

Куликов Р.Г., Куликова Т.Г., Сметанников О.Ю. Численное исследование термомеханического поведения кристаллизующейся полимерной среды с учетом больших деформаций // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – № 1. – С. 18–28. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.1.02

Kulikov R.G., Kulikova T.G., Smetannikov O.Yu. Numerical study of a thermomechanical behavior of a crystallizing polymer medium with regard to finite deformations. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no.1, pp. 18-28. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.1.02



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 1, 2018

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI: 10.15593/perm.mech/2018.1.02

УДК 539.3

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ КРИСТАЛЛИЗУЮЩЕЙСЯ ПОЛИМЕРНОЙ СРЕДЫ С УЧЕТОМ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ

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

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 03 ноября 2017 г.
Принята: 26 февраля 2018 г.
Опубликована: 30 марта 2018 г.

Ключевые слова:

кристаллизация, полимер, большие деформации, определяющие соотношения, термомеханика, численный алгоритм, линеаризация, метод конечных элементов.

АННОТАЦИЯ

Предложены феноменологические определяющие соотношения для кристаллизующейся полимерной среды, полученные в рамках нелинейной механики деформируемого твердого тела. 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. Выполнена общая постановка эволюционной краевой задачи нелинейной механики полимерных материалов в условиях протекания фазовых переходов с использованием предложенных определяющих соотношений. Рассмотрены алгоритмы численной реализации теплокинетической задачи и задачи определения напряженно-деформированного состояния затвердевающей системы для случая плоского деформированного состояния. Разработана процедура линеаризации, удобная с точки зрения построения численных алгоритмов решения поставленных эволюционных краевых задач, использующая предположение о близости каждой промежуточной конфигурации к текущей, что соответствует процедуре наложения на конечные деформации кристаллизующейся среды малых деформаций закристаллизовавшихся частиц. Процедура линеаризации исходной постановки задачи механики реализована с учетом температурных и структурных деформаций. Разработан и реализован численный алгоритм решения поставленной плоской краевой задачи с целью исследования особенностей эволюции напряженно-деформированного состояния в полимерной конструкции. Предложена и реализована методика построения дискретного аналога поставленных краевых задач, основанная на использовании процедуры метода Галеркина с выбором базисных функций с компактным носителем по методу конечных элементов. При этом в качестве узловых неизвестных приняты приращения функций перемещений на текущем временном шаге. Установлены закономерности формирования дефекта типа раковины в кристаллизующемся полимерном цилиндре.

© ПНИПУ

© **Куликов Роман Георгиевич** – кандидат физико-математических наук, доцент, e-mail: kulrtg@mail.ru
Татьяна Георгиевна – кандидат физико-математических наук, доцент, e-mail: kulrtg2@mail.ru
Сметанников Олег Юрьевич – доктор технических наук, доцент, e-mail: sou2009@mail.ru

Roman G. Kulikov – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: kulrtg@mail.ru
Tatiana G. Kulikova – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: kulrtg2@mail.ru
Oleg Yu. Smetannikov – Doctor of Technical Sciences, Associate Professor, e-mail: sou2009@mail.ru



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

NUMERICAL STUDY OF A THERMOMECHANICAL BEHAVIOR OF A CRYSTALLIZING POLYMER MEDIUM WITH REGARD TO FINITE DEFORMATIONS

R.G. Kulikov, T.G. Kulikova, O.Yu. Smetannikov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 03 November 2017
Accepted: 26 February 2018
Published: 30 March 2018

Keywords:

crystallization, polymer, finite deformations, constitutive relations, thermomechanics, numerical algorithm, linearization, finite element method.

ABSTRACT

The paper presents phenomenological constitutive relations for a crystallizing polymer medium, obtained in the framework of nonlinear solid mechanics. The relationships are based on the representation of the medium in the form of a composition of a molten and fully crystallized material, taking into account the history of a continuous nucleation and deformation of a new phase in the temperature range of phase transformations. A general formulation is carried out regarding the evolutionary boundary-value problem of the nonlinear mechanics of polymer materials under phase transitions with the use of the proposed constitutive relations. Algorithms are considered that are aimed at a numerical realization of the thermokinetic problem and determining the stress-strain state of the solidifying system for the case of a plane deformed state. A linearization procedure is developed – which is convenient for constructing numerical algorithms to solve the set evolutionary boundary value problems – using the assumption of the proximity of each intermediate configuration to the current one, which corresponds to the procedure for superimposing small deformations of crystallized particles on finite deformations of a crystallizing medium. The linearization procedure for the initial formulation of mechanics problem is realized taking into account temperature and structural deformations. A numerical algorithm aimed at solving a flat boundary value problem is developed and implemented with the aim of investigating the evolution of the stress-strain state in a polymer structure. A method is proposed and implemented to construct a discrete analogue of boundary value problems, based on the use of the Galerkin method with a selection basis functions with a compact support by the finite element method. In this case, the increments of the displacement functions at the current time step are taken as nodal unknowns. The regularities of a shell type defect's formation in the crystallizing polymer cylinder are established.

© PNRPU

Введение

Процесс производства значительной части полимерных изделий и конструкций содержит этап охлаждения материала, сопровождающийся его кристаллизацией. Технологические и остаточные напряжения, формирующиеся вследствие температурной и деформационной неоднородностей, могут приводить к снижению эксплуатационных качеств изделий и даже их разрушению еще на стадии изготовления. Поэтому актуальной является проблема описания термомеханических процессов в полимерных материалах в условиях фазового перехода. Модели поведения таких сред должны включать определяющие соотношения, единым образом описывающие связь тензоров напряжений и деформаций в широком интервале температур, включающем диапазон фазовых превращений. Для реальных процессов и изделий решение задач описания закономерностей формирования полей технологических напряжений возможно только численными методами. Поэтому важное значение приобретает построение удобного в реализации численного алгоритма решения краевой задачи термомеханики кристаллизующейся полимерной среды.

Хорошо известны модели поведения отверждающихся полимерных материалов, предложенные в разное время в работах [1–3]. Общая черта этих моделей – стремление

получить возможность простой оценки остаточных напряжений. Ряд авторов при построении моделей термомеханического поведения для кристаллизующегося полимера предполагает упругое поведение материала и малость деформаций. Например, в работе [4], в рамках указанных предположений, с использованием феноменологического подхода разработана система определяющих уравнений, описывающих термомеханическое поведение аморфно-кристаллических полимеров. В работах [5–9] моделирование термомеханического поведения полимера проведено с учетом больших деформаций. При этом многие из предлагаемых моделей поведения полимера основаны на упруговязкопластическом подходе [7–10], разработаны для конкретных полимерных материалов [5, 10] или определенных видов напряженно-деформированного состояния. Например, в работе [6] разработана модель описания механического поведения полимера в диапазоне температур, включающем процессы стеклования, для случаев одноосного нагружения и плоского напряженного состояния. В [8] рассматривается развитие упруговязкопластической теории для моделирования зависимости отклика аморфных полимеров от скорости деформирования и температуры с учетом больших деформаций.

