

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra mechaniky

Modelování pryžových součástí při zohlednění změn mechanických vlastností způsobených provozními podmínkami

Ing. Jan Heczko

Dizertační práce

k získání akademického titulu doktor
v oboru Aplikovaná mechanika

Školitel: Prof. Ing. Vladislav Laš, CSc.
Konzultant specialista: Ing. Radek Kottner, Ph.D.

Plzeň 2019

University of West Bohemia in Pilsen
Faculty of Applied Sciences
Department of Mechanics

Modelling of rubber parts considering changes in mechanical properties caused by operational conditions

Ing. Jan Heczko

A dissertation

submitted for the degree of Doctor of Philosophy
in Applied Mechanics

Supervisor: Prof. Ing. Vladislav Laš, CSc.
Supervisor specialist: Ing. Radek Kottner, Ph.D.

Pilsen 2019

Prohlášení

Předkládám k posouzení a k obhajobě tuto disertační práci zpracovanou na závěr doktorského studia na Fakultě aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni.

Čestně prohlašuji, že jsem tuto disertační práci vypracoval samostatně a s použitím odborné literatury a pramenů uvedených v seznamu, který je součástí této práce. Zároveň čestně prohlašuji, že jsem při vypracování této práce zachoval postupy ve vědecké práci obvyklé.

V Plzni, 29.8. 2019

Jan Heczko

Poděkování

Průběh doktorského studia byl podpořen studentským grantovým systémem SGS-2013-36, SGS-2016-038, SGS-2019-009, projektem VS-15, NTIS - Nové technologie pro informační společnost, Evropské centrum excelence, CZ.1.05/1.1.00/02.0090, projektem LO1506 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR, projektem VaV inteligentních komponent pokročilých technologií pro plzeňskou metropolitní oblast reg.č.: CZ.02.1.01/ 0.0/0.0/17_048/0007267 financovaného z EFRR a projekty GAČR P101/12/2315, 17-01618S, GA16-03823S, 19-04956S.

Rád bych poděkoval svému školiteli prof. Ing. Vladislavu Lašovi, CSc. za trpělivé vedení a cenné rady a připomínky. Velký dík patří mému konzultantovi specialistovi Ing. Radku Kottnerovi, Ph.D. za odborné konzultace, vytrvalou pomoc s experimenty, výpočty i psaním příspěvků a především za inspiraci pro směřování práce a její mnohdy kritické hodnocení. Poděkování patří také ostatním členům katedry mechaniky, kteří bezpočtem konzultací přispěli k výsledné podobě této práce. V neposlední řadě bych rád poděkoval celé své rodině za bezmeznou podporu a shovívavost po čas studia.

Abstrakt

Práce se zabývá modelováním mechanických vlastností pryže při uvažování chemického stárnutí a kumulace mikrotrhlin vlivem únavového poškození. Pro potřeby numerických simulací kumulace únavového poškození je navrženo použití metody průměrování v čase pomocí asymptotických rozvojų. Je popsán materiálový model vhodný pro numerické simulace dílů podrobených cyklickému zatížení při velkých deformacích a oxidativnímu stárnutí. Kumulace poškození je formulována pomocí mechaniky kontinua (tzv. *continuum damage mechanics*). Stárnutí materiálu závisí na teplotě a koncentraci kyslíku, přičemž transport kyslíku se popisuje difuzní rovnicí s reakčním členem. Mezi důležité vlastnosti modelu patří schopnost popsat zbytkové deformace. Kvůli identifikaci parametrů modelu byly odvozeny zjednodušené vztahy pro homogenní stavy deformací v různých módech a metodou přímé diferenciacce byla provedena citlivostní analýza případu jednoosé napjatosti. Poslední částí týkající se materiálového modelu jsou konečněprvkové simulace difuze kyslíku v poškozeném médiu pro zvolené tvary trhlin a částic plniva. V práci je navrženo použití těchto simulací pro doplnění materiálového modelu o závislost tenzoru difuzivity na míře únavového poškození.

V části věnované experimentům jsou uvedena měření stárnutí deformovaných vzorků při zvýšené teplotě, která dokumentují právě vývoj zbytkové deformace a změny tahových křivek pryže. Mezi dalšími provedenými experimenty je smyková zkouška typu Arcan, pro kterou byl zkonstruován přípravek, jehož natočením v čelistech trhacího stroje lze vzorek podrobit kombinovanému namáhání tahem a smykem.

Dále se práce věnuje identifikaci parametrů materiálového modelu, prováděné ve smyslu minimalizace skalární cílové funkce tvaru váženého součtu čtverců odchylek modelu a měření. Je navrženo obecné kritérium, podle kterého lze zvolit experimenty a jejich nastavení nutné pro identifikaci všech parametrů. Toto kritérium spočívá v aproximaci cílové funkce kvadratickou funkcí a následném vyšetření vlastních hodnot matice aproximace. V závěru je navrženo kritérium, pomocí něhož lze stanovit meze použitelnosti identifikovaného modelu.

Abstract

This work deals with modelling of mechanical properties of rubber with the consideration of chemical ageing and cumulation of microcracks driven by fatigue damage. The use of time-averaging technique, based on asymptotic expansions, is suggested for the purpose of numerical simulations of fatigue damage evolution. A material model suitable for numerical simulations of parts subjected to cyclic loading under large strains and to oxidative ageing is described. Damage cumulation is formulated using continuum damage mechanics. Ageing of the material is assumed to depend on temperature and oxygen concentration, with the transport of oxygen being described by the diffusion equation with a reaction term. Among the important properties of the model is the ability to account for permanent set. For the purpose of parameter identification, simplified forms of the model were derived under the assumptions of homogeneous state of strain in several modes of deformation and sensitivity analysis was performed using the direct differentiation method in the case of uniaxial tension. The last part on the material model are the finite-element simulations of oxygen diffusion in damaged media that were performed for selected geometries of cracks or filler particles. Future use of such simulations is suggested in order to enhance the described material model by the dependence of the diffusivity tensor on the amount of fatigue damage.

The sections on experimental work cover ageing measurements on deformed specimens at elevated temperature that capture the evolution of permanent set and changes in stress-strain curves of rubber. Among the other experiments is the Arcan shear test, which was enabled by manufacturing special set of clamps that may be rotated in the clamps of a universal testing machine and thereby apply a combination of tension and shear.

The final part of the work deals with parameter identification, which is performed by means of minimizing a scalar objective function in the form of weighed sum of squared residuals. A general identifiability criterion is suggested that enables a qualified choice of experiments and their settings that are necessary for identifiability of all parameters. The criterion is based on taking a quadratic approximation of the objective function and examining the eigenvalues and eigenvectors of the approximation's matrix. Another criterion is suggested at the end of the work that defines the bounds of usability of an identified model.

Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Modellierung des mechanischen Materialverhalten von Gummiwerkstoffen unter Berücksichtigung von chemischer Alterung und Schadensakkumulation. Für die numerischen Simulationen der Entwicklung von Ermüdungsschäden wird vorgeschlagen, eine Zeitmittelungstechnik, die auf asymptotischen Expansionen basiert, zu verwenden. Ein Materialmodell wird beschrieben, das für die numerischen Simulationen von Bauteilen, die durch zyklische Belastung mit großen Verformungen und oxidativen Alterungsvorgänge, verwendbar ist. Die Schadensakkumulation wird mithilfe der Kontinuumsmechanik (sog. *continuum damage mechanics*) formuliert. Die Alterung ist von der Temperatur und Sauerstoffkonzentration abhängig, wobei der Stofftransport von Sauerstoff durch die Diffusionsgleichung mit einem Reaktionsterm beschrieben wird. Eine wichtige Eigenschaft dieses Modells ist die Fähigkeit die bleibende Deformation zu berücksichtigen. Für die Zwecke der Parameteridentifikation werden vereinfachte Lösungen für homogene Verformungszustände in verschiedene Verformungsmodi abgeleitet und für uniaxialen Zugversuch wird die Sensitivitätsanalyse durch die direkte Differenzierung abgeleitet. Der letzte Teil, der das Materialmodell betrifft, sind die Finite-Elemente-Methode Simulationen der Sauerstoffdiffusion in einem beschädigtem Medium, die für verschiedene geometrische Formen von Risse und Füllstoffartikeln werden. In der Arbeit wird die Anwendung dieser Simulationen für Erweiterung des Materialmodells um die Temperaturabhängigkeit des Diffusions-Tensors vorgeschlagen.

Im experimentellen Teil sind die Messungen der bleibenden Deformation bei erhöhten Temperatur beschrieben, die die Deformationsakkumulation und die Änderungen den Spannungs-Dehnungs-Diagramms dokumentieren. Unter anderen durchgeführten Experimenten ist der Arcan-Scherversuch, für den ein Spannzeug konstruiert wurde, mit dessen Drehung eine Kombination aus Zug und Scherung untersucht werden kann.

Schließlich befasst sich die Arbeit mit Parameteridentifikation des Materialmodells, die durch minimierung einer Skalaren Zielfunktion durchgeführt wird, die die Form der Summe der Fehlerquadrate hat. Ein allgemeines Kriterium, nach dem die notwendigen Messungen und deren Parametern ausgewählt werden können. Dieses Kriterium basiert auf Approximation der Zielfunktion durch die quadratische Funktion und die Analyse der Eigenwerte der Approximation. Am Ende ist ein Kriterium vorgeschlagen, nach dem die Grenzen der Anwendbarkeit eines kalibriertes Modell festgestellt werden können.

Obsah

Obsah	i
Seznam obrázků	iii
Seznam tabulek	vii
Seznam zkratk	viii
Seznam značení	ix
1 Úvod	1
2 Současný stav	4
3 Modelování únavového poškození	10
3.1 Konstitutivní model	10
3.2 Použití metody asymptotických rozvoju	12
4 Modelování chemického stárnutí	28
4.1 Model Lion-Johlitz	28
4.1.1 Varianta pro malé deformace	29
4.2 Model Naumann-Ihleman (<i>dynamic network model</i>)	36
5 Souhrnný model stárnutí a poškození	40
5.1 Formulace modelu	40
5.2 Příklady	42
5.3 Vlastnosti modelu	45
5.4 Vliv poškození na transport kyslíku	46
5.4.1 Aproximace homogenizovaných koeficientu	52
5.4.2 Použití pro makroskopický model difuze	58
6 Experimenty	59
6.1 Stárnutí	59
6.2 Únava	59
6.3 Experimenty provedené autorem	60
6.3.1 Cyklické zkoušky	60
6.3.2 Arcan	61
6.3.3 Stárnutí při zvýšené teplotě	65
7 Identifikace parametrů	72
7.1 Úloha identifikace parametrů modelu	72
7.1.1 Cílová funkce ve tvaru váženého součtu čtverců odchylek	72
7.1.2 Modifikace cílové funkce pro analýzu vlivu experimentálních dat	74
7.1.3 Vazby	74
7.2 Řešení optimalizační úlohy	75
7.2.1 Metoda nejmenších čtverců	75
7.2.2 Metoda největšího spádu	75
7.2.3 Metoda sdružených směrů	75
7.2.4 Newtonova metoda a kvazinevtonovské metody	76
7.2.5 Levenbergova-Marquardtova metoda	76
7.3 Vliv experimentálních dat	77
7.3.1 Výběr deformačních módů a časových průběhů	79
7.3.2 Vliv jednotlivých bodů	82
7.4 Závěr	87

8 Spolehlivost modelu a meze jeho použitelnosti	88
8.1 Omezení plynoucí z vlastností materiálového modelu	88
8.2 Meze použitelnosti identifikovaného modelu	89
8.3 Výsledek identifikace ve tvaru intervalu	93
9 Závěr	95
Literatura	97
Přehled vybraných publikací autora	105
Články v impaktovaných časopisech	105
Články v recenzovaných časopisech	105
Konferenční příspěvky	105
Konference indexované v databázích Scopus nebo Web of Science	105
Ostatní konference	106
Výzkumné zprávy	107
Užitný vzor	108
Ostatní	108
A Řešení úloh s homogenní deformací	109
A.1 Jednoosá napjatost	109
A.2 Prostý smyk	110
A.3 Kombinace tahu/tlaku a smyku	112
B <i>Dynamic network model</i> při jednoosé napjatosti, konstantní teplotě a konstantní koncentraci kyslíku	116
B.1 Numerické simulace	117
B.2 Citlivostní analýza	119
B.2.1 Úloha s předepsanou deformací	119
B.2.2 Úloha s předepsaným nominálním napětím	120

Seznam obrázků

3.1.	Porovnání průběhů poškození spočtených plnou integrací a řešením homogenizované evoluční rovnice (příklad 3.1)	15
3.2.	Předepsaná deformace s nekonstantní statickou složkou (příklad 3.1)	15
3.3.	Porovnání průběhů poškození spočtených plnou integrací a řešením homogenizované evoluční rovnice (příklad 3.1) - nekonstantní statická složka předepsané deformace	16
3.4.	Geometrie vzorku nekonstantního průřezu a odpovídající veličiny (příklad 3.2)	16
3.5.	Průběh poškození na jednotlivých prvcích (příklad 3.2)	17
3.6.	Schéma explicitního časového řešiče při MKP výpočtu úlohy s únavovým poškozením (příklad 3.3)	18
3.7.	Zdeformovaná MKP síť (příklad 3.3)	18
3.8.	Rozložení poškození D na konci simulace (příklad 3.3)	19
3.9.	Průběh poškození v čase ve zvolených místech sítě (příklad 3.3)	20
3.10.	Rozložení rychlosti poškození \dot{D} na začátku a na konci simulace (příklad 3.3)	21
3.11.	Vliv parametrů modelu poškození v případě jednoosé napjatosti a harmonického předepsaného posuvu (příklad 3.4)	21
3.12.	Výpočetní oblast a části hranice pro okrajové podmínky (příklad 3.4)	22
3.13.	Nezdeformovaná MKP síť s vyznačenými body, ve kterých bylo provedeno porovnání časových průběhů poškození (příklad 3.4)	23
3.14.	Průběh poškození v bodě A (příklad 3.4)	23
3.15.	Průběh poškození v bodě B (příklad 3.4)	24
3.16.	Průběh poškození v bodě C (příklad 3.4)	24
3.17.	Průběh poškození v bodě D (příklad 3.4)	24
3.18.	Průběh poškození v bodě E (příklad 3.4)	25
3.19.	Průběh poškození v bodě F (příklad 3.4)	25
3.20.	Průběh poškození v bodě G (příklad 3.4)	25
3.21.	Průběh poškození v bodě H (příklad 3.4)	26
3.22.	Rozložení poškození na konci simulace (příklad 3.4)	26
3.23.	Porovnání zdeformovaných sítí na začátku a na konci simulace (příklad 3.4)	27
4.1.	Vulkanizační lis s vyznačenou polohou pryžového těsnění (příklad 4.1)	32
4.2.	Konečněprvková síť a okrajové podmínky simulace těsnění vulkanizačního lisu (příklad 4.1)	32
4.3.	Předepsaný svislý posuv kontaktní plochy vulkanizačního lisu (příklad 4.1)	33
4.4.	Rozložení proměnné q_R v těsnění vulkanizačního lisu po 20 h při teplotě 25 °C	33
4.5.	Rozložení proměnné q_R v těsnění vulkanizačního lisu po 20 h při teplotě 170 °C	34
4.6.	Průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R podél svislé osy řezu těsnění (úsečka A na obr. 4.4)	34

4.7.	Průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R podél vodorovné osy řezu těsnění (úsečka B na obr. 4.4)	34
4.8.	Průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R v čase na dvou různých místech těsnění (body C a D, viz obr. 4.5)	35
4.9.	Napětí (složka σ_{yy}) na začátku relaxačního intervalu ($t = 0,1$ h), teplota 25°C	35
4.10.	Napětí (složka σ_{yy}) na konci relaxačního intervalu ($t = 19,9$ h), teplota 25°C	36
4.11.	Napětí (složka σ_{yy}) na začátku relaxačního intervalu ($t = 0,1$ h), teplota 170°C	36
4.12.	Napětí (složka σ_{yy}) na konci relaxačního intervalu ($t = 19,9$ h), teplota 170°C	37
4.13.	Vývoj svislé složky napětí (σ_{yy}) v bodě E (viz obr. 4.9) v čase, teplota 25°C . Zobrazena je celková hodnota i části odpovídající členům rozkladu (4.11).	37
4.14.	Vývoj svislé složky napětí (σ_{yy}) v bodě E (viz obr. 4.9) v čase, teplota 170°C . Zobrazena je celková hodnota i části odpovídající členům rozkladu (4.11).	37
4.15.	Kinematika použitá u <i>dynamic network modelu</i>	38
5.1.	Výsledky numerické simulace cyklické zkoušky při jednoosé napjatosti.	43
5.2.	Závislost napětí na deformaci v prvním a 3150 cyklu.	44
5.3.	Výsledky numerické simulace dvoukrokové relaxace při jednoosé napjatosti.	45
5.4.	Výsledky numerické simulace relaxace při jednoosé napjatosti a cyklicky proměnné teplotě.	46
5.5.	Geometrie výpočetní oblasti pro periodické médium s trhlami	47
5.6.	MKP síť pro výpočet homogenizovaných difuzních koeficientů (příklad 5.4)	48
5.7.	Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, kruhová trhlina o průměru 0,2 (příklad 5.4)	49
5.8.	Homogenizované koeficienty v závislosti na průměru kruhové trhliny (příklad 5.4).	50
5.9.	Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, šířka buňky 0,8 (příklad 5.5)	51
5.10.	Homogenizované koeficienty v závislosti na vzdálenosti trhlin (příklad 5.5)	52
5.11.	Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, trhlina tvaru elipsy s poloosami a a b (příklad 5.6)	53
5.12.	Homogenizované koeficienty v závislosti na délce svislé poloosy trhliny (příklad 5.6)	54
5.13.	Flukтуаční část (vlevo) a celková koncentrace (vpravo) v případě kulové inkluze o průměru 1 uvnitř krychlové buňky (příklad 5.7), makroskopický gradient $\nabla c_0 = [0, 1, 0]^T$	54
5.14.	Flukтуаční část (vlevo) a celková koncentrace v případě kruhové částice plniva o průměru 1 (příklad 5.8)	54
5.15.	Homogenizované koeficienty v závislosti na objemovém podílu částic plniva (příklad 5.8)	55

5.16.	Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, částečně odtržená částice plniva (příklad 5.9)	55
5.17.	Relativní rozdíly poměrné vodivosti kompozitu s částicemi plniva v závislosti na objemovém poměru plniva (příklad 5.10).	56
5.18.	Relativní rozdíly poměrné vodivosti materiálu s plně prostupnými trhlinami v závislosti na objemovém poměru trhlín (příklad 5.10).	57
5.19.	Relativní rozdíly poměrných vodivostí materiálu s neprostupnými částicemi plniva a s plně prostupnými trhlinami (příklad 5.11).	57
6.1.	Vzorek tvaru přesýpacích hodin	60
6.2.	Předepsaná deformace při cyklických zkouškách	60
6.3.	Fotografie cyklické zkoušky jednoosým tlakem	61
6.4.	Fotografie cyklické zkoušky prostým smykem	62
6.5.	Síla při cyklické tlakové zkoušce – minima a maxima	62
6.6.	Síla při cyklické smykové zkoušce – minima a maxima	63
6.7.	Rozměry vzorku pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem (Arcan)	63
6.8.	Fotografie přípravku pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem (Arcan)	64
6.9.	Pootočení přípravku pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem (Arcan)	64
6.10.	Vytahování pryžového vzorku bez přílošek z přípravku	65
6.11.	Vzorek typu Arcan s nalepenými kovovými příložkami a plastové vložky do přípravku	65
6.12.	Časové závislosti předepsaného posuvu pístu a změřené síly při třech různých úhlech pootočení přípravku Arcan.	66
6.13.	Závislosti změřené síly na posuvu pístu pro vzorky typu Arcan při třech různých úhlech pootočení	66
6.14.	Upnutí vzorků ve svěráku při měření tepelného stárnutí	67
6.15.	Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 0% při pokojové teplotě (23 °C)	68
6.16.	Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 0% při zvýšené teplotě (70 °C)	68
6.17.	Porovnání vlivu teploty na Mullinsův efekt u vzorků stárnoucích v nedeformovaném stavu	69
6.18.	Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 15% při zvýšené teplotě (70 °C)	70
6.19.	Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 25% při zvýšené teplotě (70 °C)	70
6.20.	Velikost zbytkové deformace při experimentu se stárnutím za zvýšené teploty	71
7.1.	Postup volby materiálového modelu, jeho kalibrace a zhodnocení.	73
7.2.	Příklad 7.1. Průběh identifikace parametrů Ogdenova modelu různými metodami v prostoru optimalizačních parametrů.	77
7.3.	Příklad 7.1. Průběh identifikace parametrů Ogdenova modelu různými metodami – rychlost konvergence.	78
7.4.	Příklad 7.2. Citlivosti cílové funkce vzhledem k jednotlivým experimentům.	80
7.5.	Počet neidentifikovatelných kombinací parametrů při různých experimentech, vykresleno v rovině koeficientů stárnutí k_R - k_S	82

7.6.	Počet neidentifikovatelných kombinací parametrů při různých experimentech, vykresleno v rovině parametrů poškození a - A	83
7.7.	Cílová funkce a její lineární aproximace	85
7.8.	Hladiny cílové funkce složené pouze z relaxace a trvalé deformace v rovině koeficientů stárnutí k_R - k_S	85
7.9.	Příklad 7.3. Citlivosti cílové funkce vzhledem k bodům měření – tečení.	86
7.10.	Příklad 7.3. Citlivosti cílové funkce vzhledem k bodům měření – trvalá deformace.	86
8.1.	Meze použitelnosti neo-Hookeovského a dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu kalibrovaných metodou nejmenších čtverců (příklad 8.1)	90
8.2.	Cílové funkce definované pomocí součtu čtverců odchylek (příklad 8.1).	90
8.3.	Meze použitelnosti neo-Hookeovského a dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu v případě parametrů identifikovaných na základě délky intervalu použitelnosti (příklad 8.1)	91
8.4.	Cílové funkce definované pomocí délky intervalu spolehlivosti (příklad 8.1).	92
8.5.	Meze použitelnosti dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu v případě reálných dat (příklad 8.1)	92
8.6.	Průběhy nominálního napětí v případě jednoosé napjatosti pro různé hodnoty parametrů Ogdenova modelu – předpoklady věty 1 jsou splněny.	94
8.7.	Průběhy nominálního napětí v případě jednoosé napjatosti pro různé hodnoty parametrů Ogdenova modelu – předpoklady věty 1 nejsou splněny.	94
A.1.	Vzorek tvaru hranolu zatěžovaný prostým smykem.	110
A.2.	Příklad A.1. Průběhy zkosu, vnitřních proměnných a nominálního napětí.	112
A.3.	Popis deformací v pootočeném přípravku Arcan	114
A.4.	Příklad A.2. Závislosti síly na předepsaném posuvu pro různé úhly natočení přípravku.	115
B.1.	Ověření citlivostní analýzy pomocí konečných diferencí – úloha s předepsanou deformací (Příklad B.1).	121
B.2.	Ověření citlivostní analýzy pomocí konečných diferencí – úloha s předepsaným nominálním napětím (Příklad B.2).	126

Seznam tabulek

3.1. Výpočetní časy MKP simulací jednoosé napjatosti s nehomogenní deformací (příklad 3.2).	16
3.2. Výpočetní časy obou diskutovaných metod výpočtu cyklického poškození (příklad 3.4)	26
7.1. Vlastní čísla a vlastní vektory kvadratických aproximací citlivostí cílové funkce pro stanovení identifikovatelnosti parametrů.	84

Seznam zkratek

- ASM – Metoda adjungované soustavy (*adjoint system method*)
BFGS – Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno, kvazinevtonovská optimalizační metoda
CDM – Continuum damage mechanics
CED – část deformační energie způsobující vznik trhlin (*cracking energy density*)
DDM – Metoda přímé diferenciacie (*direct differentiation method*)
DFP – Davidon-Fletcher-Powell, kvazinevtonovská optimalizační metoda
DIC – Digitální korelace obrazu (*digital image correlation*)
EPDM – Ethylen-propylen-dienový kaučuk
FEM² – Metoda řešení víceškálových úloh
FTIR – Infračervená spektroskopie s Fourierovou transformací
IGA – Izogeometrická analýza
MKP – Metoda konečných prvků
NMR – Spektroskopie nukleární magnetické rezonance
NR – Přírodní pryž (*natural rubber*)
NURBS – *Non uniform rational B-spline*
ODR – Obyčejné diferenciální rovnice
PDR – Parciální diferenciální rovnice
SBR – Butadien-styrenový kaučuk (*styrene-butadiene rubber*)

Seznam značení

Skalární veličiny jsou značeny italikou, tenzory prvního řádu tučnými malými písmeny, tenzory druhého řádu tučnými velkými písmeny.

Obecné vztahy a kinematika

\mathbf{C}	pravý Cauchyho-Greenův deformační tenzor
C_{10}	tuhostní parametr neo-Hookeovského hyperelastického modelu
$\text{dev} [\cdot]$	deviátor výrazu v závorkách
E	Youngův modul pružnosti
$\mathbf{E}, \hat{\mathbf{E}}$	Greenův deformační tenzor, jeho deviatorická část
\mathbf{e}_i	bázový vektor
\mathbf{F}	deformační gradient
$\bar{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{F}}, \mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2$	části deformačního gradientu odpovídající změně objemu, změně tvaru, zbytkové deformaci a elastické deformaci
$\mathbf{H}^1(\Omega)$	prostor funkcí integrovatelných na Ω v kvadrátu až do 1. zobecněné derivace (Sobolevův prostor $W^{1,2}(\Omega)$)
J	determinant deformačního gradientu, tj. poměrná objemová změna
p	hydrostatický tlak
\mathcal{R}	množina reálných čísel
$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{molK}}$	univerzální plynová konstanta
t	čas
α_i	exponenty Ogdenova hyperelastického modelu (3.8)
$\boldsymbol{\varepsilon}$	tenzor malých deformací
λ, λ_i	poměrné protažení, hlavní hodnoty poměrného protažení
μ_i	tuhostní parametry Ogdenova hyperelastického modelu (3.8)
ρ	hustota
$\boldsymbol{\sigma}$	(Cauchyho) tenzor skutečného napětí
Ψ	hustota volné Helmholtzovy energie
Ω_0, Ω	výpočetní oblast v referenční a ve zdeformované konfiguraci
$\partial\Omega_0$	hranice výpočetní oblasti

Poškození

A, a	parametry (koeficient a exponent) mocninného modelu poškození
B	součinitel modelu poškození pro malé deformace

D	míra únavového poškození
D_i	poškození a ekvivalentní napětí v i -tém bloku zatěžování
$D_{(1)}, D_{(2)}, D_{(3)}$	poškození na prvcích MKP sítě
D_0, D_1, \dots	členy asymptotického rozvoje poškození
l_1, l_2, l_3	délky segmentů tyče s proměnným průřezem
N, N_f, N_i	počet cyklů zatížení, počet cyklů do porušení, počet cyklů i -tého bloku zatěžování
N	exponent modelu poškození pro malé deformace
$\mathbf{S}, \tilde{\mathbf{S}}$	druhý Piolův-Kirchhoffův tenzor napjatosti, jeho efektivní hodnota
S_i, \tilde{S}_i	vlastní hodnoty druhého Piolova-Kirchhoffova tenzoru napjatosti a jeho efektivní hodnoty
S_{eq}	ekvivalentní napětí
$S_{\text{eq}i}$	ekvivalentní napětí v i -tém bloku zatěžování
\bar{t}, t, τ	čas v různých měřítkách (skutečný, makro- a mikroskopický)
T	délka zatěžovacího cyklu
\bar{u}	předepsaný posuv
u_0, u_1, \dots	posuvy v uzlech MKP sítě
Y	termodynamická síla sdružená s poškozením D
$\Gamma_\sigma, \Gamma_{u1}, \Gamma_{u2}$	části hranice výpočetní oblasti pro popis okrajových podmínek
ε_I	první hlavní invariant tenzoru malých deformací
λ_0, λ_A	střední hodnota a amplituda předepsaného průběhu poměrného protažení
ξ	škálový parametr časových měřítek
σ_r	relativní napětí modelu poškození pro malé deformace
σ_I	první hlavní invariant tenzoru napětí
φ^*	disipační potenciál
ϕ	obecná veličina (pro aplikaci asymptotických rozvojų)
ϕ_0, ϕ_1, \dots	členy asymptotického rozvoje obecné veličiny
ω	úhlová frekvence
$\langle \phi(t, \cdot) \rangle$	integrální průměr, viz (3.24)

Stárnutí

a_{20}, a_{30}	číselné parametry vztahu Zuzovského a Brennera pro průměrnou vodivost kompozitu
c	koncentrace kyslíku
\hat{c}	reakční člen

c_D	předepsaná hodnota koncentrace kyslíku na části hranice Γ_D^c
c_0, c_1	makroskopická a flukтуаční část koncentrace kyslíku
$\nabla c_0^{(i)}, c_1^{(i)}$	i -tý předepsaný makroskopický gradient koncentrace a jemu odpovídající flukтуаční část
$\hat{\mathbf{C}}$	izochorická část pravého Cauchyho-Greenova deformačního tenzoru
\mathbf{C}_2	elastická část pravého Cauchyho-Greenova deformačního tenzoru
\mathbf{C}_1^{-1}	vnitřní proměnná popisující zbytkovou deformaci
E_{CS}, E_R	aktivační energie štěpných reakcí a reakcí, při nichž vznikají nové vazby
ΔE	aktivační energie ve výrazu pro reakční člen (4.21)
\vec{f}	objemové síly
f_{O_2}	předepsaný bezrozměrný tok kyslíku na části hranice Γ_{O_2N}
f	frekvence cyklického zatěžování teplotou (příklad 5.3)
G_+^A, G_+^B	funkce popisující nárůst tuhosti vlivem stárnutí
\vec{j}	tok kyslíku
\dot{j}_N	předepsaná hodnota toku kyslíku na části hranice Γ_N^c
k	součinitel reakčního členu v (4.20)
k_{dif}	difuzní koeficient
k_R, k_S	koeficienty stárnutí (tvorby nových vazeb a zániku vazeb) za konstantní teploty
$k_{0R}, k_{0S}, E_{aR}, E_{aS}$	parametry teplotních závislostí součinitelů stárnutí
k_1, β_2	parametry reakčního členu v <i>dynamic-network</i> modelu
\mathbf{K}	tenzor difuzivity
K_F, K_R	difuzivita (vodivost) inkluze a matrice
K_{ij}^H	složky homogenizovaného tenzoru difuzivity
m_1, m_2, m_3	parametry Mullinsova efektu v <i>dynamic-network</i> modelu
P	operátor přiřazující si navzájem body s periodickými okrajovými podmínkami
p_{O_2}	parciální tlak kyslíku
q	testovací funkce (úloha 5.2)
q_{CS}, q_R	vnitřní proměnné vyjadřující stav štěpení vazeb a vznik nových
S	Henryho konstanta
T_{amp}	amplituda teplotní historie (příklad 5.3)

\vec{t}_N	předepsaná hodnota vektoru napětí na části hranice Γ_N^u
\vec{u}_D	předepsaná hodnota posuvů na části hranice Γ_D^u
\vec{u}_0, c_0	počáteční rozložení posuvů a koncentrace kyslíku
\mathcal{U}, \mathcal{C}	prostory přípustných řešení posuvů a koncentrace kyslíku ve slabé formulaci
\mathcal{V}, \mathcal{D}	prostory testovacích funkcí ve slabé formulaci
ν'	parametr Rayleighova vztahu pro průměrnou vodivost rovinného kompozitu
ν_{CS}, ν_R	koeficienty evolučních vztahů modelu stárnutí
α	číselný parametr Rayleighova vztahu pro průměrnou vodivost kompozitu
α_{CS}, α_R	koeficienty ve výrazu pro reakční člen (4.21)
$\Gamma, \Gamma_D, \Gamma_N$	hranice výpočetní oblasti a její části s předepsanými Dirichletovými a Neumannovými okrajovými podmínkami
γ	poměr vodivostí inkluze a matrice
Γ_D^u	část hranice, na níž jsou předepsány hodnoty posuvů
Γ_D^c	část hranice, na níž jsou předepsány hodnoty koncentrace kyslíku
Γ_N^u	část hranice, na níž je předepsán vektor napětí
Γ_N^c	část hranice, na níž je předepsán tok kyslíku
Γ_{O_2N}	část hranice, na níž je předepsán bezrozměrný tok kyslíku
δ, ξ	parametry modelu difuze ve dvousíťovém modelu pro malé deformace
Γ_{SV}	hranice mezi pevnou fází a trhlinou
Γ_P, Γ_C	část i vnější hranice výpočetní oblasti, kde jsou předepsány periodické a Dirichletovy okrajové podmínky
η, η_{\max}	součinitele poškození vlivem Mullinsova efektu v <i>dynamic-network</i> modelu
κ	poměr průměrné vodivosti kompozitu a matrice
μ	vnitřní proměnná popisující vznik nových vazeb během stárnutí
μ_{CS}, μ_R	smykové moduly jednotlivých polymerních sítí (podléhající štěpení/nově vznikající)
μ_{CS0}, μ_{R0}	smykové moduly jednotlivých polymerních sítí (podléhající štěpení/nově vznikající) na počátku stárnutí
ν	vnitřní proměnná popisující zánik vazeb během stárnutí
ξ_{O_2}	bezrozměrná koncentrace kyslíku
$\hat{\Psi}_{\max}$	maximum hustoty volné Helmholtzovy energie během zatěžování

t_0, t_1	začátek a konec časového intervalu, na kterém se řeší úloha stárnutí a poškození
$\bar{\xi}_{\text{O}_2}, \Gamma_{\text{O}_2\text{D}}$	předepsaná hodnota bezrozměrné koncentrace kyslíku a část hranice odpovídající této okrajové podmínce
$\sigma_{\text{CS}}, \sigma_{\text{R}}$	napětí v síti, která podléhá štěpení vazeb a v síti, která je tvořena nově vzniklými vazbami
σ_{yy}	složka napětí ve směru svislé osy
ϕ_V	objemový podíl inkluze
$\bar{\Psi}, \hat{\Psi}$	hustota Helmholtzovy volné energie na změnu objemu a na změnu tvaru
$\Psi_{\text{vol}}, \Psi_-, \Psi_+$	části hustoty Helmholtzovy volné energie odpovídající změně objemu, štěpení vazeb a vzniku vazeb
Ω_S, Ω_V	části výpočetní oblasti odpovídající pevné fázi a trhlině

Identifikace

$\mathbf{A}, \mathbf{b}, c$	matice, vektor a skalár určující kvadratickou aproximaci cílové funkce
A_i	vlastní čísla matice kvadratické aproximace cílové funkce
\mathcal{A}	přípustná množina parametrů
d_k	délka k -tého kroku optimalizačního algoritmu
$f, f_{\text{WRSS}}, f_{\text{exp1}}, f_{\text{exp2}}$	různé formy cílové funkce
$F_i, F(x_i; \boldsymbol{\alpha})$	experimentální data a jim odpovídající výsledek numerického modelu
$\Delta F_{\text{min}}, \Delta F_{\text{max}}$	funkce definující kritérium použitelnosti modelu (8.1)
\mathbf{g}_k	gradient v k -tém kroku metody sdružených směrů
\mathbf{H}	Hessova matice cílové funkce
\mathbf{p}_k	odkloněný gradient v k -tém kroku metody sdružených směrů
\mathbf{r}	vektor reziduí
t_j	j -tý časový okamžik měření
\mathbf{V}	Jacobiova matice vektoru reziduí
\mathbf{v}_i	vlastní vektory matice kvadratické aproximace cílové funkce
w_i, w_{ij}	váhové koeficienty
$\boldsymbol{\alpha}$	vektor neznámých parametrů modelu
$\hat{\boldsymbol{\alpha}}$	řešení optimalizační úlohy
$\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_{k+1}$	iterace řešení optimalizační úlohy
$\boldsymbol{\alpha}_0$	vektor parametrů, ve kterém byla zkonstruována kvadratická aproximace

β_k	poměr po sobě jdoucích gradientů cílové funkce (kap. 7.2.3)
γ_N	parametr omezující délku kroku Newtonovy a kvazinevtonovských metod
λ_{LM}	proměnná upravující směr postupu Levenbergovy-Marquardtovy metody
ε_i	i -tý experiment při identifikaci
ε	zastavovací podmínka (příklad 7.1)
ϵ_1, ϵ_2	parametry kritérií identifikovatelnosti (7.23)-(7.24)

Části textu

Příklad 0.1: Příklad

Ukázka použití vztahů popsaných v hlavním textu. Končí černým čtverečkem vpravo.



Úloha 0.1: Úloha

Shrnutí všech potřebných vztahů pro řešení matematické úlohy. Končí prázdným čtverečkem vpravo.



Věta 0: Věta

Matematická věta obsahující tvrzení. Končí prázdným čtverečkem vpravo.



Kapitola 1

Úvod

Názvem pryž se označují materiály různého chemického složení i vlastností, souhrnným pojmenováním pro přírodní a syntetické pryže jsou elastomery [36]. Jejich společným znakem co do složení je, že jde o směsi polymerů propojených, během procesu zvaného vulkanizace, resp. zesíťování, do trojrozměrné sítě. Vazby vzniklé během vulkanizace nepřipouští neomezené tečení materiálu, čímž se z tekutiny stává pevná látka. Mezi společné znaky týkající se mechanických vlastností patří schopnost dosahovat bez porušení velkých deformací (řádu až stovek procent), schopnost rychlého návratu do blízkosti původního tvaru po odlehčení zatížení [1] a nízká tuhost v porovnání s konvenčními materiály, resp. nízká hodnota smykového modulu pružnosti oproti objemovému.

Pryž, resp. elastomery, nachází uplatnění např. jako materiál pro výrobu:

- pneumatik,
- izolátorů vibrací (uložení motorů, ve stavebnictví, částí kol kolejových (tramvají, metra) i pásových vozidel (tanků, bagrů)),
- hadic,
- izolátorů elektrických kabelů,
- součástí oděvů (nepromokavých oděvů, obuvi),
- těsnění a prachových krytů,
- pásů malých pásových vozidel,
- hnacích řemenů,
- měchů vzduchových pružin,
- plynových balónů,
- zdravotnického materiálu,
- tzv. měkkých robotů,
- polstrování a nejrůznějších uživatelských rozhraní (povrchy výrobků, membrány membránových počítačových klávesnic, rukojeti jízdních kol a motocyklů, ochranné obaly na elektronická zařízení, apod.).

Za takto širokým výčtem aplikací patrně stojí velká variabilita nejen mechanických vlastností elastomerů (deformačních, termomechanických, difuzních), ale i jejich vlastností elektrických či chemických. Variability vlastností se dosahuje nejen volbou základního polymeru, ale také volbou příměsí a průběhem vulkanizace. Mezi vlastnosti pryžových směsí, které je žádoucí takto ovlivnit, patří nejen fyzikální vlastnosti, které rozhodují o funkci výrobku, ale v nemenší míře i jejich trvanlivost při uvážení provozních podmínek a prostředí. Trvanlivost směsi se ovlivňuje např. pomocí antioxidantů nebo antiozonantů, které zamezují chemickým změnám způsobeným přítomností kyslíku nebo ozónu.

Protože má pryž podobné mechanické vlastnosti jako některé biologické tkáně, lze k jejich modelování přistupovat obdobně a obě odvětví se navzájem doplňují. Např. pryž vyztuženou nitěmi lze modelovat týmiž konstitutivními vztahy jako cévní stěnu. Přínos této práce, resp. modelování elastomerů, tedy nemusí být omezen pouze na průmyslové využití pryže.

Hlavní motivací této práce je modelování pryžových segmentů odpružených tramvajových kol. Tyto segmenty operují v předepnutém stavu, na který jsou

superponovány nejen vibrace vznikající pohybem vozidla po nerovném povrchu, ale i zatížení vznikající při průjezdech oblouky nebo při rozjezdech a brzdění. Nejdůležitější módy namáhání jsou tlak a smyk. Kola jsou provozována při proměnné teplotě a navíc se zahřívají vlivem cyklických deformací. Podstatné pro správnou funkci kol je dostatečné předpětí, aby nedošlo k prokluzu disku kola vůči obruči při rozjezdu či brzdění. Jako vhodný cíl modelování segmentů se tedy nabízí stanovit změny mechanických vlastností segmentů (např. změnu tuhosti a velikost trvalých deformací) a následně navrhnout plán údržby (dotazení předepínacích šroubů nebo výměnu segmentů). Protože uvedené segmenty, podobně jako jiná vibrozolační zařízení, obvykle mají nezanedbatelnou tloušťku, nelze zanedbat vliv difuze kyslíku uvnitř součástky. Proto je tomuto jevu věnována pozornost. Mezi materiály používané v této aplikaci patří syntetická izopren-butadienová pryž plněná sazemi nebo etylen-propylenová pryž (EPDM), experimentální pozorování uvedená zde tedy pocházejí převážně ze zkoušek těchto materiálů.

Na základě předchozího výzkumu a rešerše byly stanoveny tyto **cíle dizertační práce**:

1. Navrhnout model pryže, který bude uvažovat vliv mikromechanického poškození a stárnutí.
2. Navrhnout metodu identifikace parametrů modelu.
3. Určit meze použitelnosti identifikovaných parametrů.

Těmto cílům odpovídá i struktura a obsah této práce. Kapitola 2 této práce shrnuje současný stav poznání vybraných aspektů vyšetřování mechanických vlastností pryže. Hlavními sledovanými jevy jsou únavové poškození a chemické stárnutí pryže. V případě obou témat je sledováno jak jejich experimentální vyšetřování, tak konstitutivní modelování i numerické řešení okrajových úloh.

Kapitola 3 popisuje modelování únavového poškození pomocí mechaniky kontinua (tzv. *continuum damage mechanics*), kdy se předpokládá vznik a kumulace mikroskopických trhlin působením cyklického zatížení. Tento přístup umožňuje snadnou implementaci numerického řešení pomocí metody konečných prvků.

Kapitola 4 se zabývá popisem chemických změn materiálu a jejich vlivem na jeho mechanické vlastnosti. Difuze kyslíku a vliv chemických reakcí je modelován difuzní rovnicí s přidaným reakčním členem, jejíž numerická implementace je opět velmi přímočará.

Souhrnný materiálový model uvažující chemické stárnutí i únavové poškození je uveden v kap. 5. Na jednoduchých příkladech jsou ilustrovány hlavní vlastnosti tohoto modelu. V závěru kapitoly jsou popsány numerické simulace difuze kyslíku v poškozeném médiu.

Experimentům je věnována samostatná kapitola 6. V ní jsou popsány jak metody obvyklé při zkoumání únavy a stárnutí pryže, tak konkrétní zkoušky provedené autorem v průběhu studia.

Poslední částí práce je metoda identifikace parametrů modelu a její vlastnosti, popsána v kapitolách 7 a 8. Mezi důležité vlastnosti identifikace jsou zde zařazeny především: (i) experimentální data potřebná pro řešení úlohy identifikace, (ii) vliv množství a kvality experimentálních dat na podmíněnost úlohy identifikace a (iii) kvalita výsledku, která je vyjádřena mezemi použitelnosti identifikovaných parametrů. Navržený způsob identifikace je vyjádřen jako nelineární úloha nejmenších

čtverců řešená gradientním algoritmem. Díky tomu lze snadno vyjádřit vlastnosti této metody prostřednictvím hodnot cílové funkce a pomocí citlivostní analýzy.

Kapitola 2

Současný stav

Vzhledem ke složité struktuře a složení pryže a podobných elastomerů lze v jejich mechanickém chování pozorovat celou řadu různých jevů, které jsou způsobeny množstvím rozdílných mechanismů. Tyto mechanismy se liší jak svojí povahou – zda jde o procesy fyzikální či chemické – tak i měřítkem, na kterém se projevují. Zaměření na změny mechanických vlastností přináší další úroveň složitosti. Interpretace výsledků či představa o mechanismech se u různých autorů mnohdy liší a v některých případech dokonce trvá stav, kdy dosud nebylo dosaženo shody.

Úkol popsat změnu mechanických vlastností v sobě samozřejmě zahrnuje i popis vlastností samotných. Součástí výsledku tedy je jak stanovení množiny vlastností, které má model popsat, tak stanovení vlivů, které budou považovány za dostatečně významné. V případě pryže je samotný popis mechanických vlastností velmi složitý problém a prakticky každý model popisuje pouze jistou podmnožinu vlastností skutečného materiálu. Mezi prvky této podmnožiny lze nejčastěji narazit na:

- Vztah mezi napětím a deformací; v případě pryže některý z hyperelastických modelů, případně i model viskoelasticity nebo deformačního změkčení.
- Složky komplexního modulu, které popisují viskoelastické vlastnosti materiálu [95].
- Zbytková pevnost.
- Zbytková deformace (někdy uváděna jako trvalá).
- Hystereze.

Podobně i změna těchto vlastností může záviset na nejrůznějších vlivech. Jako nejčastější příklady provozních podmínek, které vlastnosti pryže ovlivňují, lze uvést:

- Mechanické zatížení, tedy deformaci součástky předepsanými posuvy nebo silou, případně i prostřednictvím kontaktu. Sem patří parametry jako např. minimum nebo maximum zatížení, jeho střední hodnota, součinitel nesymetrie kmitu (tzv. *R-ratio*) apod. Zatížení může být předepisováno buď jako deformace, napětí nebo pomocí energie.
- Působení teploty, které je obvykle příčinou vratných změn v mikroskopické struktuře pryže (tzv. fyzikálního stárnutí).
- Chemické působení prostředí, které vede k nevratným změnám v chemickém složení pryže (tzv. chemické stárnutí).

Kromě provozních podmínek je ovšem míra i povaha vyvolaných změn závislá i na [69]

- Složení materiálu, tj. typu polymeru, použitém plnivu, speciálních přísadách a způsobu vulkanizace.
- Samotných mechanických vlastnostech materiálu, tj. vztahu mezi napětím a deformací, Mullinsově efektu, viskoelastických vlastnostech nebo krystalizací způsobené deformací (*Strain-crystallization, strain-induced crystallization*). Tyto vlastnosti totiž ovlivňují stav napětí v okolí čela trhliny, tím i její šíření a v konečném důsledku i kumulaci poškození.

Patrně první prací, která popisuje pokles tuhosti při opakovaném zatěžování, je článek [21]. Holt [51] uvádí vliv cyklického zatěžování měřený pomocí zařízení vlastní konstrukce na vzorcích tvaru kroužku. Velmi podrobně zkoumal později tyto změny Mullins, proto je uvedený pokles tuhosti nazýván Mullinsovým efektem. Ve svém článku [76] popisuje experimenty, při kterých byly sledovány jak změny v závislosti napětí-deformace, tak změny elektrické vodivosti. Z jeho pozorování plyne, že vlastnosti neplněné směsi jsou předchozí opakovanou deformací ovlivněny jen málo, na rozdíl od směsi s obsahem plniva. V pozdějších publikacích se věnoval závislosti elastických vlastností na nejvyšší dosažené deformaci [77] a navrhnul i model této závislosti pro jednoosou napjatost [78]. Mullinsovův efekt byl v minulosti poměrně hojně zkoumán. Diani [29] uvádí na základě rešerše literatury několik mechanismů deformačního změkčení:

- přerušování vazeb (*bond rupture*),
- porušení plniva (*filler rupture*),
- klouzání molekul (*molecules slipping*),
- rozpletení molekul (*disentanglement*) a
- porušení vrstvy kolem částic plniva (*double-layer model*).

Existuje velké množství fenomenologických modelů deformačního změkčení, které mají většinou příznivé matematické vlastnosti a používají se při numerickém modelování [39, 40, 41, 84, 83]. Ogdenův-Roxburghův pseudoelastický model [83] je oproti jiným modelům a popisu pomocí *continuum damage mechanics* (viz kap. 3) stabilnější [44, 45, 42]. Navíc odstraňuje vazbu mezi jednotlivými aspekty modelu (mezi nelineární elasticitou a poklesem tuhosti), což je výhodné při identifikaci parametrů.

Dosud uvedené modely Mullinsova efektu byly izotropní. Experimentální výsledky [76, 77, 28] však ukazují existenci jevu zvaného *indukovaná anizotropie*, tj. stavu kdy deformace materiálu vede k různé změně mechanických vlastností v různých směrech. Mullins [76] tento jev vyšetřoval pomocí bobtnání vzorků v rozpouštědle. Přestože je modelování anizotropního poškození důkladně zpracováno (viz např. [79]), zkoumání tohoto jevu u pryže je záležitostí spíše nedávné doby [28, 25, 31, 72, 87, 68, 96, 85].

Ke zkoumání životnosti konstrukcí se používají dva přístupy [69, 71]. Prvním z nich je výpočet šíření existující trhliny (tzv. *crack growth*). K tomu je nutné znát kromě mechanických vlastností materiálu i geometrii trhliny. Druhým způsobem, jak posuzovat životnost, je vyjádřit kumulaci poškození (*crack nucleation*). Tento přístup používá veličiny známé z mechaniky kontinua.

V případě elastomerů je velkou výzvou zkoumání životnosti při víceosém namáhání. Náročná je jak realizace experimentů, tak matematický popis. K experimentálnímu vyšetřování mechanických vlastností elastomerů při víceosém namáhání (tj. i životnosti) se velmi často používají trhací stroje, které umožňují zatížit vzorek kombinací tahu/tlaku a krutu. Vzorky pro takový typ zkoušek jsou obvykle rotačně symetrické se zúženou střední částí, která zajišťuje, že makroskopické trhliny vznikají především v této oblasti. Jednotlivé typy těchto vzorků se liší přesnými rozměry, jsou ale často používané [63, 89, 6, 98, 30]. Mars a Fatemi [70] navrhli pro zkoumání životnosti a vzniku trhlín vzorek tvaru prstence. Pro tento tvar vzorku jsou známy analytické vztahy pro všechny složky deformace.

Zcela jiným typem vzorku je vzorek pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem, tzv. Arcan [38]. Ten je více podobný vzorku pro čistý smyk a (podobně jako vzorek pro čistý smyk) jej lze použít i pro pozorování šíření trhliny. Na rozdíl od výše uvedených vzorků pro tah/kрут ovšem jeho konstrukce umožňuje pouze proporcionální zatěžování. Poměr tahové a smykové složky deformace je totiž pevně dán natočením přípravku v čelistech trhačického stroje.

Protože je rozložení deformace při víceosém namáhání takřka vždy nehomogenní, je nutné věnovat zvýšenou pozornost i tomuto aspektu. Často se používají videoextenzometry nebo optické extenzometry. Pro měření pole deformací na celém povrchu vzorku lze použít metodu digitální korelace obrazu (*digital image correlation*, DIC), která ovšem není vhodná pro řízení průběhu zatěžování v reálném čase.

V neposlední řadě hraje při experimentálním zkoumání životnosti významnou roli i způsob jakým se definuje porušení vzorku [47, 48]. Obvyklé způsoby definice porušení jsou: (i) výrazný pokles tuhosti vzorku vzhledem k určenému referenčnímu cyklu nebo (ii) vznik trhliny stanovené délky.

Na rozdíl od Mullinsova efektu probíhá kumulace poškození i při cyklech pod maximální dosavadní hodnotou zatížení. Fyzikální mechanismy změn mechanických vlastností jsou přitom obvykle podobné jako u Mullinsova efektu. Pro matematický popis kumulace únavového poškození se používají následující řídicí veličiny, [69, 10]:

- největší hlavní deformace,
- největší hlavní napětí [5, 2],
- hustota deformační energie,
- část deformační energie způsobující vznik trhlín (*cracking energy density* – CED),
- Eshelbyho tenzor, např. J -integrál.

Pro výpočet životnosti při zatížení s proměnnou amplitudou se často používá Minerova lineární hypotéza [73]. Hypotézy kumulace poškození jsou většinou založeny na experimentech s konkrétním materiálem a typem zatížení, [10]. Sun et al. [92] zjistili při experimentech na různých směsích, že při zatěžování s rostoucí amplitudou deformace dochází k rychlejšímu poklesu zbytkové pevnosti než při zatěžování s klesající amplitudou. Harbour et al. [47] naproti tomu, na základě experimentů s přírodní pryží (NR) a butadien-styrenovou pryží (SBR), považují Minerovu hypotézu za postačující, přičemž lepší shody bylo dosaženo v případě NR.

Důležitým pojmem v matematickém popisu životnosti při víceosém namáhání je tzv. princip ekvivalence. Spočívá ve výběru vhodného skalárního parametru, jehož konstantní hodnota potom určuje ekvivalentní způsoby zatěžování při různých módech deformace. Mezi v minulosti používané skalární parametry patří největší hlavní deformace, největší hlavní napětí a hustota deformační energie. V současné době se ovšem používá především CED ve spojení s analýzou kritické roviny.

Samotný výpočet životnosti se v případě pryže obvykle řeší tak, že se pro známé zatížení v numerickém modelu najde kritické místo, ve smyslu zvoleného parametru ekvivalence, a pro něj se analyticky určí počet cyklů do porušení. Pokud se zatížení skládá z více sekvencí, které mají např. různou amplitudu, použije se některá z hypotéz kumulace poškození.

Continuum damage mechanics (CDM) je způsob vyjádření změn mechanických vlastností pomocí nástrojů mechaniky kontinua. Nejčastěji se takto vyjadřuje závislost vztahu napětí-deformace na předchozím zatížení. CDM se často používá ve spojení s plasticitou pro popis vlastností kovů i kompozitních materiálů. Podrobnější výklad je obsahem kap. 3. Některé z výše uvedených modelů Mullinsova efektu byly odvozeny použitím CDM [39, 84].

Ke změnám ve složení a vlastnostech materiálu dochází, kromě mechanického zatěžování, také prostým vystavením materiálu vlivům prostředí. Například zvýšené teplotě, atmosféře obsahující kyslík nebo ozon, mořské vodě, prostředí obsahující různá rozpouštědla nebo elektromagnetickému záření.

Tyto změny, obvykle označované jako stárnutí, lze podle povahy změn ve složení a struktuře materiálu rozlišit na fyzikální a chemické [50]. Za fyzikální stárnutí se označuje takové, které nemění chemické složení materiálu a díky tomu jde často o vratné změny. Při chemickém stárnutí se naproti tomu tvoří nové chemické vazby v polymerní síti. Rychlost tvorby těchto vazeb závisí nejen na fyzikálních podmínkách, ale i na koncentraci příslušného činidla (např. kyslíku, ozonu). Stárnutí je nezanedbatelným jevem nejen v případě elastomerů, ale i v případě jiných polymerních materiálů [91, 33, 90].

Značná část literatury charakterizuje vliv stárnutí pomocí tabulkových parametrů materiálu, jako jsou např. pevnost v tahu nebo tažnost (např. [17]). Obecný konstitutivní vztah, který popisuje změny mechanických vlastností materiálu vlivem chemického stárnutí popsali Lion a Jöhlitz [66].

