

УДК 531.21

Р.Г. Куликов, Т.Г. КуликоваПермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия**К ВОПРОСУ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФОРМИРОВАННОГО
СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЗУЮЩЕЙСЯ ПОЛИМЕРНОЙ
СРЕДЫ С УЧЕТОМ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ**

Рассматривается задача об охлаждении бесконечной плиты постоянной толщины, изготовленной из полиэтилена низкого давления. Исследуется эволюция деформированного состояния плиты, обусловленного возникающими в процессе охлаждения и кристаллизации температурными и усадочными деформациями. При решении краевой задачи термомеханики используются определяющие соотношения в рамках теории больших деформаций.

Ключевые слова: кристаллизация, полимер, большие деформации, численные методы.

R.G. Kulikov, T.G. Kulikova

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

**ON THE QUESTION OF DEFINITION OF CRYSTALLIZING
POLYMER MEDIA DEFORMED STATE ACCOUNTING BIG
DEFORMATIONS**

The problem on cooling of infinite constant thickness plate made of low pressure polyethylene is considered. Evolution of deformed state caused by temperature and shrink deformations arouse in course of cooling and crystallization process is explored. Constitutional relations accounting big deformations were used to solve boundary thermomechanical problem.

Key words: crystallization, polymer, big deformations, numerical methods.

Вопросу моделирования механического поведения кристаллизующейся полимерной среды посвящено достаточно большое количество работ [1–4]. Технологический процесс производства изделий из полимерных материалов, как правило, включает этап охлаждения, сопровождающийся кристаллизацией материала. Напряжения, возникающие в полимерных изделиях при их производстве, могут достигать значительных величин и приводить к снижению эксплуатационных качеств изделий. Поэтому проблема описания термомеханического по-

ведения полимерных материалов в условиях фазовых переходов имеет большое значение. Вследствие значительности структурных усадочных деформаций, сопровождающих переход материала из одного фазового состояния в другое, используемые определяющие соотношения по возможности должны учитывать большие деформации.

С целью иллюстрации предложенных авторами ранее определяющих соотношений, построенных с учетом больших деформаций, в работе рассматривается модельная задача об охлаждении бесконечной плиты постоянной толщины (рис. 1), изготовленной из полиэтилена низкого давления. Изначально материал рассматриваемого тела нагрет до температуры, превышающей температуру плавления. Охлаждение происходит на воздухе, причем в материале протекают процессы кристаллизации, сопровождающиеся выделением тепла. Требуется исследовать эволюцию деформированного состояния тела, обусловленного возникающими в процессе охлаждения и кристаллизации температурными и усадочными деформациями.

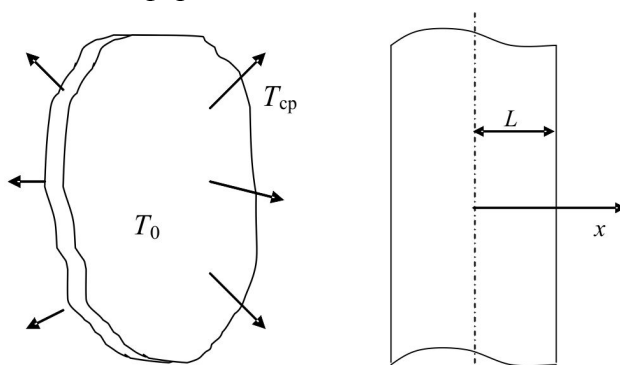


Рис. 1. Охлаждение пластины

Решение рассматриваемой задачи осуществлялось в два этапа. На первом этапе определялось решение краевой задачи нестационарной теплопроводности с учетом кристаллизации материала. На втором этапе с учетом полученных данных об эволюции полей температуры и степени кристаллизации по толщине пластины с течением времени осуществлялось решение краевой задачи механики кристаллизующегося полимера. Поскольку процесс сопровождается большими температурными и усадочными деформациями, задача рассматривалась в рамках теории больших деформаций.