В последнее время интерес к вопросам описания деформационного поведения полимеров при фазовых превращениях вызван все более широким использова-

нием их в качестве материалов с памятью формы, поскольку в основном эффекты памяти формы в полимерах связаны с фазовыми или релаксационными переходами. Различным аспектам деформационного поведения полимеров, связанным с исследованием эффектов памяти формы, посвящено большое число публикаций [11–15]. Большинство предлагаемых в них моделей используют гипотезу о малости деформаций и предназначены для описания поведения полимера в достаточно узком температурном диапазоне и моделирования конкретного механизма памяти формы и не могут описывать другие термомеханические эффекты.

В настоящей работе рассматривается построение феноменологических определяющих соотношения для кристаллизующегося полимера с учетом больших деформаций, непрерывным образом отражающих 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. Также в работе рассматривается модельная задача о зарождении раковин в кристаллизующейся среде, демонстрирующая возможности применения предлагаемых определяющих соотношений.

1. Постановка краевой термомеханической задачи для кристаллизующегося полимера.

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

- 1) теплокинетическая задача – задача по определению полей распределения температуры и степени кристаллизации;
- 2) краевая задача по определению 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:

– 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 неізотермической кристаллизации [16, 17]

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

– начальные условия

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

– граничные условия по температуре,

где c – удельная теплоемкость; ρ – плотность материала; λ – коэффициент теплопроводности; T – температура; t – время; \mathbf{x} – радиус-вектор произвольной точки тела; $\dot{Q} = Q_k d\alpha/dt$ – скорость выделения тепла в ходе протекания реакции кристаллизации; 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.

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

Для постановки краевой задачи относительно НДС затвердевающей системы необходимы физические соотношения, которые в силу специфики задачи непрерывным образом отражают связь тензоров напряжений и деформаций в широком диапазоне изменения температур. Эти соотношения были получены с учетом больших деформаций в рамках следующих гипотез и положений:

– кристаллизующаяся полимерная система в каждый момент времени в каждой точке системы рассматривается как смесь расплава полимера и полностью закристаллизованного продукта, относительная доля которых в общем объеме характеризуется величиной степени кристаллизации $\alpha(t)$;

– материал в процессе превращения и дальнейшего деформирования остается макроизотропным;

– для описания механического поведения расплава полимера и закристаллизованного полимера приемлем упругий закон.

Для описания поведения среды при конечных деформациях будем использовать понятия начальной (соответствующей моменту времени t_0) и текущей (соот-

ветствующей моменту времени t) конфигураций [18]. Пусть начальная конфигурация определяется радиусом-вектором $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q^1, q^2, q^3)$, а текущая конфигурация – радиусом-вектором $\mathbf{R} = \mathbf{R}(q^1, q^2, q^3)$, где q^i – обобщенные координаты.

Пусть в момент времени t_1 закристаллизовалась доля полимера, характеризуемая приращением степени кристаллизации $\Delta\alpha_1 = \Delta\alpha(t_1)$. Градиент места из конфигурации, в которой появилась доля кристаллической фазы $\Delta\alpha_1$, в текущую конфигурацию может быть записан следующим образом [18]:

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{F} = \mathbf{f}_n \cdot \dots \cdot \mathbf{f}_2 \cdot \mathbf{f}_1, \quad (4)$$

где \mathbf{f}_i – градиент места из конфигурации, соответствующей моменту времени t_i , в конфигурацию, соответствующую моменту времени t_{i+1} .

Для градиента места из конфигурации, соответствующей моменту времени t_2 и кристаллизации доли полимера, характеризуемой приращением степени кристаллизации $\Delta\alpha_2$, в текущую конфигурацию справедливо следующее выражение:

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{f}_n \cdot \dots \cdot \mathbf{f}_3 \cdot \mathbf{f}_2.$$

Рассмотрим n -й дискретный шаг по превращению $\Delta\alpha_n$:

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{f}_n.$$

Учитывая, что $\mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{f}_1^{-1}$, $\mathbf{F}_3 = \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{f}_2^{-1}, \dots, \mathbf{F}_n = \mathbf{F}_{n-1} \cdot \mathbf{f}_{n-1}^{-1}$, выразим все градиенты места \mathbf{F}_i через градиент места, связывающий начальную и текущую конфигурации:

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{F} \cdot \mathbf{f}_1^{-1}, \mathbf{F}_2 = \mathbf{F} \cdot \mathbf{f}_2^{-1}, \dots, \mathbf{F}_n = \mathbf{F} \cdot \mathbf{f}_n^{-1}, \quad (5)$$

где \mathbf{f}_i^{-1} – градиент места из начальной конфигурации в конфигурацию, соответствующую приращению степени кристаллизации $\Delta\alpha_i$.

Для получения определяющих соотношений необходимо записать выражение для упругого потенциала системы W [19], зависящего от тензора меры деформаций Коши-Грина. Упругий потенциал кристаллизующейся системы может быть представлен в виде суммы упругого потенциала для аморфной фазы и упругого потенциала для кристаллической фазы

$$W(\mathbf{G}_t^\times) = (1 - \alpha(t))W_a(\mathbf{G}_t^\times) + W_{\text{кр}}^1 + W_{\text{кр}}^2 + \dots + W_{\text{кр}}^n, \quad (6)$$

где $W_{\text{кр}}^i = W_{\text{кр}}(\mathbf{G}_{t_i-t}^\times)\Delta\alpha_i$ – доля потенциала, которую привносит в общий потенциал часть кристаллической фазы, соответствующая приращению степени кристал-

лизации $\Delta\alpha_i$; $\mathbf{G}_t^\times = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$ – тензор меры деформаций Коши-Грина [19], соответствующий деформированию от начального до текущего момента времени; $\mathbf{G}_{t_i-t}^\times = \mathbf{F}_i^T \cdot \mathbf{F}_i = \mathbf{f}_i^{-T} \cdot \mathbf{G}_t^\times \cdot \mathbf{f}_i^{-1}$ – тензор меры деформаций Коши-Грина, соответствующий деформированию от момента времени t_i до текущего момента времени.

После осуществления предельного перехода в соотношении (6) по степени кристаллизации выражение для упругого потенциала можно записать в виде

$$W(\mathbf{G}_t^\times) = (1 - \alpha(t))W_a(\mathbf{G}_t^\times) + \int_0^{\alpha(t)} W_{\text{кр}}(\mathbf{f}_\tau^{-T} \cdot \mathbf{G}_t^\times \cdot \mathbf{f}_\tau^{-1}) d\alpha(\tau). \quad (7)$$

Используя в качестве упругого потенциала двух-константный потенциал Пенга-Ландела [20], выражение связи тензора Пиолы-Кирхгофа второго рода $\hat{\mathbf{P}}_{II}$ с тензором меры деформаций Коши-Грина записываем следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_{II}(t) = & \left\{ \mu^a \left[\left(I_3(\hat{\mathbf{G}}_t^\times) \right)^{-1/3} \cdot \left(\hat{\mathbf{g}} - \frac{I_1(\hat{\mathbf{G}}_t^\times)}{3} \hat{\mathbf{G}}_t^{\times-1} \right) \right] + \right. \\ & \left. + B^a I_3(\hat{\mathbf{G}}_t^\times) \left(\hat{\mathbf{g}} - \left(I_3(\hat{\mathbf{G}}_t^\times) \right)^{-1/2} \hat{\mathbf{G}}_t^{\times-1} \right) \right\} (1 - \alpha(t)) + \\ & + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \mu^{\text{кр}} \left[\left(I_3(\hat{\mathbf{G}}_\tau^\times) \right)^{-1/3} \cdot \left(\hat{\mathbf{g}} - \frac{I_1(\hat{\mathbf{G}}_\tau^\times)}{3} \hat{\mathbf{G}}_\tau^{\times-1} \right) \right] + \right. \\ & \left. + B^{\text{кр}} I_3(\hat{\mathbf{G}}_\tau^\times) \left(\hat{\mathbf{g}} - \left(I_3(\hat{\mathbf{G}}_\tau^\times) \right)^{-1/2} \hat{\mathbf{G}}_\tau^{\times-1} \right) \right\} d\alpha(\tau), \quad (8) \end{aligned}$$

