

УДК 541.64:539.3

© 1991 г. А. М. Липанов, М. Ю. Альес, О. И. Евстафьев

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ  
ОТВЕРЖДАЮЩИХСЯ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ**

Рассматривается задача о напряженно-деформированном состоянии полимерных систем в процессе их отверждения. Для исследования качественных закономерностей формирования полей напряженно-деформированного состояния математическая модель процесса построена в рамках линейной теории вязкоупругости. Распределение температурно-конверсионных полей отыскивается независимо от напряженно-деформированного состояния. Методика решения основана на использовании метода конечных элементов. Для простоты изложения рассматривается случай декартовых координат  $x_i$ .

1. Приняв [1] за меру глубины отверждения «калориметрическую» степень превращения  $\eta$ , кинетическое уравнение для скорости реакции запишем в виде [2]

$$\frac{d\eta}{dt} = Z(\eta, T), \quad Z(\eta, T) = K_0 e^{-E/RT} (1-\eta) (1-c_0\eta), \quad (1)$$

где  $t$  — время;  $T$  — температура;  $K_0$  — предэкспонент;  $E$  — эффективная энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $c_0$  — константа автоторможения, характеризующая степень незавершенности процесса.

В рамках принятых допущений задача о распределении полей  $T$  ( $T(x_i, t)$ ) и  $\eta(x_i, t)$  сводится к интегрированию уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + Q \frac{\partial \eta}{\partial t} = c\rho \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

совместно с уравнением (1) и заданными краевыми

$$T \Big|_{S_1} = T^* \quad (3)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \Big|_{S_2} = q + \alpha(T - T_{cp}), \quad (4)$$

и начальными условиями

$$T(x_i, 0) = T_0, \quad \eta(x_i, 0) = \eta_0$$

Здесь  $\lambda$  — теплопроводность;  $c$  — теплоемкость;  $\rho$  — плотность;  $Q$  — энтальпия процесса отверждения;  $S_1$  и  $S_2$  — части поверхности  $S$ , на которых задаются соответственно температура и закон теплообмена с окружающей средой;  $q$  — плотность теплового потока;  $\alpha$  — коэффициент теплообмена;  $T_{cp}$  — температура окружающей среды.

По «немому» индексу производится суммирование.

Произведя триангуляцию  $P$  области интегрирования  $V$  на множестве симплексиальных конечных элементов [3], обозначим  $N, M$  — число симплексов и узлов в  $V$ ;  $L$  — множество симплексов, у которых хотя бы одна грань используется при аппроксимации поверхности тела;  $\Gamma_n$  — число уз-

лов в симплексе  $n$ ;  $B_n$  — число узлов симплекса  $n$ , находящихся на поверхности тела.

Представив локальное поле температуры симплексной модели в виде

$$T=T_\gamma \psi_\gamma, \psi_\gamma=b_\gamma+b_{\gamma i}x_i \quad (\gamma=1, \Gamma_n)$$

и применяя процедуру метода конечных элементов по схеме Галеркина с использованием «слабой» формы задачи (2)–(4), будем иметь

$$\mathbf{CT} + \mathbf{KT} = \mathbf{G} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{CT} &= \sum_{n=1}^N \left( \Omega_m^{-1} c \rho \frac{\partial T_l}{\partial t} \int_V \int \int \psi_l \psi_l dV \right)_n \\ \mathbf{KT} &= \sum_{n=1}^N \left( \Omega_m^{-1} \lambda T_l b_{li} b_{li} V + \Lambda_L^{-1} \Omega_m^{-1} T_l \int_{S_2} \int \alpha \psi_l \psi_b dS \right)_n \\ \mathbf{G} &= \sum_{n=1}^N \left( \Omega_m^{-1} w \int_V \int \psi_l dV - \Lambda_L^{-1} \Omega_m^{-1} \int_{S_2} (q - \alpha T_{ep}) \psi_b dS \right)_n \end{aligned} \quad (6)$$

