Numeričko modeliranje procesa kvazi-krhkog loma primjenom faznog modeliranja

Seleš, K.[1], Lesičar[2], T., Tonković, Z.[3] i Sorić, J.[4]

Sažetak

Numeričko modeliranje nastanka i rasta pukotina u materijalu predstavlja važan interes u inženjerskoj praksi te već dulje vrijeme privlači pozornost mnogih istraživača. Za krhke materijale dostupno je više različitih metoda koje se temelje na Griffithovoj teoriji gdje se formiranje pukotine određuje pomoću energije površinske napetosti, odnosno energije potrebne za stvaranje dvaju novih površina prijeloma. Pritom se najviše primjenjuju diskretne metode u kojima je rast pukotine kao geometrijskog diskontinuiteta definiran kriterijem loma za razdvajanje čvorova u mreži konačnih elemenata. Najveći nedostatak ovih metoda je što se rast pukotine odvija samo duž rubova konačnih elemenata te su rezultati ovisni o gustoći i usmjerenosti mreže.

Kako bi se prevladalo nefizikalno ponašanje standardnih formulacija za modeliranje oštećenja u materijalu, zadnjih godina aktualni su principi faznog modeliranja (eng. *Phase-field modeling*). Ovi principi omogućuju modeliranje mikrostrukture materijala koja se sastoji od više različitih faza na način da pretpostavljaju kontinuiranu transformaciju između tih faza. Za slučaj oštećenja materijala, različite faze odnose se na cjeloviti materijal, odnosno pukotinu. Umjesto diskretnog opisa, fazno modeliranje temelji se na kontinuumskom opisu pukotine u kojoj je diskontinuitet raspodijeljen preko određenog volumena. Na taj način, pomoću faznog modeliranja moguće je pratiti nastanak, rast i srastanje pukotina do konačnog loma.

U radu je dan prikaz algoritma faznog modeliranja za numeričku simulaciju procesa nastanka i rasta pukotina u kvazi-krhkom materijalu. Algoritam faznog modeliranja ugrađen je u programski paket ABAQUS primjenom korisničkih rutina UEL i UMAT.

Ključne riječi: kvazi-krhki lom, fazno modeliranje, metoda konačnih elemenata, mehanika oštećenja i loma

[1] **Karlo Seleš, mag.ing.mech.**, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, e-mail: karlo.seles@fsb.hr
[2] **Dr.sc. Tomislav Lesičar**, e-mail: tomislav.lesicar@fsb.hr
[3] **Prof.dr.sc. Zdenko Tonković**, e-mail: zdenko.tonkovic@fsb.hr
[4] **Prof.dr.sc. Jurica Sorić**, e-mail: jurica.soric@fsb.hr

1 Uvod

Razvojem računalne tehnologije proširene su mogućnosti klasične mehanike loma. Umjesto klasično odvojenih konstitutivnih relacija i kriterija loma, lokalni gubitak cjelovitosti materijala moguće je uvrstiti u konstitutivne relacije. Lom se tada smatra konačnom posljedicom procesa degradacije materijala. Važan utjecaj na nastanak i rast oštećenja ima mikrostruktura materijala [1]. Kako mikrostrukturna razina nije uključena u klasične kontinuumske modele oštećenja [2], [3], [4], numeričkim rješavanjem problema dolazi do lokalizacije rasta oštećenja što doprinosi fizikalno nerealnom rješenju uz prisustvo singularnosti brzine oštećenja i ovisnosti rješenja o gustoći i usmjerenosti mreže konačnih elemenata [5]. Kako bi se riješio navedeni problem, razvijene su različite regularizacijske tehnike temeljene na poboljšanju modela klasičnog kontinuuma njegovim obogaćivanjem parametrima unutarnje duljinske skale na više različitih načina. Jedna od tih tehnika temelji se na uvođenju nelokalnosti u model putem dodatnog člana višeg reda u funkciju gustoće energije deformiranja, a koji uključuje gradijente deformacije, odnosno deformacije drugog reda te njihove konjugirane vrijednosti, naprezanja drugog reda [2].