Brown [22] popisuje několik způsobů, jak kvantifikovat míru degradace vlivem stárnutí. V případě reálných dílů je na místě použít veličinu, která je pro funkci součástky zásadní. Pokud je ovšem cílem posoudit skutečné změny ve struktuře materiálu, hodí se provést chemický rozbor nebo měření absorpce kyslíku [50]. Ben Hassine et al. [17] zjišťovali změny v zesíťování EPDM pomocí bobtnání v rozpouštědle. Le Gac et al. [64] porovnávali přirozené a urychlené stárnutí silikou plněné chloroprenové pryže jak pomocí spektroskopie (infračervená spektroskopie - FTIR, spektroskopie nukleární magnetické rezonance - NMR), tak prostřednictvím mechanických testů (tahová zkouška, indentace).

Techniky experimentálního zkoumání vlivu stárnutí na mechanické vlastnosti lze rozdělit do dvou skupin: (i) kontinuální měření během procesu stárnutí a (ii) krátkodobé testy, při nichž je vzorek vyňat ze zkoumaného prostředí (tzv. *intermittent measurements*).

Kontinuální měření vyžaduje konstrukci speciálního zařízení, které umožňuje např. snímat působící sílu deformovaného vzorku umístěného v peci [74, 55]. Druhý přístup k měření naproti tomu nevyžaduje neobvyklé vybavení a provedení zkoušek je snadnější, ovšem za cenu větších nepřesností [22]. Je vhodným doplňkem kontinuálních testů, neboť umožňuje provést všechna obvyklá měření mechanických vlastností. Navíc nejsou tato měření tolik náchylná na regulaci podmínek, neboť jde o krátkodobá měření.

Změřený pokles síly při kontinuálních testech (např. [93, 55]) odpovídá degradativním procesům v polymerní síti. Probíhají-li při těchto testech i procesy, při nichž vznikají nové vazby, děje se tak v rovnováze, a tedy bez vlivu na napjatost. Toto platí, pokud viskózní deformace nejsou dominantní. Naproti tomu při krátkodobých testech zahrnuje změna měřené síly oba typy reakcí [93].

Wei et al. [95] měřili změnu komplexního modulu plněných pryží vlivem stárnutí. Zjistili m.j., že vzorky držené v deformovaném stavu stárnou rychleji.

Jinou motivaci lze spatřit ve výzkumu urychleného stárnutí materiálu. V tomto případě je cílem pomocí vhodné volby podmínek nahradit neúnosně dlouhý test testem s výrazně kratším trváním. Výsledky takového výzkumu mají mimořádný význam při testování průmyslových produktů. Urychleného stárnutí se obvykle dosahuje pomocí zvýšené teploty [52, 94, 16, 64].

Úvahy uvedené až dosud vedou na formulaci matematických modelů vyjádřených soustavami parciálních diferenciálních rovnic (PDR). V některých speciálních případech se tyto soustavy zjednoduší takovým způsobem, že lze nalézt řešení v uzavřeném tvaru. Obecnějším přístupem k modelování je numerické řešení. V současnosti je při řešení úloh mechaniky pevných těles patrně nejpoužívanější metoda konečných prvků (MKP). Použití ostatních metod, např. metody hraničních prvků, metody konečných objemů nebo částicových metod, je spíše okrajovou záležitostí.

Nedávným objevem je tzv. izogeometrická analýza (IGA), která spočívá v jednotném popisu tvaru tělesa i jeho deformace [53]. Posuvy jsou tedy vyjádřeny jako lineární kombinace stejných bázových funkcí, kterými je popsán tvar součástky (např. NURBS nebo T-spline). Uvedenou reprezentaci lze použít ve spojení s metodou vážených reziduí (tzv. galerkinovský přístup), čímž vznikne obdoba MKP. Izogeometrická kolokace [8] je způsob, jak snížit výpočetní náročnost takového postupu u bázových funkcí vyšších řádů. Její základní myšlenkou je využít zaručenou hladkost bázových funkcí a vyjádřit řídicí diferenciální rovnice ve vhodně zvolených bodech tělesa silnou formulací. Hlavní myšlenkou IGA bylo původně zefektivnit proces vývoje nových produktů, ale ukázalo se, že nový popis je výhodný i z pohledu numerických vlastností.

Pro modelování pryže jsou v tomto ohledu zajímavé kontaktní úlohy, při kterých se osvědčila izogeometrická kolokace [26, 61]. Při modelování dynamických kontaktních úloh se ovšem neosvědčila [60].

Podmínkou přesného modelování jakéhokoliv zařízení či podobné mechanické soustavy je číselné stanovení parametrů konstitutivních vztahů - jejich tzv. identifikace. Velká pozornost je v současnosti věnována identifikaci ve smyslu zjišťování prostorového rozložení elastických vlastností v tělese [20]. Přestože tato úloha nemusí být v případě pryže bez zajímavosti (např. za účelem vyšetření míry změn mechanických vlastností v různých oblastech tělesa) a přestože se různé metody a postupy mohou překrývat, zaměřením této práce je identifikace parametrů konstitutivního vztahu na základě co nejjednodušších zkoušek, přičemž je ve vzorcích dosahováno pokud možno homogenního stavu deformace. Možnou výjimkou z právě uvedeného popisu je způsob identifikace parametrů nelineárního modelu, kdy je ve vzorku záměrně dosaženo nehomogenní deformace a snímek jednoho časového okamžiku umožňuje nahradit jednodušší monotonní test [9, 75]. Tento postup byl použit např. pro identifikaci elastoplastického modelu [43].

Proces identifikace parametrů konstitutivního vztahu v sobě zahrnuje několik dílčích úloh. Zejména je to výběr experimentů, které je nutné provést, aby vůbec bylo možné z naměřených dat parametry identifikovat. V případě anizotropního materiálu je na příklad nutné provést tahové zkoušky ve více směrech. Stejně tak v případě nelineárně elastického materiálu obvykle nestačí jeden mód deformace [v4]. Podobně v případech, kdy je žádoucí zachytit časovou závislost, musí být

vhodně zvolen časový průběh zatěžování - obvykle ve tvaru cyklů, relaxace nebo tečení (*creepu*) [18].

Nutnost provádět mechanické zkoušky při více módech deformace vede automaticky na vícekritériální optimalizaci. To s sebou nese i více možností, jak definovat cílovou funkci. Na rozdíl např. od optimalizace konstrukcí by změny jednotlivých kritérií neměly působit proti sobě a není tedy na místě používat Paretovo kritérium optimality. Z tohoto důvodu se při identifikaci jako cílová funkce obvykle používá lineární kombinace dílčích kritérií.

Bambach et al. [13] porovnávají tři typy cílové funkce:

- součet čtverců odchylek,
- součet čtverců odchylek směrnic a
- lineární kombinaci obou způsobů,

přičemž nejlepších výsledků je dosaženo použitím poslední formulace.

Zásadní, přitom nepříliš zpracovanou (v případě nelineárních modelů), otázkou je řešitelnost úlohy identifikace. Závisí na zvoleném materiálovém modelu, na tvaru cílové funkce i na experimentálních datech. Rešerši obecných kritérií identifikovatelnosti lze nalézt např. v [32]. Častým nástrojem pro vyšetřování identifikovatelnosti parametrů je citlivostní analýza [23]. Bambach et al. [13] použili korelační matice pro vyjádření kritéria identifikovatelnosti parametrů nelineárního modelu plasticity.

Citlivostní analýza slouží nejen k posouzení identifikovatelnosti parametrů, ale je i součástí gradientních algoritmů numerické optimalizace. V jednoduchých případech (např. homogenní deformace) ji lze obvykle provést analyticky. Je-li stavová úloha řešena numericky, lze gradient vyčíslit pomocí konečných diferencí. Výhodou tohoto postupu je minimální úsilí potřebné pro implementaci. Existují ovšem i postupy, jak odvodit citlivostní analýzu přímo na základě vztahů popisujících stavovou úlohu. Přehledný výklad lze nalézt např. v [58]. Mezi základní metody patří metoda přímé diferenciace (*direct differentiation method*, DDM) a metoda adjungované soustavy (*adjoint system method*, ASM). Rohan a Cimrman [88] popisují použití a výpočetní náročnost obou metod v případě identifikace nelineárního viskoelastického materiálu s aktivními vlákny. Z jejich numerického experimentu lze soudit, že DDM je oproti ASM výhodnější při větším množství dat a nižším počtu identifikovaných parametrů.

Kapitola 3

Modelování únavového poškození

Obvyklý postup při vyhodnocování životnosti strojní součásti spočívá ve stanovení poškození od jednotlivých zátěžných stavů a následně určení počtu cyklů do porušení při předepsané sekvenci zatěžování. Podobné postupy jsou často uplatňovány i v případě pryže.

V této práci byl zvolen poněkud jiný postup, spočívající ve využití nelineárních pravidel kumulace poškození a transientní simulaci celého průběhu zatěžování v časové oblasti. Tento postup není tak obvyklý patrně kvůli neúnosné náročnosti zmíněných simulací, což by se ovšem mohlo změnit díky stále trvajícím pokrokům v možnostech výpočetní techniky (konkrétně paralelizaci, po stránce hardwaru i softwaru), ale především díky rozvoji víceškálového modelování v časové oblasti, jehož se týká druhá část této kapitoly. První část je shrnutím jednoho ze základních modelů únavového poškození pryže, u kterého sice byly demonstrovány některé nedostatky, ovšem bez použití plné simulace v čase, bez níž např. nelze zohlednit rozdíly ve tvaru zatěžování.

3.1 Konstitutivní model

Model je převzat z článků Ayouba et al. [12, 11]. Je zavedena skalární vnitřní proměnná $D \in \langle 0, 1 \rangle$, která vyjadřuje míru izotropního poškození materiálu. Dále je zaveden pojem efektivního napětí $\tilde{\mathbf{S}}$, přičemž vztah s druhým Piolovým-Kirchhoffovým tenzorem napjatosti \mathbf{S} je

$$\mathbf{S} = (1 - D) \tilde{\mathbf{S}} \quad (3.1)$$

a formálně podobný vztah platí i pro hlavní napětí S_i :

$$S_i = (1 - D) \tilde{S}_i . \quad (3.2)$$

Evoluční vztah pro vnitřní proměnnou D je podle [65]

$$\dot{D} = -\frac{\partial \varphi^*}{\partial Y} , \quad (3.3)$$

kde φ^* je tzv. disipační potenciál a Y je termodynamická síla sdružená s poškozením D , která je definována jako

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} . \quad (3.4)$$

Protože hustota deformační energie je funkcí hlavních protažení, $\Psi = \Psi(\lambda_i, D)$, lze termodynamickou sílu Y vyjádřit jako

$$Y = -\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_i} \frac{\partial \lambda_i}{\partial D} . \quad (3.5)$$

Derivaci \tilde{S}_i podle D lze s uvážením (3.2) zapsat jako

$$\frac{\partial \tilde{S}_i}{\partial D} = \frac{S_i}{(1 - D)^2} = \frac{\partial S_i}{\partial \lambda_i} \frac{\partial \lambda_i}{\partial D} . \quad (3.6)$$

Kombinací rovnic (3.2) a (3.6) vyjde

$$\frac{\partial \lambda_i}{\partial D} = \frac{\tilde{S}_i}{(1-D) \frac{\partial \tilde{S}_i}{\partial \lambda_i}} . \quad (3.7)$$

Model poškozění je nezávislý na zvoleném tvaru hustoty deformační energie, nicméně v člancích [12] a [11] se předpokládá Ogdenův model

$$\Psi = \sum_i \frac{\mu_i}{\alpha_i} (\lambda_1^{\alpha_i} + \lambda_2^{\alpha_i} + \lambda_3^{\alpha_i} - 3) , \quad (3.8)$$

kde μ_i a α_i jsou parametry modelu a $\lambda_j, j \in \{1, 2, 3\}$ jsou hlavní protažení. Vztah pro termodynamickou sílu y se v případě Ogdenova modelu zapíše jako

$$Y = -\frac{S_{\text{eq}}}{1-D} , \quad (3.9)$$

kde ekvivalentní napětí S_{eq} je [11]

$$S_{\text{eq}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\tilde{S}_i}{\frac{\partial \tilde{S}_i}{\partial \lambda_i}} \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_i} = \sum_{i=1}^3 \frac{\left(\sum_{j=1}^N \mu_j \lambda_i^{\alpha_j-2} + p \lambda_i^{-2} \right) \left(\sum_{j=1}^N \mu_j \lambda_i^{\alpha_j-1} + p \lambda_i^{-1} \right)}{\sum_{j=1}^N \mu_j (\alpha_j - 2) \lambda_i^{\alpha_j-3} + \frac{\partial p}{\partial \lambda_i} \lambda_i^{-2} - 2p \lambda_i^{-3}} , \quad (3.10)$$

kde p je hydrostatický tlak, který je v případě zde uvažovaného nestlačitelného materiálu nezávislý na deformaci a je nutné jej určit pomocí okrajových podmínek úlohy.

Disipační potenciál je v [12] zvolen podle [65] jako¹

$$\varphi^* = \frac{1}{A(a+1)} (-AY)^{a+1} , \quad (3.11)$$

kde A a a jsou materiálové parametry. Evoluční vztah (3.3) je po dosazení (3.11) a (3.9)

$$\dot{D} = \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1-D)} \right)^a . \quad (3.12)$$

Autoři dále uvádí [12, 11] ještě použití modelu pro cyklické zatížení a výpočet počtu cyklů do porušení. Tento postup nebyl autorem nikdy přímo použit, nicméně je zde pro úplnost uveden. Ve vztahu (3.12) se čas nahradí počtem cyklů N :

$$\frac{\partial D}{\partial N} = \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1-D)} \right)^a . \quad (3.13)$$

Metodou separace proměnných lze poté odvodit vztah pro hodnotu poškozění po N cyklech zatížení:

$$\int_0^D (1-D)^a dD = \int_0^N (A S_{\text{eq}})^a dN \quad \Rightarrow \quad (3.14)$$

¹ V této práci je na rozdíl od původního textu používána převrácená hodnota součinitele A – zde uvedené vztahy už jsou upraveny.

$$\Rightarrow D = 1 - (1 - (1 + a) (A S_{\text{eq}})^a N)^{1/(1+a)} . \quad (3.15)$$

Počet cyklů do porušení se odvodí z podmínky $D = D_f = 1$ jako

$$N_f = \frac{1}{1+a} \frac{1}{A S_{\text{eq}}^a} . \quad (3.16)$$

Zobecněný vztah pro poškození při n blocích víceúrovňového zatěžování je [11]

$$D_i = 1 - \left((1 - D_{i-1})^{1+a} - (1 + a) (A S_{\text{eq}})^a N_i \right)^{1/(1+a)} \quad (3.17)$$

a obecná podmínka pro určení počtu cyklů do porušení je

$$\int_0^{D_f=1} (1 - D)^a dD = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{N_i}^{N_{i+1}} (A S_{\text{eq}(i+1)})^a dN . \quad (3.18)$$

3.2 Použití metody asymptotických rozvoju

V konferenčních příspěvcích [v20, v19] a článku [v1] byl na výpočet kumulace poškození aplikován postup využívající metodu asymptotických rozvoju pro odvození evolučního vztahu s homogenizovaným koeficientem. Tato metoda již byla dříve použita pro řešení úloh kumulace únavového poškození při malých deformacích [27], či úlohy plasticity [7, 46, 19]. V nedávné době byla metoda homogenizace parabolických rovnic formalizována pomocí tzv. *unfolding* operátoru, jehož použití je obvyklé při víceškálovém modelování v prostoru [3].

Skutečný čas se pro potřeby této kapitoly přeznačí na \bar{t} . Navíc se zavedou další dvě časové proměnné: „pomalý“ čas t a „rychlý“ čas τ , pro které platí

$$\bar{t} = t + T \tau , \quad \tau = \frac{t}{\xi} , \quad \xi \rightarrow 0 , \quad (3.19)$$

kde T je délka zatěžovacího cyklu. Veličina ϕ , která je funkcí času, může být potom vyjádřena jako funkce těchto dvou nových časových proměnných:

$$\phi = \phi(t, \tau) . \quad (3.20)$$

Totální derivaci veličiny ϕ podle skutečného času \bar{t} lze potom rozepsat pomocí pravidla o derivování složené funkce jako

$$\frac{d\phi}{d\bar{t}} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\tau} . \quad (3.21)$$

Dále se předpokládá, že veličinu ϕ lze zapsat ve tvaru asymptotického rozvoje

$$\phi(t, \tau) = \sum_i \xi^i \phi_i(t, \tau) = \phi_0(t, \tau) + \xi \phi_1(t, \tau) + \mathcal{O}(\xi^2) . \quad (3.22)$$

Dosazením (3.22) do (3.21) vyjde vztah pro časovou derivaci ϕ

$$\frac{d\phi}{d\bar{t}} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial\phi_0}{\partial\tau} + \frac{\partial\phi_0}{\partial t} + \frac{\partial\phi_1}{\partial\tau} + \xi \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial t} + \frac{\partial\phi_2}{\partial\tau} \right) + \mathcal{O}(\xi^2) . \quad (3.23)$$

Integrální průměr přes časový interval $\langle 0, T \rangle$ je definován vztahem

$$\langle \phi(t, \cdot) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \phi(t, \tau) d\tau . \quad (3.24)$$

Je-li funkce ϕ periodická v τ , platí

$$\left\langle \frac{\partial \phi}{\partial \tau}(t, \cdot) \right\rangle = 0 . \quad (3.25)$$

Použití výše uvedených vztahů pro modelování únavového poškození je následující. Poškození D se zapíše pomocí asymptotického rozvoje (3.22)

$$D(t, \tau) = D_0(t, \tau) + \xi D_1(t, \tau) + \dots \quad (3.26)$$

a jeho časová derivace, pomocí (3.23), jako

$$\dot{D}(t, \tau) = \frac{1}{\xi} \frac{\partial D_0}{\partial \tau} + \frac{\partial D_0}{\partial t} + \frac{\partial D_1}{\partial \tau} + \dots \quad (3.27)$$

Dosazením vztahů (3.26) a (3.27) do evoluční rovnice (3.12) vyjde

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial D_0}{\partial \tau} + \frac{\partial D_0}{\partial t} + \frac{\partial D_1}{\partial \tau} + \dots = \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1 - D_0 - \xi D_1 - \dots)} \right)^a . \quad (3.28)$$

Taylorův rozvoj pravé strany v okolí $\xi = 0$ je

$$0 \xi^{-1} + \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1 - D_0)} \right)^a + \frac{D_1 a}{1 - D_0} \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1 - D_0)} \right)^a \xi + \dots \quad (3.29)$$

Porovnáním členů se stejnými mocninami ξ vyjdou následující rovnice (použity jsou zde pouze první dvě):

$$\xi^{-1} : \frac{\partial D_0}{\partial \tau} = 0 , \quad (3.30)$$

$$\xi^0 : \frac{\partial D_0}{\partial t} + \frac{\partial D_1}{\partial \tau} = \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1 - D_0)} \right)^a . \quad (3.31)$$

Vztah (3.30) znamená, že složka D_0 závisí pouze na „pomalém“ čase t . Druhá rovnice poslouží pro odvození evolučního vztahu pro pomalou složku poškození D_0 . Na obě strany se aplikuje integrální průměr (3.24). Levá strana se díky linearitě operátoru a s použitím vlastnosti (3.25) zjednoduší na

$$\left\langle \frac{\partial D_0}{\partial t} + \frac{\partial D_1}{\partial \tau} \right\rangle = \frac{\partial D_0}{\partial t} . \quad (3.32)$$

Jediný člen na pravé straně, který závisí na rychlém čase τ , je ekvivalentní napětí S_{eq} , proto se pravá strana upraví následovně:

$$\left\langle \left(\frac{A S_{\text{eq}}}{(1 - D_0)} \right)^a \right\rangle = \frac{A^a \langle S_{\text{eq}}^a \rangle}{(1 - D_0)^a} . \quad (3.33)$$

Evoluční vztah pro pomalou složku poškození vyjde, s přihlédnutím ke vztahu (3.30),

$$\frac{dD_0}{dt} = \frac{\partial D_0}{\partial t} = \frac{A^a \langle S_{\text{eq}}^a \rangle}{(1 - D_0)^a}. \quad (3.34)$$

Význam vztahu (3.34) při výpočtech životnosti je ten, že při použití nelineárního vztahu pro kumulaci poškození není nutné provádět v časové oblasti plnou simulaci všech cyklů, která by vedla na neúnosné množství časových hladin. Místo toho se časový interval diskretizuje výrazně hrubším dělením, než je počet cyklů, na každé časové hladině se vyřeší pouze jeden zatěžovací cyklus a pomocí vztahu (3.34) se řeší pouze průběh pomalé složky poškození. Použití modelu homogenizovaného v časové oblasti není závislé na prostorové a do jisté míry ani časové diskretizaci v tom smyslu, že lze použít různé numerické řešiče. Na příkladech ve zbytku této kapitoly je ukázáno použití homogenizovaného modelu při numerických výpočtech kumulace poškození v případě jednoosé napjatosti a homogenních deformací (příklad 3.1) a ve složitějších případech, kdy je prostorová diskretizace provedena metodou konečných prvků (příklady 3.3 a 3.4).

Příklad 3.1: Jednoosá napjatost s homogenní deformací

Modely poškození (3.12) a (3.34) byly upraveny pro případ homogenní deformace a jednoosé napjatosti. Pomocí řešiče LSODE byly provedeny výpočty s různým počtem časových hladin na jeden cyklus zatěžování. Materiálový model s parametry $A = \frac{1}{2}$ Pa, $a = 2$ byl nejdříve podroben cyklické deformaci s předepsaným protažením

$$\lambda(t) = \lambda_0 + \lambda_A \sin(\omega t), \quad (3.35)$$

s parametry

$$\lambda_0 = 1,1, \quad \lambda_A = 0,1, \quad \omega = 2\pi \text{ rad/s}, \quad t_1 = 1500 \text{ s}. \quad (3.36)$$

Výsledky simulací s různou časovou diskretizací jsou na obr. 3.1, porovnávány jsou případy s 11, 41 a 81 časovými hladinami na jeden zatěžovací cyklus. Rozdíly v řešení jsou patrné jak mezi jednotlivými případy plné integrace, tak mezi řešeními homogenizované úlohy. Obecně lze říci, že chyba se zvětšuje s rostoucí hodnotou parametru poškození D , lze ji ovšem eliminovat jemnější časovou diskretizací. Zároveň tento jev nepředstavuje zásadní problém v použitelnosti metody, neboť se předpokládá její použití především pro nižší hodnoty poškození.

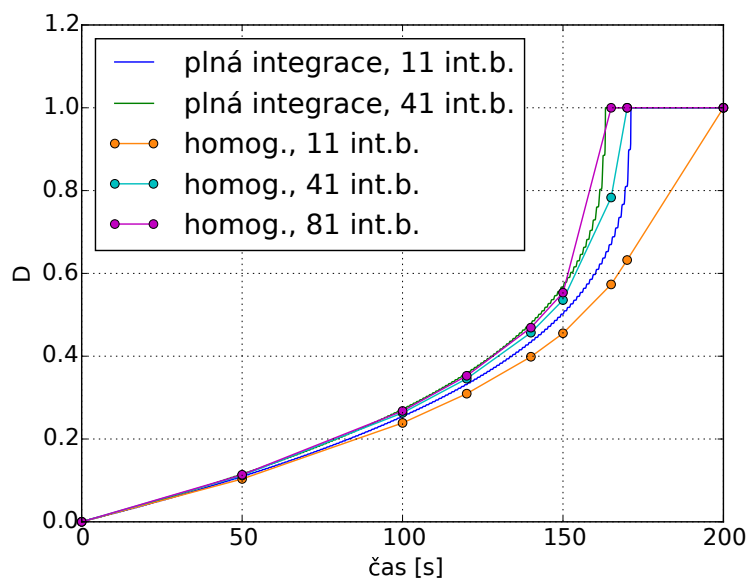
Pro ilustraci byl tentýž výpočet proveden i s proměnnou hodnotou statické části předepsaného protažení

$$\begin{aligned} \lambda(t) &= \lambda_0(t) + \lambda_A \sin(\omega t), \\ \lambda_0(t) &= \begin{cases} \lambda_{01} & \text{pro } 0 \leq t \leq t_1, \\ \lambda_{02} & \text{pro } t > t_1 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.37)$$

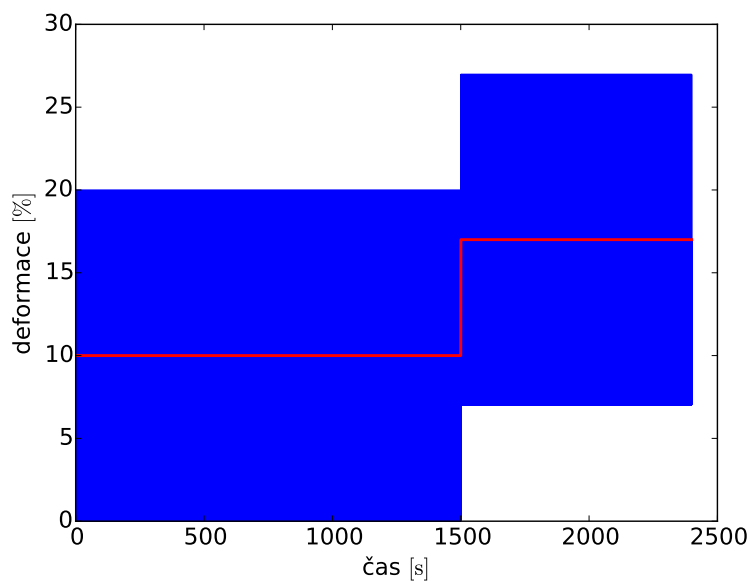
s parametry (viz obr. 3.2)

$$\lambda_{01} = 1,1, \quad \lambda_{02} = 1,175, \quad \lambda_A = 0,1, \quad \omega = 2\pi \text{ rad/s}. \quad (3.38)$$

Výsledky jsou, opět pro různé počty časových hladin, vykresleny na obr. 3.3. ■



Obrázek 3.1. Porovnání průběhů poškození spočtených plnou integrací a řešením homogenizované evoluční rovnice (příklad 3.1)

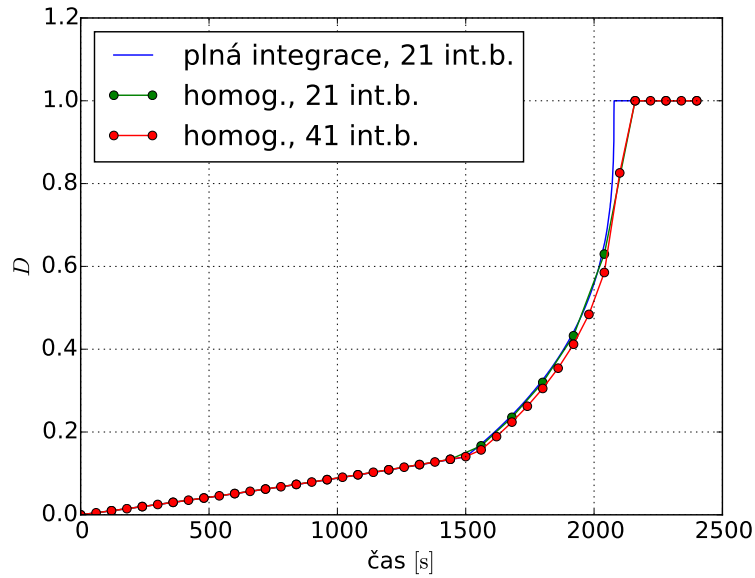


Obrázek 3.2. Předepsaná deformace s nekonstantní statickou složkou (příklad 3.1).

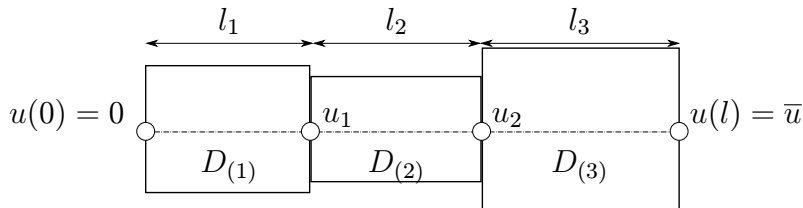
Příklad 3.2: Jednoosá napjatost s nehomogenní deformací

Metodou konečných prvků se řeší vývoj únavového poškození na tyči po částech konstantního průřezu (viz obr. 3.4) při předepsaném cyklickém protažení. Byly použity tři prvky s lineární aproximací posuvů a konstantní aproximací deformace a poškození. Předepsaný posuv byl

$$\bar{u}(t) = 0,3 (l_1 + l_2 + l_3) \sin(\omega t) . \quad (3.39)$$



Obrázek 3.3. Porovnání průběhů poškození spočtených plnou integrací a řešením homogenizované evoluční rovnice (příklad 3.1) - nekonečnou statickou složkou předepsané deformace.



Obrázek 3.4. Geometrie vzorku nekonečného průřezu a odpovídající veličiny (příklad 3.2).

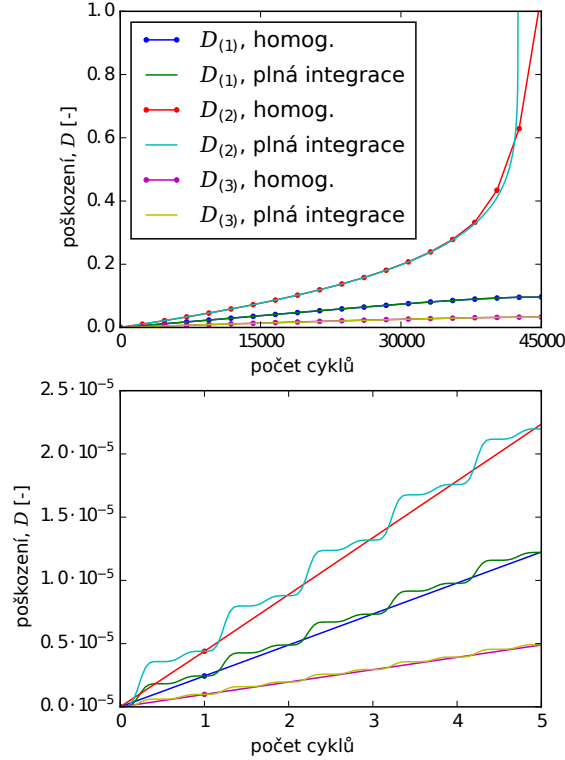
V případě plné integrace a na mikroškále homogenizované úlohy byl použit explicitní časový řešič, zatímco pro homogenizovanou úlohu na makroškále byl použit implicitní řešič.

Výsledné časové závislosti poškození na všech třech prvcích spočtené oběma metodami jsou porovnány na obr. 3.5. Z grafů je patrná dobrá shoda kromě oblasti blízko porušení prvku 2. Zároveň je patrné přerozdělení napětí, což se projevuje tak, že se zrychlením $\dot{D}_{(2)}$ dochází k poklesu $\dot{D}_{(1)}$ a $\dot{D}_{(3)}$, ke kterému u homogenní deformace (příklad 3.1) nedochází.

Výpočetní časy pro různé délky simulací jsou uvedeny v tab. 3.1. Zde je zdůrazněna nezávislost časových diskretizací na mikro- a makroškále homogenizované úlohy v tom smyslu, že pro řešení homogenizované úlohy bylo možné volit vždy stejný počet časových kroků a čas výpočtu je tedy pro všechny délky simulací stejný, na rozdíl od plné integrace, kdy je nutné vyřešit – se zvoleným počtem časových kroků – všechny zatěžovací cykly.

Tabulka 3.1. Výpočetní časy MKP simulací jednoosé napjatosti s nehomogenní deformací (příklad 3.2).

	10000 cyklů	20000 cyklů	45000 cyklů
homogenizovaná úloha	14 s	15 s	14 s
plná integrace	636 s	1270 s	2870 s



Obrázek 3.5. Průběh poškození na jednotlivých prvcích (příklad 3.2).

Příklad 3.3: MKP simulace při malých deformacích

Pro ověření použitého aparátu v kontextu prostorové diskretizace metodou konečných prvků byl v práci [v19] implementován model poškození při malých deformacích [27] pomocí MKP balíku FEniCS [67]. V tomto modelu jsou vztahy pro efektivní napětí a efektivní Youngův modul pružnosti

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 - D) \boldsymbol{\sigma}_0, \quad E = (1 - D) E_0. \quad (3.40)$$

Evoluční vztah pro poškození je

$$\dot{D} = B \frac{1 - D}{\varepsilon_I} \left(\frac{\sigma_I}{\sigma_r} \right)^N, \quad (3.41)$$

kde B , σ_r a N jsou parametry modelu a ε_I a σ_I jsou první hlavní invarianty tenzoru malých deformací a tenzoru napětí.

Jako časový řešič bylo použito explicitní schéma, tzn. časová derivace poškození na $k - 1$ -ní časové hladině se aproximuje pomocí dopředné konečné diference:

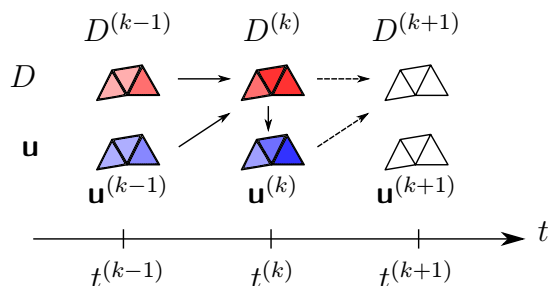
$$\dot{D}^{(k-1)} \approx \frac{D^{(k)} - D^{(k-1)}}{\Delta t^{(k-1)}} \Rightarrow D^{(k)} = D^{(k-1)} + \Delta t^{(k-1)} \dot{D}^{(k-1)}. \quad (3.42)$$

Na základě takto určeného pole poškození se spočte pole posuvů $\mathbf{u}^{(k)}$ (viz obr. 3.6).

Simulace byla provedena na výpočetní oblasti tvaru krychle o délce hrany 1 m. Předepsané okrajové podmínky byly:

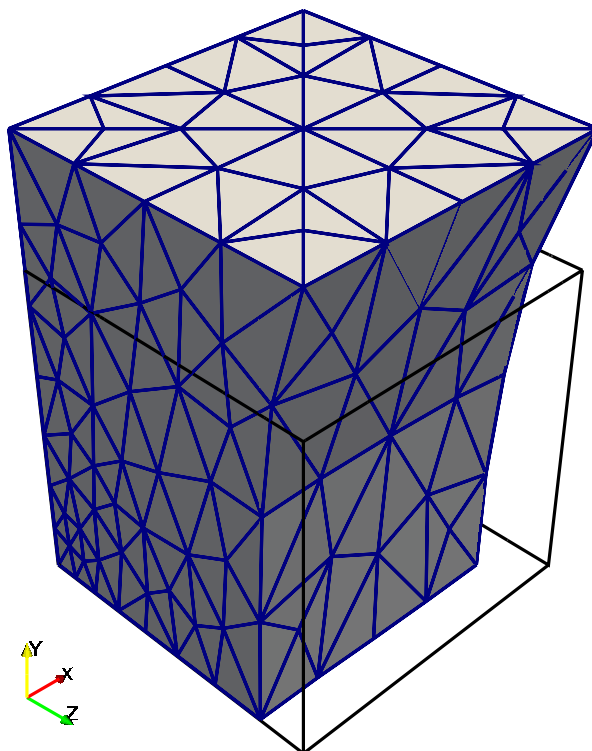
$$u_i(x_i = 0) = 0 \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.43)$$

$$u_1(x_1 = 1 \text{ m}) = 10^{-5} (1 - \cos(10t)). \quad (3.44)$$

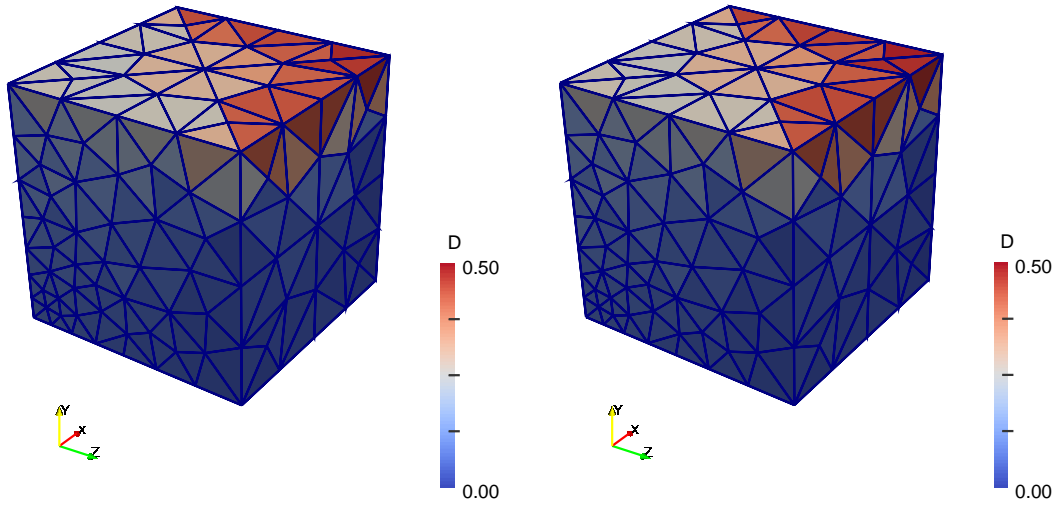


Obrázek 3.6. Schéma explicitního časového řešiče při MKP výpočtu úlohy s únavovým poškozením (příklad 3.3).

MKP síť ve zdeformovaném tvaru je vykreslena na obr. 3.7. Rozložení poškození na konci simulace vypočteného plnou integrací a pomocí homogenizovaného modelu je na nedeformované síti zobrazeno na obr. 3.8. Protože při porovnání vedle sebe nejsou patrné rozdíly, jsou na obr. 3.9 vykresleny průběhy poškození v čase ve dvou různých bodech výpočetní oblasti. Z časových závislostí je patrná dobrá shoda homogenizovaného modelu s plnou integrací. Rozdíl ve výsledných hodnotách (zejména v místě A) lze patrně vysvětlit použitým časovým řešičem a poměrně velkým časovým krokem v případě řešení homogenizovaného modelu. Druhá část obr. 3.9 - zvětšená oblast s viditelnými cykly v řešení plnou integrací - zobrazuje rozdíl v obou metodách řešení. Tj. fakt, že výsledkem řešení homogenizovaného modelu je pouze „pomalá“ složka poškození D_0 spočtená s krokem mnohokrát delším než je délka zatěžovacího cyklu.



Obrázek 3.7. Zdeformovaná MKP síť (příklad 3.3), černou čarou je naznačen nezdeformovaný tvar oblasti. Posuvy zvětšeny $2 \cdot 10^4$ -krát.



Obrázek 3.8. Rozložení poškození D na konci simulace (příklad 3.3). Vlevo výsledek plné integrace, vpravo homogenizovaný model.

Pro ilustraci toho, jaký význam má simulace průběhu poškození včetně nelineárního pravidla jeho kumulace slouží obr. 3.10, na kterém je vykresleno rozložení časové derivace poškození na začátku a na konci simulace. Je zřejmý kvantitativní rozdíl v dosahovaných rychlostech poškození, ale zejména v distribuci této veličiny, kdy přerozdělení přenášeného napětí vlivem poškození vede také ke změně v procesu poškozování co do prostorového rozložení. Toto je zřejmé z rozložení časové derivace poškození \dot{D} na horní podstavě výpočetní oblasti. ■

Příklad 3.4: Poškození při velkých deformacích [v1]

Stejný postup jako v případě malých deformací (příklad 3.3) byl v článku [v1] použit i pro simulace poškození pomocí modelu únavového poškození pro velké deformace [12].

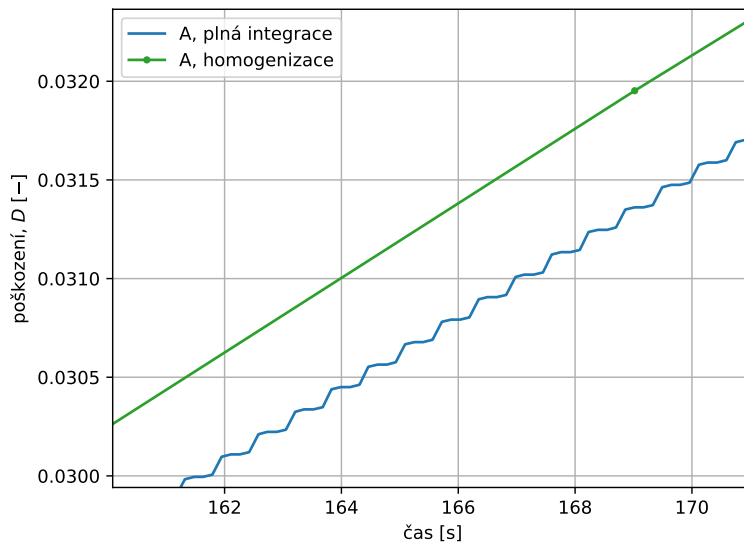
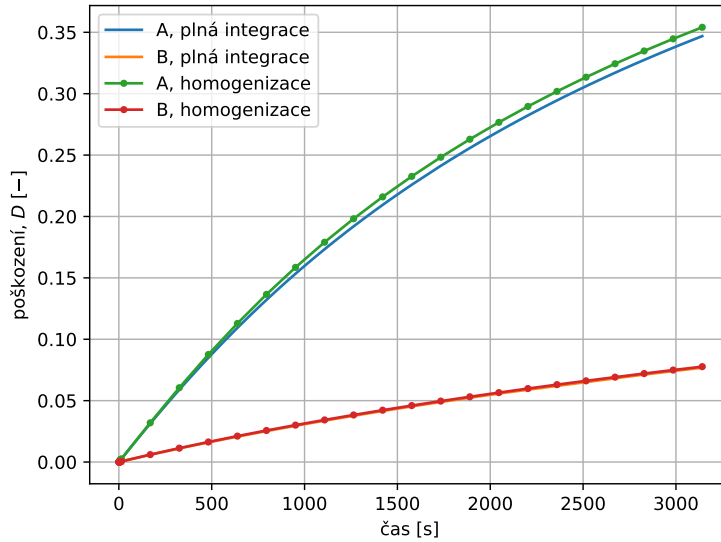
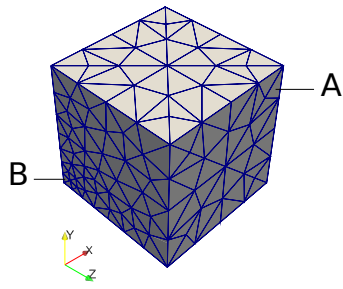
Materiál se v nepoškozeném stavu pokládá za homogenní, popsáný Ogdenovým hyperelastickým modelem s parametry (je uvažován pouze jeden člen řady, proto jsou vynechány indexy parametrů)

$$\mu = 1 \text{ Pa} , \quad \alpha = 3 . \quad (3.45)$$

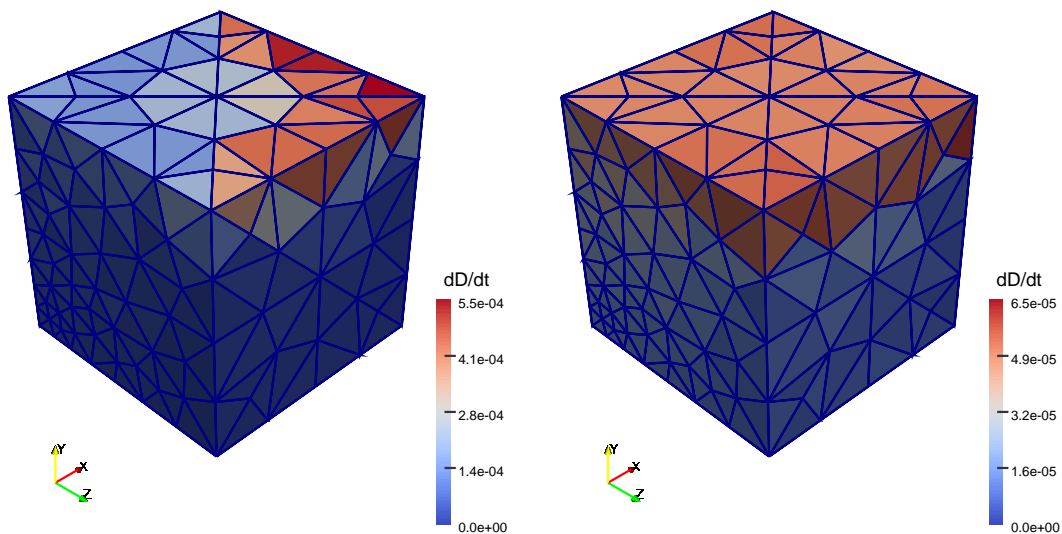
Poškození je popsáno modelem s parametry

$$A = 0,2 \text{ Pa}^{-1} , \quad a = 2 . \quad (3.46)$$

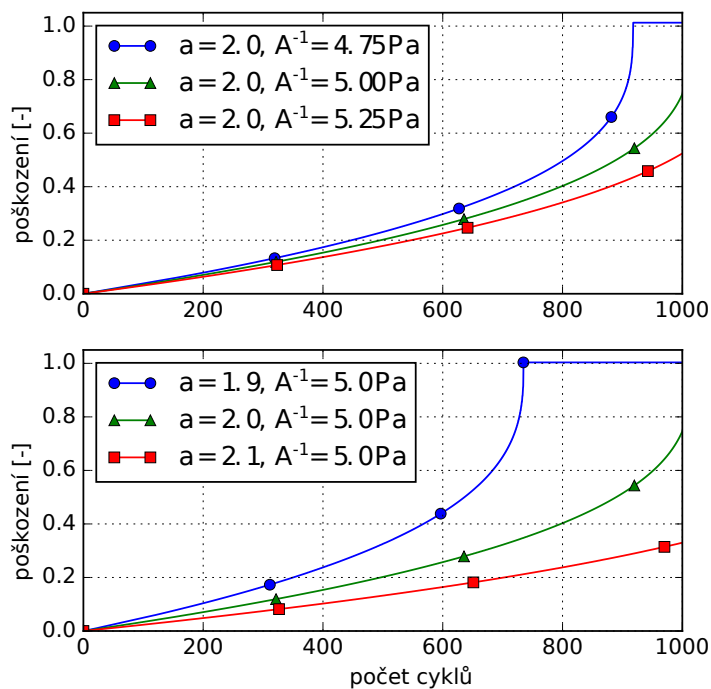
Tyto materiálové parametry byly zvoleny tak, aby numerický příklad ilustroval různé aspekty popisované výpočetní metody a zároveň čas nutný pro výpočet zůstal na dostupném systému přijatelný, resp. hodnota exponentu a byla zvolena libovolně a hodnota součinitele A byla poté nastavena tak, aby došlo k porušení v některých bodech sítě před koncem simulace, jejíž trvání bylo také pevně nastaveno. Vliv obou parametrů modelu poškození je ilustrován obr. 3.11 pro případ jednoosé napjatosti. Větší hodnota libovolného z parametrů vede k pomalejší kumulaci poškození a tedy nárůstu počtu cyklů do porušení.



Obrázek 3.9. Průběh poškození v čase ve zvolených místech sítě (příklad 3.3). Horní graf obsahuje celou simulaci, ve spodním grafu jsou zřejmé rozdíly mezi oběma metodami – výsledkem homogenizovaného modelu je pouze „pomalá“ složka D_0 spočtená v místech označených tečkami.



Obrázek 3.10. Rozložení rychlosti poškozění \dot{D} na začátku a na konci simulace (příklad 3.3).



Obrázek 3.11. Vliv parametrů modelu poškozění v případě jednoosé napjatosti a harmonického předepsaného posuvu (příklad 3.4). Vliv součinitele A nahoře, vliv exponentu a dole.

Úloha byla řešena jako rovinná napjatost. Výpočetní oblast měla tvar obdélníka, okrajové podmínky byly

$$\vec{u} = [0, 0]^T \quad \text{na } \Gamma_{u1}, \quad (3.47)$$

$$\vec{u} = [0, \bar{u}(t)]^T \quad \text{na } \Gamma_{u2}, \quad (3.48)$$

$$\mathbf{F} \mathbf{S} \vec{n} = [0, 0]^T \quad \text{na } \Gamma_\sigma, \quad (3.49)$$

kde \mathbf{F} je deformační gradient, \mathbf{S} druhý Piolův-Kirchhoffův tenzor napjatosti a \vec{n} značí vnější normálu k hranici výpočetní oblasti $\partial\Omega_0$, pro kterou platí (viz obr. 3.12)

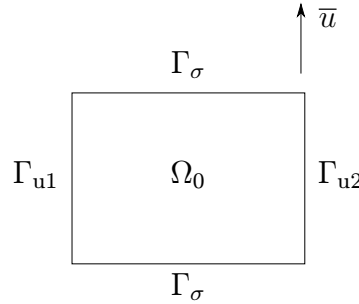
$$\partial\Omega_0 = \Gamma_\sigma \cup \Gamma_{u1} \cup \Gamma_{u2}. \quad (3.50)$$

Předepsaný svislý posuv byl

$$\bar{u}(t) = 0,3 \sin^2(\pi t). \quad (3.51)$$

Počáteční podmínka byla

$$D = 0 \quad \text{všude v } \Omega_0. \quad (3.52)$$



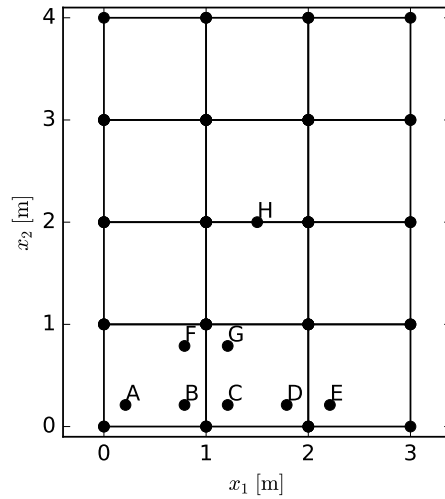
Obrázek 3.12. Výpočetní oblast a části hranice pro okrajové podmínky (příklad 3.4).

Stejně jako v předchozím příkladě, 3.3, byly porovnávány dva způsoby časové diskretizace: plná integrace a řešení homogenizovaného modelu. Simulace byly v obou případech provedeny pro 1000 zatěžovacích cyklů. Plná integrace byla provedena explicitní metodou stejně jako v předchozím příkladě, přičemž každý cyklus zatížení byl diskretizován osmi kroky a celá simulace tedy měla celkem 8001 časových hladin. Při řešení homogenizovaného modelu bylo 1000 cyklů rozděleno na 11 časových hladin. Na každé hladině byla provedena simulace jednoho zatěžovacího cyklu stejným způsobem jako v případě plné integrace (tj. 8 kroků explicitní metodou) s konstantní (v čase) hodnotou „pomalé“ složky poškození D_0 . Kumulace D_0 byla řešena implicitní metodou. Prostorová diskretizace byla provedena metodou konečných prvků, použitá síť je na obr. 3.13. Byly použity čtyřuzlové prvky s bilineární aproximací posuvů.

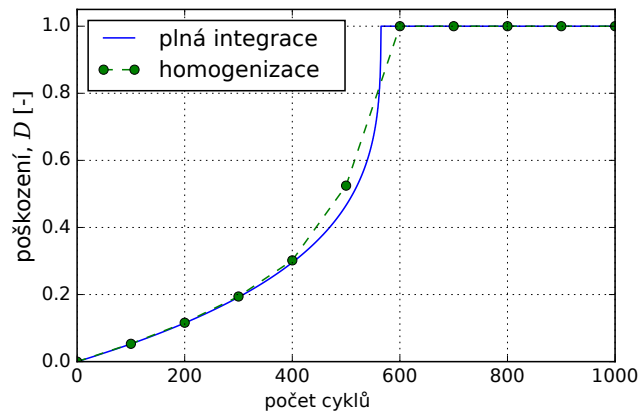
V porovnání obou metod byly sledovány dva ukazatele: přesnost a výpočetní čas. Plná integrace byla pro účely tohoto srovnání považována za správné řešení a homogenizovaný model by měl v ideálním případě vést ke stejným výsledkům. Přesnost byla porovnávána na základě průběhů poškození D , resp. D_0 , v čase v různých místech výpočetní oblasti. Umístění bodů, ve kterých bylo provedeno srovnání je na obr. 3.13. Samotné porovnání průběhů poškození je na obr. 3.14-3.21. Výsledky homogenizovaného modelu jsou velmi blízko těm získaným plnou integrací s výjimkou bodů A a B (obr. 3.14 a 3.15), kde je v průběhu simulace dosaženo porušení (tj. proměnná D dosáhne hodnoty 1). Příčinou této neshody je použitá časová diskretizace v případě řešení homogenizovaného modelu, tj. ekvidistantní dělení. Kdyby bylo dělení v okolí porušení jemnější, nebo kdyby byl

použit adaptivní řešič, bylo by řešení homogenizovaného modelu přesnější. Použití homogenizovaného modelu je nicméně na časové diskretizaci nezávislé a uvedená nepřesnost řešení tedy obecně nepředstavuje zásadní nedostatek.

Z grafů je také zřejmé, že vývoj poškození v jednom místě ovlivňuje řešení ve zbytku výpočetní oblasti. Toto je patrné z faktu, že první část křivek v místech A a B (obr. 3.14 a 3.15) je konvexní, zatímco odpovídající části křivek v místech C, D a G (obr. 3.16, 3.17 a 3.20) jsou konkávní. Jiný projev prostorových závislostí v rozložení poškození je zřejmý v okamžiku, kdy je v jednom místě dosaženo úplného porušení materiálu - přibližně při 600 cyklech v místech A a B. Po tomto okamžiku už materiál v okolí nepřenáší napětí, což výrazně ovlivní rozvoj poškození ve zbytku výpočetní oblasti. Další poškozování se zrychlilo v bodech C, E a F (obr. 3.16, 3.18 a 3.19) a naopak se zpomalilo v bodech D, G a H (obr. 3.17, 3.20 a 3.21).

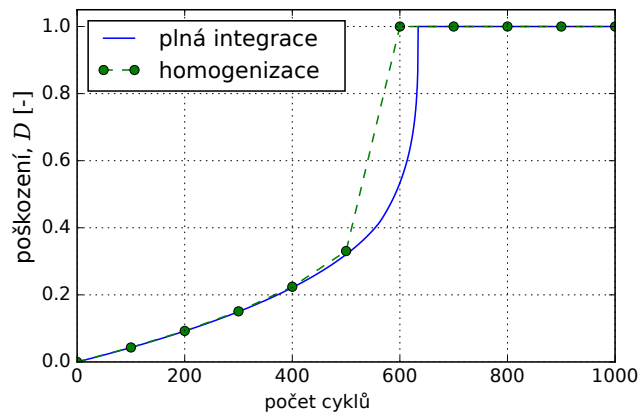


Obrázek 3.13. Neodeformovaná MKP síť s vyznačenými body, ve kterých bylo provedeno porovnání časových průběhů poškození (příklad 3.4).