где $\hat{\mathbf{G}}_\tau^\times = \hat{\mathbf{F}}_\tau^{-T} \cdot \hat{\mathbf{G}}_t^\times \cdot \hat{\mathbf{F}}_\tau^{-1}$, $\mu^a, B^a, \mu^{\text{кр}}, B^{\text{кр}}$ – механические характеристики аморфной и закристаллизовавшейся части материала соответственно; I_1, I_3 – первый и третий главные инварианты тензора второго ранга; $\hat{\mathbf{g}}$ – метрический тензор.

Вариационная постановка краевой квазистатической задачи термомеханики кристаллизующейся среды может быть получена с использованием процедуры Бубнова-Галеркина [20] и в случае отсутствия внешних силовых воздействий принимает вид

$$\int_{V_0} \hat{\mathbf{P}}_{II} \cdot \delta \hat{\mathbf{C}} dV_0 = 0, \quad (9)$$

где $\hat{\mathbf{C}} = (\hat{\mathbf{G}}_t^\times - \hat{\mathbf{g}})/2$ – тензор деформаций Коши-Грина; V_0 – начальный объем тела.

К достоинствам рассматриваемой постановки стоит отнести то, что она сформулирована в исходной конфигурации, что существенно упрощает построение чис-

ленного алгоритма расчета. При этом полагается нелинейность геометрических соотношений, обусловленная необходимостью учета больших деформаций. Сложность получения решения задачи в форме (9) обусловлена как нелинейностью постановки, так и проблемами, связанными с необходимостью учета возникающих температурных и структурных деформаций.

При решении модельной задачи будем полагать, что зарождение полости в материале происходит при достижении объемной деформации в окрестности рассматриваемой точки некоторого предельного значения. Для придания поведению рассматриваемого тела большей реалистичности предположим, что предельная величина деформации разрушения несколько варьируется по объему. Разрушение будем моделировать занижением в окрестности рассматриваемой точки модуля кристаллической фазы. С учетом неосесимметричного характера зарождения полостей решение механической задачи будет рассматриваться в декартовой системе координат для случая плоского деформированного состояния. В данном случае компоненты тензоров \hat{P}_{II} и \hat{C} конкретизируются следующим образом:

$$\begin{aligned} (P_{II})_{xx} &= \left\{ \mu^a I_3^{-1/3} \left(1 - \frac{I_1 (2C_{yy} + 1)}{3 I_3} \right) + \right. \\ &+ B^a I_3 \left(1 - I_3^{-1/2} \frac{(2C_{yy} + 1)}{I_3} \right) \left. \right\} (1 - \alpha(t)) + \\ &+ \left\{ \mu^{kp} \bar{I}_3^{-1/3} \left(1 - \frac{\bar{I}_1 (2C_{yy}^{\tau} + 1)}{3 \bar{I}_3} \right) + \right. \\ &+ B^{kp} \bar{I}_3 \left(1 - \bar{I}_3^{-1/2} \frac{(2C_{yy}^{\tau} + 1)}{\bar{I}_3} \right) \left. \right\} d\alpha(\tau), \\ (P_{II})_{yy} &= \left\{ \mu^a I_3^{-1/3} \left(1 - \frac{I_1 (2C_{xx} + 1)}{3 I_3} \right) + \right. \\ &+ B^a I_3 \left(1 - I_3^{-1/2} \frac{(2C_{xx} + 1)}{I_3} \right) \left. \right\} (1 - \alpha(t)) + \\ &+ \left\{ \mu^{kp} \bar{I}_3^{-1/3} \left(1 - \frac{\bar{I}_1 (2C_{xx}^{\tau} + 1)}{3 \bar{I}_3} \right) + \right. \\ &+ B^{kp} \bar{I}_3 \left(1 - \bar{I}_3^{-1/2} \frac{(2C_{xx}^{\tau} + 1)}{\bar{I}_3} \right) \left. \right\} d\alpha(\tau), \\ (P_{II})_{xy} &= \left\{ \mu^a I_3^{-4/3} \frac{I_1}{3} 2C_{xy} + B^a I_3^{-1/2} 2C_{xy} \right\} (1 - \alpha(t)) + \\ &+ \left\{ \mu^{kp} \bar{I}_3^{-4/3} \frac{\bar{I}_1}{3} 2C_{xy}^{\tau} + B^{kp} \bar{I}_3^{-1/2} 2C_{xy}^{\tau} \right\} d\alpha(\tau), \end{aligned}$$

$$C_{xx} = \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_y}{\partial x} \right)^2,$$

$$C_{yy} = \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_x}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_y}{\partial y} \right)^2,$$

$$C_{xy} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} + \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y} \right],$$

где $I_1 = 2(C_{xx} + C_{yy}) + 3$, $I_3 = (2C_{xx} + 1)(2C_{yy} + 1) - 4C_{xy}^2$, $\bar{I}_1 = 2(C_{xx}^{\tau} + C_{yy}^{\tau}) + 3$, $\bar{I}_3 = (2C_{xx}^{\tau} + 1)(2C_{yy}^{\tau} + 1) - 4(C_{xy}^{\tau})^2$; $C_{xx}^{\tau}, C_{yy}^{\tau}, C_{xy}^{\tau}$ – компоненты тензора деформаций, отражающие переход из промежуточной конфигурации (соответствующей времени τ) в текущую конфигурацию (соответствующую времени t).

2. Выполнение процедуры линеаризации исходной постановки с учетом структурных и температурных деформаций

Рассматриваемый в данной работе алгоритм предполагает линеаризацию постановки (9), что позволяет свести процедуру получения решения исходной нелинейной задачи к решению последовательности линейных упругих краевых задач в рамках теории малых деформаций. Линеаризация 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 [21, 22], движение тела из начальной конфигурации в конечную представимо в виде суперпозиции движений тела через промежуточные конфигурации. Таким образом, перемещения тела в произвольный момент времени представимы в виде суммы накопленных и малых перемещений, описывающих переход из промежуточной конфигурации в конечную.

Рассмотрим движение тела, приводящее его к моменту времени t из начальной недеформированной конфигурации C_0 в конфигурацию C_t , через промежуточную конфигурацию $C_{t-\Delta t}$. Положение некоторой точки в начальной конфигурации определим радиусом-вектором \mathbf{r} , в конфигурациях $C_{t-\Delta t}$ и C_t радиусом-векторами \mathbf{R}_0 и \mathbf{R} соответственно. Пусть \mathbf{U} и \mathbf{u} – векторы перемещений, переводящие тело 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 координат $q^i, i = 1, 2, 3$. Предполагается, что конфигурация $C_{t-\Delta t}$ близка к конечной и, соответственно, перемещения \mathbf{u} малы.

