

VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ

*Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 702*

*ISSN 1213-418X*

**Vladislav Kozák**

**VÝPOČTOVÉ MODELOVÁNÍ  
VÝVOJE POŠKOZENÍ V MATERIÁLECH  
SE SLOŽITOU VNITŘNÍ STRUKTUROU  
POMOCÍ METODY KONEČNÝCH PRVKŮ**



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ  
FAKULTA STAVEBNÍ  
ÚSTAV MATEMATIKY A DESKRIPTIVNÍ GEOMETRIE

Ing. Vladislav Kozák, CSc.

**VÝPOČTOVÉ MODELOVÁNÍ VÝVOJE POŠKOZENÍ  
V MATERIÁLECH SE SLOŽITOU  
VNITŘNÍ STRUKTUROU POMOCÍ METODY  
KONEČNÝCH PRVKŮ**

COMPUTATIONAL MODELLING OF FAILURE DEVELOPMENT  
IN MATERIALS WITH COMPLEX INTERNAL STRUCTURE USING  
FINITE ELEMENT METHOD

ZKRÁCENÁ VERSE HABILITAENÍ PRÁCE  
OBOR: KONSTRUKCE A DOPRAVNÍ STAVBY



BRNO 2021

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

Metoda konečných prvků, modifikovaná metoda konečných prvků, lokální přístup, šíření trhliny, kohezní prvky, GTN model, vláknové kompozity.

## **KEYWORDS**

Finite element method, extended finite element method, local approach, crack propagation, GTN model, fibre composites.

## **MÍSTO ULOŽENÍ**

Originál práce je uložen v archívu Oddělení pro vědu a výzkum Fakulty stavební Vysokého učení technického v Brně, Veverí 331/95, 602 00 Brno.

# Obsah

Představení autora	4
1 Úvod	5
2 Teoretické základy	7
2.1 Použití metody metody konečných prvků na řešení nestandardních úloh . . . . .	7
2.2 Historie lokálního přístupu . . . . .	8
2.3 Modelování šíření trhliny . . . . .	10
2.4 Vláknové kompozity pro stavebnictví a XFEM . . . . .	13
3 Vlastní výsledky - komentář publikovaných prací	16
3.1 Přímé aplikace MKP . . . . .	16
3.2 Lokální přístup . . . . .	19
3.3 GTN model a použití kohezních prvků . . . . .	21
3.4 Modelování porušení stavebních kompozitů . . . . .	25
4 Shrnutí dosažených výsledků	29
5 Literatura	30
6 Vybrané články komentované v práci	33
7 Abstrakty	35

# Představení autora

**Jméno a příjmení:** Vladislav Kozák

**Datum narození:** 28. 8. 1954 v Olomouci

**Adresa zaměstnání:**

Ústav matematiky a deskriptivní geometrie,  
Fakulta stavební VUT v Brně Veveří 331/95,  
602 Brno, Česká republika  
Telefon: 541 147 602, email: kozak.v@fce.vutbr.cz



**Vzdělání, pedagogické a vědecké hodnosti:**

1960-1969 ZŠ Leningradská, nyní Jana Babáka, Brno.  
1969-1973 Gymnasium Lerchova, Brno.  
1973-1978 FE VUT Brno, obor Elektronické počítače.  
1981-1983 VUT Brno, PGS Numerické metody v inženýrské praxi.  
1981-1988 PhD. (CSc.) na AV ČR, Fyzikální metalurgie a mezní stavy materiálů.

**Zaměstnání, pracovní zařazení a funkce:**

1978 – 1990 Ústav fyzikální metalurgie ČAV.  
Vedoucí skupiny numerických metod, výuka numerické matematiky na FAST VUT.  
1990 - 1991 Ústav fyziky materiálů AV ČR. Vědecký pracovník skupiny Lom při creepu.  
1991 - 2020 Ústav fyziky materiálů AV ČR. Výzkumný pracovník skupiny Křehký lom.  
2020 – dosud Vysoké učení technické v Brně, Fakulta stavební. Ústav matematiky a deskriptivní geometrie. Odborný asistent.

**Odborné a výzkumné zaměření:**

Numerické metody a výpočetní technika. Programy pro řízení experimentů pro laboratoře. Numerické modelování zaměřené na mechaniku kontinua, specialista na Ansys a Abaqus. Predikce lomové houževnatosti, modelování šíření trhliny v konstrukčních materiálech. Programovací jazyky Fortran, C++, Matlab. Aktivní účast v komisích TC1 a TC8 ESIS (modelování elastoplasticity a poškození) (European structural integrity society).

**Výzkumné projekty:**

Řešitel či spoluřešitel 6 projektů GAČR, člen týmu několika dalších projektů GAČR a řady mezinárodních projektů. Z těch lze zdůraznit projekty Nato SfP project No 972655 a Rolicer EU-FP7-NMP ID 263476 (modelování trhlin a poškození keramik). Spolupráce s Ukrajinskou Akademií věd, Metz University of Technology.

**Pedagogická činnost:**

Výuka numerických metod a matematiky II a III na FAST VUT Brno. Školitel doktorandů na FS VUT Brno oboru Inženýrská mechanika FS VUT Brno 2000-2008, celkový počet doktorandů 4, 2 obhájili, 2 skončili pouze doktorskou státní zkouškou.

**Publikační činnost:**

Více než 150 publikací. Celkový počet citací bez autocitací dle Web of Science 240, za posledních 5 let 62, H-index podle WOS 9.

# 1 Úvod

S vývojem nových zařízení a komponent je v dnešní době stále více spojována otázka zajištění bezpečnosti jejich provozu a predikce jejich životnosti. V případě konstrukcí může být přímo závislá na výskytu defektů, které mohou vzniknout již v etapě výroby nebo během provozu. Jedním z konceptů, které jsou využívány v konstrukci a hodnocení bezpečnosti, je soubor teorií a metod označovaný jako lomová mechanika. Tento vědní obor spojuje v sobě mechaniku kontinua s materiálovým inženýrstvím, popisuje chování defektů, např. trhlin, v konstrukcích. Jedná se o komplikovaný vztah defekt-napětí-materiál. Lepším pochopením těchto vztahů lze dosáhnout úspor u nových konstrukcí nebo prodloužení životnosti stávajících konstrukcí.

Snahou lomové mechaniky je popis, popřípadě predikce chování těles obsahujících vadu často typu trhliny. Trhliny mohou v mnoha případech vést až k úplnému porušení konstrukce v důsledku vzniku lomu. Existují dva základní přístupy pro odvození podmínek okamžiku iniciace nestabilního šíření trhliny. Podstatou prvního je aplikovatelnost teorie nejslabšího článku, druhý model uvažuje kumulaci poškození v průběhu zatěžování. Porušování konstrukčních materiálů je chápáno jako kontinuální proces, u kterého dochází ke vzájemnému prolnutí stádií plastické deformace, nukleace a iniciace trhlin. Koncové stádium ve vývoji porušování těles, které je předmětem zkoumání lomové mechaniky je šíření trhlin (nestabilní nebo stabilní). Cílem presentovaných prací bylo, jak zjistit vzájemné vztahy mezi fyzikálními zákonitostmi a vlastní fyzikální podstatou procesu porušování na straně jedné a teorií mechaniky kontinua na straně druhé.

Současné studie se zaměřují na rozpracování druhého z výše uvedených problémů. Je jím zmíněná transferabilita materiálových charakteristik. Rozdílné lomové houževnatosti můžeme změřit při odlišných konfiguracích zkušebních těles a defektů. Důvodem nesouladu je skutečný stav rozložení napětí v okolí defektu a různý rozsah plastické deformace. Nejenom tyto skutečnosti komplikují použití lomové mechaniky v praxi, uvedenému problému je věnována kapitola zaměřená na problematiku lokálního přístupu. Ta ukazuje koncepci odlišnou od standardní lomové mechaniky a pokouší se definovat mechanismus porušení veličinami nepopisujícími globální napěťové pole, ale veličinami vycházejícími ze znalosti rozložení napětí/deformace v celém tělese.

