

УДК 539.3

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС
ТЕРМОВЯЗКОУПРУГИЕ МОДЕЛИ ОТВЕРЖДЕНИЯ
ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ИЗДЕЛИЙ¹**

Н. А. Беяева, Е. Е. Худоева

Вычислительный комплекс объединяет цикл программ, разработанных в рамках математических моделей формирования осесимметричных изделий — цилиндр, сфера — в процессе их получения при параллельном протекании реакций полимеризации и кристаллизации. В статье приводится описание и принцип работы комплекса.

Ключевые слова: вычислительный комплекс, отверждение, термовязкоупругость, объемный и фронтальный режимы, двусторонний фронт, реакции полимеризации и кристаллизации, давление, непрерывное наращивание, внутренние напряжения, метод прогонки.

1. Общие сведения о комплексе

Одним из направлений научных исследований кафедры математического моделирования и кибернетики Сыктывкарского государственного университета является математическое моделирование процессов формирования осесимметричных изделий (сфера, цилиндр) методом химического формования. В рамках несвязанной теории термовязкоупругости разработан ряд математических моделей объемного и фронтального отверждения сферического и цилиндрического изделий в процессе фазового перехода жидкость — твердое тело при параллельном протекании реакций полимеризации и кристаллизации. Модели фронтального

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ ГК № 02.740.11.0618

отверждения разработаны с точки зрения механики непрерывно наращиваемого твердого тела. Каждая модель содержит теоретическую и вычислительную компоненты. Последняя подразумевает расчет температурных, конверсионных полей протекающих реакций, расчет полей внутренних напряжений в соответствии с формулами теоретической части соответствующей математической модели.

Главной целью разработки данного вычислительного комплекса было создание единого программного модуля, объединяющего расчетные программы указанных математических моделей. Программы выполнены в среде программирования Delphi 7.0.

Оболочка вычислительного комплекса представляет собой web-сайт, выполненный на языке разметки гипертекста HTML с использованием каскадных таблиц стилей CSS и JavaScript-сценариев. На рис.1 изображено главное окно комплекса.

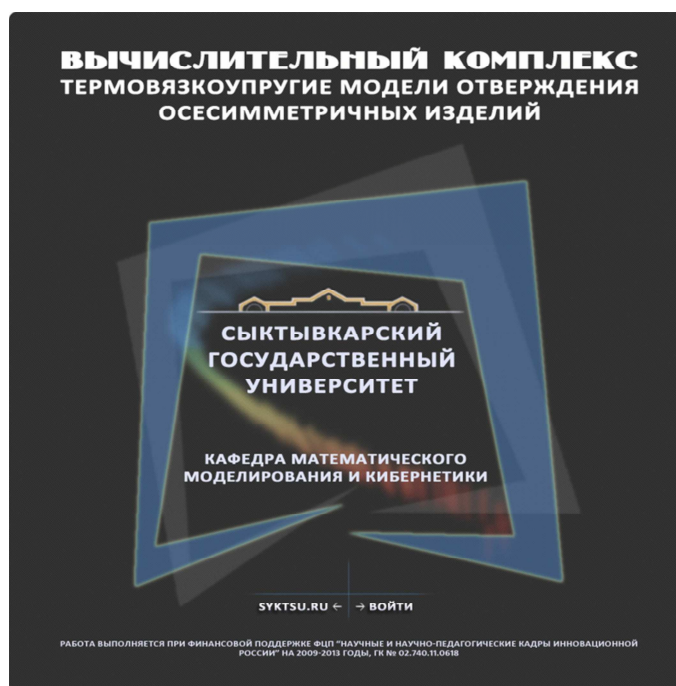


Рис.1 Главное окно

Структура вычислительного комплекса представлена тремя разделами: «О комплексе», «Исполнители», «Программы» (рис.2).

В разделе «О комплексе» приводится описание комплекса в целом, его актуальность и общая информация о нем.

Сведения о разработчиках комплекса и авторах входящих в него программ содержит раздел «Исполнители».

В разделе «Программы» содержится список программ с их кратким описанием, и здесь же непосредственно осуществляется их выбор и запуск.

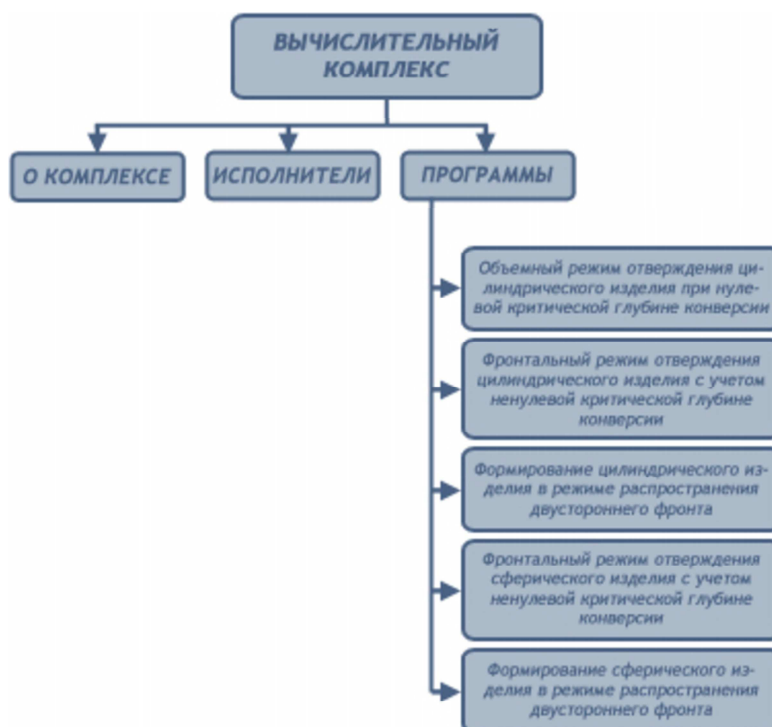


Рис.2 Структура вычислительного комплекса

2. Программы

На данный момент вычислительный комплекс включает в себя пять программных модулей численной реализации математических моделей формирования осесимметричных изделий (сфера, цилиндр):

1. «Объемный режим отверждения цилиндрического изделия при нулевой критической глубине конверсии»;
2. «Фронтальный режим отверждения цилиндрического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии»;
3. «Формирование цилиндрического изделия в режиме распространения двустороннего фронта»;

4. «Фронтальный режим отверждения сферического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии»;
5. «Формирование сферического изделия в режиме распространения двустороннего фронта».

