

Rješavanje problema krhkog, duktilnog i zamornog loma primjenom poopćenog modela faznih polja implementiranog u programski paket ABAQUS

Seleš, K.¹, Tomić, Z.¹, Tonković, Z.¹, Sorić, J.¹

Sažetak

Numeričko modeliranje iniciranja i rasta pukotine vrlo je interesantan i zahtjevan problem. Najnovija istraživanja pokazala su da metoda faznog polja (eng. *phase-field method*) ima veliki potencijal u modeliranju složenih procesa loma na relativno jednostavan način, čak i za slučaj trodimenzijskih problema. U ovom radu predložen je poopćeni model loma temeljen na teoriji faznog polja koji, ovisno o zadanim materijalnim svojstvima, može opisati krhki ili duktilni lom pri monotonom opterećenju, te nisko- i visokciklični zamorni lom. Model je temeljen na proširenju autorovog *staggered* algoritma [1] koji je prethodno verificiran i validiran na standardnim primjerima krhkog loma iz literature u [2] te na složenim mikrostrukturnim geometrijama u [3, 4]. Mogućnosti novorazvijenog modela prikazane su na primjeru heterogene mikrostrukture nodularnog lijeva dobivene metalografijom. Navedeni model implementiran je u komercijalni računalni paket ABAQUS temeljen na metodi konačnih elemenata. Kompletan izvorni kod zajedno s primjerima predstavljenim u ovom radu, uputama za primjenu i objašnjenjima javno je dostupan drugim istraživačima, studentima i inženjerima, promovirajući metodologiju loma primjenom teorije faznog polja.

Ključne riječi: analiza oštećenja i loma, metoda faznog polja, krhki i duktilni lom, zamor, ABAQUS.

¹ **Karlo Seleš, mag. ing.**, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, e-mail: karlo.seles@fsb.hr

¹ **Zoran Tomić, mag. ing.**, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, e-mail: zoran.tomic@fsb.hr

¹ **Prof. dr. sc. Zdenko Tonković**, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, e-mail: zdenko.tonkovic@fsb.hr

¹ **Prof. dr. sc. Jurica Sorić**, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, e-mail: jurica.soric@fsb.hr

1 Uvod

Degradacija i lom materijala poznati su problemi u inženjerskoj praksi koji često uzrokuju velika oštećenja konstrukcija koja mogu rezultirati katastrofalnim posljedicama, a u ekstremnijim slučajevima mogu ugroziti i ljudske živote. Predviđanje i prevencija oštećenja i loma materijala u ranoj fazi konstruiranja stoga je iznimno važno, i kao takvo, od velikog je interesa mnogim inženjerima i istraživačima. Numeričke simulacije nezaobilazan su dio konstruiranja proizvoda i značajan čimbenik u procjeni pouzdanosti i strukturalne cjelovitosti, predviđanju životnog vijeka modernih konstrukcija i strojnih komponentata, ali i razvoja novih materijala. U skladu s tim, predloženi su različiti numerički pristupi za modeliranje oštećenja i loma materijala.

Teorija faznog polja (eng. *phase-field modelling*) iznimno je popularna i primjena u području modeliranja loma samo je jedna od njenih mogućnosti. Temelji se na uvođenju kontinuirane varijable čijim se glatkim prijelazom razlikuju fizičke faze unutar određenog sustava. Na taj način u slučaju loma, razdvaja se oštećeni i neoštećeni dio materijala, aproksimirajući oštri diskontinuitet pukotine difuznim pojasom. Širina tog pojasa regulirana je parametrom duljinske skale, što metodu svrstava u kontinuumске metode modeliranja oštećenja i loma. Modeliranje loma metodom faznog polja potječe od varijacijskog pristupa krhkom lomu gdje je osnovna Griffithova teorija loma prilagođena u problem minimizacije energije [5]. Takav princip nalaže da pukotina može nastati ili rasti u čvrstom tijelu ukoliko rezultirajuća konfiguracija ima nižu ukupnu energiju u usporedbi s konfiguracijama u kojima nema nastajanja ili rasta pukotine. Smjerovi rasta pukotine prirodno se definiraju kao oni koji vode u konfiguraciju s minimalnom ukupnom energijom. Pukotine se dalje mogu granati ili spojiti ukoliko to dovodi do konfiguracije s nižom energijom od jednostavnog rasta postojećih pukotina, bez potrebe za uvođenjem dodatnih kriterija rasta oštećenja i loma. Regularizacijom tako izvedenog energijskog funkcionala, dobiva se sustav parcijalnih diferencijalnih jednadžbi koje u potpunosti određuju nastanak i rast pukotine. Aproksimacijom diskretne topologije pukotine na fiksnoj mreži konačnih elemenata zaobilazi se složeni problem praćenja površina pukotina i značajno pojednostavljuje numerička implementacija, posebno u trodimenzijskim postavkama.