U zadnje vrijeme vrlo su atraktivni principi faznog modeliranja (eng. *Phase-field modeling*) kojima se pukotina regularizira na način da se umjesto diskretne definicije pukotine, odnosno diskontinuiteta, isti raspodjeli po određenom volumenu [6]. To se postiže uvođenjem dodatne skalarne varijable ϕ koja poprima vrijednost 1 za slučaj pukotine, odnosno 0 za neoštećeni materijal. Ono što čini ovaj pristup posebno atraktivnim je njegova sposobnost učinkovitog simuliranja složenih procesa oštećenja i loma uključujući nastanak, rast, srastanje i grananje oštećenja, kako za dvodimenzijske tako i za trodimenzijske probleme. Rast pukotina automatski se prati razvojem glatkog polja ϕ na fiksnoj mreži konačnih elemenata. Prema tome, fazno modeliranje spada u kontinuumski opis diskontinuiteta što ima značajne prednosti nad diskretnim opisom pukotine čija numerička implementacija zahtijeva eksplicitno (u klasičnoj metodi konačnih elemenata, MKE) ili implicitno (u proširenoj MKE, XFEM) rješavanje problema diskontinuiteta.

U literaturi [6] je vidljivo da se primjenom klasične (izotropne) formulacije faznog modeliranja dobiva nefizikalno ponašanje konstrukcijske komponente s pukotinom. Za eliminiranje tog problema, razvijene su anizotropne formulacije faznog modeliranja. Pritom se vrši aditivna dekompozicija energije deformiranja na dio uzrokovan vlačnim, odnosno tlačnim naprezanjima primjenom spektralne dekompozicije [7], odnosno sferno-devijatorske dekompozicije [8]. Na taj način se degradacijska funkcija primjenjuje samo na dio energije koji izaziva rast pukotine. U radu je dan prikaz algoritma faznog modeliranja za numeričku simulaciju kvazi-krhkog loma. Naglasak je stavljen upravo na nefizikalno ponašanje uslijed izotropne formulacije faznog modeliranja. Učinkovitost numeričkog algoritma prikazana je na primjeru rastezanja membrane sa zarezom.

2 Izvod konstitutivnih jednadžbi

Princip faznog modeliranja za opisivanje problema kvazi-krhkog oštećenja materijala temelji se na proširenju Helmholtzove slobodne energije dodatnim članom koji se odnosi na energiju pukotine

$$\Psi = \Psi^{\mathrm{b}} + \Psi^{\mathrm{s}} = \int_{\Omega/\Gamma} \psi(\varepsilon)\,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma} G_{\mathrm{c}}\,\mathrm{d}\Gamma \; . \tag{1}$$

U prethodnoj jednadžbi koja opisuje ukupnu potencijalnu energiju Ψ , Ψ^{b} se odnosi na slobodnu energiju cjelovitog materijala, dok se Ψ^{s} odnosi na pukotinu. Ovdje je $\psi(\varepsilon)$ gustoća energije elastičnog deformiranja, G_{c} je Griffithova energija otvaranja pukotine, dok su Ω razmatrani volumen, odnosno Γ površina pukotine. Regularizacijom pukotine preko cijelog volumena, gubi se nepoznanica površine pukotine te se jednadžbu (1) svodi na

$$\Psi = \int_{\Omega} g(\phi)\psi(\varepsilon)\,\mathrm{d}\Omega + G_{\mathrm{c}}\int_{\Omega}\gamma(\phi)\,\mathrm{d}\Omega \; . \tag{2}$$

Na taj način se podintegralna funkcija u drugom članu izraza (1) zamjenjuje s $\gamma(\phi)$, tzv. funkcijom gustoće površine pukotine, a u prvi član se dodaje degradacijska funkcija $g(\phi)$. Time se diskretni opis pukotine zamjenjuje kontinuumskim pristupom, čime se izbjegava eksplicitno praćenje površine pukotine. Funkcija $\gamma(\phi)$ je izvedena iz 1D primjera, gdje je diskretna, oštra pukotina zamijenjena eksponencijalnom funkcijom