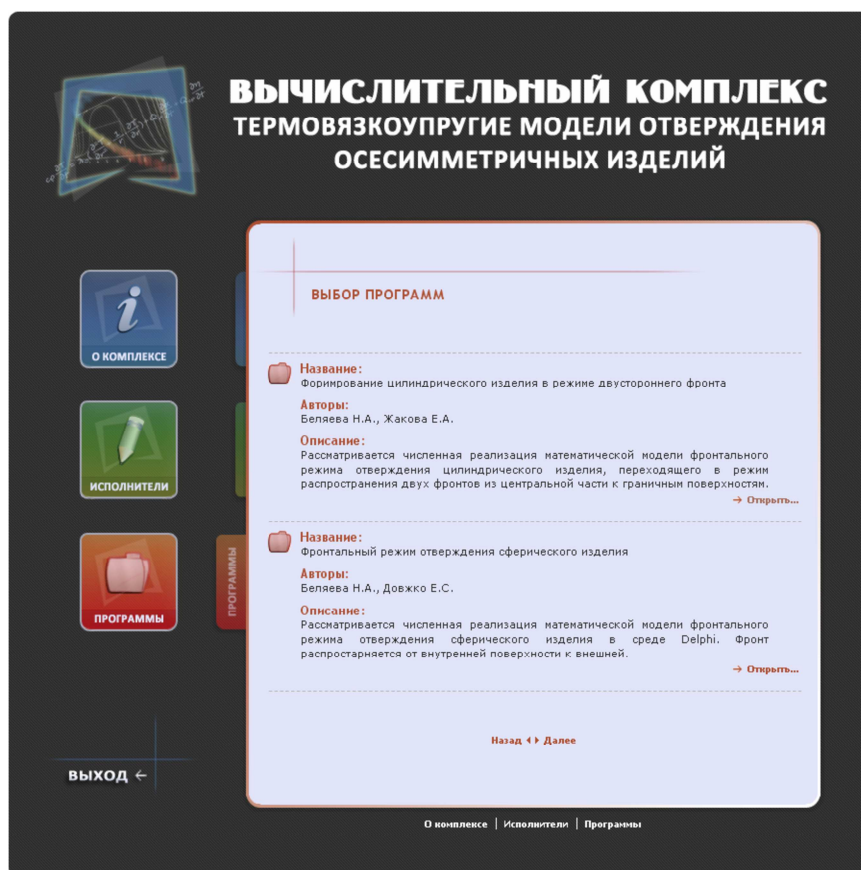


Рис.3 Окно выбора программ

Все представленные в вычислительном комплексе программы разработаны на кафедре математического моделирования и кибернетики Сыктывкарского государственного университета и основаны на новых математических моделях. Следует заметить, что данный комплекс допускает программное пополнение.

Работу каждой программы, включенной в вычислительный комплекс «Термовязкоупругие модели отверждения осесимметричных изделий», можно условно разделить на две части: *макрокинетическую* -

расчет температурных и конверсионных полей в ходе реакции и *механическую* - определение пространственно-временного распределения компонент тензора напряжений.

Расчет температурных $T = T(r, t)$ и конверсионных полей выполняется на основе [1,2] уравнения теплопроводности с нелинейным источником тепла и двух конверсионных уравнений (автокаталитические реакции первого порядка), относительно степени полимеризации $\alpha = \alpha(r, t)$ и степени кристаллизации $\eta = \eta(r, t)$.

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_0 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{n}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q_p \frac{\partial \alpha}{\partial t} + Q_k \frac{\partial \eta}{\partial t}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = k_{0_1} \exp \left(-\frac{U}{R_u T} \right) (1 - \alpha)(\varepsilon_1 + \alpha), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = k_{0_2} \exp \left(-\frac{E^a}{R_u T} - \frac{\psi T_f}{T(T_f - T)} \right) (\varepsilon_2 + \eta)(\alpha \eta_b - \eta). \quad (3)$$

где (1) – уравнение теплопроводности, n – коэффициент формы: $n = 1$ – цилиндр, $n = 2$ – сфера; (2) и (3) – кинетические уравнения процессов полимеризации и кристаллизации, соответственно. Неизвестные функции $T = T(r, t)$, $\alpha = \alpha(r, t)$, $\eta = \eta(r, t)$ – температура, глубина полимеризации и кристаллизации, соответственно, в точке r в момент времени t .

В уравнениях (1)-(3) используются следующие обозначения: c – удельная теплоемкость материала; ρ – плотность; λ_0 – коэффициент температуропроводности; Q_p – тепловой эффект полимеризации; Q_k – тепловой эффект кристаллизации; k_{0_1}, k_{0_2} – константы скоростей полимеризации и кристаллизации; U – энергия активации процесса полимеризации; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – критерии автокаталитичности процессов полимеризации и кристаллизации; E^a – энергия активации процесса кристаллизации; R_u – универсальная газовая постоянная; ψ – характерная температура полимера; T_f – равновесная температура плавления; η_b – равновесная степень кристалличности, которая вычисляется по формуле:

$$\eta_b = 0.52 \sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_f} \right)^4}.$$

Начальные и граничные условия ставятся в зависимости от реализуемого режима отверждения: объемного или фронтального. В случае объемного отверждения эти условия имеют вид:

$$t = 0 : \alpha = 0, \eta = 0, T|_{R_1 < r \leq R} = T_0; \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} - h_0 (T - T_0)|_{R_1} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} + h (T - T_0)|_R = 0, \quad (5)$$

где T_0 - начальная температура мономера и окружающей среды, h, h_0 - коэффициенты теплообмена с окружающей средой.

Фронтальный режим формирования изделий подразумевает следующие начальные и граничные условия:

$$t = 0 : \alpha = 0, \eta = 0, T|_{R_1 < r \leq R} = T_0; T|_{r=R_1} = T^*; \quad (6)$$

$$T|_{r=R_1} = T^*, 0 < t \leq t^*; \frac{\partial T}{\partial r} - h_0 (T - T_0)|_{R_1} = 0, t > t^*; \quad (7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} + h (T - T_0)|_R = 0, \quad (8)$$

где T^* — температура инициирования реакции.