$$\Lambda_L^{-1} = 1 \quad (\forall n \in L), \quad \Lambda_L^{-1} = 0 \quad (\forall n \notin L)$$

$$(m=1, M; \gamma=1, \Gamma_n; \beta=1, B_n; i=1, 3).$$

Здесь  $T_\gamma$  — температура в узле  $\gamma$ ;  $b_\gamma, b_{\gamma i}$  — величины, являющиеся функциями координат узлов симплекса [3];  $\Omega_m^{-1}$  — булева процедура, определяемая правилом  $\Omega_m^{-1}=1$ , если узел  $\gamma \in n$  соответствует узлу  $m \in P$ ,  $\Omega_m^{-1}=0$  в противоположном случае. При записи системы (5) полагается, что теплophysical характеристики среды и скорость тепловыделения  $w=Q \frac{\partial u}{\partial t}$

поэлементно однородны. Вычисление интегралов, содержащих базисные функции  $\psi_\gamma$ , а также аппроксимации для тепловой «нагрузки» на поверхность тела имеются в работе [4].

Замыкается система (5) уравнениями для скорости тепловыделения в каждом конечном элементе. Температура по элементу осредняется.

Для решения эволюционной задачи (5) использовали схему Кранка — Николсона.

2. Примем [1], что за все время отверждения образующийся полимерный материал является сжимаемой или несжимаемой изотропной линейной вязкоупругой нестареющей средой, объемная деформация которой не релаксирует. Влияние температуры на реологические свойства учтем путем введения модифицированного времени  $dt'=dt/a_t$ , где  $a_t$  — функция температурно-временного сдвига.

Для учета влияния глубины отверждения на вязкоупругие свойства среды воспользуемся следующими приближенными соотношениями. Пусть  $\tau$  — характерное время релаксации сдвиговых напряжений. Полагая [5], что при  $\eta=0 \tau=0$  и обозначая  $\tau$  при  $\eta=\eta_c=1/c_0$  через  $\tau_c$ , можно предложить следующую аппроксимационную зависимость:  $(0 \leq \eta \leq \eta_c)$

$$\tau = \tau_c e^{-\frac{A(\eta_c - \eta)}{\eta}}, \quad (7)$$

где  $A$  — константа.

Используя для регулярной части ядра сдвиговой релаксации экспоненциальное представление [1] с характерным временем  $1/\theta=\tau$ , будем иметь

$$\Gamma(t, \eta) = C e^{-\theta t} \quad (8)$$

Зависимость «мгновенного» модуля сдвига от  $\eta$  определяется соотношением

$$\mu = \frac{1}{2} \frac{C}{\theta} \quad (9)$$

Из соотношений (7)–(9) в соответствии с положениями линейной наследственной механики [6] асимптотически ( $A \rightarrow \infty$ ) следует подход, предложенный в работе [7].

В рамках принятых допущений постановка задачи о напряженно-деформируемом состоянии (НДС) отвергающейся полимерной системы с параметрами вязкоупругости, зависящими от  $T$  и  $\eta$ , будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{i\alpha}}{\partial x_\alpha} + \rho F_i &= 0, \quad \varepsilon_{i\alpha} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial U_\alpha}{\partial x_i} \right) \\ \sigma_{i\alpha} &= 2\mu \left[ \varepsilon_{i\alpha} + \left( vH - \alpha_t \Delta T + \frac{1}{3} \theta_x \right) \delta_{i\alpha} \right] - \Gamma_{i\alpha} \quad (10) \\ \varepsilon_{ii} - (1-2v)H - 3\alpha_t \Delta T + \frac{1}{3} \theta_x &= 0 \\ U_i \Big|_{S_U} &= U^*, \quad \sigma_{i\alpha} n_\alpha \Big|_{S_f} = f_i, \end{aligned}$$