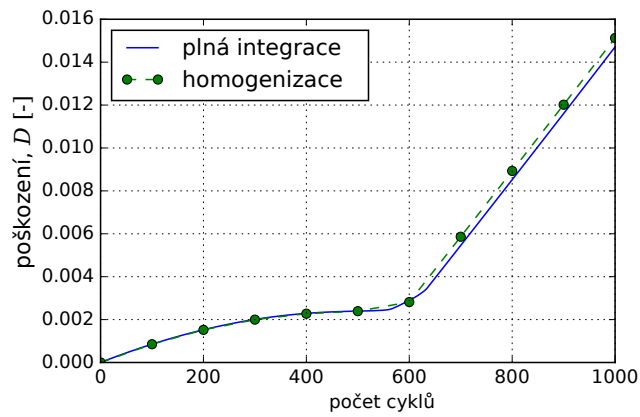


Obrázek 3.14. Průběh poškození v bodě A (příklad 3.4).

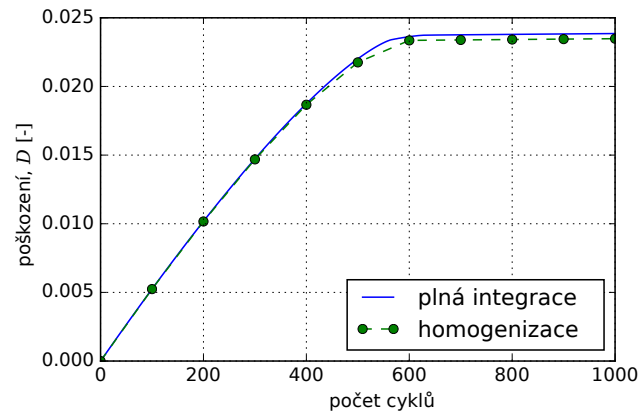
Numerické výpočty a vizualizace byly naprogramovány v programovacím jazyce Python s pomocí knihoven Numpy a Scipy [57] a Matplotlib [54]. Skripty byly



Obrázek 3.15. Průběh poškození v bodě B (příklad 3.4).

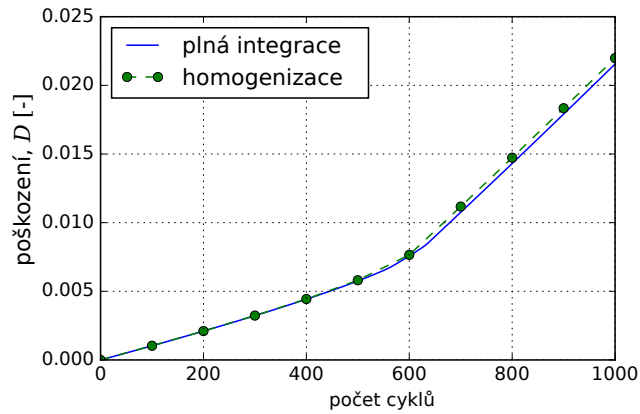


Obrázek 3.16. Průběh poškození v bodě C (příklad 3.4).

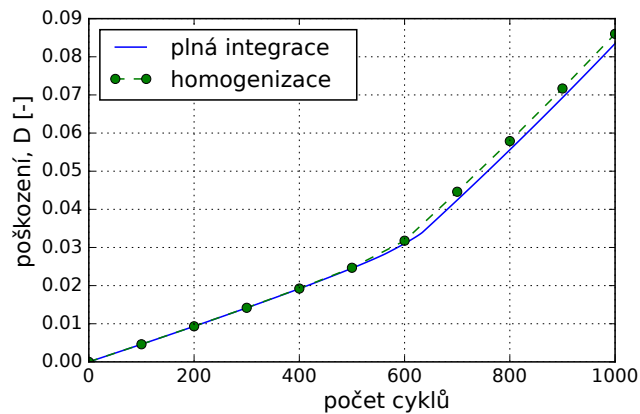


Obrázek 3.17. Průběh poškození v bodě D (příklad 3.4).

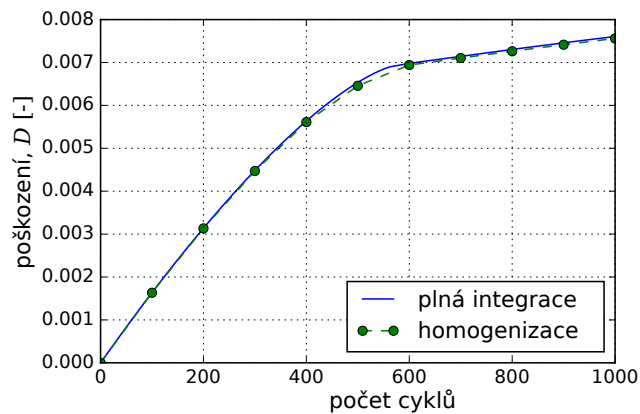
implementovány jako jednovláknové aplikace - nebyla provedena žádná paralelizace. Výpočetní náročnost obou metod byla porovnávána při separátních bězích obou skriptů na počítači s procesorem Intel Core i3-370M (2 jádra, 4 vlákna) s maximální frekvencí 2.4 GHz, s operační pamětí velikosti 4 GB, SSD úložištěm a s 64-bitovou verzí operačního systému Arch Linux s jádrem verze 4.7. Výsledné časy trvání obou simulací jsou v tab. 3.2. Řešení homogenizovaného modelu je



Obrázek 3.18. Průběh poškození v bodě E (příklad 3.4).



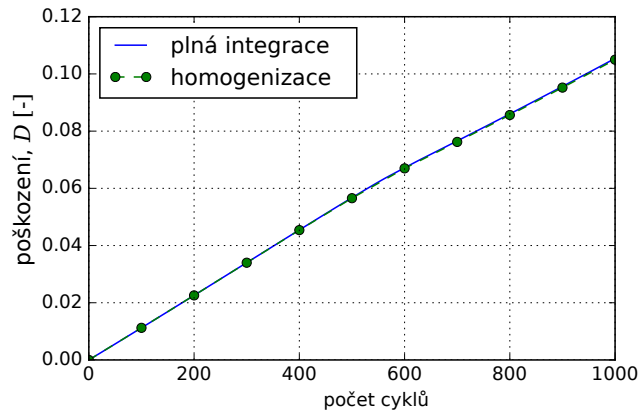
Obrázek 3.19. Průběh poškození v bodě F (příklad 3.4).



Obrázek 3.20. Průběh poškození v bodě G (příklad 3.4).

v tomto příkladu přibližně 17-krát rychlejší než plná integrace. Tohoto výsledku bylo ovšem dosaženo s parametry zvolenými tak, aby výpočet plnou integrací proběhl v přijatelném čase. Kdyby simulace měla postihnout větší počty cyklů (např. 10^5 nebo 10^6), rozdíl ve výpočetní náročnosti by byl ještě výraznější.

Výsledné rozložení poškození ve výpočetní oblasti je znázorněno na obr. 3.22. Porovnání zdeformovaných sítí (při maximálním předepsaném posuvu) na začátku

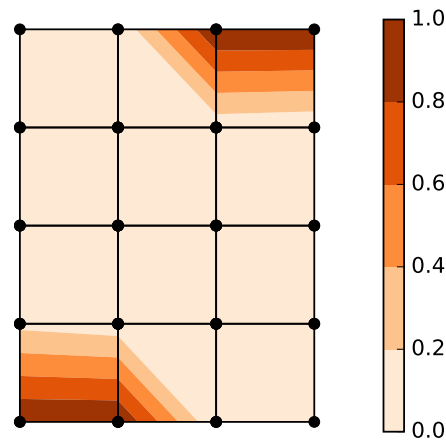


Obrázek 3.21. Průběh poškození v bodě H (příklad 3.4).

	trvání výpočtu
plná integrace	11 hodin 18 minut
homogenizovaný model	41 minut

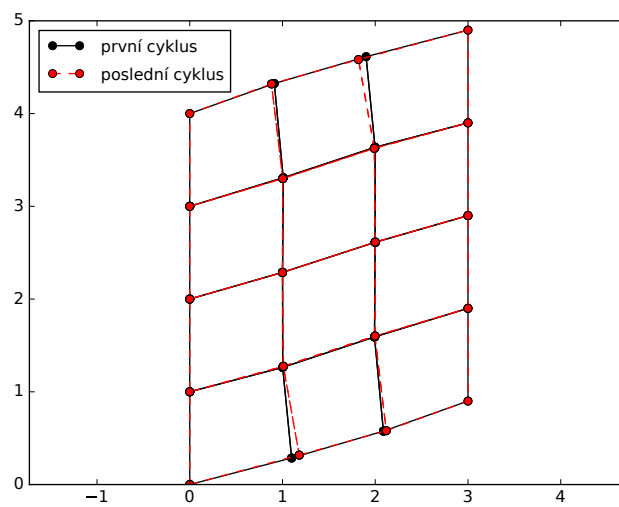
Tabulka 3.2. Výpočetní časy obou diskutovaných metod výpočtu cyklického poškození (příklad 3.4).

a na konci simulace je vykresleno na obr. 3.23. Je patrné, že vlivem rychlejší kumulace poškození, především v levém dolním a pravém horním rohu, a následného porušení v těchto místech dochází k přerozdělení napětí a změně ve výsledných posuvech.



Obrázek 3.22. Rozložení poškození na konci simulace (příklad 3.4).

■



Obrázek 3.23. Porovnání zdeformovaných sítí na začátku a na konci simulace (příklad 3.4).

Kapitola 4

Modelování chemického stárnutí

Patrně první studií stárnutí pryže je článek Tobolskyho et al. [93], ve které se také zmiňuje důležitý předpoklad, přítomný ve všech pozdějších modelech, totiž že nové vazby v polymerní síti vznikají v deformované konfiguraci bez vlivu na napjatost.

Součástí některých modelů chemického stárnutí je i transport kyslíku (příp. jiného chemického činidla), nicméně i pokud není přímo uvažován, lze jej do úvah snadno zahrnout prostřednictvím difuzní rovnice rozšířené o reakční člen. Tento typ rovnic má nezanedbatelný význam i v jiných aplikacích, např. ve stavebnictví (stárnutí betonu) nebo v biomechanice.

Podrobně jsou v této kapitole popsány dva modely, které byly autorem použity k numerickým simulacím stárnutí pryže. Je to nejprve dvousíťový model Liona a Johlitze, jehož zjednodušená varianta byla použita pro numerickou simulaci těsnění vulkanizačního lisu. Poté je to tzv. *dynamic network model* Naumanna a Ihlemanna, který byl autorem upraven pro modelování stárnutí a únavového poškození (viz kap. 5) a v této práci je výsledný model použit i pro ilustraci postupu pro vyšetřování identifikovatelnosti parametrů (kap. 7.3).

Druhý z přístupů byl v této práci vybrán k bližšímu zkoumání z těchto důvodů: (i) jde o novější postup (ii) dle názoru autora je oprávněná námitka proti dvousíťovému modelu, že počet dvou polymerních sítí je poněkud umělý předpoklad.

4.1 Model Lion-Johlitz

Model [66] se skládá z evolučních vztahů

$$\dot{q}_{CS}(t) = f_{CS}(\mathbf{E}, T, q_{CS}, q_R), \quad (4.1)$$

$$\dot{q}_R(t) = f_R(\mathbf{E}, T, q_{CS}, q_R), \quad (4.2)$$

kde proměnná $q_{CS} \in \langle 0, 1 \rangle$ popisuje průběh štěpení vazeb, zatímco proměnná $q_R \in \langle 0, 1 \rangle$ popisuje vznik nových vazeb.

Hustota Helmholtzovy volné energie (na jednotku hmotnosti) je rozložena na tři členy:

$$\Psi = \Psi_{\text{vol}} + \Psi_- + \Psi_+. \quad (4.3)$$

První člen popisuje objemové změny vyvolané stárnutím. Na deformaci závisí prostřednictvím jakobiánu deformačního gradientu a dále závisí na teplotě a výše uvedených proměnných popisujících průběh stárnutí:

$$\Psi_{\text{vol}} = \Psi_{\text{vol}}(J, T, q_{CS}, q_R). \quad (4.4)$$

Druhý člen vyjadřuje stav té části polymerní sítě, která vlivem stárnutí ztrácí tuhost:

$$\Psi_- = \Psi_-(\hat{\mathbf{E}}, T, q_{CS}), \quad \frac{\partial \Psi_-}{\partial q_{CS}} \leq 0. \quad (4.5)$$

Pokud polymerní síť při maximální možné míře zestárnutí nepřenáší žádné napětí, platí

$$\lim_{q_{CS} \rightarrow 1} \frac{\partial \Psi_-}{\partial \mathbf{E}} = \mathbf{0} . \quad (4.6)$$

Pokud je polymerní síť i při maximální míře stárnutí schopna nějaké napětí přenést, má uvedená parciální derivace nenulové složky.

Třetí člen rozkladu (4.3) vyjadřuje příspěvek nově vzniklých vazeb. Pro tento člen platí, že pokud je deformace konstantní v čase, nově vzniklá síť zůstává bez napětí, a je vyjádřen explicitním vztahem

$$\Psi_+ = \int_{-\infty}^t \left(G_+^A(T(t), q_R(s)) \frac{d}{ds} \text{tr}(\hat{\mathbf{e}}_t(s)) + G_+^B(T(t), q_R(s)) \frac{d}{ds} \text{tr}(\hat{\mathbf{E}}_t(s)) \right) ds . \quad (4.7)$$

Skalární funkce G_+^A a G_+^B popisují nárůst tuhosti vlivem stárnutí. Jsou neklesající vzhledem k proměnné q_R , tj.

$$\frac{\partial G_+^A}{\partial q_R} \geq 0 , \quad \frac{\partial G_+^B}{\partial q_R} \geq 0 , \quad (4.8)$$

a protože tato část polymerní sítě není na počátku přítomna, platí

$$G_+^A(T, 0) = 0 , \quad G_+^B(T, 0) = 0 . \quad (4.9)$$

Z předchozích dvou vlastností plyne i nezápornost obou funkcí:

$$G_+^A(T, q_R) \geq 0 , \quad G_+^B(T, q_R) \geq 0 . \quad (4.10)$$

4.1.1 Varianta pro malé deformace

V článku [56] byl představen dvousíťový model stárnutí pro malé deformace.

Předpokládá se aditivní rozklad tenzoru napětí

$$\boldsymbol{\sigma} = p \mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma}_{CS} + \boldsymbol{\sigma}_R , \quad (4.11)$$

kde $\boldsymbol{\sigma}_{CS}$ značí napětí v síti, která podléhá štěpení vazeb, a $\boldsymbol{\sigma}_R$ napětí v síti, která je tvořena nově vzniklými vazbami. Štěpení vazeb je vyjádřeno vnitřní proměnnou q_{CS} a vznik nových vazeb proměnnou q_R . Napětí v síti podléhající štěpení vazeb je

$$\boldsymbol{\sigma}_{CS} = 2 \mu_{CS}(q_{CS}) \boldsymbol{\varepsilon}^D , \quad (4.12)$$

kde $\boldsymbol{\varepsilon}^D$ je deviátor tenzoru malých deformací a μ_{CS} je smykový modul závislý na stárnutí. Napětí v nově vznikající síti je dáno hypoelastickým vztahem

$$\boldsymbol{\sigma}_R = \int_0^t 2 \mu_R(q_R(s)) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^D ds , \quad (4.13)$$

kde t je čas, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^D$ je časová derivace deviátoru tenzoru malých deformací a μ_R je materiálový parametr závislý na stárnutí. Závislosti tuhostních parametrů na stárnutí jsou určeny vztahy

$$\mu_{CS}(q_{CS}) = \mu_{CS0} (1 - q_{CS}) , \quad (4.14)$$

$$\mu_R(q_R) = \mu_{R0} q_R . \quad (4.15)$$

Evoluční vztahy pro vnitřní proměnné jsou:

$$\dot{q}_{\text{CS}} = v_{\text{CS}} c (1 - q_{\text{CS}}) \exp\left(-\frac{E_{\text{CS}}}{RT}\right), \quad (4.16)$$

$$\dot{q}_{\text{R}} = v_{\text{R}} c (1 - q_{\text{R}}) \exp\left(-\frac{E_{\text{R}}}{RT}\right), \quad (4.17)$$

kde v_{CS} , v_{R} , E_{CS} a E_{R} jsou materiálové parametry, c je koncentrace kyslíku, T je absolutní teplota a $R = 8,314 \text{ J/mol/K}$ je univerzální plynová konstanta.

Difuze kyslíku a jeho spotřeba chemickými reakcemi je vyjádřena rozšířenou difuzní rovnicí

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} - \hat{c} = 0. \quad (4.18)$$

Tok kyslíku je

$$\vec{j} = -k_{\text{dif}} (\delta + \xi T) \nabla c, \quad (4.19)$$

kde k_{dif} , δ a ξ jsou parametry modelu. Reakční člen \hat{c} je předepsán vztahy

$$\hat{c} = k(T, q_{\text{CS}}, q_{\text{R}}) (\delta + \xi T) c, \quad (4.20)$$

$$k(T, q_{\text{CS}}, q_{\text{R}}) = (\alpha_{\text{CS}} (1 - q_{\text{CS}}) + \alpha_{\text{R}} (1 - q_{\text{R}})) \exp\left(\frac{\Delta E}{RT}\right), \quad (4.21)$$

kde α_{CS} , α_{R} a ΔE jsou další parametry modelu.

Výpočetní oblast je značena Ω . Její hranice Γ je za účelem předepsání okrajových podmínek rozdělena takto (viz např. [35])

$$\Gamma = \Gamma_{\text{D}}^u \cup \Gamma_{\text{N}}^u = \Gamma_{\text{D}}^c \cup \Gamma_{\text{N}}^c \quad (4.22)$$

a Dirichletovy a Neumannovy okrajové podmínky jsou předepsány takto:

$$\vec{u} = \vec{u}_{\text{D}} \quad \text{na } \Gamma_{\text{D}}^u, \quad (4.23)$$

$$c = c_{\text{D}} \quad \text{na } \Gamma_{\text{D}}^c, \quad (4.24)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \vec{n} = \vec{t}_{\text{N}} \quad \text{na } \Gamma_{\text{N}}^u, \quad (4.25)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{j} = j_{\text{N}} \quad \text{na } \Gamma_{\text{N}}^c. \quad (4.26)$$

Počáteční podmínky jsou

$$\vec{u} = \vec{u}_0 \quad \text{na } \Omega \text{ v čase } t = 0, \quad (4.27)$$

$$c = c_0 \quad \text{na } \Omega \text{ v čase } t = 0. \quad (4.28)$$

Úloha 4.1: Slabá formulace okrajově-počáteční úlohy elasticity a stárnutí pro malé deformace

Najít pole posuvů $\vec{u} \in \mathcal{U}$ a koncentrace $c \in \mathcal{C}$ vyhovující rovnicím

$$\int_{\Omega} \nabla \delta \vec{u} : \boldsymbol{\sigma} \, dV = \int_{\Gamma_{\text{N}}^u} \delta \vec{u} \cdot \vec{t}_{\text{N}} \, dS, \quad (4.29)$$

$$- \int_{\Omega} \delta c (\rho \dot{c} + k c) \, dV + \int_{\Omega} \nabla \delta c \cdot \vec{j} \, dV = \int_{\Gamma_{\text{N}}^c} \delta c j_{\text{N}} \, dS, \quad (4.30)$$

pro všechny testovací funkce $\delta \vec{u} \in \mathcal{V}$ a $\delta c \in \mathcal{D}$. Prostory funkcí jsou definovány takto¹:

$$\mathcal{U} = \{ \vec{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega) : \vec{u} = \vec{u}_D \text{ na } \Gamma_D^u \} , \quad (4.31)$$

$$\mathcal{V} = \{ \delta \vec{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega) : \delta \vec{u} = \vec{0} \text{ na } \Gamma_D^u \} , \quad (4.32)$$

$$\mathcal{C} = \{ c \in H^1(\Omega) : c = c_D \text{ na } \Gamma_D^c \} , \quad (4.33)$$

$$\mathcal{D} = \{ \delta c \in H^1(\Omega) : \delta c = 0 \text{ na } \Gamma_D^c \} . \quad (4.34)$$

□

Pro potřeby implementace pomocí MKP balíku SfePy [24] bylo nutné přeformulovat rovnici (4.29) derivováním podle času:

$$\int_{\Omega} \nabla \delta \vec{u} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} \, dV = \int_{\Gamma_N^u} \delta u \cdot \dot{\vec{t}}_N \, dS . \quad (4.35)$$

Časová derivace napětí vyjde, s uvažováním vztahů (4.12) a (4.13),

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = -\dot{p} \mathbf{1} + 2 \underbrace{(\dot{\mu}_{CS} \boldsymbol{\varepsilon}^D + \mu_{CS} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^D)}_{\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{CS}} + \underbrace{2\mu_R \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^D}_{\dot{\boldsymbol{\sigma}}_R} . \quad (4.36)$$

Příklad 4.1: Příklad - MKP simulace těsnění vulkanizačního lisu

Varianta Lionova-Johlitzova modelu stárnutí pryže pro malé deformace byla implementována v rámci příspěvku [v8] pomocí konečněprvkového balíku SfePy [24]. Použití bylo ilustrováno numerickou simulací těsnění vulkanizačního lisu.

Lis je v řezu zobrazen na obr. 4.1 s vyznačenou polohou těsnění, které je předmětem tohoto příkladu. Úloha byla řešena za předpokladu rovinné deformace vzhledem k zanedbatelným rozměrům průřezu těsnění oproti jeho průměru. Nedeformovaná MKP síť s vyznačenými částmi hranice, kde jsou předepsány Dirichletovy okrajové podmínky, je znázorněna na obr. 4.2. Okrajové podmínky jsou:

$$\vec{u} = 0 \quad \text{na } \Gamma_{D1}^u , \quad (4.37)$$

$$\vec{u} = \vec{u}_D(t) = [0, u_y(t)]^T \quad \text{na } \Gamma_{D2}^u , \quad (4.38)$$

$$c = c_D = 1 \quad \text{na } \Gamma_D^c , \quad (4.39)$$

$$\vec{t}_N = 0 \quad \text{na } \Gamma_N^u , \quad (4.40)$$

$$j_N = 0 \quad \text{na } \Gamma_N^c . \quad (4.41)$$

Předepsaný svislý posuv $u_y(t)$ je zobrazen na obr. 4.3. Hodnoty jeho parametrů jsou: $u_{\max} = 0,8 \text{ mm}$, $t_1 = 0,1 \text{ h}$ a $t_2 = 19,8 \text{ h}$. Počáteční podmínky byly

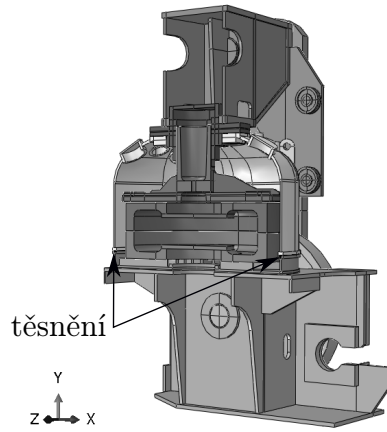
$$c = 1 \quad \text{v } \Omega , \quad (4.42)$$

$$q_{CS} = q_R = 0 \quad \text{v } \Omega . \quad (4.43)$$

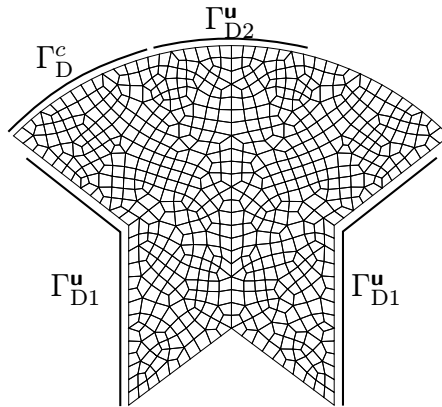
¹ Tučně jsou značeny Sobolevovy prostory vektorových funkcí, italikou prostory skalárních funkcí.

Parametry materiálového modelu byly:

$$\begin{aligned}
 k_{\text{dif}} &= 10^{-6} \text{ kg s m}^{-3} , \\
 \rho &= 920 \text{ kg m}^{-3} , \\
 E_{\text{CS}} &= E_{\text{R}} = 5000 \text{ J mol}^{-1} , \\
 \alpha_{\text{CS}} &= \alpha_{\text{R}} = 10,0 , \\
 v_{\text{CS}} &= v_{\text{R}} = 10^{-4} , \\
 \mu_{\text{CS}_0} &= \mu_{\text{R}_0} = 1,0 \text{ Pa} , \\
 \delta &= 1,0 , \\
 \xi &= 10^{-2} .
 \end{aligned}$$

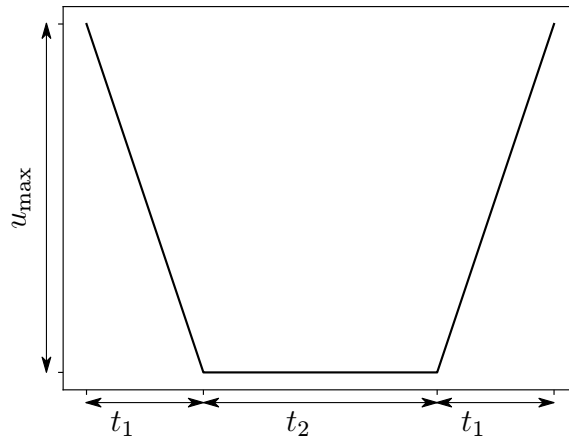


Obrázek 4.1. Vulkanizační lis s vyznačenou polohou pryžového těsnění (příklad 4.1)



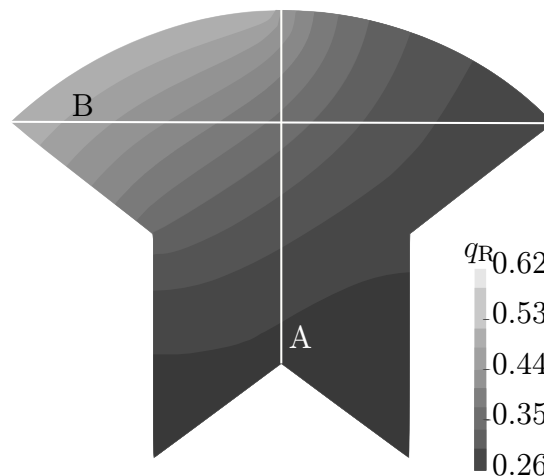
Obrázek 4.2. Konečněprvková síť a okrajové podmínky simulace těsnění vulkanizačního lisu (příklad 4.1) [v8].

Protože evoluční vztahy pro vnitřní proměnné q_{CS} a q_{R} jsou formálně shodné a protože byly zvoleny stejné hodnoty odpovídajících si parametrů těchto vztahů, jsou i výsledná rozložení obou proměnných ve všech časových krocích shodná. Hodnoty těchto vnitřních proměnných vyjadřují míru stárnutí a změn mechanických vlastností materiálu (pomocí rovnic (4.14) a (4.15)).



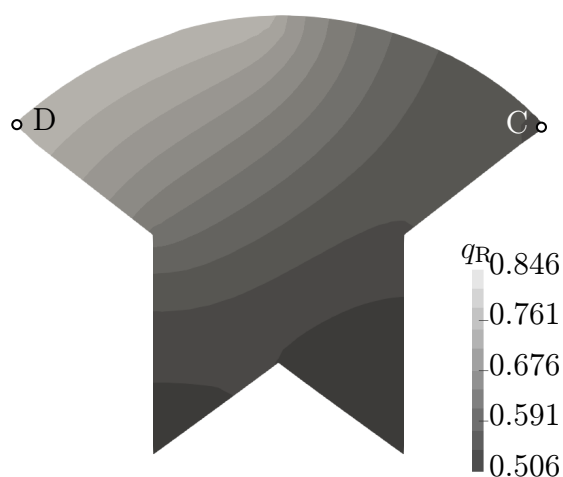
Obrázek 4.3. Předepsaný svislý posuv kontaktní plochy vulkanizačního lisu (příklad 4.1) [v8].

Výsledná rozložení proměnné q_R na konci simulace jsou vykreslena na obr. 4.4 pro teplotu 25°C a 4.5 pro teplotu 170°C . Rozložení koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R podél svislého a vodorovného rozměru těsnění (úsečky A a B na obr. 4.4) jsou na obr. 4.6 a 4.7. Je zřejmé, že vyšší teplota vede na vyšší míru stárnutí (hodnotu proměnné q_R). Rozložení koncentrace kyslíku c je v souladu s okrajovou podmínkou (4.39) v tom smyslu, že lepší přístup kyslíku urychluje stárnutí.

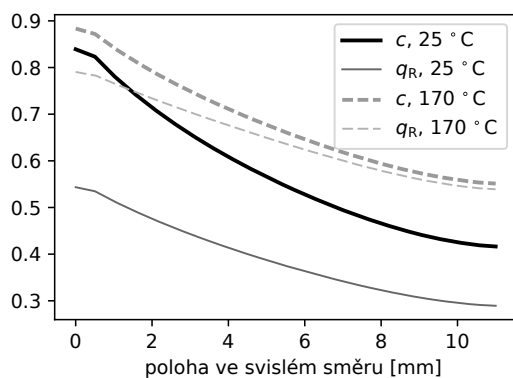


Obrázek 4.4. Rozložení proměnné q_R v těsnění vulkanizačního lisu po 20 h při teplotě 25°C .

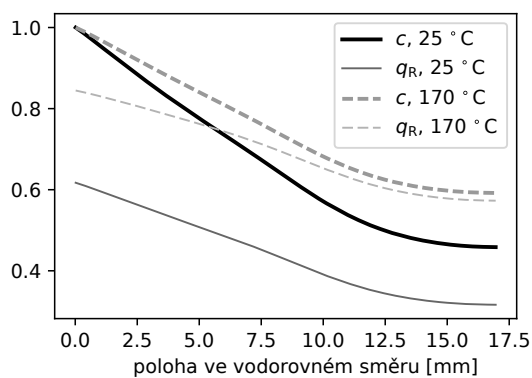
Časové průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R ve dvou vybraných místech (body C a D na obr. 4.5) jsou vykresleny na obr. 4.8. V bodě D je předepsána konstantní koncentrace kyslíku $c = 1$, což vede k velmi rychlému stárnutí. Naproti tomu v bodě C se spotřebuje významné množství kyslíku krátce po začátku děje a jeho další přísun prostřednictvím difuze je natolik omezený, že je stárnutí v tomto místě výrazně pomalejší.



Obrázek 4.5. Rozložení proměnné q_R v těsnění vulkanizačního lisu po 20 h při teplotě 170 °C.

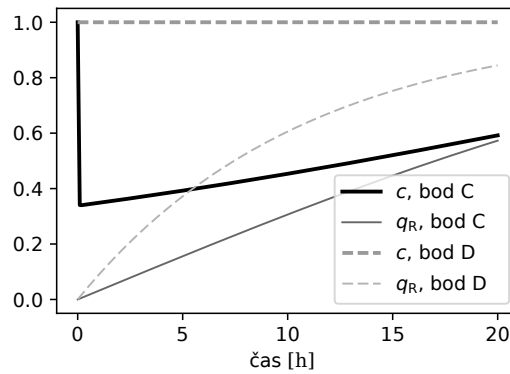


Obrázek 4.6. Průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R podél svislé osy řezu těsnění (úsečka A na obr. 4.4).



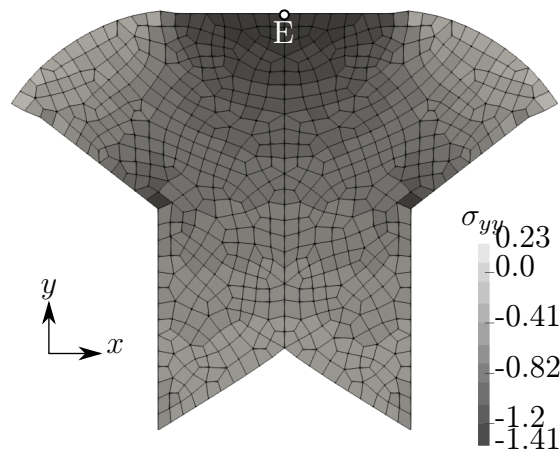
Obrázek 4.7. Průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R podél vodorovné osy řezu těsnění (úsečka B na obr. 4.4).

Rozložení svislé složky napětí je na zdeformované síti vykresleno na obr. 4.9 a 4.10 pro teplotu 25 °C a na obr. 4.11 a 4.12 pro teplotu 170 °C. V nejvíce zatížené oblasti v okolí bodu E je zřetelný pokles napětí vlivem štěpných reakcí.



Obrázek 4.8. Průběhy koncentrace kyslíku c a vnitřní proměnné q_R v čase na dvou různých místech těsnění (body C a D, viz obr. 4.5).

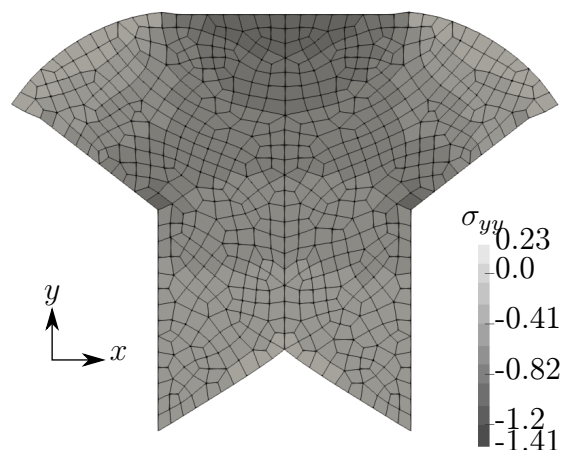
Vývoj svislé složky napětí a jejích částí podle (4.11) v čase je pro obě teploty patrný z obr. 4.13 a 4.14. Část napětí odpovídající nově vznikajícím vazbám, σ_R , je v průběhu relaxace konstantní až na malé změny způsobené přerozdělením napětí v součástce a plně se projeví po odlehčení. Efekt štěpných reakcí je patrný na poklesu σ_{CS} (v absolutní hodnotě).



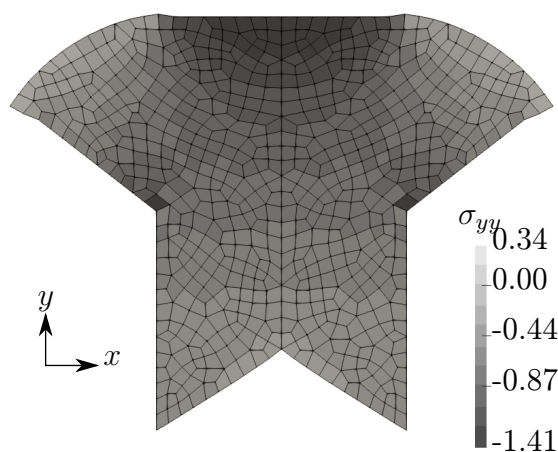
Obrázek 4.9. Napětí (složka σ_{yy}) na začátku relaxačního intervalu ($t = 0,1$ h), teplota 25°C .

Uvedený příklad, převzatý z [v8], ilustruje použití modelu stárnutí pryže pro malé deformace v MKP simulaci pryžové součástky. Numerický model zohledňuje nehomogenní rozložení mechanických vlastností materiálu jako součást řešení úlohy. Možné použití je pro predikci změn mechanických vlastností součástky při provozním zatížení a následně např. i plánování servisních intervalů a výměny dílu či tvarové optimalizace se zohledněním změn mechanických vlastností. V případě uvedeného těsnění je požadavkem, aby při zavření vulkanizační komory bylo dosaženo dostatečného předpětí ve svislém směru tak, aby při natlakování komory nedošlo ke ztrátě tlaku.





Obrázek 4.10. Napětí (složka σ_{yy}) na konci relaxačního intervalu ($t = 19,9$ h), teplota 25°C .

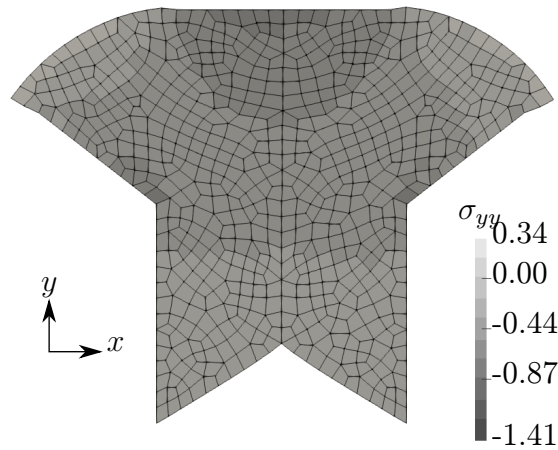


Obrázek 4.11. Napětí (složka σ_{yy}) na začátku relaxačního intervalu ($t = 0,1$ h), teplota 170°C .

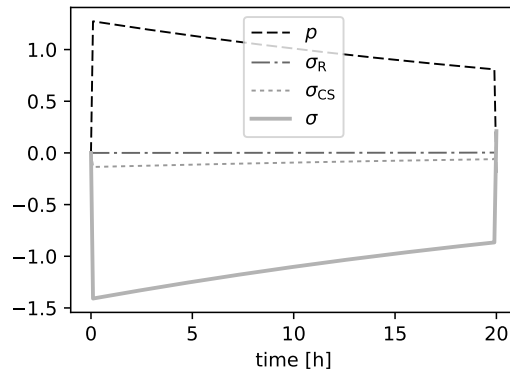
4.2 Model Naumann-Ihlemann (*dynamic network model*)

Tento model je podrobně popsán v dizertační práci Christopha Naumanna [80]. Naumann popisuje kompletně kinetiku chemických reakcí i difuzi kyslíku, na jehož spotřebě přímo závisí stárnutí pryže. Jeho model zahrnuje i popis Mullinsova efektu a jako základ modelu lze použít jak polynomiální funkce invariantů deformace (Mooneyho-Rivlinův model) tak Ogdenův model.

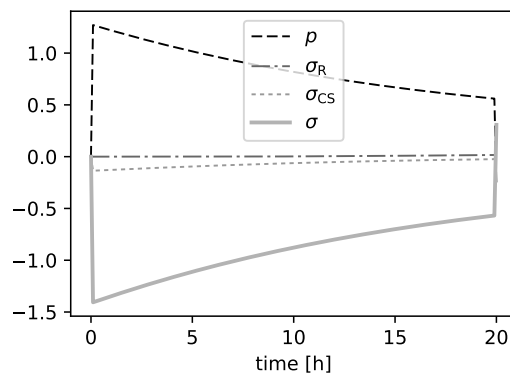
Kinematika je, na rozdíl od dřívějších modelů, založena na představě jediné polymerní sítě, jež podléhá jak vlivu štěpení vazeb, tak jejich vzniku. Štěpné reakce na kinematiku nemají vliv. Nově vzniklé vazby naproti tomu zvyšují tuhost materiálu, ovšem vznikají v aktuální, zdeformované, konfiguraci a právě jejich působením vzniká trvalá deformace vyjádřená částí deformačního gradientu \mathbf{F}_1 (viz obr. 4.15).



Obrázek 4.12. Napětí (složka σ_{yy}) na konci relaxačního intervalu ($t = 19,9$ h), teplota 170°C .

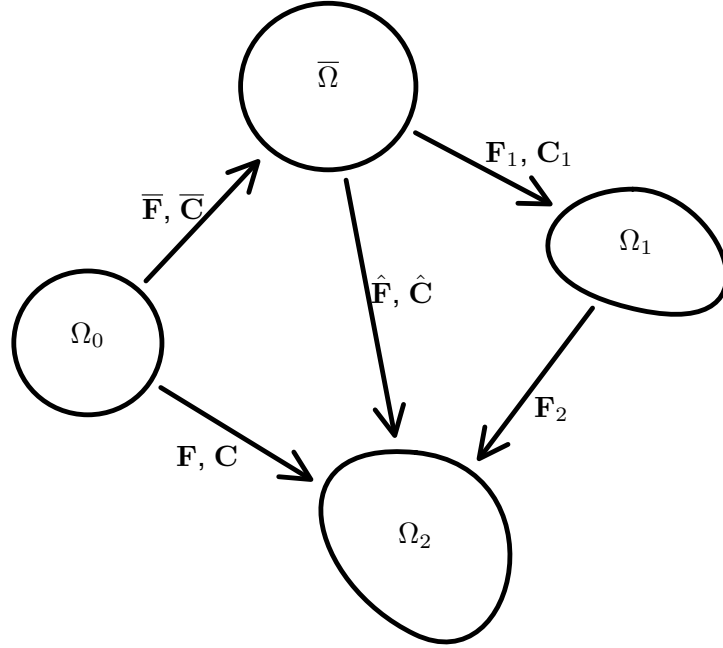


Obrázek 4.13. Vývoj svislé složky napětí (σ_{yy}) v bodě E (viz obr. 4.9) v čase, teplota 25°C . Zobrazena je celková hodnota i části odpovídající členům rozkladu (4.11).



Obrázek 4.14. Vývoj svislé složky napětí (σ_{yy}) v bodě E (viz obr. 4.9) v čase, teplota 170°C . Zobrazena je celková hodnota i části odpovídající členům rozkladu (4.11).

Celková deformace - z počáteční nedeformované konfigurace Ω_0 do aktuální konfigurace Ω - je rozložena na změnu objemu ($\Omega_0 \rightarrow \bar{\Omega}$) a izochorickou část



Obrázek 4.15. Kinematika použitá u *dynamic network modelu*.

($\bar{\Omega} \rightarrow \Omega$) tak, že pro deformační gradient platí rozklad

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}} . \quad (4.44)$$

Tomuto rozkladu na volumetrickou ($\bar{\mathbf{F}}$) a izochorickou ($\hat{\mathbf{F}}$) část odpovídá aditivní rozklad hustoty volné energie

$$\Psi = \bar{\Psi} + \hat{\Psi} . \quad (4.45)$$

Izochorická část deformačního gradientu je dále rozložena na deformaci do nezatíženého stavu (*stress-free configuration*, Ω_1) a z nezatíženého stavu do aktuální konfigurace:

$$\hat{\mathbf{F}} = \mathbf{F}_2 \mathbf{F}_1 . \quad (4.46)$$

Pomocí uvedených rozkladů deformačního gradientu lze dále definovat také pravý Cauchyho-Greenův deformační tenzor \mathbf{C} , jeho izochorickou část $\hat{\mathbf{C}}$ a elastickou část \mathbf{C}_2 , která odpovídá deformaci mezi nezatíženou a aktuální konfigurací:

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = J^{2/3} \hat{\mathbf{C}} , \quad (4.47)$$

$$\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{F}}^T \hat{\mathbf{F}} = \mathbf{F}_1^T \mathbf{C}_2 \mathbf{F}_1 , \quad (4.48)$$

$$\mathbf{C}_2 = \mathbf{F}_2^T \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_1^{-T} \hat{\mathbf{C}} \mathbf{F}_1^{-1} . \quad (4.49)$$

Hustota volné energie $\hat{\Psi}$ je potom funkcí deformačního tenzoru \mathbf{C}_2 , např. model neo-hookeovského typu

$$\rho_0 \hat{\Psi} = C_{10} \nu(t) \mu(t) (\mathbf{C}_2 : \mathbf{I} - 3) , \quad (4.50)$$

kde C_{10} je materiálový parametr a součinitele $\nu(t)$ a $\mu(t)$ popisují různé účinky stárnutí materiálu: součinitel ν odpovídá štěpným reakcím a μ popisuje vliv nově vzniklých vazeb.

Pro popis změn nezatížené konfigurace se namísto \mathbf{C}_2 použije vnitřní proměnná \mathbf{C}_1^{-1} , pomocí které se vztah (4.50) zapíše jako

$$\rho_0 \hat{\Psi} = C_{10} \nu(t) \mu(t) \left(\mathbf{C}_1^{-1} : \hat{\mathbf{C}} - 3 \right). \quad (4.51)$$

Evoluční rovnice pro \mathbf{C}_1^{-1} je odvozena z požadavku, aby nové vazby vznikaly za nulového napětí. Výsledný vztah s počáteční podmínkou jsou

$$\frac{D\mathbf{C}_1^{-1}}{Dt} = \frac{\dot{\mu}}{\mu} \left(\hat{\mathbf{C}}^{-1} - \mathbf{C}_1^{-1} \right), \quad (4.52)$$

$$\mathbf{C}_1^{-1}(0) = \mathbf{I}. \quad (4.53)$$

Uvedený model neo-hookeovského typu lze zobecnit tak, aby byl analogický Mooneyho-Rivlinovu modelu v tom smyslu, že hustota volné energie závisí na druhém invariantu deformace. Lze provést i zobecnění na model Ogdenova typu.

Pro popis změn mechanických vlastností materiálu vlivem chemického stárnutí stačí znát distribuci a rychlost spotřeby kyslíku. Bezrozměrná koncentrace kyslíku je značena ξ_{O_2} . Transport kyslíku a jeho spotřeba vlivem chemických reakcí je vyjádřena upravenou difuzní rovnicí

$$k_{\text{dif}} \Delta \xi_{O_2} - \frac{k_1 \xi_{O_2}}{1 + \beta_2 \xi_{O_2}} = 0 \quad (4.54)$$

s okrajovými podmínkami

$$\vec{n} \cdot \nabla \xi_{O_2} = 0 \quad x \in \partial\Omega_f, \quad (4.55)$$

$$\xi_{O_2} = 1 \quad x \in \partial\Omega_\xi. \quad (4.56)$$

Materiálové parametry jsou zde difuzivita k_{dif} a reakční součinitele k_1 a β_2 . Difuzní rovnice je zde uvedena ve tvaru, který odpovídá stacionárnímu stavu, neboť bylo ukázáno [80, kap. 4.1.6], že nestacionární složka má na stárnutí zanedbatelný vliv.

Vazba mezi chemickými procesy a mechanickými vlastnostmi materiálu je vyjádřena pomocí evolučních vztahů pro tuhostní součinitele

$$\frac{\dot{\nu}}{\nu} = -\alpha_S \frac{k_1 \xi_{O_2}}{1 + \beta_2 \xi_{O_2}}, \quad (4.57)$$

$$\frac{\dot{\mu}}{\mu} = \alpha_R \frac{k_1 \xi_{O_2}}{1 + \beta_2 \xi_{O_2}} \quad (4.58)$$

s počátečními podmínkami

$$\nu(0) = 1, \quad \mu(0) = 1. \quad (4.59)$$

Mullinsův efekt je do modelu zahrnut prostřednictvím součinitele η , který vstupuje do vztahu pro výpočet napětí

$$\mathbf{S} = 2\eta C_{10} \mu \nu \text{dev} \left[\mathbf{C}_1^{-1} \cdot \hat{\mathbf{C}} \right] \mathbf{C}^{-1} - J p \mathbf{C}^{-1} \quad (4.60)$$

a který se spočte pomocí vztahů

$$\eta = \eta_m(\hat{\Psi}_{\text{max}}) + \left(1 - \eta_m(\hat{\Psi}_{\text{max}}) \right) \exp \left(m_1 \left(\frac{\hat{\Psi}}{\hat{\Psi}_{\text{max}}} - 1 \right) \right), \quad (4.61)$$

$$\hat{\Psi}_{\text{max}}(t) = \max \left\{ \hat{\Psi}(\tau), \tau \leq t \right\}, \quad (4.62)$$

$$\eta_m(\hat{\Psi}_{\text{max}}) = (m_2 + 1 - m_2) \exp \left(-m_3 \hat{\Psi}_{\text{max}} \right). \quad (4.63)$$

Kapitola 5

Souhrnný model stárnutí a poškození

Pro modelování změn mechanických vlastností pryže při současném uvažování únavového poškození i chemického stárnutí byl autorem navržen model [v15], který kombinuje *continuum damage mechanics* (CDM) podle [12] s dynamickým síťovým modelem (*dynamic network model* [81, 80]). Formálně je použit stejný postup jako při zahrnutí Mullinsova efektu v původním modelu (viz kap. 4.2), ale rozvoj poškození je popsán jinými vztahy. V této kapitole je uvedena formulace souhrnného modelu, příklady jeho použití a jsou diskutovány jeho vlastnosti.

5.1 Formulace modelu

Pro popis kinematiky je použit tentýž rozklad jako v kap. 4.2, tj. platí

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}}, \quad (5.1)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}, \quad (5.2)$$

$$\hat{\mathbf{F}} = \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_2, \quad (5.3)$$

$$\mathbf{C}_2 = \mathbf{F}_2^T \mathbf{F}_2, \quad (5.4)$$

přičemž vnitřní proměnná \mathbf{C}_1^{-1} vyjadřuje zbytkovou deformaci.

Hustota Helmholtzovy volné energie Ψ je funkcí elastické části deformace \mathbf{C}_2 , vnitřních proměnných μ a ν vyjadřujících stárnutí a vnitřní proměnné D vyjadřující poškození. Neo-Hookeovský tvar je

$$\Psi = C_{10} \mu \nu (1 - D) (\mathbf{C}_2 : \mathbf{I} - 3) = C_{10} \mu \nu (1 - D) (\hat{\mathbf{C}} : \mathbf{C}_1^{-1} - 3), \quad (5.5)$$

kde C_{10} je parametr modelu. Druhý Piolův-Kirchhoffův tenzor napětí je v takovém případě a při uvažování nestlačitelného materiálu

$$\mathbf{S} = 2 C_{10} \mu \nu (1 - D) \operatorname{dev} \left[\mathbf{C}_1^{-1} \hat{\mathbf{C}} \right] \mathbf{C}^{-1} - p \mathbf{C}^{-1}. \quad (5.6)$$

Rozvoj poškození je popsán vztahy

$$\dot{D} = (-AY)^a, \quad Y = \frac{\partial \Psi}{\partial D}, \quad (5.7)$$

s parametry A a a a počáteční podmínkou

$$D(0) = 0. \quad (5.8)$$

Změna tuhosti vlivem stárnutí je opět

$$\frac{\dot{\nu}}{\nu} = -\alpha_S \frac{k_1 \xi_{O_2}}{1 + \beta_2 \xi_{O_2}}, \quad (5.9)$$

$$\frac{\dot{\mu}}{\mu} = \alpha_R \frac{k_1 \xi_{O_2}}{1 + \beta_2 \xi_{O_2}} \quad (5.10)$$

s počátečními podmínkami

$$\nu(0) = 1, \quad \mu(0) = 1. \quad (5.11)$$

Při zanedbání difuze kyslíku, např. v případě tenkých vzorků, je koncentrace ξ_{O_2} konstantní a předchozí vztahy lze zjednodušit na

$$\frac{\dot{\nu}}{\nu} = -k_{\text{S}}, \quad (5.12)$$

$$\frac{\dot{\mu}}{\mu} = k_{\text{R}}, \quad (5.13)$$

kde k_{R} a k_{S} jsou nové parametry modelu stárnutí.

Simulace chování pryžového dílu může tedy být popsána např. v totální Lagrangeově formulaci jako následující počátečně-okrajová úloha.

Úloha 5.1:

Jsou předepsány objemové síly $\vec{f} : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^N$, posuvy části hranice $\vec{u}_{\text{D}} : \Gamma_{\text{D}} \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^N$ a vektor napětí $\vec{t}_{\text{N}} : \Gamma_{\text{N}} \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^N$. Dále je předepsán průběh teploty¹ $T : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}$ a okrajové podmínky pro bezrozměrnou koncentraci kyslíku ξ_{O_2}

$$\xi_{\text{O}_2} = \bar{\xi}_{\text{O}_2} \quad \text{na } \Gamma_{\text{O}_2\text{D}}, \quad (5.14)$$

$$\nabla \xi_{\text{O}_2} \cdot \vec{n} = f_{\text{O}_2} \quad \text{na } \Gamma_{\text{O}_2\text{N}}. \quad (5.15)$$

Řešením úlohy se rozumí najít pole posuvů $\vec{u} : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^N$, pole bezrozměrné koncentrace kyslíku $\xi_{\text{O}_2} : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}$, pole tuhostních součinitelů $\mu : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}$ a $\nu : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}$, pole parametru poškození $D : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}$ a pole inverzí trvalých deformací $\mathbf{C}_1^{-1} : \Omega_0 \times \langle t_0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^{N \times N}$ takových, že v každém čase $t \in \langle t_0, t_1 \rangle$ splňují podmínku rovnováhy a difuzní rovnici

$$\text{Div}(\mathbf{S}\mathbf{F}^{\text{T}}) + \rho_0 \vec{f} = 0, \quad \text{v } \Omega, \quad (5.16)$$

$$k_{\text{dif}} \Delta \xi_{\text{O}_2} - \frac{k_1 \xi_{\text{O}_2}}{1 + \beta_2 \xi_{\text{O}_2}} = 0, \quad \text{v } \Omega. \quad (4.54)$$

s okrajovými podmínkami

$$\vec{u} = \vec{u}_{\text{D}} \quad \text{na } \Gamma_{\text{D}}, \quad (5.17)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \vec{n} = \vec{t}_{\text{N}} \quad \text{na } \Gamma_{\text{N}}, \quad (5.18)$$

$$\xi_{\text{O}_2} = \bar{\xi}_{\text{O}_2} \quad \text{na } \Gamma_{\text{O}_2\text{D}}, \quad (5.14)$$

$$\nabla \xi_{\text{O}_2} \cdot \vec{n} = f_{\text{O}_2} \quad \text{na } \Gamma_{\text{O}_2\text{N}} \quad (5.15)$$

a evoluční vztahy

$$\frac{\text{D}\mathbf{C}_1^{-1}}{\text{D}t} = \frac{\dot{\mu}}{\mu} \left(\hat{\mathbf{C}}^{-1} - \mathbf{C}_1^{-1} \right) \quad \text{v } \Omega, \quad (4.52)$$

$$\dot{D} = (AY)^a, \quad Y = \frac{\partial \Psi}{\partial D} \quad \text{v } \Omega, \quad (5.7)$$

$$\frac{\dot{\mu}}{\mu} = \alpha_{\text{R}} \frac{k_1 \xi_{\text{O}_2}}{1 + \beta_2 \xi_{\text{O}_2}} \quad \text{v } \Omega, \quad (5.10)$$

$$\frac{\dot{\nu}}{\nu} = \alpha_{\text{S}} \frac{k_1 \xi_{\text{O}_2}}{1 + \beta_2 \xi_{\text{O}_2}} \quad \text{v } \Omega, \quad (5.9)$$

¹ Není uvažována termomechanická vazba a rozložení teploty lze tedy určit nezávisle jako řešení úlohy vedení tepla.

s počátečními podmínkami

$$\mathbf{C}_1^{-1} = \mathbf{I} \quad \text{v } \Omega , \quad (5.19)$$

$$D = 0 \quad \text{v } \Omega , \quad (5.20)$$

$$\mu = 1 \quad \text{v } \Omega , \quad (5.21)$$

$$\nu = 1 \quad \text{v } \Omega . \quad (5.22)$$

□

5.2 Příklady

Chování materiálového modelu popsaného v předchozí části je na tomto místě ilustrováno několika příklady odezvy na typické způsoby zatěžování. Většina příkladů byla představena v [v15]. Jde vesměs o odezvy na různé typy zatěžování za předpokladu homogenní deformace při jednoosé napjatosti. Díky tomuto předpokladu přejde původní okrajová úloha 5.1 na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (ODR), kterou lze řešit ve speciálních případech (např. relaxace) analyticky nebo obvyklými numerickými řešiči. Odvození potřebných vztahů je popsáno v dodatku A.