Mezi efektivní nástroje, které přispívají k objasnění hledaných vztahů, patří modely, jež využívají numerických metod. V předložené práci se vychází většinou z použití metody konečných prvků (dále MKP), mnohdy na hranicích použitelnosti klasických software MKP, detailněji v kapitole přímých a nepřímých aplikací MKP. Nové metody převážně v oblasti modelování poškození jsou soustředěny ve třetí kapitole, která je věnována modelování šíření trhliny jak pomocí mechaniky poškození (použita modifikace Gursona-Tvergaard-Needlemana) či použití kohezních prvků implementovaných pomocí uživatelské subroutiny do systému Abaqus. Používání kompozitních materiálů s cementovou maticí a výztužnými vlákny rozličného původu pro konstrukční účely si vynucuje věrohodnou výpočtovou predikci jejich mechanických vlastností, především nebezpečí postupného vzniku mikrotrhlin a makrotrhlin. V poslední kapitole komentovaných prací je ukázána možnost de-

terministické výpočtové predikce tohoto fyzikálního procesu s využitím kvazistatického viskoelastického materiálového modelu a kohezních kontaktů, metody časové diskretizace a rozšířené metody konečných prvků pro dvourozměrné úlohy.

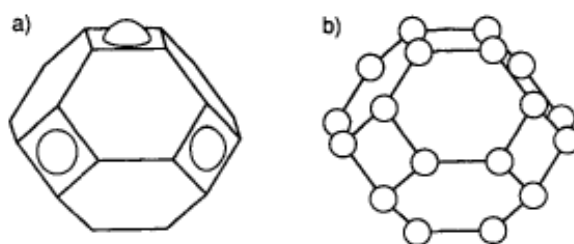
Prosazování netradičních materiálů, konstrukcí a technologií v moderním stavebnictví vyžaduje i nové přístupy k vyšetřování jejich fyzikálních vlastností, při nichž se nelze spoléhat na ty osvědčené. Simulace chování materiálových vzorků, konstrukčních prvků i staveb jako celku se stává nezbytnou.

## 2 Teoretické základy

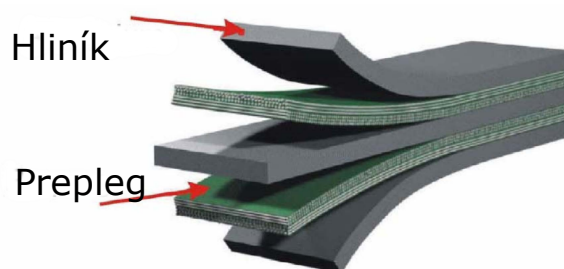
Tato kapitola si klade za cíl uvést čtenáře do řešené problematiky a naznačit některé otázky, na které se autor této práce snaží navázat v kapitole věnované vlastním výsledkům.

### 2.1 Použití metody metody konečných prvků na řešení nestandardních úloh

Zde jsou specifikovány teoretické podklady pro první kapitolu věnovanou komentovaným publikovaným pracím. První skupina se zaměřuje na speciální problémy modelování creepového chování materiálů, speciálně na procesy probíhající při stlačování kovového prášku či při zatěžování kompozitů s kovovou maticí. Druhou skupinu představují vláknové lamináty GLARE, jež byly vyvíjeny pro modernizaci letadel Airbus. Třetí skupina je věnována konvergenci elastoplastických úloh při zatěžování těles s ostrou trhlinou. Všechny skupiny používají k výpočtu standardní systémy, tj. Ansys a Abaqus. Na rozdíl od následujících kapitol jsou tyto systémy používány přímo bez zasahování do standardních softwarů.



Obrázek 2.1: Model uzavřené pórovitosti (a) nový model, (b) dle literatury [7].



Obrázek 2.2: Struktura sklolaminátu GLARE, převzato z [en.wikipedia.org/GLARE](http://en.wikipedia.org/GLARE).

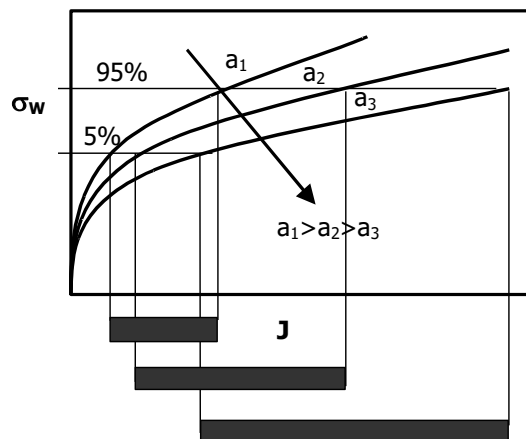
Slinování (anglicky sintering) je proces zhutňování a formování pevné hmoty materiálu teplem nebo tlakem, aniž by se roztavil do bodu zkapalnění. Slinování probíhá přirozeně v ložiscích minerálů nebo jako součást výrobního procesu používaného s kovy, keramikou, plasty a jinými materiály. Jako základní fyzikální procesy je nutno vyzvednout viskózní tok přes hranice zrn a difúzi po hranicích zrn, struktury jsou s uzavřenou pórovitostí, jak je naznačeno na obr. 2.1, při modelování této úlohy se vycházelo z prací [27] a [9].



## 2.2. HISTORIE LOKÁLNÍHO PŘÍSTUPU

Sklolaminátový epoxid vyztužený hliníkem (GLARE, Glass Laminate Aluminum Reinforced Epoxy) je laminát z kovového vlákna (FML, Fiber Metal Laminate) složený z několika velmi tenkých vrstev kovu (obvykle hliníku) proložených vrstvami preplegu ze skleněných vláken, spojených dohromady maticí, jako je epoxid. Při modelování pomocí MKP byla řešena otázka kritických směrů namáhání a iniciace vzniku trhliny při nízkocyklové únavě. Strukturu materiálu, nyní velmi využívaného v letectví, například v [39], vidíme na obr. 2.2.

V této kapitole je proveden i úvod do problematiky numerického výpočtu veličiny označované v experimentální oblasti jako lomová houževnatost, která je spojována s maximálním napětím před čelem trhliny a v komentovaných pracích je jí věnována významná pozornost. Různé konfigurace těleso/defekt vedou k rozdílným napěťově/deformačním stavům (rozdílná úroveň plastické deformace), viz [28] a [35]. Z aplikačních důvodů, viz obr. 2.3, byla snaha zavést dvouparametrovou lomovou mechaniku tak, aby byla možná transformace stanovených veličin na jednoparametrový popis pomocí  $K$ ,  $J$ . Podmínky na špici trhliny, které lze těmito veličinami popsat, jsou označovány jako stav small-scale yielding (SSY) či large-scale yielding (LSY), viz [40].



Obrázek 2.3: Predikovaný rozptyl lomové houževnatosti, převzato z Přílohy B1.

V rámci deformační teorie plasticity s předpokladem izotropního zpevnění pro Misesovu podmínku plasticity byly uvažovány podmínky rovinné deformace a rovinné napjatosti pro případ plastického chování materiálu s mezí kluzu  $\sigma_0$  a exponentem deformačního zpevnění  $n$ , jehož vlastnosti jsou popsány ve formě mocninné závislosti mezi napětím a deformací typu Ramberg-Osgood [8].