Основной метод расчета макрокинетики отверждения во всех представленных программах – метод прогонки на пространственно-временной сетке. Обратный ход прогонки находит значения прогоночных коэффициентов во всех узлах рассматриваемой сетки, после чего выполняется прямой ход, вычисляющий температуру в узловых точках.

Пространственно-временное поведение отверждающегося материала полностью описывается системой определяющих соотношений, справедливых в общем случае для неупругой сплошной среды. Для цилиндрического изделия они имеют вид:

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} = \frac{\sigma_{\varphi\varphi} - \sigma_{rr}}{r}; \quad (9)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{\varphi\varphi}}{\partial r} = \frac{\varepsilon_{rr} - \varepsilon_{\varphi\varphi}}{r}, \quad (10)$$

где (9) — уравнение равновесия, (10) — уравнение совместности деформаций; $\sigma_{rr}, \sigma_{\varphi\varphi}$ — радиальная и окружная компоненты напряжений; $\varepsilon_{rr}, \varepsilon_{\varphi\varphi}$ — радиальная и окружная компоненты деформаций.

В случае сферы уравнения равновесия и совместности деформаций принимают вид:

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{2}{r} (\sigma_{rr} - \sigma_{tt}) = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{tt}}{\partial r} = \frac{\varepsilon_{rr} - \varepsilon_{tt}}{r}, \quad (12)$$

где σ_{rr}, σ_{tt} — радиальная и тангенциальная компоненты тензора напряжений; $\varepsilon_{rr}, \varepsilon_{tt}$ — соответствующие компоненты тензора деформаций.

Полные компоненты деформаций в (10),(12) являются суммой вязкоупругой ε^* , температурной ε^T и химической ε^{ch} составляющих:

$$\varepsilon = \varepsilon^* + \varepsilon^T + \varepsilon^{ch}. \quad (13)$$

Температурная усадка определяется следующим образом:

$$\varepsilon^T = \alpha_0 (T - T_0),$$

где α_0 — аналог коэффициента линейного температурного расширения материала (для простоты он считается постоянным во все время отверждения); $T = T(r, t)$ — текущая температура; T_0 — начальная температура отверждаемого материала.

Деформация химической усадки пропорциональна глубине реакции отверждения (совмещённый процесс полимеризации и кристаллизации):

$$\varepsilon^{ch} = \varepsilon_p + \varepsilon_{cr},$$

где ε_p — усадка материала вследствие реакции полимеризации; ε_{cr} — усадка материала вследствие реакции кристаллизации. Предполагается, что последние пропорциональны глубине полимеризации и кристаллизации, т.е.

$$\varepsilon_p = k_1 \alpha, \quad \varepsilon_{cr} = k_2 \eta, \quad \varepsilon^{ch} = k_1 \alpha + k_2 \eta,$$

где k_1, k_2 — константы.

Определение напряженного состояния формируемого изделия осуществляется в зависимости от его геометрии и реализуемого режима отверждения.

Результаты работы программ комплекса представлены как численно, так и графически, что позволяет более наглядно отразить рассматриваемые процессы, при этом графический результат расчетов можно сохранить в отдельном файле.

2.1 Объемный режим отверждения цилиндрического изделия при нулевой критической глубине конверсии

Данная программа реализует алгоритм численного анализа модели объемного режима формирования изделия в виде полого бесконечного цилиндра в ходе параллельного протекания реакций полимеризации и кристаллизации [1]- [3].

В начальный момент времени мономер имеет температуру окружающей среды T_0 . На внутренней и внешней границе образца происходит теплообмен с окружающей средой. В результате реакций полимеризации и кристаллизации, а также теплообмена в образце устанавливаются неоднородные температурное и конверсионное поля. Распределение температуры $T = T(r, t)$, глубина полимеризации $\alpha = \alpha(r, t)$ и кристаллизации $\eta = \eta(r, t)$ в образце определяется из совместного решения уравнения теплопроводности и двух кинетических уравнений с учетом начальных и граничных условий: (1)-(5).

Для определения компонент напряжения вводится в рассмотрение функция напряжений $\Phi = \Phi(r, t)$

$$\sigma_{rr}(r, t) = \frac{\Phi}{r}, \sigma_{\varphi\varphi}(r, t) = \frac{\partial\Phi}{\partial r}. \quad (14)$$

На основе определяющих соотношений (9), (10), выражения для полных компонент деформации (13), метода поиска вязкоупругой компоненты деформации, преобразования Лапласа и его обращения, начальных и граничных условий задачи (внутренняя поверхность свободна от напряжений) удастся получить в конечном виде выражение для функции $\Phi = \Phi(r, t)$:

$$\Phi(r, t) = J(r, t) - \int_0^t (\lambda - \mu) \exp[-\lambda(t - \tau)] J(r, \tau) d\tau. \quad (15)$$

Здесь функция $J(r, t)$ определяется на основе макрокинетической модели соотношением:

$$J(r, t) = -\frac{1}{r} \int_r^R F(r, t) r dr + \frac{1}{2r} F(R_1, t) (R^2 - r^2), \quad (16)$$

$$F(r, t) = -E \left(\theta_\varphi(r, t) + \int_{R_1}^r \frac{\theta_r(r, t) - \theta_\varphi(r, t)}{r} dr \right),$$

$$\theta(r, t) = \varepsilon_y^{ch} + \varepsilon_y^I. \quad (17)$$

Для стандартной модели вязкоупругого тела

$$\lambda = (E_1 + E_2)/\beta, \quad E_1 = E = const, \quad E_2 = 3 \cdot 10^{10}(T_f/T - 1);$$

$$\mu = E_2/\beta, \quad \beta = \beta_1 \eta / (\eta_b - \eta), \quad \beta_1 = A \exp(-E^v/R_u T + A_1 \alpha).$$

Тогда согласно формулам (14) получим выражения для компонент тензора напряжений:

$$\sigma_{rr}(r, t) = \frac{1}{r} \left[J(r, t) - \int_0^t (\lambda - \mu) \exp[-\lambda(t - \tau)] J(r, \tau) d\tau \right], \quad (18)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r, t) = \frac{\partial J(r, t)}{\partial r} - \int_0^t (\lambda - \mu) \exp[-\lambda(t - \tau)] \frac{\partial J(r, \tau)}{\partial r} d\tau. \quad (19)$$

