

УДК 539.3

**ОТВЕРЖДЕНИЕ  
СФЕРИЧЕСКОГО ИЗДЕЛИЯ С УЧЕТОМ ДАВЛЕНИЯ  
ПЕРЕД ФРОНТОМ <sup>1</sup>**

*Н.А. Беляева, Е.С. Довжко*

Напряженное состояние формируемого сферического изделия рассматривается с точки зрения непрерывно наращиваемого твердого тела. На поверхности роста задан полный тензор напряжений. Учитывается давление со стороны жидкого слоя на образовавшуюся твердую часть.

**1. Модель отверждения**

Рассмотрим задачу о фронтальном формировании (отверждении) изделия в виде полый сферы ( $R_1 \leq r \leq R$ ) в ходе параллельного протекания реакций полимеризации и кристаллизации.

В начальный момент времени на внутренней границе образца задана температура зажигания  $T^*$  (поддерживаемая в течение времени  $t^*$ ), более высокая, чем температура окружающей среды  $T_0$ . На внутренней и внешней границе образца происходит теплообмен с окружающей средой. В результате реакций полимеризации и кристаллизации, теплообмена с окружающей средой в образце устанавливаются неоднородное температурное и конверсионное поля.

Распределение температуры  $T = T(r, t)$  и изменение концентрации заполимеризованного мономера  $\alpha = \alpha(r, t)$  и кристаллизованного полимера  $\eta = \eta(r, t)$  в образце в ходе реакций определяется из совместного решения уравнения теплопроводности с нелинейным источником тепла и соответствующих кинетических уравнений [1, 2]:

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы, ГК № 02.740.11.0618

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_0 \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q_p \frac{\partial \alpha}{\partial t} + Q_k \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = k_{0_1} \exp \left( -\frac{U}{R_u T} \right) (1 - \alpha)(\epsilon_1 + \alpha), \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = k_{0_2} \exp \left( -\frac{E^a}{R_u T} - \frac{\psi T_f}{T(T_f - T)} \right) (\epsilon_2 + \eta)(\alpha \eta_b - \eta), \quad (1.3)$$

где (1.1)— уравнение теплопроводности; (1.2) и (1.3) — кинетические уравнения процесса полимеризации и кристаллизации. 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 (1.1)-(1.3) использованы следующие обозначения:  $c$  — удельная теплоемкость материала;  $\rho$  — плотность;  $\lambda_0$  — 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;  $\epsilon_1, \epsilon_2$  — критерии автокаталитичности процессов полимеризации и кристаллизации;  $E^a$  — энергия активации процесса кристаллизации;  $R_u$  — универсальная газовая постоянная;  $\psi$  — характерная температура полимера;  $T_f$  — равновесная температура плавления;  $\eta_b$  — равновесная степень кристалличности, вычисляемая по формуле:

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

Начальными и граничными для рассматриваемого процесса являются следующие условия:

$$t = 0: \quad \alpha = 0; \quad \eta = 0; \quad T \Big|_{R_1 < r \leq R} = T_0; \quad T \Big|_{r=R_1} = T^*; \quad (1.4)$$

$$T \Big|_{r=R_1} = T^*, \quad 0 < t \leq t^*; \quad \frac{\partial T}{\partial r} - h_0 (T - T_0) \Big|_{R_1} = 0, \quad t > t^*; \quad (1.5)$$

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

где  $T_0$  — начальная температура мономера и окружающей среды;  $T^*$  — температура зажигания, или температура инициирования реакции;  $h_0, h$  — коэффициенты теплообмена с окружающей средой.

Краевая задача для непрерывно растущего тела при малых деформациях включает стандартные уравнения равновесия, определяющие соотношения (уравнение связи, уравнение совместности деформаций) и граничные условия на нерастущих поверхностях, причем на поверхности роста будем задавать полный тензор напряжений.

Отличие от постановки задачи для фиксированного тела вытекает из того факта, что элемент растущего тела в окрестности какой-либо точки  $(r)$  деформируется совместно с другими элементами лишь начиная с момента его отверждения  $t^*(r)$ , совпадающего с моментом присоединения этого элемента к образованной (затвердевшей) области  $\Omega(t > t^*(r))$ . Таким образом, нас не будет интересовать предыстория движения частицы  $(r)$  до момента присоединения (отверждения) этой частицы к области  $\Omega$ . Напряженное состояние затвердевшей части  $\Omega$  при условии  $t > t^*(r)$  можно рассматривать независимо от состояния неотвердевшей части [1,2].