## 2.2 Historie lokálního přístupu

Tento přístup, zejména v případě štěpného porušení, koreluje pravděpodobnost porušení s distribucí napětí před čelem trhliny. Přestože je vznik porušení predikován z lokálního napětí, jsou apriori v tzv. Weibullově napětí zahrnuté efekty jako: ztráta „constraintu“ (někdy v české literatuře označován jako stísnění, viz obr. 2.5), charakter zatěžování, tepelně indukovaná napětí atd. Metodika lokálního přístupu (dále LP) je silným nástrojem pro predikci životnosti komponent. Nutnost pečlivého a přesného určení napětí/deformace v uvažovaném tělese je nezbytná.

Princip je založen na předpokladu, že existuje malý, ale konečný objem materiálu, který obsahuje množinu rovnoměrně rozložených defektů [3] a [8]. Problém křehkého porušení se redukuje na nalezení kritického defektu. Úvahy dodržují předpoklad iniciace prasknutím křehké částice, respektive tzv. kritického článku. Nechť existuje buňka o objemu  $V_0$ , která takovýto defekt obsahuje. Beremin [3] uvedl pravděpodobnost nalezení trhliny o délce  $l_0$  až  $l_0 + dl_0$  ve tvaru

$$p(l_0)dl_0 = \alpha/l_0^\beta dl_0, \quad (2.1)$$

kde  $\alpha$  a  $\beta$  jsou materiálové charakteristiky. Jestliže v objemu  $V_0$  elementární buňky působí napětí  $\sigma$ , pak je možné pravděpodobnost porušení vyjádřit v integrálním formě

$$p(\sigma) = \int p(l_0)dl_0, \quad (2.2)$$

kde integrujeme od kritické velikosti defektu  $l_c$ . Nechť první materiálová charakteristika je  $m = 2\beta - 2$ , potom po zavedení  $\sigma_u$  obdržíme pravděpodobnost porušení  $p(\sigma)$  ve formě

$$p(\sigma) = (\sigma/\sigma_u)^m, \quad (2.3)$$

kde pro  $\sigma_u$  platí, že je to materiálová konstanta, pokud se neprojeví vliv teploty. Úvahy se doposud týkaly jedné elementární buňky. Pro popis chování celého tělesa je nutné najít integrální vyjádření pravděpodobnosti porušení. Takto popsané chování odpovídá matematicky teorii slabého článku, která považuje systém za řetěz, který se poruší v okamžiku porušení jedné buňky. Po úpravě do formy

$$p(\sigma, V) = 1 - \exp((-V/V_0)(\sigma/A)^\beta), \quad (2.4)$$

což je obecný zápis pravděpodobnosti porušení jako funkce napětí, a po zavedení Weibullova napětí lze zapsat celkovou pravděpodobnost porušení ve tvaru

$$p_f = 1 - \exp(-(\sigma_w/\sigma_u)^m), \quad (2.5)$$

kde Weibullovo napětí je dáno vztahem

$$\sigma_w = [\int \sigma_1^m (dV/V_0)]^{1/m}. \quad (2.6)$$

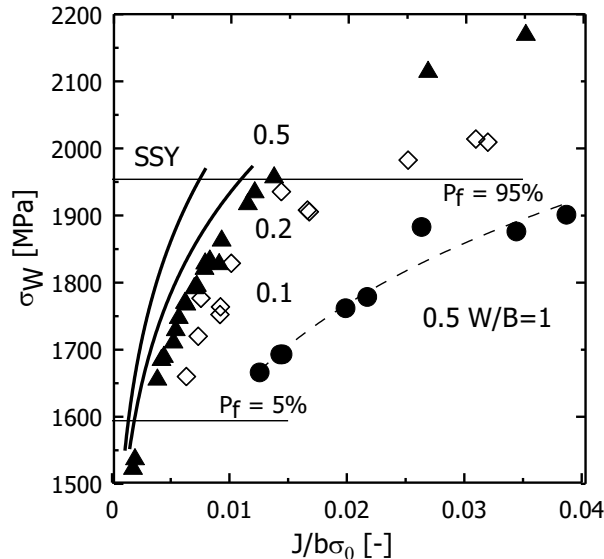
Parametr  $m$  charakterizuje rozptyl a  $\sigma_u$  je napětí pro 63% pravděpodobnost porušení,  $dV$  je objem, kde působí napětí  $\sigma_1$ . Tyto parametry jsou obvykle nezávislé na geometrii zkušebního tělesa. Elementární objem  $V_0$  se často nahrazuje veličinou  $\lambda$ , která je definována jako

$$\lambda = V_0^{1/3}. \quad (2.7)$$

Nezbytným krokem před zahájením výpočtu je přesné stanovení závislosti skutečné napětí/skutečná deformace při zvolené teplotě. Pro výpočet distribuce napětí/deformace v testovaných tělesech je možné použít některou z implementací metody konečných prvků, např. systémy Ansys, Abaqus aj. Dle [3], [1] či [8] jsou lokální parametry nezávislé na geometrii zkušebního tělesa [26]. Poslední fází procedury je iterační proces hledání lokálních parametrů. Jedná se o hledání 2 parametrů (v pozdějších pracích 3, viz například Příloha B6, neboť se zavádí prahová hodnota napětí pro iniciaci porušení) Weibullova rozdělení. To popisuje chování materiálu v závislosti na aplikovaném napětí  $\sigma_w$ . Dříve

### 2.3. MODELOVÁNÍ ŠÍŘENÍ TRHLINY

doporučovaná metoda nejmenších čtverců je pak později zaměněna za metodu maximální věrohodnosti. V literatuře se však objevují hodnoty lokálních parametrů, které se navzájem liší, srov. [14] a [19]. Kapitola zaměřená na komentář vlastních prací se bude věnovat i tomuto nesouladu.



Obrázek 2.4: Princip přenositelnosti lomové houževnatosti, převzato z Přílohy B2.

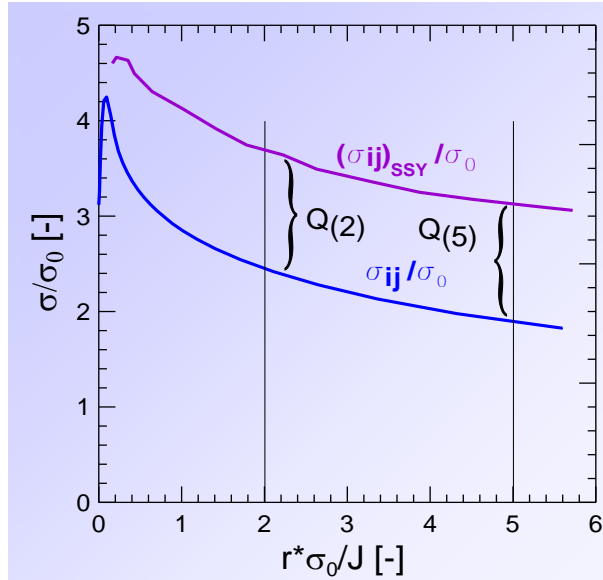
Jednou z prvních prací, které se zabývaly řešením problému vlivu geometrie na lomovou houževnatost v kontextu lokálního přístupu, bylo experimentálně-výpočtové řešení [23], kde byla snaha transferovat lomovou houževnatost z těles o tloušťce 5,2 a 9,6 mm na těleso 20 mm; původ této myšlenky lze nalézt v [13]. Významným prvkem při použití těchto modelů je inherentní zahrnutí „constraint“ efektu na lomovou houževnatost, viz obr. 2.4. Pokud budeme sledovat jeho vliv [14], např. způsobený poklesem poměru  $a/W$ , na tvar závislosti  $J - \sigma_w$ , dojdeme k následujícímu závěru, že se zápornějším  $Q$  získává křivka plošší charakter [33].