где  $\sigma_{i\alpha}$ ,  $\varepsilon_{i\alpha}$  – тензоры напряжений и деформаций;  $U_i$  – вектор перемещений;  $\varepsilon_{i\alpha}$  – девиатор деформаций;  $F_i$ ,  $f_i$  – векторы массовых и поверхностных сил;  $n_\alpha$  – вектор внешней нормали к  $S$ ;  $S_U$ ,  $S_f$  – части поверхности  $S$ , на которых задаются  $U_i$  и  $f_i$ ;  $v$  – «мгновенный» коэффициент поперечной деформации;  $\delta_{i\alpha}$  – символ Кронекера;  $\alpha_t$  – коэффициент теплового расширения;  $\Delta T = T - T_n$ ,  $T_n$  – температура ненапряженного состояния;  $\theta_x$  – относительное изменение объема вследствие полимеризации материала.

Интеграл  $\Gamma_{i\alpha} = \int \Gamma(t' - \xi', \eta) \varepsilon_{i\alpha}(\xi) d\xi$  на временном слое  $(j+1)$  аппроксимируем в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_{i\alpha} &= \Gamma(\Delta t_1', \eta_1) \varepsilon_{i\alpha}(t_0) \Delta t_1 \quad (j=0) \\ \Gamma_{i\alpha} &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \Delta t_n [\Gamma(t'_{j+1} - t'_{n-1}, \eta_{j+1}) \varepsilon_{i\alpha}(t_{n-1}) + \Gamma(t'_{j+1} - t'_n, \eta_{j+1}) \varepsilon_{i\alpha}(t_n)] + \\ &\quad + \Gamma(\Delta t'_{j+1}, \eta_{j+1}) \varepsilon_{i\alpha}(t_{j+1}) \quad (n=1, j+1) \end{aligned}$$

Используя триангуляцию  $P$  и применяя процедуру по схеме Галеркина для «слабой» формы задачи (10) при линейной аппроксимации локального поля перемещений  $U_i = \psi_i U_{it}$  ( $\gamma=1$ ,  $\Gamma_n$ ) и постоянном значении по элементу функции  $H_n$  ( $n=1, N$ ) будем иметь

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \left\{ \Omega_m \mu \left[ b_{\gamma i} (a_{\alpha i} + a_{i\alpha}) + 2vHb_{\gamma\alpha} - \frac{1}{\mu} b_{\gamma i} \Gamma_{i\alpha} - 2 \left( \alpha_t \Delta T - \frac{1}{3} \theta_x \right) b_{\gamma\alpha} \right] v - \right. \\ \left. - \Lambda_L \Omega_m F_{\alpha\beta} \right\}_n = 0 \quad (11) \end{aligned}$$

$$\{2\mu v [a_{ii} - (1-2v)H - 3\alpha_t \Delta T + \theta_x] V\}_n = 0$$

$$a_{ij} = U_{it} b_{\gamma i} \quad (n=1, N; m=1, M; \gamma=1, \Gamma_n)$$

Здесь  $U_{i\alpha}$ ,  $F_{\alpha\beta}$  – компоненты перемещений узла и результирующих сил, приложенных к узлам  $\beta$  и  $\alpha$ , обусловленных воздействием соответственно поверхностных и массовых нагрузок. Аппроксимации для  $F_{\alpha\beta}$  и имеются в работах [3, 4]. При записи системы (11) полагается, что физико-механические характеристики среды поэлементно однородны.

Для решения системы уравнений (11) использовали пакет программ линейной алгебры [8].

