

## NUMERICAL IMPLEMENTATION OF THE LEONOV MODEL

R. Valenta\*

**Summary:** *The Leonov model, where the Eyring flow model is used to represent the plastic shear rate of the deformation of a material, appears to be a proper choice for the description of non-linear viscoelastic behavior of polymers. This paper outlines formulations of the generalized Leonov model and presents possible approaches to numerical implementation of this constitutive law. A fully explicit method based on forward Euler integration is known to suffer from numerical instabilities, which can only be prevented by taking very short time steps. To eliminate this restriction, a fully implicit method (backward Euler integration), where the solution was established employing the Newton-Raphson iteration method, was developed. Both methods are compared and verified by simulation of a uni-axial test of the PR100/2+EM100E epoxy resin.*

### 1. Úvod

Díky snadnému zpracování a vhodným mechanickým vlastnostem mají polymery stále širší využití. V poslední době se rozšířilo zejména jejich použití jako matrice v kompozitních materiálech, které se využívají např. k rehabilitaci porušených betonových sloupů, jako stožáry, vrtule, speciální nosné konstrukce, části strojních zařízení, atd. Kompozity jsou materiály unikátních vlastností. Dobře vytvrzený kompozitní profil je lehký, pevný, houževnatý, odolný proti šíření trhlin, rázu, delaminaci, UV záření apod. Z kompozitů lze vyrobit poměrně složité tvary a jejich vlastnosti je možno řídit přidáním různých aditiv. Schopnost spolehlivě předpovědět výslednou odezvu kompozitu na základě vlastností jeho složek je tedy základní podmínkou pro jejich zdárné rozšíření. Zatímco vlákna v kompozitních materiálech vykazují většinou elastické chování, matrice (polymer) je nelineárně vazkopružný materiál. A právě numerické modelování odezvy takového materiálu je těžištěm tohoto příspěvku.

Je experimentálně dokázáno, že polymery obecně vykazují zanedbatelnou objemovou deformaci během plastického tečení. To je jeden z důvodů, proč je Leonovův model [Le76] využívající Eyringovu rovnici plastického tečení [Te96] velmi vhodný pro popis mechanického chování polymerů. Tento model byl též zvolen pro popis nelineární vazkopružné odezvy epoxidové pryskyřice PR100/2+EM100E, která se používá jako matrice v kompozitních materiálech.

Vlastní formulace Leonovova modelu je přiblížena v kapitole 2, přičemž možné přístupy k jeho numerické implementaci jsou objasněny v kapitole 3. V kapitole 4 se především věnujeme ověření vhodnosti aplikace Leonovova modelu pro popis mechanických vlastností epoxidové pryskyřice PR100/2+EM100E a porovnáním jednotlivých přístupů k numerické implementaci Leonovova modelu. Je zde také nastíněn možný způsob získání parametrů tohoto modelu a také jsou zde hodnoty těchto parametrů pro epoxidovou pryskyřici uvedeny. V závěrečné páté kapitole je provedeno krátké zhodnocení této práce.

\* Ing. R. Valenta; Fakulta stavební, ČVUT v Praze; Thákurova 7, 166 29 Praha 6;  
tel.:+420 224 354 472; e-mail: richard.valenta@fsv.cvut.cz

## 2. Konstitutivní vztahy Leonovova modelu

O polymerech je známo, že rychlost plastické smykové deformace je velmi dobře popsána Eyringovou rovnicí [TE96]

$$\dot{\gamma}_p = \frac{I}{A} \sinh \frac{\tau}{\tau_0}, \quad (1)$$

kde  $\tau$  je smykové napětí a  $\dot{\gamma}_p$  je rychlost plastické smykové deformace. Materiálová konstanta  $A$  (za konstantní teploty) je vztažena k aktivační energii  $\Delta H$  a aktivačnímu objemu  $V^*$ , jak je ukázáno v [TE96].

Inverzí rovnice (1) dostaneme

$$\dot{\gamma}_p = \frac{\tau}{\eta(\dot{\gamma}_p)}, \quad (2)$$

s vyjádřením viskozity

$$\eta(\dot{\gamma}_p) = \frac{\tau_0 \operatorname{arcsinh}(A \dot{\gamma}_p)}{\dot{\gamma}_p}. \quad (3)$$

Eyringova rovnice tečení je zjednodušením obecného trojrozměrného vztahu zapsaného ve tvaru

$$\dot{e}_{ij}^p = \frac{\frac{1}{2} s_{ij}}{\tau_0 \operatorname{arcsinh}(A \dot{\gamma}_{eq}) / \dot{\gamma}_{eq}} = \frac{\frac{1}{2} s_{ij}}{\eta(\dot{\gamma}_{eq})}, \quad (4)$$

kde  $e_{ij}$  a  $s_{ij}$  reprezentují deviatorické části tenzoru deformace a tenzoru napětí,  $\dot{\gamma}_{eq}$  je ekvivalentní rychlost deformace a  $\tau_{eq}$  je ekvivalentní napětí. Platí

$$\dot{\gamma}_{eq} = \frac{I}{A} \sinh \frac{\tau_{eq}}{\tau_0}, \quad \tau_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2} s_{ij} s_{ij}}. \quad (5)$$