Definici parametru „constraint“ a postup pro jeho určení lze vypořádat z obr. 2.5,  $\sigma_{SSY}$  se někdy označuje  $\sigma_{ref}$ . Index 2 nebo 5 určuje polohu, kde se parametr  $Q$  počítá,  $\sigma_0$  je mez kluzu.

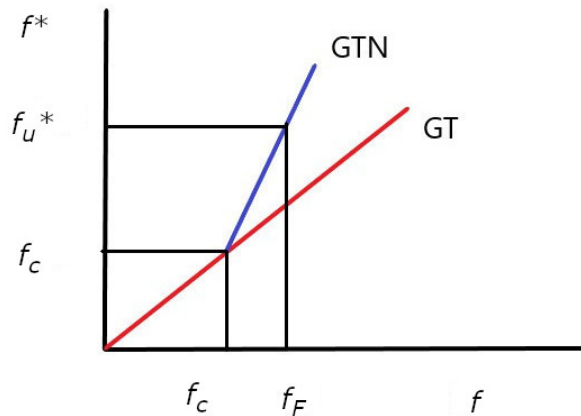
### 2.3 Modelování šíření trhliny

V průběhu šedesátých let se postupně vytvářely teorie, které byly schopny popsat chování těles s trhlinou s uvažováním plastické zóny většího rozsahu, a přiblížit se tak reálnějším podmínkám vznikajících při zatěžování těles s trhlinou.

V současnosti existuje několik postupů, které lze využít k řešení problému simulace šíření trhliny pomocí MKP. Mezi první a nejstarší patří modelování stabilního růstu trhliny s využitím metody uvolňování uzlů. Druhou možností představuje metoda „mizení“ elementů, v jejímž rámci jsou zahrnuty i nejnovější přístupy využívající kohezní elementy, které jsou vlastně zobecněním kontaktu. Podrobněji budou rozebrány obě výše zmiňované metody.



Obrázek 2.5: Určení parametru „constraint“, převzato z Přílohy A5.



Obrázek 2.6: Definice modelu poškození Gurson-Tvergaard-Needleman.

První úpravu původní Gursonovy rovnice navrhuje Tvergaard [37]. Na základě vyhodnocení provedených experimentů doporučuje zavést dva (resp. tři) volitelné parametry  $q_1, q_2, q_3$ , obvykle  $q_1 = 1, 5$ ,  $q_2 = 1$ ,  $q_3 = q_1^2$ . Rozbor chování těchto parametrů byl proveden v [40]. Zde  $\sigma_{YS}$  je skluzové napětí materiálu matrice,  $\sigma_m$  je střední (hydrostatické) napětí a  $f$  je objemový podíl dutin. Rozdíl mezi původním modelem a modifikovaným je znázorněn na obr. 2.6, schematická situace před čelem trhliny na obr. 2.7. Tvar tzv. kompletního modelu je zapsán v následující rovnici, viz [6], nebo přesněji jako uživatelská procedura pro Abaqus ve [42]:

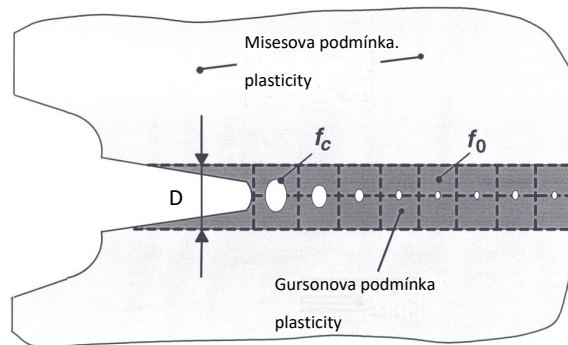
$$\Phi = \frac{2}{3} \frac{S_{ij} S_{ij}}{\sigma_{YS}^2} + 2q_1 f \cosh \left( \frac{3}{2} \frac{q_2^2 \sigma_m}{\sigma_{YS}} \right) - (1 + q_3 f^2) = 0. \quad (2.8)$$

Zavedením efektivního objemového podílu dutin  $f^*$  se tedy v této rovnici  $f$  transformuje na  $f^*$ , kde pro  $f$  větší než  $f_c$  se doplní rovnice (2.8) podle předpisu

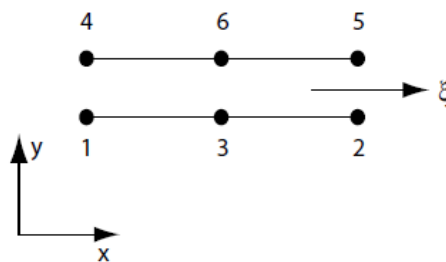
### 2.3. MODELOVÁNÍ ŠÍŘENÍ TRHLINY

$$f^* = f_c - \frac{f_u^* - f_c}{f_F - f_c}(f - f_c), \quad (2.9)$$

kde  $f_c$  je kritický objem, při kterém dojde ke spojování dutin,  $f_F$  je objem dutin při konečném poškození a  $f_u^* = 1/q_1$ .



Obrázek 2.7: Schema modelů poškození před čelem trhliny, převzato z přílohy C2.



Obrázek 2.8: Schematický tvar kohezního prvku pro 2D.

Problematické přenositelnosti se věnoval [13], později [34] a [25], kalibrací [11]. Z aplikacích prací je třeba upozornit na [20] a [44].

Dalším typem prvků pro modelování šíření trhliny jsou prvky kohezní. Ty se původně vyvinuly z kontaktních prvků a využívají myšlenky separace materiálu se vznikem nových povrchů [36]. Prakticky se jedná o určitý fenomenologický popis, který nám charakterizuje chování materiálu pomocí tzv. trakčně separačního zákona, díky němuž pak můžeme predikovat lokální porušení; schematický tvar kohezního prvku pro 2D geometrii je na obr. 2.8.

Existuje několik možností, jak implementovat kohezní zákon do komerčního systému MKP. V předloženém práci se vychází z dlouholetých zkušeností s komerčním systémem Abaqus, který umožňuje relativně snadné psaní vlastních uživatelských procedur pro případ některých speciálních typů poškozování, nových typů prvků, či uživatelskému ovládání některých možností systému. Právě možnost psaní uživatelské procedury UEL (User's Element) se stala základem pro vytvoření a implementaci procedury pro trakčně separační zákon. Obecný tvar tohoto zákona lze nalézt v [31] či v [15]. Prvotní verze je uvedena na obr. 2.9, tento trakčně separační zákon byl dále modifikován, jak bude uvedeno v kapitole věnované komentáři k vybraným vlastním výsledkům.



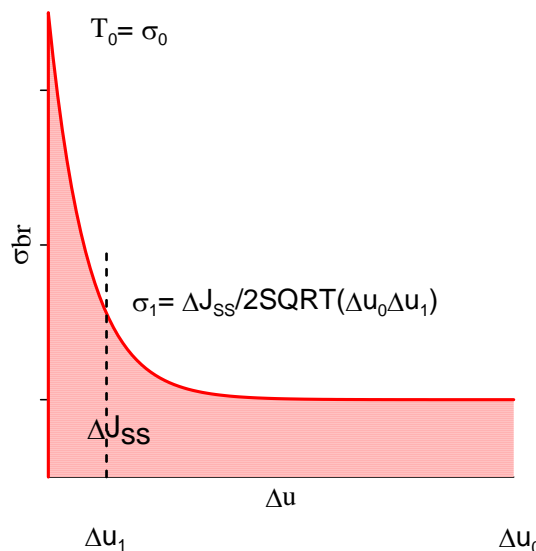
## 2.4 Vláknové kompozity pro stavebnictví a XFEM

Vláknocementové kompozity patří do třídy perspektivních betonů s vyšší mechanickou odolností proti vzniku trhlin. To umožňuje jemnější a ekonomičtější konstrukci; je tedy nutný nový pohled na vytváření stavebních konstrukcí či nahrazení ocelové konstrukce. Tyto konstrukce vystavené zatížení mohou mít za následek napětí v tělese překračující pevnost materiálu, a tím vést k postupnému selhání. Taková selhání jsou často iniciována povrchovými nebo blízkými povrchovými trhlinami, což snižuje pevnost materiálu.