Пространственно-временное поведение отверждающегося материала можно полностью описать следующей системой определяющих соотношений, справедливых в общем случае для неупругой сплошной среды:

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{2}{r}(\sigma_{rr} - \sigma_{tt}) = 0, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{tt}}{\partial r} = \frac{\varepsilon_{rr} - \varepsilon_{tt}}{r}, \quad (1.7)$$

(1.6) — уравнение равновесия, (1.7) — условие совместности деформаций;  $\sigma_{rr}, \sigma_{tt}$  — радиальная и тангенциальная компоненты тензора напряжения;  $\varepsilon_{rr}, \varepsilon_{tt}$  — соответствующие компоненты тензора деформации. Полные компоненты деформации в (1.7) являются суммой вязкоупругой  $\varepsilon^*$ , температурной  $\varepsilon^T = \alpha_0(T - T_0)$  и химической  $\varepsilon^{ch} = \varepsilon_p + \varepsilon_{cr}$ ;  $\varepsilon_p = k_1\alpha$ ,  $\varepsilon_{cr} = k_2\eta$  составляющих:

$$\varepsilon = \varepsilon^* + \varepsilon^T + \varepsilon^{ch}.$$

Здесь  $\alpha_0$  — аналог коэффициента линейного температурного расширения материала, для простоты будем считать его постоянным;  $\varepsilon_p, \varepsilon_{cr}$  — усадки вследствие полимеризации и кристаллизации, соответственно,  $k_1, k_2$  — константы.

В случае объемного отверждения сферического изделия вязкоупругая компонента деформации  $\varepsilon^*$  находится в тензорном виде:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon_{rr}^*(r, t) \\ \varepsilon_{tt}^*(r, t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1/E & -2\nu/E \\ -\nu/E & 1 - \nu/E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{rr}(r, t) \\ \sigma_{tt}(r, t) \end{pmatrix} + \\ &+ \int_0^t \begin{pmatrix} f_{rr}(t - \tau) & f_{rt}(t - \tau) \\ f_{tr}(t - \tau) & f_{tt}(t - \tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{rr}(r, \tau) \\ \sigma_{tt}(r, \tau) \end{pmatrix} d\tau, \end{aligned} \quad (1.8)$$

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $E$  — модуль упругости. Для стандартной модели [1, 3] вязкоупругого тела  $f_{rt} = -f_{rr}$ ,  $f_{tr} = -f_{rr}/2$ ,  $f_{tt} = f_{rr}/2$ ,

$$f_{rr}(t) = \frac{\lambda - \mu}{E} e^{-\mu t}. \quad (1.9)$$

При проведении реакции во фронтальном режиме соотношения (1.8) следует рассматривать с момента времени  $t^*(r)$  — момента присоединения рассматриваемой точки ( $r$ ) к образованной (затвердевшей) области  $\Omega$ . Соответствующие зависимости в развернутом виде запишутся:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr}^*(r, t) &= \frac{1}{E} (\sigma_{rr}(r, t) - 2\nu\sigma_{tt}(r, t)) + \\ &+ \int_{t^*(r)}^t f_{rr}(t - \tau) (\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)) d\tau, \\ \varepsilon_{tt}^*(r, t) &= \frac{1}{E} (-\nu\sigma_{rr}(r, t) + (1 - \nu)\sigma_{tt}(r, t)) - \\ &- \frac{1}{2} \int_{t^*(r)}^t f_{rr}(t - \tau) (\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)) d\tau, \end{aligned} \quad (1.10)$$

где  $t > t^*(r)$ .