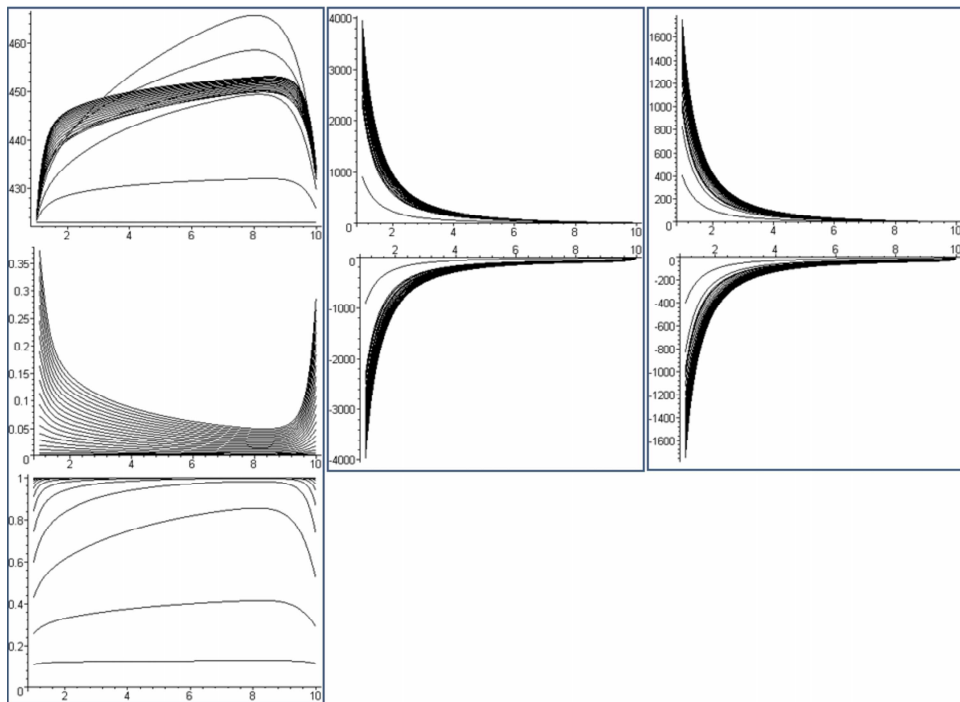


Рис.4 Результат работы программы «Объемный режим отверждения цилиндрического изделия при нулевой критической глубине конверсии»

Таким образом, в алгоритме и программе, включенной в рассматриваемый вычислительный комплекс, рассчитываются на основе макрокинетической модели в каждый фиксированный момент времени температура формируемого изделия, глубина отверждения (полимеризации), глубина кристаллизации в каждой точке построенного разбиения пространственной координаты. Основной метод расчета — метод прогонки. В этот же момент времени на основе формул (16)-(19) выполняется расчет радиальной и окружной компонент напряжения. Метод расчета интегралов в указанных формулах — метод трапеций.

Заметим, что в данной модели определение полей напряжений производится с самого начала процесса отверждения, т.е. критическая глубина конверсии предполагается равной нулю.

На рис.4 представлен результат работы программы: динамика температуры, глубины полимеризации и кристаллизации, радиальной и окружной компоненты напряжения формируемого изделия в процессе отверждения исходного мономера.

2.2 Фронтальный режим отверждения цилиндрического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии

В данной программе реализован алгоритм [1, 4] фронтального формирования изделия в виде полого бесконечного цилиндра в ходе отверждения при параллельном протекании реакций полимеризации и кристаллизации.

В начальный момент времени на внутренней границе образца задается температура инициирования T^* , более высокая, чем температура окружающей среды T_0 . Высокая температура поддерживается на внутренней поверхности в течение времени t^* — время инициирования реакции.

Распределение температуры $T = T(r, t)$, глубина полимеризации $\alpha = \alpha(r, t)$ и кристаллизации $\eta = \eta(r, t)$ определяются на основе макрокинетической модели (1)-(3), 6), (7).

Механическая часть математической модели фронтального формирования осесимметричного (в рассматриваемом случае цилиндрического) изделия [1] построена в рамках механики непрерывно нарастающего твердого тела. Краевая задача для непрерывно растущего тела при малых деформациях включает стандартные уравнения равновесия, определяющие соотношения (уравнение связи, уравнение совместности деформаций) и граничные условия на растущих и нерастущих поверхностях, причем на поверхности роста будем задавать полный тензор напряжений. Для учета динамического характера процесса основные

уравнения рассматриваются в продифференцированном по времени виде.

Если на растущей поверхности $r = r^*(t)$ задано внешнее давление $p(t)$:

$$\dot{\sigma}_{rr}(r^*(t)) = -\dot{p}(t),$$

а на внутренней нерастущей поверхности $r = R_1$ задано внутреннее давление $p_{in}(t)$:

$$\dot{\sigma}_{rr}(R_1) = -\dot{p}_{in}(t),$$

то радиальная и окружная компоненты напряжения определяются следующими формулами:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{rr}(r, t) = & -\dot{p}(t) \frac{r^{*2} (r^2 - R_1^2)}{r^2 (r^{*2} - R_1^2)} - \frac{R_1^2 (r^{*2} - r^2)}{r^2 (r^{*2} - R_1^2)} \cdot \\ & \cdot \left[\dot{p}_{in}(t) - \int_{R_1}^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right] - \\ & - \int_r^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{\varphi\varphi}(r, t) = & -\dot{p}(t) \frac{r^{*2} (r^2 + R_1^2)}{r^2 (r^{*2} - R_1^2)} + \frac{R_1^2 (r^{*2} + r^2)}{r^2 (r^{*2} - R_1^2)} \cdot \\ & \cdot \left[\dot{p}_{in}(t) - \int_{R_1}^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right] - \\ & - \int_r^{r^*} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr + \frac{1}{r^2} \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь функция $\chi(r, t)$ определяется интегральным уравнением с использованием решения макрокинетической модели по определению температуры, глубины полимеризации и кристаллизации

$$\begin{aligned} \dot{\chi}(r, t) + \tilde{f}_{rr}(0)\chi(r, t) + \int_{t^*}^t \dot{\tilde{f}}_{rr}(r, t - \tau)\chi(r, \tau)d\tau = \\ = -E \left(\frac{\partial \dot{\theta}_{\varphi}(r, t)}{\partial r} - \frac{\dot{\theta}_r(r, t) - \dot{\theta}_{\varphi}(r, t)}{r} \right), \end{aligned} \quad (22)$$