Samostatný závažný problém přitom představuje nastavení materiálových parametrů na makroskopické úrovni, podpořené vhodnými experimenty, jsou-li k dispozici aspoň nějaké informace o struktuře materiálu, např. o nahodilých či záměrně preferovaných směrech vláken; problémům tohoto druhu s důrazem na nedestruktivní či málo invazivní zkušební metody (zejména rentgenografické, tomografické a elektromagnetické, pracující se stacionárním magnetickým či s harmonickým elektromagnetickým polem) se podrobně věnuje [4].

Pro praktické výpočty lze použít metodu časové diskretizace a rozšířenou metodu konečných prvků (anglicky eXtended Finite Element Method, zkráceně XFEM), viz obr. 2.11, pracující s adaptivním obohacováním množiny bazových funkcí poblíž singularit [32]. Tato metoda (včetně řady svých modifikací s vlastními názvy a označeními) má již poměrně bohatou historii; o pokroku v posledních letech se lze přesvědčit porovnáním zakladatelských prací [2] a [17] s [12] a [16]. Obecnější postup pro náhodně orientovaná vlákna předkládá [5], příklad reálného rozložení v drátkobetonu je v obr. 2.10.

Vznik mikrotrhlin [4] lze zohlednit zavedením součinitele porušení na základě přístupu modifikující pole napětí a pracujícího s nelokálním Eringenovým modelem [10], schematický diagram popisující výpočet napětí před čelem trhliny je znázorněn na obr. 2.12. O rozhraních mezi maticí a vlákny, ale i uvnitř matrice, případně i vláken, v závislosti na postupně aktivovaných makrotrhlinách, se většinou předpokládá, že je lze popsat kohezním modelem podle [30], [29] či [22].



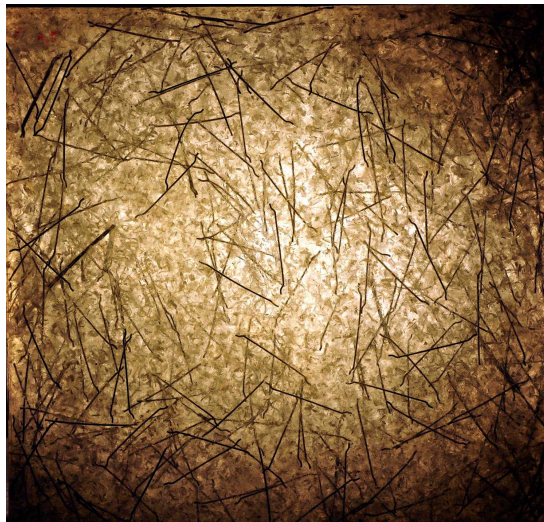
Obrázek 2.9: Trakčně separační zákon pro vláknové kompozity.

## 2.4. VLÁKNOVÉ KOMPOZITY PRO STAVEBNICTVÍ A XFEM

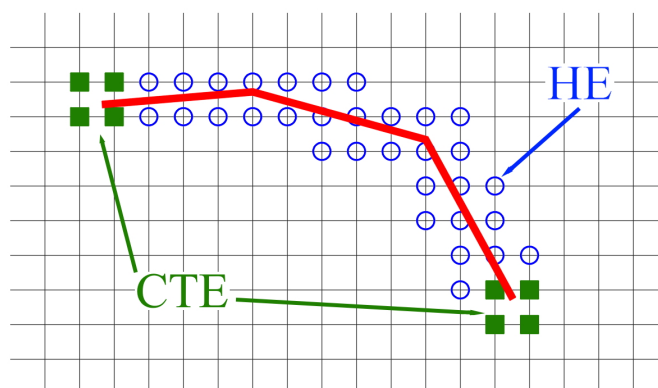
Aplikace XFEM je schopna potlačit nevýhody v simulaci šíření soudržných trhlin; musí však zvládnout neexistenci ostré singularity na špičce trhliny se složitějším odvozením požadovaných napětí z posunů. Kompletní výpočetní model by měl obecně zahrnovat vznik a šíření trhlin, jejich přemostění vlákny, ztrátu soudržnosti mezi vlákny a matricí, jejich vzájemné klouzání třením a destrukci vláken; speciální funkce jsou nutné např. pro singularity napětí v případě otevírání a zavírání trhlin. Schema šíření trhliny přes původní prvky MKP je reprezentováno na obr. 2.11.

Jednotný přístup překlenující měřítko pokrývající elastické a plastické chování spolu s lomem a dalšími defekty vede k konceptu strukturované deformace, viz [24].

Uvažováním o modelech založených na mikromechanice se získají makro-konstitutivní rovnice jednosměrných nebo náhodně rozložených vláken vyztužených materiálů s přihlédnutím k možnosti formování a šíření trhlin v matrici, jakož i k oddělování a lámání vláken. Výpočtový model je nakonec použit v numerických simulacích, aby bylo možné nastínit jeho spolehlivost při hodnocení jak fenoménu interakce vlákno-matice, tak schopnosti



Obrázek 2.10: Radiografický snímek rozložení vláken v drátkovém kompozitu, převzato z Přílohy D1



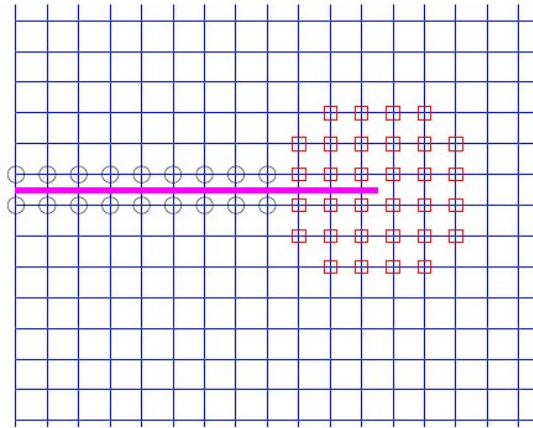
Obrázek 2.11: Schema šíření trhliny pro XFEM, zkratka HE označuje „Heaviside Enrichment“, CTE „Crack Tip Enrichment“.

předpovědi selhání lomu u vláknových kompozitů. Mechanické chování kompozitů s křehkou maticí vyztužených vlákny, s důrazem na cementové kompozity, bude zkoumáno na základě jak diskontinuitního přístupu, tak modifikovaných přístupů založených na MKP.

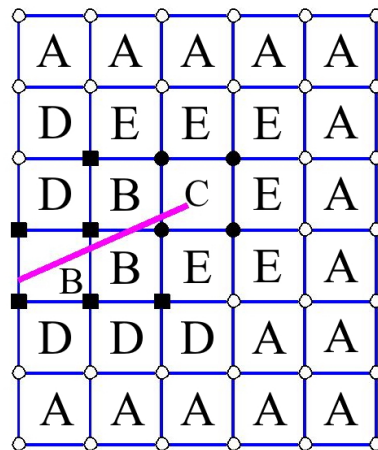
V XFEM je síť nezávislá na vnitřní hranici, jako jsou materiálová rozhraní a trhliny. Tyto interní hranice obvykle způsobují slabé nebo silné diskontinuity pole proměnných, které budou zohledněny v XFEM začleněním „enrichment“ funkcí do standardní aproximace MKP. V rámci XFEM je aproximace v prvku pro viskoelastické těleso s trhlinou vyjádřena rovnicí ve tvaru dle [43]

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in C_A} N_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i + \sum_{j \in C_S} N_j(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{x}) \mathbf{a}_j + \sum_{K \in C_T} N_K(\mathbf{x}) \sum_{m=1}^4 \Phi_K^m(\mathbf{x}) \mathbf{c}_K^m, \quad (2.10)$$

kde  $C_A$ ,  $C_S$ ,  $C_T$  jsou množiny bodů odpovídající obr. 2.13,  $H(\mathbf{x})$  je Heavisidova funkce. Zjednodušeně řečeno první člen odpovídá standardní metodě konečných prvků, druhý realizuje vznik trhliny a třetí kritérium vzniku, přičemž  $\Phi_K^m$  reprezentuje lokální situaci před čelem trhliny.



