

POOPĆENI RUBNI UVJETI PERIODIČNOSTI U RAČUNALNOJ HOMOGENIZACIJI DRUGOG REDA

Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J.

Sažetak: U radu je prikazana metoda višerazinskog modeliranja procesa deformiranja heterogenih materijala na dvije razine primjenom računalne homogenizacije drugog reda uz pretpostavku malih deformacija. Detaljnije je istražena primjena poopćenih uvjeta periodičnosti na reprezentativnom volumenskom elementu (RVEu). Ispitan je utjecaj izbora metode numeričke integracije za implementaciju integralnog uvjeta mikrofluktacija na rubne čvorove RVEa. Za diskretizaciju makromodela primijenjen je dvodimenzijски trokutni element s C^1 kontinuitetom, dok je RVE diskretiziran četverokutnim elementom prvog reda. Učinkovitost i točnost prikazane metode provjerena je na problemu smičnog sloja.

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

1 UVOD

U današnje vrijeme kada tržišni zahtjevi traže čim jeftinije materijale uz sve bolje karakteristike, ispitivanje utjecaja mikrostrukture materijala na njegova mehanička svojstva ima sve značajniju ulogu kod razvoja novih materijala, kao i eksploatacije postojećih. U tu svrhu, razvijena je skupina numeričkih metoda višerazinskog modeliranja, koje razmatraju ponašanje mikrostrukture materijala (RVEa), rezultate analize uprosječuju po volumenu RVEa (homogenizacija) te ih koriste u daljnjoj analizi makromodela.

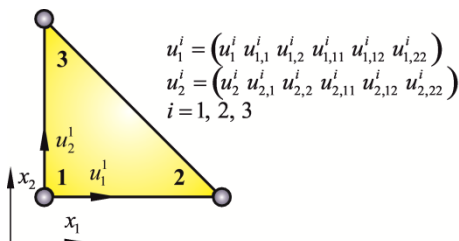
S obzirom na problem rubnih vrijednosti koji se rješava na makro- i mikromodelu, razlikuju se metode homogenizacije prvog [6] i drugog reda [2, 3]. Za diskretizaciju makromodela kod homogenizacije drugog reda se primjenjuju konačni elementi višeg reda koji zadovoljavaju C^1 kontinuitet. Kod računalne homogenizacije drugog reda RVE i dalje zadržava C^0 kontinuitet. Zbog različitih teorija primijenjenih na makro- i mikrorazini nije moguće ostvariti volumenski prosjek svih varijabli makrorazine na mikrorazini. Navedena jednakost ostvaruje se dodatnim formulacijama varijabli višeg reda na RVEu te pomoću integralnog uvjeta mikrofluktacija. Istraživanja su pokazala da rubni uvjeti periodičnosti na RVEu daju najrealnije rezultate homogenizacije [6].

U radu je ukratko objašnjen algoritam višerazinskog modeliranja heterogenih materijala primjenom računalne homogenizacije drugog reda. Makrorazina je diskretizirana dvodimenzijским trokutnim konačnim elementom za ravninsko stanje deformacija, koji zadovoljava C^1 kontinuitet. Detaljno su razmotreni poopćeni rubni uvjeti periodičnosti, kao i implementacija integralnog uvjeta mikrofluktacija na rubove RVEa. Svi numerički algoritmi ugrađeni su u programski paket ABAQUS/Standard [1] primjenom korisničkih rutina.

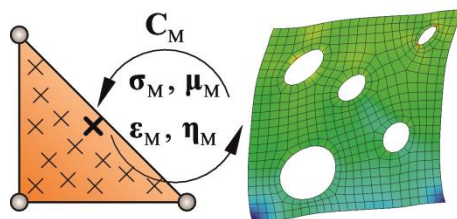
2 MIKRO-MAKRO ALGORITAM

Za provedbu homogenizacije drugog reda izveden je dvodimenzijski trokutni konačni element s C^1 kontinuitetom, temeljen na gradijentnoj teoriji [7]. Element je prikazan na slici 1. Kao što je vidljivo, element ima 36 stupnjeva slobode. Detaljan izvod konačnog elementa prikazan je u [4, 5].