где $\tilde{f}_{rr} = f_{rr} \cdot E, t > t^*(r)$; $t^*(r)$ — момент присоединения точки r к твердой части формируемого изделия, функция $\theta = \theta(r, t)$ определяется соотношением (17). Функция $f_{rr} = f_{rr}(t)$ определяется на основе стандартной модели вязкоупругого тела:

$$f_{rr}(t) = \frac{\lambda - \mu}{E} e^{-\mu t}. \quad (23)$$

Таким образом, напряжение в точке r вычисляется лишь с момента присоединения этой точки к твердому слою. Граница твердого слоя изделия в каждый момент времени t определяется из условия: $\alpha(r, t) \geq \alpha^*$, α^* — критическая глубина конверсии. При выполнении численного анализа в рамках модели фронтального режима отверждения критическая глубина конверсии выбирается из условия: $\alpha^* \cong 0.6 \div 0.8$.

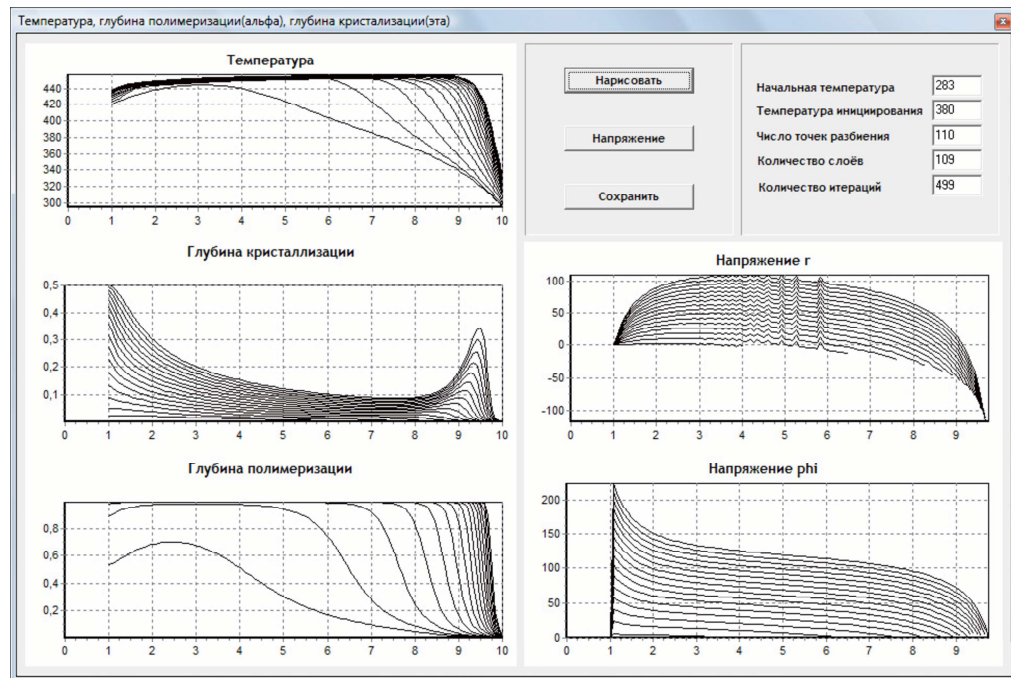


Рис.5 Результат работы программы «Фронтальный режим отверждения цилиндрического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии»

В формулах (20), (21) давление p на растущей поверхности — границе между твердым и жидким слоем формируемого изделия опреде-

ляется из условия несжимаемости материала в ходе отверждения:

$$\frac{(1 - 2\nu)\Delta p}{E} + [\varepsilon_y^{ch} + \varepsilon_y^T] = 0, \quad (24)$$

где Δp — приращение давления, $\varepsilon_y^T = \alpha_0 (T(r^*, t) - T_0)$, $\varepsilon_y^{ch} = k_1 \alpha(r^*, t) + k_2 \eta(r^*, t)$ — температурная и химическая усадки на границе фронта, определяемые на основе макрокинетической модели. Изменение давления Δp в точке $r^* = r^*(t)$ находится из уравнения (24), а давление в указанной точке определяется из рекуррентного соотношения

$$p(r^*(t)) = p(r^* - \Delta r) + \Delta p(r^*(t))$$

с начальным условием

$$t = 0 : p(r^*) = p_{in}.$$

Пример работы программы «Фронтальный режим отверждения цилиндрического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии» представлен на рис.5.

2.3 Формирование цилиндрического изделия в режиме распространения двустороннего фронта

При определенном выборе параметров задачи отверждения односторонний фронт реакции может трансформироваться в двусторонний фронт из центральной области изделия к граничным поверхностям. В этом случае модель формирования изделия изменяется. Рассматриваемая программа реализует алгоритм [1, 5] формирования изделия в виде бесконечного полого цилиндра в режиме двустороннего фронта, движущегося из центральной части к внутренней и внешней граничным поверхностям.

Напряженное состояние формируемого изделия определяется при следующих граничных условиях на границах фронтов $r = r_1^*(t)$ и $r = r_2^*(t)$:

$$\dot{\sigma}_{rr}(r_1^*(t)) = -\dot{p}_1(t) \quad (25)$$

$$\dot{\sigma}_{rr}(r_2^*(t)) = -\dot{p}_2(t) \quad (26)$$

Производные радиальной и окружной компонент тензора напряжения определяются с учетом (25), (26) соотношениями:

$$\dot{\sigma}_{rr}(r, t) = -\dot{p}_2(t) \frac{r_2^{*2} (r^2 - r_1^{*2})}{r^2 (r_2^{*2} - r_1^{*2})} + \frac{r_1^{*2} (r^2 - r_2^{*2})}{r^2 (r_2^{*2} - r_1^{*2})}.$$

$$\cdot \left[\dot{p}_1(t) - \int_{r^*_{1}}^{r^*_{2}} \left(\int_{r^*_{1}}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right] - \quad (27)$$

$$- \int_r^{r^*_{2}} \left(\int_{r^*_{1}}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr,$$

$$\dot{\sigma}_{\varphi\varphi} = -\dot{p}_2(t) \frac{r^*_{2}{}^2 (r^2 + r^*_{1})}{r^2 (r^*_{2}{}^2 - r^*_{1}{}^2)} + \frac{r^*_{1}{}^2 (r^*_{2}{}^2 + r^2)}{r^2 (r^*_{2}{}^2 - r^*_{1}{}^2)} \cdot$$

$$\cdot \left[\dot{p}_1(t) - \int_{r^*_{1}}^{r^*_{2}} \left(\int_{r^*_{1}}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr \right] - \quad (28)$$

$$- \int_r^{r^*_{2}} \left(\int_{r^*_{1}}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr \right) \frac{1}{r^3} dr + \frac{1}{r^2} \int_{r_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^2 dr.$$