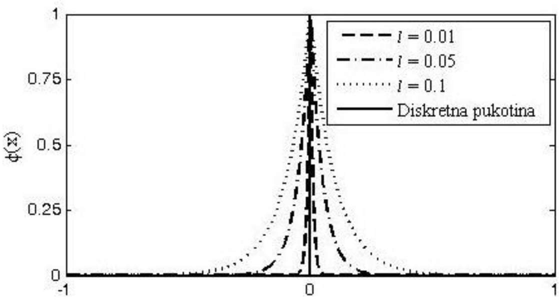
$$\phi(x) = \exp\left(\frac{-|x|}{\ell}\right), \quad \begin{array}{l} \phi(x) \to 0 \;\text{ za }\; x \to \pm\infty, \\ \phi(x) \to 1 \;\text{ za }\; x = 0, \\ \phi'(x) \to 0 \;\text{ za }\; x \to \pm\infty, \end{array} \tag{3}$$

kao što je prikazano na slici 1. Za 1D slučaj vrijedi $\Psi^{s} = G_{c}\int_{\Omega}\gamma(\phi)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}A = G_{c}A$, pa je zadovoljavajuća funkcija

$$\gamma(\phi) = \frac{1}{2}\left[\ell\left(\phi'\right)^{2} + \frac{1}{\ell}\phi^{2}\right], \tag{4}$$

odnosno u općem slučaju

$$\gamma(\phi) = \frac{1}{2}\left[\ell\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\frac{\partial\phi}{\partial x_i} + \frac{1}{\ell}\phi^{2}\right]. \tag{5}$$



Slika 1. Regularizacija pukotine za različite vrijednosti „l“

Ovdje je još potrebno izvesti degradacijsku funkciju koja množi energiju deformiranja $\psi(\varepsilon)$ i na taj način smanjuje krutost materijala uslijed pojave oštećenja. Uobičajena forma degradacijske funkcije kod faznog modeliranja je prikazana jednadžbom prema [7]

$$g(\phi) = (1-\phi)^2 + k\ . \tag{6}$$

Konačno, nakon regularizacije, dobivamo proširenu funkciju slobodne energije koja glasi

$$\Psi(\phi) = \int_\Omega \left[(1-\phi)^2 + k\right]\psi(\varepsilon)\,\mathrm{d}\Omega + \int_\Omega \frac{G_c}{2}\left[\ell\nabla\phi\cdot\nabla\phi + \frac{1}{\ell}\phi^2\right]\mathrm{d}\Omega\ . \tag{7}$$

Primjenom principa virtualnog rada

$$\delta W_{\mathrm{ext}} = \delta W_{\mathrm{int}};\quad \int_\Omega b_j\,\delta u_j\,\mathrm{d}\Omega + \int_{\partial\Omega} h_j\,\delta u_j\,\mathrm{d}\partial\Omega = \delta\Psi\ , \tag{8}$$

sada je moguće doći do konstitutivnih relacija faznog modeliranja u obliku

$$\begin{aligned}
&\left[(1-\phi)^2 + k\right]\partial\sigma_{ij}/\partial x_i + b_j = 0 \ \text{ na } \Omega,\\
&\left[(1-\phi)^2 + k\right]n_i\sigma_{ij} = h_j \ \text{ na } \partial\Omega_h,\\
&u_j = \bar{u}_j \ \text{ na } \partial\Omega_u,\\
&-G_c\ell\,\partial^2\phi/\partial x_i\partial x_i + \left[\frac{G_c}{\ell} + 2\psi(\varepsilon)\right]\phi = 2\psi(\varepsilon) \ \text{ na } \Omega,\\
&\partial\phi/\partial x_i\, n_i = 0 \ \text{ na } \partial\Omega.
\end{aligned} \tag{9}$$

Iz jednadžbe (9) vidljivo je kako $\psi(\varepsilon)$ upravlja razvojem oštećenja. Kako ove relacije ne zadovoljavaju uvjet ireverzibilnosti, uvodi se parametar povijesti oštećenja prema [7]

$$\mathcal{H}(x,t) = \max_{\tau\in[0,t]}\psi\left(\varepsilon(x,\tau)\right), \tag{10}$$

koji zamjenjuje $\psi(\varepsilon)$ u jednadžbi (9) i sprječava smanjenje oštećenja tijekom deformiranja.