Obrázek 2.12: Výpočet napětí před čelem trhliny pro nelokální přístup.



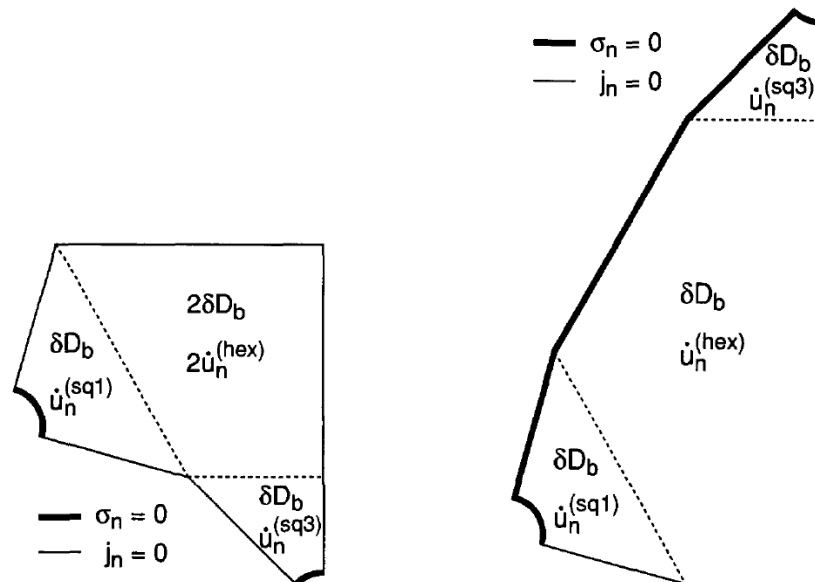
Obrázek 2.13: Ilustrace „enrichment“ funkce, prázdné kruhové uzly patří do  $C_A$ , plné do  $C_T$  a plné hranaté do  $C_S$ .

# 3 Vlastní výsledky - komentář publikovaných prací

Habilitační práce je sestavena jako komentář 26 vybraných článků publikovaných na mezinárodních konferencích, v impaktovaných a recenzovaných časopisech. V následující kapitole budou komentovány práce, která jsou zařazeny v Příloze. Výsledky jsou rozděleny do čtyř oblastí. Společným nosným problémem pro všechny kapitoly je využití metody konečných prvků pro různé aplikace. Největší prostor je věnován problematice modelování poškození pro několik druhů materiálů.

## 3.1 Přímé aplikace MKP

Jak již bylo uvedeno v teoretické části, viz obr. 2.1, při řešení úlohy Příloze A1 se snažíme model zjednodušit pro jeho modelování ve 2D. To vede na určení čtyř zatěžovacích případů, více viz Příloha A1; první dva jsou charakterizovány v obr. 3.1. Numerické vý-



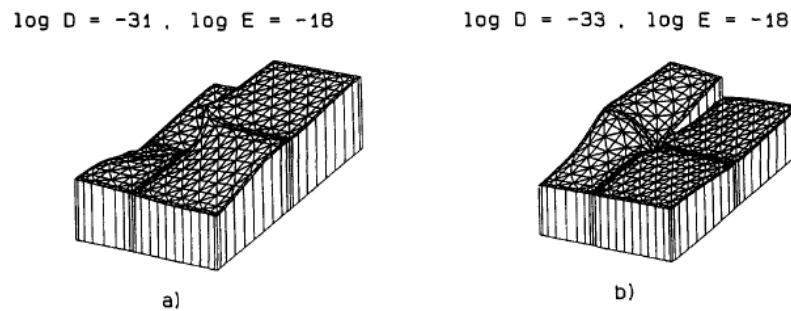
Obrázek 3.1: Jednotková buňka pro zatížení 1 a 2.

počty difúzních polí na povrchu tetrakaidekahedronu se určují pro následující případy: (i) Jednosměrné prodloužení ve směru [001]. V tomto případě je jedinou nenulovou složkou rychlosti deformace  $\dot{\epsilon}_{33}$ . Cílem je vypočítat potřebná napětí která způsobí tuto deformační rychlost. (ii) Smyk na (100) rovinách ve směru [010]. Pak jsou pouze nenulová deformační rychlost a složky napětí  $\dot{\epsilon}_{12} = \dot{\epsilon}_{21}$  a  $\sigma_{12} = \sigma_{21}$ . (iii) Izostatické zatěžování se střední rychlostí deformace  $\dot{\epsilon}_m = \dot{\epsilon}_{11} = \dot{\epsilon}_{22} = \dot{\epsilon}_{33}$  vede k hydrostatickému napěťovému stavu se střední hodnotou  $\sigma_m$ . (iiii) Creep ve směru [001] bez pórů, kdy předepíšeme složky rychlosti defor-

### 3. VLASTNÍ VÝSLEDKY - KOMENTÁŘ PUBLIKOVANÝCH PRACÍ

mace  $\epsilon_{33} = -2\epsilon_{11} = -2\epsilon_{22}$ . Jak později ukázaly citace této práce, navržený model přesněji charakterizuje chování keramických a kovových prášků při jednoosém zatěžování.

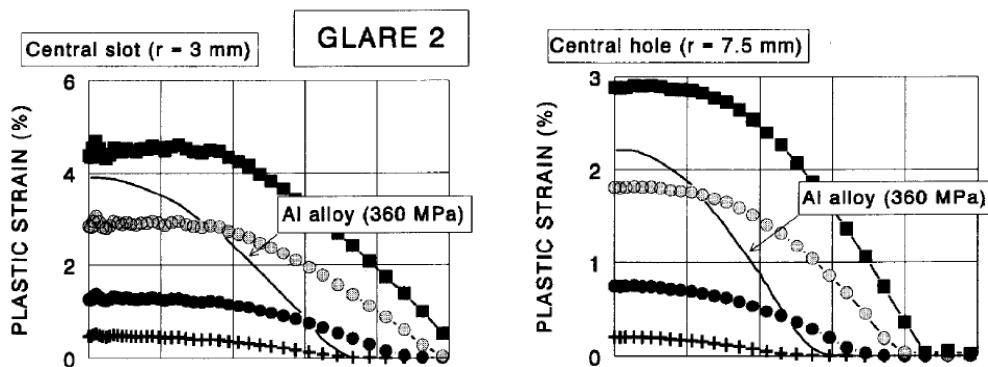
Na tuto práci navazuje Příloha A2, kdy se podařilo vytvořit funkční model pro kompozity s kovovou maticí zpevněnou krátkými vlákny či karbidy křemíku. Jedná se o vhodný materiál pro letectví, zejména o nahrazení titanu, či automobilový průmysl, zvláště pro návrhy motorů. Důležitou úlohu zde hraje difúze po hranicích zrna a pokluzy po hranicích. Příklady výsledků modelování pro logaritmus koeficientu difúze po hranicích zrn  $D$



Obrázek 3.2: Rozložení napětí  $\sigma_{22}$  v oblasti stacionárního creepu různé vlastnosti rozhraní zpevnění/matrice, převzato z Přílohy A2.

a rychlost pokluzů  $E$  jsou na obr. 3.2.