Чтобы соблюсти корректность постановки рассматриваемой задачи и учесть динамический характер протекающего процесса отверждения (непрерывного наращивания), основные уравнения (1.6), (1.7), (1.10) и граничные условия необходимо записать в продифференцированном по времени виде:

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{rr}}{\partial r} + \frac{2}{r} (\dot{\sigma}_{rr} - \dot{\sigma}_{tt}) = 0, \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{tt}}{\partial r} = \frac{\dot{\varepsilon}_{rr} - \dot{\varepsilon}_{tt}}{r}, \quad (1.12)$$

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{rr}^* = & \frac{1}{E} (\dot{\sigma}_{rr}(r, t) - 2\nu\dot{\sigma}_{tt}(r, t)) + f_{rr}(0) (\sigma_{rr}(r, t) - \sigma_{tt}(r, t)) + \\ & + \int_{\tau^*(r)}^t \dot{f}_{rr}(t - \tau) (\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)) d\tau, \end{aligned} \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{tt}^* = & \frac{1}{E} (-\nu\dot{\sigma}_{rr}(r, t) + (1 - \nu)\dot{\sigma}_{tt}(r, t)) - \frac{1}{2} f_{rr}(0) (\sigma_{rr}(r, t) - \\ & - \sigma_{tt}(r, t)) - \frac{1}{2} \int_{\tau^*(r)}^t \dot{f}_{rr}(t - \tau) (\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)) d\tau. \end{aligned}$$

Подставив в условие совместности деформаций (1.12) производные полных компонент деформации в виде:

$$\dot{\varepsilon}_{rr} = \dot{\varepsilon}_{rr}^* + \dot{\Theta}, \quad \dot{\varepsilon}_{tt} = \dot{\varepsilon}_{tt}^* + \dot{\Theta},$$

$$\Theta(r, t) = \Theta_r(r, t) = \Theta_t(r, t) = \varepsilon^T + \varepsilon^{ch},$$

получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial r} \left( -\nu\dot{\sigma}_{rr}(r, t) + (1 - \nu)\dot{\sigma}_{tt}(r, t) - \frac{E}{2} f_{rr}(0) [\sigma_{rr}(r, t) - \sigma_{tt}(r, t)] - \right. \\ & \quad \left. - \frac{E}{2} \int_{\tau^*(r)}^t \dot{f}_{rr}(t - \tau) [\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)] d\tau + E\Theta_t \right) = \\ & = \frac{1}{r} \left( (1 + \nu)(\dot{\sigma}_{rr}(r, t) - \dot{\sigma}_{tt}(r, t)) + \frac{3E}{2} f_{rr}(0) [\sigma_{rr}(r, t) - \sigma_{tt}(r, t)] + \right. \\ & \quad \left. + \frac{3E}{2} \int_{\tau^*(r)}^t \dot{f}_{rr}(t - \tau) [\sigma_{rr}(r, \tau) - \sigma_{tt}(r, \tau)] d\tau + E(\dot{\Theta}_r - \dot{\Theta}_t) \right). \end{aligned}$$

Преобразование последнего выражения с учетом уравнения равновесия (1.6) и введение функции

$$\chi(r, t) = \frac{\partial \sigma_{tt}}{\partial r} - \frac{1}{r} (\sigma_{rr} - \sigma_{tt}) \quad (1.14)$$

приводит к интегро-дифференциальному уравнению

$$\dot{\chi}(r, t) + \tilde{f}_{rr}(0)\chi(r, t) + \int_{\tau^*(r)}^t \tilde{f}_{rr}(t - \tau)\chi(r, t)d\tau = \dot{F}(r, t), \quad (1.15)$$

в котором

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

Дифференцируя (1.14) по времени с учетом (1.6), получим дифференциальное уравнение второго порядка относительно производной радиального напряжения:

$$\frac{\partial^2 \dot{\sigma}_{rr}}{\partial r^2} + \frac{4}{r} \frac{\partial \dot{\sigma}_{rr}}{\partial r} - \frac{2}{r} \dot{\chi}(r, t) = 0,$$

понижив порядок которого, получим

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{rr}}{\partial r} = \frac{1}{r^4} \left[ 2 \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t)r^3 dr + c(t)R_1^4 \right], \quad (1.16)$$

откуда

$$\dot{\sigma}_{rr} = \int_{r^*(t)}^r \left[ 2 \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t)r^3 dr + c(t)R_1^4 \right] \frac{dr}{r^4} + \psi(t), \quad (1.17)$$

где  $c(t)$ ,  $\psi(t)$  — функции, зависящие от времени и подлежащие определению из граничных условий.

Предположим, что на растущей поверхности задано внешнее давление  $p(t)$  :

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

тогда из (1.17) имеем:

$$\psi(t) = -\dot{p}(t). \quad (1.18)$$

Если на нерастущей поверхности  $r = R_1$  задано внутреннее давление  $p_i(t)$ , т.е.