3. В качестве примера рассматривали задачу о НДС полого кругового цилиндра, состоящего из отвергающегося полимерного наполнителя, скрепленного по наружной поверхности с упругой тонкостенной оболочкой. Система работает в условиях плоской деформации ( $\varepsilon_{zz}=0$ ) и осевой

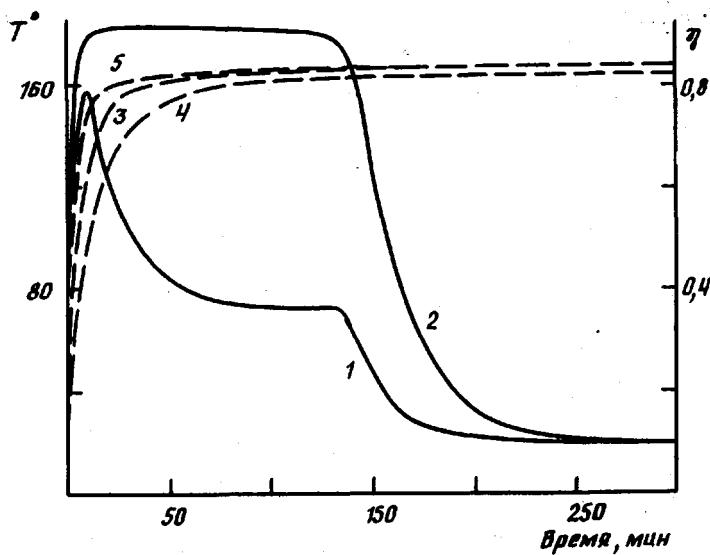


Рис. 1. Изменение температуры  $T$  (1, 2) и степени превращения  $\eta$  (3–5). 1, 3, 4 – вариант I; 2, 5 – вариант II

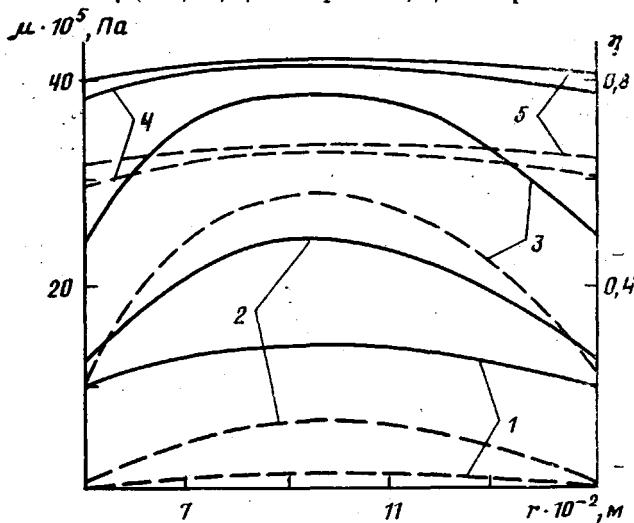


Рис. 2. Распределение степени превращения  $\eta$  и «мгновенного» модуля сдвига  $\mu$  в моменты времени 1 мин 20 с (1), 2 мин 40 с (2), 8 мин 40 с (3), 1 ч (4) и 133,3 мин (5)

симметрии (индексом « $\kappa$ » обозначены характеристики корпуса); радиус канала  $R_1=0,05$  м, радиус скрепления наполнителя с корпусом  $R_2=0,15$  м, толщина корпуса  $h=0,002$  м,  $E=31,5$  кДж/моль,  $K_0=116,7$  с,  $c_0=1, 2$ ,  $\lambda=-2,6$  Вт/м·град,  $\rho c=260$  кДж/м·град,  $Q=264$  кДж/кг,  $A=2$ ,  $C=50$  МН/м<sup>2</sup>,  $\nu=0,5$ ,  $\tau_c=0,2$  с,  $\alpha_t=1,04 \cdot 10^{-5}$  град,  $T_h=73^\circ$ ,  $\theta_x=0$ ,  $\lambda_\kappa=25,25$  Вт/м·град,  $(\rho c)_\kappa=285$  кДж/м·град,  $\mu_\kappa=8,1 \cdot 10^4$  МН/м<sup>2</sup>,  $\nu_\kappa=0,13$ ,  $(\alpha_t)_\kappa=0,117 \cdot 10^{-6}$  град,  $\Delta t_{i+1}=40$  с.

