

Peti susret Hrvatskog društva za mehaniku
Terme Jezerčica, Donja Stubica, 6.-7. lipnja 2013.

VIŠERAZINSKO MODELIRANJE HETEROGENIH MATERIJALA

Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J.

Sažetak: U radu je prikazana metoda modeliranja procesa deformiranja heterogenih materijala na dvije razine primjenom računalne homogenizacije drugog reda uz pretpostavku malih deformacija. Detaljnije je istražen prijenos varijabli s makro na mikro razinu i primjena poopćenih uvjeta periodičnosti na reprezentativnom volumenskom elementu (RVE-u). Prilikom izvođenja relacija koje povezuju varijable makro i mikro razine javlja se integralni uvjet mikro fluktuacija, koji je primjenom numeričke integracije implementiran na rubne čvorove RVE-a. Za diskretizaciju makromodela izveden je dvodimenzijski trokutni element s C^1 kontinuitetom, dok je RVE diskretiziran četverokutnim elementom prvog reda s C^0 kontinuitetom. Učinkovitost i točnost prikazane metode provjerena je na problemu čistog savijanja.

Ključne riječi: heterogeni materijal, višerazinsko modeliranje, gradijentna teorija, računalna homogenizacija drugog reda, konačni element s C^1 kontinuitetom, poopćeni rubni uvjeti periodičnosti, integralni uvjet mikrofluktuacija

1 UVOD

Gotovo svi materijali koji se koriste u inženjerskoj praksi su zbog svoje prirodne građe na mikro razini heterogeni. U novije vrijeme istraživanju utjecaja strukture materijala na njegovo mehaničko ponašanje pridaje se posebna pažnja. Iz tog su razloga razvijene metode višerazinskog modeliranja materijala, koje se temelje postupcima homogenizacije [8]. Pritom se za rješavanje problema rubnih vrijednosti najčešće koristi metoda konačnih elemenata, mada se u novije vrijeme primjenjuju i druge diskretizacijske metode među kojima se posebno ističu bezmrežni postupci. Na temelju zavisnosti varijabli mikro i makro razine, razlikuju se metode homogenizacije prvog i drugog reda. Homogenizacija prvog reda uzima u obzir samo gradijent pomaka na makro razini, odnosno makro deformaciju [6]. Na taj se način zadržavaju osnovne pretpostavke lokalnog pristupa mehanike kontinuuma. Zbog toga homogenizacija prvog reda na odgovarajući način opisuje samo jednostavnije slučajeve opterećenja, kao što su vlak, tlak i smik. Osim toga, primjenom homogenizacije prvoga reda ne može se opisati utjecaj okoline na ponašanje neke točke („size effect“) u razmatranom kontinuumu. Stoga je razvijena homogenizacija drugog reda, temeljena na nelokalnoj teoriji, koja nadilazi ograničenja homogenizacije prvog reda [2, 3, 4]. Za primjenu homogenizacije drugog reda, na makro razini mora biti zadovoljen C^1 kontinuitet, što zahtijeva primjenu elemenata višeg reda, koji uključuju dodatne stupnjeve slobode, kao što su prve i druge derivacije pomaka. U ovom slučaju se na mikro razini i dalje zadržava C^0 kontinuitet, u cilju pojednostavljenja numeričkog proračuna. Jedan od najvećih problema višerazinskog modeliranja materijala s primjenom homogenizacije drugog reda je prijenos makro deformacije i makro gradijenta deformacije na mikro

razinu. Prilikom izvođenja relacija između makro i mikro varijabli zbog prijelaza s C^1 na C^0 kontinuitet proizlazi integralni uvjet polja mikro fluktuacija [3, 4].

U radu je prikazan algoritam višerazinskog modeliranja materijala uz primjenu računalne homogenizacije drugog reda za slučaj malih deformacija. Posebna pažnja usmjerena je na primjenu poopćenih uvjeta periodičnosti na RVE-u. Za diskretizaciju makro razine primijenjen je dvodimenzijanski trokutni konačni element s C^1 kontinuitetom, čija je formulacija prilagođena potrebama višerazinske analize [5]. Provedena je numerička implementacija integralnog uvjeta na rubove RVE-a. Svi numerički algoritmi ugrađeni su u programski paket ABAQUS [1] primjenom korisničkih rutina.