Příklad 5.1: Jednoosá napjatost

Protažení je předepsáno funkcí

$$\lambda(t) = 1 + 0,1 \sin^2(2\pi t) . \quad (5.23)$$

Teplota T i bezrozměrná koncentrace kyslíku ξ_{O_2} se předpokládají konstantní v čase i v prostoru a hodnoty parametrů modelu jsou

$$C_{10} = 1,0 \text{ Pa} , \quad (5.24)$$

$$A = 5,0 \text{ Pa} , \quad (5.25)$$

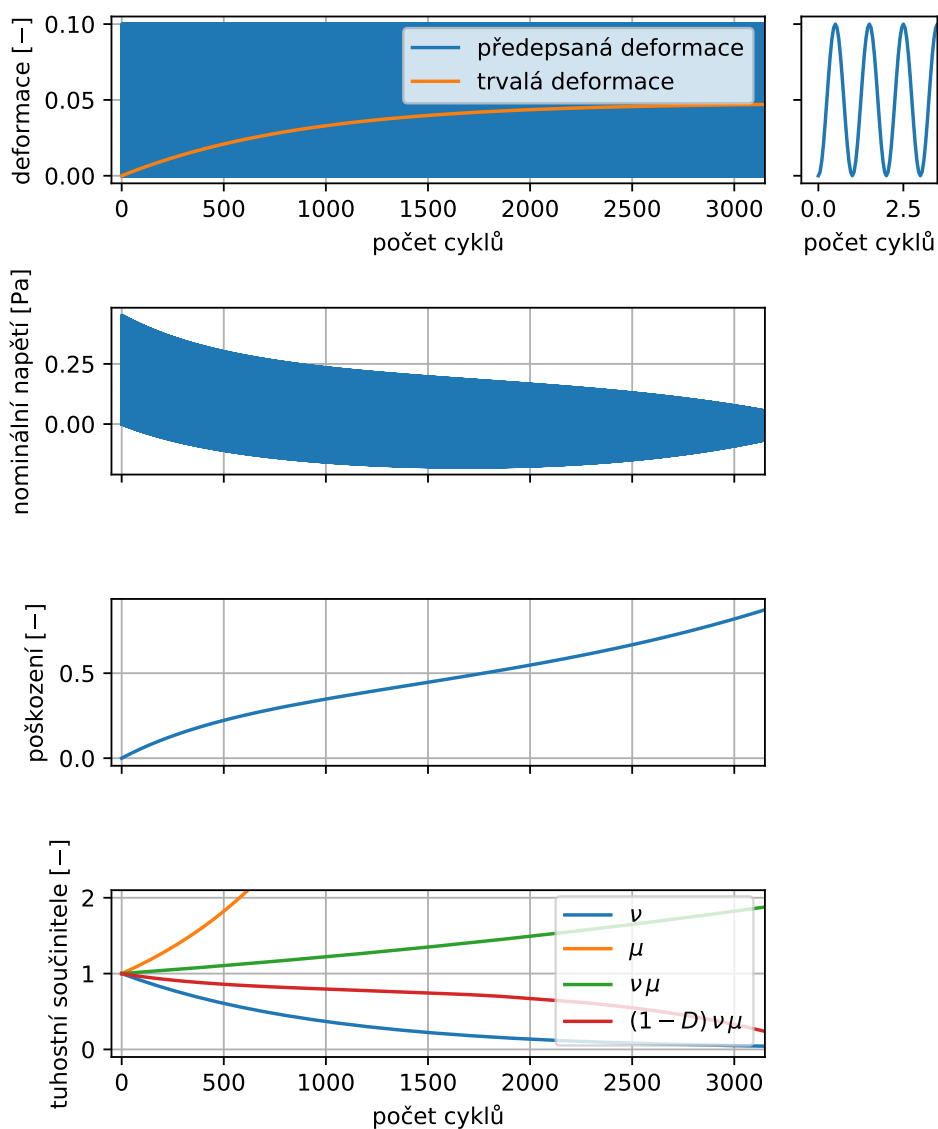
$$a = 3,0 , \quad (5.26)$$

$$k_{\text{R}} = 1,2 \cdot 10^{-3} , \quad (5.27)$$

$$k_{\text{S}} = 10^{-3} . \quad (5.28)$$

Výsledné časové závislosti vnitřních proměnných a napětí jsou vykresleny v obr. 5.1. Trvalá deformace (resp. deformace odpovídající nezatíženému stavu) roste z nuly na střední hodnotu předepsané cyklické deformace a zatížení se tak mění z původně míjivého na symetrické. V souladu s hodnotami parametrů k_{R} a k_{S} roste hodnota součinu $\nu \mu$, tj. převažuje z pohledu vlivu stárnutí na celkovou tuhost proces tvorby nových vazeb nad jejich zánikem. V součinu se součinitelem poškození ovšem celková tuhost klesá, neboť poškození je ve svém efektu jev nevratný.

Porovnání závislosti napětí na deformaci při prvním a posledním cyklu simulace je na obr. 5.2. Není patrná žádná hystereze, neboť hodnoty součinitelů stárnutí k_{R} a k_{S} jsou příliš malé vzhledem ke zvolené frekvenci zatížení a jiný mechanismus, který by k hysterezi mohl vést, použitý model neobsahuje. Kromě výrazného poklesu tuhosti je patrná i změna nezatíženého stavu a jí odpovídající



Obrázek 5.1. Výsledky numerické simulace cyklické zkoušky při jednoosé napjatosti.

tlakové napětí při nulové deformaci v případě posledního cyklu, což je jev běžně pozorovaný při experimentech. ■

Příklad 5.2: Dvoukroková relaxace

Protažení je předepsáno funkcí

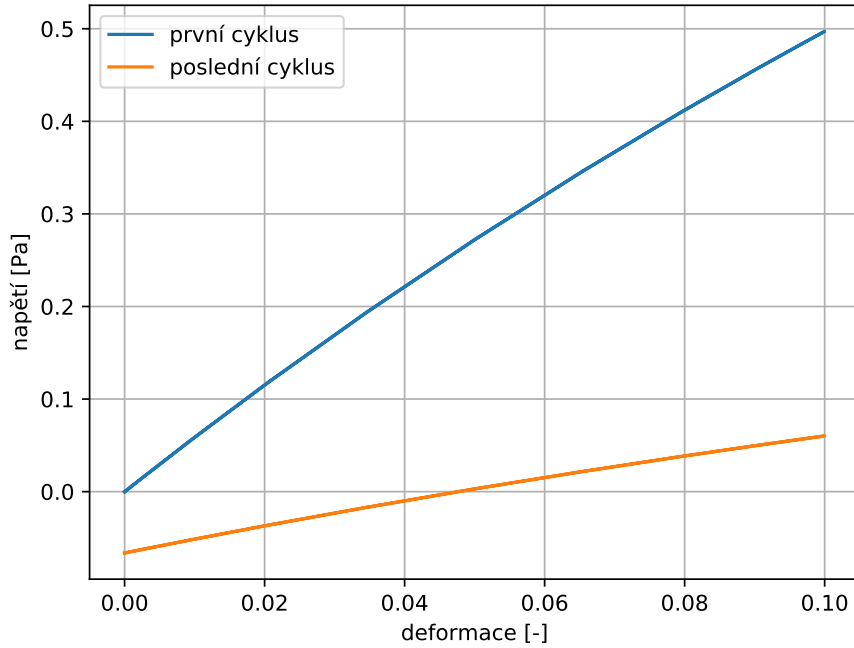
$$\lambda(t) = \begin{cases} 1,2 & 0 \leq t < 5000 \text{ s} , \\ 1,3 & 5000 \leq t . \end{cases} \quad (5.29)$$

Výsledné průběhy napětí a poškození jsou vykreslena v obr. 5.3 pro tyto hodnoty parametrů modelu:

$$C_{10} = 1,0 \text{ Pa} , \quad (5.30)$$

$$A = 1,5 \text{ Pa} , \quad (5.31)$$

$$a \in \{4,0, 4,5, 8,0\} , \quad (5.32)$$



Obrázek 5.2. Závislost napětí na deformaci v prvním a 3150 cyklu.

$$k_R = 1,2 \cdot 10^{-3} , \quad (5.33)$$

$$k_S = 10^{-3} . \quad (5.34)$$

Výsledky jsou zobrazeny pro různé hodnoty exponentu a . Je patrné, že průběh trvalé deformace není exponentem a ovlivněn, na rozdíl od průběhu napětí a poškození. Napětí v každém případě klesá při každém kroku zatížení k nule, což je způsobeno stárnutím, konkrétně změnou nezatížené konfigurace. Tento závěr plyne z faktu, že při druhém kroku napětí opět vzroste a jeho pokles tedy nebyl způsoben štěpnými reakcemi ani poškozením. Pokud by totiž pokles napětí byl způsoben poklesem součinitele ν k nule nebo nárůstem proměnné D k jedné, změna deformace by nezpůsobila výraznou změnu napětí. Dalším patrným efektem změny nezatížené konfigurace je odpovídající pokles rychlosti poškození. ■

Příklad 5.3: Relaxace při cyklicky proměnné teplotě

Protážení má po celou dobu experimentu hodnotu $\lambda = 1,2$ a teplota je předepsána jako

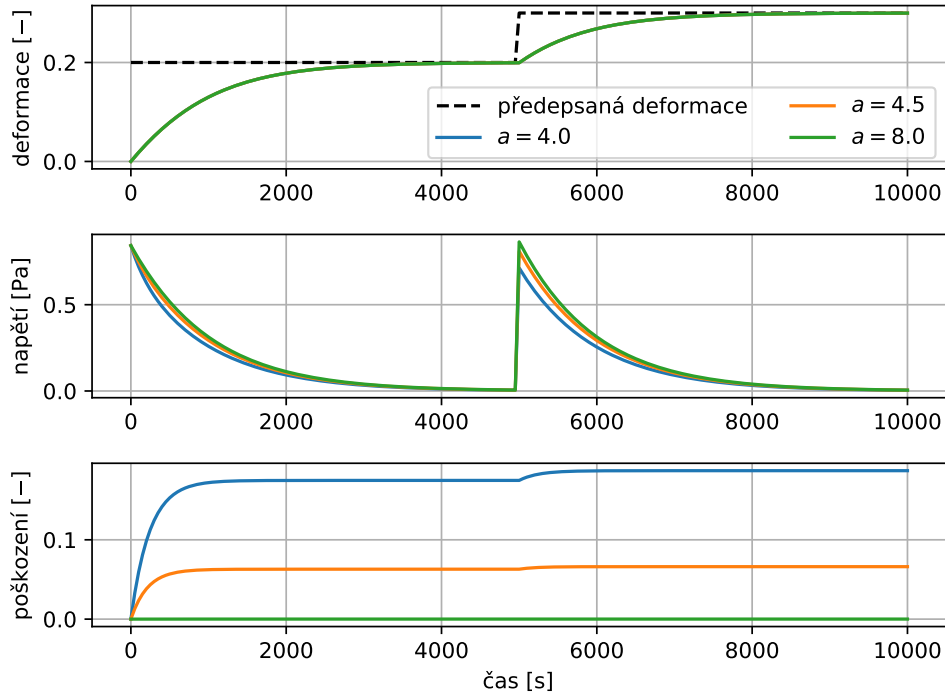
$$T(t) = 300 \text{ K} + T_{\text{amp}} \sin^2(\pi f t) , \quad (5.35)$$

s frekvencí $f = 10^{-3} \text{ Hz}$ a třemi různými amplitudami, $T_{\text{amp}} \in \{20 \text{ K}, 10 \text{ K}, 1 \text{ K}\}$.

Závislosti koeficientů evolučních vztahů (5.13) a (5.12) na teplotě T jsou určeny Arrheniovým zákonem

$$k_i(T) = k_{0i} \exp\left(\frac{-E_{ai}}{RT}\right) , \quad i \in \{R, S\} , \quad (5.36)$$

jehož parametry jsou součinitel k_{0i} a aktivační energie E_{ai} . Univerzální plynová konstanta je označena R .



Obrázek 5.3. Výsledky numerické simulace dvoukrokové relaxace při jednoosé napjatosti.

Výsledné průběhy napětí, poškození a koeficientů evolučních rovnic k_R a k_S jsou vykresleny v obr. 5.4 pro tyto hodnoty parametrů modelu:

$$C_{10} = 1,0 \text{ Pa} , \quad (5.37)$$

$$A = 1,5 \text{ Pa} , \quad (5.38)$$

$$a = 6,0 , \quad (5.39)$$

$$k_{0R} = 1,2 \cdot 10^{-3} , \quad (5.40)$$

$$k_{0S} = 10^{-3} , \quad (5.41)$$

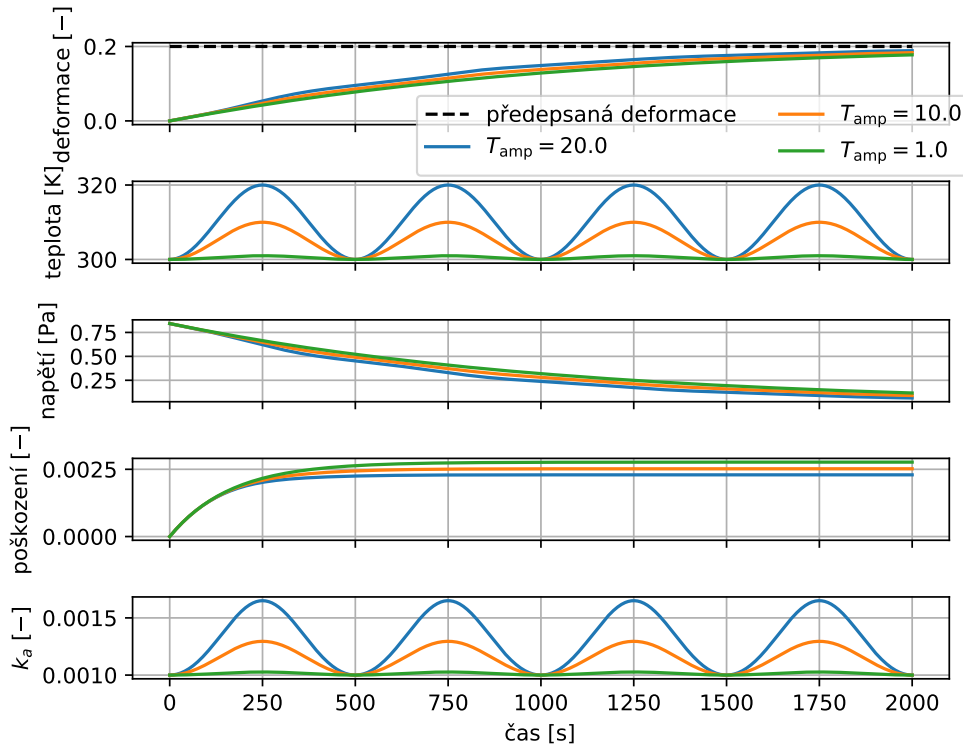
$$E_{aR} = 2 \cdot 10^4 \text{ J} , \quad (5.42)$$

$$E_{aS} = 2 \cdot 10^4 \text{ J} . \quad (5.43)$$

Z grafů je patrné, že zbytková deformace se blíží předepsané deformaci, přičemž nejbližší jsou hodnoty odpovídající amplitudě $T_{\text{amp}} = 20 \text{ K}$. Následkem průběhů zbytkové deformace klesá napětí k nule. Hodnoty poškození se ustálí, největší poškození odpovídá nejmenší teplotní amplitudě a naopak. ■

5.3 Vlastnosti modelu

Chování modelu ilustrované v předchozí kapitole na příkladech několika vybraných typů zatížení odpovídá do značné míry výchozímu dynamickému síťovému modelu. Výjimkou, která je proto předmětem zkoumání této práce, je vztah stárnutí a únavového poškození. Projevy stárnutí mají různý vliv na vývoj poškození. Pokles tuhosti či změna nezatížené konfigurace při zachovaném zatěžování snižují rychlost poškozování, zatímco růst tuhosti tuto rychlost zvyšuje.



Obrázek 5.4. Výsledky numerické simulace relaxace při jednoosé napjatosti a cyklicky proměnné teplotě.

Změna nezátížená konfigurace je proces do jisté míry vratný. Naproti tomu pokles tuhosti vlivem stárnutí i poškození je nevratný. Pokud je součinitel poškození nenulový, vždy převáží nad nárůstem tuhosti.

5.4 Vliv poškození na transport kyslíku

Výše popsaný model obsahuje implicitně vliv stárnutí na rozvoj únavového poškození, vazba v opačném směru však přítomna není. Jako jeden z možných mechanismů takové vazby autor navrhuje působení mikrotrhlin na difuzi kyslíku. Přítomnost trhliny, která je ekvivalentní poškození, může pro pohyb molekul kyslíku tvořit v krajních případech buď překážku nebo zkratku. Vliv poškození na proces stárnutí pak spočívá ve zrychlení či zpomalení přísunu kyslíku.

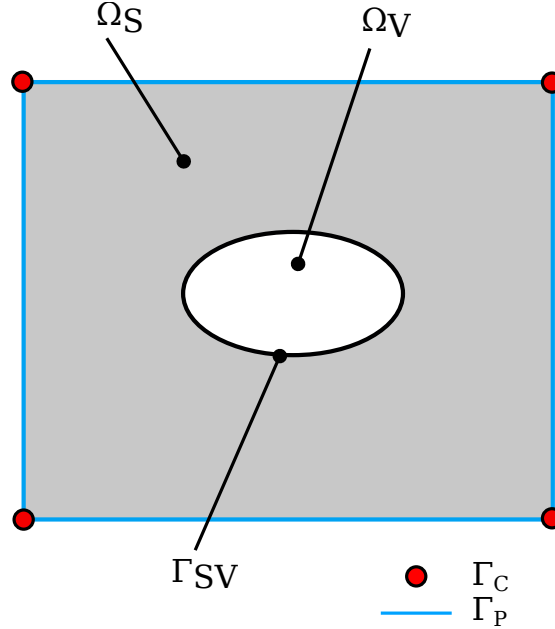
V literatuře zabývající se difuzí v pryžích je zmiňována spíše první možnost, překážky jsou ovšem tvořeny částicemi plniva, čemuž odpovídají i experimentální výsledky. V této kapitole jsou popsány simulace ustáleného stavu difuze metodou konečných prvků v periodickém médiu s nehomogenitami různých tvarů obou typů včetně jejich kombinace. Výsledkem těchto simulací jsou především homogenizované koeficienty difuzivity v závislosti na geometrii a velikosti trhlin. Tyto závislosti jsou validovány analytickými vzorci známými z literatury a v závěru kapitoly je navržen postup dávající do souvislosti proměnnou poškození D s makroskopickou hodnotou difuzivity k_{dif} .

Příklad výpočetní oblasti, kterou je jedna periodická buňka, je znázorněn na obr. 5.5. Je tvořena pevnou fází Ω_S , trhlinou Ω_V , hranicí mezi pevnou fází a trhlinou Γ_{SV} a vnější hranicí výpočetní oblasti Γ_P . Předpokladem je, že transport

kyslíku na rozhraní pevné a plynné fáze se řídí Henryho zákonem

$$c = S p_{O_2} , \quad (5.44)$$

ve kterém je c koncentrace kyslíku v pevné fázi, p_{O_2} je parciální tlak kyslíku v plynné fázi a součinitel S tzv. Henryho konstanta.



Obrázek 5.5. Geometrie výpočetní oblasti pro periodické médium s trhlinami

Dále se předpokládá, že transport kyslíku v plynné fázi probíhá mnohem většími rychlostmi než jeho difuze v pevné fázi. Z toho vyplývá, že parciální tlak kyslíku v každé uzavřené a oddělené trhlíně je konstantní a tedy, díky Henryho zákonu (5.44), je i koncentrace kyslíku na hranici každé takové trhliny konstantní. Toto samozřejmě platí, je-li Henryho konstanta S kladná. Pokud je nulová, k pohybu kyslíku přes hranici trhliny nedochází a trhlina se pro molekuly kyslíku chová jako překážka. První varianta, kdy trhlina působí jako zkratka je popsána následující okrajovou úlohou.

Úloha 5.2: Difuze kyslíku v periodickém médiu s trhlinami

Pro zadaný makroskopický gradient koncentrace ∇c_0 najít flukтуаční část c_1 takovou, která splňuje difuzní rovnici

$$\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c) = 0 \quad \text{na } \Omega_S , \quad (5.45)$$

kde celková koncentrace $c = c_0 + c_1$, Dirichletovy okrajové podmínky jsou

$$c_1 = 0 \quad \text{na } \Gamma_C , \quad (5.46)$$

periodické okrajové podmínky

$$c_1(\mathbf{x}_1) = c_1(\mathbf{x}_2) \quad \forall \mathbf{x}_1 \in \Gamma_P, \mathbf{x}_2 = P(\mathbf{x}_1) , \quad (5.47)$$

kde P je operátor, který bodům $z \in \Gamma_P$ přiřazuje odpovídající body na protější části hranice, a konečně podmínky ve tvaru lineární kombinace

$$c(\mathbf{x}_1) = c(\mathbf{x}_2) \quad \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Gamma_{SV} . \quad (5.48)$$

□

Slabá formulace úlohy 5.2 je v případě konstantní difuzivity \mathbf{K} : Pro zadaný gradient ∇c_0 najít $c_1 \in \mathcal{U}$ takové, že

$$\int_{\Omega_S} \mathbf{K} \nabla c_1 \nabla q = - \int_{\Omega_S} \mathbf{K} \nabla c_0 \nabla q, \quad \forall q \in \mathcal{V}, \quad (5.49)$$

kde prostor přípustných řešení $\mathcal{U} = \{ c \in H^1(\Omega_S) : c = 0 \text{ na } \Gamma_P \cup \Gamma_C \text{ a } c_0 + c = \text{konst. na } \Gamma_{SV} \}$ a prostor testovacích funkcí $\mathcal{V} = \{ q \in H^2(\Omega_S) : q = 0 \text{ na } \Gamma_P \cup \Gamma_C \cup \Gamma_{SV} \}$.

Homogenizované koeficienty se spočtou tak, že se řeší úlohy, ve kterých jsou bázové vektory \mathbf{e}_i použity coby předepsané gradienty makroskopické koncentrace $\nabla c_0^{(i)}$, tj.

$$\nabla c_0^{(i)} = \mathbf{e}_i. \quad (5.50)$$

Složky homogenizovaného tenzoru difuzivity se potom spočtou jako

$$K_{ij}^H = \frac{1}{|\Omega_S|} \int_{\Omega_S} \mathbf{K} \left(\nabla c_0^{(i)} + \nabla c_1^{(i)} \right) \left(\nabla c_0^{(j)} + \nabla c_1^{(j)} \right),$$

kde $\nabla c_1^{(i)}$ je řešení okrajové úlohy (5.49) s gradientem makroskopické koncentrace definovaným (5.50).

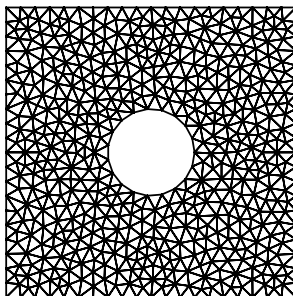
Numerické simulace metodou konečných prvků (MKP) byly implementovány pomocí knihovny SfePy [24]. Parametrické generování MKP sítě bylo realizováno pomocí Gmsh [37].

Příklad 5.4: Kruhová trhlina proměnného průměru

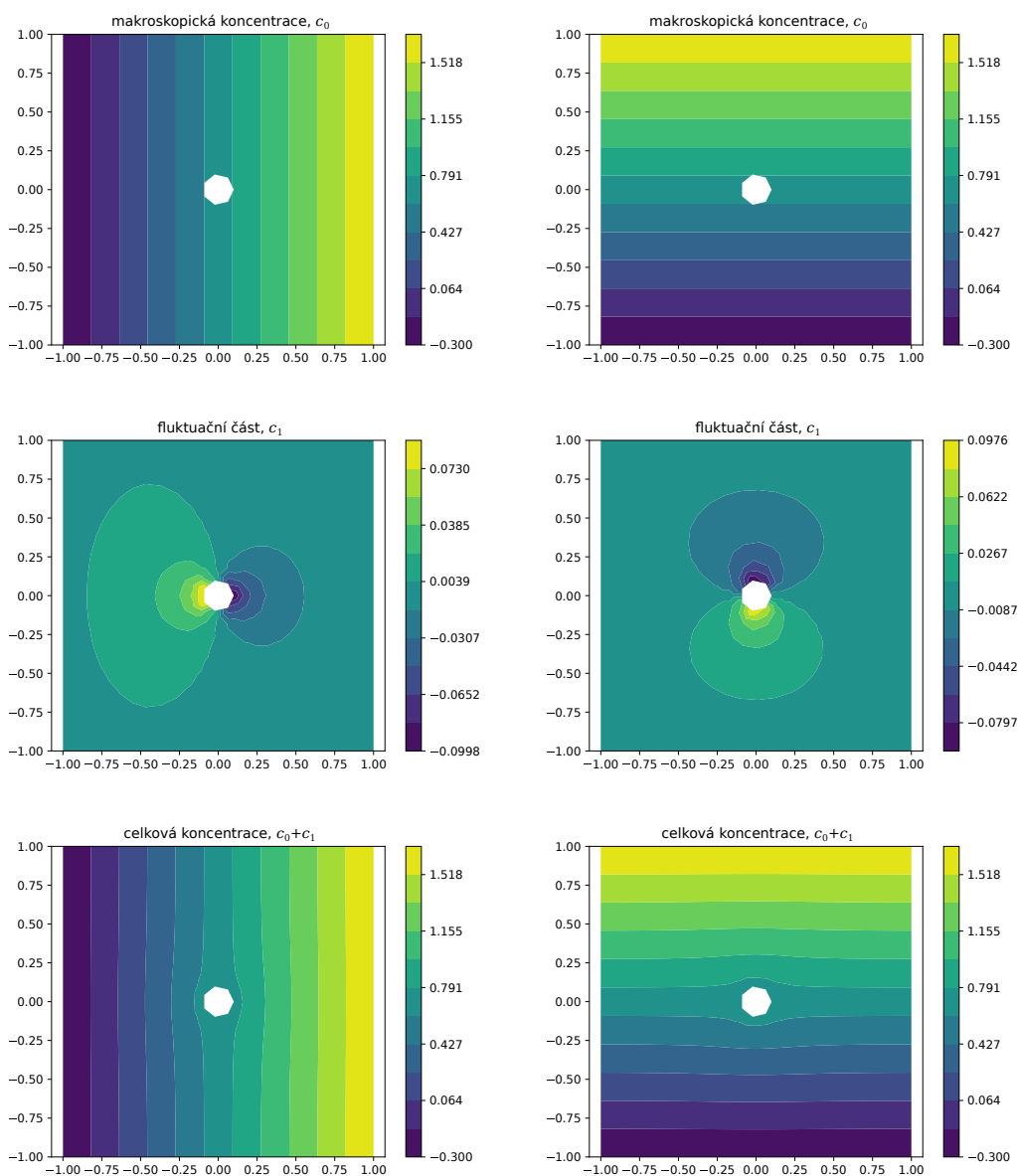
Úloha je definována v rovině, byly použity trojúhelníkové prvky s lineární aproximací koncentrace. Příklad sítě je na obr. 5.6. Difuzivita pryže (pevné fáze) je zvolena jednotková, tj.

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.51)$$

Henryho koeficient se předpokládá kladný, $S > 0$, tj. přestup kyslíku přes rozhraní Γ_{SV} je možný.



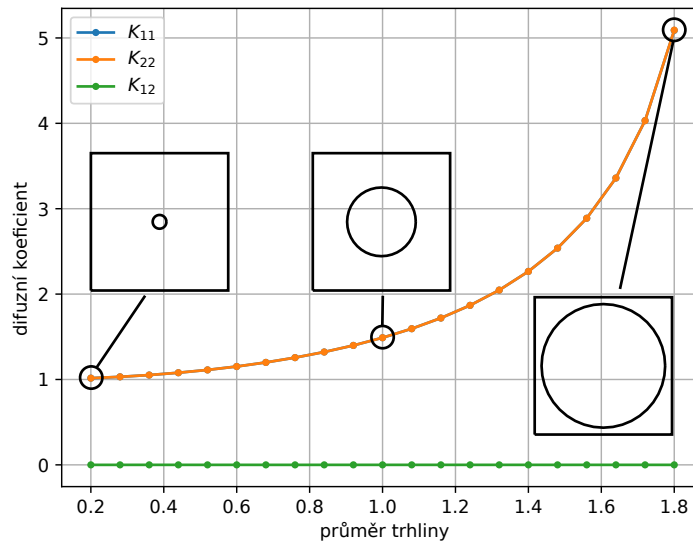
Obrázek 5.6. MKP síť pro výpočet homogenizovaných difuzních koeficientů (příklad 5.4)



Obrázek 5.7. Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, kruhová trhlina o průměru 0,2 (příklad 5.4). Levý sloupec obsahuje výsledky pro $\nabla c_0 = [1, 0]^T$, pravý sloupec pro $\nabla c_0 = [0, 1]^T$. Zcela nahoře jsou hodnoty c_0 , uprostřed flukтуаční část c_1 a dole celková hodnota $c_0 + c_1$.

Ukázka výsledných koncentrací je na obr. 5.7. V případě gradientu $\nabla c_0 = [1, 0]^T$ je flukтуаční část koncentrace evidentně nesymetrická, což je způsobeno hrubou diskretizací hranice trhliny nesymetrickou podle svislé osy. Tento jev byl pro úplnost v obrázku ponechán.

Závislost homogenizovaných koeficientů na průměru trhliny je na obr. 5.8. Prvky na diagonále mají stejnou hodnotu a rostou s objemovým podílem trhliny, zatímco mimodiagonální složky jsou nulové, tenzor difuzních koeficientů je tedy izotropní. ■



Obrázek 5.8. Homogenizované koeficienty v závislosti na průměru kruhové trhliny (příklad 5.4).

Příklad 5.5: Proměnné vnější rozměry periodické buňky

Průměr kruhové trhliny je v tomto příkladě 0,4, ale mění se jejich vzdálenost podél vodorovné osy. Toho je dosaženo změnou vnějších rozměrů výpočetní oblasti. Ostatní parametry zůstávají stejné jako v předchozím příkladě.

Ukázka výsledků MKP výpočtu je na obr. 5.9. Homogenizované koeficienty, viz obr. 5.10, jsou v tomto případě neizotropní kromě případu čtvercové buňky a opět rostou s objemovým podílem trhliny.



Příklad 5.6: Trhlina tvaru elipsy

V tomto příkladu jsou uvažovány trhliny tvaru elipsy s konstantní plochou, ale proměnným poměrem délek poloos. Ostatní parametry jsou stejné jako v ostatních příkladech.

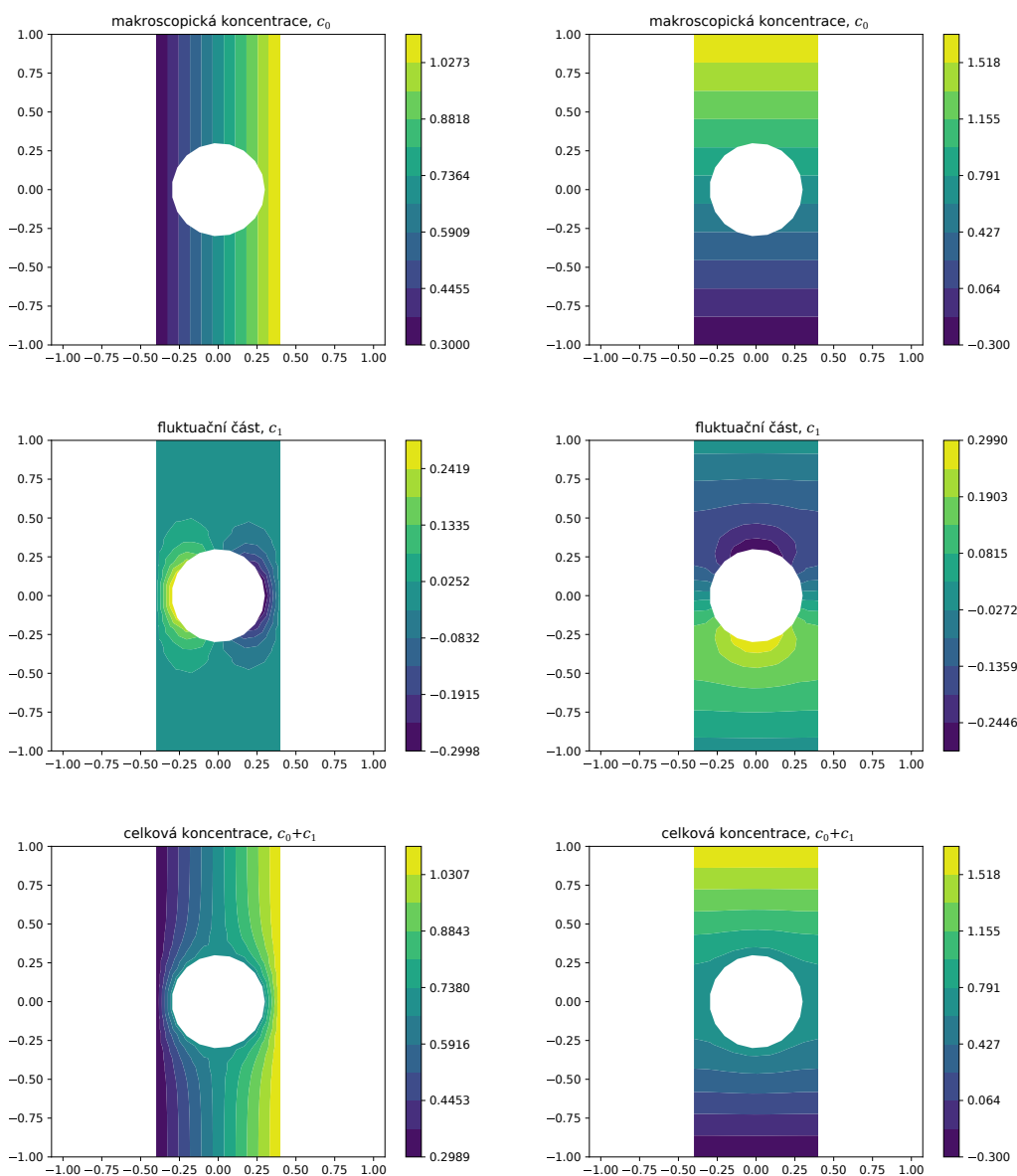
Příklad výsledných koncentrací je zobrazen na obr. 5.11. Homogenizované koeficienty, viz obr. 5.12, jsou opět anizotropní kromě případu kruhové trhliny. Stejně jako v předchozím příkladě platí, že koeficient ve směru, ve kterém jsou mezi trhlinami menší vzdálenosti, nabývá větší hodnoty a naopak.

Protože matice difuzních koeficientů reprezentuje tenzorovou veličinu, podléhá obvyklým transformačním vztahům při změnách souřadnic. Tento fakt byl ověřen porovnáním transformovaných složek matice s výsledkem numerických simulací, ve kterých byla trhlina pootočená.



Příklad 5.7: Řešení v prostoru

Převedení popisovaných rovinných úloh do prostoru je možné provést s minimálními změnami v kódu díky obecnosti použité MKP knihovny SfePy. Tento příklad byl řešen na síti tvořené čtyřuzlovými prvky s lineární aproximací koncentrace.



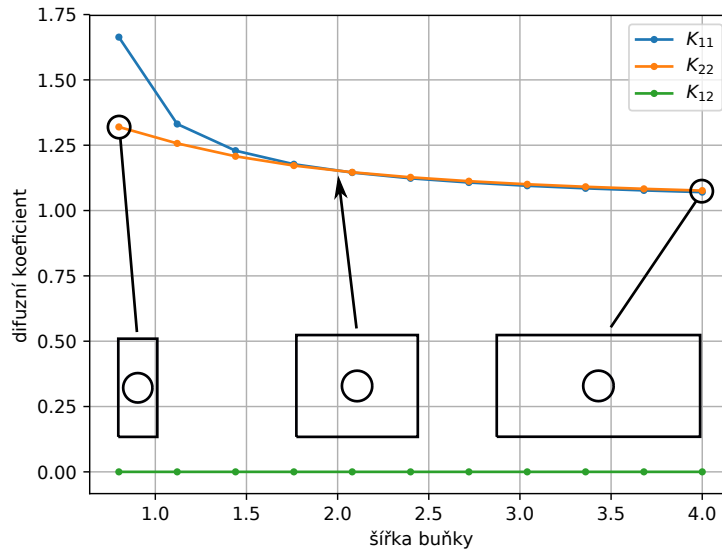
Obrázek 5.9. Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, šířka buňky 0,8 (příklad 5.5). Levý sloupec obsahuje výsledky pro $\nabla c_0 = [1, 0]^T$, pravý sloupec pro $\nabla c_0 = [0, 1]^T$. Zcela nahoře jsou hodnoty c_0 , uprostřed flukuační část c_1 a dole celková hodnota $c_0 + c_1$.

Obr. 5.13 obsahuje příklad výsledných koncentrací. Další diskuzi obsahuje kap. 5.4.1, kde jsou homogenizované koeficienty porovnány s analytickými vztahy. ■

Příklad 5.8: Neprostupná částice plniva

Volba Henryho koeficientu $S = 0$ vede k situaci, kdy se inkluze vzhledem k difuzi chovají jako překážky. Toto může být, vzhledem k experimentálním výsledkům [14, 4], případ částic plniva.

Z příkladu výsledných koncentrací na obr. 5.14 je patrné, že průběh koncentrace podél hranice inkluze je kvalitativně zcela odlišný od případů s propustnou inkluzí. Hodnoty homogenizovaných koeficientů v závislosti na objemovém po-



Obrázek 5.10. Homogenizované koeficienty v závislosti na vzdálenosti trhlin (příklad 5.5).

měru inkluze jsou na obr. 5.15. Vyšší poměr plniva vede v souladu s očekáváním k poklesu difuzivity. Díky symetrii úlohy jsou homogenizované koeficienty izotropní. ■

Příklad 5.9: Částečně odtržená částice plniva

Tento příklad ukazuje kombinaci obou druhů podmínek zkoumaných dosud. Předpokládá se, že kruhová inkluze - částice plniva - je na horní části svého povrchu ($y \geq 0$) odtržena od matrice, tj. Henryho koeficient je zde kladný, $S > 0$, a transport kyslíku přes tuto část hranice je možný. Na zbylé části hranice ($y \leq 0$) je Henryho koeficient nulový, $S = 0$, a rozhraní je zde pro kyslík neprostupné.

Výsledné rozložení koncentrace je vykresleno na obr. 5.16 a matice difuzních koeficientů je

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1,234 & -0,0109 \\ -0,0109 & 0,817 \end{bmatrix}. \quad (5.52)$$

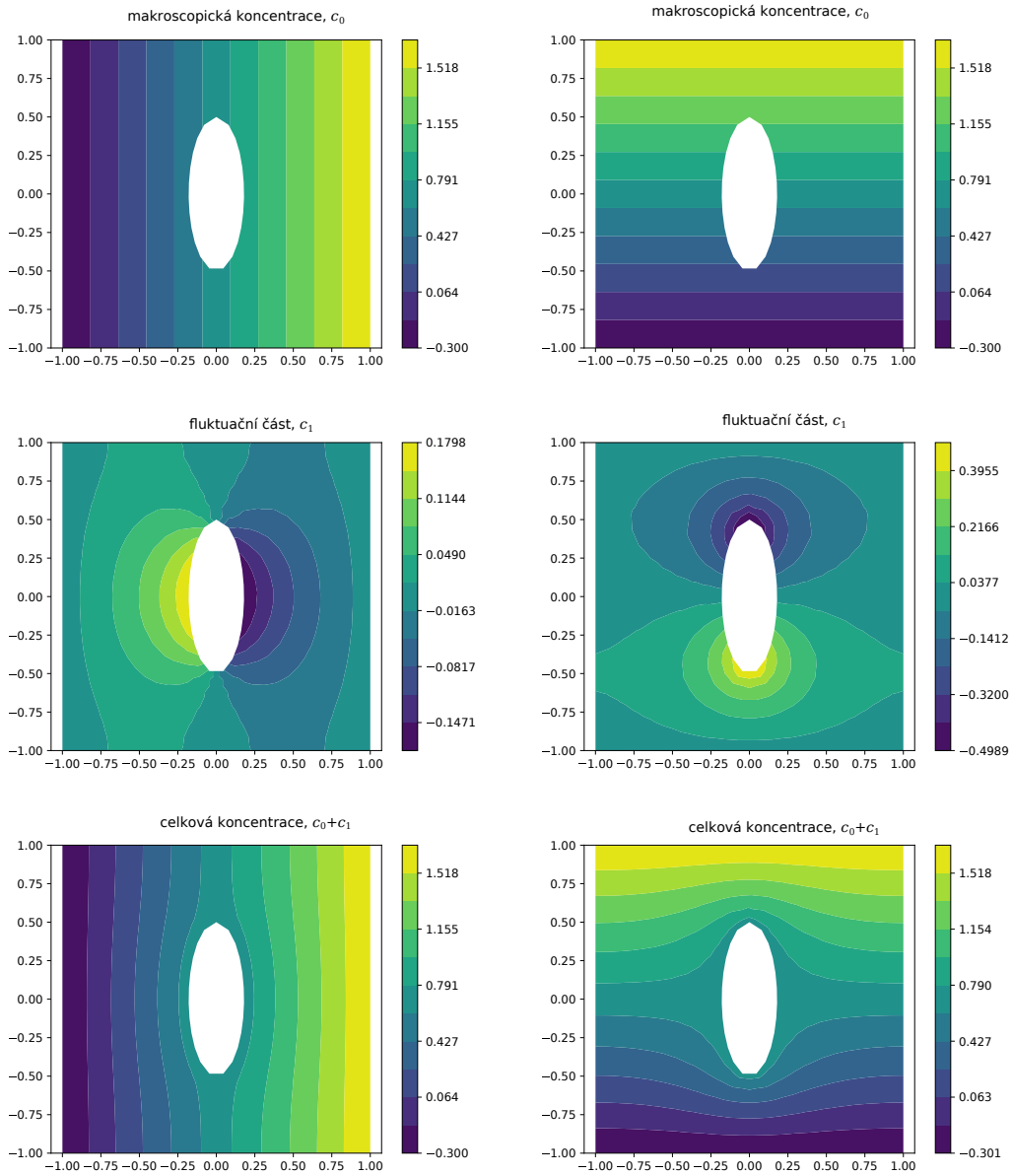
5.4.1 Aproximace homogenizovaných koeficientů

Z literatury jsou známy nejrůznější vztahy pro homogenizovanou vodivost kompozitních materiálů, které je možné díky formální podobnosti difuzní rovnice použít pro srovnání s prezentovanými numerickými výpočty.

Prvním je Maxwellův vztah [99] pro řídkce rozptýlené kulové částice, tj. materiál, ve kterém je velikost částic zanedbatelná proti vzdálenosti mezi nimi,

$$\kappa = 1 - 3\phi_V \left(\frac{2 + \gamma}{1 - \gamma} + \phi_V \right)^{-1}, \quad (5.53)$$

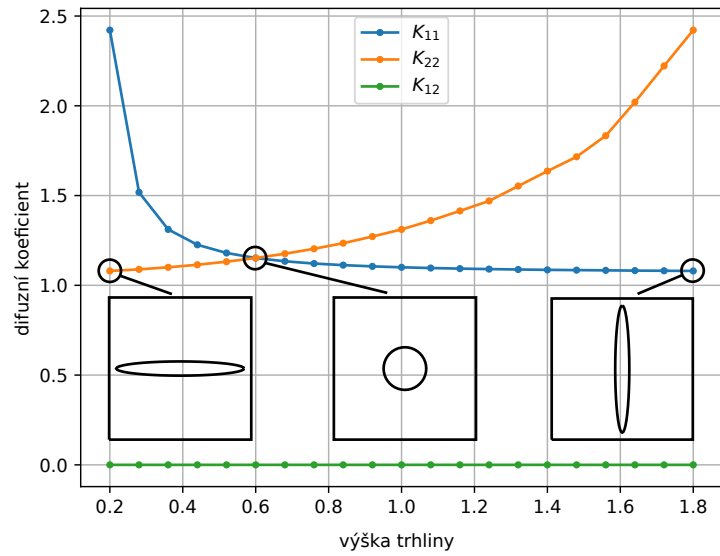
kde $\phi_V \in (0, \pi/6)$ je objemový podíl inkluze, $\gamma = K_F/K_R$ je poměr vodivostí inkluze (K_F) a matrice (K_R) a κ je poměr průměrné vodivosti kompozitu a matrice.



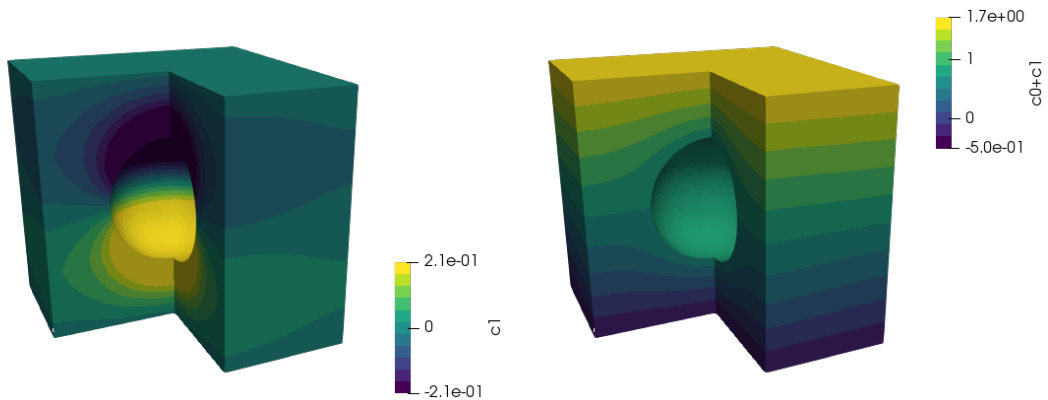
Obrázek 5.11. Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, trhlina tvaru elipsy s poloosami 0,5 a 0,25 (příklad 5.6). Levý sloupec obsahuje výsledky pro $\nabla c_0 = [1, 0]^T$, pravý sloupec pro $\nabla c_0 = [0, 1]^T$. Zcela nahoře jsou hodnoty c_0 , uprostřed flukuační část c_1 a dole celková hodnota $c_0 + c_1$.

V kontextu této práce mají význam dva speciální případy: $\gamma = 0$ v případě nevodivé inkluze (částice plniva) a $\gamma \rightarrow \infty$ v případě plně propustné trhliny. Dalším vztahem je Rayleighův pro kulové inkluze rozmístěné v krychlové síti [86, 99]:

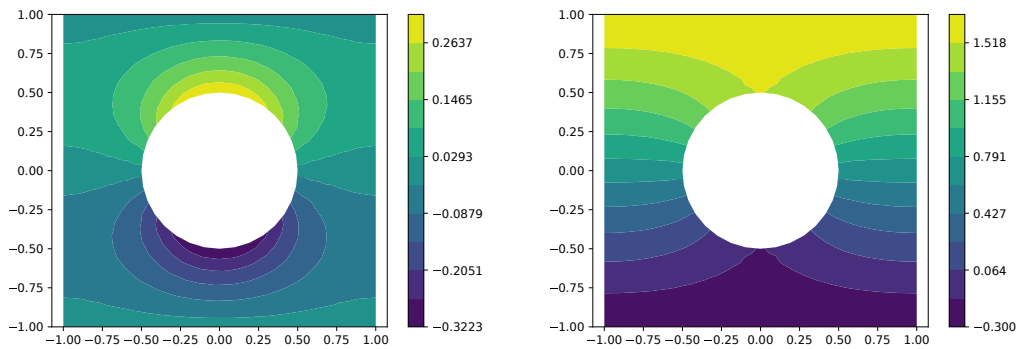
$$\kappa = 1 - 3\phi_V \left(\frac{2 + \gamma}{1 - \gamma} + \phi_V - \frac{\alpha(1 - \gamma)}{\frac{4}{3} + \gamma} \phi_V^{10/3} + \mathcal{O}(\phi_V^{14/3}) \right)^{-1}, \quad (5.54)$$



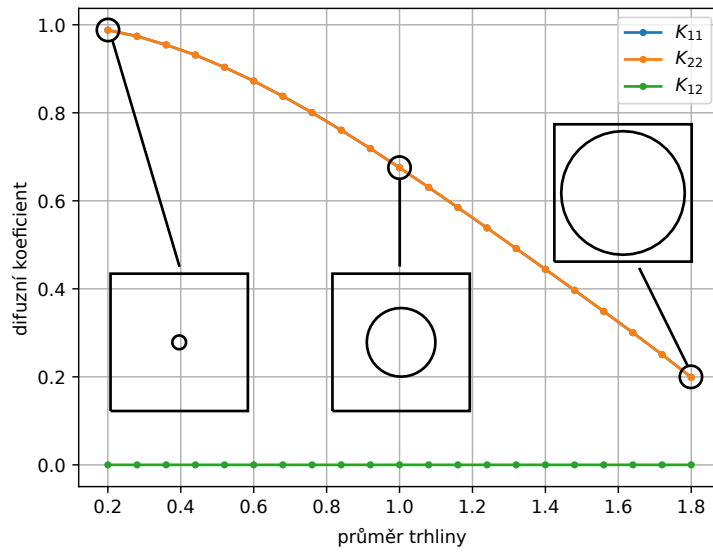
Obrázek 5.12. Homogenizované koeficienty v závislosti na na délce svislé poloosy trhliny (příklad 5.6).



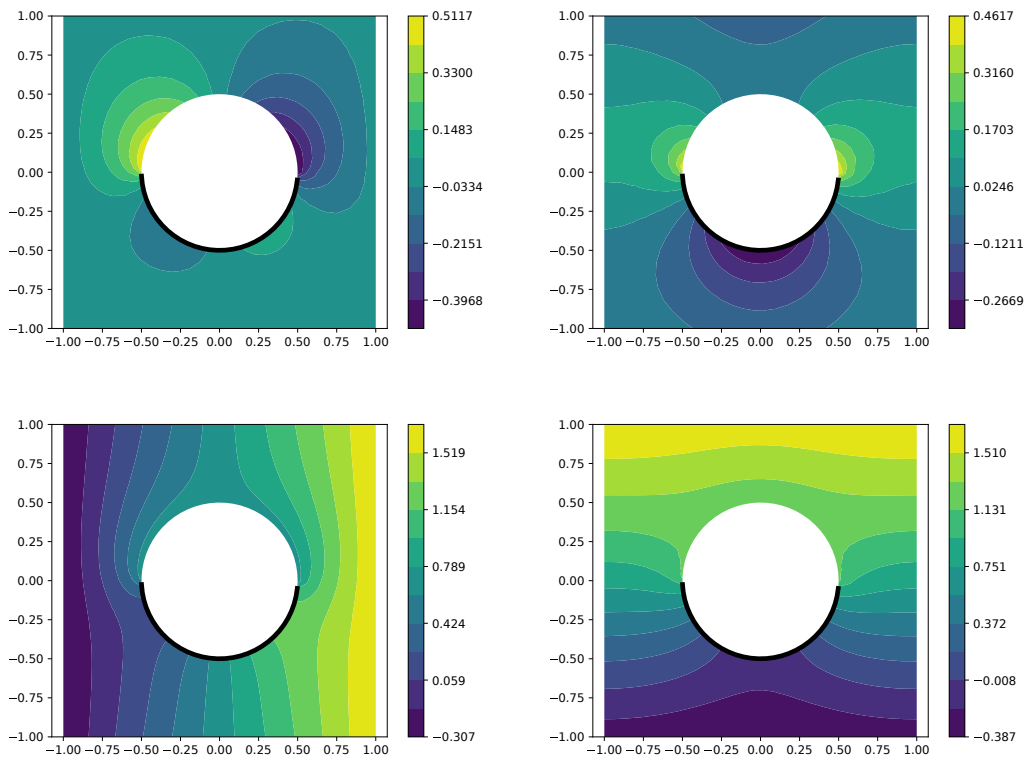
Obrázek 5.13. Flukтуаční část (vlevo) a celková koncentrace (vpravo) v případě kulové inkluze o průměru 1 uvnitř krychlové buňky (příklad 5.7), makroskopický gradient $\nabla c_0 = [0, 1, 0]^T$. Jedna čtvrtina buňky je skryta.



Obrázek 5.14. Flukтуаční část (vlevo) a celková koncentrace v případě kruhové částice plniva o průměru 1 (příklad 5.8), makroskopický gradient $\nabla c_0 = [0, 1]^T$.



Obrázek 5.15. Homogenizované koeficienty v závislosti na objemovém podílu částic plniva (příklad 5.8).



Obrázek 5.16. Výsledné koncentrace při různých makroskopických gradientech, částečně odtržená částice plniva (příklad 5.9). Levý sloupec obsahuje výsledky pro $\nabla c_0 = [1, 0]^T$, pravý sloupec pro $\nabla c_0 = [0, 1]^T$. Nahoře flukuační část c_1 a dole celková hodnota $c_0 + c_1$. Černá čára na hranici inkluze značí její neprostupnou část, zbytek je odtržená plně prostupná část.

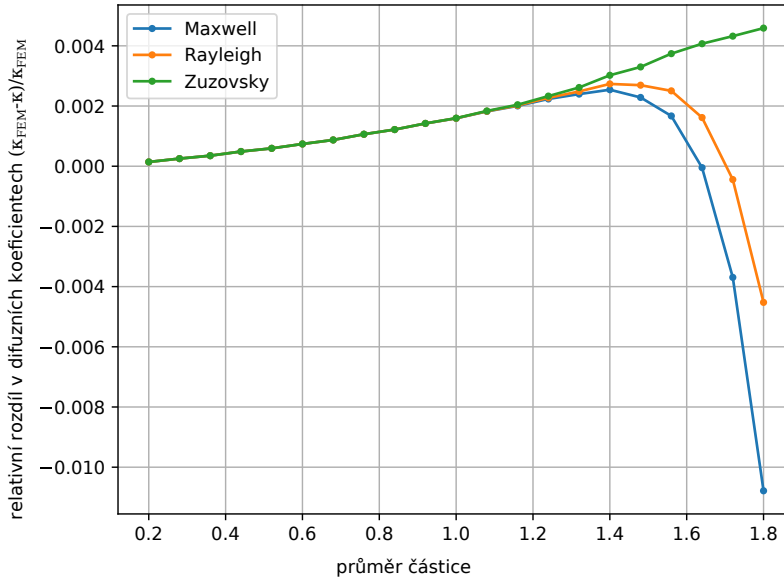
kde $\alpha = 0,523$. Třetím vztahem pro kulové inkluze je vzorec Zuzovskyyho a Brennera [99]

$$\kappa = 1 - 3\phi_V \left(\frac{2 + \gamma}{1 - \gamma} + \phi_V - \frac{16 a_{20}^2 \phi_V^{10/3}}{\frac{4/3 + \gamma}{1 - \gamma} + 20 a_{30} \phi_V^{7/3}} - \frac{53,5 a_{30}^2 (1 - \gamma) \phi_V^{14/3}}{\frac{6}{5} + \gamma} + \mathcal{O}(\phi_V^6) \right)^{-1}, \quad (5.55)$$

kde $a_{20} = 0,2857$ a $a_{30} = 0,02036$ v případě kulových děr rozmístěných v krychlové síti.