3 Dekompozicija energije deformiranja

U mehanici loma je poznato da vlačna naprezanja otvaraju pukotine, dok ih tlačna zatvaraju. Kako bi se izbjegla interpenetracija površine pukotine i kriva putanja rasta pukotine uslijed utjecaja tlačnih naprezanja, u jednadžbi razvoja parametra faznog modeliranja potrebno je razdvojiti energiju deformiranja na dio koji se odnosi na vlačna, odnosno tlačna naprezanja. Dva najučestalija načina razdvajanja energije deformiranja u literaturi su spektralna dekompozicija

$$\Psi^\pm = \frac{\lambda}{2}\langle \mathrm{tr}(\varepsilon)\rangle_\pm^2 + \mu\,\mathrm{tr}\left(\varepsilon_\pm^2\right),\quad \varepsilon_\pm := \sum_{i=1}^3 \langle\varepsilon_i^*\rangle n_i\otimes n_i\ , \tag{11}$$

i sferno – devijatorska dekompozicija

$$\Psi^+ = \frac{1}{2}\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\langle \mathrm{tr}(\varepsilon)\rangle_+^2 + \mu\,\mathrm{tr}\left(\varepsilon^{dev}:\varepsilon^{dev}\right);\quad \Psi^- = \frac{1}{2}\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\langle\mathrm{tr}(\varepsilon)\rangle_-^2 \tag{12}$$

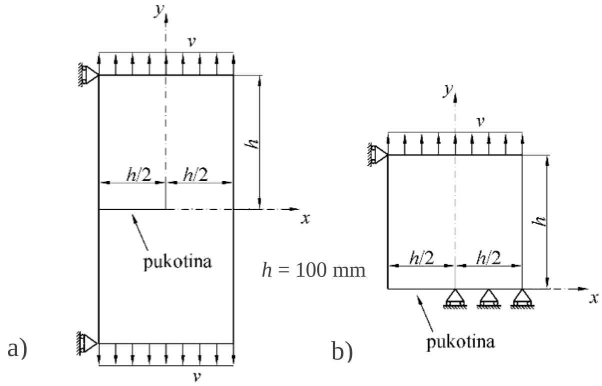
Primjenom neke od navedenih dekompozicija, iz početne jednadžbe faznog modeliranja (2) se dobiva

$$\Psi = \int_{\Omega} \left\{ g(\phi)\psi^{+} + \psi^{-} \right\} \mathrm{d}\Omega + G_{\mathrm{c}} \int_{\Omega} \gamma(\phi) \mathrm{d}\Omega \,, \tag{13}$$

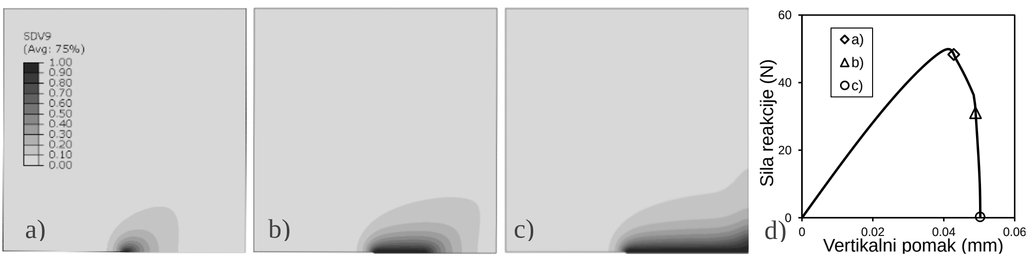
gdje je očito kako degradacijska funkcija djeluje samo na pozitivni dio, dok negativni dio ostaje ne degradiran. Također, daljnjim izvodom u jednadžbi razvoja oštećenja (9), ψ se zamjenjuje s ψ^{+}. Korištenjem takvih dekompozicija uvodi se anizotropnost zbog čega se javljaju nesimetrične matrice krutosti. Zbog navedenog, anizotropnost još nije uspješno implementirana u ovom radu.