Upravo je navedeno razlog popularnosti ove metode koja se pokazala izrazito uspješnom u rješavanju složenih procesa loma, uključujući nastanak, rast, grananje i srastanje pukotina [6, 7]. Uz veliki broj razvijenih modela faznih polja s različitom primjenom od krhkog ili duktilnog loma, preko multifizikalnih problema, tek je nedavno formulacija faznog polja proširena i na probleme zamornog loma [8], uglavnom pod pretpostavkom elastičnog ponašanja materijala što odgovara takozvanom visokocikličnom zamornom režimu. U ovom radu predložen je poopćeni model loma za istovremeno modeliranje krhkog, duktilnog i zamornog loma, ovisno o materijalnim svojstvima i načinu opterećivanja. Mogućnosti razvijenog modela prikazane su na primjeru heterogene mikrostrukture nodularnog lijeva dobivene metalografijom.

Određeni problemi u numeričkoj implementaciji modela unutar formulacije metode konačnih elemenata (MKE) i dalje postoje te su predmet intenzivnog istraživanja u znanstvenoj zajednici. Većina modela loma metodom faznog polja razvijena je u programima otvorenog koda temeljenim na metodi konačnih elemenata ili u obliku samostalnih algoritama. Na taj način značajno je ograničen potencijal primjene ove metode u praktičnim inženjerskim problemima izvan znanstvene zajednice. Stoga je predloženi model implementiran u komercijalni računalni

MKE paket ABAQUS [1], te je otvoreni kod algoritma, zajedno s ilustrativnim primjerima i detaljnim objašnjenjima objavljen i slobodno dostupan na adresi: <https://data.mendeley.com/datasets/p77tsyrbx2/3>.

Glavne prednosti implementacije unutar komercijalnog softvera su efikasno iskorištene, uključujući računalnu paralelizaciju i opciju brisanja elemenata kako bi se smanjilo vrijeme računanja; korištenje različitih rješavača koji omogućuju računanje primjera s opterećenjem zadanim putem pomaka i sila; korištenje naprednih kriterija konvergencije; korištenje automatske inkrementacije, opcije ponovnog pokretanja, odnosno nastavka analiza; opcije računanja problema kontakta.

2 Formulacija poopćenog modela loma metodom faznog polja

Osnovne jednadžbe metode faznog polja za modeliranje krhkog, duktilnog i zamornog loma prikazane su u tablici 1. U jednadžbi (1), Ψ^b predstavlja ukupnu energiju deformiranja akumuliranu u n -dimenzijskom tijelu Ω s pukotinom $\Gamma(t)$, dok Ψ^s označava disipacijsku energiju loma. Ukupna energija deformiranja sastoji se od elastične i plastične energije deformiranja, Ψ_e i Ψ_p , gdje je $\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p$ tenzor malih deformacija. Kako bi se za računanje razvoja pukotine u obzir uzelo samo vlačno stanje naprezanja, primijenjena je sferno-devijatorska dekompozicija elastične energije (3). Ovdje su λ i μ Laméove konstante, dok simbol $\langle \cdot \rangle$ predstavlja Macaulayovu zagradu. Plastična energija definirana je jednadžbom (4) gdje je σ^* nedegradirani tenzor naprezanja, a \mathbf{a} predstavlja tenzor povratnog naprezanja (eng. *backstress*). Plastično ponašanje materijala opisano je primjenom von Misesovog plastičnog modela s nelinearnim izotropnim (7) i kinematičkim (6) očvršćenjem. Pretpostavljen je asocijativni zakon tečenja gdje je λ plastični multiplikator, F funkcija tečenja, σ_y granica tečenja, dok $\dot{\varepsilon}_{eq}^p$ predstavlja ekvivalentnu plastičnu deformaciju. Kinematičko očvršćenje definirano je prema Chabocheovom modelu (6) s materijalnim parametrima C_k i γ_k , za svaki pojedinačni tenzor povratnog naprezanja. Izotropno očvršćenje definirano u funkciji akumulirane plastične deformacije s materijalnim parametrima σ_y^0 , Q_∞ i b .