$$\lg a_t(T^\circ) = 1,42 \left[ 3,38 - \frac{8,86(T+34,6)}{182+(T+34,6)} \right]$$

Некоторые результаты представлены на рис. 1–6 для двух вариантов, моделирующих условия отверждения. В варианте I (изотермическое окружение) полагалось, что температура поверхностей  $r=R_1$  и  $r=R_2+h$  равна  $T_h$ . В варианте II (адиабатическое окружение) указанные поверхности полагались теплоизолированными. В обоих вариантах с момента времени  $t=133,3$  мин проводилась смена краевых условий: температура на внутренней и наружной поверхностях цилиндра полагалась равной  $20^\circ$ . Начальные условия:  $T_0=T_h$ ,  $\eta_0=0$ .

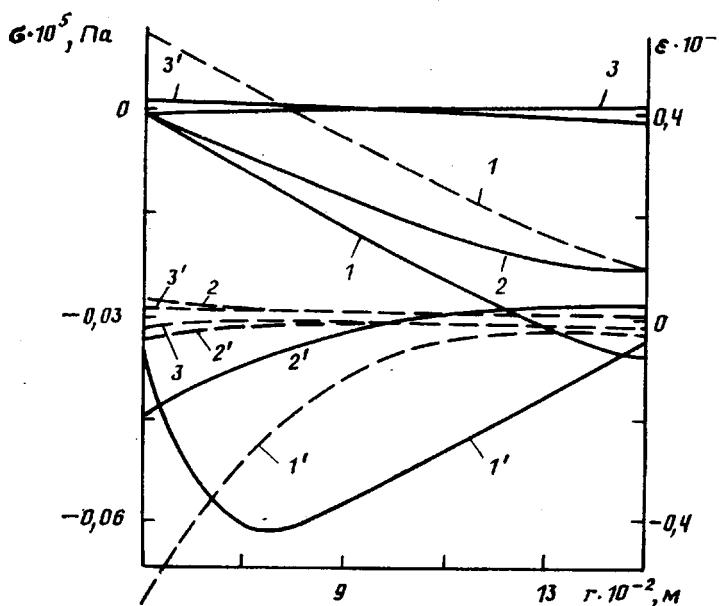


Рис. 3. Распределение напряжений  $\sigma_r$  (1-3),  $\sigma_\phi$  ( $1'-3'$ ) и деформаций  $\varepsilon_r$  (1-3),  $\varepsilon_\phi$  ( $1'-3'$ ) в моменты времени 8 мин 40 с (1), 1 ч (2), 133,3 мин (3). Вариант I

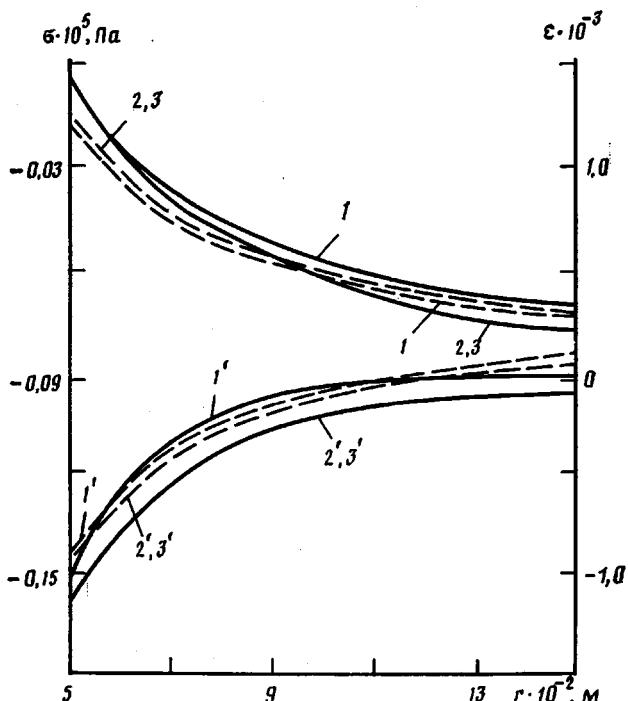


Рис. 4. Распределение напряжений  $\sigma_r$  (1-3),  $\sigma_\phi$  ( $1'-3'$ ) и деформаций  $\varepsilon_r$  (1-3),  $\varepsilon_\phi$  ( $1'-3'$ ) в моменты времени 8 мин 40 с (1), 1 ч (2) и 133,3 мин (3). Вариант II