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

то с учетом (1.17), (1.18) получим

$$-\dot{p}_i(t) = - \int_{R_1}^{r^*(t)} \left[ 2 \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr \right] \frac{dr}{r^4} - c(t) R_1^4 \int_{R_1}^{r^*(t)} \frac{dr}{r^4} - \dot{p}(t),$$

откуда следует, что

$$c(t) = \frac{3r^{*3}}{R_1(r^{*3} - R_1^3)} \left[ \dot{p}_i(t) - \dot{p}(t) - 2 \int_{R_1}^{r^*(t)} \left( 2 \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right]. \quad (1.19)$$

Используя (1.18), (1.19), получаем окончательное выражение для производной радиального напряжения:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{rr}(r, t) = & -\dot{p}(t) \frac{r^{*3}(r^3 - R_1^3)}{r^3(r^{*3} - R_1^3)} - \frac{R_1^3(r^{*3} - r^3)}{r^3(r^{*3} - R_1^3)} \left[ \dot{p}_i(t) - \right. \\ & \left. - 2 \int_{R_1}^{r^*(t)} \left( \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right] - 2 \int_r^{r^*(t)} \left( \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Для нахождения производной тангенциального напряжения воспользуемся уравнением равновесия, из которого следует, что

$$\dot{\sigma}_{tt} = \dot{\sigma}_{rr} + \frac{r}{2} \frac{\partial \dot{\sigma}_{rr}}{\partial r},$$

следовательно, учитывая (1.20),

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{tt}(r, t) = & -\dot{p}(t) \frac{r^{*3}(2r^3 + R_1^3)}{2r^3(r^{*3} - R_1^3)} + \\ & + \frac{R_1^3(r^{*3} + 2r^3)}{2r^3(r^{*3} - R_1^3)} \left[ \dot{p}_i(t) - 2 \int_{R_1}^{r^*(t)} \left( \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} \right] - \\ & - 2 \int_r^{r^*(t)} \left( \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr \right) \frac{dr}{r^4} + \frac{1}{r^3} \int_{R_1}^r \dot{\chi}(r, t) r^3 dr. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Выражения (1.20), (1.21) являются дифференциальными соотношениями для определения производных радиальной и тангенциальной компонент напряжений. При этом необходимо использовать макрокинетическую модель совмещенного процесса для определения температуры, глубины полимеризации и кристаллизации в ходе процесса отверждения.

Для определения давления на подвижной границе фронта воспользуемся условием несжимаемости массы в ходе отверждения [4], которое при продвижении фронта отверждения от  $r^* - \Delta r$  до  $r^*$  запишется следующим образом:

$$(1 - 2\nu) \Delta p/E + [\varepsilon_y^{ch} + \varepsilon_y^T] = 0, \quad (1.22)$$

где  $\Delta p$  — 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. Из уравнения определяем изменение давления  $\Delta p$  в точке  $r^* = r^*(t)$  — границе твердого слоя в момент времени  $t$ . При этом давление в указанной точке определяется из рекуррентного соотношения

$$p(r^*(t)) = p(r^* - \Delta r) + \Delta p(r^*(t)) \quad (1.23)$$

при выполнении начального условия

$$t = 0 : p(r^*) = p_i. \quad (1.24)$$

Таким образом, в формулах (20) и (22) производная давления  $\dot{p}(t)$  определяется численно по мере продвижения фронта реакции, а давление  $p_i(t)$  — технологический параметр заданной задачи.

## 2. Некоторые результаты численного эксперимента

В данной работе представлены некоторые результаты численного анализа описанной выше модели определения напряженно-деформированного состояния формируемого сферического изделия в режиме распространения фронта реакции с учетом давления между сосуществующими твердой и жидкой фазами на подвижной границе формируемого изделия. Для проведения численного эксперимента составлен [5, 6] алгоритм и программа в среде программирования Delphi-7.

На рис. 1 представлена динамика температурного поля  $T = T(r, t)$ , демонстрирующая распространение реакции во фронтальном режиме (фронт изнутри). Рост температуры происходит вследствие интенсивного протекания полимеризации. Понижение температуры к внешней границе сферы вызвано теплообменом с окружающей средой.