U prikazanom modelu, diskretna geometrija pukotine aproksimirana je skalarnim parametrom faznog polja $\phi \in [0, 1]$, koji poprima vrijednosti 1 za potpuno oštećeno i 0 za neoštećeno stanje materijala. Parametrom duljinske skale l regulira se širina aproksimirane pukotine. Degradacija krutosti modela uslijed razvoja oštećenja uvedena je kvadratnom funkcijom $g(\phi) = (1 - \phi)^2$.

Zamornom funkcijom $\hat{F} = (\log(\bar{\psi}_\infty / \bar{\psi}))^2$, $\hat{F} \in [1, 0]$ degradira se energija loma, odnosno lomna materijalna svojstva (lomna žilavost G_c), tijekom cikličkog opterećenja konstrukcija. Varijabla akumulirane energije $\bar{\psi}_N = \bar{\psi}_{N-1} - \langle \psi_N - \psi_{N-1} \rangle_-$ određuje povijest cikličkog deformiranja gdje indeks N označava trenutni ciklus opterećenja. Takav model zamornog loma najviše dolazi do izražaja u visokocikličkom režimu opterećenja u kojem uglavnom nema pojave plastičnih deformacija. S druge strane, uvođenjem modela nelinearnog kinematičkog očvršćenja omogućena je točnija analiza ciklički opterećenih modela u tzv. niskocikličkom režimu zamora. Kako bi se spriječilo nefizikalno smanjenje oštećenja, u jednadžbi (8d) uveden je parametar povijesti deformiranja $\mathcal{H}(t) := \max_{\tau \in [0, t]} \tilde{D}(\psi_e^+(\tau))$ [9], gdje funkcija stanja

$\tilde{D} = \langle \psi_e^+ / \hat{F}(\bar{\psi}) \psi_c + \psi_p / \hat{F}(\bar{\psi}) \psi_c - 1 \rangle_+$ pokreće mehanizam nastajanja i rasta pukotine. Jednadžbe jake forme (8a)-(8e) u potpunosti opisuju nastanak i razvoj oštećenja i loma. $\bar{\mathbf{b}}$ i $\bar{\mathbf{t}}$ su eksterne površinske i volumenske sile, \mathbf{u} je polje pomaka, \mathbf{n} je vektor normale, dok $\partial\Omega$ označava površinu tijela. Više detalja o formulaciji metode faznog polja za problem loma može se naći u [6, 10].