1. Решение теплокинетической задачи

Постановка задачи в рамках известной теплокинетической модели включает [5]:

– нестационарное уравнение теплопроводности

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \rho(T)Q_k\dot{\alpha}(t), \quad x \in [0, L]; \quad (1)$$

– уравнение кинетики неизотермической кристаллизации

$$\frac{d\alpha}{dt} = K \exp\left(-\frac{U}{RT} - \frac{\Psi}{T_p - T}\right) (1 + A_0\alpha)(\alpha_p(T) - \alpha), \quad x \in [0, L]; \quad (2)$$

– граничные и начальные условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \lambda \frac{\partial T(L, t)}{\partial x} = -h(T(L, t) - T_{cp}(t)), \\ T(x, 0) = T_n, \quad \alpha(x, 0) = 0, \quad x \in [0, L], \end{aligned} \quad (3)$$

где Q_k – тепловой эффект реакции кристаллизации; T – температура; t – время; ρ – плотность материала; c – удельная теплоемкость; λ – коэффициент теплопроводности; α – степень кристаллизации материала, $\alpha = \partial\alpha/\partial t$; α_p – равновесная степень кристаллизации; T_p – температура плавления; T_{cp} – температура окружающей среды; R – универсальная газовая постоянная; K, U, Ψ, A_0 – макрокинетические константы, определяемые экспериментально; x – координата.

Численный расчет был проведен для пластины из полиэтилена низкого давления. Значения теплофизических и механических параметров брались из литературных источников [5–8]. При решении теплокинетической задачи учитывалась зависимость удельной теплоемкости, коэффициента теплопроводности и плотности полиэтилена от температуры.

Температурная краевая задача решена численно-разностным методом. В силу симметрии рассматривалась только половина конструкции. Толщина пластины полагалась равной 20 мм, начальная температура тела – 450 К. Используемая сетка содержала 100 узлов. Временной шаг составлял 0,5 с. Процесс расчета прекращался при достижении во всех точках равновесной степени кристаллизации.

Решение уравнения кинетики неизотермической кристаллизации определялось численно на каждом шаге алгоритма решения краевой задачи методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Для обеспечения устойчивости счета временной шаг составлял 0,005 с.

На рис. 2 представлены кривые распределения температуры и степени кристаллизации для различных моментов времени.

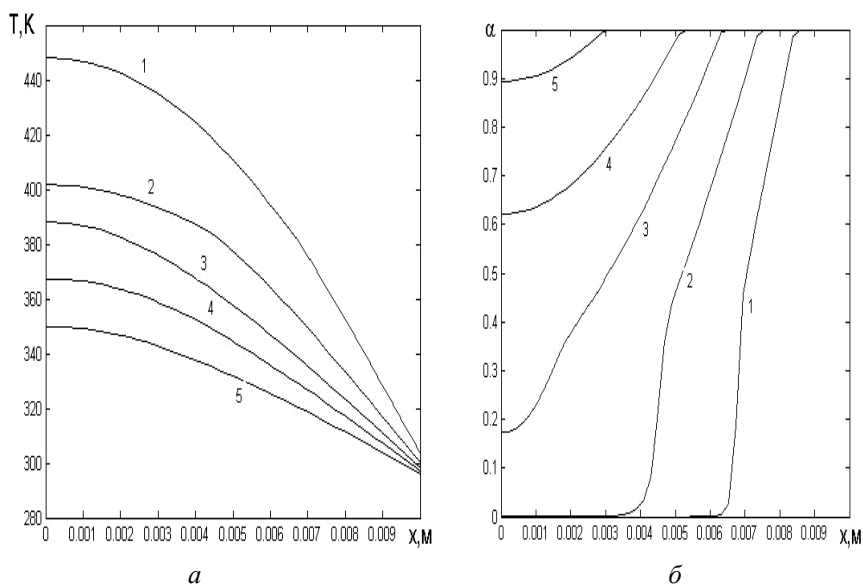


Рис. 2. Кривые распределения температуры и степени кристаллизации для различных моментов времени: 1 – 200 с, 2 – 400 с, 3 – 600 с, 4 – 800 с, 5 – 1000 с

2. Решение краевой задачи механики кристаллизующегося полимера

При решении задачи механики использовалась «слабая» вариационная постановка, которая для рассматриваемой задачи принимает вид [9]

$$\frac{1}{2} \int_{V_0} \mathbf{P}_{II} \cdot \delta \mathbf{C} dV_0 = 0, \quad (4)$$

где \mathbf{P}_{II} – тензор Пиолы-Кирхгофа второго рода, \mathbf{C} – 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 численных алгоритмов расчета.