U mikro-makro algoritmu makrorazinu čini makromodel, diskretiziran prethodno opisanim trokutnim elementima. Mikrorazinu predstavlja RVE, diskretiziran četverokutnim elementima prvog reda. U svakoj točki integracije makromodela provodi se analiza RVEa. Gradijent pomaka ϵ_M i gradijent gradijenta pomaka η_M na makrorazini se putem poopćenih rubnih uvjeta periodičnosti transformiraju u pomake rubnih čvorova RVEa. Nakon homogenizacije dobivaju se tenzori napreznja σ_M i sekundarnog napreznja μ_M te materijalne matrice C_M , koji se prenose na makrorazinu (slika 2). Više detalja o računalnoj homogenizaciji drugog reda može se naći u [2, 5].



Sl. 1 Trokutni konačni element s C^1 kontinuitetom



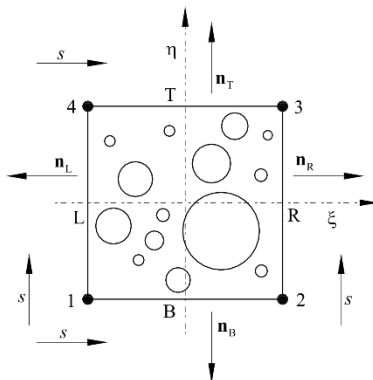
Sl. 2 Shema mikro-makro algoritma

3 POOPĆENI RUBNI UVJETI PERIODIČNOSTI

U računalnoj homogenizaciji drugog reda polje pomaka koje se dodjeljuje na rubove RVEa opisano je pomoću Taylorovog reda kao

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

gdje je \mathbf{x} prostorna koordinata na rubovima RVEa, definiranog prema slici 3, a \mathbf{r} predstavlja polje mikrofluktuacija. Ovdje je veličinama s makro razine dodijeljen indeks "M", dok su veličine s mikro razine označene indeksom "m".



Sl. 3 Reprezentativni volumenski element

Izraz (1) može se zapisati u obliku

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{D}^T \boldsymbol{\varepsilon}_M + \mathbf{H}^T \boldsymbol{\eta}_M + \mathbf{r}, \quad (2)$$

gdje su \mathbf{D} i \mathbf{H} koordinatne matrice

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2x & 0 & y \\ 0 & 2y & x \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2x^2 & 0 & 2y^2 & 0 & xy & 0 \\ 0 & 2y^2 & 0 & 2x^2 & 0 & xy \end{bmatrix}.$$

Kod poopćenih rubnih uvjeta periodičnosti pomaci kutnih čvorova 2, 3 i 4 se računaju eksplicitno prema izrazu

$$\mathbf{u}_i = (\mathbf{D}_i^T - \mathbf{D}_1^T) \boldsymbol{\varepsilon}_M + (\mathbf{H}_i^T - \mathbf{H}_1^T) \boldsymbol{\eta}_M, \quad i = 2, 3, 4. \quad (4)$$

Kao što je vidljivo iz izraza (4), pomak kutnog čvora 1 je suspregnut ($\mathbf{u}_1 = \mathbf{0}$) zbog eliminacije pomaka krutog tijela. Na temelju poopćenog rubnog uvjeta periodičnosti vrijede jednakosti

$$\mathbf{r}_L(s) = \mathbf{r}_R(s), \quad \mathbf{r}_T(s) = \mathbf{r}_B(s). \quad (5)$$

Raspisivanjem polja pomaka lijevog („L“) i desnog („R“) ruba RVEa pomoću (2) slijede izrazi

$$\mathbf{u}_R = \mathbf{D}_R^T \boldsymbol{\varepsilon}_M + \mathbf{H}_R^T \boldsymbol{\eta}_M + \mathbf{r}_R, \quad \mathbf{u}_L = \mathbf{D}_L^T \boldsymbol{\varepsilon}_M + \mathbf{H}_L^T \boldsymbol{\eta}_M + \mathbf{r}_L. \quad (6)$$