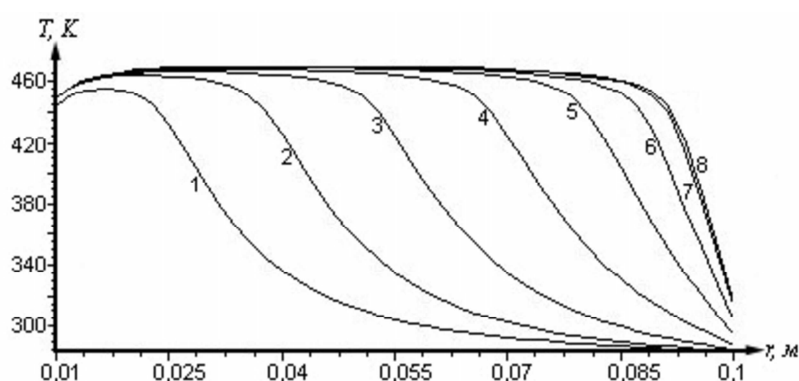


Рис. 1. Пространственно-временное распределение температуры  $T = T(r, t)$ ,  $t(c)$  : 1(42267), 2(43130), 3(43992), 4(44855), 5(45717), 6(46580), 7(47443), 8(47634)

На рис. 2–3 изображено пространственно-временное поведение степеней полимеризации и кристаллизации во фронтальном режиме. Видно,

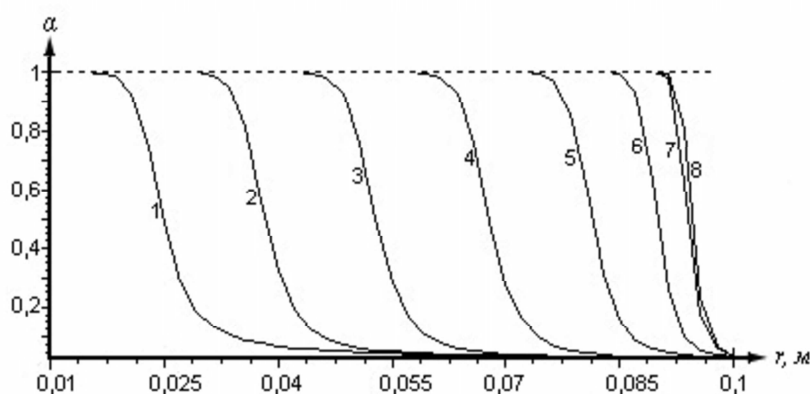


Рис. 2. Пространственно-временное распределение глубины полимеризации  $\alpha = \alpha(r, t)$ ; условия на рис. 1

что интенсивное протекание полимеризации идет с выделением большого количества тепла, которое, в свою очередь, тормозит кристаллизацию. Понижение температуры к внешней границе, вследствие теплообмена, способствует повышению кристаллизации (рис. 3).

На рис. 4–5 представлены пространственно-временные изменения производной радиальной и тангенциальной компонент напряжения

$\dot{\sigma}_{rr} = \dot{\sigma}_{rr}(r, t)$ ;  $\dot{\sigma}_{tt} = \dot{\sigma}_{tt}(r, t)$ , демонстрирующие возрастающий в каждой точке образца характер самих напряжений, их возрастание от внутренней поверхности к внешней.

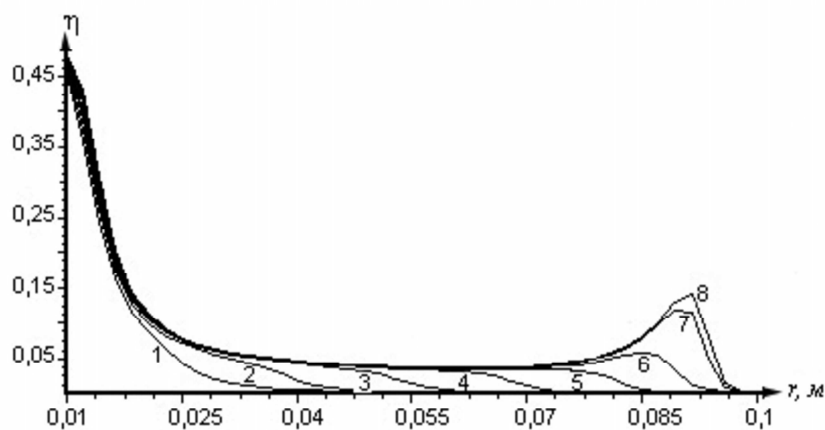


Рис. 3. Пространственно-временное распределение глубины кристаллизации  $\eta = \eta(r, t)$ ; условия на рис. 1