Substitucí rovnic (5) do rovnice (4) obdržíme vztah pro viskozitu ve tvaru

$$\eta(\tau_{eq}) = A \tau_0 \frac{\frac{\tau_{eq}}{\tau_0}}{\sinh\left(\frac{\tau_{eq}}{\tau_0}\right)} = \eta_0 a_\sigma(\tau_{eq}), \quad (6)$$

kde  $a_\sigma(\tau_{eq})$  je faktor posunutí a  $\eta_0$  je viskozita materiálu v lineární viskoelastické oblasti při ekvivalentním napětí nižším než  $\tau_0$ . Eyringův model tedy vede k funkční závislosti Eyringovy viskozity na ekvivalentním napětí.

Za předpokladu isotropního materiálu a platnosti teorie malých deformací můžeme vyjádřit konstitutivní rovnice popisující zobecněný Leonovovův model ve tvaru

$$\sigma_{ij} = \sigma_m \delta_{ij} + s_{ij}, \quad (7)$$

$$\sigma_m = K \varepsilon_v, \quad (8)$$

$$\dot{s}_{ij} = 2G \left( \dot{\varepsilon}_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij}^p \right), \quad (9)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \frac{\frac{1}{2} s_{ij}}{\eta(\tau_{eq})}, \quad (10)$$

kde  $\sigma_m$  je střední napětí,  $\varepsilon_v$  je objemová deformace,  $K$  je objemový modul pružnosti a  $G$  vyjadřuje modul pružnosti ve smyku.

Jednoduchým módem, reprezentovaným jedním článkem Maxwellova řetězce s viskozitou závislou na napětí, nelze realisticky popsat chování epoxidové pryskyřice, neboť model vykazuje náhlý přechod od elastického chování k tekutému [TE96]. Proto je nutné využít k popisu chování polymeru spektrum relaxačních časů  $\theta_\mu = \eta_{0\mu} / G_\mu$ , kde  $\theta_\mu$  je zvolený relaxační čas,  $\eta_{0\mu}$  a  $G_\mu$  je počáteční smyková viskozita a modul smyku  $\mu$ -tého článku. Pro úplnost zde uvádíme rozšířené vztahy (9) a (10) Leonovova modelu pro jednotlivé články modifikovaného Maxwellova řetězce (viz obr. 1) ve tvaru

$$\dot{s}_{ij,\mu} = 2G_\mu \left( \dot{\varepsilon}_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij,\mu}^p \right), \quad (11)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij,\mu}^p = \frac{\frac{1}{2} s_{ij,\mu}}{\eta_\mu(\tau_{eq})} = \frac{\frac{1}{2} s_{ij,\mu}}{\eta_{0,\mu} a_\sigma(\tau_{eq})}. \quad (12)$$

Jak je patrné z obr. 1, je výsledné deviatorické napětí dáno vztahem

$$s_{ij} = \sum_{\mu=1}^M s_{ij,\mu}. \quad (13)$$

### 3. Numerická implementace

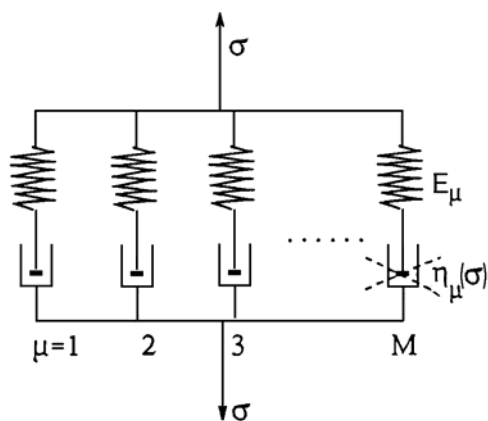
Spojením výše uvedených vztahů a jejich zobecněním získáme základní diferenciální rovnici Leonovova modelu pro  $\mu$ -tý článek ve tvaru

$$\dot{s}_{ij,\mu} + \frac{G_\mu s_{ij,\mu}}{\eta_{0,\mu} a_\sigma(\tau_{eq})} = 2G_\mu \dot{\varepsilon}_{ij}. \quad (14)$$