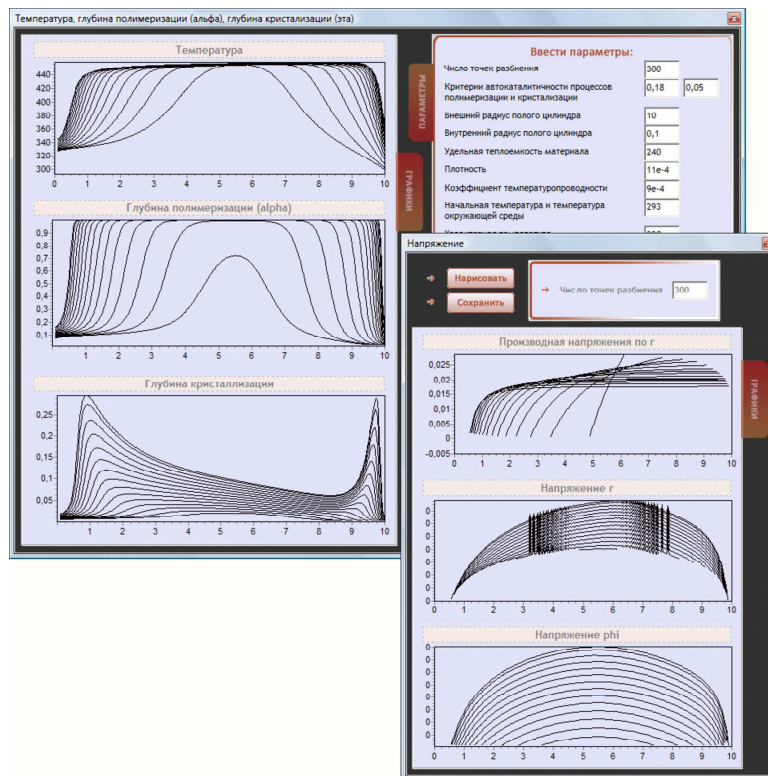


Рис.6 Результат работы программы «Формирование цилиндрического изделия в режиме распространения двустороннего фронта»

Давления $p_1(t), p_2(t)$ на границах фронтов $r = r_1^*(t), r = r_2^*(t)$ соответственно определяются рекуррентными соотношениями:

$$\begin{aligned} p_1(r_1^*(t)) &= p_1(r_1^* - \Delta r) + \Delta p_1(r_1^*(t)); \\ p_2(r_2^*(t)) &= p_2(r_2^* - \Delta r) + \Delta p_2(r_2^*(t)). \end{aligned}$$

На рис.6 показано окно результатов работы рассматриваемой программы.

2.4 Фронтальный режим отверждения сферического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии

В данной программе численно реализуется модель фронтального формирования изделия в виде полый сферы в ходе параллельного протекания реакций полимеризации и кристаллизации [1, 6].

В начальный момент времени мономер имеет температуру окружающей среды T_0 . На внутренней границе образца задается температура инициирования реакции T^* более высокая, чем температура окружающей среды T_0 . Указанная температура поддерживается в течение времени инициирования $t^* : (0 < t \leq t^*)$. При условии $t > t^*$ на внутренней границе образца происходит теплообмен с окружающей средой. На внешней границе теплообмен происходит в течение всего времени отверждения. В результате реакций полимеризации и кристаллизации, теплообмена с окружающей средой в образце устанавливаются неоднородные температурное и конверсионное поля. В силу заданных граничных условий фронт отверждения распространяется от внутренней границы изделия к внешней.

Распределение температуры, глубина полимеризации и кристаллизации определяются из совместного решения уравнения теплопроводности (1) и двух кинетических уравнений (2), (3) с учетом начальных и граничных условий (6)-(8).

Напряженное состояние фронтально формируемого сферического изделия определяется базовыми соотношениями (11), (12), (13). Вязкоупругая составляющая деформации ищется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr}^*(r, t) &= \frac{1}{E} (\sigma_{rr}(r, t) - 2\nu\sigma_{tt}(r, t)) + \\ &+ \int_{t^*(r)}^t f_{rr}(t - \tau) (\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)) d\tau, \quad (29) \\ \varepsilon_{tt}^*(r, t) &= \frac{1}{E} (-\nu\sigma_{rr}(r, t) + (1 - \nu)\sigma_{tt}(r, t)) - \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \int_{t^*(r)}^t f_{rr}(t-\tau) (\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)) d\tau, \quad (30)$$

где $t > t^*(r)$, $t^*(r)$ — момент присоединения рассматриваемой точки (r) к образованной (затвердевшей) области Ω , ν — коэффициент Пуассона, E — модуль упругости.