2 C^1 DVODIMENZIJSKI TROKUTNI KONAČNI ELEMENT

U ovom poglavlju su prikazane osnovne relacije trokutnog konačnog elementa s 3 čvora koji zadovoljava C^1 kontinuitet. Konačni element opisuje ravninsko stanje deformacija, a temelji se na gradijentnoj teoriji [7, 9]. Kao što se vidi na slici 1, konačni element ima 36 stupnjeva slobode, odnosno 12 stupnjeva slobode po čvoru. Polje pomaka u elementu je aproksimirano potpunim polinomom petog stupnja. Princip virtualnih pomaka iz kojeg je element izveden, za gradijentnu teoriju glasi

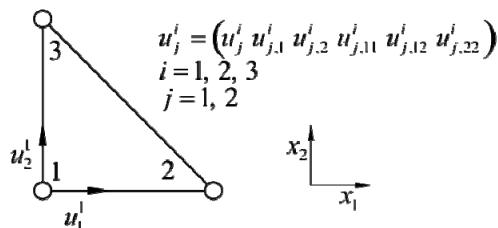
$$\int_A \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} dA + \int_A \delta \boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\mu} dA = \int_s \delta \mathbf{u}^T \mathbf{t} ds + \int_s \delta (\text{grad } \mathbf{u}^T) \mathbf{T} ds. \quad (2)$$

U jednadžbi (2), $\boldsymbol{\sigma}$ i $\boldsymbol{\mu}$ predstavljaju vektore naprezanja i sekundarnog naprezanja. $\boldsymbol{\varepsilon}$ je vektor deformacije, dok je $\boldsymbol{\eta}$ vektor sekundarnih deformacija, koji se sastoji od drugih derivacija vektora pomaka \mathbf{u} . \mathbf{T} predstavlja tenzor sekundarnog površinskog opterećenja dobiven iz vektora sekundarnog površinskog opterećenja $\boldsymbol{\tau}$ i normale \mathbf{n} na plohu s na način da je $\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau} \mathbf{n}$. Gradijenti pomaka prikazani su kao

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T = (\varepsilon_{11} \ \varepsilon_{22} \ 2\varepsilon_{12}) = (\mathbf{B}_\varepsilon \mathbf{v})^T, \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\eta}^T = (\eta_{111} \ \eta_{222} \ \eta_{221} \ \eta_{122} \ 2\eta_{121} \ 2\eta_{212}) = (\mathbf{B}_\eta \mathbf{v})^T,$$

pri čemu matrice \mathbf{B}_ε i \mathbf{B}_η sadrže odgovarajuće prve i druge derivacije matrice interpolacijskih polinoma \mathbf{N} , a \mathbf{v} je vektor stupnjeva slobode elementa.



Sl. 1 Trokutni konačni element s C^1 kontinuitetom

Za analizu nelinearnog problema, jednadžba (2) se rješava inkrementalno-iterativno, pri čemu se inkrementi naprezanja i sekundarnog naprezanja u tom slučaju se računaju pomoću konstitutivnih relacija

$$\begin{aligned}\Delta\boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{C}_{\sigma\varepsilon}\Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{C}_{\sigma\eta}\Delta\boldsymbol{\eta}, \\ \Delta\boldsymbol{\mu} &= \mathbf{C}_{\mu\varepsilon}\Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{C}_{\mu\eta}\Delta\boldsymbol{\eta},\end{aligned}\quad (3)$$

gdje su $\mathbf{C}_{\sigma\varepsilon}$, $\mathbf{C}_{\sigma\eta}$, $\mathbf{C}_{\mu\varepsilon}$ i $\mathbf{C}_{\mu\eta}$ materijalne matrice koje povezuju odgovarajuće komponente naprezanja s deformacijama. Nakon provedbe uobičajenih matematičkih operacija u metodi konačnih elemenata, dobiva se dobro poznata jednadžba konačnog elementa $\mathbf{K}\Delta\mathbf{v} = \mathbf{F}_e - \mathbf{F}_i$. U ovom slučaju, matrica krutosti \mathbf{K} može se zapisati kao zbroj: $\mathbf{K} = \mathbf{K}_{\sigma\varepsilon} + \mathbf{K}_{\sigma\eta} + \mathbf{K}_{\mu\varepsilon} + \mathbf{K}_{\mu\eta}$, gdje su pojedine matrice jednake

$$\begin{aligned}\mathbf{K}_{\sigma\varepsilon} &= \int_A (\mathbf{B}_\varepsilon^T \mathbf{C}_{\sigma\varepsilon} \mathbf{B}_\varepsilon) dA, \quad \mathbf{K}_{\sigma\eta} = \int_A (\mathbf{B}_\varepsilon^T \mathbf{C}_{\sigma\eta} \mathbf{B}_\eta) dA, \\ \mathbf{K}_{\mu\varepsilon} &= \int_A (\mathbf{B}_\eta^T \mathbf{C}_{\mu\varepsilon} \mathbf{B}_\varepsilon) dA, \quad \mathbf{K}_{\mu\eta} = \int_A (\mathbf{B}_\eta^T \mathbf{C}_{\mu\eta} \mathbf{B}_\eta) dA.\end{aligned}\quad (4)$$