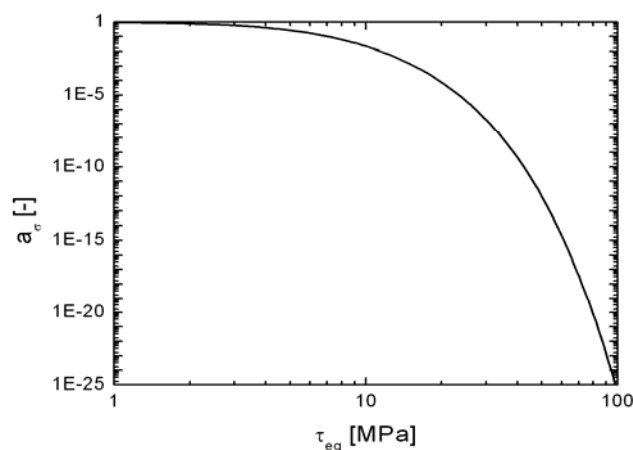
Řešení této diferenciální rovnice nám komplikuje faktor posunutí  $a_\sigma$ , který je funkcí ekvivalentního napětí  $\tau_{eq}$ , jak plyne z rovnice (6). Připomeňme, že

$$a_\sigma(\tau_{eq}) = \frac{\tau_{eq}}{\tau_0} \left/ \sinh\left(\frac{\tau_{eq}}{\tau_0}\right) \right. \quad (15)$$

Z této rovnice je zřejmé, že parametr  $a_\sigma(\tau_{eq})$  mění svoji hodnotu exponenciálně v závislosti na úrovni napětí a velmi rychle se s rostoucím ekvivalentním napětím blíží k nule, jak je znázorněno na obr. 2.



Obr. 1: Maxwellův řetězec s viskozitou závislou na napětí



Obr. 2: Logaritmičká závislost faktoru posunutí  $a_\sigma$  na ekvivalentním napětí  $\tau_{eq}$

V následujícím textu nahradíme tenzorové veličiny jejich vektorovými, resp. Maticovými reprezentacemi, přičemž vektory jsou znázorněny malými tučnými písmeny –  $\mathbf{a}$ , a matice velkými tučnými písmeny –  $\mathbf{A}$ . Dále definujeme matici

$$\mathbf{Q} = \text{diag} \left[ 1 \quad 1 \quad 1 \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right], \quad (16)$$

která převádí inženýrské deformace na tenzorové.

### 3.1 Explicitní integrace

Předpokládejme konstantní rychlost deformace  $\dot{\mathbf{e}}$  během integračního kroku  $\langle t_{i-1}, t_i \rangle$  a také v tomto časovém intervalu konstantní faktor posunutí  $a_\sigma = a_\sigma(\tau_{eq}(t_{i-1}))$ . Za těchto zjednodušujících předpokladů řešíme rovnici (14) jako lineární nehomogenní diferenciální rovnici prvního řádu, tzn. že nejdříve vyřešíme odpovídající homogenní lineární rovnici (rovnice s nulovou pravou stranou) a dále pak nalezneme řešení dané nehomogenní rovnice metodou variace konstanty. Toto řešení lze dále upravit a převést na přírůstkový tvar

$$\mathbf{s}(t_i) = \mathbf{s}(t_{i-1}) + 2\hat{G}(t_{i-1})\mathbf{Q}(\Delta\mathbf{e} - \Delta\hat{\mathbf{e}}(t_{i-1})), \quad (17)$$

kde

$$\hat{G}(t_{i-1}) = \sum_{\mu=1}^M \frac{G_{\mu} \theta_{\mu} a_{\sigma}(t_{i-1})}{\Delta t} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_{\mu} a_{\sigma}(t_{i-1})}\right) \right], \quad (18)$$

$$\Delta \hat{\mathbf{e}}(t_{i-1}) = \frac{1}{2 \hat{G}(t_{i-1})} \sum_{\mu=1}^M \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_{\mu} a_{\sigma}(t_{i-1})}\right) \right] \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}_{\mu}(t_{i-1}). \quad (19)$$

Toto řešení vychází z plně dopředné Eulerovy integrace, neboť parametr  $a_{\sigma}(t_{i-1})$  je vztažen k začátku integračního kroku, jak je naznačeno parametrem v závorkách.

Plně explicitní metodu lze velmi snadno naprogramovat a během jednoho integračního kroku vyžaduje jen minimum výpočtů. Problémem je numerická nestabilita výpočtu, která je zjevně způsobená nesprávným předpokladem konstantního faktoru posunutí během integračního kroku (viz obr. 2). Tato nestabilita se dá eliminovat pouze zvětšením počtu integračních kroků a jejich podstatným zkrácením.