Для учета динамического характера процесса отверждения, соотношения (11), (12), (13), (29), (30) записываются в продифференцированном по времени виде. Преобразования последних при использовании модели стандартного вязкоупругого тела приводит к следующим выражениям производных компонент тензора напряжения:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{rr} = & -\dot{p}(t) \frac{r^{*3} (r^3 - R_1^3)}{r^3 (r^{*3} - R_1^3)} - \frac{R_1^3 (r^{*3} - r^3)}{r^3 (r^{*3} - R_1^3)} \cdot \\ & \cdot \left[\dot{p}_i(t) - 2 \int_{R_1}^{r^*(t)} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right] - \\ & - 2 \int_r^{r^*(t)} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4}, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{tt} = & -\dot{p}(t) \frac{r^{*3} (2r^3 + R_1^3)}{2r^3 (r^{*3} - R_1^3)} + \frac{R_1^3 (r^{*3} + 2r^3)}{2r^3 (r^{*3} - R_1^3)} \cdot \\ & \cdot \left[\dot{p}_i(t) - 2 \int_{R_1}^{r^*(t)} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right] - \\ & - 2 \int_r^{r^*(t)} \left(\int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} + \frac{1}{r^3} \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr. \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь функция $\chi(r, t)$ определяется решением интегрального уравнения:

$$\dot{\chi}(r, t) + \tilde{f}_{rr}(0) \cdot \chi(r, t) + \int_{t^*(r)}^t \tilde{f}_{rr}(t-\tau) \chi(r, t) d\tau = \dot{F}(r, t), \quad (33)$$

где

$$\tilde{f}_{rr} = \frac{E}{2(1-\nu)} f_{rr}, \quad F(r, t) = -\frac{E}{1-\nu} \frac{\partial \theta(r, t)}{\partial r}.$$

В формулах напряжений (31), (32) внешнее давление $p(t)$ — давление со стороны жидкого слоя на образовавшийся твердый слой — определяется численно по мере продвижения границы фронта. При этом граница твердого слоя определяется критической глубиной конверсии материала (аналогично п.2.3). Величина $p_i(t)$ — внутренне давление на нерастущей поверхности $r = R_1$, технологический параметр задачи.

На рис. 7 представлено окно с примером работы рассматриваемой программы.

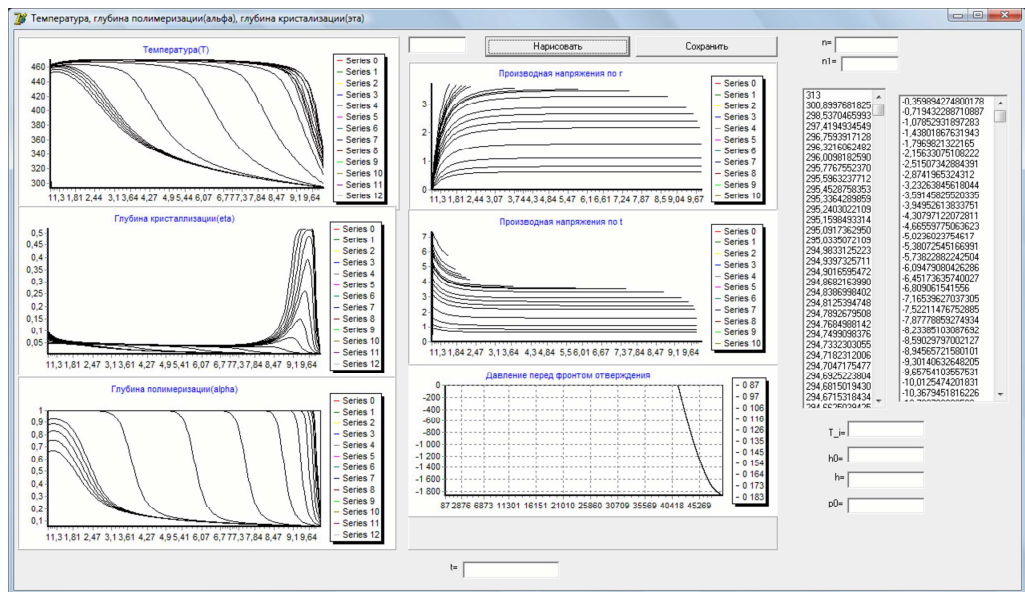


Рис.7 Результат работы программы «Фронтальный режим отверждения сферического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии»

2.5 Формирование сферического изделия в режиме распространения двустороннего фронта

Данная программа реализует алгоритм [1, 7] формирования изделия в виде полый сферы в режиме двустороннего фронта в ходе параллельного протекания реакций полимеризации и кристаллизации. Рассматриваемый режим отверждения реализуется при определенном выборе параметров фронтального или объемного режимов отверждения. В этом случае модель фронтального режима распространения реакции изменяется с учетом существования двух границ сосуществования твердой и жидкой фаз: $r = r_1^*(t)$ и $r = r_2^*(t)$. Напряженное состояние формируемого изделия определяется при следующих граничных условиях на

границах фронтов:

$$\dot{\sigma}_{rr}(r_1^*(t)) = -\dot{p}_1(t) \quad (34)$$

$$\dot{\sigma}_{rr}(r_2^*(t)) = -\dot{p}_2(t), \quad (35)$$

давления $p_1 = p_1(t)$ и $p_2 = p_2(t)$ со стороны жидких слоев на образовавшуюся твердую часть изделия определяются численно по мере продвижения фронтов, аналогично предыдущему пункту.

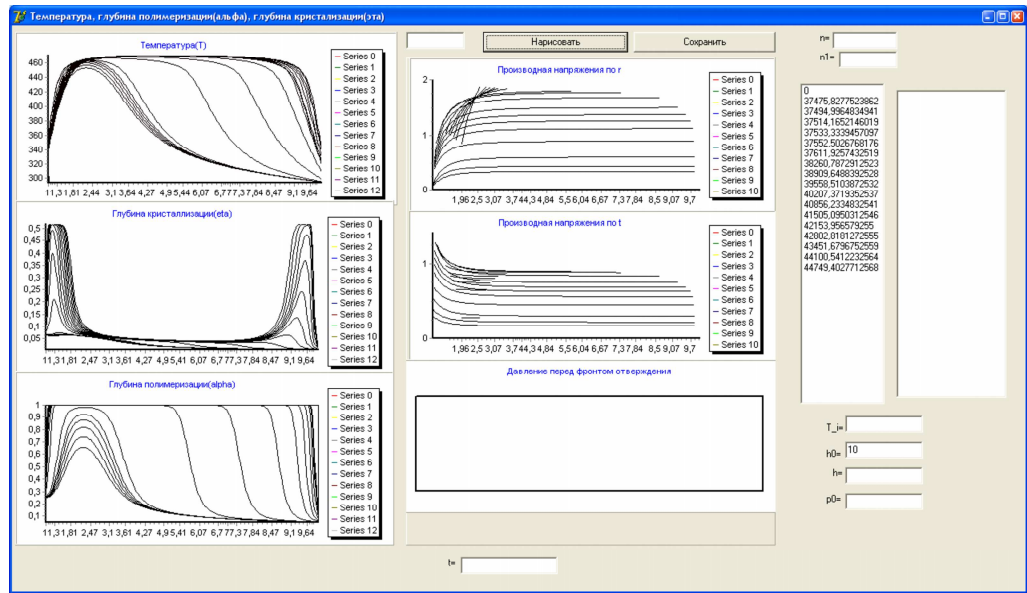


Рис.8 Результат работы программы «Формирование сферического изделия в режиме распространения двустороннего фронта»