Связь тензора Пиолы-Кирхгофа, характеризующего напряженное состояние материала, с упругим потенциалом W определяется в виде

$$\mathbf{P}_{II} = 2\partial W(\mathbf{G}_t^\times) / \partial \mathbf{G}_t^\times,$$

где \mathbf{G}_t^\times – тензор меры деформаций Коши-Грина для рассматриваемого момента времени t . Связь тензора меры деформаций Коши-Грина с тензором деформаций Коши-Грина определяется соотношением $\mathbf{C} = (\mathbf{G}^\times - \mathbf{g})/2$, где \mathbf{g} – метрический тензор. Определяющие соотношения для упругого кристаллизующегося полимерного материала взяты в форме [10]

$$W(\mathbf{G}_t^\times) = (1 - \alpha(t))W_a(\mathbf{G}_t^\times) + \int_0^{\alpha(t)} W_{кр}(\mathbf{F}_\tau^{-T} \cdot \mathbf{G}_t^\times \cdot \mathbf{F}_\tau^{-1}) d\alpha(\tau), \quad (5)$$

где \mathbf{F}_τ – тензор-градиент места, взятый относительно момента времени τ ; \mathbf{F}_τ^{-T} , \mathbf{F}_τ^{-1} – обратная величина к транспонированному тензору и обратная величина к тензору градиента места \mathbf{F}_τ соответственно; $W_a, W_{кр}$ – упругий потенциал аморфной и кристаллической фаз материала. В качестве упругого потенциала использовался двухконстантный потенциал Пенга-Ландела [11].

Рассматриваемая формулировка (4) нелинейна, так как строится с использованием нелинейных геометрических и физических соотношений. Для построения численного алгоритма определения деформированного состояния с учетом возникающих температурных и структурных деформаций выполнена линейризация исходной постановки (5). Это позволяет свести процедуру получения решения к анализу последовательности линейно-упругих краевых задач в рамках теории малых деформаций. Процедура линейризации подробно рассмотрена в работах [10, 12].

Предположим, что в процессе деформирования тело последовательно проходит три конфигурации (рис. 3), в которых положение точки определяется радиус-векторами r, R, \mathfrak{R} . Переход из начальной конфигурации в промежуточную определяется вектором перемещений \mathbf{U}_0 , а из промежуточной в конечную – вектором малых перемещений \mathbf{u} .

С учетом малости перемещений \mathbf{u} последнего перехода тензор деформаций Коши-Грина, описывающий переход из начальной конфигурации в конечную, может быть представлен в виде суммы двух слагаемых:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}^*, \quad (6)$$

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

где операторы $\nabla, \overset{0}{\nabla}$ определены относительно исходной и промежуточной конфигураций.

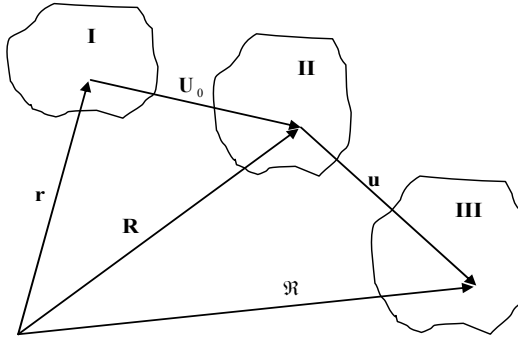


Рис. 3. Последовательность конфигураций в процессе деформирования:
I – начальная конфигурация, II – промежуточная конфигурация,
III – конечная конфигурация

Таким образом, полученные соотношения (6) линейно зависят от вектора малых перемещений \mathbf{u} последнего перехода.

Процедура линеаризации физических соотношений состоит в разложении соотношения (4) в ряд Тейлора с учетом только линейных слагаемых. Линеаризованные физические соотношения с учетом температурных и структурных деформаций могут быть записаны в общем виде:

$$\mathbf{P}_{II} = (\mathbf{P}_{II})_0 + {}^4 \mathbf{D}(\mathbf{C}_0) \cdot (\mathbf{F}_0^T \cdot (\mathbf{e} - \mathbf{e}_\theta) \cdot \mathbf{F}_0^T), \quad (7)$$

где ${}^4\mathbf{D}(\mathbf{C}_0)$ – тензор четвертого ранга линейных операторов, зависящий от деформированного состояния промежуточной конфигурации, \mathbf{e}_0 – тензор суммы малых температурных и структурных деформаций, $\mathbf{F}_0 = (\nabla \mathbf{R})^T$.

С учетом выполненных процедур линеаризации соотношение (4) принимает вид

$$\frac{1}{2} \int_{V_0} \left((\mathbf{P}_{II})_0 + {}^4\mathbf{D}(\mathbf{C}_0) \cdot (\mathbf{F}_0^T \cdot (\mathbf{e} - \mathbf{e}_0) \cdot \mathbf{F}_0) \right) \cdot \delta \mathbf{C}^* dV_0 = 0. \quad (8)$$

Выражение (8) – это линейное соотношение, сформулированное относительно приращения перемещений, возникающих вследствие малых приращений температурных и структурных деформаций. Определение эволюции поля перемещений сводится к решению последовательности линейных задач относительно приращения перемещений на временных шагах.