### 3.2 Implicitní integrace

S cílem vyhnout se možné numerické nestabilitě spojené s explicitní integrací a umožnit prodloužení časového přírůstku  $\Delta t$  byla vyvinuta plně implicitní Eulerova zpětná integrační metoda. Za předpokladu konstantní rychlosti deformace  $\dot{\mathbf{e}}$  během integračního kroku můžeme nový stav napjatosti na konci  $i$ -tého integračního kroku vyjádřit jako

$$\mathbf{s}(t_i) = \mathbf{s}(t_{i-1}) + 2 \hat{G}(t_i) \mathbf{Q} (\Delta \mathbf{e} - \Delta \hat{\mathbf{e}}(t_i)), \quad (20)$$

kde časově závislé proměnné v čase  $t_i$  zapíšeme ve tvaru

$$\hat{G}(t_i) = \sum_{\mu=1}^M \frac{G_{\mu} \theta_{\mu} a_{\sigma}(t_i)}{\Delta t} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_{\mu} a_{\sigma}(t_i)}\right) \right], \quad (21)$$

$$\Delta \hat{\mathbf{e}}(t_i) = \frac{1}{2 \hat{G}(t_i)} \sum_{\mu=1}^M \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_{\mu} a_{\sigma}(t_i)}\right) \right] \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}_{\mu}(t_{i-1}). \quad (22)$$

Zde  $\mathbf{s}_{\mu}(t_{i-1})$  je vektor deviatorického napětí v jednotlivých člancích vyčíslené na začátku časového přírůstku  $\Delta t = t_i - t_{i-1}$  a  $M$  je počet článků v modifikovaném Maxwellově řetězci. Faktor posunutí je dán vztahem

$$a_{\sigma}(t_i) = \frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0} / \sinh\left(\frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0}\right), \quad (23)$$

kde ekvivalentní napětí  $\tau_{eq}(t_i)$  vyplývá z

$$\tau_{eq}(t_i) = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{s}^T(t_i) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}(t_i)}. \quad (24)$$

Všechny proměnné při Eulerově zpětné integraci v rovnici (20) jsou nelineárně závislé na napjatosti na konci integračního kroku, a proto úspěšné dokončení daného integračního kroku vyžaduje řešení systému nelineárních rovnic. V našem případě je k tomuto řešení využita Newton-Raphsonova iterační metoda. Za tímto účelem definujeme vektor reziduí

$$\mathbf{r} = \{T \quad G \quad A\}^T, \quad (25)$$

kde

$$T = \tau_{eq}(t_i) - \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{s}^T(t_i) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}(t_i)}, \quad (26)$$

$$G = \hat{G}(t_i) - \sum_{\mu=1}^M \frac{G_{\mu} \theta_{\mu} a_{\sigma}(t_i)}{\Delta t} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_{\mu} a_{\sigma}(t_i)}\right) \right], \quad (27)$$

$$A = a_{\sigma}(t_i) - \frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0} \left/ \sinh\left(\frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0}\right) \right., \quad (28)$$

s primárními neznámými

$$\mathbf{a} = \{\tau_{eq}(t_i) \quad \hat{G}(t_i) \quad a_{\sigma}(t_i)\}^T. \quad (29)$$

Dále poznamenejme, že tenzor deformace dotvarování  $\Delta \hat{\mathbf{e}}(t_i)$ , který se vyskytuje v rovnici (20), je druhotná proměnná. Pak za předpokladu konstantní rychlosti deformace vyjádříme Newton-Raphsonův iterační proces jako

$$\mathbf{a}_{k+1}(t_i) = \mathbf{a}_k(t_i) - \mathbf{H}_k^{-1} \mathbf{r}_k, \quad (30)$$

kde matice  $\mathbf{H}$  je daná vztahem

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial \tau_{eq}} & \frac{dT}{d\hat{G}} & \frac{dT}{da_{\sigma}} \\ \frac{\partial G}{\partial \tau_{eq}} & \frac{\partial G}{\partial \hat{G}} & \frac{\partial G}{\partial a_{\sigma}} \\ \frac{\partial A}{\partial \tau_{eq}} & \frac{\partial A}{\partial \hat{G}} & \frac{\partial A}{\partial a_{\sigma}} \end{bmatrix} = \frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{a}}. \quad (31)$$

Vzhledem k tomu, že Newton-Raphsonova iterační metoda je pouze lokálně konvergentní, rozhodujícím kritériem pro úspěšnou iteraci je odhad počátečních hodnot primárních proměnných (pro  $k = 0$ ). To znamená, že pokud budou počáteční hodnoty těchto proměnných

příliš vzdálené konečnému řešení, iterační proces nemusí konvergovat. V rámci provedených numerických experimentů se dobře osvědčil jejich odhad získaný pomocí plně explicitní metody (dopředná Eulerova integrace).

Při plně implicitní metodě je řešení stabilní i při relativně velkém časovém kroku. Na druhé straně je však potřeba lokální Newton-Raphsonova iterace, která zajišťuje správné hodnoty časově závislých proměnných na konci daného časového kroku. I když tyto výpočty mohou zpomalit lokální integraci v rámci jednoho kroku, významné snížení počtu integračních kroků se může vést ke značným časovým úsporám.