В рассматриваемой задаче можно выделить три характерных временных участка. Первая стадия процесса характеризуется интенсивным объемным тепловыделением (рис. 1). В адиабатическом варианте реакции протекают с большей скоростью. Распределение температуры  $T$ , степени отверждения  $\eta$  по объему однородное, что обусловливает в рамках принятых допущений однородное распределение модуля  $\mu$ , функции влияния  $\Gamma$ . В варианте изотермического окружения на первой стадии процесса, распределение  $T$ ,  $\eta$  и, как следствие,  $\mu$ ,  $\Gamma$  существенно неоднородно. Для ил-

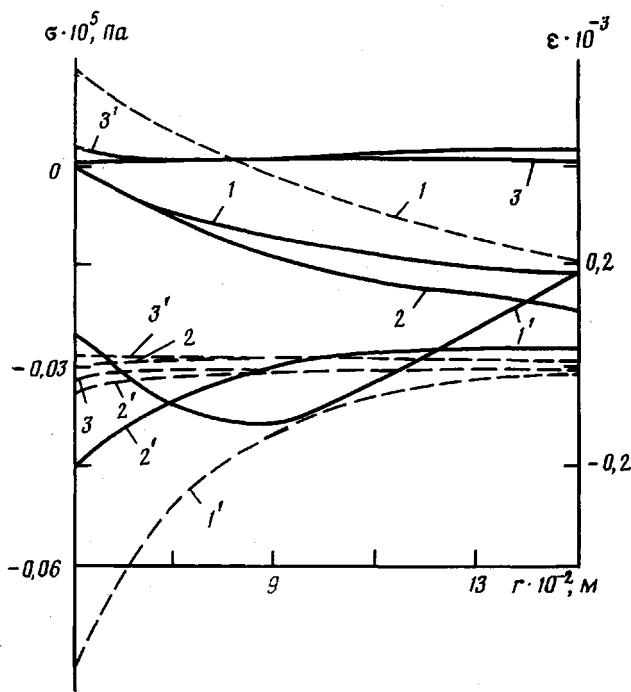


Рис. 5. Распределение напряжений  $\sigma_r$  (1–3),  $\sigma_\phi$  ( $1'-3'$ ) и деформаций  $\varepsilon_r$  (1–3),  $\varepsilon_\phi$  ( $1'-3'$ ) в моменты времени 8 мин 40 с (1), 1 ч (2) и 133,3 мин (3). Вариант I ( $A=10$ )