Производные радиальной и тангенциальной компонент напряжения рассчитываются по формулам:

$$\dot{\sigma}_{rr} = -\dot{p}_2(t) \frac{r^*{}^2{}^3 (r^3 - r_1^*{}^3)}{r^3 (r_2^*{}^3 - R_1^*{}^3)} + \frac{r_1^*{}^3 (r^3 - r_2^*{}^3)}{r^3 (r_2^*{}^3 - r_1^*{}^3)} \cdot \left[\dot{p}_1(t) - 2 \int_{r_1^*}^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right] - 2 \int_r^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4}, \quad (36)$$

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma}_{tt} = & -\dot{p}_2(t) \frac{r_2^{*3} (r_1^* + 2r^3)}{2r^3 (r_2^{*3} - r_1^{*3})} + \frac{r_1^{*3} (r_2^{*3} + 2r^3)}{2r^3 (r_2^{*3} - r_1^{*3})} \cdot \\
 & \cdot \left[\dot{p}_1(t) - 2 \int_{r_1^*}^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right] - \\
 & - 2 \int_{r_1^*}^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} - 2 \int_r^{r_2^*} \left(\int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} + \\
 & + \frac{1}{r^3} \int_{r_1^*}^r \dot{\chi}(r, t) \cdot r^3 dr.
 \end{aligned} \tag{37}$$

Здесь функция $\chi = \chi(r, t)$ определяется интегральным уравнением (33).

3. Заключение

Таким образом, представлен вычислительный комплекс «Термовязкоупругие модели отверждения осесимметричных изделий» содержащий расчетные программы, являющиеся частью математических моделей объемного и фронтального режимов отверждения цилиндрического и сферического изделий в процессе фазового перехода жидкость-твердое тело при параллельном протекании реакций полимеризации и кристаллизации.

В настоящее время работа над комплексом продолжается. Она предполагает его постепенное усовершенствование, пополнение новыми программами, приведение всех программ к единому виду. В частности, для каждого программного модуля планируется организовать возможность единообразного ввода параметров по аналогии с тем, что уже реализовано в программе «Формирование цилиндрического изделия в режиме распространения двустороннего фронта» (рис.9).

Кроме того, предполагается размещение вычислительного комплекса на сайте университета в ознакомительных целях, активное внедрение в учебный процесс. На данный момент завершается работа над программой «Отверждение сферического изделия при нулевой критической глубине конверсии», которая будет также включена в комплекс.

Вычислительный комплекс может быть использован в рамках таких спецкурсов как «Математические модели термовязкоупругости», «Механика сплошной среды», на занятиях по информатике и веб-программированию для студентов старших курсов математических и

физических специальностей, при написании курсовых, выпускных квалификационных работ, магистерских и кандидатских диссертаций.

Ввести параметры:	
Число точек разбиения	100
Критерии автокаталитичности процессов полимеризации и кристаллизации	0,18 0,05
Внешний радиус полого цилиндра	10
Внутренний радиус полого цилиндра	1
Удельная теплоемкость материала	240
Плотность	11e-4
Коэффициент температуропроводности	9e-4
Начальная температура и температура окружающей среды	293
Характерная температура	330
Энергия активации процесса полимеризации	13000
Энергия активации кристаллизации	88e2
Характерная температура полимера	225
Температура плавления	493
Коэффициенты теплообмена с окружающей средой	5 0,5
Тепловой эффект полимеризации	18
Тепловой эффект кристаллизации	35
Константы скоростей полимеризации и кристаллизации	28e3 59e2
Давление на внутренней поверхности	1

Рис.9 Ввод параметров

Литература

1. **Беляева Н. А.** Деформирование вязкоупругих структурированных систем: монография. Lap Lambert Academic Publishing GmbH & Co. KG, Germany. 2011. 200 с.
2. **Беляева Н. А.** Деформирование вязкоупругих материалов с изменяющейся структурой // Вестник Сыктывкарского университета. Сер 1. Вып. 11. 2010. С. 52-75.
3. **Беляева Н. А., Осипова В. В.** Формирование цилиндрического изделия в ходе объемного отверждения // Федеральное агентство по образованию. ОФАП. Свид. об отрасл. регистрации разработки. №7944. 30.03. 2007.

4. **Беляев Д. Ю., Беляева Н. А.** Термовязкоупругое фронтальное отверждение цилиндрического изделия как непрерывно наращиваемого твердого тела с учетом давления перед фронтом отверждения. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам РФ, Реестр программ для ЭВМ. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2010615792, 7 сентября 2010 г.
5. **Жакова Е. А., Беляева Н. А.** Объемное отверждение цилиндрического изделия в условиях термовязкоупругости при ненулевой критической глубине конверсионного поля. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам РФ, Реестр программ для ЭВМ. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2010615790, 7 сентября 2010 г.
6. **Довжко Е. С., Беляева Н. А.** Термовязкоупругое фронтальное отверждение сферического изделия с точки зрения непрерывно наращиваемого твердого тела с учетом давления перед фронтом отверждения. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам РФ, Реестр программ для ЭВМ. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2010615793, 7 сентября 2010 г.
7. **Довжко Е. С., Беляева Н. А.** Формирование сферического изделия с учетом ненулевой критической глубины конверсии. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам РФ, Реестр программ для ЭВМ. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2011617495, 27 сентября 2011 г.

Summary

Belyaeva N. A., Khudoyeva E. E. Computing complex «Thermoviscoelastic models of the formation of axisymmetric products»

The computing complex integrates series of programs developed within the mathematical models of the formation of axisymmetric products (cylinder, sphere) in the process of their obtaining in the parallel reactions of polymerization and crystallization. The article gives a description and operating principles of the complex.

Keywords: computing complex, solidification, thermoviscoelasticity, volume

and frontal modes, bilateral front, reactions of polymerization and crystallization, pressure, continuous build-up, internal tensions, the sweep method.

Сыктывкарский государственный университет

Поступила 31.10.11