#### 4. Numerické ověření modelu

V této kapitole ověříme výstižnost modelování polymerů Leonovovým modelem porovnáním simulace s laboratorními experimenty. Dále také porovnáme jednotlivé metody řešení diferenciální rovnice (14) a ověříme předpoklady o jednotlivých řešeních.

Jelikož byli na daném materiálu provedeny pouze jednoosé tahové zkoušky (viz [VSS01]), a také pro větší průhlednost řešení omezíme naše zkoumání pouze na jednodimenzionální problém (vztahy pro jednoosou napjatost jsou uvedeny například v [SVZ04])

##### 4.1 Materiálové parametry

Materiálové parametry Leonovova modelu v tab. 1 odpovídají epoxidové pryskyřici PR100/2+EM100E, která se využívá jako matrice v kompozitních materiálech. Parametry  $A$  a  $\tau_0$  byly určeny z Eyringova grafu [VSS01], do kterého jako vstupy byly použity data z tahových experimentů při různých rychlostech zatěžování. Zbylé parametry byly určeny ze série experimentů dotvarování při různých úrovních zatížení, kde 13 členů zobecněného Kelvin-Voightova modelu bylo použito pro získání přesné aproximace funkce poddajnosti. Poté byla použita metoda pro transformaci funkce dotvarování na relaxační funkci, která využívá Laplaceovu transformaci a výsledkem jsou exaktní vztahy jak pro koeficienty  $G_\mu$ , tak i pro relaxační časy  $\theta_\mu$  (podrobný popis viz [Va03], [VSS03]).

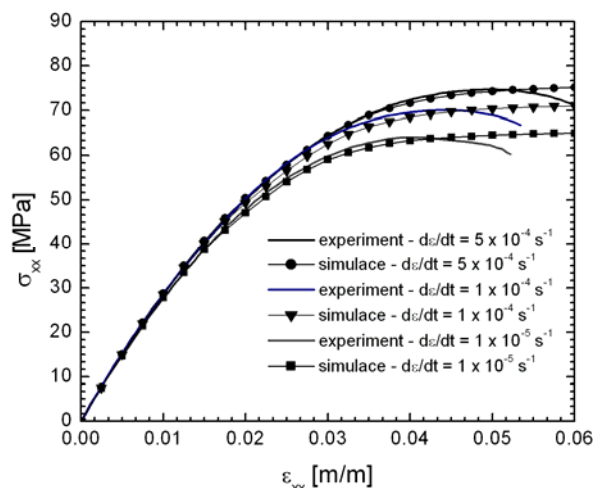
	Parametr	Hodnota
	$A$ [s]	4.85E+14
	$\tau_0$ [MPa]	1.57
	$K$ [MPa]	5030
	$\nu$ [-]	0.40
$\mu$	$\theta_\mu$ [s]	$G_\mu$ [MPa]
1	8.9315E+00	8.2764E+00
2	8.0535E+01	6.1953E+00
3	7.1629E+02	1.8739E+01
4	6.3864E+03	2.8055E+01
5	5.7589E+04	2.5387E+01
6	5.1096E+05	3.8607E+01
7	4.6020E+06	3.6537E+01
8	3.9972E+07	6.6250E+01
9	3.6302E+08	5.4059E+01
10	3.2616E+09	5.2360E+01
11	2.8017E+10	8.2224E+01
12	2.2362E+11	1.3733E+02
13	2.2362E+12	5.3192E+02

Tab. 1: Parametry Leonovova modelu pro epoxidovou pryskyřici PR100/2+EM100E

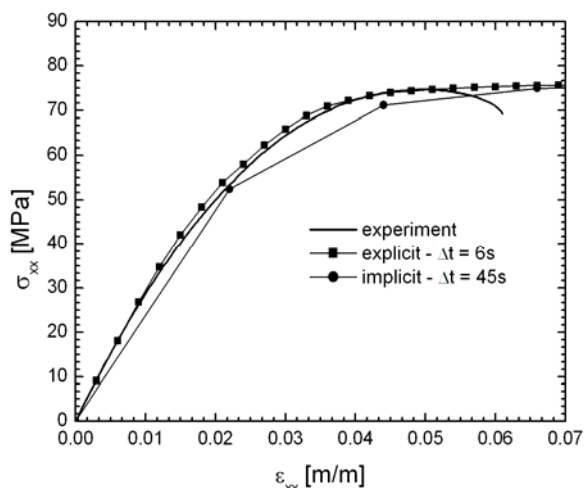
## 4.2 Porovnání simulace s experimenty

Vhodnost Leonovova modelu pro popis deformačního chování epoxidové pryskyřice PR100/2+EM100E byla ověřena porovnáním numerické simulace jednoosé tahové zkoušky s odpovídajícími experimenty. Jedná se o tahové zkoušky s řízenou rychlostí deformace. Typická odezva zkoumaného materiálu pro tři odlišné rychlosti zatěžování je znázorněna na obr. 3. Experimentálně získaná data jsou znázorněna hladkou křivkou, zatímco data z počítačové simulace křivkami s bodovými znaky. Z grafu je zřejmé, že použití Leonovova modelu pro popis nelineárně viskoelastického chování epoxidové pryskyřice je zcela oprávněné, neboť bylo dosaženo velmi uspokojivé shody mezi experimentem a numerickou analýzou.