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

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

где g^{ij} и G^{ij} – контравариантные компоненты метрического тензора в начальной и промежуточной конфигурациях соответственно.

Операторы Гамильтона в конфигурациях C_0 и $C_{t-\Delta t}$ определены следующим образом:

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

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

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

Градиент места $\hat{\mathbf{F}}$ может быть представлен через тензоры $\hat{\mathbf{F}}_0$ и $\hat{\mathbf{f}}$ следующим образом:

$$\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{f}} \cdot \hat{\mathbf{F}}_0.$$

С учетом этого тензор меры деформаций Коши-Грина записывается в виде

$$\hat{\mathbf{G}}_t^x = \hat{\mathbf{F}}^T \cdot \hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot \hat{\mathbf{f}}^T \cdot \hat{\mathbf{f}} \cdot \hat{\mathbf{F}}_0.$$

Тензор меры деформаций Коши-Грина $\hat{\mathbf{G}}_t^x = \hat{\mathbf{f}}^T \cdot \hat{\mathbf{f}}$, описывающий переход из $C_{t-\Delta t}$ в C_t , с учетом малости \mathbf{u} может быть преобразован к виду

$$\hat{\mathbf{G}}_t^x = 2\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{g}},$$

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.

Тензор деформации Коши-Грина, описывающий переход из начальной конфигурации в конечную, записывается в форме

$$\hat{\mathbf{C}} = (\hat{\mathbf{G}}_t^x - \hat{\mathbf{g}})/2 = (\hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot \hat{\mathbf{F}}_0 - \hat{\mathbf{g}})/2 + \hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{F}}_0$$

и может быть представлен в виде

$$\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{C}}_0 + \hat{\mathbf{C}}^*,$$

$$\hat{\mathbf{C}}_0 = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U}_0 + (\nabla \mathbf{U}_0)^T + \nabla \mathbf{U}_0 (\nabla \mathbf{U}_0)^T),$$

$$\hat{\mathbf{C}}^* = \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T + \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T + \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T +$$

$$\begin{aligned} &+ \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T + \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T + \\ &+ \nabla \mathbf{U}_0 \cdot \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right)^T \cdot \left(\nabla \mathbf{U}_0 \right)^T, \end{aligned}$$

где \mathbf{U}_0 – вектор перемещений из начальной конфигурации в промежуточную; \mathbf{u} – вектор малых перемещений из промежуточной в конечную, операторы Гамильтона $\nabla, \overset{0}{\nabla}$ определены относительно исходной и промежуточной конфигураций, тензор $\hat{\mathbf{C}}_0$ соответствует деформациям, возникающим при переходе из начальной конфигурации в промежуточную, $\hat{\mathbf{C}}^*$ – из промежуточной в конечную.

Для плоского деформированного состояния в декартовой системе координат операторы Гамильтона записываются следующим образом:

$$\nabla \mathbf{U}_0 = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_x}{\partial x} & \frac{\partial U_y}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial U_x}{\partial y} & \frac{\partial U_y}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} = \frac{1}{A} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y}\right) \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} & \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y}\right) \frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial u_y}{\partial y} & 0 \\ \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x}\right) \frac{\partial u_x}{\partial y} - \frac{\partial U_x}{\partial y} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x}\right) \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{\partial U_x}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где U_x, U_y, u_x, u_y – компоненты векторов \mathbf{U}_0 и \mathbf{u} соответственно, $A = \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x}\right) \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y}\right) - \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y}$. Окон-

чательно для плоского деформированного состояния в декартовой системе координат линеаризованные геометрические соотношения имеют вид

$$\begin{aligned} C_{xx} &= \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_y}{\partial x} \right)^2 + \\ &+ \frac{1}{A} \left[\left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y}\right) \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x}\right)^2 - \frac{\partial U_x}{\partial y} \frac{\partial U_y}{\partial x} \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x}\right) \right] \frac{\partial u_x}{\partial x} + \\ &+ \frac{1}{A} \left[\left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x}\right) \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y}\right) \frac{\partial U_y}{\partial x} - \frac{\partial U_x}{\partial y} \left(\frac{\partial U_y}{\partial x} \right)^2 \right] \frac{\partial u_y}{\partial x}, \end{aligned}$$

$$C_{yy} = \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_x}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_y}{\partial y} \right)^2 +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{A} \left[\left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y} \right)^2 \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} \right) - \frac{\partial U_x}{\partial y} \frac{\partial U_y}{\partial x} \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) \right] \frac{\partial u_y}{\partial y} + \\
 & + \frac{1}{A} \left[\left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} \right) \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) \frac{\partial U_x}{\partial y} - \left(\frac{\partial U_x}{\partial y} \right)^2 \left(\frac{\partial U_y}{\partial x} \right) \right] \frac{\partial u_x}{\partial y}, \\
 C_{xy} & = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} + \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y} \right] + \\
 & + \frac{1}{2A} \frac{\partial U_x}{\partial y} \left[1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y} - \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial U_x}{\partial y} \right] \frac{\partial u_x}{\partial x} + \\
 & + \frac{1}{2A} \frac{\partial U_y}{\partial x} \left[1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y} - \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial U_x}{\partial y} \right] \frac{\partial u_y}{\partial y} + \\
 & + \frac{1}{2A} \left(1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} \right) \left[1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y} - \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial U_x}{\partial y} \right] \times \\
 & \times \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{1}{2A} \left(1 + \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) \left[1 + \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_x}{\partial x} \frac{\partial U_y}{\partial y} - \right. \\
 & \left. - \frac{\partial U_y}{\partial x} \frac{\partial U_x}{\partial y} \right] \frac{\partial u_y}{\partial x}.
 \end{aligned}$$

Процедура линеаризации физических соотношений состоит в разложении соотношения (8) в ряд Тейлора с учетом только линейных слагаемых. В результате линеаризованные физические соотношения, определяющие компоненты тензора Пиолы-Кирхгофа второго рода \hat{P}_{II} , принимают вид