Tablica 1. Osnovne jednadžbe poopćenog modela loma pomoću metode faznog polja

Funkcional slobodne energije:	$\Psi = \Psi^b + \Psi^s = \int_{\Omega/\Gamma} (\psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + \psi_p(\boldsymbol{\varepsilon}^p)) d\Omega + \hat{F}(\bar{\psi}) \int_{\Gamma} G_c d\Gamma. \quad (1)$
Regularizacija početnog funkcionala:	$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \boldsymbol{\varepsilon}^p, \phi, \bar{\psi}) = \int_{\Omega} \left\{ g(\phi) [\psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + \psi_p(\boldsymbol{\varepsilon}^p)] + \psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}^e) \right\} d\Omega + \hat{F}(\bar{\psi}) \cdot \psi_c \int_{\Omega} [2\phi + l^2 \nabla\phi ^2] d\Omega. \quad (2)$
Sferno-devijatorska dekompozicija	$\psi_e^+ := \frac{1}{2} \left(\lambda + \frac{2\mu}{n} \right) \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+^2 + \mu (\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{dev}} : \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{dev}}), \quad \psi_e^- := \frac{1}{2} \left(\lambda + \frac{2\mu}{n} \right) \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_-^2 \quad (3)$
Plastični model:	$\boldsymbol{\varepsilon}^p = \int_0^t (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\alpha}) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p dt, \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}^*}, \quad (4)$
	$F = \left\ \text{dev}[\boldsymbol{\sigma}^*] - \boldsymbol{\alpha} \right\ - \sqrt{\frac{2}{3}} \sigma_y(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eqv}}^p) \leq 0, \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{eqv}}^p = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p, \quad (5)$
	$\dot{\boldsymbol{\alpha}}_k = C_k \frac{1}{\sigma_y(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eqv}}^p)} (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\alpha}) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{eqv}}^p - \gamma_k \boldsymbol{\alpha}_i \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{eqv}}^p, \quad \boldsymbol{\alpha} = \sum_k \boldsymbol{\alpha}_k, \quad (6)$
	$\sigma_y(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eqv}}^p) = \sigma_y^0 + Q_{\infty} (1 - \exp[-b \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eqv}}^p]). \quad (7)$
Osnovne jednadžbe jake forme:	$\nabla \boldsymbol{\sigma} + \bar{\mathbf{b}} = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad (8a)$
	$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{on } \partial\Omega_{\bar{\mathbf{t}}}, \quad (8b) \quad -l^2 \Delta \phi + [1 + \mathcal{H}] \phi = \mathcal{H} \quad \text{in } \Omega, \quad (8d)$
	$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } \partial\Omega_{\bar{\mathbf{u}}}, \quad (8c) \quad \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \quad (8e)$

3 Numerička implementacija i numerički primjeri

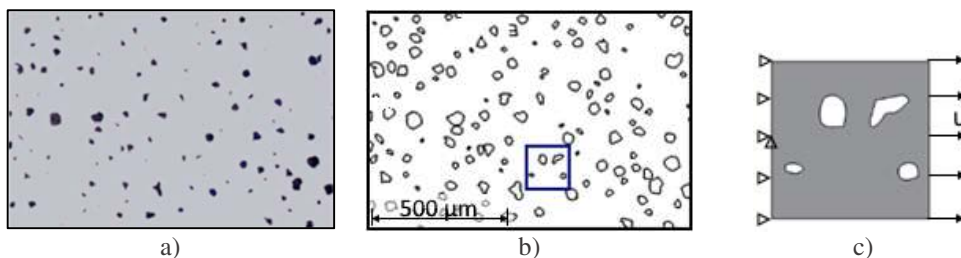
Prikazani model faznog polja implementiran je u formulaciju metode konačnih elemenata primjenom 2D četverokutnog konačnog elementa za analizu ravninskog stanja deformacija sa standardnim stupnjevima slobode pomaka i parametrom faznog polja ϕ kao dodatnim stupnjem slobode. Iste funkcije oblika primjenjuju se za interpolaciju oba polja, ϕ i \mathbf{u} . Za rješavanje jednadžbi konačnog elementa, u svom prethodnom radu [2] autori su predložili *staggered* algoritam s kontrolom reziduala kao uvjetom zaustavljanja iterativnog postupka. Kao što je već rečeno, algoritam je implementiran u programski paket Abaqus pomoću korisničkih rutina [11] te je otvoreno dostupan na Mendeley repozitoriju [1]. Više informacija o numeričkoj implementaciji može se pronaći u [2, 10].