Problematicke dalších druhů kompozitů, tentokrát sklolaminátu GLARE, lze nalézt v Příloze A3 a A7.



Obrázek 3.3: Ekvivalentní plastická deformace ve Al vrstvě laminátu GLARE pro různé velikosti iniciátoru napětí, převzato z Přílohy A3.

Výpočty společně s metalografií prokázaly, že první mikrotrhliny v rozích na krajích vnitřních Al vrstev. Během dalšího zatěžování vznikají nové mikrotrhliny ve vnitřních kovových vrstvách nehlédíc na předchozí trhliny v materiálu. Nakonec začnou vznikat trhliny v povrchových vrstvách, viz obr. 3.3 a 3.4.

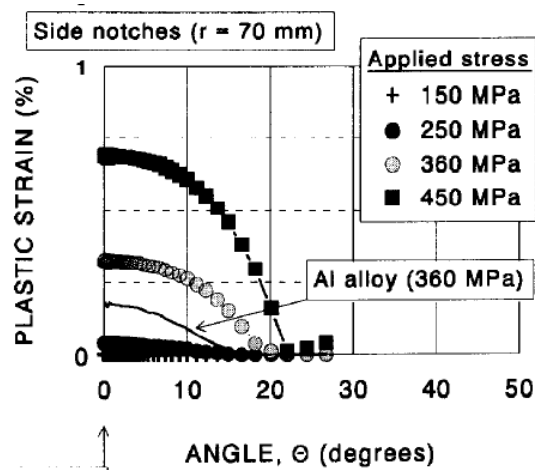
V Přílohách A4, A5, A6 je hledána kritická zóna před čelem trhliny či vrubem. Ta může být ovlivněna tvarem trhliny a určuje lomové chování komponenty. Je konfrontován deterministický přístup (princip kritického napětí Příloha A4) s pravděpodobnostním přístupem v Příloze A5 a A6. Numerické elastoplastické výpočty MKP slouží jako podpůrný nástroj pro interpretaci fyzikální podstaty probíhajících mikromechanických procesů. Ukázalo se, že tato lokální zóna není citlivá na změnu lomového mechanismu a velikost kritického napětí lze brát jako materiálovou charakteristiku. Rovněž pro ko-



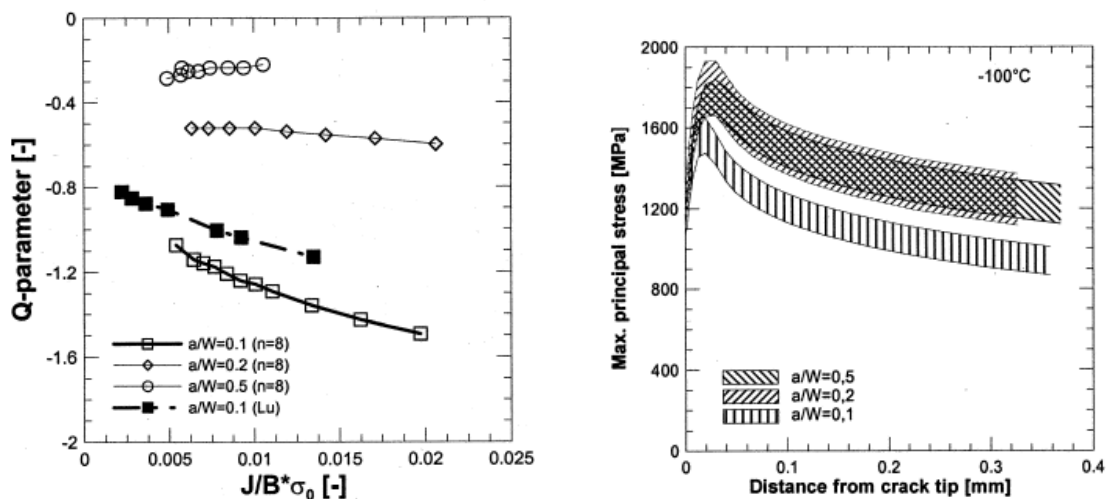
### 3.1. PŘÍMÉ APLIKACE MKP

rektnější predikci lomového chování je nutno využívat možnosti víceparametrové lomové mechaniky. Tu lze, zejména  $J, Q$  přístup, využít i pro vysvětlení metod využívajících statistických přístupů. Určení těchto parametrů znamenalo přesnější výpočet pole napětí a deformace před čelem trhliny, a tedy pro vysokou úroveň plastické deformace použití deformační teorie plasticity či prodloužení závislosti skutečného napětí na skutečné deformaci mimo hodnoty získané přímým měřením. Příklad korektního výpočtu lze najít na obr. 3.5, kde je ukázán i případný rozptyl maximálního hlavního napětí  $\sigma_1$  a výpočet „constraint“ pro různé tloušťky zkušebního tělesa. Symboly  $a, W, B$  označují postupně délku trhliny, šířku zkušebního tělesa a jeho tloušťku. Zajímavým zjištěním je, že  $\sigma_1$  před čelem trhliny pro krátké trhliny  $a/W = 0,1$  je výrazně nižší než pro ostatní konfigurace.

Řešení problémů lomové mechaniky je založeno na znalosti deformačně-napěťových charakteristik před čelem trhliny. V případě hodnocení chování komponent obsahujících trhlínu určuje elasticko-plastická lomová mechanika přesně vztah mezi maximálním přípustným vnějším zatížením a parametry komponenty (rozměry tělesa, materiálové vlastnosti, velikost a polohu trhliny). MKP představuje vhodný nástroj pro získání přehledu roz-



Obrázek 3.4: Aplikované napětí pro řešení úlohy laminátu GLARE, převzato z Přílohy A3.



Obrázek 3.5: J-Q diagram a maximální hlavní napětí versus vzdálenost od čela trhliny, převzato z Přílohy A5.

### 3. VLASTNÍ VÝSLEDKY - KOMENTÁŘ PUBLIKOVANÝCH PRACÍ

ložení polí deformací a napěťových polí v analyzovaném modelu. Poloměr zaoblění čela trhliny se pohyboval kolem  $r = 0,01$  mm.

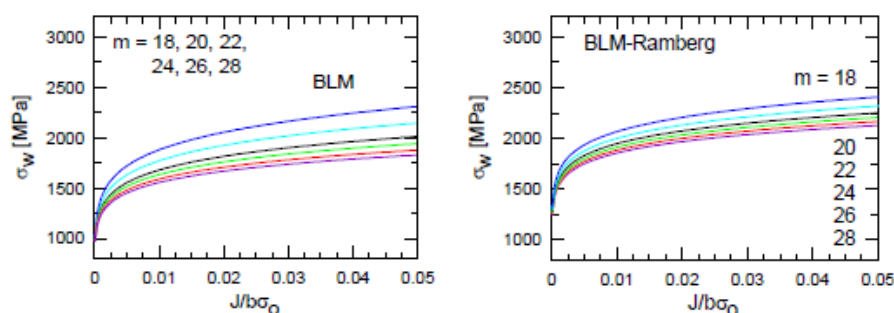
## 3.2 Lokální přístup

V přílohách B1 a B2 lze najít komentované výsledky věnované určování lokálních parametrů na tělesech s různým poloměrem vrubu a tělesech s trhlinou. V počátečních pracích jsme vycházeli z literárního rozboru a používali dvouparametrový přístup, tj. použití parametrů  $m$  a  $\sigma_u$ , později, zejména v B6 a B7, tříparametrový model zavedením  $\sigma_{th}$ . Ze závěrů je nutno zdůraznit, že lokální parametry jsou geometricky závislé, a to s tendencí klesající poloměr zaoblění – rostoucí parametr  $m$ . Situace je však složitější, jak již bylo zmíněno; hlavním problémem je stanovení vlastní distribuce napětí. V oblasti podléhající rozsáhlé plastické deformaci dochází k nukleaci mikrodefektů, které svojí existencí mění napěťové pole, viz tabulka 3.6. Na úrovni současných metod experimentálních i výpočtových nejsme schopni tento efekt identifikovat. Proto jsou pro stanovení lokálních parametrů doporučovány tělesa s malým gradientem napětí, u kterých je větší procesní zóna, a celkově je tak možné ovlivnění výpočtu okrajovými podmínkami nižší. Doporučená velikost hrany použitých prvků pro MKP se stanovuje tak, aby v elementární buňce bylo tak 10 možných vzniků defektů. To pro případ  $\lambda = 100$   $\mu\text{m}$  znamená velikost hrany prvku méně než  $2 - 6$   $\mu\text{m}$ .