Uvrštavanjem prve jednakosti iz izraza (5) u izraz (6) nakon grupiranja varijabli slijede jednadžbe periodičnosti desnog i lijevog ruba RVEa

$$\mathbf{u}_R - \mathbf{u}_L = (\mathbf{D}_R^T - \mathbf{D}_L^T) \boldsymbol{\varepsilon}_M + (\mathbf{H}_R^T - \mathbf{H}_L^T) \boldsymbol{\eta}_M. \quad (7)$$

Analogno prethodno prikazanom postupku dobivaju se i jednadžbe periodičnosti gornjeg („T“) i donjeg („B“) ruba RVEa

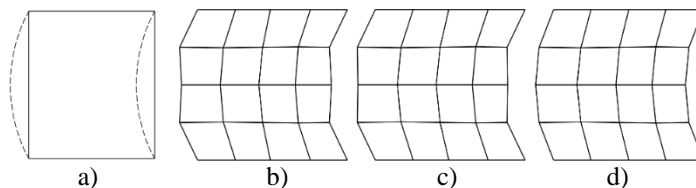
$$\mathbf{u}_T - \mathbf{u}_B = (\mathbf{D}_T^T - \mathbf{D}_B^T) \boldsymbol{\varepsilon}_M + (\mathbf{H}_T^T - \mathbf{H}_B^T) \boldsymbol{\eta}_M. \quad (8)$$

Integralni uvjet mikrofluktacija koji se javlja kod rubnih uvjeta periodičnosti izveden je u [5], a svodi se na dvije integralne relacije koje vežu pomake rubnih čvorova lijevog i donjeg ruba RVEa

$$\int_{A_L} \mathbf{u}_L dA = \boldsymbol{\varepsilon}_M^T \int_{A_L} \mathbf{x}_L dA + \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_M \int_{A_L} (\mathbf{x}_L^T \mathbf{x}_L) dA, \quad \int_{A_B} \mathbf{u}_B dA = \boldsymbol{\varepsilon}_M^T \int_{A_B} \mathbf{x}_B dA + \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_M \int_{A_B} (\mathbf{x}_B^T \mathbf{x}_B) dA. \quad (9)$$

Prilikom implementacije izraza (9) u programski paket ABAQUS ispitano je nekoliko metoda numeričke integracije kao što su Booleovo, Simpsonovo i trapezno pravilo. Usporedba je napravljena na jediničnom homogenom RVEu diskretiziranom pomoću 16 četverokutnih elemenata. Na rubove RVEa su dodijeljeni pomaci koji odgovaraju sekundarnoj deformaciji $\eta_{221} = u_{1,22} = 0,02$, što je prikazano na slici 4a. Sa slike je vidljivo da u kutnim čvorovima nema pomaka. Jednadžbe periodičnosti (7) i (8) također su jednake nuli. Odnosno, vidljivo je da bez integralnog uvjeta mikrofluktacija nije moguć prijenos potpunog tenzora sekundarnih deformacija. Očekivano, svaka metoda numeričke integracije zadovoljava integralne relacije (9). S druge strane, deformirani oblici RVEa se razlikuju i jedino trapezno pravilo daje fizikalno realan deformirani oblik RVEa, što je prikazano na slici 4d. Iz slike 4 je očito da jedino trapezno pravilo opisuje glatko zakrivljene rubove RVEa, dok Booleovo i Simpsonovo pravilo stvaraju

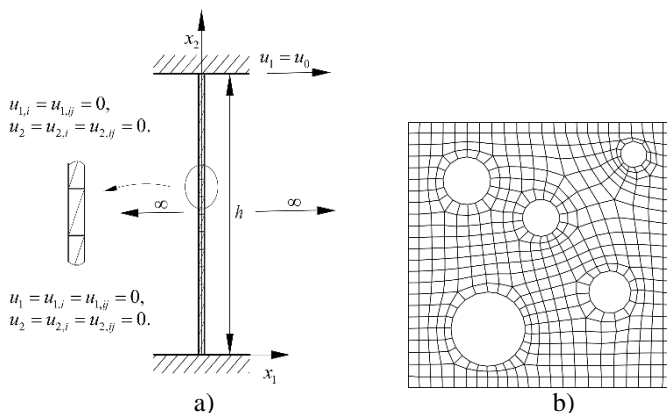
nazubljeni lijevi i desni brid RVEa s cik-cak rasporedom čvorova, što je posljedica neodgovarajuće raspodjele težinskih faktora primijenjenih na pomake čvorova.