$$\begin{aligned}
 (P_{II})_{xx} & = (P_{II})_{xx}^0 + \frac{\partial (P_{II}^a)_{xx} (C_{ij}^0)}{\partial C_{xx}} \Delta C_{xx} + \\
 & + \frac{\partial (P_{II}^a)_{xx} (C_{ij}^0)}{\partial C_{yy}} \Delta C_{yy} + 2 \frac{\partial (P_{II}^a)_{xx} (C_{ij}^0)}{\partial C_{xy}} \Delta C_{xy} + \\
 & + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xx} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{xx}^{\tau t}} \Delta C_{xx} + \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xx} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{yy}^{\tau t}} \Delta C_{yy} + \right. \\
 & \left. + 2 \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xx} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{xy}^{\tau t}} \Delta C_{xy} \right\}, \\
 (P_{II})_{yy} & = (P_{II})_{yy}^0 + \frac{\partial (P_{II}^a)_{yy} (C_{ij}^0)}{\partial C_{xx}} \Delta C_{xx} + \\
 & + \frac{\partial (P_{II}^a)_{yy} (C_{ij}^0)}{\partial C_{yy}} \Delta C_{yy} + 2 \frac{\partial (P_{II}^a)_{yy} (C_{ij}^0)}{\partial C_{xy}} \Delta C_{xy} + \\
 & + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{yy} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{xx}^{\tau t}} \Delta C_{xx} + \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{yy} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{yy}^{\tau t}} \Delta C_{yy} + \right. \\
 & \left. + 2 \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{yy} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{xy}^{\tau t}} \Delta C_{xy} \right\}, \tag{10}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (P_{II})_{xy} & = (P_{II})_{xy}^0 + \frac{\partial (P_{II}^a)_{xy} (C_{ij}^0)}{\partial C_{xx}} \Delta C_{xx} + \\
 & + \frac{\partial (P_{II}^a)_{xy} (C_{ij}^0)}{\partial C_{yy}} \Delta C_{yy} + 2 \frac{\partial (P_{II}^a)_{xy} (C_{ij}^0)}{\partial C_{xy}} \Delta C_{xy} + \\
 & + \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xy} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{xx}^{\tau t}} \Delta C_{xx} + \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xy} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{yy}^{\tau t}} \Delta C_{yy} + \right. \\
 & \left. + 2 \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xy} (C_{ij}^{\tau 0})}{\partial C_{xy}^{\tau t}} \Delta C_{xy} \right\},
 \end{aligned}$$

где, например,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial (P_{II}^a)_{xx}}{\partial C_{xx}} & = \left\{ \mu^a \left[-\frac{2}{3} I_3^{-4/3} (2C_{yy} + 1) - \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{2(2C_{yy} + 1)}{3} \left(I_3^{-4/3} - \frac{4}{3} I_1 I_3^{-7/3} (2C_{yy} + 1) \right) \right] \right\} + \\
 & + B^a (2C_{yy} + 1) \left[2 + I_3^{-3/2} (2C_{yy} + 1) \right] (1 - \alpha(t)),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial (P_{II}^a)_{xx}}{\partial C_{yy}} & = \left\{ -\frac{2}{3} \mu^a \left[I_3^{-4/3} (2C_{xx} + 1) - \right. \right. \\
 & \left. \left. - (2C_{yy} + 1) \left(I_3^{-4/3} - \frac{4}{3} I_1 I_3^{-7/3} (2C_{xx} + 1) \right) \right] \right\} + \\
 & + B^a (2C_{xx} + 1) \left[2 + I_3^{-3/2} (2C_{xx} + 1) \right] (1 - \alpha(t)),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial (P_{II}^a)_{xx}}{\partial C_{xy}} & = \left\{ \mu^a \frac{8}{3} C_{xy} \left[I_3^{-4/3} - \frac{4}{3} I_1 I_3^{-7/3} (2C_{yy} + 1) \right] - \right. \\
 & \left. - B^a 8C_{xy} \left[1 + \frac{1}{2} I_3^{-3/2} (2C_{yy} + 1) \right] \right\} (1 - \alpha(t)),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xx}}{\partial C_{xx}^{\tau t}} & = \int_0^{\alpha(t)} \left\{ -\frac{2}{3} \mu^{kp} (2C_{yy}^{\tau t} + 1) \times \right. \\
 & \times \left[2 \tilde{I}_3^{-4/3} - \frac{4}{3} \tilde{I}_1 \tilde{I}_3^{-7/3} (2C_{yy}^{\tau t} + 1) \right] + \\
 & \left. + B^{kp} (2C_{yy}^{\tau t} + 1) \left[2 + \tilde{I}_3^{-3/2} (2C_{yy}^{\tau t} + 1) \right] \right\} d\alpha(\tau),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xx}}{\partial C_{yy}^{\tau t}} & = \int_0^{\alpha(t)} \left\{ -\frac{2}{3} \mu^{kp} \left[\tilde{I}_3^{-4/3} (2C_{xx}^{\tau t} + 1) + \right. \right. \\
 & \left. \left. + (2C_{yy}^{\tau t} + 1) \left(\tilde{I}_3^{-4/3} - \frac{4}{3} \tilde{I}_1 \tilde{I}_3^{-7/3} (2C_{xx}^{\tau t} + 1) \right) \right] \right\} + \\
 & + B^{kp} (2C_{xx}^{\tau t} + 1) \left[2 + \tilde{I}_3^{-3/2} (2C_{yy}^{\tau t} + 1) \right] d\alpha(\tau),
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial (P_{II}^{kp})_{xx}}{\partial C_{xy}^{\tau t}} = \int_0^{\alpha(t)} \left\{ \mu^{kp} \frac{8}{3} C_{xy}^{\tau t} \times \right.$$

$$\times \left[\bar{I}_3^{-4/3} - \frac{4}{3} \bar{I}_1 \bar{I}_3^{-7/3} (2C_{yy}^{\tau} + 1) \right] - \\ - B^{kp} 8C_{xy}^{\tau} \left[1 + \frac{1}{2} \bar{I}_3^{-3/2} (2C_{yy}^{\tau} + 1) \right] \} d\alpha(\tau).$$

Величины ΔC_{ij} – приращения компонент тензора деформаций Коши-Грина на рассматриваемом шаге.

При построении физических соотношений в случае использования нелинейных уравнений состояния существенным является вопрос учета температурных деформаций материала. Ряд авторов [23, 24] предлагают использовать введение линейного слагаемого, зависящего от приращения температуры, аналогично тому, как это принято в случае использования линейных соотношений. В работе [25] используется подход, основанный на линеаризации физических соотношений и предположении о 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 вопрос построения численного алгоритма решения задач определенного класса (определения технологических напряжений в ходе процесса получения полимерных изделий), в которых деформации, являясь значительными по величине, все-таки остаются умеренными (порядка 10 %). С учетом ограниченности деформаций в рассматриваемом процессе линеаризованные физические соотношения в матричном виде могут быть записаны следующим образом:

$$\hat{\mathbf{P}}_{II}(t) = (\hat{\mathbf{P}}_{II})^0 + {}^4\hat{\mathbf{D}}^a(\hat{\mathbf{C}}^0) \dots \\ \dots \left(\hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot (\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}_0) \cdot \hat{\mathbf{F}}_0 \right) (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} {}^4\hat{\mathbf{D}}^{kp}(\hat{\mathbf{C}}^{\tau 0}) \dots \\ \dots \left(\hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot (\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}_0) \cdot \hat{\mathbf{F}}_0 \right) d\alpha(\tau),$$

где $\hat{\mathbf{e}}_0$ – тензор суммы малых температурных и структурных деформаций, возникающих при переходе из промежуточной конфигурации в конечную; $\hat{\mathbf{e}}_0 = K_T^a(T(t) - T_0)\hat{\mathbf{E}}$ – для аморфной фазы; $\hat{\mathbf{e}}_0 = K_T^{kp}(T(t) - T(\tau))\hat{\mathbf{E}} - k\hat{\mathbf{E}}$ – для кристаллической фазы; K_T^a, K_T^{kp} – коэффициенты температурного расширения для аморфной и кристаллической фаз соответственно; k – коэффициент структурной усадки; $\hat{\mathbf{E}}$ – единичный тензор; тензор $\hat{\mathbf{C}}^{\tau 0}$ описывает переход из конфигурации, соответствующей моменту времени τ , в промежуточную; ${}^4\hat{\mathbf{D}}^a, {}^4\hat{\mathbf{D}}^{kp}$ – тензоры четвертого ранга «касательных жесткостей» аморфной и кристаллической фаз, компоненты которых зависят от $\hat{\mathbf{C}}^0$ и $\hat{\mathbf{C}}^{\tau 0}$.

