



INŽENÝRSKÁ MECHANIKA 2005

NÁRODNÍ KONFERENCE

s mezinárodní účastí

Svratka, Česká republika, 9. - 12. května 2005

IMPLEMENTATION OF THE LEONOV MODEL INTO FEM

R. Valenta, M. Sejnoha

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 be only prevented by taking very short time steps. To eliminate this restriction, a fully implicit method (backward Euler integration), where the solution is established by employing the Newton-Raphson iteration method, is developed. This procedure requires keeping track of the total deformation increment during the iteration as the method is path dependent. Therefore, implementation of this method into the FEM source code requires a special treatment as is shown in this paper.*

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 a kterou jsme využili pro ověření výše zmíněného modelu.

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

Vlastní formulace Leonovova modelu je přiblížena v kapitole 2, přičemž možné přístupy k jeho numerické implementaci jsou objasněny v kapitole 3. V kapitole 4 je nastíněn způsob implementace obou přístupů k řešení základní diferenciální rovnice Leonovova modelu do zdrojového kódu metody konečných prvků. V závěrečné páté kapitole je provedeno krátké zhodnocení této práce.

2. Konstitutivní vztahy Leonovova modelu

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

$$\frac{de_p}{dt} = \frac{1}{A} \sinh \frac{\tau}{\tau_0}, \quad (1)$$

kde τ je smykové napětí, A je materiálová konstanta (za konstantní teploty) vztážená k aktivační energii ΔH a aktivačnímu objemu V^* , jak je ukázáno v [TE96]. Sečtením plastické a elastické rychlosti smykové deformace získáme jednodimenzionální Leonovův model ve tvaru

$$\frac{de}{dt} = \frac{de_e}{dt} + \frac{de_p}{dt} = \frac{de_e}{dt} + \frac{\tau}{\eta (de_p/dt)}, \quad (2)$$

s vyjádřením viskozity

$$\eta (de_p/dt) = \frac{\eta_0 \tau}{\tau_0 \sinh(\tau/\tau_0)} = \eta_0 a_\sigma(\tau), \quad (3)$$

kde $a_\sigma(\tau_{eq})$ je faktor posunutí a η_0 je viskozita materiálu v lineární viskoelastické oblasti při ekvivalentním napětí nižším než τ_0 . Eyringův model tedy vede k funkční závislosti Eyringovy viskozity na ekvivalentním napětí. Je zřejmé, že materiálový model popsáný rovnicí (2) odpovídá Maxwellově řetězci s proměnou viskozitou η .

Pro popis vícedimenzionálního problému použijeme zobecněný Leonovův model [TE96], který odpovídá zobecněnému modifikovanému Maxwellově řetězci, viz obrázek 1. Viskozita μ -tého článku řetězce pak nabude tvaru

$$\eta_\mu = \eta_{0,\mu} a_\sigma(\tau_{eq}), \quad (4)$$

kde ekvivalentní napětí τ_{eq} spočteme

$$\tau_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2} s_{ij} s_{ij}}, \quad (5)$$

kde s_{ij} je deviatorická část tenzoru napětí. Za předpokladu isotropního materiálu a platnosti teorie malých deformací můžeme vyjádřit konstitutivní rovnice popisující zobecněný Leonovův model ve tvaru

$$\sigma_m = K \varepsilon_v, \quad (6)$$

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \sum_{\mu=1}^M 2G_\mu \left(\frac{d\mathbf{e}}{dt} - \frac{d\mathbf{e}_{p,\mu}}{dt} \right), \quad (7)$$

$$\mathbf{s}_\mu = 2\eta_\mu \frac{d\mathbf{e}_{p,\mu}}{dt} = 2\eta_{0,\mu} a_\sigma(\tau_{eq}) \frac{d\mathbf{e}_{p,\mu}}{dt}, \quad (8)$$

$$\mathbf{s} = \sum_{\mu=1}^M \mathbf{s}_\mu, \quad (9)$$

kde σ_m je střední napětí, ε_v je objemová deformace, K je objemový modul pružnosti a G vyjadřuje modul pružnosti ve smyku.

