], и записанная в виде

$$\varphi(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^5 \left(\left| \sigma_{\varphi}(\mathbf{p}, r_i) - \sigma_r(\mathbf{p}, r_i) \right| - \left| \sigma_{\varphi}^0 - \sigma_r^0 \right|_{r_i} \right)^2 + Q(\mathbf{p}) \rightarrow \inf_{\mathbf{p}} \quad (12)$$

где r_i – точки области, в которых найдены экспериментальные значения разности главных напряжений; $\sigma_{\varphi}(\mathbf{p}, r_i) - \sigma_r(\mathbf{p}, r_i)$ – разность главных напряжений, получаемая при заданных значениях параметров оптимизации p и r_i ; $Q(\mathbf{p})$ – функция штрафа, введенная для выполнения ограничений на параметры оптимизации.

Параметрами оптимизации являются константы, характеризующие зависимость степени застеклованности материала от температуры: $T'_g, \gamma', T''_g, \gamma''$ (11).

Вводятся обозначения: $p_1 = T'_g, p_2 = \gamma', p_3 = T''_g, p_4 = \gamma''$ – компоненты вектора параметров оптимизации p .

Задача оптимизации формулируется следующим образом: найти вектор параметров $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3, p_4)$, сообщающих минимум функции (12) при ограничениях в виде задачи (1)–(7).

3. Методика и результаты решения задачи

Ввиду осевой симметрии задачи для уменьшения размерности конечно-элементной сетки рассматривается только четверть сечения цилиндра (рис. 1).

Решение задачи теплопроводности (1)–(3) выполнено с использованием явной схемы метода конечных разностей [3] в пакете *MATLAB*. На рис. 2 представлена зависимость изменения максимальной температуры в центральном сечении цилиндра от времени.

Для решения задачи термовязкоупругости разработана оригинальная компьютерная программа, реализующая метод конечных элементов [4] с учетом особенностей математической постановки.

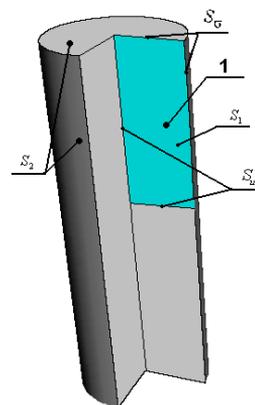


Рис. 1. Расчетная схема цилиндра

Минимизация функции четырех переменных (12) выполнялась методом Нелдера-Мида [5]. Для исследования единственности решения поиск минимума проводился при различных начальных приближениях. Координаты некоторых начальных точек приведены в табл. 1. Эволюция значений критерия оптимизации при выполнении процедуры поиска минимума целевой функции (12) методом Нелдера-Мида для приведенных в табл. 1 начальных приближений показана на рис. 3 и 4.

Решение задачи оптимизации при всех выбранных начальных приближениях сходится к значениям параметров, представленным в табл. 2.

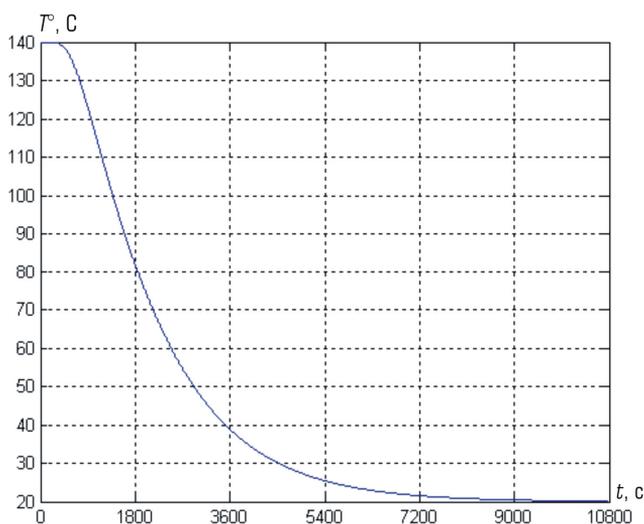


Рис. 2. Изменение максимальной температуры в сечении цилиндра в зависимости от времени

Таблица 1

Начальные приближения параметров оптимизации

Начальное приближение 1					Начальное приближение 2				
Номер вершины симплекса	p_1	p_2	p_3	p_4	Номер вершины симплекса	p_1	p_2	p_3	p_4
1	100	4,2	78	4,5	1	110	4,6	40	1,9
2	75	4,0	80	5,0	2	50	3,0	95	6,3
3	96	3,7	88	3,5	3	70	1,7	80	4,5
4	50	5,0	70	6,0	4	30	8,0	50	4
5	82	3,2	90	4,7	5	90	4,2	100	3,7