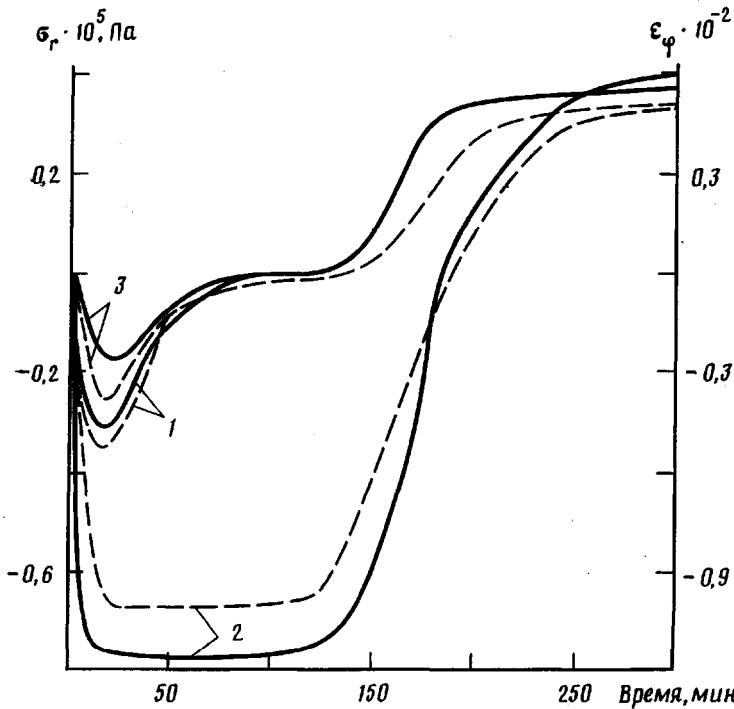


Рис. 6. Изменение контактных напряжений  $\sigma_r$  и кольцевых деформаций канала  $\varepsilon_\phi$ . Варианты I–III (1–3). Для варианта III  $A=10$

люстрации этого на рис. 1 кривыми 1, 3 обозначено соответственно изменение  $T$ ,  $\eta$  при  $r=(R_1+R_2)/2$ , кривой 4 – изменение  $\eta$  на канале (температура на канале 73°). На рис. 2 сплошными линиями представлено распределение  $\eta$ , штриховыми линиями – распределение  $\mu$ .

К моменту времени 8 мин 40 с мощность внутренних источников тепла резко уменьшается. На второй стадии процесса в адиабатическом ва-

рианте температура практически постоянна (рис. 1, кривая 2). В варианте изотермического окружения температура в объеме релаксирует до температуры поверхности (рис. 1, кривая 1). Из рис. 1 и 2 видно, что к моменту времени 133,3 мин распределение  $T$ ,  $\eta$ ,  $\mu$ ,  $\Gamma$  близко к однородному.

На третьей стадии происходит охлаждение конструкции. Характер пространственно-временного распределения функций  $T$ ,  $\eta$ ,  $\mu$ ,  $\Gamma$ , а также наличие скрепленного с наполнителем деформируемого корпуса и несжимаемость наполнителя определяют особенности кинетики НДС в конструкции. На рис. 3–5 сплошными кривыми обозначены распределения по радиусу цилиндра радиальных  $\sigma_r$  и кольцевых  $\sigma_\phi$  напряжений, штриховыми — деформаций  $\varepsilon_r$ ,  $\varepsilon_\phi$ . На рис. 6 представлено изменение во времени напряжения  $\sigma_r$  на границе скрепления наполнителя с корпусом (сплошные линии) и деформации  $\varepsilon_\phi$  канала (штриховые линии) — характеристика НДС, во многих случаях [1] ответственных за прочность системы наполнитель — корпус.

Как видно из рисунков, на первой и второй стадиях процесса вследствие того, что  $(1+v)\alpha > (1+v_k)\alpha_k$ ,  $\Delta T > 0$ , в конструкции реализуются сжимающие напряжения  $\sigma_r$ ,  $\sigma_\phi$ . Экстремальный характер распределения  $\sigma_\phi$  по радиусу в варианте I к началу второй стадии (рис. 3, кривая 1) обусловлен ярко выраженной пространственной неоднородностью «мгновенного» модуля сдвига  $\mu$  и температуры  $T$ . На рис. 5 для иллюстрации влияния распределения  $\mu$  представлены результаты расчета по исходным данным варианта I, но с константой в уравнении (7), равной  $A=10$ . Пространственно-временное распределение  $T$ ,  $\eta$ ,  $\Gamma$  для вариантов рис. 3 и 5 одинаковое. При достигаемой равной в каждый момент времени степени превращения  $\eta$  модуль  $\mu$  при  $A=10$  имеет меньшее значение (или равное при  $\eta=\eta_c$ ), чем модуль при  $A=2$ . Это обуславливает его более однородное пространственное распределение к началу второй стадии и, как следствие, менее выраженный экстремальный характер распределения  $\sigma_\phi$  (рис. 5, кривая 1).