Příklad 5.10: Porovnání s analytickými vztahy - kulové trhliny v krychlové mřížce

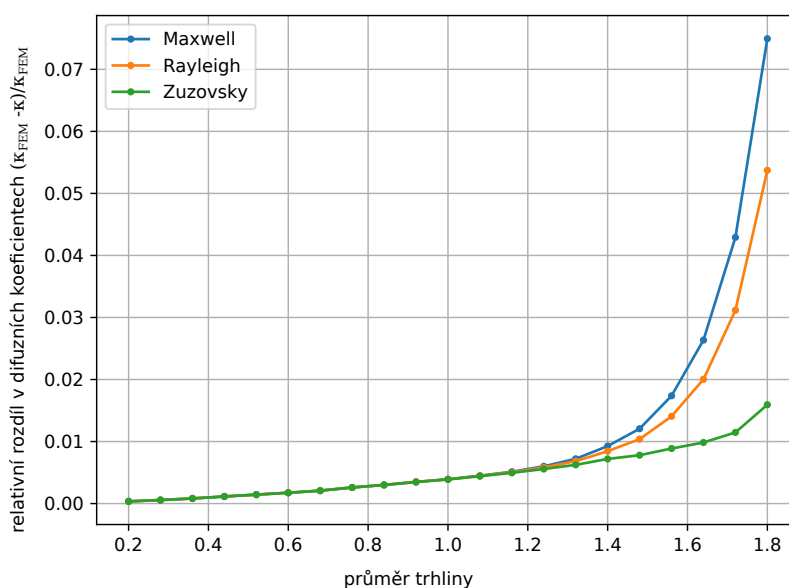
Vztahy (5.53)-(5.55) byly porovnány s výsledky MKP výpočtů. Obr. 5.17 obsahuje relativní rozdíly poměrné vodivosti kompozitu s neprostupnými částicemi plniva v závislosti na objemovém poměru plniva. Obr. 5.18 obsahuje relativní rozdíly poměrné vodivosti materiálu s plně prostupnými trhlinami v závislosti na objemovém poměru trhlin. Výsledky vykazují velmi dobrou shodu v případě neprostupných částic plniva a pro nižší objemový podíl trhlin. Rozdíly při vyšších podílech trhlin lze do jisté míry zmenšit zjemněním sítě, ale vzhledem k tomu, že hlavní motivací této práce je modelování pryžových dílů v pracovních podmínkách, odhad životnosti a případně návrh výměny dílů za nové, není případná neshoda v oblasti velkých objemových podílů trhlin relevantní.



Obrázek 5.17. Relativní rozdíly poměrné vodivosti kompozitu s částicemi plniva v závislosti na objemovém poměru plniva (příklad 5.10).

Pro rovinné úlohy s kruhovými inkluzemi lze použít Rayleighův vztah [86]

$$\kappa = 1 - 2\phi_V \left(v' + \phi_V - \frac{3\phi_V^4}{v' \pi^4} (\pi^4 0,03235020)^2 \right)^{-1}, \quad (5.56)$$



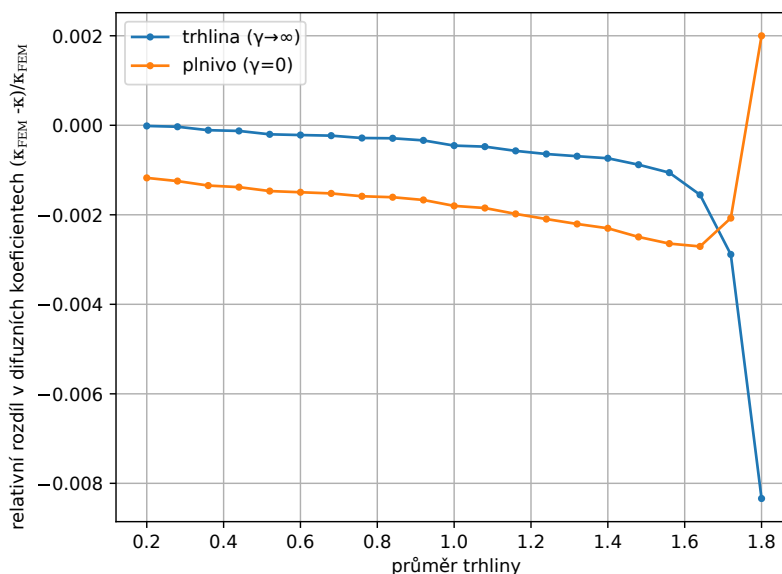
Obrázek 5.18. Relativní rozdíly poměrné vodivosti materiálu s plně propustnými trhlínami v závislosti na objemovém poměru trhlín (příklad 5.10).

kde

$$v' = \frac{1 + \gamma}{1 - \gamma} . \quad (5.57)$$

Příklad 5.11: Porovnání s analytickými vztahy - rovinný případ

Porovnání vztahu (5.56) s MKP výpočty pro případ nepropustných částic plniva i plně propustných trhlín je vykresleno na obr. 5.19. Stejně jako u předchozího příkladu platí, že shoda je dobrá pro malé hodnoty objemového podílu inkluze.



Obrázek 5.19. Relativní rozdíly poměrných vodivostí materiálu s nepropustnými částicemi plniva a s plně propustnými trhlínami (příklad 5.11).



5.4.2 Použití pro makroskopický model difuze

Praktický význam numerických simulací difuze na mikroskopických buňkách tkví v možnosti navržení odpovídajícího fenomenologického modelu. Jde o činnost probíhající v době psaní této dizertační práce a budou zde tedy jen ve stručnosti shrnuty hlavní kroky bez přímé vazby na ostatní kapitoly. Cílem je na makroskopické škále určit vztah mezi poškozením D a difuzivitou k_{dif} bez uvažování šíření mikrotrhlin a s dalšími zjednodušujícími předpoklady.

Klíčovým krokem je nalezení hypotézy tvaru trhlin, tj. předpisu, který popisuje geometrii mikroskopické buňky v závislosti na hodnotě D . Je-li taková hypotéza zvolena, lze numericky vypočítat hodnoty difuzivity k_{dif} pro různá D a tyto použít v řešení okrajově-počáteční úlohy 5.1 namísto konstantní difuzivity. Ve spojení s předepsanými hodnotami makroskopické deformace je možné realizovat tento postup buď vhodnou metodou pro víceškálové simulace, např. FEM^2 (*FEM-squared*), kdy se řeší mikroúloha v každém kvadrurním bodě, nebo pomocí vhodné interpolační funkce vyjádřit difuzivitu podle předem spočtených hodnot.

Kapitola 6

Experimenty

6.1 Stárnutí

Postup při zkoušení vlivu tepelného stárnutí ve vzduchu na fyzikální vlastnosti pryže upravuje norma ČSN 62 1522. Tělesa dle ní stárnou v nedeformovaném stavu. Při zkoušce se provede počáteční měření zvolených fyzikálních vlastností, poté se umístí do zařízení zabezpečujícího stálou teplotu a výměnu vzduchu – teplotní komory (v terminologii uvedené normy termostatu). V teplotní komoře se vzorky nechají po stanovenou dobu stárnout a po jejich vyjmutí se opět provede měření zvolených fyzikálních vlastností. Norma stanovuje teploty a doby stárnutí, přípustné časové intervaly mezi jednotlivými úkony i požadavky na konstrukci teplotní komory (např. minimální vzdálenost vzorků od stěn i od sebe navzájem, požadavky na výměnu vzduchu nebo přípustné výkyvy teploty). Mezinárodní norma ISO 188 rozlišuje dva způsoby realizace stárnutí v peci, tj. při atmosferickém tlaku, a v tlakové nádobě za zvýšeného tlaku.

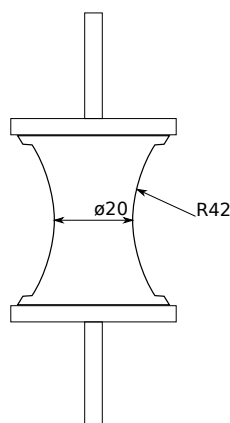
Johlitz popisuje v článku [55] dva druhy experimentů provedené na přírodní pryži plněné 60 phr sazí. Prvním typem měření je kontinuální relaxační zkouška (*continuous relaxation test*), při které jsou tahové vzorky drženy při předepsané deformaci přímo v teplotní komoře a síla je měřena po celou dobu stárnutí. Při tomto druhu zkoušky je možné pozorovat vliv fyzikálního stárnutí a štěpných reakcí na tuhost vzorku, ale vliv nově vzniklých vazeb není patrný, neboť se tvoří beze změny napětí (tzv. *stress-free*). Druhý typ měření (*intermittent monotonic tension test*) je prakticky shodný s postupem podle ČSN 62 1522 popsaném v předchozím odstavci, tj. vzorky stárnou v nedeformovaném stavu a po stanovené době se provede monotonní tahová zkouška. Pro každou zkoušku se použije nový vzorek a zatěžování probíhá při malých rychlostech deformace, čímž se potlačí projevy Mullinsova efektu a viskoelastivity.

6.2 Únava

Standardní zkoušky únavy pryže jsou buď ohybové nebo tahové. Postupy zkoušení únavy v ohybu upravují např. normy ASTM D430, ASTM D813 nebo ISO 132. Pro zkoušky v tahu stanovuje norma ISO 6943 tělesa tvaru kroužků a ploché dvoulopatkové vzorky a doporučuje se pro materiály bez výrazného tečení. Norma ASTM D4482 je prakticky shodná. Zkoušky je obvykle možné realizovat jako měření počtu cyklů do porušení nebo měření růstu trhliny.

Pro únavové zkoušky elastomerů při víceosém namáhání bylo vyvinuto několik typů vzorků. Častým tvarem, v různých rozměrových variantách, je vzorek tvaru přesýpacích hodin (*hourglass specimen*), který sestává z rotačně symetrické pryžové části navulkanizované ke kovovým podstavám, které se upínají do čelistí trhacího stroje (viz obr. 6.1). Tento typ vzorku lze zatěžovat tahem, tlakem i krutem nebo jejich kombinací. Nevýhodou pro únavové zkoušky může být, oproti plochým vzorkům, hromadění tepla.

Mars a Fatemi [70] navrhli vzorek tvaru prstence navulkanizovaného mezi kovové podstavy, který rovněž umožňuje zkoušky tahem, tlakem a krutem, ale má mnohem menší tloušťku a jsou pro něj známa analytická řešení.

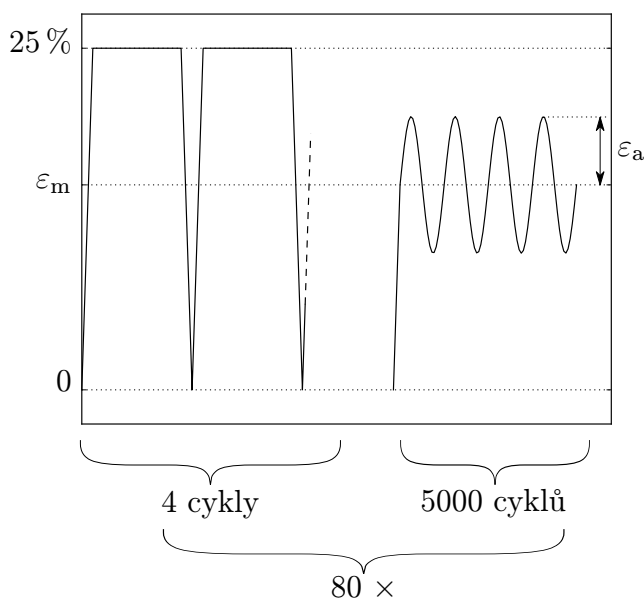


Obrázek 6.1. Vzorek tvaru přesýpacích hodin.

6.3 Experimenty provedené autorem

6.3.1 Cyklické zkoušky

Tato část práce je popsána v [v10]. Cyklické zatěžování bylo prováděno na servo-hydraulickém stroji Instron 8800. V předepsaném zatěžování (obr. 6.2) se střídají vždy čtyři cykly mezi 0 a 25 % deformace („pomalé cykly“) a poté 5000 cyklů harmonické deformace („rychlé cykly“) superponované na statickou hodnotu. Tato posloupnost dvou druhů cyklů se vždy opakovala 80-krát s hodinovou přestávkou po každých dvaceti cyklech. Výjimkou byly zkoušky prostým smykem, při kterých docházelo k odlepení vzorků dřívě.

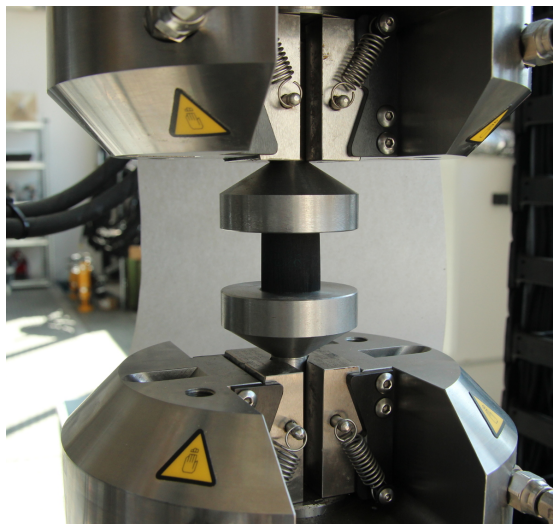


Obrázek 6.2. Předepsaná deformace při cyklických zkouškách.

Rychlost deformace při „pomalých cyklech“ byla $0,01 \text{ s}^{-1}$, což odpovídá rychlosti posuvu čelistí stroje $0,26 \text{ mm/s}$ v případě tlakových vzorků a $0,10 \text{ mm/s}$ v případě prostého smyku. „Rychlé cykly“ byly prováděny s frekvencí 10 Hz .

Pro zkoušku jednoosým tlakem byly vyrobeny tlačné plochy, které lze upnout do tahových čelistí trhačího stroje (obr. 6.3). Tlačná plocha je opatřena mělkou

drážkou tvaru kružnice, která výrazně omezuje samovolný posuv vzorku během cyklického zatěžování. Pro zkoušky prostým smykem byla použita obvyklá konfigurace, tj. pryžový kvádr nalepený protilehlými stěnami mezi dva ocelové plechy – obr. 6.4. Posuvy byly při obou módech zatěžování snímány pohonem stroje, neboť rozměry vzorků a tvar přípravků neumožňoval připnutí mechanického extenzometru.



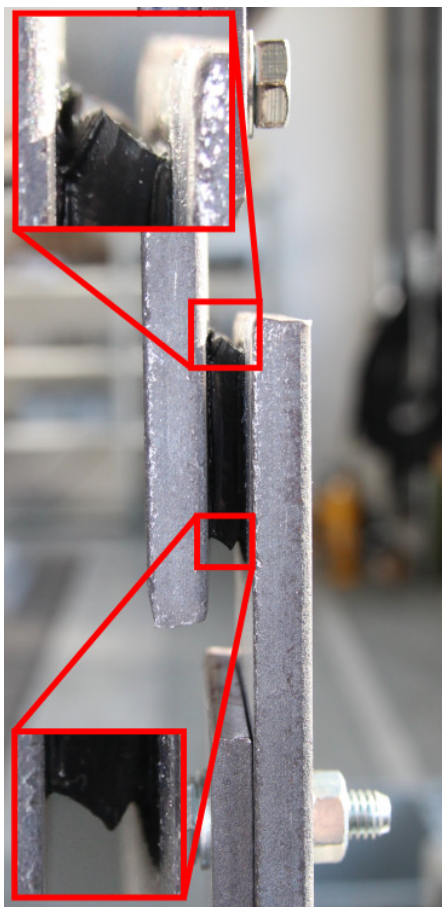
Obrázek 6.3. Fotografie cyklické zkoušky jednoosým tlakem.

Změřená data jsou znázorněna na obr. 6.5 a 6.6. Jsou vykreslena maxima a minima síly při „rychlých“ cyklech. Jednotlivé křivky odpovídají různým parametrům zatěžování, tj. amplitudě „rychlých“ cyklů ε_a a jejich střední hodnotě ε_m . V grafech je zřejmý pokles síly, což může být způsobeno očekávaným poklesem tuhosti vlivem poškození, ale také např. trvalými deformacemi. Skutečným výsledkem zkoušek jsou tedy data změřená při „pomalých“ cyklech, ze kterých lze lépe usuzovat na mechanismy změn vlastností materiálu. Zároveň mohou být statické deformační vlastnosti požadovaným výstupem, např. při řešení úlohy jak se bude měnit statické předpětí tlumicího elementu vlivem cyklického provozního zatížení. Model vlivu cyklického namáhání pryže na její statické vlastnosti byl popsán v [v10].

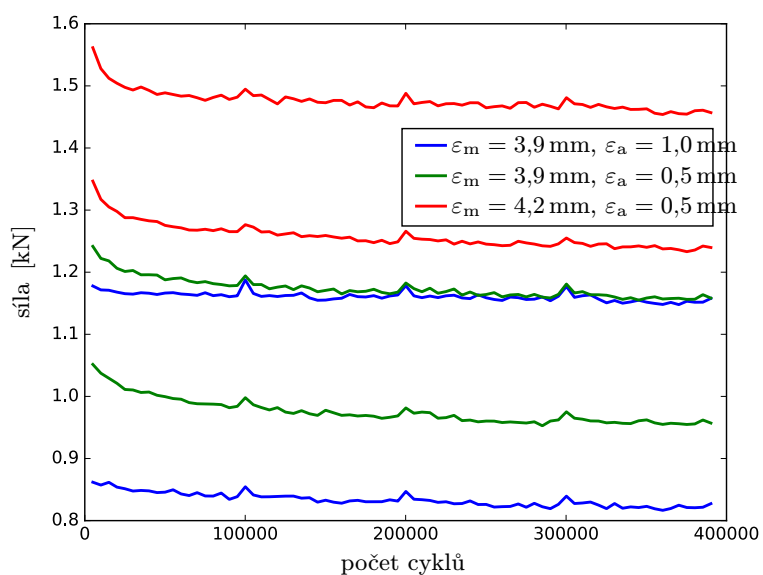
6.3.2 Arcan

V rámci projektu VS15 [v30] byl vyroben přípravek pro kombinované zkoušky tahem a smykem (tzv. Arcan). Tvar a rozměry vzorku jsou znázorněny na obr. 6.7. Šrafované oblasti jsou upnuty v přípravku. Fotografie celé sestavy během zkoušky je na obr. 6.8. Vzorek se do střední části přípravku upevňuje pomocí vložek vyráběných dodatečně. Doposud byl přípravek použit pouze ke zkoušení měkkých materiálů – pryže a korkového kompozitu – kdy byly vložky vyrobeny z plastu (PLA) na 3D tiskárně. Tento způsob výroby umožňuje tvar vložek přizpůsobit drobným rozdílům ve tvarech vzorků, přičemž tyto rozdíly mají v zásadě tři příčiny:

1. Tloušťka desky, ze které se vzorky řezou, závisí na výrobcí a zamýšlené aplikaci. Není tedy možné dodržet při různých měřeních předepsanou tloušťku

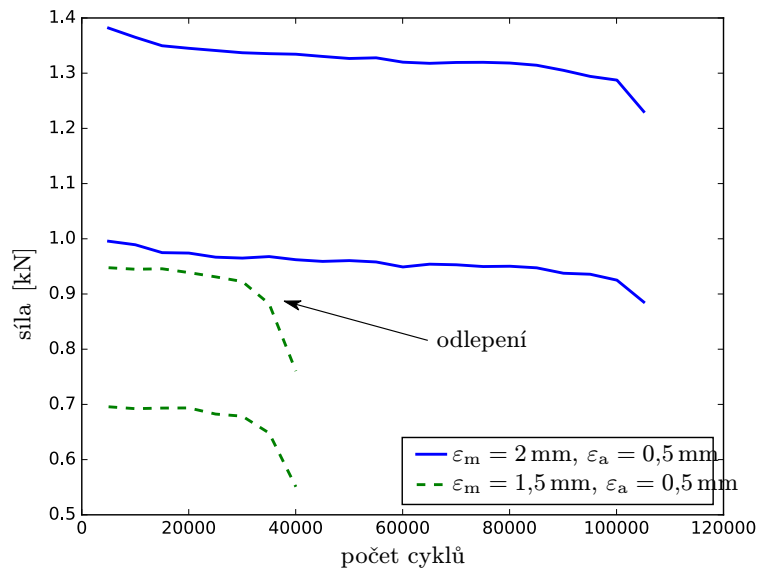


Obrázek 6.4. Fotografie cyklické zkoušky prostým smykem; zvětšeny jsou oblasti, kde je patrné odlepování vzorku od ocelových plechů.



Obrázek 6.5. Síla při cyklické tlakové zkoušce – minima a maxima, [v10].

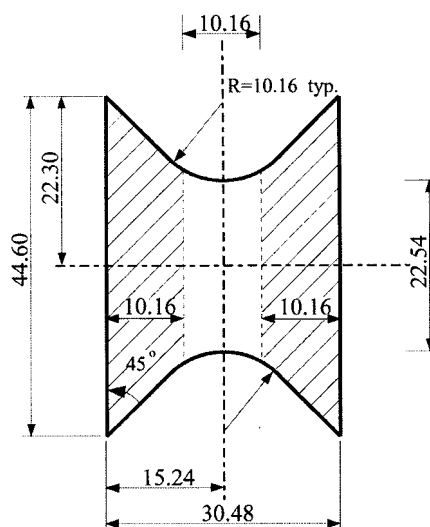
vzorků. S pomocí 3D tisku se velmi rychle (v řádu desítek minut) vyrobí vložky přesně požadované tloušťky.



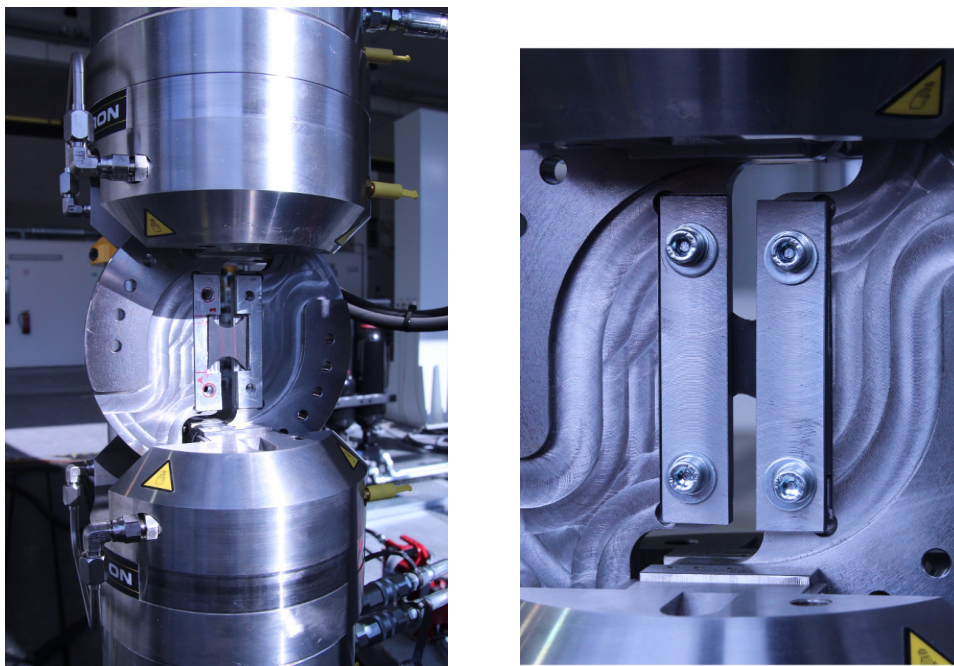
Obrázek 6.6. Síla při cyklické smykové zkoušce – minima a maxima, [v10].

2. Vzorky se obvykle řezou vodním paprskem. Častým jevem při použití této technologie je, že se paprsek mírně rozšiřuje a i po korekci tohoto rozšíření mají obvykle nařezané vzorky jednu podstavu větší.
3. Při měření pryže dochází k vytahování vzorků z přípravku, proč se na jeho strany (na obr. 6.7 vyznačeno šrafováním) lepí kovové příložky. Obvykle se ovšem nepovede nalepit příložky zcela přesně a ty pak na některých hranách vzorku mírně vyčnívají (o 0,1-0,2 mm). Toto se řeší vytisknutím sady vložek s různou hodnotou tolerance.

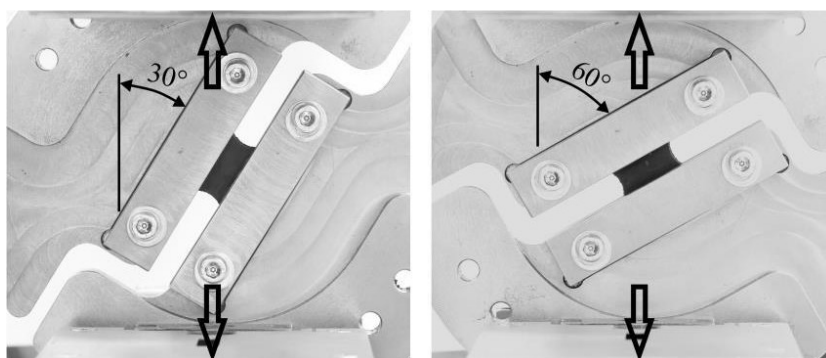
Při zkoušce se předepisují pouze tahové posuvy, ale podle natočení přípravku v čelistech je vzorek namáhán zvolenou kombinací tahu a smyku (viz obr. 6.9 a kap. A.3).



Obrázek 6.7. Rozměry vzorku (v mm) pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem (Arcan) [59].



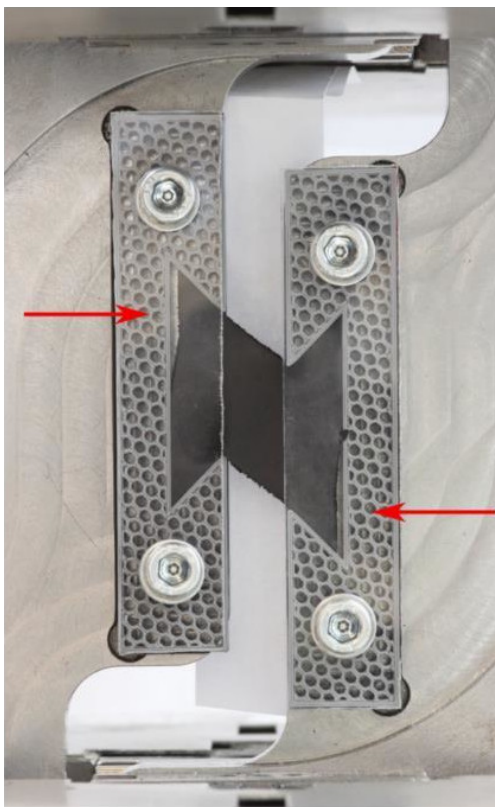
Obrázek 6.8. Fotografie přípravku pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem (Arcan). Vlevo přípravek bez upínacích destiček, vpravo během zkoušky.



Obrázek 6.9. Pootočení přípravku pro kombinovanou zkoušku tahem a smykem (Arcan)

Přípravek byl použit pro validaci identifikovaného modelu korko-pryžového kompozitu [v9], přičemž uchycení pomocí plastových vložek nepředstavovalo problém. Při zkouškách pryže [v7, v5] bylo ovšem zaznamenáno vytahování vzorků z přípravku, viz obr. 6.10. Tento jev byl eliminován nalepením kovových příložek na boky vzorku, obr. 6.11. Použití kovových příložek rovněž odstraňuje nutnost stlačení vzorku při upínání, díky čemuž nedochází k jeho vytlačení z přípravku a nežádoucímu nárůstu měřené síly při nulovém posuvu.

Obr. 6.12 obsahuje časové závislosti předepsaného posuvu pístu a změřené hodnoty síly, obr. 6.13 obsahuje závislosti změřené síly na posuvu pístu pro úhly pootočení přípravku 0° , 30° a 60° . S rostoucím úhlem pootočení přípravku je patrný nárůst změřené síly, přičemž větší rozdíl je mezi 30° a 60° . Vzhledem k počtům vzorků, kdy byl použit pouze jeden vzorek pro nenulové úhly natočení přípravku, je ovšem tento závěr nejistý a v případě dalších měření jej bude nutné prověřit. Důvodem pro použití pouze jednoho vzorku pro pootočený přípravek byl kromě



Obrázek 6.10. Vytahování pryžového vzorku bez příložek z přípravku. Červené šípky označují místa, kde dochází k odlehnutí vzorku od stěn přípravku. Vzorek byl kvůli fotografování upevněn plexisklem.



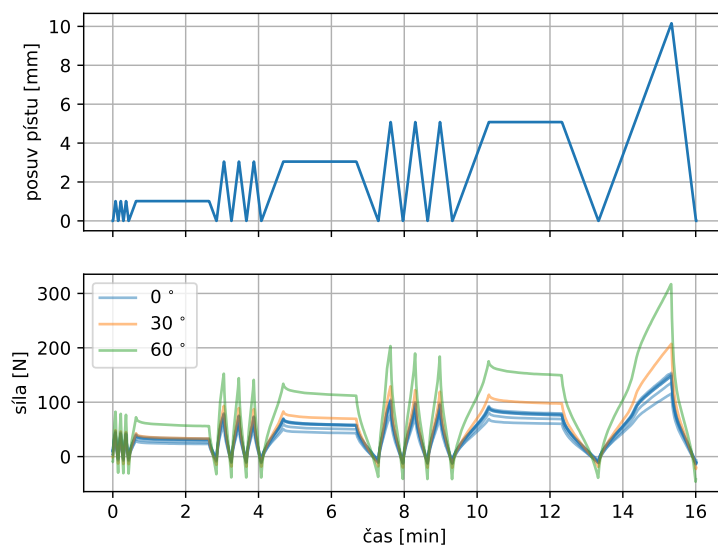
Obrázek 6.11. Vzorek typu Arcan s nalepenými kovovými příložkami a plastové vložky do přípravku

časové náročnosti měření i omezený počet vzorků dodaných výrobcem a předchozí použití většího množství vzorků pro analýzu jejich uchycení v přípravku.

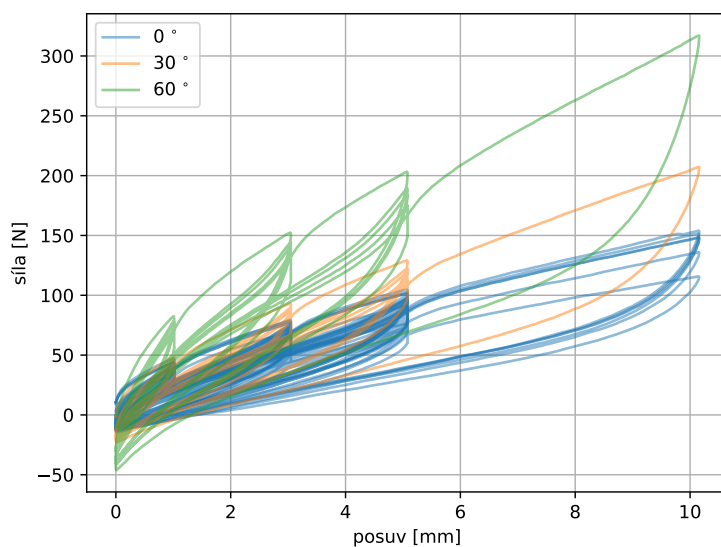
6.3.3 Stárnutí při zvýšené teplotě

Výsledky popsané v této kapitole nebyly dosud publikovány. Jde ale o důležitou část předkládané práce, proto jsou zde postup měření i výsledky popsány podrobněji.

Měření vlivu stárnutí při zvýšené teplotě bylo prováděno v teplotní komoře (termostatu) umožňující dosažení teploty až 140 °C. Rozměry vnitřního prostoru teplotní komory jsou 50 × 60 × 40 cm (výška × šířka × hloubka), uvnitř je místo pro



Obrázek 6.12. Časové závislosti předepsaného posuvu pístu a změřené síly při třech různých úhlech pootočení přípravku Arcan.

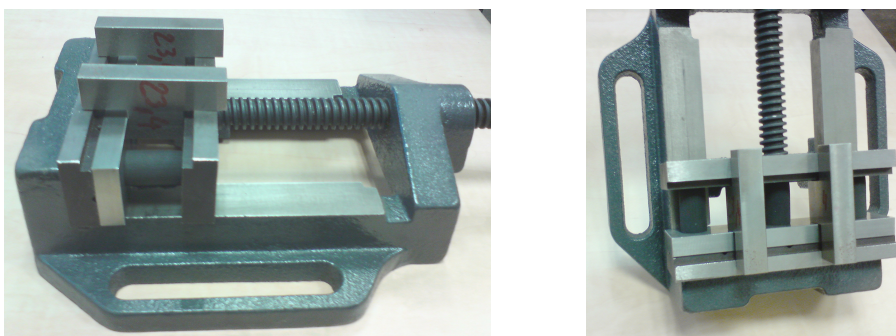


Obrázek 6.13. Závislosti změřené síly na posuvu pístu pro vzorky typu Arcan při třech různých úhlech pootočení

tři poličky, vzdálené od sebe ve svislém směru 14 cm. Výměna vzduchu s okolím je zajištěna kruhovým větracím otvorem o průměru 5 cm ve stropu teplotní komory.

Při zkouškách bylo postupováno s přihlédnutím k normě ČSN 62 1522 (Pryž – Metoda stanovení urychleného tepelného stárnutí ve vzduchu). Byly dodrženy podmínky stárnutí (výměna vzduchu v teplotní komoře, teplota stárnutí, doba kondicionování vzorků po vyjmutí z teplotní komory). Tvar vzorků a umístění ve svěrácích bylo voleno na základě dostupnosti materiálu (pryžových vzorků) a podle normy ČSN ISO 815-1, která upravuje měření trvalé deformace v tlaku (viz dále).

K měření byly použity vzorky tvaru válce o výšce 26 mm a průměru 13,5 mm. U těchto byla nejprve provedena zkouška jednoosým tlakem. Při ní byly vzorky zatíženy čtyřmi kvazistatickými cykly do deformace 35 %. Poté byly vzorky po třech stlačeny ve strojních svěrácích (obr. 6.14) na předem stanovené hodnoty deformace a vloženy do teplotní komory. Tam byly ponechány po dobu 24 hodin při teplotě 70 °C. Poté byly vyjmuty, ochlazeny na pokojovou teplotu a po stanovené době kondicionování (minimálně 16 hodin, maximálně 6 dní) byla opět provedena zkouška jednoosým tlakem. Po ní byly vzorky opět vloženy do svěráků a do teplotní komory a následoval další krok stárnutí. Výsledkem měření jsou tedy závislosti napětí na deformaci změřené pro různé hodnoty předpětí a po různých dobách stárnutí.



Obrázek 6.14. Upnutí vzorků ve svěráku při měření tepelného stárnutí. Součástí přípravku je deska s rovnou kontaktní plochou a distanční vložky, které zajišťují stlačení vzorků na předepsanou deformaci s dostatečnou přesností.

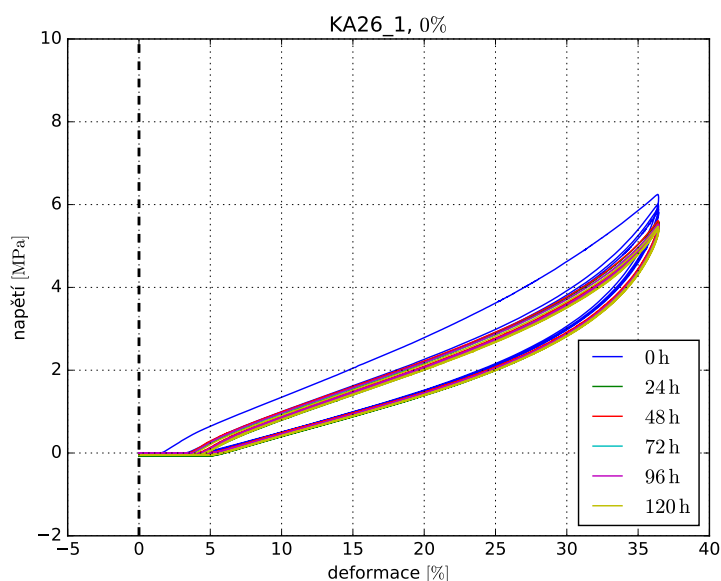
Byly zvoleny dvě hodnoty deformace: 15 % a 25 %. Kromě toho byly v peci přítomny ještě tři nestlačené vzorky a tři nestlačené vzorky byly umístěny mimo pec.

Obr. 6.15-6.19 zobrazují vliv celkové doby stárnutí při různých hodnotách deformace na výsledky kvazistatické tlakové zkoušky. V případě nedeformovaných vzorků (obr. 6.15 a 6.16) je při zvýšené teplotě patrný návrat materiálu do blízkosti původního stavu. Na rozdíl od vzorků umístěných mimo pec (obr. 6.15) lze i při následných zkouškách vzorků umístěných v peci (obr. 6.16) pozorovat výrazný Mullinsovův efekt (detail na obr. 6.17).

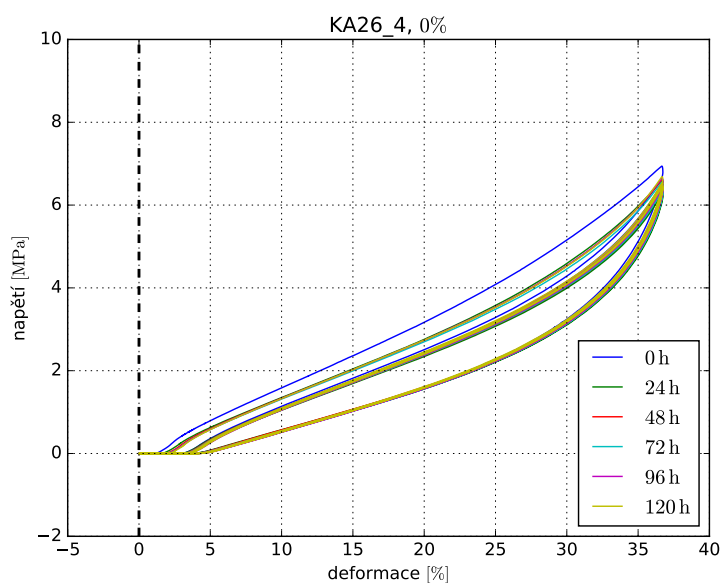
Ostatní zkoušky (obr. 6.18-6.19) naznačují výrazný vliv předpětí jak na nárůst tuhosti a míru Mullinsova efektu, kterou lze pozorovat při následném zatížení, tak na velikost zbytkové deformace (bude popsáno dále). Nárůst tuhosti lze přitom pozorovat téměř výhradně v oblasti deformací nad hodnotou, při které byl vzorek držen v teplotní komoře.

Obr. 6.20 zobrazuje velikost zbytkové deformace v závislosti na čase. Zbytková deformace byla měřena s přihlédnutím k normě ČSN ISO 815-1 (Přez, vulkanizovaný nebo termoplastický elastomer – Stanovení trvalé deformace v tlaku – Část 1: Při laboratorních nebo zvýšených teplotách). Nebyl dodržen tvar zkušebních vzorků z důvodu dostupnosti materiálu. Předepsaná teplota a postup zkoušky (tj. doba zotavení mezi vyjmutím vzorků z pece a měřením jejich tloušťky) dodrženy byly.

V případě vzorků bez předpětí (na obr. 6.20 zobrazeny modrou a zelenou barvou) lze předpokládat, že zbytková deformace je důsledkem zatížení vzorků při kvazistatických zkouškách nebo důsledkem změny objemu materiálu během



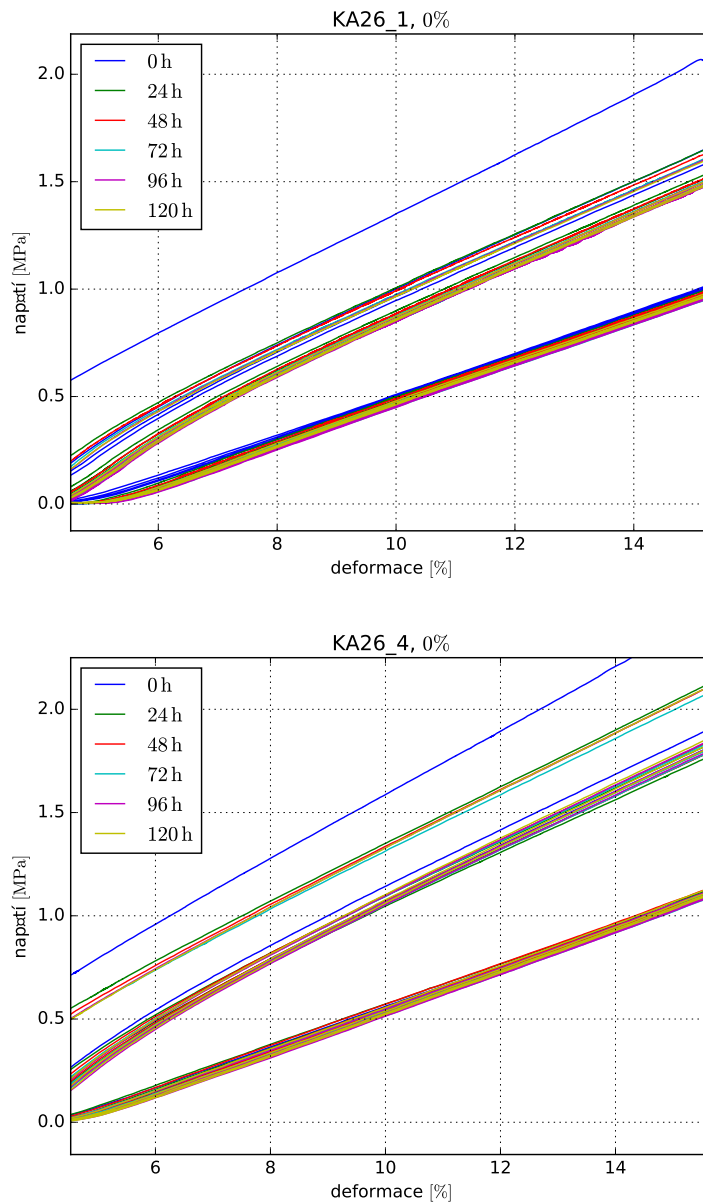
Obrázek 6.15. Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 0% při pokojové teplotě (23 °C).



Obrázek 6.16. Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 0% při zvýšené teplotě (70 °C).

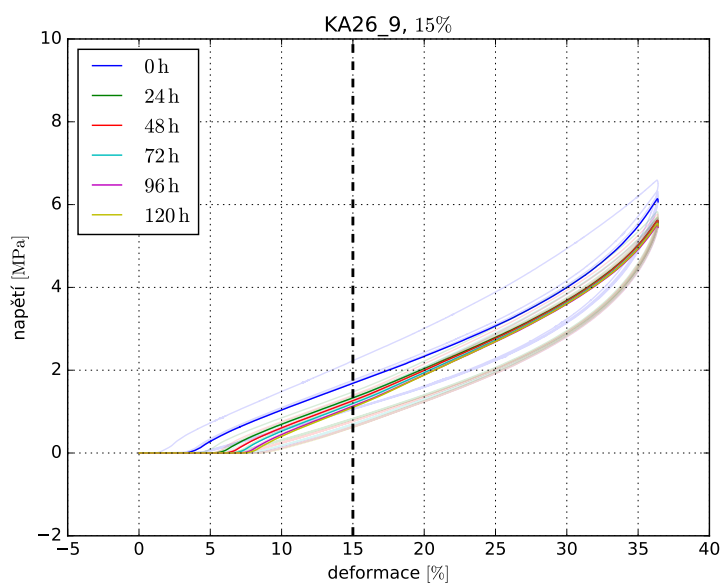
stárnutí. U vzorků umístěných v peci je hodnota zbytkové deformace nižší než u vzorku drženího při pokojové teplotě. Lze se tedy domnívat, že zvýšená teplota působí v tomto případě snižování trvalé deformace. Pro potvrzení nebo vyvrácení této domněnky ovšem není (ve zde uvedených výsledcích) k dispozici dostatek dat.

U vzorků drženího během stárnutí při nenulovém předpětí (na obr. 6.20 zobrazeny červeně a černě) dosahují trvalé deformace nezanedbatelných hodnot a v průběhu stárnutí ještě dále výrazně rostou. Struktura materiálu se tedy mění jak v závislosti na předpětí, tak v závislosti na době stárnutí. Tato představa

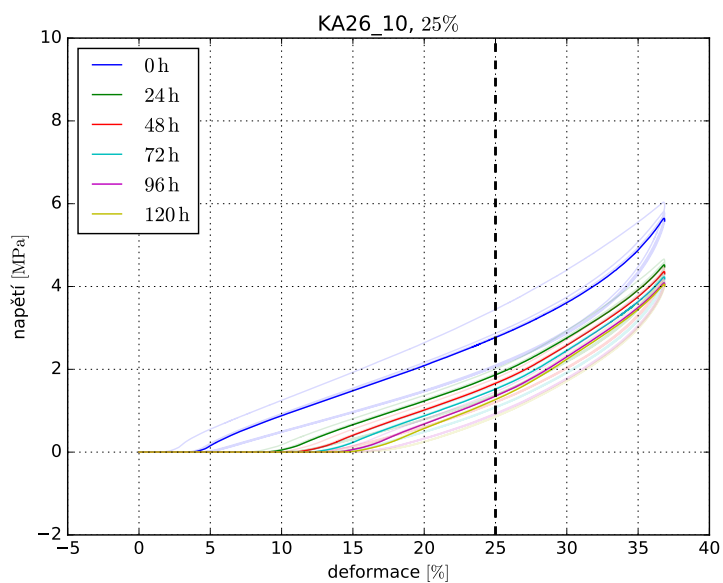


Obrázek 6.17. Porovnání vlivu teploty na Mullinsův efekt u vzorků stárnoucích v ne-deformovaném stavu. Nahoře vzorek stárnoucí při 23 °C, dole vzorek stárnoucí při 70 °C.

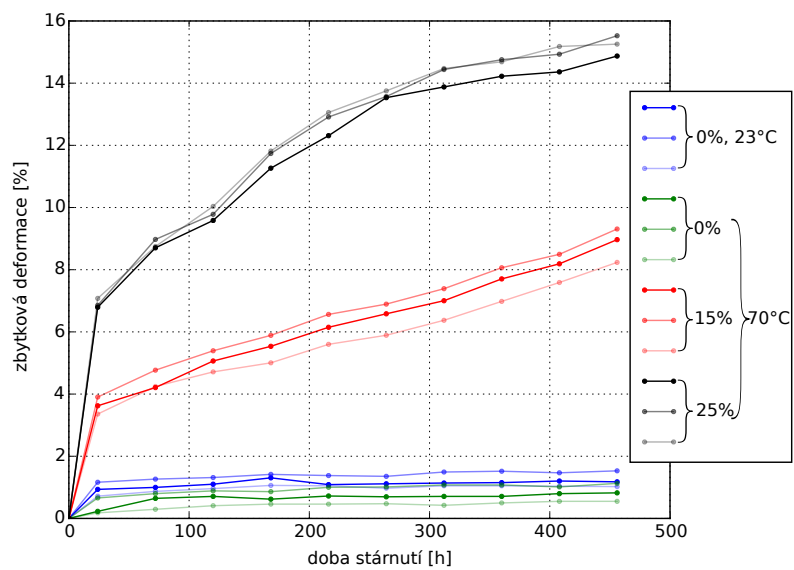
souhlasí s představou o změně zesíťování uvedenou v kap. 4, která je základem modelů chemického stárnutí (kap. 4.1, [66], nebo 4.2, [80]), a citované modely jsou proto vhodnými kandidáty pro modelování zde popsaných jevů.



Obrázek 6.18. Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 15 % při zvýšené teplotě (70 °C). Zvýrazněny jsou, pro přehlednost a kvůli povaze diskutovaných výsledků, pouze čtvrté zatěžovací křivky.



Obrázek 6.19. Porovnání kvazistatických zkoušek u vzorku stárnoucího při deformaci 25 % při zvýšené teplotě (70 °C). Zvýrazněny jsou, pro přehlednost a kvůli povaze diskutovaných výsledků, pouze čtvrté zatěžovací křivky.



Obrázek 6.20. Velikost zbytkové deformace při experimentu se stárnutím za zvýšené teploty. Barevně jsou odlišeny různé hodnoty deformace.

Kapitola 7

Identifikace parametrů

Tato kapitola se zabývá nejdříve identifikací parametrů materiálových modelů obecně a poté aplikací uvedených postupů na souhrnný model poškozování a stárnutí popsány v kap. 5. Hlavním přínosem je část 7.3 věnovaná volbě vhodných měření a analýze vlastností optimalizační metody v závislosti na experimentálních datech. Stanovení mezí použitelnosti identifikovaných parametrů je popsáno až v kapitole 8. Již na tomto místě je ovšem na obr. 7.1 pro ilustraci uveden celkový postup identifikace parametrů materiálového modelu. Tento postup předpokládá volbu libovolného materiálového modelu a případnou revizi této volby. Výběr modelu lze ovšem chápat i jako rozhodování mezi různou mírou zjednodušení komplexního modelu uvedeného v této práci tak, jak je popsáno v kap. 8.1. Zásadním krokem je zvážení předpokládaného namáhání součásti a na základě něj stanovení požadovaných mezí použitelnosti materiálového modelu. Významnou část této kapitoly (podkap. 7.3) tvoří třetí krok metody, který spočívá v analýze proveditelných experimentů z pohledu identifikovatelnosti parametrů vybraného modelu. Výstupem této analýzy je seznam experimentů, které je nutné provést. Další část metody, kterou popisuje tato kapitola, je samotná kalibrace modelu (podkap. 7.1 a 7.2). V diagramu je znázorněna doporučená volba optimalizační metody v závislosti na vlastnostech modelu – zda je lineární vzhledem ke svým parametrům a zda některé jeho parametry podléhají nerovnostním vazbám. Kroky metody týkající se mezí použitelnosti a vyhodnocení shody modelu s experimenty jsou popsány v kap. 8.

7.1 Úloha identifikace parametrů modelu

Matematická formulace zvolená pro potřeby této práce má tvar minimalizace hodnoty zdola omezené skalární funkce.

Úloha 7.1: Identifikace parametrů

Najít sadu parametrů

$$\hat{\alpha} = \arg \min_{\alpha \in \mathcal{A}} f(\alpha), \quad (7.1)$$

kde f je některá z forem cílových funkcí popsanych níže a množina \mathcal{A} je tzv. přípustná množina daná případnými vazbami. \square

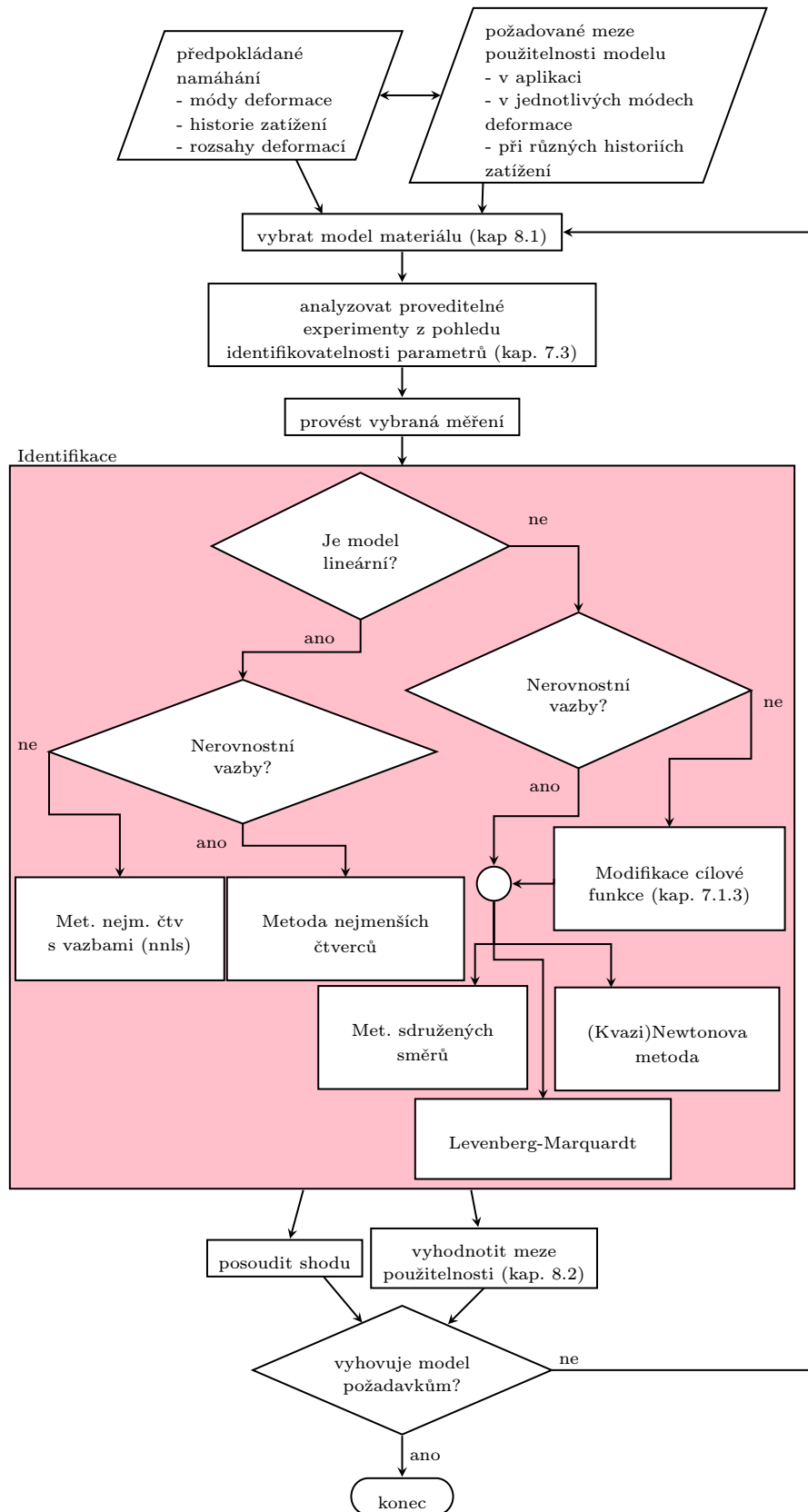
7.1.1 Cílová funkce ve tvaru váženého součtu čtverců odchylek

Funkce f v (7.1) je v tomto případě dána předpisem

$$f_{\text{WRSS}}(\alpha) = \sum_i w_i (F_i - F(x_i; \alpha))^2, \quad (7.2)$$

kde x_i jsou hodnoty nezávisle proměnné, F_i jim odpovídající změřené hodnoty závisle proměnné, funkce F je model a w_i jsou nezáporné váhové koeficienty.