Для построения конечномерного аналога рассматриваемой задачи (8) использовался метод конечных элементов [13]. Использовался двухузловой элемент с линейной аппроксимацией неизвестных. В качестве узловых неизвестных выступали приращения перемещений на текущем временном шаге. В силу линейности постановки (8) глобальная система алгебраических уравнений принимает вид

$$[K(\mathbf{U}_0)]\{u\} = \{F_p\} + \{F_\theta\}, \quad (9)$$

где $[K(\mathbf{U}_0)]$ – глобальная матрица системы, обладающая симметрией и зависящая от вектора накопленных перемещений \mathbf{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, процесс определения эволюции деформированного состояния рассматриваемого тела сводится к решению последовательности линейных задач (9), сформулированных относительно приращений узловых перемещений. Оператор левой части соотношения требует переопределения на каждом шаге. Изменение компонент тензора деформаций Коши и тензора Пиолы-Кирхгофа при переходе в очередную конфигурацию определяется в соответствии с (6) и (7).

Временную сетку удобно взять совпадающей с временной сеткой температурно-конверсионной задачи.

При решении рассматриваемой задачи конечномерный аналог содержал 100 узлов. Временной шаг составлял 0,5 с.

Кривые распределения функции перемещений по толщине пластины для различных моментов времени представлены на рис. 4. Для сравнения на том же рисунке приведены кривые, полученные при решении аналогичной задачи с использованием линейных физических и геометрических соотношений. Как видно из графиков, с ростом времени расхождение результатов, полученных для рассматриваемой задачи с использованием нелинейной и линейной моделей, возрастает.

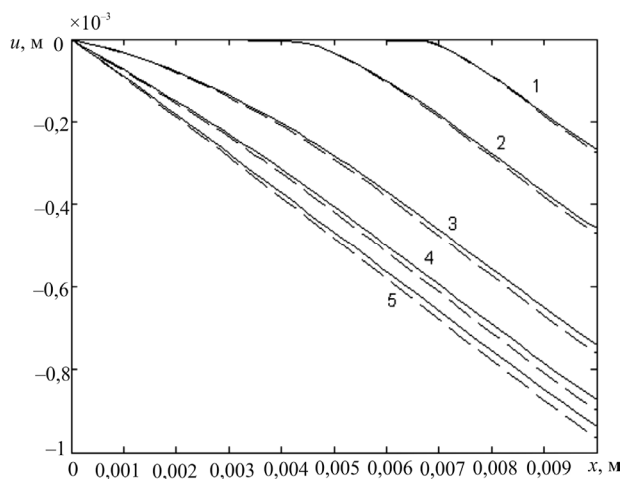


Рис. 4. Кривые распределения функции перемещений для различных моментов времени: 1 – 200 с, 2 – 400 с, 3 – 600 с, 4 – 800 с, 5 – 1000 с (— — нелинейная модель, - - - - - линейная модель)

В результате с использованием предложенного подхода решена задача моделирования процесса эволюции деформированного состояния в кристаллизующейся полимерной плите с учетом больших деформаций. Как видно из рис. 4, учет нелинейности определяющих соотношения для рассматриваемой задачи позволяет получить результаты, отличающиеся на 3% от результатов, полученных в рамках линейной модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-01-96032-р_урал_a).

Библиографический список

1. Моделирование термомеханических процессов в кристаллизующемся полимере / В.П. Бегишев [и др.] // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 1997. – № 4. – С. 120–132.
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. Куликова Т.Г., Труфанов Н.А. Численное решение краевой задачи термомеханики для кристаллизующегося вязкоупругого полимера // Вычислительная механика сплошных сред. – 2008. – Т. 1, № 2. – С. 38–52.
5. Малкин А.Я., Бегишев В.П. Химическое формирование полимеров. – М.: Химия, 1991. – 540с.
6. Теплофизические и реологические характеристики полимеров: справочник / под ред. Ю.С. Липатова. – Киев: Наукова думка, 1977. – 244 с.
7. Пивень А.Н., Гречанная Н.А., Чернобыльский Н.И. Теплофизические свойства полимерных материалов. – Киев: Вища школа, 1976. – 180 с.
8. Нильсен Л. Механические свойства полимеров и полимерных композиций. – М.: Химия, 1978. – 312 с.
9. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. – М.: Наука, 1980. – 512 с.
10. 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.
11. Методы прикладной вязкоупругости / А.А. Адамов [и др.]. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 411 с.
12. Куликова Т.Г. К описанию деформирования кристаллизующегося полимерного материала с учетом больших деформаций // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010. – № 3. – С. 67–85.
13. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541 с.