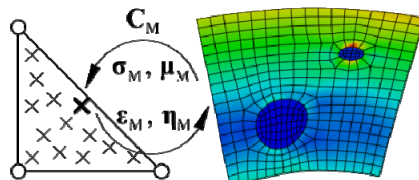
Nadalje, vektori vanjskih i unutarnjih čvornih sila \mathbf{F}_e i \mathbf{F}_i su prikazani relacijama

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_e &= \int_s (\mathbf{N}^T \mathbf{t} + \text{grad } \mathbf{N}^T \mathbf{T}) ds, \\ \mathbf{F}_i &= \int_A (\mathbf{B}_\varepsilon^T \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B}_\eta^T \boldsymbol{\mu}) dA.\end{aligned}\quad (5)$$

Izvedeni konačni element je implementiran u programski paket ABAQUS primjenom korisničke rutine UEL. Za numeričku integraciju matrice krutosti elementa primijenjen je Gaussov postupak reducirane integracije s 13 točaka integracije.

3 MIKRO-MAKRO ALGORITAM

U tekstu koji slijedi dane su osnovne relacije algoritma višerazinskog modeliranja primjenom homogenizacije drugog reda. Algoritam se sastoji od dva modela, gdje svaki model predstavlja jednu razinu. Makro razinu čini makro model, diskretiziran prethodno opisanim trokutnim elementima. Mikrostrukturnu razinu predstavlja RVE, diskretiziran četverokutnim elementima prvog reda. Pritom je svakoj veličini makro razine dodijeljen indeks “M”, dok su veličine mikro razine označene indeksom “m”. Na taj način, u svakoj točki integracije na makro razini provodi se analiza RVE-a. U tu svrhu, makro gradijent pomaka $\boldsymbol{\varepsilon}_M$ i makro gradijent gradijenta pomaka $\boldsymbol{\eta}_M$ se primjenom poopćenih rubnih uvjeta periodičnosti prevode u pomake rubnih čvorova RVE-a. Nakon rješavanja problema rubnih vrijednosti na mikrorazini, homogenizacijom se dobivaju vektor naprezanja $\boldsymbol{\sigma}_M$, vektor sekundarnih naprezanja $\boldsymbol{\mu}_M$ i materijalna matrica \mathbf{C}_M , kao što je prikazano na slici 2.



Sl. 2 Shema mikro-makro algoritma

U računalnoj homogenizaciji drugog reda polje pomaka rubova RVE-a je definirano kao

$$\mathbf{u}_m = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\varepsilon}_M + \frac{1}{2} (\mathbf{x}^T \boldsymbol{\eta}_M \mathbf{x}) + \mathbf{r}, \quad (6)$$

gdje je \mathbf{x} prostorna koordinata na rubovima RVE-a, a \mathbf{r} predstavlja polje mikro fluktuacija. Iz uvjeta da varijable na makro razini moraju odgovarati volumenskom prosjeku varijabli na mikro razini slijede relacije

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_A (\mathbf{n}^T \mathbf{r}) dA &= \mathbf{0}, \\ \int_A (\mathbf{n}^T \mathbf{r} \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{r} \mathbf{n}) dA &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (7)$$

Nadalje, u slučaju rubnih uvjeta periodičnosti druga integralna relacija u (7) se može prikazati pomoću pomaka nezavisnih rubova RVE-a (npr. lijevi i donji rub) na način da je

$$\begin{aligned} \int_{A_L} \mathbf{u}_L dA &= \boldsymbol{\varepsilon}_M^T \int_{A_L} \mathbf{x}_L dA + \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_M \int_{A_L} (\mathbf{x}_L^T \mathbf{x}_L) dA, \\ \int_{A_B} \mathbf{u}_B dA &= \boldsymbol{\varepsilon}_M^T \int_{A_B} \mathbf{x}_B dA + \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_M \int_{A_B} (\mathbf{x}_B^T \mathbf{x}_B) dA. \end{aligned} \quad (8)$$

Iz Hill-Mandelova uvjeta slijedi veza između vektora naprezanja na mikro i makro razini prikazana pomoću površinskih integrala