С учетом выполненных процедур линеаризации выражение (9) может быть преобразовано к виду

$$\int_{V_0} \left[(\hat{\mathbf{P}}_{II})^0 + {}^4\hat{\mathbf{D}}^a(\hat{\mathbf{C}}^0) \dots \right. \\ \left. \dots \left(\hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot (\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}_0) \cdot \hat{\mathbf{F}}_0 \right) (1 - \alpha(t)) + \int_0^{\alpha(t)} {}^4\hat{\mathbf{D}}^{kp}(\hat{\mathbf{C}}^{\tau 0}) \dots \right. \\ \left. \dots \left(\hat{\mathbf{F}}_0^T \cdot (\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}_0) \cdot \hat{\mathbf{F}}_0 \right) d\alpha(\tau) \right] \cdot \delta \hat{\mathbf{C}}^* dV_0 = 0. \quad (11)$$

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

3. Разработка и реализация численных процедур решения поставленных краевых задач

Получение решения краевых задач механики для тел сложной пространственной конфигурации невозможно без использования численных методик. Среди существующих численных подходов в настоящее время наиболее широко применяется метод конечных элементов [26], который и был выбран для построения дискретного аналога рассматриваемой задачи. Применение конечно-элементного подхода к аппроксимации геометрических и физических соотношений приводит к получению линейных алгебраических соотношений, которые могут быть представлены в матричной форме [26]:

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

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

Последнее соотношение может быть преобразовано к виду

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

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

В матричной форме соотношение (8) можно записать как

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

где \sum_e означает суммирование по элементам; $[k]^e$ – локальная матрица жесткости элемента; $\{f_P\}^e, \{f_\theta\}^e$ – локальные векторы узловых сил, обусловленные наличием накопленных напряжений, температурными и структурными деформациями:

$$[k]^e = \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, U_0)]^T [D(U_0)] [B(\mathbf{x}, U_0)] dV,$$

$$\{f_p\}^e = \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, U_0)]^T \{P_0\} dV,$$

$$\{f_\theta\}^e = - \int_{V_0^e} [B(\mathbf{x}, U_0)]^T [D(U_0)] \{\Delta C_\theta\} dV.$$

В результате сборки глобальной системы для всего ансамбля конечных элементов получим

$$[K(U_0)]\{u\} = \{F_p\} + \{F_\theta\}, \quad (12)$$

где $[K(U_0)]$ – глобальная матрица системы, обладающая симметрией и зависящая от вектора накопленных перемещений U_0 ; $\{F_p\}, \{F_\theta\}$ – глобальные векторы «фиктивных» усилий, обусловленные накопленными к рассматриваемому шагу напряжениями и возникающими на рассматриваемом переходе температурными и структурными деформациями.

Таким образом, получаем последовательность линейных задач, сформулированных относительно приращений узловых перемещений. Оператор левой части соотношения (12) требует переопределения на каждом шаге, что обуславливает существенную вычислительную нагрузку при решении задач большой размерности.

Для случая решения двумерных задач рассматривается построение конечно-элементного алгебраического аналога с использованием трехузлового конечного элемента с линейной аппроксимацией узловых неизвестных, в качестве которых приняты приращения перемещений. Все соотношения получены в базисе исходной конфигурации.

4. Решение модельной задачи описания эволюции дефекта типа раковины в кристаллизующемся полимерном цилиндре

Рассматривается задача о протекании процесса кристаллизации и формирования дефекта типа раковины в полимерном цилиндре. Изначально материал цилиндра (полиэтилен) имеет температуру 430 К, что превышает температуру плавления. Цилиндр диаметром 0,2 м охлаждается по внешнему контуру водой, температура которой составляла 293 К. При решении теплокинетической задачи на границе тела задаются условия конвективного теплообмена. Коэффициент теплоотдачи на поверхности принимается равным 550 Вт/(м²·К). В процессе охлаждения в материале протекают процессы кристаллизации, сопровождающиеся выделением тепла.

Краевая задача нестационарной теплопроводности решалась методом конечных элементов. Для решения задачи кинетики кристаллизации использовался разностный метод Рунге-Кутты [27]. Учитывалась зависимость термомеханических свойств от температуры. Значения теплофизических и механических параметров,

зависимость удельной теплоемкости, коэффициента теплопроводности и плотности полиэтилена от температуры взяты из литературных источников [28–30]. При решении задачи определения НДС конструкции задавались кинематические граничные условия, гарантирующие отсутствие смещений тела как абсолютно жесткого. Эволюция полей температуры и степени кристаллизации представлена на рис. 1. Закономерности эволюции раковины в цилиндре иллюстрируются рис. 2.

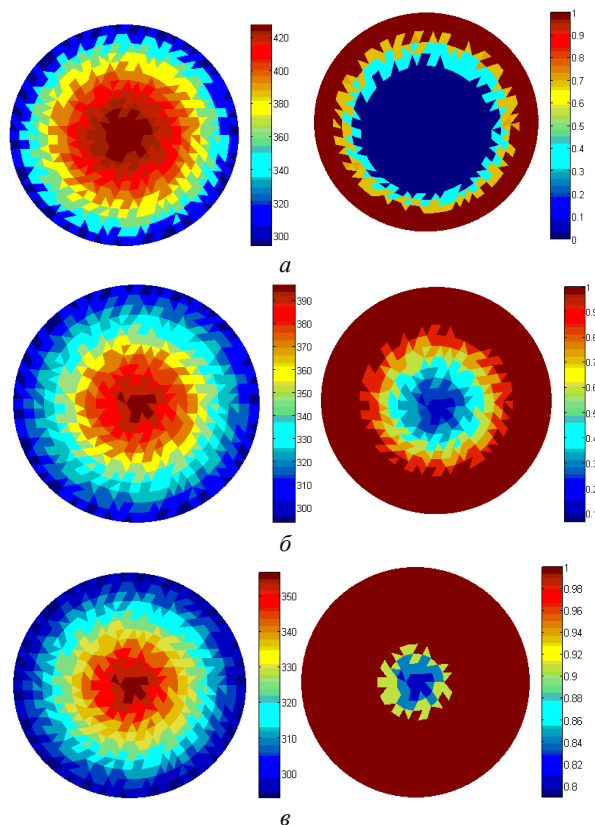


Рис. 1. Распределение температуры и степени кристаллизации для моментов времени: а – 7800 с; б – 22800 с; в – 37800 с
 Fig. 1. Distribution of temperature and crystallization degree for time instants: а – 7800 s; б – 22800 s; в – 37800 s