References

1. Begishev V.P., Matveenkov V.P., Pistsov N.V., Shardakov I.N. Modeling of thermomechanical processes in crystallizing polymers [Modelirovanie termomekhanicheskikh protsessov v kristallizuyushchetsya polimere]. *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela – Mechanics of Solids*, 1997, No. 4, pp. 120–132.
2. Shardakov I.N., Golotina L.A. Modeling of deformation processes in amorphous-crystalline polymers [Modelirovanie deformatsionnykh protsessov v amorfno-kristallicheskih polimerakh]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred – Computational continuum mechanics*, 2009, Vol. 2, No 3, pp. 106–113.
3. Zavyalova T.G., Trufanov N.A. Constitutive relations for a viscoelastic body in a crystallization [Opredelyayushchie sootnosheniya dlya vyazkouprugogo tela v usloviyakh kristallizatsii] // *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika – Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2005, Vol. 46, No 4, pp 78–87.
4. Kulikova T.G., Trufanov N.A. Numerical solution of a thermomechanical boundary-value problem for crystallizing viscoelastic polymer [Chislennoe reshenie kraevoy zadachi termomekhaniki dlya kristallizuyushchegosya vyazkouprugogo polimera]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred – Computational continuum mechanics*, 2008, Vol. 1, No 2, pp. 38–52.
5. Malkin A.Ya., Begishev V.P. Chemical Forming Polymers [*Khimicheskoe formovanie polimerov*]. Moscow: Khimiya, 1991, 540 p.
6. Thermophysical and rheological properties of polymers. Handbook [*Teplofizicheskie i reologicheskie kharakteristiki polimerov. Spravochnik*]. Kiev: Naukova dumka, 1977, 244 p.
7. Piven A.N., Grechannaya N.A., Chernobylskiy N.I. Thermophysical properties of polymeric materials [*Teplofizicheskie svoystva polimernykh materialov*]. Kiev: Vishcha shkola, 1976, 180 p.
8. Nilsen L. Mechanical properties of polymers and polymer composites [*Mekhanicheskie svoystva polimerov i polimernykh kompozitsiy*]: Transl. from eng. Moscow: Khimiya, 1978, 312 p.
9. Lure A.I. Nonlinear theory of elasticity [*Nelineynaya teoriya uprugosti*]. Moscow: Nauka, 1980, 512 p.
10. Kulikova T.G., Trufanov N.A. [Opredelyayushchie sootnosheniya dlya kristallizuyushchegosya polimernogo materiala i poshagovaya protsedura resheniya s uchetom konechnykh deformatsiy]. *Vychislitel'naya mekhanika – Computational Mechanics*, Perm: Perm, Gos. tekhn. Univ. Publ, 2008, No. 7, pp. 170–180.

11. Adamov A.A., Matveenko V.P., Trufanov N.A., Shardakov I.N. Methods of Applied Viscoelasticity [*Metody prikladnoy vyazkouprugosti*]. Ekaterinburg: UrO RAN, 2003, 411 p.

12. Kulikova T.G. To the description of crystallizing polymer material's deformation with regard to large deformations [К описанию деформирования кристаллизующегося полимерного материала с учетом больших деформаций]. *PSTU Mechanics Bulletin – Vestnik PGTU. Mekhanika*, 2010, No. 3, pp.67–85.

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

Об авторах

Куликов Роман Георгиевич (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры вычислительной математики и механики Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: kulrtg@mail.ru).

Куликова Татьяна Георгиевна (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры вычислительной математики и механики Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: kulrtg@mail.ru).

About the authors

Kulikov Roman Georgievich (Perm, Russian Federation) – Ph. D. in Physical and Mathematical Sciences, Ass. Professor, Department of Compute Mathematics and Mechanics, State National Research Polytechnic University of Perm (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russian Federation, e-mail: kulrtg@mail.ru).

Kulikova Tatiana Georgievna (Perm, Russian Federation) – Ph. D. in Physical and Mathematical Sciences, Ass. Professor, Department of Compute Mathematics and Mechanics, State National Research Polytechnic University of Perm (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russian Federation, e-mail: kulrtg@mail.ru).

Получено 19.02.2012