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_M &= \frac{1}{V} \int_A (\mathbf{p}^T \mathbf{x}) dA \rightarrow \boldsymbol{\sigma}_M = \frac{1}{V} \mathbf{D} \mathbf{f}_b, \\ \boldsymbol{\mu}_M &= \frac{1}{2V} \int_A (\mathbf{x}^T \mathbf{p} \mathbf{x}) dA \rightarrow \boldsymbol{\mu}_M = \frac{1}{V} \mathbf{H} \mathbf{f}_b, \end{aligned} \quad (9)$$

pri čemu \mathbf{p} označava površinsko opterećenje, \mathbf{f}_b je vektor sila rubnih čvorova RVE-a, dok matrice \mathbf{D} i \mathbf{H} predstavljaju koordinatne matrice rubnih čvorova RVEa prikazane u [2, 6]. Za dobivanje materijalne matrice \mathbf{C}_M , potrebno je naći vezu između inkremenata naprezanja $\Delta \boldsymbol{\sigma}_M$ i $\Delta \boldsymbol{\mu}_M$ s inkrementima deformacija $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_M$ i $\Delta \boldsymbol{\eta}_M$, kao što je to prikazano u izrazu (3). Potom se primjenom jednostavnog matematičkog postupka dobivaju se slijedeće relacije

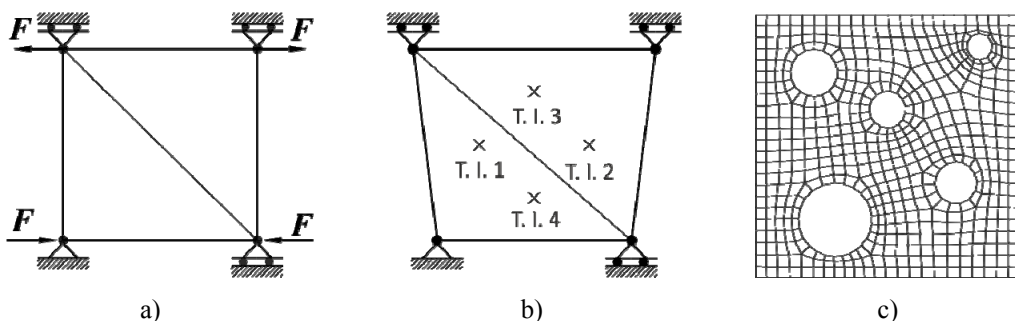
$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{\sigma\varepsilon} &= \frac{1}{V} \mathbf{D} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{D}^T, \quad \mathbf{C}_{\sigma\eta} = \frac{1}{V} \mathbf{D} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}^T, \\ \mathbf{C}_{\mu\varepsilon} &= \frac{1}{V} \mathbf{H} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{D}^T, \quad \mathbf{C}_{\mu\eta} = \frac{1}{V} \mathbf{H} \tilde{\mathbf{K}}_{bb} \mathbf{H}^T, \end{aligned} \quad (10)$$

koje predstavljaju vezu između materijalnih matrica na makro razini i kondenzirane krutosti RVE-a, $\tilde{\mathbf{K}}_{bb}$.

4 NUMERIČKI PRIMJER

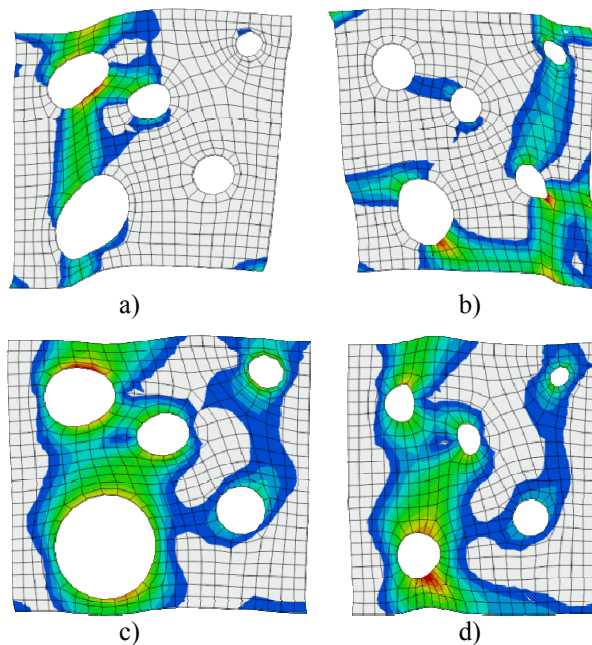
Prikazani algoritam mikro-makro analize verificiran je na problemu čistog savijanja. Pritom je razmatran kvadratni makro model duljine stranice 1 mm diskretiziran s dva trokutna konačna elementa, prikazan zajedno s pripadnim rubnim