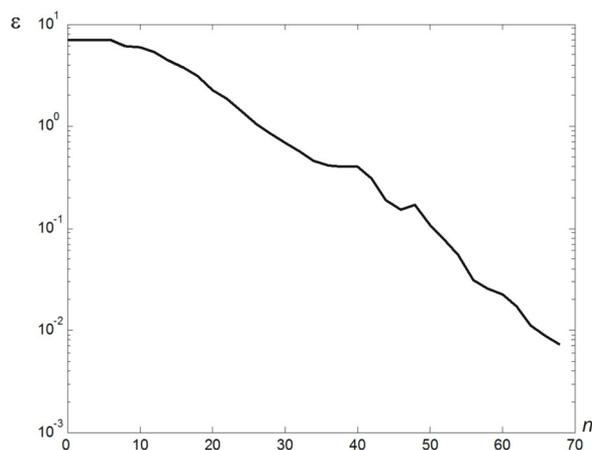


Рис. 3. Зависимость решения задачи оптимизации от количества шагов метода Нелдера-Мида при начальном приближении 1

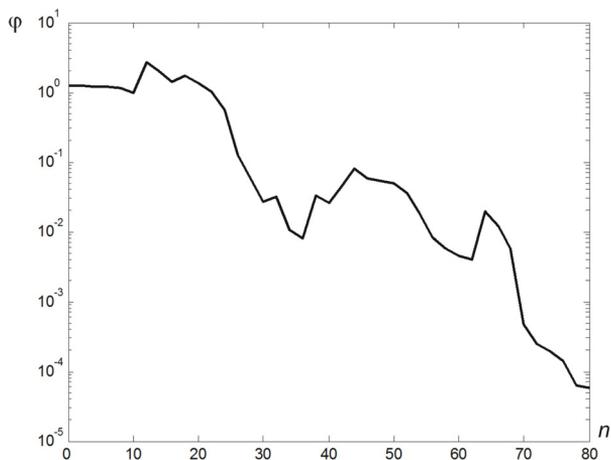


Рис. 4. Зависимость решения задачи оптимизации от количества шагов метода Нелдера-Мида при начальном приближении 2

Таблица 2

Оптимальные значения параметров степени застеклованности

p_1	p_2	p_3	p_4
53,5	5,4	72,6	6,5

Предложена методика, позволяющая определять физико-механические константы полимера с применением методов оптимизации при сравнительно небольшом объеме экспериментальных данных.

Для реализации предложенной методики разработаны оригинальные компьютерные программы, учитывающие допущение о том, что термомеханическое поведение материала описывается для шаровой и девиаторной частей тензоров напряжений и деформаций разными константами.

Анализ полученного решения задачи оптимизации, приведенного в табл. 2, показывает, что для девиаторных и шаровых частей тензоров напряжений и деформаций значения параметров T'_g и T''_g различаются на 36 %. Это подтверждает предположение о том, что при решении задач определения напряженно-деформированного состояния изделий из исследуемого материала необходимо использовать разные параметры степени стеклования для шаровой и девиаторной частей тензоров напряжений и деформаций.

Библиографический список

1. Термомеханика полимерных материалов в условиях релаксационного перехода / В.П. Матвеевко [и др.] // Физическая мезомеханика. – 1999. – Т. 2, № 4. – С. 23–29.
2. Сметанников О.Ю., Труфанов Н.А., Шардаков И.Н. Определяющие соотношения термомеханического поведения полимерных материалов в условиях стеклования и размягчения // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 1997. – № 3. – С. 106–114.
3. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1983. – 552 с.
4. Зенкевич О.С. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541 с.
5. Лесин В.В., Лисовец Ю.П. Основы методов оптимизации. – М.: Изд-во МАИ, 1995. – 344 с.

References

1. Matveenko V.P., Smetannikov O.Yu., Trufanov N.A., Sharda-
kov I.N. Thermomechanics of polymer materials in a relaxation transition [Termomekhanika polimernykh materialov v usloviyakh relaksatsionnogo perekhoda]. *Fizicheskaya mezomekhanika – Physical Mesomechanics*, 1999, Vol. 2, No. 4, pp. 23–29.

2. Smetannikov O.Yu., Trufanov N.A., Shardakov I.N. Defining relations for thermo-mechanical behavior of polymeric materials in the glass transition and softening [Opredelyayushchie sootnosheniya termomekhanicheskogo povedeniya polimernykh materialov v usloviyakh steklovaniya i razmyagcheniya]. *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela – Mechanics of Solids*, 1997, No. 3, pp. 106–114.

3. Samarskiy A.A. Introduction to the theory of difference schemes [*Vvedenie v teoriyu raznostnykh skhem*]. Moscow: Nauka, 1983, 552 p.

4. Zenkevich O. The finite element method in engineering [*Metod konechnykh elementov v tekhnike*]: Transl. from eng. Moscow: Mir, 1975, 541 p.

5. Lesin V.V., Lisovets Yu.P. Fundamentals of optimization methods [*Osnovy metodov optimizatsii*]. Moscow, MAI Publ., 1995, 344 p.

Об авторах

Бояршинова Ирина Николаевна (Пермь, Россия) – кандидат технических наук, доцент кафедры вычислительной математики и механики Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: vmm@cpl.pstu.ac.ru).

About the authors

Boyarshinova Irina Nikolaevna (Perm, Russian Federation) – Ph.D. in Technical Science, Ass.Professor, Department of Computational Mathematics and Mechanics, State National Research Polytechnic University of Perm (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russian Federation, e-mail: vmm@cpl.pstu.ac.ru).

Получено 19.02.2012