Ve zbývajících částech této kapitoly se pracuje se dvěma modifikacemi uvedeného tvaru cílové funkce, které jsou ovšem jen jejím přeformulováním za účelem přehlednosti výkladu a jsou jejími speciálními případy.



Obrázek 7.1. Postup volby materiálového modelu, jeho kalibrace a zhodnocení.

7.1.2 Modifikace cílové funkce pro analýzu vlivu experimentálních dat

Předpokládá se provedení několika měření s různými způsoby zatěžování, např. cyklické zkoušky v tahu a tlaku s různými rychlostmi posuvu, relaxace, tečení, apod. Pro posouzení vlivu experimentu jako celku na identifikovatelnost parametrů a na kvalitu identifikovaných parametrů (viz kap. 7.3.1) se cílová funkce zvolí ve tvaru

$$f_{\text{exp1}}(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{\varepsilon_i} w_i \frac{\sum_{t_j} (F_{ij} - F(\varepsilon_i, x_j; \boldsymbol{\alpha}))^2}{\sum_{t_j} (F_{ij})^2}, \quad (7.3)$$

kde index i odpovídá jednotlivým zkouškám a index j značí jednotlivé okamžiky měření. Oproti (7.2) přibylo normování součtem experimentálních dat a váhové koeficienty w_i příslušné jednotlivým experimentům.

Pro vyšetření vlivu jednotlivých časových okamžiků (viz kap. 7.3.2) se váhové koeficienty přiřadí každé složce rezidua zvlášť:

$$f_{\text{exp2}}(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{\varepsilon_i} \frac{\sum_{t_j} w_{ij} (F_{ij} - F(\varepsilon_i, x_j; \boldsymbol{\alpha}))^2}{\sum_{t_j} (F_{ij})^2}. \quad (7.4)$$

7.1.3 Vazby

Použití vazeb nejčastěji pramení z potřeby zajistit stabilitu identifikovaného modelu nebo je žádoucí kvůli zachování fyzikálního významu některých parametrů (např. relaxačních časů).

Při odvození vazeb pro parametry polynomiálního hyperelastického modelu [v25] byla podmínka stability zredukována na limity tahového a tlakového napětí

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \sigma(\boldsymbol{\alpha}; \lambda) &= +\infty, \\ \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \sigma(\boldsymbol{\alpha}; \lambda) &= -\infty. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Nutnou podmínkou pro splnění (7.5) je nezápornost všech parametrů modelu $C_{(ij)}$, což je sama o sobě natolik restriktivní podmínka, že další omezení nebyla požadována.

V případě Ogdenova hyperelastického modelu je postačující podmínkou pro stabilitu [82, str. 582]

$$\alpha_j \mu_j > 0, \quad \forall j. \quad (7.6)$$

V případě Ogdenova modelu s jedním nebo dvěma členy jde zároveň o podmínku nutnou, pro modely se třemi a více členy není nutné splnit nerovnost pro všechna j .

Pokud model obsahuje evoluční vztahy ve tvaru obyčejných diferenciálních rovnic, je obvyklé omezit jejich koeficienty tak, aby odpovídaly fyzikálnímu významu. V případě *dynamic network modelu* se to týká především součinitelů stárnutí α_R a α_S (viz (4.57)) a difuzivity k_{dif} (viz (4.54)), které mají být kladné. Podobně parametr poškození A (viz (5.7)) by měl být nezáporný, aby byla disipace nezáporná.

7.2 Řešení optimalizační úlohy

Praktický postup při identifikaci parametrů modelu obvykle spočívá v použití vhodného algoritmu pro numerickou optimalizaci. Obecné algoritmy jsou k dispozici jako součást softwarových balíčků pro vědecké výpočty (např. SciPy [57], Octave [34], Matlab), ovšem některé řešiče jsou dostupné i samostatně (např. IPOpt [97]).

Podkapitoly 7.2.1-7.2.5 tvoří přehled nejjednodušších algoritmů pro numerickou optimalizaci. Příklad 7.1 obsahuje příklady jejich použití při identifikaci a porovnání vlastností.

7.2.1 Metoda nejmenších čtverců

Je-li model F lineární vzhledem k parametrům α a jde o úlohu bez vazeb (tj. $\mathcal{A} = \mathbb{R}^N$) přejde úloha 7.1 na soustavu lineárních algebraických rovnic. Případy nelineárních modelů lze obvykle linearizovat, ale je nutné sledovat platnost linearizovaného modelu. Linearizovaný model lze použít jak k iteračnímu řešení úlohy identifikace, tak k odvození některých teoretických závěrů [15] (viz kap. 7.3).

Při identifikaci parametrů polynomiálního hyperelastického modelu se ukázalo, že pro zajištění stability identifikovaného modelu je nutné, aby všechny parametry byly nezáporné [v25] (viz kap. 7.1.3). Tato úloha byla řešena funkcí `scipy.optimize.nnls` [57], která využívá algoritmus popsany Lawsonem a Hansonem [62, kap. 23].

Ve zvláštních případech je možné model linearizovat transformací proměnných. Takto byly např. identifikovány parametry modelu cyklického poškození v článku [11], kdy se vztah (3.16) pro počet cyklů do porušení N_f převede do logaritmických souřadnic:

$$\log N_f = -a \log S_{\text{eq}} + \log \left(\frac{A^a}{1+a} \right). \quad (7.7)$$

Za nezávisle proměnnou se v tomto případě považuje ekvivalentní napětí S_{eq} a měřenou veličinou je počet cyklů do porušení N_f . Parametry lineárního modelu jsou pak a a $\log \left(\frac{A^a}{1+a} \right)$.

7.2.2 Metoda největšího spádu

Vstupem metody je kromě předpisu cílové funkce (včetně experimentálních dat) ještě startovací bod α_0 . V k -tém kroku se vektor parametrů změní podle následujícího předpisu:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k - d_k \nabla f(\alpha_k), \quad (7.8)$$

kde délka kroku d_k může být, v závislosti na zvolené variantě algoritmu, zvolená konstanta nebo řešení úlohy jednorozměrné minimalizace (line-search)

$$d_k = \arg \min_{d \in \mathcal{R}} f(\alpha_k - d \nabla f(\alpha_k)). \quad (7.9)$$

7.2.3 Metoda sdružených směrů

Na začátku se zvolí

$$\mathbf{p}_0 = -\mathbf{g}_0 = -\nabla f(\alpha_0). \quad (7.10)$$

V k -tém kroku se provedou následující výpočty:

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_k &= \nabla f(\boldsymbol{\alpha}_k), \\
\beta_k &= \frac{\|\mathbf{g}_{k-1}\|}{\|\mathbf{g}_k\|}, \\
\mathbf{p}_k &= -\mathbf{g}_k + \beta_k \mathbf{p}_{k-1}, \\
d_k &= \arg \min_t f(\boldsymbol{\alpha}_{k-1} + t \cdot \mathbf{p}_{k-1}), \\
\boldsymbol{\alpha}_{k+1} &= \boldsymbol{\alpha}_k + d_k \cdot \mathbf{p}_k.
\end{aligned} \tag{7.11}$$

7.2.4 Newtonova metoda a kvazinewtonovské metody

Předpis pro k -tý krok optimalizace je

$$\boldsymbol{\alpha}_{k+1} = \boldsymbol{\alpha}_k - \gamma_N \mathbf{H}^{-1} \nabla f(\boldsymbol{\alpha}_k), \tag{7.12}$$

kde \mathbf{H} značí Hessovu matici cílové funkce f a součinitel γ_N omezuje délku kroku metody, pokud je $\gamma_N < 1$.

Metody, které aproximují Hessovu matici (resp. její inverzi, čímž se snižuje výpočetní náročnost) pouze za použití funkčních hodnot a gradientu, se nazývají kvazinewtonovské. Patří sem např. BFGS nebo DFP.

7.2.5 Levenbergova-Marquardtova metoda

Patří mezi tzv. *trust region* metody, které – podobně jako newtonovské – aproximují cílovou funkci funkcí kvadratickou. Je ale stanovena velikost okolí, na kterém je tato aproximace ještě považována za důvěryhodnou a tím je stanovena i maximální délka kroku.

Vztah pro výpočet členů minimizující posloupnosti je

$$\boldsymbol{\alpha}_{k+1} = \boldsymbol{\alpha}_k - (\mathbf{H} + \lambda_{LM} \text{diag } \mathbf{H})^{-1} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\alpha}_k), \tag{7.13}$$

kde \mathbf{H} je Hessova matice cílové funkce a hodnota parametru λ_{LM} se upravuje podle průběhu optimalizace: Dojde-li v rámci kroku ke snížení hodnoty cílové funkce, sníží se jeho hodnota. V opačném případě se jeho hodnota zvýší a výpočet $\boldsymbol{\alpha}_{k+1}$ se opakuje s touto větší hodnotou.

V případě cílové funkce ve tvaru

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^{n_{\text{exp}}} r_i^2(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r} \tag{7.14}$$

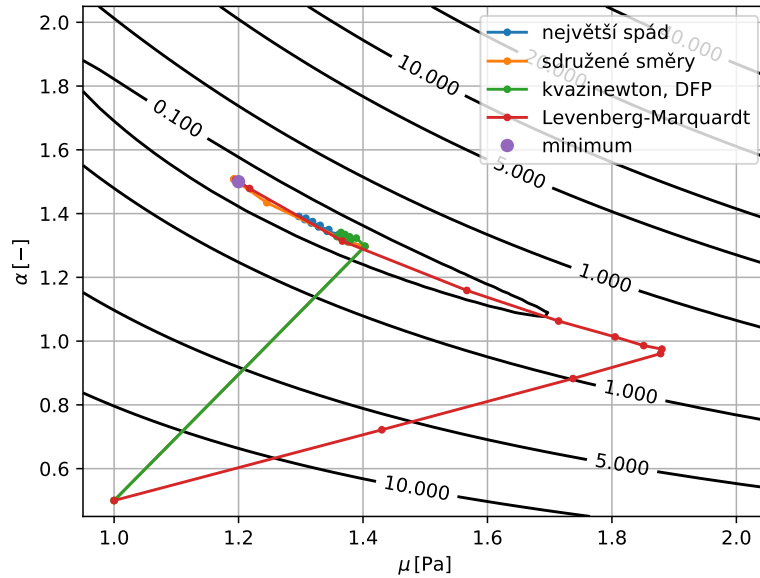
lze v okolí minima použít aproximaci Hessovy matice

$$\mathbf{H} \approx \mathbf{V}^T \mathbf{V}, \tag{7.15}$$

kde matice $\mathbf{V} = \nabla \mathbf{r}$.

Příklad 7.1: Porovnání optimalizačních metod

Identifikace parametrů Ogdenova hyperelastického modelu. Uvažuje se pouze jeden člen řady, parametry optimalizace jsou tedy modul μ a exponent α . „Experimentální“ data byla generována uměle, se zvolenými parametry $\mu = 1,2 \text{ Pa}$,



Obrázek 7.2. Příklad 7.1. Průběh identifikace parametrů Ogdenova modelu různými metodami v prostoru optimalizačních parametrů.

$\alpha = 1,5$. Pro všechny metody bylo provedeno patnáct kroků optimalizace. V případě reálné úlohy by byla zastavovací podmínka volena např. ve tvaru

$$\nabla f(\boldsymbol{\alpha}_k) < \varepsilon, \quad (7.16)$$

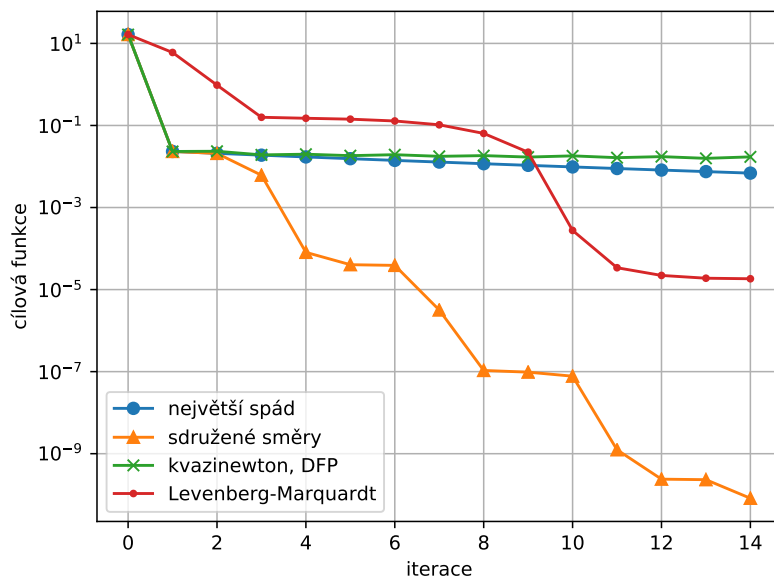
kde ε je zvolené (malé) číslo. Pro jednorozměrnou minimalizaci byla použita funkce `minimize_scalar` z balíku `scipy.optimize` [57].

Průběh optimalizace a hladiny cílové funkce v prostoru optimalizačních parametrů jsou vykresleny v obr. 7.2. Hodnoty cílové funkce v průběhu identifikace jsou na obr. 7.3.

Z pohledu rychlosti konvergence se v tomto případě jeví jako nejlepší metoda sdružených směrů. První krok je identický s metodou největšího spádu a DFP, ale od druhého kroku je již konvergence metody sdružených směrů výrazně rychlejší. Levenbergova-Marquardtova metoda se od ostatních už v prvním kroku liší, zřejmě díky použité aproximaci Hessovy matice (7.15). Během několika kroků se ovšem Levenbergova-Marquardtova metoda dostane do podobného trendu jako metoda sdružených směrů a lze tedy očekávat, že pro řešení úloh identifikace bude vhodná též. ■

7.3 Vliv experimentálních dat

Pojem identifikovatelnosti parametrů v závislosti na použitých datech je v literatuře známý, ovšem týká se typicky situace, kdy je vybraný matematický model příliš složitý, tj. má velké množství parametrů (je tzv. *overparametrized*), a dostupná data neumožňují identifikovat všechny tyto parametry [23]. K této situaci může dojít i při identifikaci parametrů materiálových modelů pryže, což bude ukázáno v této kapitole, přičemž bude navržen postup, jak tomuto stavu vhodnou



Obrázek 7.3. Příklad 7.1. Průběh identifikace parametrů Ogdenova modelu různými metodami – rychlost konvergence.

volbou použitých měření předejít. Protože je tato práce zaměřena na zahrnutí stárnutí a poškození, dvou jevů podobných ve svém vlivu na časovou změnu tuhosti materiálu, je popisovaná metoda ilustrována příklady, které zdůrazňují právě parametry, které ovlivňují změnu tuhosti materiálu v závislosti na čase a historii zatěžování, zatímco použití na obvyklé tuhostní parametry zde popsáno není. Ve zmíněných příkladech je tedy použit jediný mód namáhání – jednoosá napjatost – ale jsou podrobně zkoumány různé časové průběhy předepsaného zatížení a jejich vliv na řešitelnost a podmíněnost úlohy identifikace. Předkládaná metoda posuzování identifikovatelnosti parametrů je nicméně naprosto obecná a lze ji tedy použít i pro parametry, které odpovídají různým geometrickým charakteristikám deformačního chování materiálu, např. tuhostním parametrům polynomiálního modelu (C_{10}, C_{01}, \dots) nebo parametrům Ogdenova modelu (μ_i, α_i).

K problému identifikovatelnosti bylo přistoupeno pomocí analýzy cílové funkce ve spojení s numerickými experimenty, což je postup vedoucí ke značnému zjednodušení problému, díky kterému lze v prvním kroku abstrahovat od jevů, které nebyly cílem práce, jako např. zahrnutí chyb měření náhodných nebo systematických. Zmíněný přístup pomocí numerických experimentů rovněž umožňuje zvážit potenciál dosud nerealizovaných experimentů, tj. přínos pořízení nového zařízení nebo úsilí vloženého do ladění aparatury a postupu dosud nerealizovaného měření. Jevy potlačené ve zmíněném zjednodušení je zároveň možné záměrně zkoumat např. tak, že se do numerických experimentů chyby měření uměle zavedou. Zároveň lze ve zde uvedených postupech použít skutečná experimentální data a vyšetřovat tak vlastnosti cílové funkce, která popisuje chování fyzicky existujícího materiálu.

7.3.1 Výběr deformačních módů a časových průběhů

Tato kapitola vyšetřuje vliv experimentu ε_i jako celku na vlastnosti cílové funkce. Zamýšlené použití takové analýzy je rozvaha, zda zahrnutí uvedeného experimentu přispívá k identifikovatelnosti hledané sady parametrů modelu a jaký je jeho vliv na přesnost či obor použitelnosti výsledku.

Předpokládá se cílová funkce podle (7.3). Citlivost cílové funkce vzhledem k i -tému experimentu jako celku lze zapsat jako

$$\frac{\partial f_{\text{exp1}}}{\partial w_i} = \frac{\sum_{t_j} (F_{ij} - F(\varepsilon_i, x_j; \boldsymbol{\alpha}))^2}{\sum_{t_j} (F_{ij})^2}, \quad (7.17)$$

což je opět skalární funkce parametrů modelu (pro každé i). Použití tohoto typu citlivosti je ilustrováno následujícím příkladem.

Příklad 7.2: Prostý tah/tlak za konstantní teploty a koncentrace kyslíku

Protože jsou teplota i koncentrace kyslíku nezávislé na čase, je průběh vnitřních proměnných μ a ν řešením jednoduché lineární obyčejné diferenciální rovnice. Průběh inverzní trvalé deformace \mathbf{C}_1^{-1} závisí na předepsaném průběhu deformace v čase. Za “správné“ parametry materiálového modelu byly zvoleny:

$$C_{10} = 1,0 \text{ Pa}, \quad k_R = 0,9, \quad k_S = 1,05, \quad A = 0,05 \text{ Pa}^{-1}, \quad a = 2 \quad (7.18)$$

a numerickou simulací odezev na vybraná buzení byly vygenerovány průběhy deformace a napětí, které byly použity místo experimentálních dat. Zvolené typy zatížení byly:

- tečení s předepsaným nominálním napětím 1 N,
- cyklická zkouška s předepsaným protažením

$$\lambda(t) = 1 + \sin^2(\pi t), \quad (7.19)$$

- relaxační zkouška s předepsanou skokovou deformací

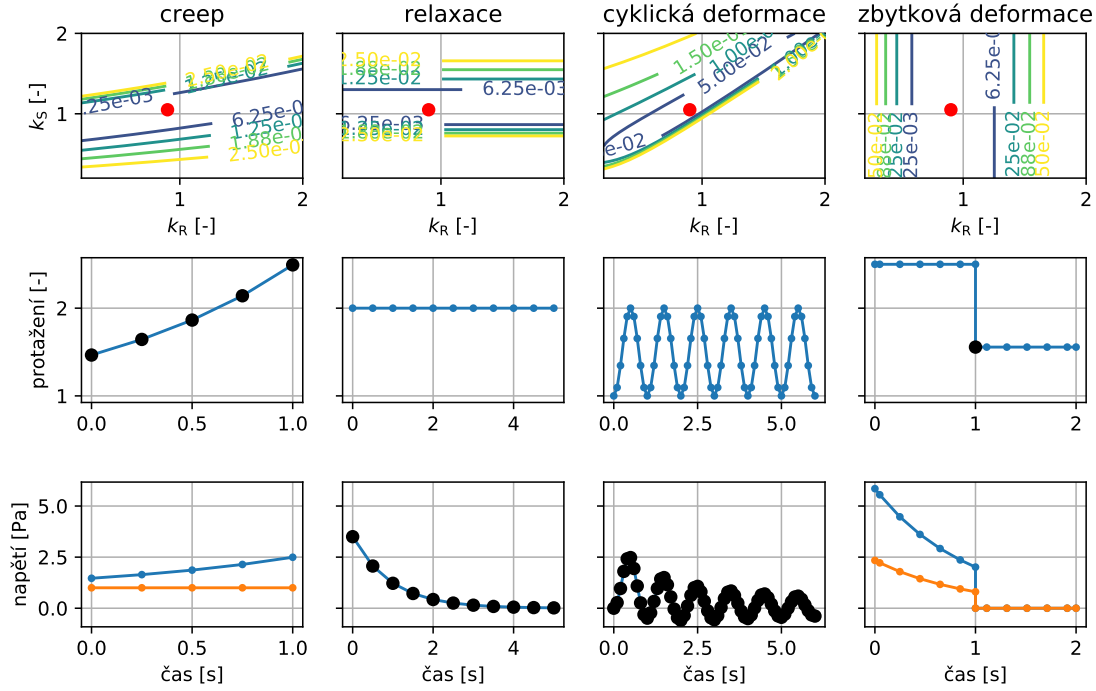
$$\lambda(t) = \begin{cases} 1 & \text{pro } t < 0 \\ 2 & \text{pro } t \geq 0 \end{cases} \quad (7.20)$$

- měření trvalé deformace, při kterém je vzorek nejdříve zdeformován jako při relaxaci ($\lambda = 2,5$), poté zcela odlehčen do nezatíženého stavu (na nulové napětí) a deformace změřená v této fázi je považována za trvalou a je výsledkem měření.

Na obr. 7.4 jsou vykreslena předepsaná protažení, vygenerovaná napětí a jim odpovídající citlivosti cílové funkce f_{exp1} v rovině parametrů stárnutí k_R a k_S . Důležitým zjištěním je, že hladiny citlivostí v případě relaxační zkoušky a měření trvalé deformace jsou rovnoběžné. Při identifikaci pouze na základě relaxační zkoušky tedy nelze stanovit hodnotu parametru k_R a, podobně, ze samotného měření trvalé deformace nelze určit hodnotu parametru k_S . ■

Výsledky naznačené v předchozím příkladě graficky lze formulovat i číselně. Cílová funkce či její citlivost (pro jednoduchost značení bude použito souhrnné označení f) se za tím účelem aproximuje v bodě $\boldsymbol{\alpha}_0$ kvadratickou funkcí f_{approx}

$$f(\boldsymbol{\alpha}) \approx f_{\text{approx}} = \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{b}^T \boldsymbol{\alpha} + c. \quad (7.21)$$



Obrázek 7.4. Příklad 7.2. Citlivosti cílové funkce vzhledem k jednotlivým experimentům v rovině parametrů stárnutí k_R - k_S (horní řada) a vygenerovaná data (spodní dvě řady). Červené tečky v grafech citlivostí označují správné hodnoty parametrů modelu. Černé tečky v grafech dat označují body použité pro výpočet cílové funkce.

Minimalizace této aproximace spočívá v řešení soustavy lineárních algebraických rovnic

$$2 \mathbf{A} \boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{b} . \quad (7.22)$$

Kromě existence jednoznačného řešení může nastat (viz např. [49]) ještě případ, kdy existuje nekonečně mnoho řešení a případ, kdy neexistuje žádné řešení. Vzhledem k povaze zde řešených úloh identifikace materiálových parametrů je relevantní především případ nekonečně mnoha řešení. Ten nastane, pokud vektor pravých stran \mathbf{b} neleží v nulovém prostoru matice \mathbf{A} . Při vyšetřování identifikovatelnosti parametrů se tedy najdou nulová vlastní čísla matice \mathbf{A} a jim odpovídající vlastní vektory \mathbf{v}_i . Každý z těchto vlastních vektorů, který je kolmý na vektor \mathbf{b} , potom značí směr, ve kterém jsou hladiny f_{approx} rovnoběžné a každý takový směr značí deficit v identifikovatelnosti parametrů modelu. Je tedy možné identifikovat lineární kombinaci parametrů, složek $\boldsymbol{\alpha}$, která odpovídá nenulovým složkám vektoru \mathbf{v}_i , ale nikoliv všechny hodnoty těchto parametrů.

Obr. 7.5 a 7.6 zobrazují počty takových neidentifikovatelných kombinací v závislosti na poloze bodu $\boldsymbol{\alpha}_0$, ve kterém byla zkonstruována kvadratická aproximace. Hodnoty v obou grafech jsou vyčísleny na síti 201×201 bodů. Kritéria, podle kterých byly posuzované veličiny považovány za nulové, byla:

$$|A_i| \leq \epsilon_1 , \quad (7.23)$$

$$\frac{|\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{b}|}{\|\mathbf{b}\|} \leq \epsilon_2 , \quad (7.24)$$

kde A_i značí vlastní číslo matice \mathbf{A} příslušné vlastnímu vektoru \mathbf{v}_i .

Kombinace parametrů, jejichž počty jsou v uvedených grafech vykresleny, nicméně nemají přímou vazbu na rovinu, ve které jsou zobrazeny, tj. je-li např.

u relaxace v nějakém bodě roviny parametrů poškození zobrazen jeden neidentifikovatelný směr, jde o tentýž směr, který je pro tutéž kombinaci parametrů zobrazen jako deficitní v rovině parametrů stárnutí.

Kvadratická aproximace byla v tomto případě určena metodou používanou např. Batesem a Wattsem [15], kdy se cílová funkce zapíše jako

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})^T \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (7.25)$$

a reziduální vektor \mathbf{r} se potom aproximuje v bodě $\boldsymbol{\alpha}_0$ lineárně jako

$$\mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha}_0) + \mathbf{V}(\boldsymbol{\alpha}_0) (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_0) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{V} (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_0) . \quad (7.26)$$

Matice \mathbf{V} byla v případě výpočtu obr. 7.5 a 7.6 stanovena metodou přímé diferenciace (DDM, viz kap. B.2). Parametry kvadratické aproximace vyjdou

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}^T \mathbf{V} , \quad (7.27)$$

$$\mathbf{b} = -2 \mathbf{V}^T \mathbf{V} \mathbf{r}_0 + 2 \mathbf{V}^T \mathbf{r}_0 , \quad (7.28)$$

$$c = \boldsymbol{\alpha}_0^T \mathbf{V}^T \mathbf{V} \boldsymbol{\alpha}_0 + \mathbf{r}_0^T \mathbf{r}_0 . \quad (7.29)$$

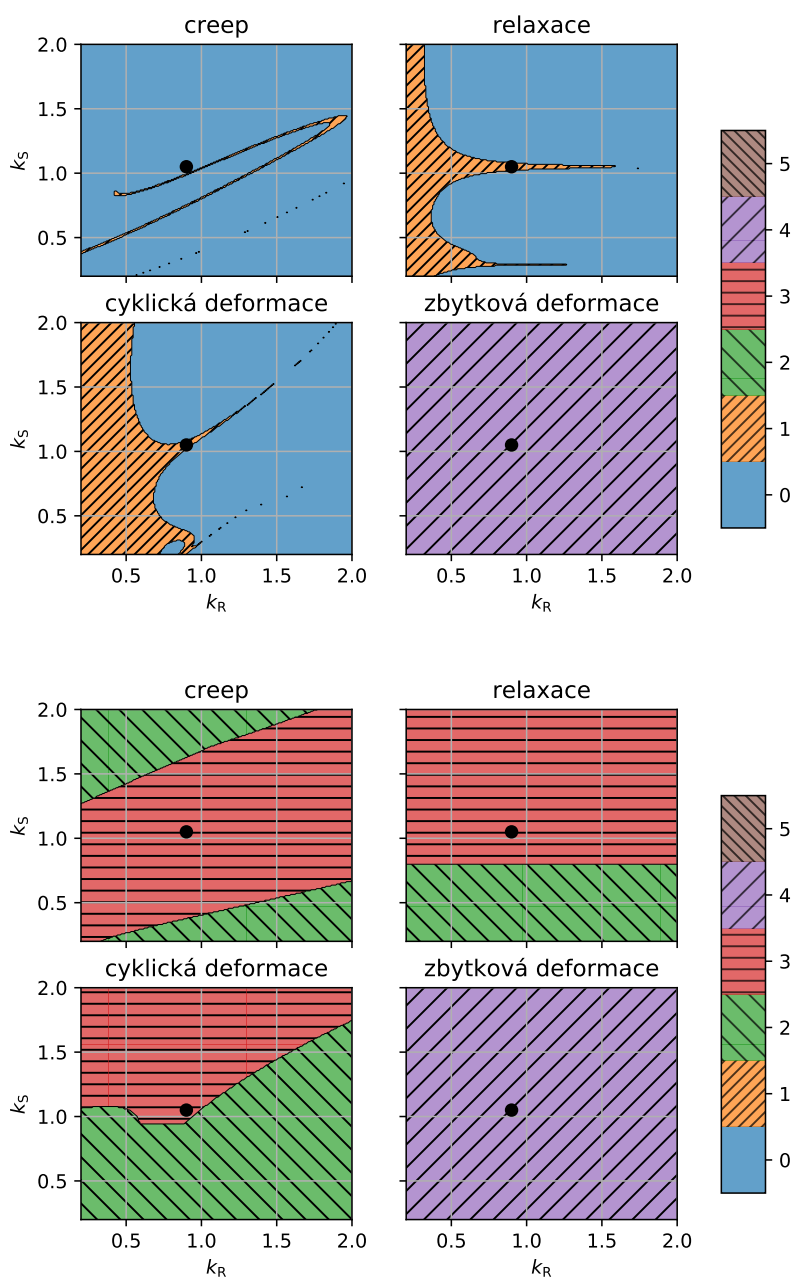
Příklad konkrétních hodnot vlastních čísel a jim odpovídajících vlastních vektorů pro aproximaci v bodě $\boldsymbol{\alpha}_0 = \hat{\boldsymbol{\alpha}}$ jsou uvedeny v tab. 7.1. Z uvedených dat jsou zřejmé následující závěry:

- Tečení neobsahuje žádné deficitní identifikovatelnosti podle kritérií (7.23) a (7.24), vektor ve směru exponentu poškození a je však jejich splnění velmi blízko.
- Relaxační a cyklická zkouška mají deficit převládající ve směru koeficientu poškození A .
- Měření trvalé deformace umožňuje identifikaci pouze parametru k_R , neboť jediná nenulová složka jediného vlastního vektoru, který nepatří mezi deficitní směry, odpovídá právě tomuto parametru.
- Koeficient poškození A je problematický u všech uvedených zkoušek.

Interpretace uvedené analýzy cílové funkce je ta, že žádný z uvažovaných experimentů nepostačuje k identifikaci všech parametrů modelu a je tedy nutné použít nějakou jejich kombinaci. Existence deficitu v identifikovatelnosti není nutně problémem pro optimalizační metody, které nevyužívají kvadratickou aproximaci cílové funkce, neboť i v případě, že neexistuje jednoznačné minimum této aproximace, existuje obvykle gradient a je tedy možné postupovat v jím definovaném směru. U některých z výše zmíněných problematických experimentů (relaxace, zbytková deformace) je ovšem problém na metodě řešení nezávislý, neboť tyto dílčí cílové funkce nemají jednoznačné minimum.

Pro úplnost je na obr. 7.7 v rovině parametrů stárnutí k_R - k_S spolu s hladinami cílové funkce vykreslena hladina její kvadratické aproximace, která prochází bodem, ve kterém byla aproximace zkonstruována a má tedy v tomto bodě s hladinou původní cílové funkce společnou tečnu. Graf kromě toho ilustruje i princip optimalizačních metod využívajících kvadratickou aproximaci cílové funkce (viz kap. 7.2.4 a 7.2.5).

Kromě řešitelnosti úlohy identifikace se nabízí sledovat ještě případný dopad volby experimentů na spolehlivost výsledků. Např. cyklická zkouška sice umožňuje nalezení hodnot parametrů k_R a k_S , ale hladiny v okolí řešení tvoří protáhlé

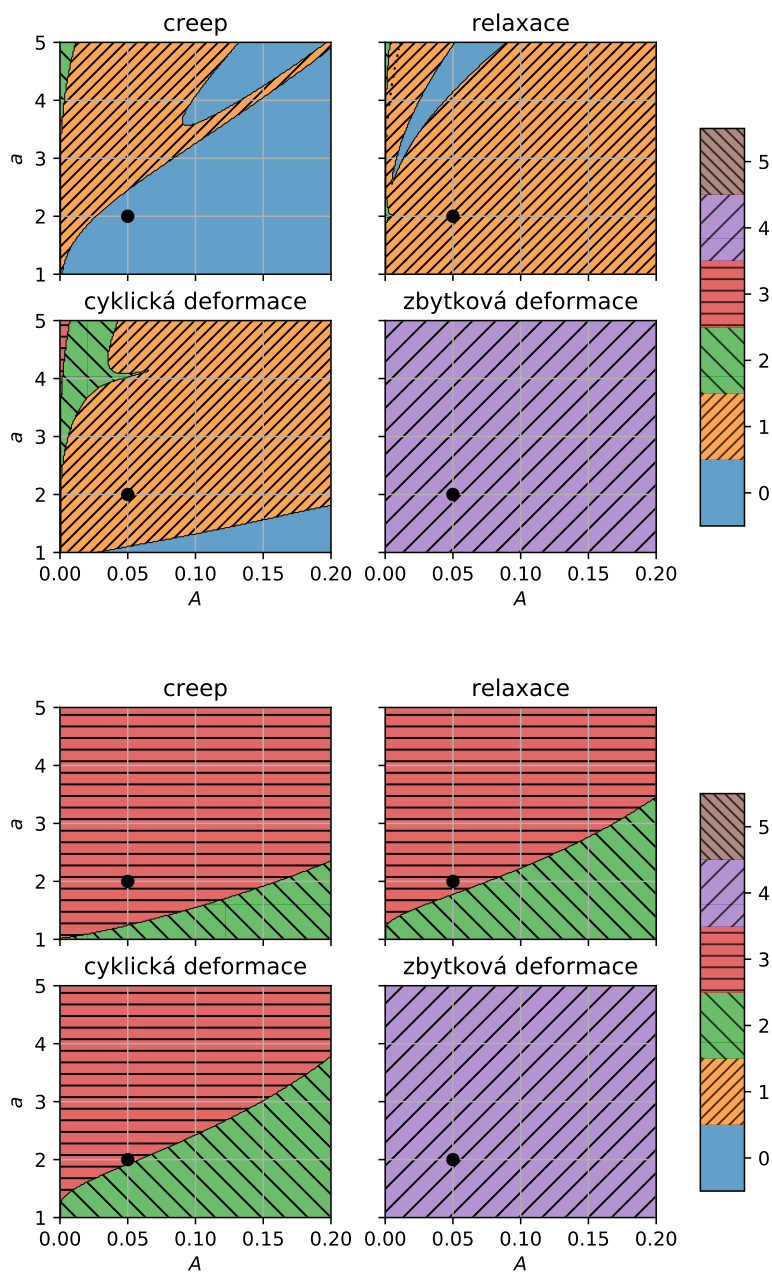


Obrázek 7.5. Počet neidentifikovatelných kombinací parametrů při různých experimentech, vykresleno v rovině koeficientů stárnutí k_R - k_S . Nahoře $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-12}$, dole $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-3}$.

údolí. Při nepřesném určení jedné z neznámých tak automaticky vznikne chyba i v hodnotě druhého parametru. Naproti tomu při použití kombinace relaxační zkoušky a měření trvalé deformace mají hladiny cílové funkce tvar blízký kružnicím, viz obr. 7.8, a chyba v jednom parametru neznámá automaticky chybu v hodnotě druhého.

7.3.2 Vliv jednotlivých bodů

Tato kapitola se, na rozdíl od předchozí, zabývá vlivem jednotlivých bodů měření na vlastnosti cílové funkce. Cílem takového popisu je především určit, zda je po-



Obrázek 7.6. Počet neidentifikovatelných kombinací parametrů při různých experimentech, vykresleno v rovině parametrů poškození a - A . Nahoře $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-12}$, dole $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-3}$.

užité množství dat dostatečné, zda lze některé údaje vynechat, nebo které jsou naopak pro identifikaci nepostradatelné.

K uvedenému účelu se použije cílová funkce ve tvaru (7.4) přičemž její derivace vzhledem k vybrané kombinaci i a j vyjadřuje vliv j -tého bodu i -tého měření a má tvar

$$\frac{\partial f_{\text{exp2}}}{\partial w_{ij}} = \frac{(F_{ij} - F(\varepsilon_i, x_j; \boldsymbol{\alpha}))^2}{\sum_{t_j} (F_{ij})^2}. \quad (7.30)$$

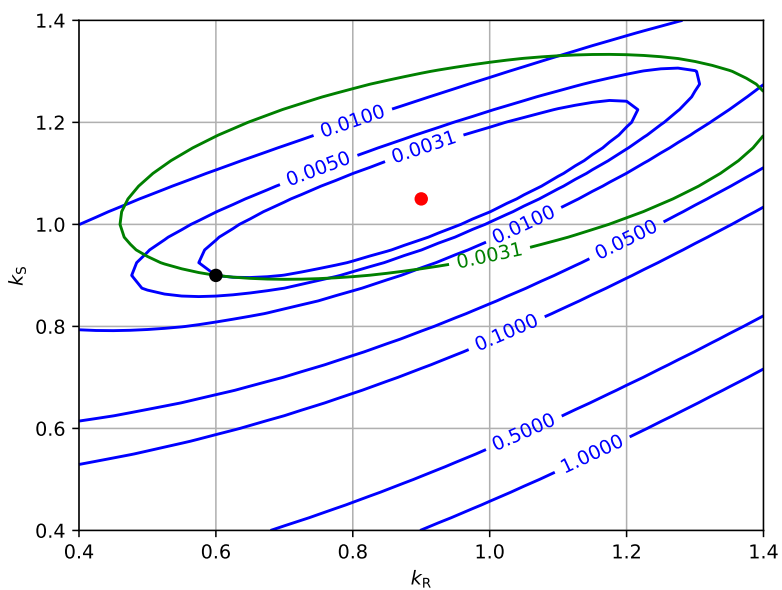
Pro ilustraci použití je opět uveden příklad.

	vl. číslo	vl. vektor \mathbf{v}_i	$(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{b}) / \ \mathbf{b}\ $	převládající směr
tečení	0,440		0,997	
	0,0103		-0,0710	
	$5,65 \cdot 10^{-5}$	$[-0,0511, -0,821, -0,314, 0,473, -0,0287]^T$	$3,67 \cdot 10^{-4}$	k_R, k_S, A
	$1,070 \cdot 10^{-6}$	$[0,00409, 0,485, 0,0492, 0,872, -0,0466]^T$	$-2,90 \cdot 10^{-6}$	A
$9,60 \cdot 10^{-13}$	$[-1,93 \cdot 10^{-6}, -0,00341, 8,21 \cdot 10^{-4}, 0,0552, 0,998]^T$	$-1,17 \cdot 10^{-11}$	a	
relaxace	0,543		-0,939	
	0,0960		-0,345	
	$4,47 \cdot 10^{-4}$	$[-0,0124, 9,50 \cdot 10^{-7}, -0,137 0,989, -0,0594]^T$	$2,49 \cdot 10^{-4}$	A
	$3,62 \cdot 10^{-9}$	$[-7,47 \cdot 10^{-6}, 3,72 \cdot 10^{-4}, -8,88 \cdot 10^{-4}, -0,0601, -0,998]^T$	$2,01 \cdot 10^{-8}$	a
$1,21 \cdot 10^{-15}$	$[6,99 \cdot 10^{-10}, -1,00, -9,31 \cdot 10^{-7}, -2,14 \cdot 10^{-5}, -3,71 \cdot 10^{-4}]^T$	$2,97 \cdot 10^{-15}$	k_R	
cyklická deformace	1,01		-0,886	
	0,153		-0,463	
	$7,42 \cdot 10^{-4}$	$[0,0378, 1,09 \cdot 10^{-8}, -0,111, 0,991, -0,0600]^T$	$2,42 \cdot 10^{-4}$	A
	$1,25 \cdot 10^{-8}$	$[-1,14 \cdot 10^{-4}, -1,26 \cdot 10^{-6}, -9,12 \cdot 10^{-4}, -0,0605, -0,998]^T$	$5,46 \cdot 10^{-8}$	a
$5,52 \cdot 10^{-19}$	$[-1,64 \cdot 10^{-10}, -1,00, -1,92 \cdot 10^{-8}, -8,52 \cdot 10^{-8}, 1,26 \cdot 10^{-6}]^T$	$1,42 \cdot 10^{-16}$	k_R	
zbytková deformace	0		$-4,29 \cdot 10^{-29}$	
	0,0818	$[-2,90 \cdot 10^{-13}, -1, -2,34 \cdot 10^{-13}, -3,36 \cdot 10^{-16}, 3,26 \cdot 10^{-16}]^T$	1	k_R
	$3,65 \cdot 10^{-49}$		$-8,04 \cdot 10^{-29}$	
	0		$5,59 \cdot 10^{-29}$	
	0		$2,11 \cdot 10^{-29}$	

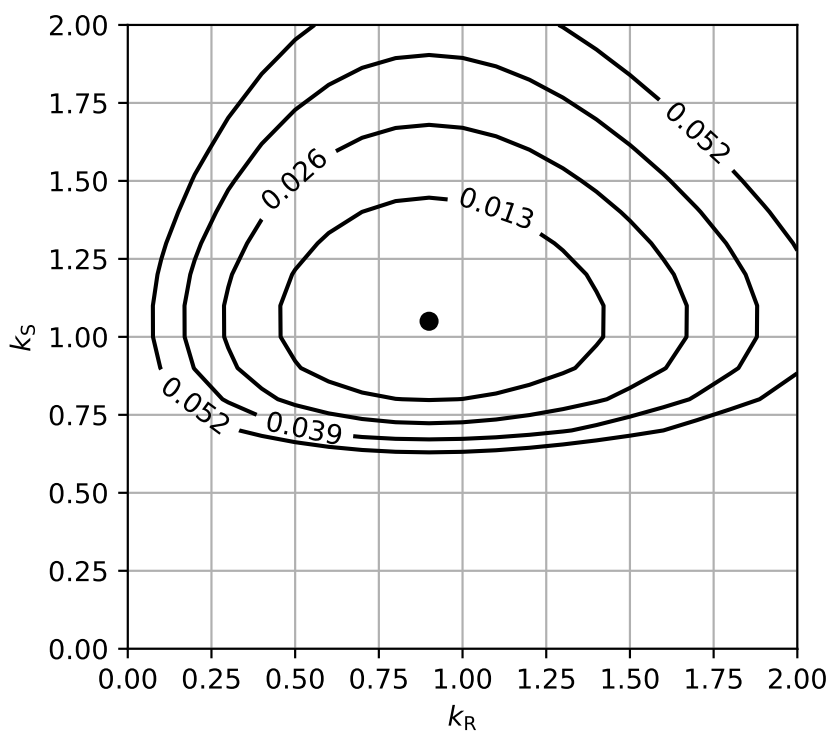
Tabulka 7.1. Vlastní čísla a vlastní vektory kvadratických aproximací citlivostí cílové funkce pro stanovení identifikovatelnosti parametrů. Pro přehlednost uvedeny jen vlastní vektory nejbližší splnění kritérií (7.23) a (7.24) kromě tečení, kde je uveden pouze jediný vektor nesplňující tato kritéria.

Příklad 7.3: Prostý tah/tlak za konstantní teploty a koncentrace kyslíku – vliv jednotlivých bodů

Na obr. 7.9 jsou zobrazeny citlivosti cílové funkce vzhledem k vybraným bodům zkoušky tečení. Měřenou veličinou je protažení, jehož hodnota v okamžiku zatížení není ovlivněna žádným z parametrů stárnutí. S rostoucím časem roste i váha bodů měření, ale cílová funkce si v rovině parametrů stárnutí zachovává tvar protáhlého údolí, které je při identifikaci nežádoucí z důvodu možného cik-cak efektu, ale především kvůli spolehlivosti identifikovaných parametrů.

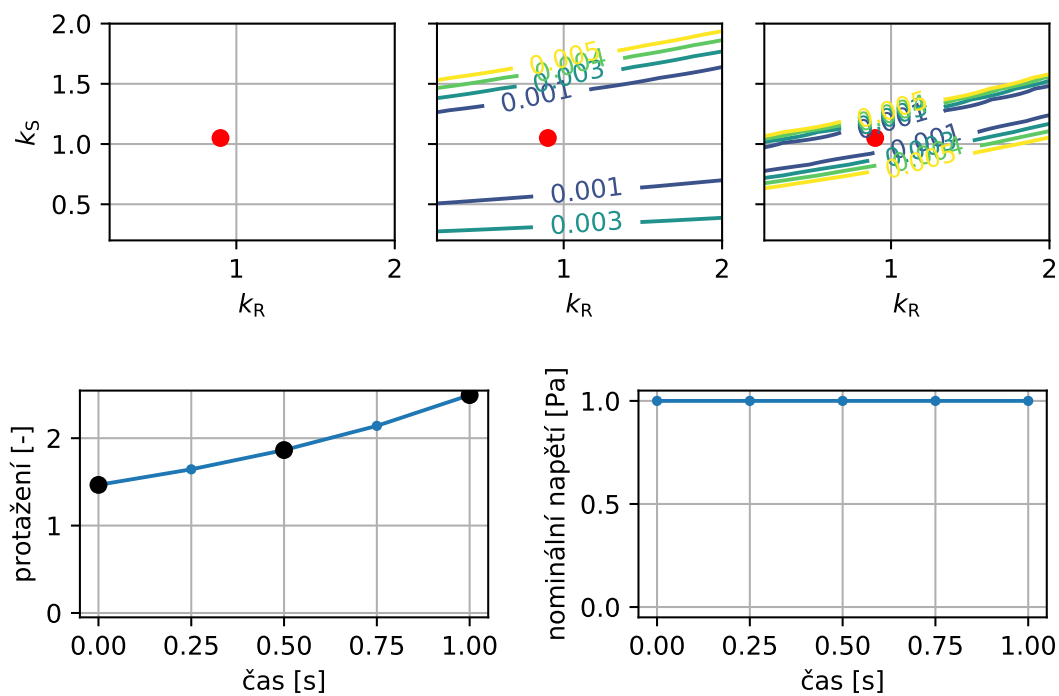


Obrázek 7.7. Cílová funkce (modré hladiny) a její kvadratická aproximace (zelené hladiny). Černým kolečkem je označen bod, ve kterém byla aproximace zkonstruována, červeně je zakresleno minimum původní cílové funkce.

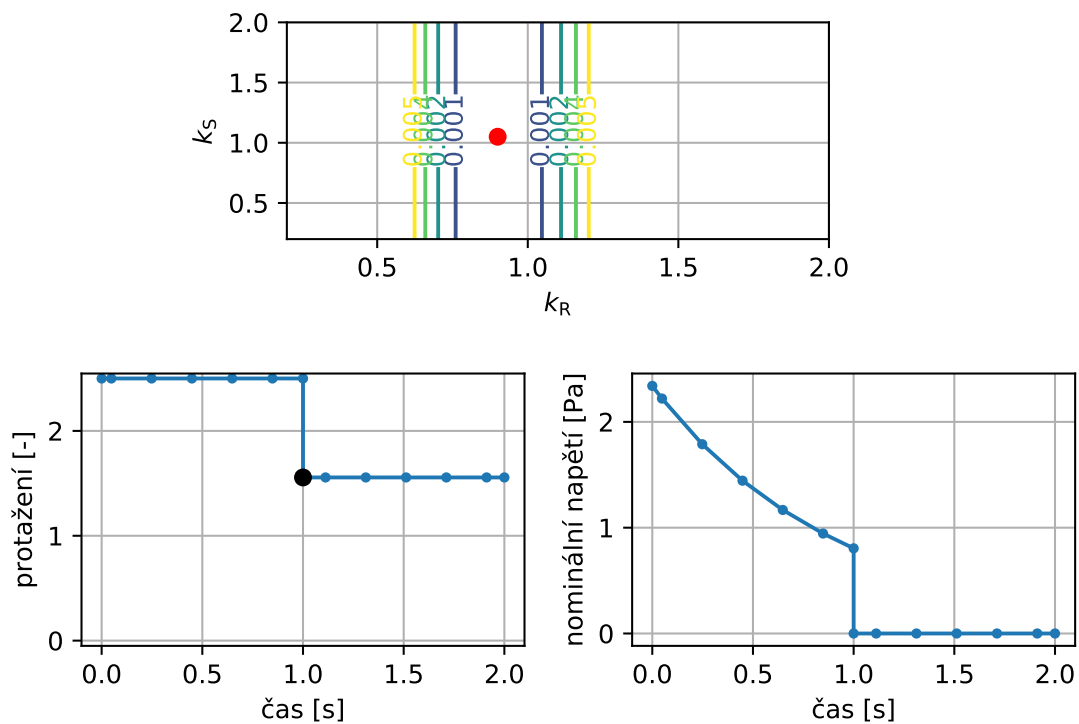


Obrázek 7.8. Hladiny cílové funkce složené pouze z relaxace a trvalé deformace v rovině koeficientů stárnutí k_R - k_S .

Na obr. 7.10 jsou zobrazeny citlivosti cílové funkce vzhledem k měření zbytkové deformace. Toto měření sestává z jediného údaje, na nějž má vliv předchozí historie zatížení. Měření zbytkové deformace v libovolném pozdějším čase by



Obrázek 7.9. Příklad 7.3. Citlivosti cílové funkce vzhledem k bodům měření – tečení.



Obrázek 7.10. Příklad 7.3. Citlivosti cílové funkce vzhledem k bodům měření – trvalá deformace.

ovšem v případě zde uvažovaného materiálového modelu vedlo k identickým výsledkům.



7.4 Závěr

Na základě výše uvedených příkladů optimalizačních algoritmů se jako vhodný postup při kalibraci modelu chemického stárnutí a poškození pryže (kap. 5) jeví použití gradientního algoritmu s vhodným zahrnutím nerovnostních vazeb. Robustní technikou je metoda největšího spádu, přičemž vazby mohou být snadno zohledněny modifikací cílové funkce vhodně zvolenou penaltou. Pro rychlejší konvergenci lze doporučit metodu sdružených směrů či Levenbergovu-Marquardtovu metodu. Vzhledem k průběhům cílových funkcí konstruovaných v kap. 7.3.1, jejichž hladiny by v prostoru parametrů měly být blízko elipsoidům, lze nicméně předpokládat, že pomalá konvergence Newtonovy metody a kvazinevtonovských metod se vhodnou volbou experimentů do jisté míry eliminuje.

Hlavním závěrem této kapitoly je ovšem volba experimentálních dat nutných k úspěšné kalibraci modelu. Byl uveden obecný postup spočívající v analýze cílové funkce. Na příkladech byly studovány její vlastnosti vzhledem k parametrům určujícím závislosti mechanických vlastností materiálu na čase a historii zatěžování. Z provedených simulací plyne, že tyto parametry modelu lze identifikovat buď na základě měření tečení nebo kombinace relaxační zkoušky a trvalé deformaci, přičemž druhá možnost vede k robustnějším výsledkům.

Identifikace tuhostních parametrů modelu nebyla v rámci této práce zkoumána, resp. ve všech výpočtech byl uvažován pouze parametr C_{10} , jehož stanovení je velmi přímočaré, ačkoliv použitelnost výsledného modelu je omezená. Důvodem pro toto zjednodušení je fakt, že stanovení tuhostních parametrů je úloha z velké části nezávislá na parametrech časových závislostí, které jsou těžištěm této práce, a již na toto téma existuje rozsáhlá literatura, která popisuje deformační módy nutné pro identifikaci různých tuhostních parametrů. Pro pryže, které byly autorem dosud zkoumány, se vždy potvrdilo, že při identifikaci založené na tahové a tlakové zkoušce dosahuje model dobré shody i ve smyku. Tento závěr se nepotvrdil v případě korko-pryžového kompozitu, u něhož je tedy použit smykovou či krutovou zkoušku i při kalibraci modelu.

Lze tedy říci, že pro identifikaci všech parametrů modelu (tuhostních i časových) je nutné pro každý deformační mód – zde tah a tlak¹ – provést požadovanou historii zatěžování – zde tečení a měření zbytkové deformace. Pokud má být uvažován i vliv difuze kyslíku, je nutné zjistit i koeficient difuzivity, např. měřením permeability membrány. Toto měření lze realizovat nezávisle na ostatních a hodnotu koeficientu difuzivity je tedy možné v analýze identifikovatelnosti i procesu kalibrace modelu považovat za známou konstantu. Opačná situace by nastala v případě, že není možné měření permeabilit realizovat (např. kvůli chybějícímu přístrojovému vybavení nebo nemožnosti vyrobit požadované vzorky). Nabízí se pak provést identifikaci koeficientu difuzivity např. pomocí mechanických zkoušek na vzorcích různé tloušťky, přičemž chemické stárnutí by díky rozdílnému průběhu difuze kyslíku mělo různý vliv na změny tuhosti jednotlivých vzorků. Takováto měření již ovšem nejsou z pohledu kalibrace modelu nezávislá na ostatních experimentech a musí být zahrnuta do analýzy identifikovatelnosti podle kap. 7.3.1.

¹ Tlak lze alternativně realizovat jako ekvibiaxiální zkoušku.

Kapitola 8

Spolehlivost modelu a meze jeho použitelnosti

Kvalitu identifikovaných parametrů vzhledem ke změřeným datům vyjadřuje cílová funkce. Při praktickém použití mohou ovšem vyvstat i následující otázky týkající se výsledku:

- Jsou identifikované parametry stabilní vzhledem k použitým experimentálním datům?
- Jak se liší predikovaná hodnota sledované veličiny $F(t; \alpha)$ od jí odpovídající změřené hodnoty F_i v závislosti na nezávisle proměnné t ?
- Jaká bude shoda modelu s experimenty, které nebyly zahrnuty v sadě měření, na základě kterých byla provedena identifikace?

První bod byl již stručně diskutován v kap. 7.3. Druhý a třetí bod je ekvivalentní hodnotě cílové funkce, tj. pro zvolenou hodnotu cílové funkce lze dopočítat maximální odchylku mezi predikovanou a změřenou hodnotou pro libovolnou hodnotu nezávisle proměnné. Podkapitola 8.2 obsahuje formulaci obecného kritéria, které lze použít pro stanovení mezí použitelnosti identifikovaných parametrů a to pro experimenty zahrnuté ve formulaci cílové funkce i pro měření pro kalibraci modelu nepoužitá.

Poslední podkapitola potom popisuje způsob, jak pracovat s výsledky identifikace parametrů Ogdenova hyperelastického modelu ve tvaru intervalu. Autor tento postup považuje za potenciálně natolik významný pro praxi, že je zde uveden.

8.1 Omezení plynoucí z vlastností materiálového modelu

Častým požadavkem při volbě materiálového modelu je zanedbat některé jevy pozorované v chování skutečného materiálu, např. teplotní závislost, viskoelasticitu nebo nelinearitu. Toto zanedbání s sebou pak nese omezení prediktivních schopností modelu, který lze následně použít jen v určitém okolí fyzikálních podmínek, pro které byl zkalibrován. Přes zjevný nesoulad se skutečností ovšem může mít použití zjednodušeného modelu zcela legitimní opodstatnění v technické praxi.