Na obr. 4 je znázorněna odezva daného polymeru na shodnou jednoosou tahovou zkoušku s řízenou rychlostí deformace  $\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Hladká křivka znázorňuje odezvu získanou z experimentu, druhé dvě křivky odpovídají počítačovým simulacím. Pro jednu simulaci byla využita dopředná Eulerova integrační metoda (explicitní metoda), pro druhou zpětná Eulerova integrační metoda (implicitní metoda). V obou případech byl použit největší možný časový integrační krok, pro který je odpovídající řešení stále stabilní (nedochází k oscilacím). Z grafu je zřejmé, že řešení využívající implicitní metodu je stabilní i při použití řádově desetkrát většího časového kroku.



Obr. 3: Porovnání experimentálně získaných dat s počítačovou simulací jednoosé tahové zkoušky při různých rychlostech poměrné deformace



Obr. 4: Porovnání experimentu se simulací – max. možný časový přírůstek

## 4.3 Srovnání explicitní a implicitní metody

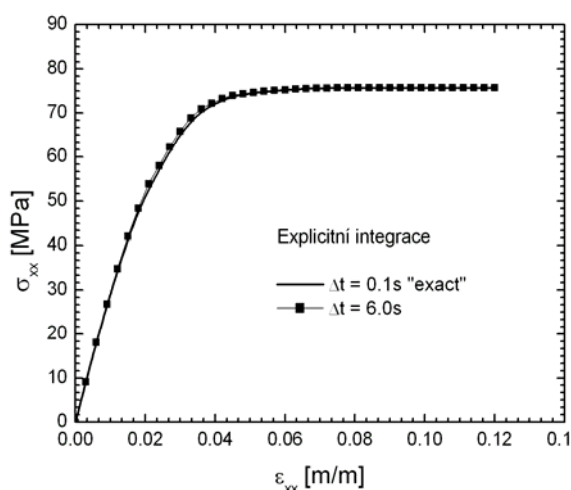
Jak již bylo naznačeno v článku 3.2, při použití implicitní metody můžeme použít relativně velký časový krok aniž by řešení bylo numericky nestabilní a aniž by vykazovalo velkou odchylku od přesného řešení. Na druhou stranu je ale tato metoda řešení během jednoho integračního kroku výpočetně náročnější. Zatímco při použití explicitní metody jsme omezeni relativně malým časovým krokem, náročnost výpočetních operací během jednoho kroku je minimální. To je ale vyváženo větším počtem integračních kroků.



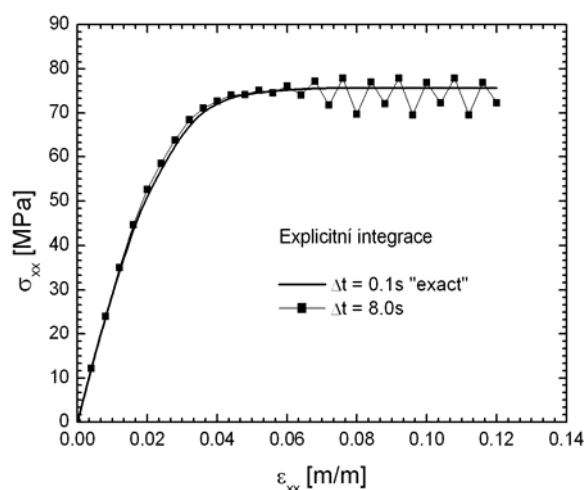
Na obrázcích 5 až 10 jsou znázorněny simulace jednoosé tahové zkoušky s řízenou rychlostí deformace a proměnným integračním krokem. Pro znázornění přesnosti jednotlivých řešení je v každém grafu hladkou křivkou znázorněná simulace s velmi malým časovým krokem, která vyjadřuje “přesné” řešení při dané rychlosti deformace.