4 Numerički primjer

Fazno modeliranje kvazi-krhkog oštećenja prikazano je na jednostavnom akademskom primjeru razvlačenja membrane s pukotinom. Geometrija i rubni uvjeti prikazani su na slici 2. Zbog simetrije, modelirana je samo polovica ploče kako bi se smanjili računalni resursi. Mreža konačnih elemenata je jednolika i sastoji se od 10000 četverokutnih konačnih elemenata s 3 stupnja slobode u čvoru (2 pomaka i parametar faznog modeliranja ϕ) za ravninsko stanje deformacija. Mreža je jednolika upravo iz razloga da ne utječe na smjer rasta pukotine. Materijalna svojstva su preuzeta iz [7]: λ=121,15 kN/mm^2, μ=80,77 kN/mm^2, G_{C}=2,7x10^{-3} kN/mm^2, l=4 mm.



Slika 2. a) Geometrija i b) rubni uvjeti



Slika 3. Polje varijable ϕ za 3 različita stanja opterećenja a), b), c) i d) dijagram sila-pomak

Slike 3.a)-c) prikazuju polje varijable ϕ za 3 različita stanja opterećenja. Vidljivo je da se na ovom jednostavnom primjeru ne pojavljuje nefizikalni rast pukotine uslijed korištenja izotropnog algoritma bez dekompozicije energije deformiranja. Za složenije primjere, bit će ipak potrebno uključiti anizotropnost. Slika 3.d) je dijagram ovisnosti sile i pomaka te jasno prikazuje kako nosivost materijala pada sa širenjem oštećenja te je pri konačnom lomu jednaka nuli.

5 Zaključak

U radu je prikazan postupak faznog modeliranja za rješavanje problema kvazi-krhkog loma. Prikazan je termodinamički i varijacijski konzistentan izvod algoritma za rješavanje navedenog problema. Pozornost je posvećena dekompoziciji energije deformiranja za slučaj vlačnih i tlačnih naprezanja. Kako u ovoj fazi istraživanja navedena dekompozicija još nije uspješno implementirana u algoritam, mogućnosti faznog modeliranja prikazane su na jednostavnom primjeru razvlačenja membrane s pukotinom.

Zahvala

Istraživanje je u potpunosti financirano sredstvima Hrvatske zaklade za znanost u okviru projekta „Multiscale Numerical Modeling of Material Deformation Responses from Macro- to Nanolevel“ (2516) - MNumMacroNano.

Literatura

[1] Putar F., Sorić J., Lesičar T. i Tonković Z. Damage modeling employing strain gradient continuum theory. International Journal of Solids and Structures. 2017, doi: 10.1016/j.ijsolstr.2017.04.039.

[2] Lesičar T., Tonković Z. i Sorić J. A Second-Order Two-Scale Homogenization Procedure Using C1 Macrolevel Discretization. Computational Mechanics. 2014;54(2):425-441.

[3] Lesičar T., Sorić J. i Tonković Z. Large strain, two-scale computational approach using continuity finite element employing a second gradient theory. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2016;1(1):298-303.

[4] Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J. Two-Scale Computational Approach Using Strain Gradient Theory at Microlevel. International Journal of Mechanical Sciences, 2017;126:67-78.

[5] Pijaudier-Cabot G. i Bažant Z. Nonlocal damage theory. Journal of engineering mechanics. 1987;113(10):1512-33.

[6] Ambati M., Gerasimov T. i De Lorenzis L. A review on phase-field models of brittle fracture. Computational Mechanics. 2015;55:383–405.

[7] Miehe C., Welschinger F. i Hofacker M. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture:Variational principles and multi-field FE implementations. Int. J. Numer. Meth. Engng. 2010;83:1273–1311.

[8] Amor H., Marigo J.-J. i Maurini C. Regularized formulation of thevariational brittlefracture with unilateral contact: Numerical experiments. J Mech Ph Solid. 2009;57 (8):1209–1229.