Sl. 4 Usporedba deformiranih oblika RVEa dobivenih a) analitički te različitim metodama numeričke integracije: b) Booleovo pravilo, c) Simpsonovo pravilo, d) trapezno pravilo

4 NUMERIČKI PRIMJER

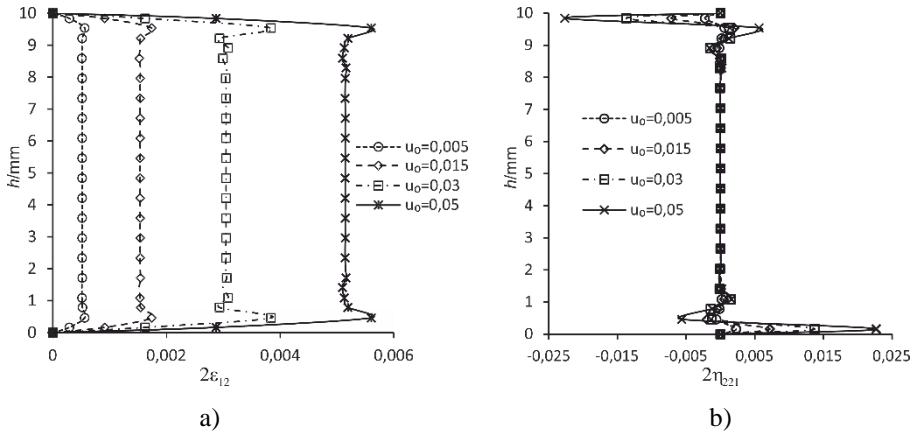
Algoritam višerazinskog modeliranja je testiran na problemu smičnog sloja (*shear layer problem*), često korištenog u literaturi [2, 3, 5]. Makromodel čini sloj heterogenog materijala visine $h = 10$ mm i beskonačne duljine, što omogućava diskretizaciju makromodela jednim redom elemenata po visini. Razmatrane su 3 različite diskretizacije makromodela, s 2, 4 i 8 elemenata po visini sloja, na način prikazan na slici 6a. Za materijal je odabran akademski primjer poroznog čelika s elastoplastičnom matricom i linearnim izotropnim očvršćenjem. Modul elastičnosti matrice E je 210 GPa, a Poissonov faktor 0,3. Granica tečenja iznosi $\sigma_y = 250$ MPa, dok je elastoplastični tangenti modul $E_T = 250$ MPa. RVE duljine stranice 0,2 mm diskretiziran je s 508 četverokutnih elemenata, što je prikazano na slici 6b. Sastoji se od 13% proizvoljno razmještenih šupljina srednjeg polumjera 0,043 mm. Rubni uvjeti makromodela prikazani su na slici 6a, gdje je $i, j = 1, 2$. Lijevi i desni brid vezani su jednadžbama periodičnosti što daje neovisnost rješenja o koordinati x_1 , dok je na gornjem rubu makromodela dodijeljen horizontalni pomak $u_0 = 0,05$ mm u nekoliko inkremenata.



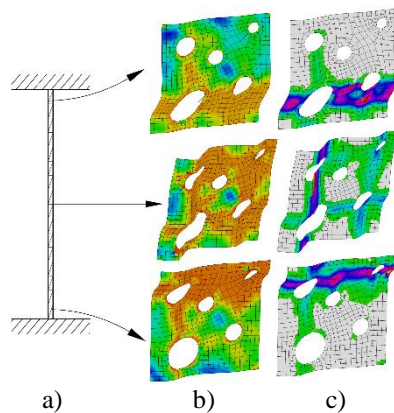
Sl. 6 Smični sloj: a) diskretizacija makromodela, b) reprezentativni volumenski element

Raspodjela posmične i sekundarne deformacije po visini makromodela prikazana je na slikama 7 i 8. Sa slike 7 je vidljivo da kruti rubni uvjeti u uklještenjima uzrokuju male deformacije uz njih, ali se zato javljaju veliki gradijenti sekundarne deformacije η_{221} .