U explicitní metody se výsledky při časovém kroku do cca  $\Delta t = 6s$  (zdůrazněme, že tento limit je vztážen k rychlosti poměrné deformace  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} s^{-1}$ ) téměř nelišily, ale při následném zvětšování časového kroku  $\Delta t$  docházelo v oblasti výrazné nelinearity k oscilaci hodnot napětí, jak je ukázáno na obr. 5, 6 a 7. Vysvětleme nyní důvod oscilace. Dopředná Eulerova integrace předpokládá konstantní faktor posunutí během integračního kroku, přičemž jeho hodnotu uvažuje ze začátku tohoto kroku. Při jednoosém tahovém namáhání ale faktor posunutí konstantní není, jeho hodnota se rapidně zmenšuje (viz obr. 2). Faktor posunutí při takovémto namáhání zjednodušeně řečeno snižuje tuhost materiálu (přesněji řečeno urychluje tečení [MC83]). Ta je ale během integračního kroku předpokládána konstantní, a proto při relativně velkém časovém kroku dojde k výraznějšímu “přecenění” rovnovážného stavu mezi úrovní napětí a úrovní deformace. V následujícím kroku je faktor posunutí spočten z této “přestřelené” úrovně napětí, model se snaží vrátit do rovnovážného stavu, ale tím, že  $a_\sigma$  je opět spočteno ze začátku kroku, je rovnovážný stav “podceněn” a tím dochází k oscilaci.

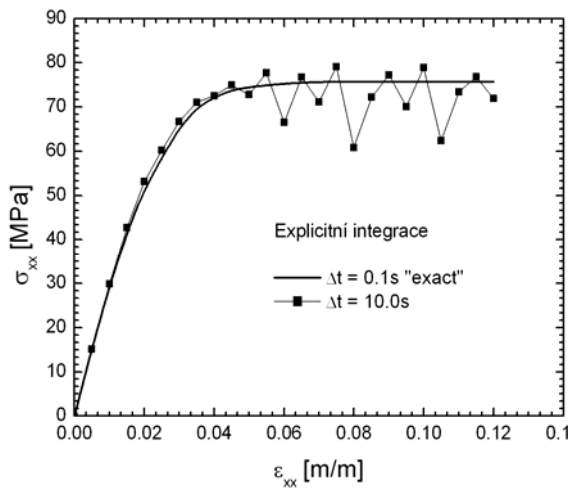
Jak je zřejmé obr. 8, 9 a 10 při simulaci tahového experimentu pomocí implicitní metody k oscilaci nedochází, metoda je stabilní i při relativně velkém časovém kroku a zvětšováním integračního kroku dochází jen k nepatrné nepřesnosti. Pro velmi velký časový krok,  $\Delta t > 50s$  (pro  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} s^{-1}$ ), začala Newton-Raphsonova iterační metoda divergovat, jak je ukázáno na obr. 10, kde byl spočten pouze jeden zatěžovací krok. To je způsobeno podmíněnou konvergencí Newton-Raphsonovi metody, jak je diskutováno v článku 3.2. Při takto velkých integračních krocích už je odhad počátečních hodnot pomocí explicitní metody nedostačující. V tab. 2 je znázorněna rychlost konvergence z hlediska průměrného a maximálního počtu iterací potřebného k dosažení předepsané chyby. Nutno dodat, že v našem případě bylo kritérium až příliš přísné a jako plně dostačující se jeví hodnota  $\varepsilon = 10^{-5}$ .



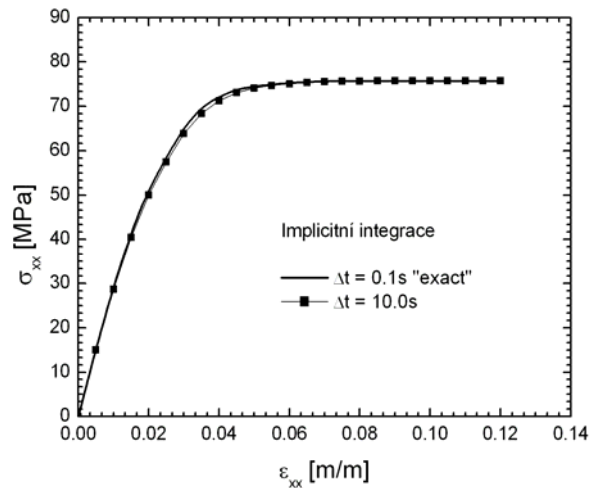
Obr 5: Explicitní metoda,  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} s^{-1}$



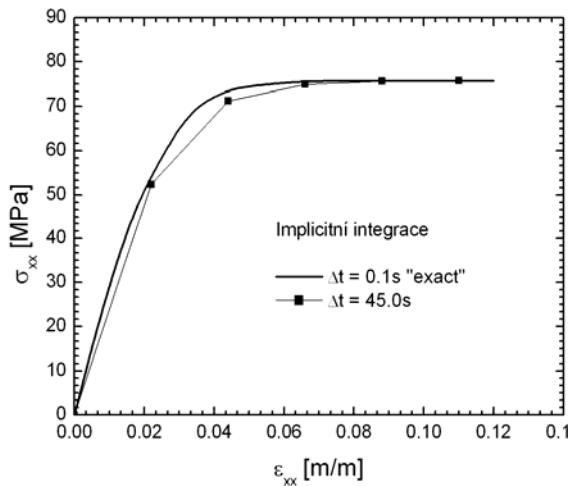
Obr 6: Explicitní metoda,  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} s^{-1}$