Model chemického stárnutí a únavového poškození pryže popisovaný v této práci (kap. 5) zanedbává především tyto jevy:

- viskoelasticitu,
- Mullinsův efekt,
- anizotropii původních mechanických vlastností i procesu poškození a
- stlačitelnost.

Zanedbání viskoelasticity pramení přímo z motivace této práce, kdy cílem modelování není výpočet přechodové odezvy v čase, ale výpočet předpětí či deformace při statické zkoušce. Mullinsův efekt není uvažován, neboť je obvykle patrný pouze během několika prvních cyklů zatěžování. Zbývá omezení jsou pak učiněna s cílem

zachovat přijatelnou míru složitosti modelu a jde tedy o možné další kroky v jeho vývoji.

Další zjednodušení lze v materiálovém modelu uplatnit, pokud by tomu odpovídaly předpokládané provozní podmínky, zanedbáním:

- difuze kyslíku v případě tenkých součástí,
- teplotní závislosti při předpokládaném provozu bez velkých teplotních výkyvů nebo
- omezením rozsahu deformací,

přičemž vliv na použitelnost takto zjednodušených modelů je zřejmý.

8.2 Meze použitelnosti identifikovaného modelu

Jako kritérium pro stanovení mezí použitelnosti identifikovaného modelu bylo v příspěvku [v13] navrženo následující.

Nechť sada parametrů považovaná za řešení úlohy 7.1 je $\hat{\alpha}$. Dále se uvažuje experiment, při němž byly změřeny hodnoty závisle proměnné \bar{F}_i odpovídající hodnotám nezávisle proměnné t_i . Půžitelnost modelu pro různé hodnoty nezávisle proměnné t se potom posoudí podle splnění kritéria

$$\bar{F}_i - \Delta F_{\min}(t_i) \leq F(t_i, \hat{\alpha}) \leq \bar{F}_i + \Delta F_{\max}(t_i), \quad (8.1)$$

kde ΔF_{\min} a ΔF_{\max} jsou zvolené funkce. Aby bylo možné stanovit hranice intervalů použitelnosti přesněji než ve zvolených bodech t_i , nahradí se změřené hodnoty \bar{F}_i vhodnou spojitou aproximací.

Uvedené kritérium může být použito pro stanovení mezí parametrů zatížení tak, že se provede např. série cyklických tahových zkoušek s proměnnou amplitudou posuvu a shodnými ostatními parametry zatěžování. Pro každé měření se pak prověří splnění kritéria (8.1) a výsledkem je interval (resp. množina) amplitud, pro které je model charakterizovaný parametry $\hat{\alpha}$ považovaný za použitelný. Ve zcela obecném případě je nutné podobný postup opakovat pro všechny relevantní způsoby zatěžování (módy deformace, časové průběhy) a jejich parametry (amplituda, střední hodnota, rychlost zatížení). Prakticky tedy lze meze použitelnosti vyšetřit jen ve velmi omezeném rozsahu.

Příklad 8.1: Meze použitelnosti neo-Hookeovského a dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu

Pro ilustraci použití kritéria (8.1) jsou uvažovány dva hyperelastické modely. Data byla vygenerována pomocí Ogdenova hyperelastického modelu (3.8) s parametry

$$\mu_1 = 1 \text{ Pa}, \quad \alpha_1 = 0,5, \quad \mu_2 = 0,3 \text{ Pa}, \quad \alpha_2 = 5,0,$$

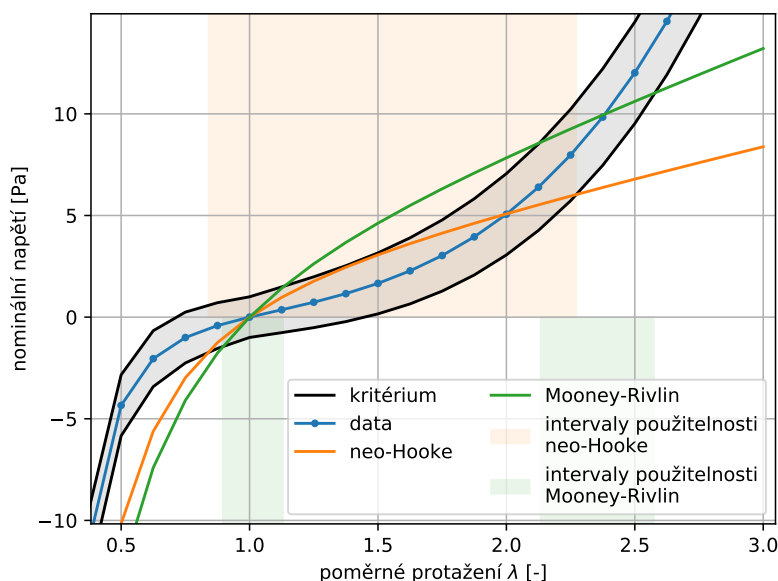
aby je nebylo možné pomocí žádného z obou modelů popsat přesně. Kritérium použitelnosti bylo definováno funkcemi

$$\Delta F_{\min}(t) = \Delta F_{\max}(t) = F^{(0)} + F'(t - t_0), \quad (8.2)$$

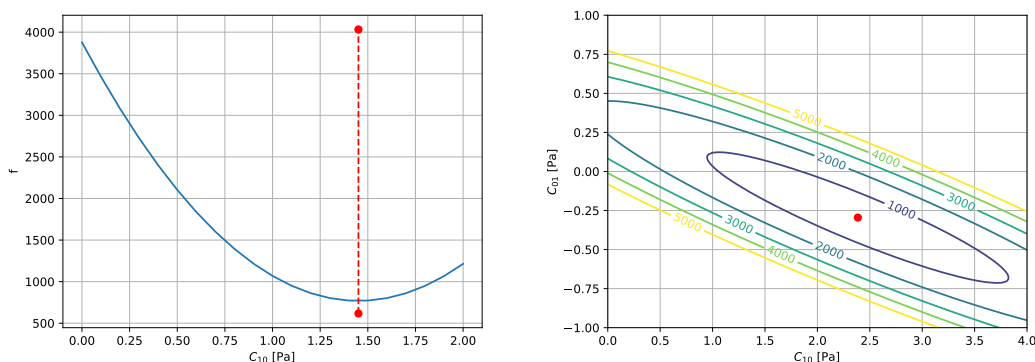
s parametry $F^{(0)} = 1 \text{ Pa}$, $F' = 1 \text{ Pa}$ a $t_0 = 1$, přičemž jako nezávisle proměnná t je v tomto příkladu bráno poměrné protažení ve směru zatěžování λ .

Obr. 8.1 ukazuje pro případ jednoosé napjatosti vygenerovaná data spolu s oběma modely, zvoleným kritériem použitelnosti a vyznačenými intervaly použitelnosti obou modelů. Oba modely byly v tomto případě kalibrovány metodou nejmenších čtverců (lineární), neboť jsou lineární vzhledem ke svým parametrům. Výsledné parametry a hodnoty cílové funkce f byly:

- neo-Hookeovský model: $C_{10} = 1,45 \text{ Pa}$, $f = 768$,
- Mooneyho-Rivlinův model: $C_{10} = 2,38 \text{ Pa}$, $C_{01} = -0,295 \text{ Pa}$, $f = 540$.



Obrázek 8.1. Meze použitelnosti neo-Hookeovského a dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu kalibrovaných metodou nejmenších čtverců (příklad 8.1).



Obrázek 8.2. Cílové funkce definované pomocí součtu čtverců odchylek (příklad 8.1).

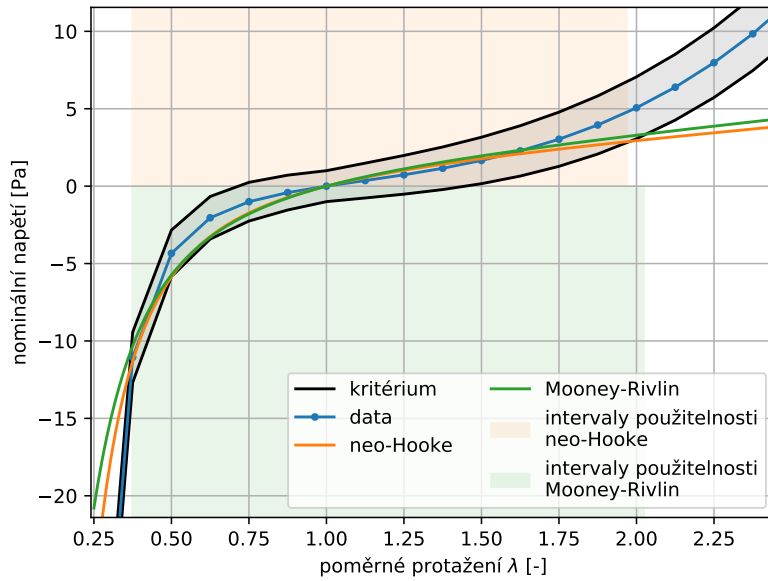
Z grafu je ovšem zřejmé, že ani jeden model nepopisuje dobře uvedená data. Dobré shody není dosaženo ani v okolí nedeformovaného stavu, neboť modely mají zcela jinou počáteční tuhost. Toto je způsobeno zahrnutím dat s příliš velkými deformacemi do cílové funkce – modely pak tvoří jen jakési sečny, jejichž tvar ale v žádném místě nekopíruje data.

Pro odstranění uvedeného nedostatku byl učiněn pokus definovat cílovou funkci jako délku intervalu použitelnosti v okolí nezatíženého stavu \bar{t} , tj.

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{cases} -|\mathcal{I}| & \text{pokud existuje interval použitelnosti } \mathcal{I} \text{ takový, že } \bar{t} \in \mathcal{I}, \\ 0 & \text{pokud } \bar{t} \text{ neleží v žádném intervalu použitelnosti.} \end{cases} \quad (8.3)$$

Výsledné parametry a hodnoty cílové funkce f byly:

- neo-Hookeovský model: $C_{10} = 0,84 \text{ Pa}$, $f = -1,602$,
- Mooneyho-Rivlinův model: $C_{10} = 0,98 \text{ Pa}$, $C_{01} = -0,080 \text{ Pa}$, $f = -1,629$.



Obrázek 8.3. Meze použitelnosti neo-Hookeovského a dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu v případě parametrů identifikovaných na základě délky intervalu použitelnosti (příklad 8.1).

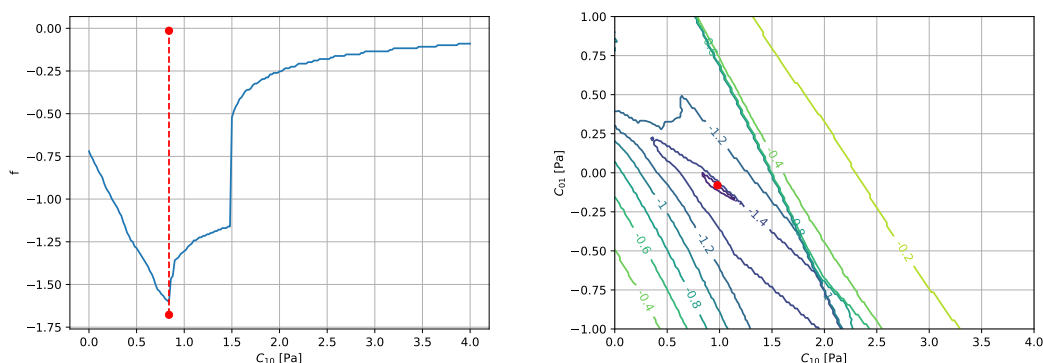
Výsledky jsou znázorněny na obr. 8.3. Je zřejmé, že interval spolehlivosti se u obou modelů podařilo výrazně rozšířit, přestože ani u tohoto způsobu kalibrace modelů není výsledná shoda ideální. Další nevýhodou tohoto přístupu je nekonvexnost cílové funkce – viz obr. 8.4. ■

Příklad 8.2: Meze použitelnosti dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu pro skutečná experimentální data

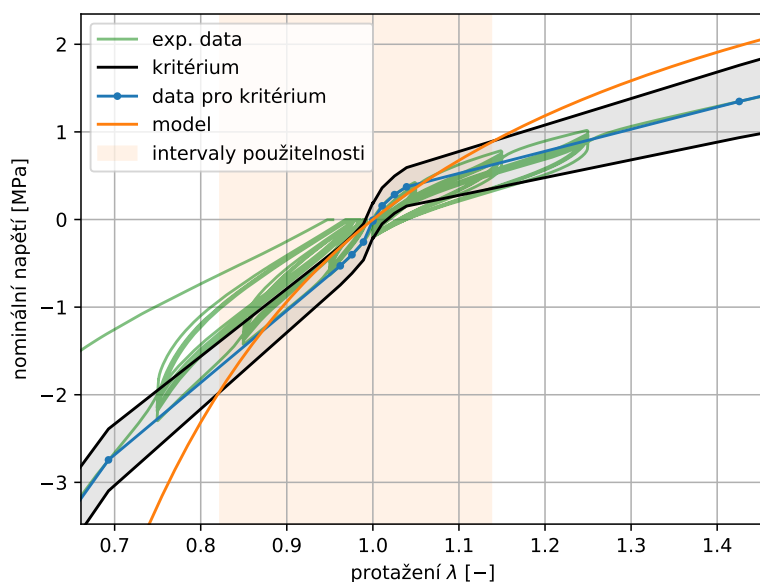
V tomto příkladu jsou použita data z cyklických tahových a tlakových zkoušek. Kritérium použitelnosti bylo voleno tak, že měřené hodnoty \bar{F}_i ležely na zatěžovací části křivky a parametry vztahu (8.2) byly

$$F^{(0)} = 0,2 \text{ MPa} , \quad F' = 0,5 \text{ MPa} , \quad \bar{t} = 1 . \quad (8.4)$$

Výsledky jsou znázorněny na obr. 8.5. ■



Obrázek 8.4. Cílové funkce definované pomocí délky intervalu spolehlivosti (příklad 8.1).



Obrázek 8.5. Meze použitelnosti dvouparametrického Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu v případě reálných dat (příklad 8.1).

Příklad 8.1 ilustruje následující závěry týkající se posuzování mezí použitelnosti materiálového modelu:

- Samotná hodnota cílové funkce nevypovídá o kvalitativní shodě modelu a dat.
- Cílová funkce založená na intervalu použitelnosti (8.3) je náročná na vyčíslení a je nekonvexní.

Příklad 8.2 naproti tomu ukazuje, jak stanovit meze použitelnosti ve smyslu rozsahu deformací zvoleného způsobu zatěžování (zde jednoosé napjatosti) při modelování pryže hyperelastickým materiálovým modelem. Za nezávisle proměnnou jejíž meze je tedy v tomto příkladu poměrné protažení ve směru osy vzorku.

V případě materiálových modelů závislých na čase či historii zatěžování je situace složitější, neboť funkci nezávisle proměnné plní (za předpokladu homogenní deformace) časová závislost deformace. Meze použitelnosti takových modelů

(včetně modelu chemického stárnutí a poškození popisovaného v této práci) se pak nabízí posuzovat následujícími dvěma způsoby:

- Časový průběh deformace považovat za neměnný, např. uvažováním relaxační zkoušky při předepsané hodnotě deformace. Interval použitelnosti je potom přímo časový interval, během kterého leží napětí předpovězená modelem ve zvoleném okolí změřených hodnot.
- Předepsaný časový průběh deformace parametrizovat skalární proměnnou, např. hodnotou deformace při relaxační zkoušce nebo amplitudou cyklů, a interval použitelnosti modelu určit pro tuto proměnnou.

8.3 Výsledek identifikace ve tvaru intervalu

Pro účely numerických simulací je též možné použít více sad parametrů materiálového modelu a výsledky jim odpovídajících simulací interpretovat jako meze skutečně dosahovaných hodnot sledovaných veličin. V případě netriviálních materiálových modelů obecně neplatí, že takto určené meze závislosti napětí na deformaci nezmění pořadí, proto je zde bez důkazu uvedena věta, která obsahuje nutné podmínky pro parametry Ogdenova modelu.

Věta 1:

Uvažují se dvě varianty Ogdenova modelu, σ_{\min} a σ_{\max} , které se liší hodnotami svých parametrů – $[\mu_{\min,1}, \alpha_{\min,1}, \mu_{\min,2}, \alpha_{\min,2}, \dots]$ a $[\mu_{\max,1}, \alpha_{\max,1}, \mu_{\max,2}, \alpha_{\max,2}, \dots]$. Dále je zvolen třetí model, σ , s parametry $[\mu_1, \alpha_1, \mu_2, \alpha_2, \dots]$. Nechť lze parametry těchto tří modelů uspořádat tak, že

$$\mu_{\min,i} \leq \mu_i \leq \mu_{\max,i} \quad \text{a} \quad \alpha_{\min,i} \leq \alpha_i \leq \alpha_{\max,i} \quad \forall i. \quad (8.5)$$

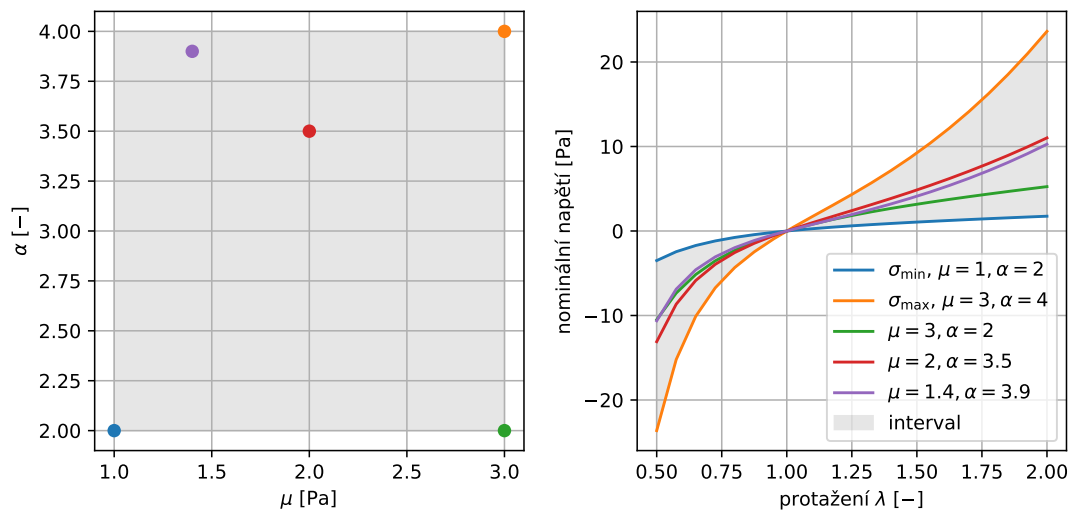
Potom při libovolné přípustné deformaci platí pro hlavní napětí

$$\|\sigma_{\min,j}\| \leq \|\sigma_j\| \leq \|\sigma_{\max,j}\|, \quad j = 1, 2, 3. \quad (8.6)$$

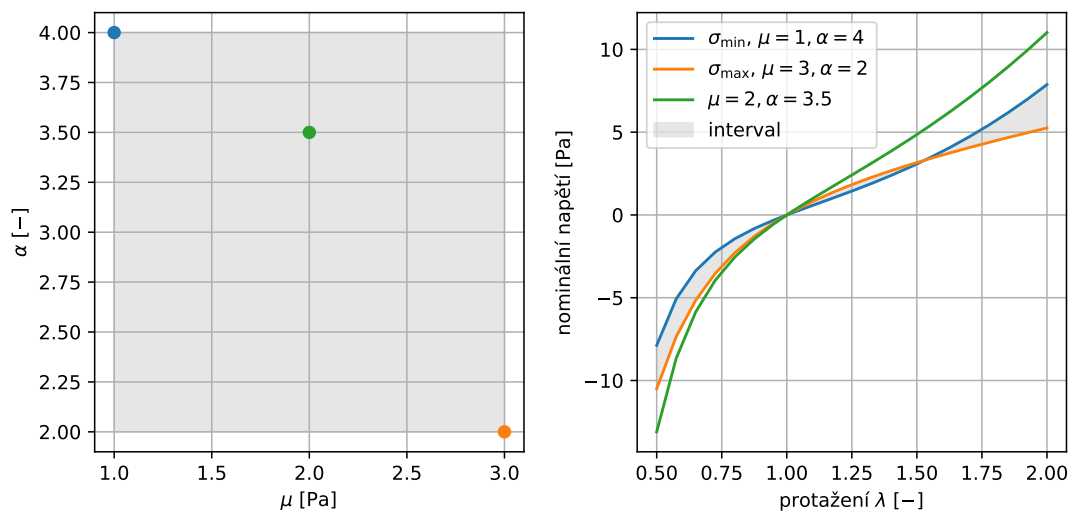
□

Použití věty 1 ilustrují obr. 8.6 a 8.7. Parametry modelu jsou zobrazeny jako body v prostoru parametrů (rovina μ - α – pro názornost byly uvažovány modely s jedním členem rozvoje). Výsledky simulací jsou v tomto případě závislosti nominálního napětí při jednoosé napjatosti na deformaci (protážení). V případě splněných předpokladů věty 1 leží všechny odezvy modelů v množině ohraničené odezvami mezních modelů σ_{\min} a σ_{\max} , tj. pro libovolné protážení $\lambda \in (0, \infty)$ platí

$$\sigma_{\min}(\lambda) \leq \sigma(\lambda) \leq \sigma_{\max}(\lambda). \quad (8.7)$$



Obrázek 8.6. Průběhy nominálního napětí v případě jednoosé napjatosti pro různé hodnoty parametrů Ogdenova modelu – předpoklady věty 1 jsou splněny.



Obrázek 8.7. Průběhy nominálního napětí v případě jednoosé napjatosti pro různé hodnoty parametrů Ogdenova modelu – předpoklady věty 1 nejsou splněny.

Kapitola 9

Závěr

Předkládaná dizertační práce popisuje různá témata související s modelováním mechanického chování pryže a to především taková, která se vážou k úlohám řešeným na Katedře mechaniky Západočeské univerzity v Plzni v době doktorského studia autora. Tyto úlohy byly motivovány spoluprací na průmyslových aplikacích, ale i účastí na vědeckých konferencích a sledováním aktuálního vývoje výzkumu v oblasti konstitutivního modelování pryže a numerických metod.

Značné úsilí bylo věnováno experimentům a měření. Jejich přínos k závěrům této práce se ovšem v době jejího psaní ukázal být převážně nepřímý, a proto jsou v textu zmíněny spíše okrajově, především jako podklad pro sestavení materiálového modelu a motivace numerických simulací. Výroba a testování smykového přípravku Arcan má značný význam pro zkoušení materiálů na KME (pryží, ale i korko-pryžového kompozitu) a pro validaci identifikovaných materiálových modelů. Měření trvalých deformací a stárnutí za zvýšené teploty naproti tomu motivovalo výběr materiálového modelu v této práci a proces identifikace parametrů.

Mezi hlavní výsledky práce patří použití metody asymptotických rozvojų pro řešení kumulace únavového poškození a implementace tohoto postupu do MKP řešení únavy při velkých deformacích. Tento postup je zásadní pro aplikaci ostatních částí práce v praxi, neboť navrhovaný materiálový model obsahuje nelineární pravidlo kumulace poškození a proto je nutné simulace cyklického zatěžování provádět v časové oblasti. Řešení vysokocyklické únavy by bez průměrování v čase vedlo k neúnosně dlouhým výpočetním časům a to i v případě úloh s homogenními deformacemi. Některé softwarové nástroje (*FESafe/Rubber*) pro vyšetřování vysokocyklové únavy elastomerů již podobnou techniku obsahují, konkrétně možnost přepočítat po zvoleném počtu cyklů parametry kumulace poškození se zohledněním přerozdělení napětí. Výhodou zde popsaného přístupu je ovšem jeho obecnost a nezávislost na časovém řešiči.

Dalším důležitým výsledkem je úprava Naumannova-Ihlemannova modelu (*dynamic network model*) tak, aby popisoval pokles tuhosti způsobený kumulací únavového poškození, na rozdíl od původní verze modelu, která zahrnuje pouze změkčení vlivem Mullinsova efektu. Ten je ovšem závislý pouze na maximální dosavadní hodnotě zatížení a je tedy patrný pouze při několika prvních cyklech zatížení, zatímco kumulace únavového poškození probíhá i při hodnotách zatížení menších než je dosavadní maximum. Pro posuzování životnosti strojních součástí má tedy význam spíše tato forma poklesu tuhosti materiálu. Model chemického stárnutí navíc popisuje pokles i nárůst tuhosti vlivem chemických reakcí za přítomnosti kyslíku. Výsledný model lze tedy použít k vyšetřování životnosti součástí se zohledněním různých mechanismů změn mechanických vlastností materiálu, kdy např. pokles tuhosti vlivem poškození je kompenzován nárůstem tuhosti vlivem stárnutí, ovšem např. předpětí klesá také vlivem trvalých deformací způsobených stárnutím.

Za zásadní pak lze považovat část zabývající se identifikací parametrů modelu, a to zejména kap. 7.3, která popisuje obecný přístup k vyšetřování experimentálního programu. Numerické příklady v této části ilustrují použití uvedené metody pomocí dříve popsaného modelu chemického stárnutí a únavového poškození

pryže, přičemž hlavním cílem je vyjasnit vztahy mezi různými aspekty modelu v časové oblasti, především situaci, kdy štepné chemické reakce a poškození vedou shodně k poklesu tuhosti materiálu. Závěry numerických experimentů v této části jsou:

- Na základě relaxační zkoušky nelze identifikovat parametr reformace polymerní sítě k_R .
- Na základě měření trvalé deformace lze identifikovat pouze parametr reformace polymerní sítě k_R .
- Tečení sice umožňuje identifikovat všechny parametry modelu, ale protáhlý tvar hladin cílové funkce vede na korelaci mezi chybami jednotlivých parametrů. Použití kombinace relaxační zkoušky a měření trvalé deformace tento nedostatek odstraňuje.

Formálně shodný postup lze použít pro vyšetření identifikovatelnosti tuhostních parametrů v závislosti na módech deformace použitých při experimentech.

Stanovení mezí použitelnosti zkalibrovaného modelu popisuje kritérium uvedené v kapitole 8. Toto kritérium je zcela obecné co se týče způsobu zatěžování a volby veličiny vzhledem ke které je meze stanovit. Použitelnost modelu lze tedy udávat např. jako rozsah deformací nebo jako časový interval, ve kterém je zaručeno, že odezva modelu (např. napětí) bude ve zvoleném okolí experimentálních hodnot. Výhodou popsaného kritéria oproti samotné hodnotě cílové funkce je, že lépe reflektuje shodu či rozdíly v odezvách modelu a skutečného materiálu. V rámci této práce byla prověřena i možnost použít meze použitelnosti v definici cílové funkce pro kalibraci modelu. Výsledné modely dosahovaly, podle očekávání, mnohem větších intervalů použitelnosti než modely zkalibrované pomocí metody nejmenších čtverců, značnou nevýhodou je ovšem ztráta konvexity cílové funkce.

Důležitou částí práce je odvození vztahů pro různé případy homogenních deformací (tah/tlak, prostý smyk a kombinace tahu a smyku) a citlivostní analýza jednoosé napjatosti. Tyto vztahy nejen umožnily výše uvedenou analýzu cílové funkce, ale jsou velmi užitečné pro zrychlení numerické optimalizace při identifikaci parametrů modelu. Přes jejich praktický význam jde ovšem spíše o aplikaci již známých metod, a proto jsou uvedeny v dodatcích k této práci.

Jako vhodný směr dalšího výzkumu se jeví aplikace zde popsaných postupů na komplexnější materiálové modely, především na jejich tuhostní parametry, jejichž identifikaci se tato práce prakticky nezabývá. Praktická identifikace parametrů a validace za použití reálných experimentů bude kromě provedení potřebných měření vyžadovat také efektivní implementaci numerických simulací a průběžné ověření předpokladů, zejm. homogenity deformací v měřeném objemu vzorků. V případě úspěšné realizace mikroskopických měření je reálné i odvození modelu vlivu poškození na difuzi kyslíku tak, jak byl popsán v kap. 5.4.2.

Literatura

- [1] ISO 1382, *Rubber – Vocabulary*. Dostupné na <https://www.iso.org/standard/60252.html>.
- [2] ABRAHAM, F., T. ALSHUTH a S. JERRAMS. The effect of minimum stress and stress amplitude on the fatigue life of non strain crystallising elastomers. *Materials & Design*. 2005, ročník 26, č. 3, s. 239 - 245. ISSN 0261-3069. Dostupné na DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2004.02.020>.
- [3] AMAR, Micol, Daniele ANDREUCCI a Dario BELLAVEGLIA. The time-periodic unfolding operator and applications to parabolic homogenization. *Rendiconti Lincei - Matematica e Applicazioni*. European Mathematical Society, 11, 2017, ročník 28. ISSN 1120-6330. Dostupné na DOI [10.4171/RLM/781](https://doi.org/10.4171/RLM/781).
- [4] AMERONGEN, G. J. van. Diffusion in Elastomers. *Rubber Chemistry and Technology*. 1964, ročník 37, č. 5, s. 1065-1152. Dostupné na DOI [10.5254/1.3540396](https://doi.org/10.5254/1.3540396).
- [5] ANDRE, N., G. CAILLETAUD a R. PIQUES. Haigh diagram for fatigue crack initiation prediction of natural rubber components. *KGK-Kautschuk und Gummi Kunststoffe*. 1999, ročník 52, č. 2, s. 120-123.
- [6] ANDRIYANA, A., N. SAINTIER a E. VERRON. Configurational Mechanics and Critical Plane Approach: Concept and application to fatigue failure analysis of rubberlike materials. *International Journal of Fatigue*. 2010, ročník 32, s. 1627-1638. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijfatigue.2010.03.004](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2010.03.004).
- [7] AUBRY, Denis a Guillaume PUEL. Two-timescale homogenization method for the modeling of material fatigue. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2010, ročník 10, č. 1, s. 012113. Dostupné na DOI [10.1088/1757-899X/10/1/012113](https://doi.org/10.1088/1757-899X/10/1/012113).
- [8] AURICCHIO, F., L. B. DA VEIGA, T. J. R. HUGHES, A. REALI a G. SANGALLI. Isogeometric collocation methods. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. 2010, ročník 20, č. 11, s. 2075-2107. Dostupné na DOI [10.1142/S0218202510004878](https://doi.org/10.1142/S0218202510004878).
- [9] AVRIL, Stéphane, Marc BONNET, Anne-Sophie BRETTELLE, Michel GRÉDIAC, François HILD, Patrick IENNY, Félix LATOURTE, Didier LEMOSSE, Stéphane PAGANO, Emmanuel PAGNACCO a Fabrice PIERRON. Overview of Identification Methods of Mechanical Parameters Based on Full-field Measurements. *Experimental Mechanics*. Springer US, 2008, ročník 48, č. 4, s. 381-402. ISSN 0014-4851. Dostupné na DOI [10.1007/s11340-008-9148-y](https://doi.org/10.1007/s11340-008-9148-y).
- [10] AYOUB, G., M. NAÏT-ABDELAZIZ, F. ZAÏRI, M. GLOAGUEN a P. CHARRIER. A continuum damage model for the high-cycle fatigue life prediction of styrene-butadiene rubber under multiaxial loading. *International Journal of Solids and Structures*. 2011, ročník 48, č. 18. Dostupné na DOI [10.1016/j.jsolstr.2011.04.003](https://doi.org/10.1016/j.jsolstr.2011.04.003).

- [11] AYOUB, G., M. NAÏT-ABDELAZIZ, F. ZAÏRI, M. GLOAGUEN a P. CHARRIER. A continuum damage model for the high-cycle fatigue life prediction of styrene-butadiene rubber under multiaxial loading. *International Journal of Solids and Structures*. 2011, ročník 48, č. 18. Dostupné na DOI [10.1016/j.jsolstr.2011.04.003](https://doi.org/10.1016/j.jsolstr.2011.04.003).
- [12] AYOUB, G., M. NAÏT-ABDELAZIZ, F. ZAÏRI a J.M. GLOAGUEN. Multiaxial fatigue life prediction of rubber-like materials using the continuum damage mechanics approach. *Procedia Engineering*. 2010, ročník 2, s. 985-993.
- [13] BAMBACH, M., S. HEPPNER, D. STEINMETZ a F. ROTERS. Assessing and ensuring parameter identifiability for a physically-based strain hardening model for twinning-induced plasticity. *Mechanics of Materials*. 2015, ročník 84, č. 0, s. 127 - 139. ISSN 0167-6636. Dostupné na DOI [10.1016/j.mechmat.2015.01.019](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2015.01.019).
- [14] BARRER, R. M., J. A. BARRIE a M. G. ROGERS. Heterogeneous membranes: Diffusion in filled rubber. *Journal of Polymer Science Part A: General Papers*. 1963, ročník 1, č. 8, s. 2565-2586. Dostupné na DOI [10.1002/pol.1.963.100010806](https://doi.org/10.1002/pol.1.963.100010806).
- [15] BATES, Douglas M. a Donald G. WATTS. *Nonlinear Regression Analysis and Its Applications*. John Wiley & Sons, Inc., 1988. ISBN 0-471-81643-4.
- [16] BAUER, David R., John M. BALDWIN a Kevin R. ELLWOOD. Rubber aging in tires. Part 2: Accelerated oven aging tests. *Polymer Degradation and Stability*. 2007, č. 92, s. 110-117.
- [17] BEN HASSINE, M., M. NAÏT-ABDELAZIZ, F. ZAÏRI, X. COLIN, C. TOURCHER a G. MARQUE. Time to failure prediction in rubber components subjected to thermal ageing: A combined approach based upon the intrinsic defect concept and the fracture mechanics. *Mechanics of Materials*. 2014, č. 74, s. 15-24. Dostupné na DOI [10.1016/j.mechmat.2014.07.015](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2014.07.015).
- [18] BERGSTRÖM, J.S. a M.C. BOYCE. Constitutive modeling of the large strain time-dependent behavior of elastomers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1998, ročník 46, č. 5, s. 931-954.
- [19] BHATTACHARYYA, Mainak, Amélie FAU, Udo NACKENHORST, David NÉRON a Pierre LADEVÈZE. A multi-temporal scale model reduction approach for the computation of fatigue damage. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2018, ročník 340, s. 630 - 656. ISSN 0045-7825. Dostupné na DOI [10.1016/j.cma.2018.06.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.06.004).
- [20] BONNET, Marc a Andrei CONSTANTINESCU. Inverse problems in elasticity. *Inverse Problems*. 2005, ročník 21, č. 2, s. R1-R50. Dostupné na DOI [10.1088/0266-5611/21/2/R01](https://doi.org/10.1088/0266-5611/21/2/R01).
- [21] BOUASSE, H. a Z. CARRIERE. Sur les courbes de traction du caoutchouc vulcanisé. *Annales de la faculté des sciences de Toulouse*. 1903, ročník 5, č. 3, s. 257-283.
- [22] BROWN, Roger. *Physical testing of rubber*. Springer Science & Business Media, Inc., 2006. ISBN 0-387-29012-5.
- [23] BRUN, R., P. REICHERT a H.R. KÜNSCH. Practical identifiability analysis of large environmental simulation models. *Water Resources Research*. 2001, ročník 37, č. 4, s. 1015-1030. Dostupné na DOI [10.1029/2000WR900350](https://doi.org/10.1029/2000WR900350).

- [24] CIMRMAN, Robert. SfePy - Write Your Own FE Application. In: Pierre de BUYL a Nelle VAROQUAUX, editoři. *Proceedings of the 6th European Conference on Python in Science (EuroSciPy 2013)*. 2014. s. 65–70. Dostupné na <http://arxiv.org/abs/1404.6391>.
- [25] DARGAZANY, Roozbeh a Mikhail ITSKOV. A network evolution model for the anisotropic Mullins effect in carbon black filled rubbers. *International Journal of Solids and Structures*. 2009, ročník 46, č. 16, s. 2967 - 2977. ISSN 0020-7683. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijsolstr.2009.03.022](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2009.03.022).
- [26] DE LORENZIS, L., J. A. EVANS, T. J. R. HUGHES a A. REALI. Isogeometric collocation: Neumann boundary conditions and contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2015, ročník 284, s. 21-54. Dostupné na DOI [10.1016/j.cma.2014.06.037](https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.06.037).
- [27] DEVULDER, A., D. AUBRY a G. PUEL. Two-time scale fatigue modeling: Application to damage. *Computational Mechanics*. 2010, ročník 45, č. 6, s. 637-646. Dostupné na DOI [10.1007/s00466-010-0476-2](https://doi.org/10.1007/s00466-010-0476-2).
- [28] DIANI, J., M. BRIEU a J.M. VACHERAND. A damage directional constitutive model for Mullins effect with permanent set and induced anisotropy. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 2006, ročník 25, s. 483-496. Dostupné na DOI [10.1016/j.euromechsol.2005.09.011](https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2005.09.011).
- [29] DIANI, Julie, Bruno FAYOLLE a Pierre GILORMINI. A review on the Mullins effect. *Eur. Polym. J.* 2009, č. 45, s. 601-612. Dostupné na DOI [10.1016/j.eurpolymj.2008.11.017](https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2008.11.017).
- [30] DONNER, H., L. KANZENBACH, IHLEMANN, Jörn a Christoph NAUMANN. Efficiency of rubber material modelling and characterisation. In: *Constitutive Models for Rubber X*. 2017. s. 19-29.
- [31] DORFMANN, A. a F.Q. PANCHERI. A constitutive model for the Mullins effect with changes in material symmetry. *International Journal of Non-Linear Mechanics*. 2012, ročník 47, č. 8, s. 874 - 887. ISSN 0020-7462. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijnonlinmec.2012.05.004](https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2012.05.004).
- [32] DORMANN, Carsten F., Jane ELITH, Sven BACHER, Carsten BUCHMANN, Gudrun CARL, Gabriel CARRÉ, Jaime R. García MARQUÉZ, Bernd GRUBER, Bruno LAFOURCADE, Pedro J. LEITÃO, Tamara MÜNKEMÜLLER, Colin MCCLEAN, Patrick E. OSBORNE, Björn REINEKING, Boris SCHRÖDER, Andrew K. SKIDMORE, Damaris ZURELL a Sven LAUTENBACH. *Collinearity: a review of methods to deal with it and a simulation study evaluating their performance*. Dostupné na DOI [10.1111/j.1600-0587.2012.07348.x](https://doi.org/10.1111/j.1600-0587.2012.07348.x).
- [33] DROZDOV, Aleksey D. Physical aging and nonlinear viscoelasticity of amorphous glassy polymers. *Computational Materials Science*. 2001, č. 21, s. 197-213.
- [34] EATON, John W., David BATEMAN, Søren HAUBERG a Rik WEHBRING. *GNU Octave version 4.2.1 manual: a high-level interactive language for numerical computations*. Dostupné na <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v4.2.1/>.
- [35] EHLERS, Wolfgang a Joachim BLUHM. *Porous media: theory, experiments and numerical applications*. Springer Science & Business Media, 2013.

- [36] GENT, Alan N. *Engineering with Rubber*. 2 vyd. Hanser, 2001.
- [37] GEUZAINÉ, Christophe a Jean-Francois REMACLE. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2009, ročník 79, č. 11, s. 1309-1331.
- [38] GOLDENBERG, N., M. ARCAN a E. NICOLAU. On the Most Suitable Specimen Shape for Testing Shear Strength of Plastics. *ASTM STP*. 1958, ročník 247, s. 115-121.
- [39] GOVINDJEE, S. a J. SIMO. A micro-mechanically based continuum damage model for carbon black-filled rubbers incorporating Mullins' effect. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1991, ročník 39, č. 1, s. 87-112. Dostupné na DOI [10.1016/0022-5096\(91\)90032-J](https://doi.org/10.1016/0022-5096(91)90032-J).
- [40] GOVINDJEE, S. a J. SIMO. Transition from micro-mechanics to computationally efficient phenomenology: Carbon black filled rubbers incorporating Mullins' effect. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1992, ročník 40, č. 1, s. 213-233. Dostupné na DOI [10.1016/0022-5096\(92\)90324-U](https://doi.org/10.1016/0022-5096(92)90324-U).
- [41] GOVINDJEE, S. a J.C. SIMO. Mullins effect and the strain amplitude dependence of the storage modulus. *International Journal of Solids and Structures*. 1992, ročník 29, č. 14-15, s. 1737-1751. Dostupné na DOI [10.1016/0020-7683\(92\)90167-R](https://doi.org/10.1016/0020-7683(92)90167-R).
- [42] GRACIA, Leticia A., Estefanía PEÑA, Jose M. ROYO, Jose L. PELEGAY a Begoña CALVO. A comparison between pseudo-elastic and damage models for modelling the Mullins effect in industrial rubber components. *Mechanics Research Communications*. 2009, ročník 36, č. 7, s. 769 - 776. ISSN 0093-6413. Dostupné na DOI [10.1016/j.mechrescom.2009.05.010](https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2009.05.010).
- [43] GRÉDIAC, Michel a Fabrice PIERRON. Applying the Virtual Fields Method to the identification of elasto-plastic constitutive parameters. *International Journal of Plasticity*. 2006, ročník 22, č. 4, s. 602 - 627. ISSN 0749-6419. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijplas.2005.04.007](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2005.04.007).
- [44] GUO, Z. a L.J. SLUYS. Computational modelling of the stress-softening phenomenon of rubber-like materials under cyclic loading. *European Journal of Mechanics, A/Solids*. 2006, ročník 25, č. 6, s. 877-896. Dostupné na DOI [10.1016/j.euromechsol.2006.05.011](https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2006.05.011).
- [45] GUO, Z. a L.J. SLUYS. Constitutive modelling of hyperelastic rubber-like materials. *Heron*. 2008, ročník 53, č. 3, s. 109-132.
- [46] HAOUALA, S. a I. DOGHRI. Modeling and algorithms for two-scale time homogenization of viscoelastic-viscoplastic solids under large numbers of cycles. *International Journal of Plasticity*. 2015, ročník 70, č. 0, s. 98 - 125. ISSN 0749-6419. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijplas.2015.03.005](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.03.005).
- [47] HARBOUR, Ryan J., Ali FATEMI a Will V. MARS. Fatigue life analysis and predictions for NR and SBR under variable amplitude and multiaxial loading conditions. *International Journal of Fatigue*. 2008, ročník 30, č. 7, s. 1231-1247. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijfatigue.2007.08.015](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2007.08.015).
- [48] HARBOUR, Ryan J., Ali FATEMI a Will V. MARS. Fatigue crack orientation in NR and SBR under variable amplitude and multiaxial loading conditions.

- Journal of Materials Science*. 2008, ročník 43, č. 6, s. 1783-1794. ISSN 1573-4803. Dostupné na DOI [10.1007/s10853-007-2398-8](https://doi.org/10.1007/s10853-007-2398-8).
- [49] HEATH, Michael T. *Scientific computing: An introductory survey*. 2 vyd. McGraw-Hill, 2002.
- [50] HERZIG, Alexander, Michael JOHLITZ a Alexander LION. An experimental set-up to analyse the oxygen consumption of elastomers during ageing by using a differential oxygen analyser. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2015, ročník 27, č. 6, s. 1009-1017. ISSN 0935-1175. Dostupné na DOI [10.1007/s00161-014-0396-z](https://doi.org/10.1007/s00161-014-0396-z).
- [51] HOLT, W.L. Behavior of Rubber under Repeated Stress. *Industrial and Engineering Chemistry*. 1931, ročník 23, č. 12.
- [52] HUANG, Deng, Bart J. LACOUNT, Jose M. CASTRO a Frederick IGNATZ-HOOVER. Development of a service-simulating, accelerated aging test method for exterior tire rubber compounds I. Cyclic aging. *Polymer Degradation and Stability*. 2001, č. 74, s. 353-362.
- [53] HUGHES, T. J. R., J. A. COTTRELL a Y. BAZILEVS. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2005, ročník 194, č. 39-41, s. 4135-4195. Dostupné na DOI [10.1016/j.cma.2004.10.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.10.008).
- [54] HUNTER, J. D. Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing In Science & Engineering*. IEEE COMPUTER SOC, 2007, ročník 9, č. 3, s. 90-95. Dostupné na DOI [10.1109/MCSE.2007.55](https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.55).
- [55] JOHLITZ, Michael, Nico DIERCKS a Alexander LION. Thermo-oxidative ageing of elastomers: A modelling approach based on a finite strain theory. *International Journal of Plasticity*. 2013, ročník 63, s. 138-151. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijplas.2014.01.012](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2014.01.012).
- [56] JOHLITZ, Michael a Alexander LION. Chemo-thermomechanical ageing of elastomers based on multiphase continuum mechanics. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2013, ročník 25, č. 5, s. 605-624. ISSN 1432-0959. Dostupné na DOI [10.1007/s00161-012-0255-8](https://doi.org/10.1007/s00161-012-0255-8).
- [57] JONES, Eric, Travis OLIPHANT, Pearu PETERSON a OTHERS. *SciPy: Open source scientific tools for Python*. Dostupné na <http://www.scipy.org/>.
- [58] KLEIBER, Michal. *Parameter Sensitivity in Nonlinear Mechanics: Theory and Finite Element Computations*. John Wiley & Sons Ltd., 1997. ISBN 0-471-96854-4.
- [59] KNAUSS, W.G. a W. ZHU. Nonlinearly Viscoelastic Behavior of Polycarbonate. I. Response under Pure Shear. *Mechanics of Time-Dependent Materials*. 2002, č. 6, s. 231-269.
- [60] KOPAČKA, Ján, Dušan GABRIEL, Radek KOLMAN a Jiří PLEŠEK. Iso-geometric contact analysis: a study of an explicit dynamic contact algorithm. In: *Výpočty konstrukcí metodou konečných prvků*. Západočeská univerzita v Plzni, 2014. ISBN 978-80-261-0445-2.
- [61] KRUSE, R., N. NGUYEN-THANH, L. DE LORENZIS a T. J. R. HUGHES. Isogeometric collocation for large deformation elasticity and frictional contact

- problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2015, ročník 296, s. 73-112.
- [62] LAWSON, Charles L. a Richard J. HANSON. *Solving Least Squares Problems*. SIAM, 1987.
- [63] LE CAM, Jean-Benoît, Bertrand HUNEAU a Erwan VERRON. Fatigue damage in carbon black filled natural rubber under uni- and multiaxial loading conditions. *International Journal of Fatigue*. 2013, ročník 52, s. 82-94. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijfatigue.2013.02.022](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2013.02.022).
- [64] LE GAC, P.Y., V. LE SAUX, M. PARIS a Y. MARCO. Ageing mechanism and mechanical degradation behaviour of polychloroprene rubber in a marine environment: Comparison of accelerated ageing and long term exposure. *Polymer Degradation and Stability*. 2012, č. 97, s. 288-296.
- [65] LEMAITRE, J. a J. L. CHABOCHE. *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press, 1994.
- [66] LION, Alexander a Michael JOHLITZ. On the representation of chemical ageing of rubber in continuum mechanics. *International Journal of Solids and Structures*. 2012, ročník 49, s. 1227-1240. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijsolstr.2012.01.014](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2012.01.014).
- [67] LOGG, A., K.-A. MARDAL, G. N. WELLS a et AL. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012. Dostupné na DOI [10.1007/978-3-642-23099-8](https://doi.org/10.1007/978-3-642-23099-8).
- [68] MACHADO, G., G. CHAGNON a D FAVIER. Theory and identification of a constitutive model of induced anisotropy by the Mullins effect. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2014, ročník 63, s. 29-39.
- [69] MARS, W. V. a A. FATEMI. Factors that Affect the Fatigue Life of Rubber: A Literature Survey. *Rubber Chemistry and Technology*. 2004, ročník 77, č. 3, s. 391-412. Dostupné na DOI [10.5254/1.3547831](https://doi.org/10.5254/1.3547831).
- [70] MARS, W. V. a A. FATEMI. A novel specimen for investigating the mechanical behavior of elastomers under multiaxial loading conditions. *Experimental Mechanics*. 2004, ročník 44, č. 2, s. 136-146. ISSN 1741-2765. Dostupné na DOI [10.1007/BF02428173](https://doi.org/10.1007/BF02428173).
- [71] MARS, William V. a Ali FATEMI. Multiaxial fatigue of rubber: Part I: equivalence criteria and theoretical aspects. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*. Blackwell Science Ltd, 2005, ročník 28, č. 6, s. 515-522. ISSN 1460-2695. Dostupné na DOI [10.1111/j.1460-2695.2005.00891.x](https://doi.org/10.1111/j.1460-2695.2005.00891.x).
- [72] MERCKEL, Yannick, Julie DIANI, Mathias BRIEU a Julien CAILLARD. Constitutive modeling of the anisotropic behavior of Mullins softened filled rubbers. *Mechanics of Materials*. 2013, ročník 57, s. 30 - 41. ISSN 0167-6636. Dostupné na DOI [10.1016/j.mechmat.2012.10.010](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2012.10.010).
- [73] MINER, M.A. Cumulative damage in fatigue. *Journal of Applied Mechanics*. 1945, ročník 67, s. 159-164.
- [74] MITRA, Susanta, Afshin GHANBARI-SIAHKALI a Kristoffer ALMDAL. A novel method for monitoring chemical degradation of crosslinked rubber by stress relaxation under tension. *Polymer Degradation and Stability*. 2006, ročník 91, č. 10, s. 2520 - 2526. ISSN 0141-3910. Dostupné na DOI [10.1016/j.polydegradstab.2006.03.002](https://doi.org/10.1016/j.polydegradstab.2006.03.002).

- [75] MOUSSAWI, Ali, Gilles LUBINEAU, Eric FLORENTIN a Benoit BLAYSAT. The constitutive compatibility method for identification of material parameters based on full-field measurements . *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* . 2013, ročník 265, s. 1-14. ISSN 0045-7825. Dostupné na DOI [10.1016/j.cma.2013.06.003](https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.06.003).
- [76] MULLINS, L. Effect of stretching on the properties of rubber. *Journal of Rubber Research*. 1947, ročník 16, č. 12, s. 275-289.
- [77] MULLINS, L. Softening of Rubber by Deformation. *Rubber Chemistry and Technology*. 1969, ročník 42, č. 1, s. 339-362. Dostupné na DOI [10.5254/1.3539210](https://doi.org/10.5254/1.3539210).
- [78] MULLINS, L. a N.R. TOBIN. Stress softening in rubber vulcanizates. Part I. Use of a strain amplification factor to describe the elastic behavior of filler-reinforced vulcanized rubber. . *Journal of Applied Polymer Science*. 1965, ročník 9, č. 9, s. 2993-3009. Dostupné na DOI [10.1002/app.1965.070090906](https://doi.org/10.1002/app.1965.070090906).
- [79] MURAKAMI, Sumio. *Continuum Damage Mechanics*. Springer, 2012. ISBN 978-94-007-2665-9.
- [80] NAUMAN, Christoph. *Chemisch-mechanisch gekoppelte Modellierung und Simulation oxidativer Alterungsvorgänge in Gummibauteilen*. Technische Universität Chemnitz, 2016. Disertační práce.
- [81] NAUMANN, Christoph a Jörn IHLEMANN. A dynamic network model to simulate chemical aging processes in elastomers. In: *Constitutive Models for Rubber IX*. 2015. s. 39-45.
- [82] OGDEN, R. W. *Large Deformation Isotropic Elasticity - On the Correlation of Theory and Experiment for Incompressible Rubberlike Solids*. Dostupné na DOI [10.1098/rspa.1972.0026](https://doi.org/10.1098/rspa.1972.0026).
- [83] OGDEN, R. W. a D. G. ROXBURGH. *A pseudo-elastic model for the Mullins effect in filled rubber*. Dostupné na DOI [10.1098/rspa.1999.0431](https://doi.org/10.1098/rspa.1999.0431).
- [84] QI, H.J. a M.C. BOYCE. Constitutive model for stretch-induced softening of the stress-stretch behavior of elastomeric materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2004, ročník 52, č. 10, s. 2187-2205. Dostupné na DOI [10.1016/j.jmps.2004.04.008](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2004.04.008).
- [85] RAGNI, Laura, Enrico TUBALDI, Andrea DALL'ASTA, Hamid AHMADI a Alan MUHR. Biaxial shear behaviour of HDNR with Mullins effect and deformation-induced anisotropy. *Engineering Structures*. 2018, ročník 154, s. 78-92. ISSN 0141-0296. Dostupné na DOI [10.1016/j.engstruct.2017.10.060](https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2017.10.060).
- [86] RAYLEIGH, Lord. On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium. *Philosophical Magazine*. 1892, ročník 5, č. 34, s. 481-502. Dostupné na <https://archive.org/details/londonedinburgh53418921on/page/480>.
- [87] REBOUAH, M., G. MACHADO, G. CHAGNON a D. FAVIER. Anisotropic Mullins stress softening of a deformed silicone holey plate . *Mechanics Research Communications* . 2013, ročník 49, s. 36-43. ISSN 0093-6413. Dostupné na DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechrescom.2013.02.002>.

- [88] ROHAN, Eduard a Robert CIMRMAN. Sensitivity analysis and material identification for activated smooth muscle. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*. 2002, ročník 9, č. 4, s. 519-541.
- [89] SAINTIER, N., G. CAILLETAUD a R. PIQUES. Crack initiation and propagation under multiaxial fatigue in a natural rubber. *International Journal of Fatigue*. 2006, ročník 28, s. 61-72. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijfatigue.2005.03.006](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2005.03.006).
- [90] SCHWARTZ, Gustavo A., Silvina CERVENY, Ángel J. MARZOCCA, Michel GERSPACHER a Leszek NIKIEL. Thermal aging of carbon black filled rubber compounds. I. Experimental evidence for bridging flocculation. *Polymer*. 2003, č. 44, s. 7229-7240. Dostupné na DOI [10.1016/j.polymer.2003.09.007](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2003.09.007).
- [91] STRUIK, L.C.E. *Physical Ageing in Amorphous Polymers and Other Materials*. TU Delft, 1978. Disertační práce.
- [92] SUN, C., A. GENT a P. MARTENY. effect of Fatigue Step Loading Sequence on Residual Strength. *Tire Science and Technology*. 2000, ročník 28, č. 3, s. 196-208. Dostupné na DOI [10.2346/1.2136000](https://doi.org/10.2346/1.2136000).
- [93] TOBOLSKY, A.V., I.B. PRETTYMAN a J.H. DILLON. Stress relaxation of natural and synthetic rubber stocks. *Journal of Applied Physics*. 1944, ročník 15, č. 4, s. 380-395. Dostupné na DOI [10.1063/1.1707442](https://doi.org/10.1063/1.1707442).
- [94] WARLEY, Russell L. a James R. HALLADAY. Effect of ambient temperature and cure state on the age stiffening of a cured NR/BR blend. *Polymer Testing*. 2005, ročník 24, s. 678-683. Dostupné na DOI [10.1016/j.polymertesting.2005.06.004](https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2005.06.004).
- [95] WEI, Y.T, L NASDALA, H ROTHERT a Z XIE. Experimental investigations on the dynamic mechanical properties of aged rubbers. *Polymer Testing*. 2004, ročník 23, č. 4, s. 447 - 453. ISSN 0142-9418. Dostupné na DOI [10.1016/j.polymertesting.2003.09.006](https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2003.09.006).
- [96] WULF, H. a Jörn IHLEMANN. Statistical investigation of self-organization processes in filled rubber. In: *Constitutive Models for Rubber X*. 2017. s. 601-607.
- [97] WÄCHTER, Andreas a Lorenz T. BIEGLER. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming*. Mar, 2006, ročník 106, č. 1, s. 25-57. ISSN 1436-4646. Dostupné na DOI [10.1007/s10107-004-0559-y](https://doi.org/10.1007/s10107-004-0559-y).
- [98] ZINE, A., N. BENSEDDIQ a M. NAÏT-ABDELAZIZ. Rubber fatigue life under multiaxial loading: Numerical and experimental investigations. *International Journal of Fatigue*. 2011, ročník 33, č. 10, s. 1360 - 1368. ISSN 0142-1123. Dostupné na DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2011.05.005>.
- [99] ZUZOVSKY, M. a H. BRENNER. Effective conductivities of composite materials composed of cubic arrangements of spherical particles embedded in an isotropic matrix. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*. Nov, 1977, ročník 28, č. 6, s. 979-992. ISSN 1420-9039. Dostupné na DOI [10.1007/BF01601666](https://doi.org/10.1007/BF01601666).