uvjetima na slici 3a. Ovdje su odgovarajuće prve i druge derivacije pomaka povezane jednadžbama periodičnosti. Za definiranje ravnog lijevog i desnog brida, suspregnute su druge derivacije pomaka u pravcu normale na brid, zajedno s mješovitim drugim derivacijama. Odabrani materijal je odabran akademski primjer poroznog čelika, modula elastičnosti $E = 210 \text{ GPa}$ s Poissonovim faktorom $\nu = 0,3$. Granica tečenja materijala je $\sigma_y = 250 \text{ MPa}$, nakon koje dolazi do izotropnog očvršćenja materijala, pri čemu tangenti modul iznosi $E_T = 250 \text{ MPa}$. Model RVE-a, duljine stranice $0,2 \text{ mm}$, diskretiziran je s 508 konačnih elemenata i prikazan na slici 3c,. Sastoji se od slučajno raspoređenih poroznosti srednjeg polumjera $0,043 \text{ mm}$ površinskog udjela 13% . Deformirani oblik makro modela prikazan je na slici 3b.



Sl. 3 Problem čistog savijanja: a) makro model s rubnim uvjetima, b) deformirani oblik, c) RVE

Na slici 4 je prikazana raspodjela ekvivalentne plastične deformacije na deformiranim RVE-ima, za nekoliko karakterističnih točaka integracije na makrorazini. Položaj točaka integracije (T. I.) je prikazan na slici 3b.



Sl. 4 Raspodjela ekvivalentne plastične deformacije: a) T. I. 1, b) T. I. 2, c) T. I. 3, d) T. I. 4

Iz slike 4 je jasno vidljivo da deformirani oblici RVE-a odgovaraju položajima pojedinih točaka integracije, kao i da dolazi do izotropnog očvršćenja materijala matrice i pojave zona plastičnog tečenja. Kao što se može primijetiti, nakon formiranja plastične zone po cijeloj duljini, odnosno visini RVE-a, dolazi do svojevrsnog gubitka stabilnosti modela, gdje daljnji mehanizam deformiranja ovisi upravo o formiranoj zoni plastične deformacije.

5 ZAKLJUČAK

Prikazan je algoritam dvorazinskog mikro-makro modeliranja ponašanja heterogenih materijala primjenom računalne homogenizacije drugog reda u teoriji malih deformacija. Za diskretizaciju makro razine korišten je trokutni konačni element s C^1 kontinuitetom izveden u radu, dok je RVE diskretiziran četverokutnim konačnim elementom prvog reda s C^0 kontinuitetom. Razrađena je primjena poopćenih rubnih uvjeta periodičnosti i integralnog uvjeta mikro fluktuacija na RVE-u. Izvedeni numerički algoritam je implementiran u programski paket ABAQUS i verificiran na primjeru čistog savijanja.

Literatura

- [1] Abaqus 6.10.1, Dassault Systemes
- [2] Kaczmarczyk L., Pearce C.J., Bićanić N., „Scale transition and enforcement of RVE boundary conditions in second-order computational homogenization“, *Int. J. for Numer. Methods in Eng.*, 2008., **74**:506-522
- [3] Kouznetsova V.G., „Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials“, Ph. D. thesis, 2002., Technische Universiteit Eindhoven
- [4] Kouznetsova V.G., Geers M.G.D., Brekelmans W.A.M.: „Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials: a nested finite element solution strategy“, *Comput. Methods in Appl. Mech. and Eng.*, 2004., **193**:5525-5550
- [5] Lesičar T., Tonković Z., Sorić J., Čanžar P., „Multiscale Modelling Of Deformation Processes Of Nodular Cast Iron“, 7th Int. Congress of Croatian Society of Mech., 2012., Zadar
- [6] Miehe C., Koch A. (2002), „Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains“, *Arch. of Appl. Mech.*, **72**:300-317
- [7] Mindlin R.D., „Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity“, *Int. J. of Solids and Struct.*, 1965., **1**:417-438
- [8] Nguyen V.P., Stroeve M., Sluys L.J., „Multiscale continuous and discontinuous modelling of heterogeneous materials: A review on recent developments“, 2012., Delft Univ. of Technology
- [9] Toupin R.A., „Elastic materials with couple stresses“, *Arch. Rational Mech. Analysis.*, 1968., **11**:385-413

Autori:

Tomislav Lesičar, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, tel. 01/6168-514, fax. 01/6168-187, e-mail: tomislav.lesicar@fsb.hr, web: <http://www.fsb.hr/lnm/staff/>
Zdenko Tonković, tel. 01/6168-450, e-mail: zdenko.tonkovic@fsb.hr
Jurica Sorić, tel. 01/6168-103, e-mail: jurica.soric@fsb.hr