Pošto je u posmičnoj deformaciji ($2\varepsilon_{12} = u_{1,2} + u_{2,1}$) prvi član dominantan, a $\eta_{221} = u_{1,22}$, krivulje sa slike 7b zapravo predstavljaju derivacije pripadnih krivulja sa slike 7a. Važno je napomenuti da je $u_{1,22}$ čvorni stupanj slobode elementa na makrorazini. Slika 8 prikazuje raspodjelu Von Misesovih ekvivalentnih napreznja i ekvivalentne plastične deformacije na nekoliko karakterističnih RVEova za pomak $u_0 = 0,05 \text{ mm}$.



Sl. 7 Raspodjela deformacija po visini makromodela za različite vrijednosti u_0 : a) posmična deformacija, ε_{12} , b) sekundarna deformacija, η_{221}



Sl. 8 Raspodjela mikrovarijabli u pojedinim točkama integracije makromodela za $u_0 = 0,05 \text{ mm}$
a) makromodel, b) ekvivalentna napreznja prema Von Misesu, c) ekvivalentna plastična deformacija

Na slici 8b razlikuju se tri karakteristična područja. Na RVEovima smještenim blizu uklještenja uz posmičnu deformaciju javljaju se i njezini gradijenti (slika 7b), što na kraju rezultira razvojem plastičnih zona po RVEu između najvećih šupljina. Na RVEu u sredini makromodela prisutan je čisti smik, jer gradijent deformacije iščezava (slika 7b). Na taj način se plastične zone šire po čitavom RVEu i povezuju sve šupljine. Iz slike 8c vidljiva su lokalna područja velikih plastičnih deformacija na kojima dolazi do razvoja

smičnog sloja, po kojem na kraju dolazi do popuštanja materijala, odnosno plastičnog kolapsa makromodela.

5 ZAKLJUČAK

Prikazan je algoritam dvorazinskog modeliranja procesa deformiranja heterogenih materijala primjenom računalne homogenizacije drugog reda na mikrorazini, uz pretpostavku malih deformacija. Za diskretizaciju makromodela izveden je trokutni konačni element s C^1 kontinuitetom, dok je RVE diskretiziran C^0 četverokutnim konačnim elementom prvog reda. Prikazan je detaljan izvod poopćenih rubnih uvjeta periodičnosti. Na jednostavnom primjeru zakrivljenosti homogenog RVEa ispitan je utjecaj težinskih faktora različitih metoda numeričke integracije, potrebnih za implementaciju integralnog uvjeta mikrofluktuacija, koji se javlja kod rubnih uvjeta periodičnosti. Rezultati su pokazali da jedino trapezno pravilo daje fizikalno realističan deformirani oblik RVEa. Izvedeni numerički algoritam je implementiran u programski paket ABAQUS i verificiran na primjeru smičnog sloja.

Zahvala

Rad je izrađen u okviru RCOP projekta "Centre of Excellence for Structural Health" (CEEStructHealth) sufinanciranog iz sredstava Europske unije (ugovor IPA2007/HR/16IPO/001-040513).

Literatura

- [1] ABAQUS 6.12-1, Dassault Systemes
- [2] Kaczmarczyk, L. K., Pearce, C. J., Bicanic, N., "Scale transition and enforcement of RVE boundary conditions in second-order computational homogenization", International Journal for Numerical Methods in Engineering, **74**, 3, 2008, 506-522.
- [3] 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", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **193**, 2004, 5525-5550.
- [4] Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J., "C1 Continuity Finite Element Formulation In Second-Order Computational Homogenization Scheme", Journal of Multiscale Modelling, **04**, 04, 2012, 19.
- [5] Lesičar, T., Tonković, Z., Sorić, J., "A Second-Order Two-Scale Homogenization Procedure Using C1 Macrolevel Discretization", Computational Mechanics, 2014, DOI 10.1007/s00466-014-0995-3
- [6] Miehe, C., Koch, A., "Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains", Archive of Applied Mechanics, **72**, 4-5, 2002, 300-317.
- [7] Mindlin, R. D., "Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity", International Journal of Solids and Structures, **1**, 4, 1965, 417-438.

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