3. Numerická implementace konstitutivních vztahů

Spojením výše uvedených vztahů a jejich zobecněním získáme základní diferenciální rovnici Leonovova modelu pro μ -tý člen ve tvaru

$$\dot{s}_{ij,\mu} + \frac{G_\mu s_{ij,\mu}}{\eta_{0,\mu} a_\sigma(\tau_{eq})} = 2 G_\mu \dot{e}_{ij}. \quad (10)$$

Řešení této diferenciální rovnice nám komplikuje faktor posunutí a_σ , který je funkcí ekvivalentního napětí τ_{eq} , jak plyne z rovnice (3). Připomeňme, že

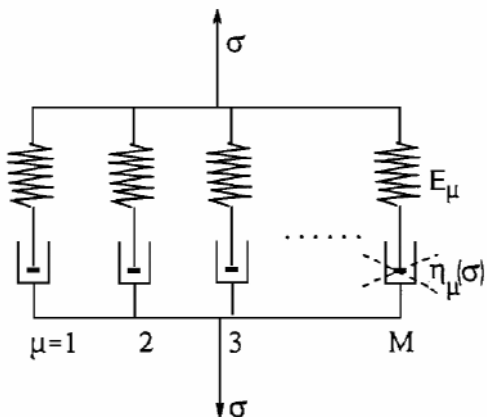
$$a_\sigma(\tau_{eq}) = \frac{\tau_{eq}}{\tau_0} \left/ \sinh\left(\frac{\tau_{eq}}{\tau_0}\right) \right. . \quad (11)$$

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.

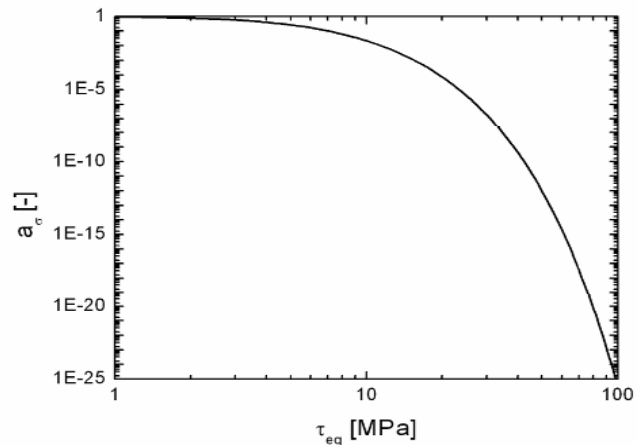
V následujícím textu nahradíme tenzorové veličiny jejich vektorovými, resp. Maticovými reprezentacemi, přičemž vektory jsou znázorněny malými tučnými písmeny – \mathbf{a} , a matice velkými tučnými písmeny – \mathbf{A} . Dále definujeme matici

$$\mathbf{Q} = \text{diag} \left[1 \quad 1 \quad 1 \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right], \quad (12)$$

která převádí inženýrské deformace na tenzorové.



Obr. 1: Maxwellův řetězec s viskozitou závislou na napětí



Obr. 2: Logaritmická závislost faktoru posunutí a_σ na ekvivalentním napětí τ_{eq}

3.1 Explicitní integrace

Předpokládejme konstantní rychlost deformace $\dot{\epsilon}$ 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 (10) 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

$$\mathbf{s}(t_i) = \mathbf{s}(t_{i-1}) + 2\hat{G}(t_{i-1})\mathbf{Q}(\Delta\mathbf{e} - \Delta\hat{\mathbf{e}}(t_{i-1})), \quad (13)$$

kde

$$\hat{G}(t_{i-1}) = \sum_{\mu=1}^M \frac{G_\mu \theta_\mu a_\sigma(t_{i-1})}{\Delta t} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_\mu a_\sigma(t_{i-1})}\right) \right], \quad (14)$$

$$\Delta\hat{\mathbf{e}}(t_{i-1}) = \frac{1}{2\hat{G}(t_{i-1})} \sum_{\mu=1}^M \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_\mu a_\sigma(t_{i-1})}\right) \right] \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}_\mu(t_{i-1}). \quad (15)$$

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 Δt 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

$$\mathbf{s}(t_i) = \mathbf{s}(t_{i-1}) + 2\hat{G}(t_i)\mathbf{Q}(\Delta\mathbf{e} - \Delta\hat{\mathbf{e}}(t_i)), \quad (16)$$

kde časově závislé proměnné v čase t_i zapíšeme ve tvaru

$$\hat{G}(t_i) = \sum_{\mu=1}^M \frac{G_\mu \theta_\mu a_\sigma(t_i)}{\Delta t} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_\mu a_\sigma(t_i)}\right) \right], \quad (17)$$

$$\Delta\hat{\mathbf{e}}(t_i) = \frac{1}{2\hat{G}(t_i)} \sum_{\mu=1}^M \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_\mu a_\sigma(t_i)}\right) \right] \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}_\mu(t_{i-1}). \quad (18)$$

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

$$a_\sigma(t_i) = \frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0} / \sinh\left(\frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0}\right), \quad (19)$$

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

$$\tau_{eq}(t_i) = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{s}^T(t_i) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}(t_i)}. \quad (20)$$