Heterogena mikrostruktura nodularnog lijeva EN-GJS-400-18-LT proizvedenog Inmould postupkom lijevanja prikazana je na slici 1.a) dobivenoj metalografijom [12]. Razmatrani

materijal sastoji se od feritne matrice i grafitnih nodula čiji volumenski udio iznosi oko 7%. Uzorak veličine $161,7 \times 161,7 \mu\text{m}$ izabran je poštujući prosječni volumenski udio grafitnih nodula, kako je prikazano na slici 1.b). Grafitni noduli zamjenjeni su poroznostima. Odabrani parametar duljinske skale iznosi $l = 0,0025 \text{ mm}$. Uzorak je jednoliko diskretiziran s 27144 konačnih elemenata, čime se prema [9] zadržava omjer $h/l < 0,5$, gdje h predstavlja karakterističnu veličinu konačnog elementa. Elastoplastična svojstva materijala preuzeta su iz [13] i navedena u tablici 2.

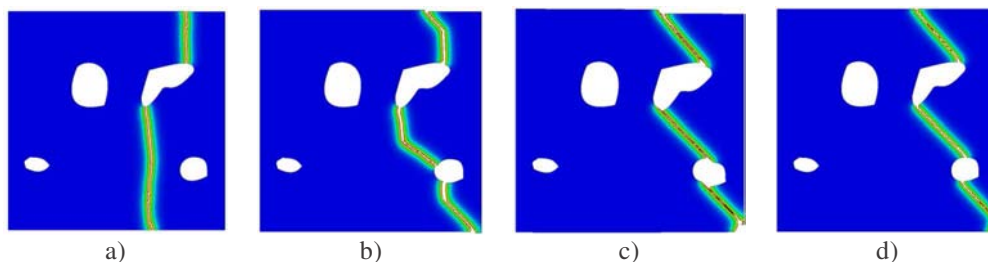
Tablica 2. Elastoplastična materijalna svojstva

E [GPa]	ν [-]	σ_y^0 [MPa]	Q_∞ [MPa]	b [-]	C_I [MPa]	γ_I [-]	C_2 [MPa]	γ_2 [-]
140	0,3	123	95	18	22,734	261,8	136 029	2 113,5

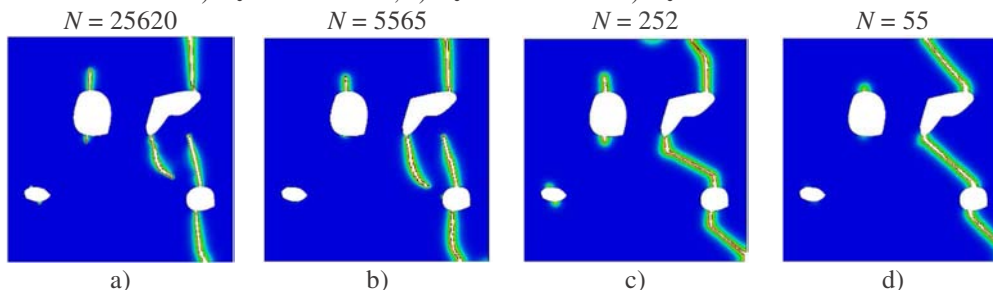


Slika 1. a) Metalografska slika mikrostrukture EN-GJS-400-18-LT [10, 11], b) odabir uzoraka koji zadovoljavaju prosječni udio grafitnih nodula, c) prikaz zadanih rubnih uvjeta

Uzorak je najprije monotono opterećen pritom varirajući parametar lomne žilavosti, G_c . Prema rezultatima prikazanim na slici 2. jasno je vidljiva mogućnost predloženog modela za rješavanje problema krhkog i duktilnog loma. Strukturni odziv navedenih analiza prikazan je na slici 4.a), gdje se vidi očit prijelaz između krhkog i duktilnog ponašanja.

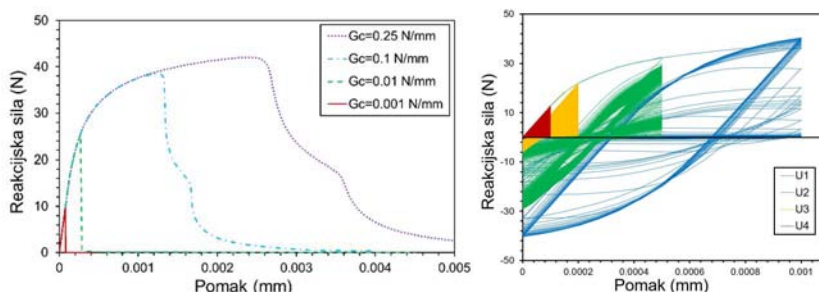


Slika 2. Monotono opterećenje. Slika loma dobivena za a) $G_c = 0.001 \text{ N/mm}$, b) $G_c = 0.01 \text{ N/mm}$, c) $G_c = 0.1 \text{ N/mm}$ i d) $G_c = 0.25 \text{ N/mm}$