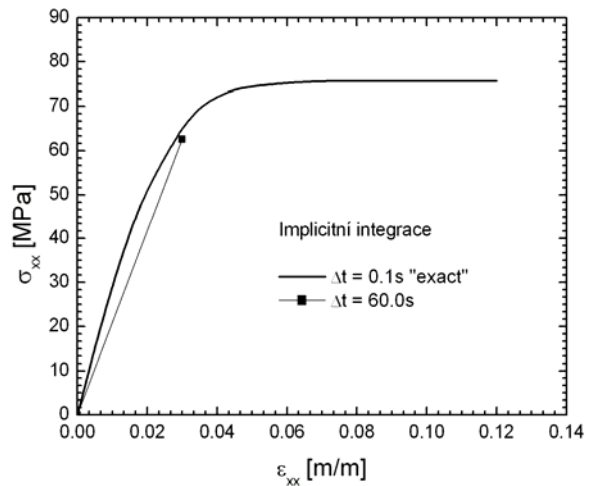
Obr 7: Explicitní metoda,  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$



Obr 8: Implicitní metoda,  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$



Obr 9: Implicitní metoda,  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$



Obr 10: Implicitní metoda,  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$

## 5. Zhodnocení

Práce potvrdila předpoklady o obou přístupech k numerické implementaci Leonovova modelu. Při použití explicitní metody je náročnost na výpočetní operace velmi nízká, což je ovšem vyváženo nutností použít relativně malý integrační krok. Implicitní metoda nám umožnila při simulaci jednoosých tahových experimentů o řád zvětšit integrační krok oproti explicitní metodě, ale za cenu větší výpočetní náročnosti. Při použití velkých časových kroků docházelo při simulaci k nepatrnému snížení přesnosti v oblasti velké nelinearity odezvy materiálu (viz obr.9). Je ale nutno zdůraznit, že při časovém kroku odpovídajícím maximu u explicitní metody je tato nepřesnost zanedbatelná. Tato nepřesnost je částečně eliminována použitím tzv. semi-implicitní metody, kde se při řešení základní diferenciální rovnice Leonovova modelu (viz rovnice (14)) uvažuje lineární změna převrácené hodnoty faktoru posunutí během integračního kroku, viz [Va03].

Časový krok	Počet iterací	
	průměrně	maximálně
8	4	6
20	5	8
30	10	27
40	13	25
45	12	25

Tab. 2: Počet iterací potřebných k dosažení kritéria pro normu residuí  $\| \mathbf{r} \| \leq 10^{-8}$

### Poděkování

Děkuji prof. Ing. Jiřímu Šejnohovi, DrSc. a doc. Ing. Michalovi Šejnohovi, Ph.D. za jejich cenné rady a připomínky. Taktéž děkuji Ing. Janu Zamanovi, Ph.D. za pomoc nejen při korektuře článku.

Príspevek byl vypracován za podpory GAČR 106/03/0180, 103/01/D052 a 106/03/H000.

### Literatura

- [Le76] Leonov, A. I.: Non-equilibrium thermodynamics and rheology of viscoelastic polymer media. *Rheologica Acta*, Vol. 15; pp. 85-98, 1976
- [MC83] MacKnight, A.: *Introduction to Polymer Viscoelasticity*. University of Massachusetts, Amherst, Massachusetts, 1983
- [SVZ04] Sejnoha, M., Valenta, R. a Zeman, J.: Nonlinear viscoelastic analysis of statistically homogeneous random composites. *International Journal for Multiscale Computational Mechanics*, zasláno k publikaci, 2004
- [Te96] Tervoort, T. A.: *Constitutive Modeling of Polymer Glasses: Finite, Nonlinear Viscoelastic Behaviour of Polycarbonate*. Eindhoven University of Technology, Eindhoven, 1996
- [Va03] Valenta, R.: Numerické modelování polymerů. ČVUT v Praze, Fakulta stavební, 2003 (Diplomová práce)
- [VSS01] Valenta, R., Šejnoha, M. a Šejnoha, J.: Materiálové parametry Leonovova modelu pro epoxidovou pryskyřici. sborník „Nové trendy v statice a dynamice stavebných konstrukcí“, Bratislava, 2001
- [VSS03] Valenta, R., Šejnoha, J. a Šejnoha, M.: Transformace funkce dotvarování na relaxační funkci. *Stavební obzor*, duben 2003