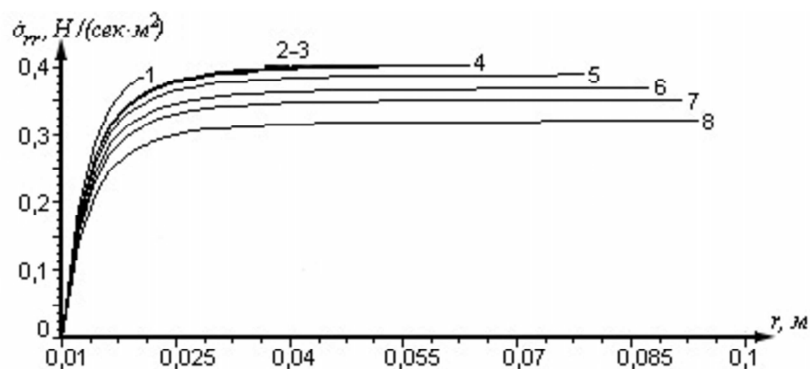


Рис. 4. Пространственно-временное распределение производной радиальной компоненты напряжения  $\dot{\sigma}_{rr} = \dot{\sigma}_{rr}(r, t)$ ; условия на рис. 1

Таким образом, при рассмотрении процессов формирования изделий в условиях, подобных моделируемым в рассмотренной выше работе,

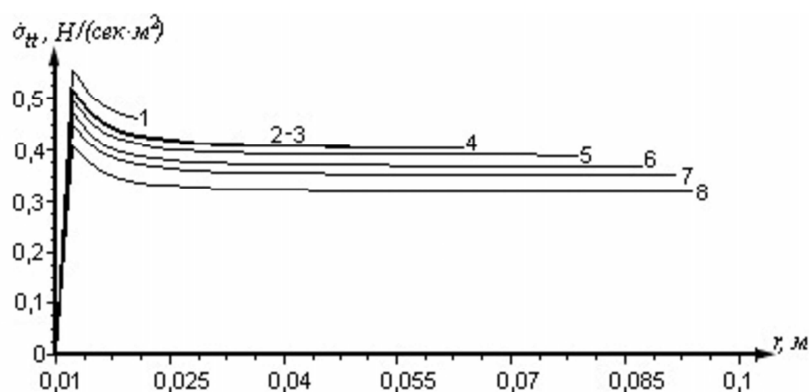


Рис. 5. Пространственно-временное распределение производной тангенциальной компоненты напряжения  $\dot{\sigma}_{tt} = \dot{\sigma}_{tt}(r, t)$ ; условия на рис. 1

следует принимать к сведению предложенный метод определения внутренних напряжений, учитывающий режим проведения реакции отверждения, термовязкоупругие свойства материала.

## Литература

1. **Беляева Н. А.** Математические модели деформируемых структурированных материалов. Монография. Сыктывкар: Изд-во СыктГУ, 2008. 116 с.
2. **Беляева Н. А.** Математическое моделирование деформирования вязкоупругих структурированных полимерных (композитных) систем. Автореферат дисс. на соискание ученой степени д.ф.-м.н. Черноголовка, ИПО СыктГУ. 2008. 32 с.
3. **Беляева Н.А., Паршукова Н.Н.** Термовязкоупругая модель отверждения сферического изделия // *Вестник Сыктывкарского университета. Сер.1. Вып.4. 2001. С. 115–124.*
4. **Беляева Н. А.** Деформирование вязкоупругих материалов с изменяющейся структурой // *Вестник Сыктывкарского университета. Сер 1. Вып. 11. 2010. С. 52–75.*
5. **Самарский А. А.** Теория разностных схем. — М: Наука, 1983. — 616 с.

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.

### **Summary**

**Belyaeva N.A., Dovzhko E.S.** Spherical product hardening with pressure in front of

The stress state of a formed spherical product is considered from the view of the body continuously increases. The full stress tensor is given on the growing surface. The pressure from the liquid layer on the formed solid part is taken into account.

*Сыктывкарский госуниверситет*

*Поступила 25.10.2010*