Slika 3. Cikličko opterećenje. Slika loma dobivena amplitudom pomaka a) $u = 0.0001 \text{ mm}$, b) $u = 0.002 \text{ mm}$, c) $u = 0.005 \text{ mm}$, i d) $u = 0.001 \text{ mm}$

Isti je uzorak zatim ciklički opterećen sinusoidalnim pomakom. Slika 3 prikazuje putanju zamornog loma za 4 različite amplitude pomaka nakon određenog broja ciklusa N . Očito je da zamorni lom na modelu s višom amplitudom nastaje nakon manjeg broja ciklusa, te je nalik slici duktilnog loma pri monotonom opterećenju. Strukturni odziv cikličkih analiza prikazan je na slici 4.b) te jasno prikazuje prijelaz između nisko- i visokocikličkog režima zamora.



Slika 4. Dijagrami sila-pomak za a) monotono i b) cikličko opterećenje

4 Zaključak

U radu su testirane mogućnosti poopćenog modela faznih polja za rješavanje problema krhkog, duktilnog i zamornog loma čvrstih materijala. Provedena je analiza loma uzorka heterogene mikrostrukture dobivene na temelju metalografskih snimaka nodularnog lijeva. Dobiveni rezultati prikazuju mogućnosti poopćenog modela u rješavanju iniciranja i rasta krhkih i duktilnih pukotina uslijed monotonog opterećenja, ovisno o zadanim materijalnim svojstvima, te nastajanje i rast nisko- i visokocikličkog zamornog loma, ovisno o nametnutoj amplitudi opterećenja.

Literatura

- [1] K. Seleš, Mendeley data 2018, doi:10.17632/p77tsyrbx2.3
- [2] K. Seleš, T. Lesičar, Z. Tonković, J. Sorić, Eng Fract Mech., Vol. 205 (2018) 370-386. doi: 10.1016/j.engfracmech.2018.09.027
- [3] K. Seleš, A. Jurčević, Z. Tonković, J. Sorić, Theor. Appl. Fract. Mec., Vol. 100 (2019) 289-297. doi: 10.1016/j.tafmec.2019.01.022
- [4] K. Seleš, T. Lesičar, Z. Tonković, J. Sorić, Key Eng. Mater., Vol. 774 (2018) 632-637. doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.774.632
- [5] B. Bourdin, G.A. Francfort, J.J. Marigo, J Mech Phys Solids, Vol. 48(4) (2000) 797-826. doi: 10.1016/S0022-5096(99)00028-9
- [6] L. De Lorenzis, T. Gerasimov, Chapter in book (2020), doi: 10.1007/978-3-030-37518-8_3
- [7] K. Seleš, Z. Tonković, A. Jurčević, J. Sorić, Key Eng. Mater., Vol. (2019) 482-487. doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.827.482
- [8] P. Carrara, M. Ambati, R. Alessi, L. De Lorenzis, Comput Method Appl M, 361 (2020) 29. doi: 10.1016/j.cma.2019.112731
- [9] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger, Comput Method Appl M, 199(45-48) (2010) 2765-2778. doi: 10.1016/j.cma.2010.04.011
- [10] K. Seleš, PhD Thesis, University of Zagreb (2020) (predano povjerenstvu na čitanje).
- [11] Abaqus 6.14-1, Dassault Systemes Simulia Corp., Providence, RI, USA, 2014.
- [12] P. Canzar, Z. Tonkovic, J. Kodvanj, Mater Sci Eng A, Vol. 556 (2012) 88-99. doi: 10.1016/j.msea.2012.06.062
- [13] P. Čanžar, PhD Thesis, University of Zagreb (2012)