Všechny proměnné při Eulerově zpětné integraci v rovnici (16) 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 definujme vektor reziduí

$$\mathbf{r} = \{T \quad G \quad A\}^T, \quad (21)$$

kde

$$T = \tau_{eq}(t_i) - \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{s}^T(t_i) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}(t_i)}, \quad (22)$$

$$G = \hat{G}(t_i) - \sum_{\mu=1}^M \frac{G_\mu \theta_\mu a_\sigma(t_i)}{\Delta t} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\theta_\mu a_\sigma(t_i)}\right) \right], \quad (23)$$

$$A = a_\sigma(t_i) - \frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0} \Big/ \sinh\left(\frac{\tau_{eq}(t_i)}{\tau_0}\right), \quad (24)$$

s primárními neznámými

$$\mathbf{a} = \left\{ \tau_{eq}(t_i) \quad \hat{G}(t_i) \quad a_\sigma(t_i) \right\}^T. \quad (25)$$

Dále poznamenejme, že tenzor deformace dotvarování $\Delta \hat{\mathbf{e}}(t_i)$, který se vyskytuje v rovnici (16), je druhotná proměnná. Pak za předpokladu konstantní rychlosti deformace vyjádříme Newton-Raphsonův iterační proces jako

$$\mathbf{a}_{k+1}(t_i) = \mathbf{a}_k(t_i) - \mathbf{H}_k^{-1} \mathbf{r}_k, \quad (26)$$

kde matice \mathbf{H} je dána vztahem

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial \tau_{eq}} & \frac{dT}{d\hat{G}} & \frac{dT}{da_\sigma} \\ \frac{\partial G}{\partial \tau_{eq}} & \frac{\partial G}{\partial \hat{G}} & \frac{\partial G}{\partial a_\sigma} \\ \frac{\partial A}{\partial \tau_{eq}} & \frac{\partial A}{\partial \hat{G}} & \frac{\partial A}{\partial a_\sigma} \end{bmatrix} = \frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{a}}. \quad (27)$$

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 může vést ke značným časovým úsporám.

4. Implementace do MKP

Při explicitní metodě řešení jsou všechny druhotné neznámé z rovnice (13) závislé na počátečním stavu napjatosti v daném časovém přírůstku, a proto implementace Leonovova modelu řešeného explicitním přístupem do metody konečných prvků nevyžaduje žádné speciální úpravy. Naprogramování MKP využívající Leonovův materiálový model založený na explicitní integraci je pak shodné jako u MKP s vazkopružným materiálovým modelem, jenom je nezbytné zahrnout vliv faktoru posunutí a_σ .

U implicitní metody ovšem stojíme před odlišným problémem. Druhotné neznámé v rovnici (20) jsou všechny funkcemi celkové napjatosti na konci integračního kroku a iterační cyklus popsany v kapitole 3.2 je závislý na celkovém přírůstku deformace během daného časového kroku. Jinými slovy, v této metodě je zahrnut v každém globálním iteračním cyklu MKP vliv celkového deformačního přírůstku. Pro $n+1$ časový krok můžeme tedy psát

$$\mathbf{u}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{u}_n + \Delta \mathbf{u}_n^{k+1}, \quad (28)$$

kde $\Delta \mathbf{u}_n^{k+1}$ je celkový přírůstek naakumulovaný ze všech globálních iteračních kroků metody konečných prvků (1 ... $k+1$) v daném časovém přírůstku a lze jej vyjádřit ve tvaru

$$\Delta \mathbf{u}_n^{k+1} = \Delta \mathbf{u}_n^k + d\mathbf{u}_n^k, \quad (29)$$

kde $d\mathbf{u}_n^k$ je dílčí přírůstek z k -tého globálního iteračního cyklu MKP. Tímto způsobem je nutné upravit globální řídicí iterační cyklus metody konečných prvků.

5. Závěr

V době vzniku tohoto příspěvku nebyla ještě plně implicitní metoda řešení Leonovova modelu zaimplementována do zdrojového kódu MKP, a proto zde nejsou uvedeny žádné simulace vícerozměrných problémů. Jak již bylo ukázáno dříve na jednorozměrném problému (viz [Va03], [SVZ04]), implicitní metoda řešení nám umožňuje prodloužit integrační krok, neboť je výrazně stabilnější. To vyvažuje její hlavní nevýhodu oproti řešení pomocí explicitní metody, což je větší výpočetní náročnost. I když může lokální iterační proces zpomalit výpočet během jednoho integračního kroku, celkově může být plně implicitní metoda výhodnější díky významnému snížení počtu integračních kroků.

Poděkování

Příspěvek byl vypracován za podpory GAČR 106/03/0180 a 106/03/H150.

Literatura

- [Le76] Leonov, A. I.: Non-equilibrium thermodynamics and rheology of viscoelastic polymer media. *Rheologica Acta*, Vol. 15; pp. 85-98, 1976
- [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)