Přehled vybraných publikací autora

Články v impaktovaných časopisech

- [v1] HECZKO, J., KOTTNER, R. Modeling of material damage using finite elements and time homogenization in case of finite strain. *Applied Mathematics and Computation*. 2018, roč. 319, č. Feb 15 2018, s. 264-273. ISSN 0096-3003. Dostupné na DOI [10.1016/j.amc.2017.03.014](https://doi.org/10.1016/j.amc.2017.03.014)
- [v2] VONDŘEJC, J., ROHAN, E., HECZKO, J. Shape optimization of phononic band gap structures using the homogenization approach. *International Journal of Solids and Structures*. 2017, roč. 113-114, č. 15 May 2017, s. 147-168. ISSN: 0020-7683. Dostupné na DOI [10.1016/j.ijsolstr.2017.01.038](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.01.038)
- [v3] KOTTNER, R., KOCÁB, J., HECZKO, J., KRYSTEK, J. Investigation of the mechanical properties of a cork/rubber composite. *Materiali in Tehnologije*. 2016, roč. 50, č. 4, s. 579-583. ISSN: 1580-2949. Dostupné na DOI [10.17222/mit.2015.172](https://doi.org/10.17222/mit.2015.172)
- [v4] HECZKO, J., KOTTNER, R., KROUPA, T. Identification of parameters of a nonlinear material model considering the effects of viscoelasticity and damage. *Computers, Materials and Continua*. 2013, roč. 3, č. 3, s. 257-273. ISSN 1546-2218. Dostupné na DOI [10.3970/cmcc.2013.033.257](https://doi.org/10.3970/cmcc.2013.033.257)

Články v recenzovaných časopisech

- [v5] KOTTNER, R., HECZKO, J., KRYSTEK, J. Validation of identified material parameters of rubber using an Arcan shear test. *Materials Today: Proceedings*. 2019, roč. 12, č. 2, s. 404-410. ISSN: 2214-7853. Dostupné na DOI [10.1016/j.matpr.2019.03.142](https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.03.142)
- [v6] HECZKO, J., KOTTNER, R., FUKALA, L. Investigation of long-term mechanical response of rubber. *Applied Mechanics and Materials*. 2014, č. 486, s. 42-47. ISSN 1660-9336. Dostupné na DOI [10.4028/www.scientific.net/AMM.486.42](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.486.42)

Konferenční příspěvky

Konference indexované v databázích Scopus nebo Web of Science

- [v7] KOTTNER, R., HECZKO, J., KRYSTEK, J. Validation of identified material parameters of rubber using an arcan shear test. In: *35th Danubia-Adria Symposium on Advances in Experimental Mechanics - Extended abstracts*. Bucurest: The Romanian Association for Stress Analysis and Materials Testing – ARTENS, 2018, s. 79-80. ISBN: 978-606-23-0874-2.

- [v8] HECZKO, J., KOTTNER, R. Finite element implementation of a constitutive model of rubber ageing. In: *Constitutive Models for Rubber X*. Leiden: CRC Press, 2017, s. 159-164. ISBN: 978-1-138-03001-5.
- [v9] KOTTNER, R., KOCÁB, J., KOCHOVÁ, P., HECZKO, J. Tensile and shear tests of a cork/rubber composite. In: *EAN 2017 - 55th Conference on Experimental Stress Analysis 2017*. Košice: Technical University of Košice, 2017, s. 273-279. ISBN: 978-80-553-3167-6.
- [v10] HECZKO, J., KOTTNER, R. Modelling of changes in mechanical properties of rubber under cyclic loading. In: *Constitutive Models for Rubber IX - Proceedings of the 9th European Conference on Constitutive Models for Rubbers*. Leiden: CRC Press, 2015, s. 411-415. ISBN: 978-1-138-02873-9.
- [v11] ROHAN, E., VONDŘEJC, J., HECZKO, J. Shape optimization for homogenized phononic materials and band gap structures. In: *Engineering Optimization IV - Proceedings of the 4th International Conference on Engineering Optimization*. London: Taylor&Francis, 2014, s. 347-352. ISBN: 978-1-138-02725-1.
- [v12] HECZKO, J., DIMITROVOVÁ, Z., RODRIGUES, H. C. Optimization of a material with a negative stiffness provided by an inherent bistable element. In: *Engineering Optimization IV - Proceedings of the 4th International Conference on Engineering Optimization*. London: Taylor&Francis, 2014, s. 439-444. ISBN: 978-1-138-02725-1.

Ostatní konference

- [v13] HECZKO, J., KOTTNER, R. Stanovení mezí použitelnosti identifikovaných parametrů materiálového modelu pryže. In: *SVK FAV 2019 - magisterské a doktorské studijní programy, sborník rozšířených abstraktů*. Plzeň: ZČU v Plzni, 2019, s. 11-12. ISBN: 978-80-261-0867-2. Dostupné na http://svk.fav.zcu.cz/download/sbornik_svk_2019.pdf.
- [v14] HECZKO, J., KOTTNER, R. Identifikace parametrů při modelování stárnutí a poškození pryže. In: *SVK FAV 2018 - magisterské a doktorské studijní programy, sborník rozšířených abstraktů*. Plzeň: ZČU v Plzni, 2018, s. 13-14. ISBN: 978-80-261-0867-2. Dostupné na http://svk.fav.zcu.cz/download/sbornik_svk_2018.pdf.
- [v15] HECZKO, J., KOTTNER, R. Modelling of ageing and fatigue under large strains. In: *Computational Mechanics - Extended Abstracts*. Plzeň: Západočeská univerzita v Plzni, Univerzitní 8, 306 14 Plzeň, 2017. s. 31-32. ISBN: 978-80-261-0748-4.
- [v16] HECZKO, J. Softwarová implementace optického extenzometru. In: *Studentská vědecká konference 2017 - magisterské a doktorské studijní programy, sborník rozšířených abstraktů*. Plzeň: ZČU v Plzni, 2017. s. 17-18. ISBN: 978-80-261-0706-4. Dostupné na http://svk.fav.zcu.cz/download/sbornik_svk_2017.pdf.
- [v17] DIMITROVOVÁ, Z., HECZKO, J., LOBOVSKÝ, L., KRYSTEK, J., RODRIGUES, H.C. Structural Optimization and Material Fitting of a Material with Inherent Bistable Elements. In: *EngOpt 2016 - 5th International Conference on Engineering Optimization*. Rio de Janeiro: E-papers

- Serviços Editoriais Ltda, 2016. s. 1-9. ISBN: 978-85-7650-522-8. Dostupné na <http://engopt.org/downloads/ProceedingsEngOpt2016.pdf>.
- [v18] KOTTNER, R., KOCÁB, J., HECZKO, J., KRYSTEK, J. Investigation of mechanical properties of cork/rubber composite. In: *23rd International conference on materials and technology, program and book of abstracts*. Portorož: Institute of Metals and Technology, 2015, s. 108.
- [v19] HECZKO, J., KOTTNER, R. Modelling fatigue damage using finite elements and time homogenization. In: *31st conference with international participation Computational Mechanics 2015 - Extended Abstracts*. Západočeská univerzita v Plzni, 2015, s. 31-32. ISBN: 978-80-261-0568-8.
- [v20] HECZKO, J. Použití metody homogenizace pro výpočet únavového poškození pryže. In: *SVK FAV 2015 - magisterské a doktorské studijní programy, sborník rozšířených abstraktů*. Plzeň: ZČU v Plzni, 2018, s. 17-18. ISBN: 978-80-261-0867-2. Dostupné na http://svk.fav.zcu.cz/download/sbornik_svk_2015.pdf.
- [v21] HECZKO, J., DIMITROVOVÁ, Z. MKP model bistabilní rovinné struktury. In: *Výpočty konstrukcí metodou konečných prvků*. Západočeská univerzita v Plzni, 2014, s. 8-13.
- [v22] KOTTNER, R., HECZKO, J., KRYSTEK, J., FUKALA, L. Mechanical properties of sprung wheel rubber segments and selecting of suitable model to describe their behaviour. In: *29th conference with international participation Computational Mechanics 2013 - Extended Abstracts*. Západočeská univerzita v Plzni, 2013, s. 65-66. ISBN: 978-80-261-0282-3.
- [v23] HECZKO, J., DIMITROVOVÁ, Z., RODRIGUES, H.C. Composite material with negative stiffness inclusion for vibration damping: The effect of a nonlinear bistable element. In: *11th International Conference on Vibration Problems (ICOVP-2013)*. Lisabon: APMTAC – Associação Portuguesa de Mecânica Teórica, Aplicada e Computacional, 2013, s. 271. Dostupné na http://icoev.org/proceedings2013/580_paper0.pdf.

Výzkumné zprávy

- [v24] KOTTNER, R., KRYSTEK, J., HECZKO, J. Identifikace parametrů Mooney-Rivlinova modelu pryže tvrdostí 65ShA a 75ShA. Výzkumná zpráva č. NTIS-VP3-00005/2018. Západočeská univerzita v Plzni, 2018.
- [v25] KOTTNER, R., KRYSTEK, J., HECZKO, J. Identifikace parametrů Mooney-Rivlinova modelu pryže EPDM 55ShA. Výzkumná zpráva č. NTIS-VP3-0010/2017. Západočeská univerzita v Plzni, 2017.
- [v26] KŘEN, J., LOBOVSKÝ, L., SALÁŠEK, M., WEISOVÁ, D., JANSOVÁ, M., KRYSTEK, J., MANDYS, T., HECZKO, J., ZEMČÍK, R., HARTLOVÁ, J. Vytvoření experimentálních modelů a vyhodnocení experimentálních měření v oblasti pánevního kruhu. Výzkumná zpráva. Univerzita Karlova v Praze, 2014.
- [v27] HECZKO, J., KOTTNER, R., KRYSTEK, J. Závěrečná zpráva smluvního výzkumu identifikace parametrů Mooneyho-Rivlinova hyperelastického modelu pryže 51 115. Výzkumná zpráva. Západočeská univerzita v Plzni, 2014.

[v28] HECZKO, J., KOTTNER, R., KRYSTEK, J. Řešení 1. etapy, nepoužitý segment, směs 42809, 20 °C. Západočeská univerzita v Plzni, 2013.

Užitný vzor

[v29] HECZKO, J., KOTTNER, R. Přípravek pro měření objemové stlačitelnosti materiálu. Užitný vzor, č. 25107. Praha: Úřad průmyslového vlastnictví, 2013. Dostupné na <https://isdv.upv.cz/doc/FullFiles/UtilityModels/FullDocuments/FDUM0025/uv025107.pdf>.

Ostatní

[v30] HECZKO, J., SRBOVÁ, H. Únava pryže. Západočeská univerzita v Plzni, 2015. Teoretický učební text.

Příloha A

Řešení úloh s homogenní deformací

Přestože je možné numericky implementovat vztahy pro homogenní deformace v jejich původním obecném tvaru (viz kap. 5), jejich zjednodušení je vhodné pro řešení úloh s předepsaným nominálním napětím a pro citlivostní analýzu.

Předpokládá se nestlačitelný materiál a změny objemu vlivem stárnutí se neuvažují. Dále se předpokládá neo-hookeovský tvar hustoty deformační energie (5.5). Soustava parciálních diferenciálních rovnic v okrajové úloze 5.1 přejde díky předpokladu homogenní deformace soustavu obyčejných diferenciálních rovnic.

A.1 Jednoosá napjatost

Protážení ve směru působící síly λ je považováno za známou funkci času t , stejně jako teplota T a bezrozměrná koncentrace kyslíku ξ_{O_2} . Deformační gradient je ve vhodné zvolené kartézské souřadnicové soustavě reprezentován maticí

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

pravý Cauchyův-Greenův deformační tenzor a jeho inverze

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\lambda} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Požadavek jednoosého napětí vede k následujícímu odvození hodnoty hydrostatického tlaku p . Skutečné napětí se spočte jako

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T = \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \mathbf{F} \operatorname{dev} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}^T - p \quad (\text{A.3})$$

Rozvoj trvalé deformace se řídí vztahy

$$\begin{aligned} \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{Dt} &= \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda^{-2} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}), \\ \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{Dt} &= \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{33}}{Dt} = \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

přičemž mimodiagonální složky jsou nulové. Deviator ve vztahu (A.3) tedy vyjde

$$\begin{aligned} \operatorname{dev} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] &= \mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] = \\ &= \frac{1}{3} ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1}) \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Dosazením vyjdou vztahy pro hydrostatický tlak a osovou složku napětí

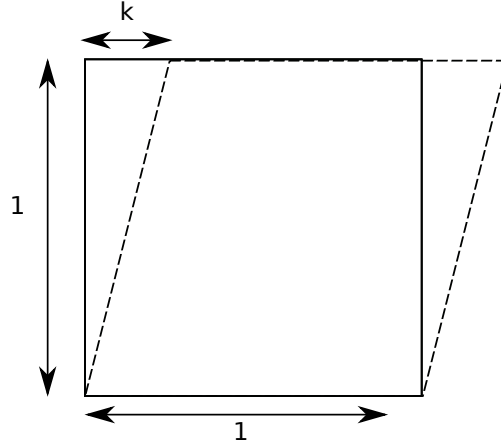
$$p = \frac{2}{3} \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (D - 1) \left(-(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} \right), \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{4}{3} \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (D - 1) \left(-(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} \right) - p = \\ &= \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (D - 1) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Evoluční vztah pro poškození vyjde

$$\dot{D} = \left(A C_{10} \mu \nu \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{\lambda} - 3 \right) \right)^a. \quad (\text{A.8})$$

A.2 Prostý smyk



Obrázek A.1. Vzorek tvaru hranolu zatěžovaný prostým smykem.

Situace je znázorněna na obr. A.1. Deformace jako funkce času je dána parametrem $k = k(t)$ tak, že deformační gradient je ve vhodně zvolené kartézské souřadnicové soustavě reprezentován maticí

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & k & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

pravý Cauchyův-Greenův deformační tenzor a jeho inverze

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & k & 0 \\ k & 1 + k^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 + k^2 & -k & 0 \\ -k & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Nekonstantní složky inverze trvalé deformace jsou v tomto případě popsány evolučními vztahy

$$\begin{aligned} \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{12}}{Dt} &= \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{21}}{Dt} = \frac{\dot{k}}{\mu} (-k - (\mathbf{C}_1^{-1})_{12}), \\ \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{Dt} &= \frac{\dot{k}}{\mu} (1 + k^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}), \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

deviátor ve vztahu pro napětí (A.3) vyjde

$$\begin{aligned}
\operatorname{dev} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] &= \mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] = \\
&= \frac{1}{3} \left(k^2 \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} + k (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} + \right. \\
&\quad \left. + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) + \\
&\quad + \begin{bmatrix} 0 & k + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} & 0 \\ k + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{A.12}$$

a složky skutečného napětí

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma} &= \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \left(\frac{1}{3} (k^2 + 2k (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} - 1) \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \right. \\
&\quad \left. + \begin{bmatrix} 0 & k + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} & 0 \\ k + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right) - p \mathbf{1}.
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Předpokládá se stav rovinné napjatosti a hodnota hydrostatického tlaku se tedy spočte z podmínky $\sigma_{33} \equiv 0$ jako

$$p = -\frac{2}{3} \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) (k^2 + 2k (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} - 1). \tag{A.14}$$

Evoluční vztah pro poškození je po dosazení

$$\dot{D} = (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2k (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} + k^2 - 1))^a. \tag{A.15}$$

Pro porovnání s experimenty je ještě nutné vyjádřit hodnotu nominálního napětí $P_{12} = \frac{F}{A_0}$, kde F je tahová síla ve směru posuvu podstavy vzorku Γ_F a A_0 je počáteční plocha podstavy Γ_F . Bez újmy na obecnosti lze předpokládat vzorek tvaru krychle o straně 1 m. Plocha podstavy je tedy $A_0 = 1 \text{ m}^2$ a její normála je vzhledem k volbě souřadnicového systému $\vec{n} = [0, 1, 0]^T$. Síla se potom spočte jako

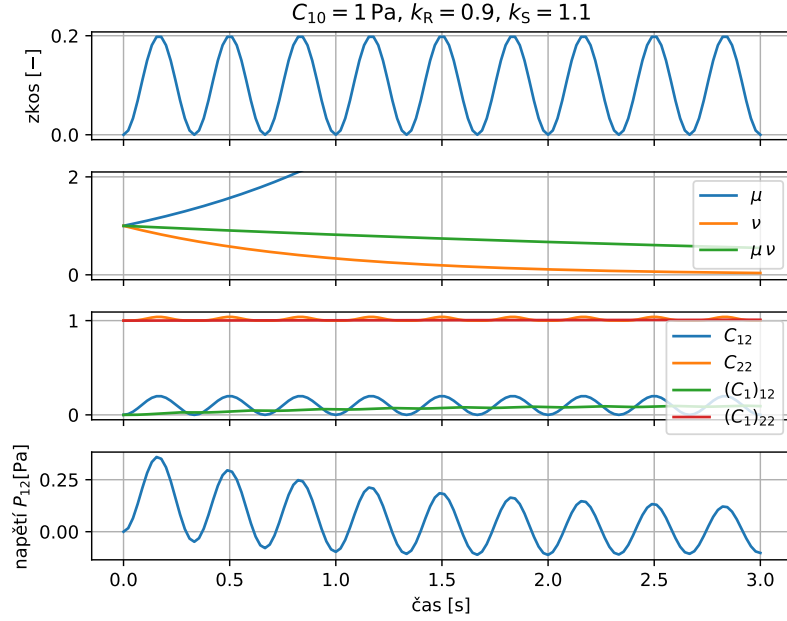
$$\vec{F} = \int_{\Gamma_F} \vec{t} \, dS = \int_{\Gamma_F} \boldsymbol{\sigma} \vec{n} \, dS = \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \begin{bmatrix} k + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{A.16}$$

Příklad A.1: Prostý smyk

Jednotková krychle je cyklicky zatěžována prostým smykem. Zkos k je předepsán jako

$$k(t) = k_0 \sin^2(f \pi t). \tag{A.17}$$

Koncentrace kyslíku ξ_{O_2} i teplota jsou uvažovány konstantní v čase. Výsledné průběhy nominálního napětí a vnitřních proměnných jsou na obr. A.2. ■



Obrázek A.2. Příklad A.1. Průběhy zkosu, vnitřních proměnných a nominálního napětí.

A.3 Kombinace tahu/tlaku a smyku

Předpokládá se deformační gradient ve tvaru

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda^{-1/2} & k\lambda & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^{-1/2} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.18})$$

pravý Cauchyův-Greenův deformační tenzor a jeho inverze

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda} & k\lambda^{1/2} & 0 \\ k\lambda^{1/2} & \lambda(k^2+1) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\lambda} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda(k^2+1) & -k\lambda^{-1/2} & 0 \\ -k\lambda^{-1/2} & \lambda^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

Inverze trvalé deformace má tedy nekonstantní pouze složky 11, 12, 21, 22 a 33, které jsou popsány evolučními vztahy

$$\begin{aligned} \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{Dt} &= \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda(k^2+1) - (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}), \\ \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{12}}{Dt} &= \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{21}}{Dt} = \frac{\dot{\mu}}{\mu} (-k\lambda^{-1/2} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{12}), \\ \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{Dt} &= \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda^{-2} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}), \\ \frac{D(\mathbf{C}_1^{-1})_{33}}{Dt} &= \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{33}), \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

deviátor ve vztahu pro napětí (A.3) vyjde

$$\begin{aligned}
\text{dev} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] &= \mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C} - \frac{1}{3} \text{tr} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] = \\
&= \frac{1}{3\lambda} \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \begin{bmatrix} 2 & 3k\lambda^{3/2} & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{33} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \right. \\
&\quad + (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \begin{bmatrix} -(k^2+1)\lambda^3 & 0 & 0 \\ 3k\lambda^{3/2} & 2(k^2+1)\lambda^3 & 0 \\ 0 & 0 & (k^2+1)\lambda^3 \end{bmatrix} + \\
&\quad \left. + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} \begin{bmatrix} k\lambda^{3/2} & 3(k^2+1)\lambda^3 & 0 \\ 3 & k\lambda^{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & -2k\lambda^{3/2} \end{bmatrix} \right) \tag{A.21}
\end{aligned}$$

a složky skutečného napětí

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma} &= \frac{1}{3} \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (1-D) \left(\frac{-(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{\lambda} \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \right. \\
&\quad + (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^2 \begin{bmatrix} (2k^2-1) & 3k & 0 \\ 3k & (2-k^2) & 0 \\ 0 & 0 & -(k^2+1) \end{bmatrix} - \\
&\quad - \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{33}}{\lambda} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} + \\
&\quad \left. + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} \sqrt{\lambda} \begin{bmatrix} 4k & 3 & 0 \\ 3 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \right) - p \mathbf{1}. \tag{A.22}
\end{aligned}$$

Stejně jako v případě prostého smyku se předpokládá stav rovinné napjatosti a hydrostatický tlak p se určí z podmínky $\sigma_{33} \equiv 0$ jako

$$p = -\frac{2}{3} \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (1-D) \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^3 (k^2+1) - 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{33} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} k \lambda^{3/2}}{\lambda}. \tag{A.23}$$

Evoluční vztah pro poškození vyjde

$$\begin{aligned}
\dot{D} &= \left(A C_{10} \mu \nu \left(\frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + (\mathbf{C}_1^{-1})_{33}}{\lambda} + 2k\sqrt{\lambda} (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \lambda (k^2+1) (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \right) \right)^a. \tag{A.24}
\end{aligned}$$

Popisovaný způsob namáhání, tj. kombinace tahu a smyku, se vyskytuje především při zkouškách v přípravku Arcan. Požadovaného poměru tahu a zkosu se docílí natočením přípravku v čelistech trhacího stroje, měří se tedy síla ve směru

svírajícím s osou přípravku známý úhel α (viz obr. A.3), přičemž parametry deformace použité ve výše uvedeném odvození se tedy ze známého úhlu α a posunutí pístu u vyjádří jako

$$\lambda = 1 + u \sin \alpha , \quad (\text{A.25})$$

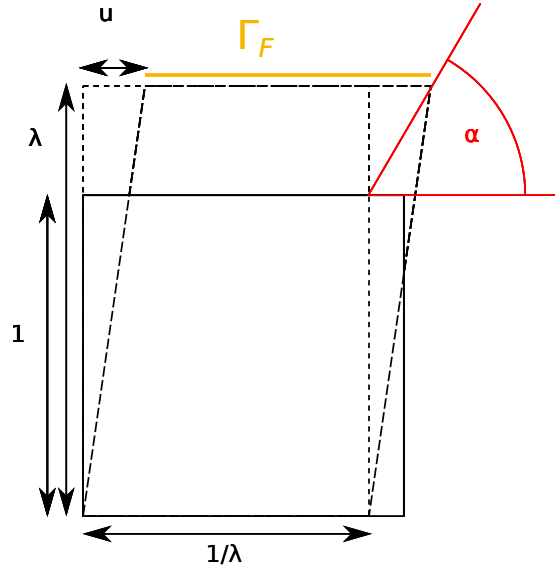
$$k = u \cos \alpha . \quad (\text{A.26})$$

Normála ve vztahu pro vektor skutečného (Cauchyova) napětí je opět $\vec{n} = [0, 1, 0]^T$ a celková síla vyjde

$$\begin{aligned} \vec{F} &= \int_{\Gamma_F} \vec{t} \, dS = \int_{\Gamma_F} \boldsymbol{\sigma} \vec{n} \, dS = \frac{1}{\lambda} \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = \\ &= \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \frac{1}{\lambda} \begin{bmatrix} (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} k \lambda^2 + (\mathbf{C}_1^{-1})_{12} \sqrt{\lambda} \\ (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^2 - \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{33}}{\lambda} \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

a její průmět do směru pohybu pístu, $\vec{p} = [\cos \alpha, \sin \alpha, 0]^T$ je

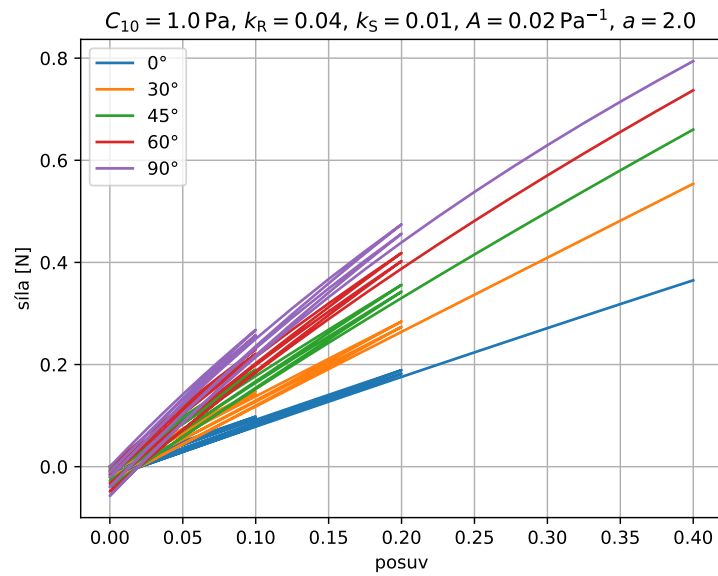
$$F_p = \vec{F} \cdot \vec{p} = \sin \alpha \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{33}}{\lambda^2} \right) + \cos \alpha \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{22} k \lambda + \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{12}}{\sqrt{\lambda}} \right) . \quad (\text{A.28})$$



Obrázek A.3. Popis deformací v pootočeném přípravku Arcan

Příklad A.2: Kombinace tahu a smyku

Je řešen případ cyklického zatěžování s postupně rostoucí amplitudou při různých úhlech natočení přípravku, opět za konstantní koncentrace kyslíku a konstantní teploty. Obr. A.4 obsahuje závislosti síly na předepsaném posunutí, přičemž s rostoucím úhlem natočení je dosahováno větších sil, což souhlasí s experimentálními výsledky uvedenými v kap. 6.3.2. Od experimentálních dat se model odchyluje v závislosti tohoto nárůstu, tj. že mezi křivkami pro natočení 0 a 30° je větší rozdíl než mezi křivkami pro 30 a 60°, zatímco u experimentálních výsledků je



Obrázek A.4. Příklad A.2. Závislosti síly na předepsaném posuvu pro různé úhly natočení přípravku.

tomu naopak. Dále model oproti experimentům prakticky neobsahuje hysterezi, což je ovšem předpokládaný výsledek, neboť model explicitně neobsahuje členy popisující viskózní chování ani Mullinsův efekt.



Příloha B

Dynamic network model při jednoosé napjatosti, konstantní teplotě a konstantní koncentraci kyslíku

Experimenty prováděné při zkoumání deformačních vlastností pryže jsou často navrženy tak, aby v určité části zkušebních vzorků byl homogenní stav deformace a napětí. Příklady takových měření jsou tahové zkoušky s činkovými nebo dvoulopatkovými vzorky, tlakové zkoušky s dostatečně dlouhými válcovými vzorky nebo biaxiální zkoušky. Díky homogenitě vyšetřovaných veličin mohou být pro výpočet odezvy materiálu použity zjednodušené vztahy, konkrétně v případě *dynamic network* modelu přejde počátečně-okrajová úloha soustavy parciálních diferenciálních rovnic na počáteční úlohu soustavy obyčejných diferenciálních rovnic. Vztahy odvozené v této kapitole byly použity pro vyšetřování vlivu experimentálních dat na vlastnosti cílové funkce v kap. 7.3.

Dalším předpokladem použitým v této kapitole je konstantní koncentrace kyslíku, což platí v případě tenkých vzorků, u kterých má difuze kyslíku zanedbatelný vliv. Dále se předpokládá ještě konstantní teplota.

Deformační gradient je v případě jednoosé napjatosti reprezentován maticí

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^{-1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^{-1/2} \end{bmatrix}, \quad (B.1)$$

kde λ je protažení ve směru zatěžování vzorku. Pravý Cauchyho-Greenův deformační tenzor a jeho inverze jsou tedy

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^{-1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}. \quad (B.2)$$

Skutečné (Cauchyovo) napětí je

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T = \frac{2}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \mathbf{F} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}^T - p. \quad (B.3)$$

Evoluční vztahy pro \mathbf{C}_1^{-1} jsou

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} = \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda^{-2} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}), \quad (B.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} = \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{C}_1^{-1})_{33} = \frac{\dot{\mu}}{\mu} (\lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}), \quad (B.5)$$

přičemž mimodiagonální prvky jsou nulové. Deviator ve vztahu (B.3) je tedy

$$\begin{aligned} \text{dev} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] &= \mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C} - \frac{1}{3} \text{tr} [\mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}] = \\ &= \frac{1}{3} ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1}) \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (B.6)$$

Hydrostatický tlak a osová složka skutečného napětí jsou potom

$$p = -\frac{1}{3} \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} \right), \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{2}{3} \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} \right) - p = \\ &= \frac{1}{J} C_{10} \mu \nu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Poškození se řídí vztahy

$$\begin{aligned} \dot{D} &= (-AY)^a, \\ Y &= \frac{\partial \Psi}{\partial D} = -\frac{C_{10}}{\rho_0} \mu \nu (\mathbf{C}_1^{-1} : \mathbf{C} - 3) = \\ &= -\frac{C_{10}}{\rho_0} \mu \nu \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} - 3 \right), \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

s počáteční podmínkou

$$D(0) = 0. \quad (\text{B.10})$$

Stárnutí se řídí následujícími evolučními vztahy a počátečními podmínkami:

$$\dot{\mu} = k_R \mu, \quad \mu(0) = 1, \quad (\text{B.11})$$

$$\dot{\nu} = -k_S \nu, \quad \nu(0) = 1. \quad (\text{B.12})$$

B.1 Numerické simulace

Vztahy pro jednoosou napjatost při konstantní teplotě a koncentraci kyslíku jsou použity pro vyšetřování identifikovatelnosti v kap. 7.3. Tato sekce obsahuje formulace dvou konkrétních úloh a popis implementace jejich numerického řešení.

Úloha B.1: Úloha s předepsanou deformací

Pro zadaný časový interval $\langle 0, t_1 \rangle$ a historii protažení $\lambda : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^+$ najít funkce $\mu : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$, $\nu : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$, $(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^+$, $(\mathbf{C}_1^{-1})_{22} : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^+$ a $D : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$ takové, které splňují evoluční vztahy a počáteční podmínky (B.4), (B.5), (B.9), (B.11) a (B.12). \square

Úloha B.2: Úloha s předepsaným nominálním napětím

Pro zadaný časový interval $\langle 0, t_1 \rangle$ a historii nominálního napětí $P_{11} : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}$ najít funkce $\lambda : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^+$, $\mu : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$, $\nu : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$, $(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^+$, $(\mathbf{C}_1^{-1})_{22} : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \mathcal{R}^+$ a $D : \langle 0, t_1 \rangle \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$ takové, které splňují evoluční vztahy a počáteční podmínky (B.4), (B.5), (B.9), (B.11), (B.12) a podmínku pro nominální napětí

$$P_{11} = C_{10} \mu \nu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2} \right). \quad (\text{B.13})$$

\square

Řešení úlohy B.1 se implementuje přímo jako řešení počáteční úlohy soustavy obyčejných diferenciálních rovnic, neboť uvedené evoluční vztahy lze zapsat ve tvaru $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$, kde $\mathbf{x} = [\mu, \nu, D, (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}, (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}]^T$. Napětí se poté pouze vyčíslí pomocí vztahu (B.8).

Úloha B.2 naproti tomu vyžaduje přeformulování, aby bylo možné použít některý z obecných řešičů počátečních úloh soustav ODR. Vztah (B.13) se formálně zderivuje podle času

$$\begin{aligned} \dot{P}_{11} = C_{10} \left(\dot{\mu} B_{\mu} + \dot{\nu} B_{\nu} - \dot{D} B_D + \dot{\lambda} B_{\lambda} + \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} B_{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \right. \\ \left. + \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} B_{(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \right), \end{aligned} \quad (B.14)$$

kde

$$B_{\mu} = \nu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2} \right), \quad (B.15)$$

$$B_{\nu} = \mu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2} \right), \quad (B.16)$$

$$B_D = \mu \nu \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2} \right), \quad (B.17)$$

$$B_{\lambda} = \mu \nu (1 - D) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \right), \quad (B.18)$$

$$B_{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} = \mu \nu (1 - D) \lambda, \quad (B.19)$$

$$B_{(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} = \mu \nu (1 - D) \lambda^{-2}. \quad (B.20)$$

Ze vztahu (B.14) lze vyjádřit časovou derivaci protažení, které v úloze B.2 vystupuje jako neznámá:

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} = B_{\lambda}^{-1} \left(\frac{\dot{P}_{11}}{C_{10}} - \dot{\mu} B_{\mu} - \dot{\nu} B_{\nu} + \dot{D} B_D - \right. \\ \left. - \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} B_{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} - \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} B_{(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \right) = \end{aligned} \quad (B.21)$$

$$= \frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_{\lambda}} - \underbrace{\frac{\dot{\mu}}{\mu}}_{k_R} \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}}{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}} - \underbrace{\frac{\dot{\nu}}{\nu}}_{-k_S} \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}}{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}}$$

$$+ \frac{\dot{D}}{1 - D} \frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}}{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}} - \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \frac{\lambda}{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}}$$

$$- \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \frac{\lambda^{-2}}{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}} = \quad (B.22)$$

$$\begin{aligned} = \frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_{\lambda}} + \left(\left(-k_R + k_S + \frac{\dot{D}}{1 - D} \right) \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2} \right) \right. \\ \left. - \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda + \frac{D}{Dt} (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2} \right) \\ \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (B.23)$$

Počáteční podmínka pro neznámé protažení λ se určí řešením nelineární rovnice (B.13).

Takto formulovaná úloha s předepsaným nominálním napětím je citlivá na kumulaci numerických chyb a je proto nutné volit dostatečně malý časový krok.

B.2 Citlivostní analýza

Citlivostní vztahy pro zde popisovaný zjednodušený model byly odvozeny metodou přímé diferenciacce. Tato metoda byla použita především z toho důvodu, že pro modely závislé na historii zatěžování, ke kterým dynamický síťový model patří, není podle literatury výhodné použít metodu adjungované soustavy ([58], kap. 4.2.1). Cílem je získat citlivost hledaných funkcí $(\mu, \nu, (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}, \dots)$ vzhledem k parametrům modelu (C_{10}, k_R, \dots) . Tyto dílčí citlivosti je možné použít např. k výpočtu gradientu cílové funkce při identifikaci nebo k sestrojení její kvadratické aproximace.

B.2.1 Úloha s předepsanou deformací

Evoluční vztahy pro citlivosti se odvodí přímo z evolučních vztahů pro jednotlivé neznámé funkce (celkem devět neznámých citlivostí, ostatní než zde uvedené jsou identicky nulové):

$$\frac{d}{dt} \frac{d\mu}{dk_R} = \mu + k_R \frac{d\mu}{dk_R}, \quad (B.24)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d\nu}{dk_S} = -\nu - k_S \frac{d\nu}{dk_S}, \quad (B.25)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} = \lambda^{-2} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} - k_R \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R}, \quad (B.26)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} = \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} - k_R \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R}, \quad (B.27)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{dD}{dC_{10}} = \frac{a}{C_{10}} (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^a, \quad (B.28)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{dD}{dk_R} = \frac{\partial \dot{D}}{\partial \mu} \frac{d\mu}{dk_R} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R}, \quad (B.29)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{dD}{dk_S} = \frac{\partial \dot{D}}{\partial \nu} \frac{d\nu}{dk_S}, \quad (B.30)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{dD}{dA} = \frac{a}{A} (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^a, \quad (B.31)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{dD}{da} = \dot{D} \log (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3)), \quad (B.32)$$

kde

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial \mu} = \frac{a}{\mu} (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^a, \quad (B.33)$$

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} = a (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^{a-1} A C_{10} \mu \nu \lambda^2, \quad (B.34)$$

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} = 2a (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^{a-1} A C_{10} \mu \nu \lambda, \quad (B.35)$$

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial \nu} = \frac{a}{\nu} (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^a, \quad (B.36)$$

Samotný výpočet citlivostí potom spočívá v řešení počáteční úlohy soustavy obyčejných diferenciálních rovnic s nulovými počátečními podmínkami, neboť

v původní úloze jsou počáteční podmínky dané nezávisle na hodnotách parametrů materiálového modelu.

Příklad B.1: Úloha s předepsanou deformací – ověření pomocí konečných diferencí

Citlivosti neznámých a napětí spočtené pomocí výše uvedených vztahů byly porovnány s citlivostmi spočtenými metodou centrálních konečných diferencí, tj. citlivost neznámé y vzhledem k parametru α_i byla určena jako

$$\left(\frac{dy}{d\alpha_i} \right)_{\text{FD}} = \frac{y(\alpha_i + \Delta_i) - y(\alpha_i - \Delta_i)}{2\Delta_i}, \quad (\text{B.37})$$

kde Δ_i je zvolený krok metody. Rozdíly citlivostí spočtených DDM a metodou konečných diferencí jsou na obr. B.1. Krok metody konečných diferencí byl zvolen pro všechny parametry stejný $\Delta_i = 10^{-8}$. Řešení dílčích úloh B.1 i citlivostní úlohy (B.24)-(B.36) bylo provedeno explicitní metodou Runge-Kutta řádu 5 nebo 4 s maximální délkou časového kroku 0,05. Citlivost proměnné μ je pro ilustraci porovnávána i s přesným řešením, které lze odvodit díky předpokladu konstantní koncentrace kyslíku a konstantní teploty a má tvar

$$\frac{d\mu}{dk_R} = t e^{k_R t}. \quad (\text{B.38})$$

■

B.2.2 Úloha s předepsaným nominálním napětím

Postup je stejný jako v předchozím případě. Výsledné evoluční vztahy pro citlivosti jsou:

$$\frac{d}{dt} \frac{d\mu}{dk_R} = \mu + k_R \frac{d\mu}{dk_R}, \quad (\text{B.39})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d\nu}{dk_S} = -\nu - k_S \frac{d\nu}{dk_S}, \quad (\text{B.40})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} = -k_R \left(2\lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dC_{10}} + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} \right), \quad (\text{B.41})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} = \lambda^{-2} - (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} - k_R \left(2\lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dk_R} + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} \right), \quad (\text{B.42})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} = -k_R \left(2\lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dk_S} + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} \right), \quad (\text{B.43})$$

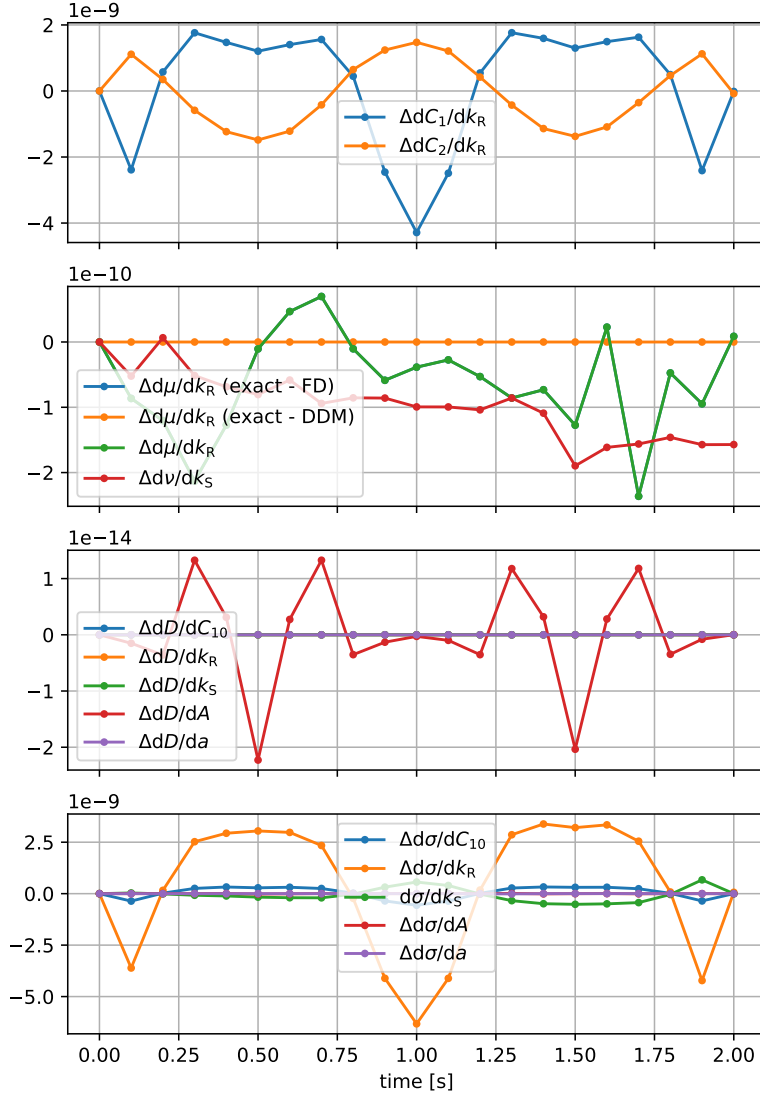
$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} = -k_R \left(2\lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dA} + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} \right), \quad (\text{B.44})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} = -k_R \left(2\lambda^{-3} \frac{d\lambda}{da} + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} \right), \quad (\text{B.45})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}} = k_R \left(\frac{d\lambda}{dC_{10}} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}} \right), \quad (\text{B.46})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} = \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} + k_R \left(\frac{d\lambda}{dk_R} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} \right), \quad (\text{B.47})$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S} = k_R \left(\frac{d\lambda}{dk_S} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S} \right), \quad (\text{B.48})$$



Obrázek B.1. Ověření citlivostní analýzy pomocí konečných diferencí – úloha s přepsanou deformací (Příklad B.1).

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA} = k_R \left(\frac{d\lambda}{dA} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA} \right), \quad (B.49)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da} = k_R \left(\frac{d\lambda}{da} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da} \right), \quad (B.50)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{dD}{dC_{10}} &= \frac{a}{C_{10}} (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} - 3))^a + \\ &+ \frac{\partial \dot{D}}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dC_{10}} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial \mu} \underbrace{\frac{d\mu}{dC_{10}}}_{=0} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial \nu} \underbrace{\frac{d\nu}{dC_{10}}}_{=0} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} + \\ &+ \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}}, \end{aligned} \quad (B.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{dD}{dk_R} &= \frac{\partial \dot{D}}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dk_R} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial \mu} \frac{d\mu}{dk_R} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} + \\ &+ \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} \end{aligned} \quad (B.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{dD}{dk_S} &= \frac{\partial \dot{D}}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dk_S} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial \nu} \frac{d\nu}{dk_S} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} + \\ &+ \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S}, \end{aligned} \quad (B.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{dD}{dA} &= \frac{a}{A} (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3))^a + \\ &+ \frac{\partial \dot{D}}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dA} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA}, \end{aligned} \quad (B.54)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{dD}{da} &= \dot{D} \log (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda - 3)) + \\ &+ \frac{\partial \dot{D}}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{da} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} + \frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da}, \end{aligned} \quad (B.55)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{d\lambda}{dC_{10}} &= -\frac{\dot{P}_{11}}{C_{10}^2 B_\lambda} - \frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_\lambda^2} \frac{dB_\lambda}{dC_{10}} + \left(\right. \\ &\left. \left(\frac{1}{1-D} \frac{d\dot{D}}{dC_{10}} + \frac{\dot{D}}{(1-D)^2} \frac{dD}{dC_{10}} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) + \right. \\ &+ \left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} \lambda + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \frac{d\lambda}{dC_{10}} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}} \lambda^{-2} + \right. \\ &\quad \left. \left. 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dC_{10}} \right) \right. \\ &\left. - \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} \lambda - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \frac{d\lambda}{dC_{10}} + \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}} \lambda^{-2} - 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dC_{10}} \right) \\ &((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})^{-1} - \\ &- \left(\left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \lambda + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-2} \right) \\ &((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})^{-2} \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dC_{10}} \right) \end{aligned} \quad (B.56)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{d\lambda}{dk_R} &= -\frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_\lambda^2} \frac{dB_\lambda}{dk_R} + \left(\right. \\ &\left. \left(-1 + \frac{1}{1-D} \frac{d\dot{D}}{dk_R} + \frac{\dot{D}}{(1-D)^2} \frac{dD}{dk_R} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) + \right. \\ &+ \left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} \lambda + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \frac{d\lambda}{dk_R} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} \lambda^{-2} + \right. \\ &\quad \left. \left. 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dk_R} \right) \right. \\ &\left. - \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} \lambda - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \frac{d\lambda}{dk_R} + \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} \lambda^{-2} - 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dk_R} \right) \\ &((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})^{-1} - \\ &- \left(\left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \lambda + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-2} \right) \\ &((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})^{-2} \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dk_R} \right) \end{aligned}$$

(B.57)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \frac{d\lambda}{dk_S} &= -\frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_\lambda^2} \frac{dB_\lambda}{dk_S} + \left(\right. \\
&\quad \left. \left(1 + \frac{1}{1-D} \frac{d\dot{D}}{dk_S} + \frac{\dot{D}}{(1-D)^2} \frac{dD}{dk_S} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) + \right. \\
&\quad \left. + \left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} \lambda + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \frac{d\lambda}{dk_S} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S} \lambda^{-2} + \right. \right. \\
&\quad \quad \left. \left. 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dk_S} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} \lambda - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \frac{d\lambda}{dk_S} + \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S} \lambda^{-2} - 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dk_S} \right) \\
&\quad \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \right)^{-1} - \\
&\quad - \left(\left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \lambda + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-2} \right) \\
&\quad \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \right)^{-2} \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dk_S} \right)
\end{aligned} \tag{B.58}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \frac{d\lambda}{dA} &= -\frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_\lambda^2} \frac{dB_\lambda}{dA} + \left(\right. \\
&\quad \left(\frac{1}{1-D} \frac{d\dot{D}}{dA} + \frac{\dot{D}}{(1-D)^2} \frac{dD}{dA} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) + \\
&\quad + \left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} \lambda + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \frac{d\lambda}{dA} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA} \lambda^{-2} + \right. \\
&\quad \quad \left. 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dA} \right) \\
&\quad - \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} \lambda - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \frac{d\lambda}{dA} + \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA} \lambda^{-2} - 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{dA} \\
&\quad \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \right)^{-1} - \\
&\quad - \left(\left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \lambda + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-2} \right) \\
&\quad \left((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \right)^{-2} \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dA} \right)
\end{aligned} \tag{B.59}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \frac{d\lambda}{da} &= -\frac{\dot{P}_{11}}{C_{10} B_\lambda^2} \frac{dB_\lambda}{da} + \left(\right. \\
&\quad \left(\frac{1}{1-D} \frac{d\dot{D}}{da} + \frac{\dot{D}}{(1-D)^2} \frac{dD}{da} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) + \\
&\quad + \left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} \lambda + (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \frac{d\lambda}{da} - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da} \lambda^{-2} + \right. \\
&\quad \quad \left. 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{da} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} \lambda - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \frac{d\lambda}{da} + \frac{d}{dt} \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da} \lambda^{-2} - 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-3} \frac{d\lambda}{da} \\
& ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})^{-1} - \\
& - \left(\left(k_S - k_R + \frac{\dot{D}}{1-D} \right) ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}) - \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dt} \lambda + \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dt} \lambda^{-2} \right) \\
& ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})^{-2} \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{da} \right)
\end{aligned} \tag{B.60}$$

kde

$$\begin{aligned}
\frac{dB_\lambda}{dC_{10}} &= -\frac{dD}{dC_{10}} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}) + \\
& + \mu \nu (1-D) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dC_{10}} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dC_{10}} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dC_{10}} \right)
\end{aligned} \tag{B.61}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dB_\lambda}{dk_R} &= \frac{d\mu}{dk_R} \frac{B_\lambda}{\mu} - \frac{dD}{dk_R} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}) + \\
& + \mu \nu (1-D) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_R} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_R} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dk_R} \right)
\end{aligned} \tag{B.62}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dB_\lambda}{dk_S} &= \frac{d\nu}{dk_S} \frac{B_\lambda}{\nu} - \frac{dD}{dk_S} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}) + \\
& + \mu \nu (1-D) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dk_S} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dk_S} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dk_S} \right)
\end{aligned} \tag{B.63}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dB_\lambda}{dA} &= -\frac{dD}{dA} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}) + \\
& + \mu \nu (1-D) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{dA} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{dA} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{dA} \right)
\end{aligned} \tag{B.64}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dB_\lambda}{da} &= -\frac{dD}{da} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3}) + \\
& + \mu \nu (1-D) \left(\frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{11}}{da} + 2 \frac{d(\mathbf{C}_1^{-1})_{22}}{da} \lambda^{-3} - 6 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-4} \frac{d\lambda}{da} \right)
\end{aligned} \tag{B.65}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \dot{D}}{\partial \lambda} &= a (A C_{10} \mu \nu ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda^2 + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-1} - 3))^{a-1} \\
& (A C_{10} \mu \nu (2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}))
\end{aligned} \tag{B.66}$$

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial \mu} = \text{viz (B.33)}$$

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{11}} = \text{viz (B.34)}$$

$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial (\mathbf{C}_1^{-1})_{22}} = \text{viz (B.35)}$$

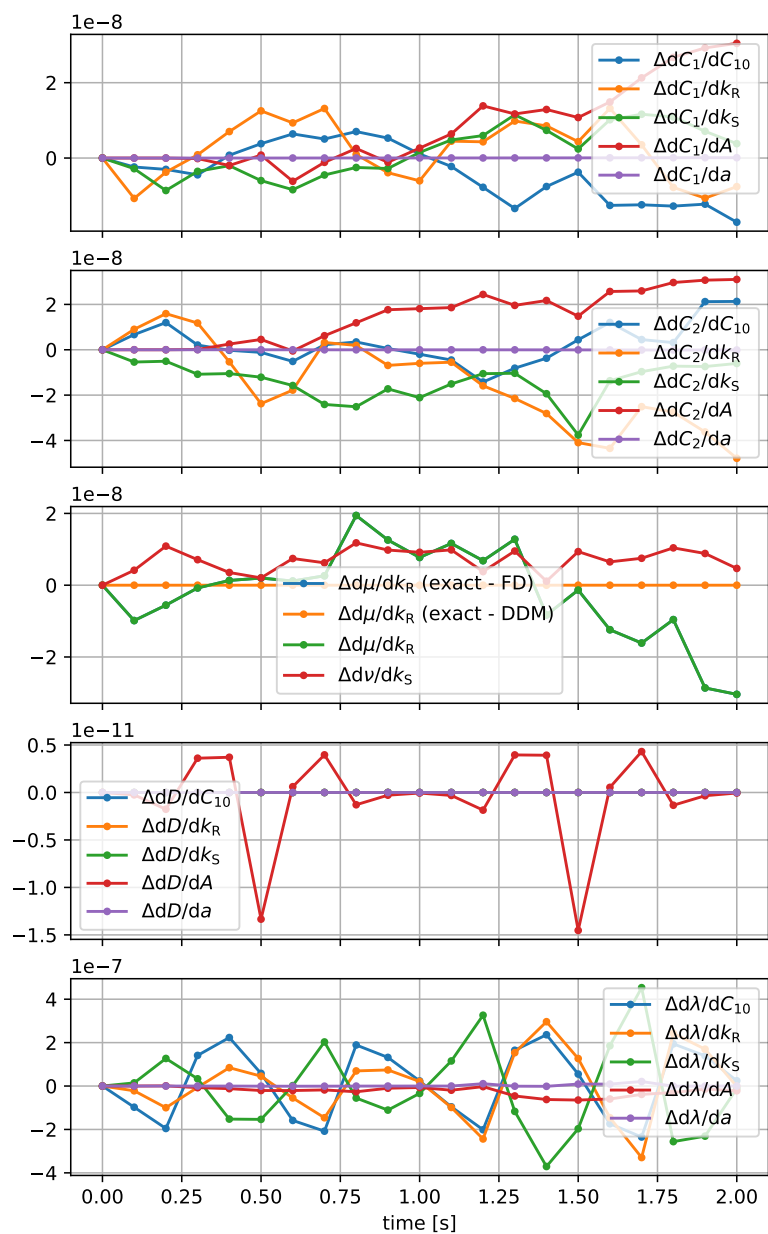
$$\frac{\partial \dot{D}}{\partial \nu} = \text{viz (B.36)}$$

Počáteční podmínka pro $\frac{d\lambda}{dC_{10}}$ se získá formálním zderivováním vztahu (B.13) podle C_{10} . Po úpravě vyjde

$$\frac{d\lambda}{dC_{10}} = -\frac{(\mathbf{C}_1^{-1})_{11} \lambda - (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-2}}{C_{10} ((\mathbf{C}_1^{-1})_{11} + 2 (\mathbf{C}_1^{-1})_{22} \lambda^{-3})}. \quad (\text{B.67})$$

Příklad B.2: Úloha s předepsaným nominálním napětím – ověření pomocí konečných diferencí

Citlivosti neznámých spočtené pomocí výše uvedených vztahů byly porovnány s citlivostmi spočtenými metodou centrálních konečných diferencí stejným způsobem jako v příkladu B.1. Rozdíly citlivostí spočtených DDM a metodou konečných diferencí jsou na obr. B.2. Krok metody konečných diferencí byl zvolen pro všechny parametry stejný $\Delta_i = 10^{-8}$. Řešení dílčích úloh B.1 i citlivostní úlohy (B.24)-(B.36) bylo provedeno explicitní metodou Runge-Kutta řádu 5 nebo 4 s maximální délkou časového kroku 0,05. ■



Obrázek B.2. Ověření citlivostní analýzy pomocí konečných diferencí – úloha s předepsaným nominálním napětím (Příklad B.2).