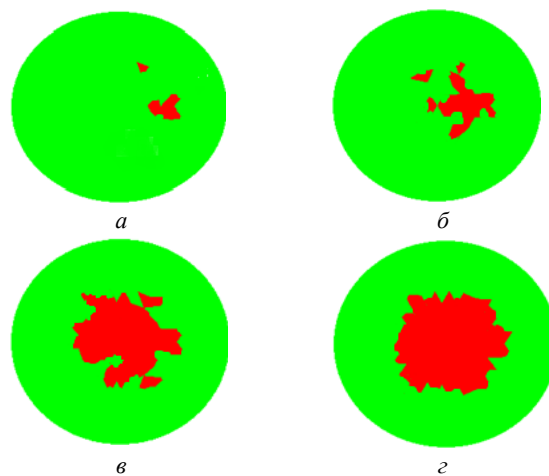


Рис. 2. Образование раковины для моментов времени: а – 16550 с; б – 17550 с; в – 18300с; г – 19550 с
 Fig. 2. Formation of the shell for time instants: а – 16550 s; б – 17550 s; в – 18300 s; г – 19550 s

Заключение

Таким образом, выполнена формулировка двумерных наследственных краевых задач нелинейной термомеханики кристаллизующихся полимерных материалов в рамках теории конечных деформаций. Предложен и реализован метод линеаризации исходной постановки с учетом структурных и температурных деформаций. Разработан и реализован численный алгоритм решения поставленной плоской краевой задачи с целью исследования особенностей эволюции напряженно-деформированного состояния в полимерной конструкции. Получено численное решение модельной

Библиографический список

1. Production stresses during the solidification of cylindrical articles formed from polymer composite materials / V.N. Korotkov, R.A. Turusov, E.A. Dzhavadyan, B.A. Rozenberg // *Mechanics of Composite Materials*. – 1986. – Vol. 22. – No. 1. – P. 99–103.
2. Shaffer B.W., Lewitsky M. Thermoelastic Constitutive Equation for Chemically Hardening Materials // *Journal of Appl. Mech.* – 1974. – Vol. 41. – No. – P. 652–657.
3. Lewitsky M., Shaffer B.W. Residual Thermal Stresses in a Solid Sphere Cast From a Thermosetting Material // *Journal of Appl. Mech.* – 1975. – Vol. 42. – No. 9. – P. 651–655.
4. Golotina L.A., Matveenko V.P., Shardakov I.N. Analysis of deformation process characteristics in amorphous-crystalline polymers // *Mechanics of Solids*. – 2012. – Vol. 47. – P. 634–640. DOI: 10.3103/S0025654412060040
5. Boyce M.C., Socrate S., Llana P.G. Constitutive Model for the Finite Deformation Stress-Strain Behavior of Poly(Ethylene Terephthalate) above the Glass Transition // *Polymer*. – 2000. – Vol. 41. – No. 6. – P. 2183–2201.
6. Rebecca B. Dupaix, Mary C. Boyce. Constitutive modeling of the finite strain behavior of amorphous polymers in and above the glass transition // *Mechanics of Materials*. – 2007. – No. 39. – P. 39–52.
7. Modeling and Validation of the Large Deformation Inelastic Response of Amorphous Polymers over a Wide Range of Temperatures and Strain-Rates / J. Richeton, S. Ahzi, K.S. Vecchio [et al.] // *Int. J. Solids Struct.* – 2007. – No. 44. – P. 7938–7954.
8. A Thermo-Mechanically Coupled Theory for Large Deformations of Amorphous Polymers. Part I: Formulation / L. Anand, N.M. Ames, V. Srivastava, S.A. Chester // *Int. J. Plast.* – 2009. – Vol. 25. – No 8. – P. 1474–1494.
9. A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition / V. Srivastava, S.A. Chester, N.M. Ames, L. Anand // *International Journal of Plasticity*. – 2010. – No. 26. – P. 1138–1182.
10. Varghese A.G., Batra R.C., Constitutive Equations for Thermomechanical Deformations of Glassy Polymers // *Int. J. Solids Struct.* – 2009. – Vol. 46. – No. 22. – P. 4079–4094.
11. Finite Deformation Thermo-Mechanical Behavior of Thermally Shape Memory Polymers / H.J. Qi, T.D. Nguyen, F. Castroa et al. // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2008. – Vol. 56. – No. 5. – P. 1730–1751.
12. Liu C., Qin H., Mather P.T. Review of progress in shape-memory polymers // *J. Mater. Chem.* – 2007. – Vol. 17. – P. 1543–1558.

задачи о формировании дефекта типа раковины в кристаллизующейся полимерной пластине.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-01-00474, 16-48-590809).

Acknowledgments

This work has been carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research (Projects No. 16-01-00474, 16-48-590809).

13. Thermomechanics of shape memory polymers: uniaxial experiments and constitutive modeling / Y.P. Liu, K. Gall, M.L. Dunn, A.R. Greenberg, J. Diani // *Int. J. Plast.* – 2006. – Vol. 22. – P. 279–313.
14. Dietsch B., Tong T. A review: features and benefits of shape memory polymers (SMPs) // *J. Adv. Mater.* – 2007. – Vol. 39. – P. 3–12.
15. Gunes I.S., Jana S.C. Shape memory polymers and their nanocomposites: a review of science and technology of new multifunctional materials // *J. Nanosci. Nanotechnol.* – 2008. – Vol. 8. – P. 1616–1637.
16. Simulation of Thermomechanical Processes in Crystallising Polymer / I.N. Shardakov, V.P. Matveyenko, N.V. Pistsov, V.P. Beghishev // *Polym. Eng. and Sci.* – 1997. – Vol. 37. – No. 8. – P. 1270–1279.
17. Degree of crystalline structure of polymer obtained from melt at various cooling rates / A.Ya. Malkin, S.A. Bolgov, V.P. Begishev, O.S. Mazalov // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 1991. – Vol. 61. – No. 3. – P. 1092–1095.
18. Новокшанов Р.С., Роговой А.А. Эволюционные определяющие соотношения для конечных вязкоупругих деформаций // *Изв. РАН. Механика твердого тела*. – 2005. – № 4. – С. 122–140.
19. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. – М.: Наука, 1970. – 940 с.
20. Методы прикладной вязкоупругости / А.А. Адамов, В.П. Матвеевко, Н.А. Труфанов, И.Н. Шардаков / УрО РАН. – Екатеринбург, 2003. – 411 с.
21. Роговой А.А. Определяющие соотношения для конечных упруго-неупругих деформаций // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2005. – № 5. – С. 138–149.
22. Куликов Р.Г., Куликова Т.Г. К вопросу определения деформированного состояния кристаллизующейся полимерной среды с учетом больших деформаций // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – Пермь, 2012. – № 1. – С. 62–72.
23. Vikas Srivastava, Shawn A. Chester, Lallit Anand. Thermally actuated shape-memory polymers: Experiments, theory and numerical simulations // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2010. – No. 58. – P. 1100–1124.
24. Адамов А.А. Исследование и моделирование нестационарного термомеханического поведения вязкоупругих резиноподобных материалов и элементов конструкций при конечных деформациях: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – Пермь, 2004.

25. Rogovoy A.A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. – 2012. – No. 24. – P. 81–114.

26. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541 с.

27. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Лаборатория базовых знаний, 2001. – 630 с.