Относительно распределения деформаций отметим следующее. В варианте изотермического окружения на первых двух стадиях процесса досмены краевых условий ( $t < 133,3$  м) вклад «тепловой составляющей» в деформацию канала и наружной поверхности отсутствует. Канал и корпус под действием системы внутренних напряжений перемещаются в направлении к оси цилиндра, реализуются сжимающая кольцевая  $\varepsilon_\phi$  и растягивающая радиальная  $\varepsilon_r$  деформации (рис. 3, 5, кривые 1'–3', 1–3). В адабатическом варианте поверхности цилиндра имеют существенную «тепловую составляющую» деформаций. На первых двух стадиях процесса отверждения корпус перемещается в направлении от осевой линии цилиндра, канал — к осевой линии. На внешней поверхности реализуются растягивающие кольцевые деформации, на канале — сжимающие (рис. 4, кривые 1'–3'). Радиальные деформации при этом по объему растягивающие (рис. 4, кривые 1–3).

На второй стадии в варианте I  $\Delta T$  стремится к нулю, уровень напряжений и деформаций уменьшается (рис. 3, 5, кривые 2, 3, 2', 3'; рис. 6, кривые 1, 3).

В варианте II вследствие продолжающегося слабого тепловыделения напряжения и деформации по абсолютной величине незначительно увеличиваются (рис. 4, кривые 2, 3, 2, 3; рис. 6, кривая 2).

На третьей стадии процесса охлаждения конструкции до 20° знак напряжений и деформаций меняется. Для рассматриваемой задачи именно на этой стадии возникают опасные с точки зрения прочности конструкции отрывные радиальные напряжения в месте скрепления наполнителя с корпусом и растягивающие кольцевые деформации канала.

Методика численного моделирования реализована в виде программного комплекса, ориентированного на ЕС ЭВМ и позволяющего стандартно рассчитывать НДС отверждающихся полимерных систем в областях произвольной формы в плоской и осесимметричной постановках при произвольных тепловых и силовых режимах отверждения.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Москвитин В. В. Сопротивление вязкоупругих материалов.* М., 1972. С. 327.
2. *Бегищев В. П., Болгов С. А., Лавочкин Ю. Б. // Механика деформируемых неоднородных структур.* Свердловск, 1986. С. 86.
3. *Оден Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред.* М., 1976. С. 464.
4. *Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов.* М., 1979. С. 392.
5. *Кристенсен Р. Введение в теорию вязкоупругости.* М., 1974. С. 338.
6. *Ильюшин А. А., Победря Б. Е. Основы математической теории термовязкоупругости.* М., 1970. С. 280.
7. *Малкин А. Я., Бегищев В. П., Шардаков И. Н., Шадрин О. А., Болгов С. А. // Высокомолек. соед. А. 1987. Т. 29. № 9. С. 1992. М., 1974. С. 186.*
8. Сборник научных программ на ФОРТРАНе. Ч. 2: Линейная алгебра. М., 1974. С. 186.

Институт математики и механики  
УрО АН СССР

Поступила в редакцию  
09.10.89

A. M. Lipanov, M. Yu. Al'yes, O. I. Yevstaf'ev

### NUMERICAL SIMULATION OF THE STRESS-STRAINED STATE OF POLYMER SYSTEMS UNDER CURING

#### Summary

The problem of the stress-strained state of polymer systems in the course of their curing is discussed. The qualitative regularities of the formation of the stress-strained state fields are studied using the mathematical model based on the linear theory of viscoelasticity. The distribution of the temperature-conversion fields is determined independently on the stress-strained state. The technique of solution uses the finite elements method. For simplicity the case of Cartesian coordinates  $x_i$  is described.