References

1. Korotkov V.N., Turusov R.A., Dzhavadyan E.A., Rozenberg B.A. Production stresses during the solidification of cylindrical articles formed from polymer composite materials. *Mechanics of Composite Materials*, 1986, vol. 22, no. 1, pp. 99-103.

2. Shaffer B.W., Lewitsky M. Thermoelastic Constitutive Equation for Chemically Hardening Materials. *Journal of Appl. Mech.*, 1974, pp. 652-657.

3. Lewitsky M., Shaffer B.W. Residual Thermal Stresses in a Solid Sphere Cast From a Thermosetting Material. *Journal of Appl. Mech.*, 1975, vol. 42, no. 9, pp. 651-655.

4. Golotina L.A., Matveenko V.P., Shardakov I.N. Analysis of deformation process characteristics in amorphous-crystalline polymers. *Mechanics of Solids*, 2012, vol. 47, pp. 634-640. DOI:10.3103/S0025654412060040.

5. Boyce M.C., Socrate S., Llana P.G.. Constitutive Model for the Finite Deformation Stress-Strain Behavior of Poly(Ethylene Terephthalate) above the Glass Transition. *Polymer*, 2000, vol. 41, no. 6, pp. 2183-2201.

6. Rebecca B. Dupaux, Mary C. Boyce. Constitutive modeling of the finite strain behavior of amorphous polymers in and above the glass transition. *Mechanics of Materials*, 2007, no. 39, pp. 39-52.

7. J. Richeton, S. Ahzi, K. S. Vecchio, et al. Modeling and Validation of the Large Deformation Inelastic Response of Amorphous Polymers over a Wide Range of Temperatures and Strain-Rates. *Int. J. Solids Struct.*, 2007, no. 44, pp. 7938-7954.

8. L. Anand, N.M. Ames, V. Srivastava, S. A. Chester. A Thermo-Mechanically Coupled Theory for Large Deformations of Amorphous Polymers. Part I: Formulation. *Int. J. Plast.*, 2009, vol. 25, no 8, pp. 1474-1494.

9. Srivastava V., Chester S.A., Ames N.M., Anand L. A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition. *International Journal of Plasticity*, 2010, no. 26, pp. 1138-1182.

10. Varghese A.G., Batra R.C. Constitutive Equations for Thermomechanical Deformations of Glassy Polymers. *Int. J. Solids Struct.*, 2009, vol. 46, no. 22, pp. 4079-4094.

11. Qi H.J., Nguyen T.D., Castroa F., et al. Finite deformation thermo-mechanical behavior of thermally shape memory polymers. *J. Mech. Phys. Solids*, 2008, vol. 56, no. 5, pp. 1730-1751.

12. Liu C., Qin H., Mather P.T. Review of progress in shape-memory polymers. *J. Mater. Chem.*, 2007, vol. 17, pp. 1543-1558.

13. Liu Y.P., Gall K., Dunn M.L., Greenberg A.R., Diani J. Thermomechanics of shape memory polymers: uniaxial experiments and constitutive modeling. *Int. J. Plast.*, 2006, vol. 22, pp. 279-313.

14. Dietsch B., Tong T. A review: features and benefits of shape memory polymers (SMPs). *J. Adv. Mater.*, 2007, vol. 39, pp. 3-12.

15. Gunes I.S., Jana S.C. Shape memory polymers and their nanocomposites: a review of science and technology of new multifunctional materials. *J. Nanosci. Nanotechnol.*, 2008, vol. 8, pp. 1616-1637.

28. Теплофизические и реологические характеристики полимеров: справ. / под ред. Ю.С. Липатова – Киев: Наук. думка, 1977. – 244 с.

29. Пивень А.Н., Гречанная Н.А., Чернобыльский Н.И. Теплофизические свойства полимерных материалов. – Киев: Вища школа, 1976. – 180 с.

30. Нильсен Л. Механические свойства полимеров и полимерных композиций. – М.: Химия, 1978. – 312 с.

16. Shardakov I.N., Matveyenko V.P., Pistov N.V., Beghishev V.P. Simulation of Thermomechanical Processes in Crystallising Polymer. *Polym. Eng. and Sci.*, 1997, vol. 37, no.8, pp. 1270-1279.

17. Malkin A.Ya., Bolgov S.A., Begishev V.P., Mazalov O.S. Degree of crystalline structure of polymer obtained from melt at various cooling rates. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 1991, vol. 61, no. 3, pp. 1092-1095.

18. Novokshanov R.S., Rogovoi A.A. Evoliutsionnyye opredeliushchie sootnosheniia dlia konechnykh viazkoupругikh deformatsii [Evolutional constitutive relations for finite viscoelastic deformations]. *Izvestiia RAN. Mekhanika tverdogo tela – Mechanics of solids*, 2005, no. 4, pp.122-140.

19. Lu'e A.I. Nelineinaia teoriia uprugosti [Nonlinear theory of elasticity]. *Moscow, Nauka*, 1970, 940 p.

20. Adamov A.A., Matveenko V.P., Trufanov N.A., Shardakov I.N. Metody prikladnoi viazkoupругosti [Methods of applied viscoelasticity]. *Ekaterinburg, UrO RAN*, 2003, 411 p.

21. Rogovoi A.A. Opredeliushchie sootnosheniia dlia konechnykh upругo-neupругikh deformatsii [Constitutive relations for finite elastic-inelastic deformations]. *Prikladnaia mekhanika i tekhnicheskaiia fizika – Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2005, no. 5, pp.138-149.

22. Kulikov R.G., Kulikova T.G. On the determination of the deformed state of a crystallizing polymer medium with allowance for large deformations. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2012, no. 1, pp. 62-72.

23. Vikas Srivastava, Shawn A. Chester, Lallit Anand. Thermally actuated shape-memory polymers: Experiments, theory and numerical simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2010, no. 58, pp. 1100-1124.

24. Adamov A.A. Issledovanie i modelirovanie nestatsionarnogo termomekhanicheskogo povedeniia viazkoupругikh rezinopodobnykh materialov i elementov konstruktssii pri konechnykh deformatsiakh [Investigation and modeling of non-stationary thermomechanical behavior of viscoelastic rubber-like materials and structural elements at finite deformations]. *Perm', Dissertatsiia na soiskanie uchenoi stepeni doktora fiziko-matematicheskikh nauk*, 2004.

25. Rogovoy A.A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2012, no. 24, pp. 81-114.

26. Zenkevich O. Metod konechnykh elementov v tekhnike [Finite element method in engineering]. *Moscow, Mir*, 1975, 541 p.

27. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. Chislennye metody [Numerical methods]. *Moscow, Laboratoriia Bazovykh Znaniy*, 2001, 630 p.

28. Теплофизические и реологические характеристики полимеров [Thermophysical and rheological characteristics of polymers]. *Kiev, Naukova dumka*, 1977, 244 p.

29. Пивень А.Н., Гречанная Н.А., Чернобыльский Н.И. Теплофизические свойства полимерных материалов [Thermophysical properties of polymeric materials]. *Kiev, Vishcha shkola*, 1976, 180 p.

30. Nil'sen L. Mekhanicheskie svoistva polimerov i polimernykh kompozitsii [Mechanical properties of polymers and polymer compositions]. *Moscow, Khimiia*, 1978, 312 p.