Příklad testů určování lokálních parametrů na rotačních tělesech s různým poloměrem vrubu,  $\sigma_0$  označuje mez kluzu. Většina příloh označených B1-B7 se však věnuje problému

U notch 0.2 mm						
$\sigma_{th}/\sigma_0$	~11300		~6500		~3500	
	m	$\sigma_u$	m	$\sigma_u$	m	$\sigma_u$
0	65.6	1340	64.6	1343	63.3	1350
1	65.6	1340	64.6	1343	63.3	1350
1.5	65.6	1340	64.6	1342	63.3	1350
U notch 0.7 mm						
0	17.0	2485	16.9	2491	16.8	2506
1	17.0	2484	16.9	2491	16.8	2506
1.5	16.9	2489	16.9	2494	16.8	2508
U notch 1. mm						
0	18.2	2117	17.8	2145	17.8	2146
1	18.2	2117	17.8	2146	17.8	2146
1.5	18.2	2120	17.8	2148	17.7	2149

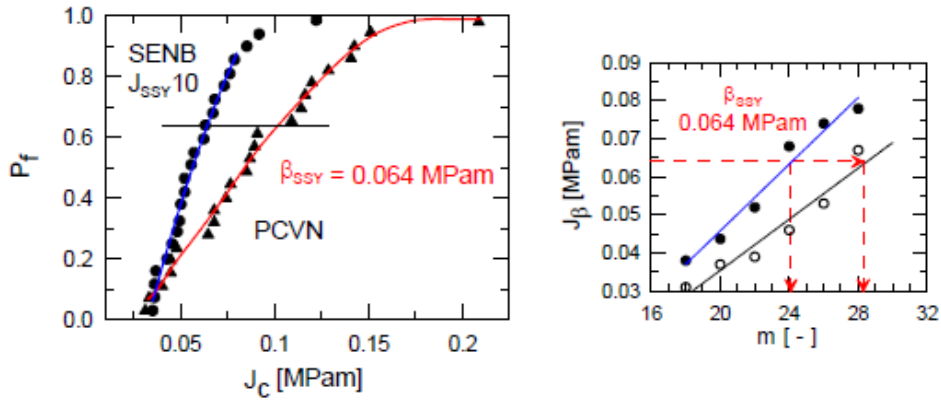
Obrázek 3.6: Vliv velikosti sítě a poloměru vrubu pro rotační tělesa, převzato z Přílohy B1.



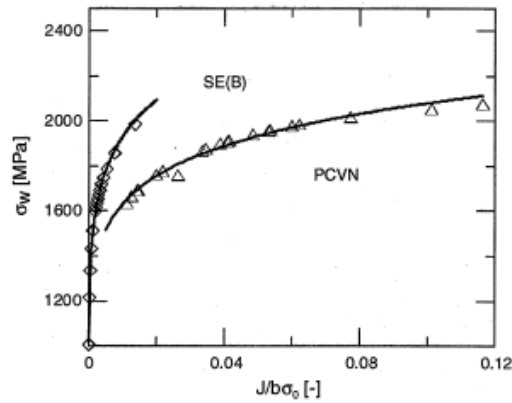
Obrázek 3.7: Diagram Weibulova napětí a návržení TSM pomocí MBL, převzato z Přílohy B3.

### 3.2. LOKÁLNÍ PŘÍSTUP

přenositelnosti lomových charakteristik a lokální parametry jsou určovány na tělesech s trhlinou. Bylo zjištěno, že přenos funguje pro tělesa se stejným tvarem koncentrátoru napětí. Technika tvorby diagramu TSM, (Toughness Scalling Method), viz obr. 3.7, je testována v Příloze B2 a B3; přehled je v Příloze B5, viz obr. 3.9.



Obrázek 3.8: Kalibrace lokálních parametrů, převzato z Přílohy B3.



Obrázek 3.9: Kalibrovaný TSM diagram, převzato z Přílohy B5.

Kroky postupu kalibrace použité pro TSM jsou následující, viz Příloha B3 a obr. 3.8:

- Vytvořit pravděpodobnostní diagram hodnocení ( $P_f = f(J_c)$ ) pro dvě geometrie.
- Provést výpočet MKP pro testované těleso a podmínky SSY.
- Weibullovo stanovení napětí pro testované těleso a podmínky SSY.
- Oprava omezení podle nejslabší tloušťky dle postupu ESIS E-1921.
- Nechť  $t_{SSY}$  a  $t_A$  označuje tloušťku pro SSY a pro konfiguraci A, pak je  $J_{SSY} = 1.8 + (t_A/t_{SSY})^2(J_c - 1.8)$ .
- Určíme  $b$ . Většinou se předpokládá hodnota  $b = 2$ , což znamená, že korigovaná lomová houževnatost vyhovuje Weibullovu rozdělení s exponentem rovný dvěma. Parametr  $\beta$  definuje hodnotu při 63% pravděpodobnosti porušení, což vede na

$$\left(\frac{J}{\beta}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u}\right)^m. \quad (3.1)$$

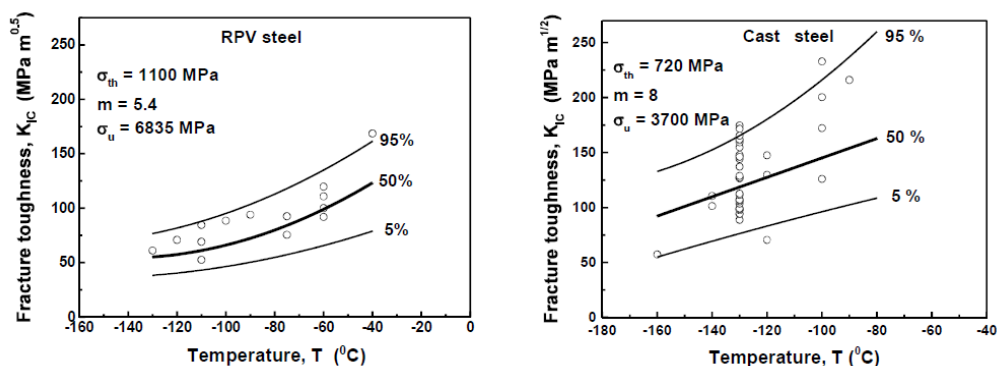
### 3. VLASTNÍ VÝSLEDKY - KOMENTÁŘ PUBLIKOVANÝCH PRACÍ

Podle modelu štěpného lomu polykrystalických kovů navrženého v [18] a verifikovaného v přílohách B6 a B7 je hodnota prahového napětí  $\sigma_{th}$  určena minimálním napětím  $\zeta_{Cmin}$  odpovídajícím nestabilitě prasklého nukleakčního jádra. Potom lze prahovou hladinu stresu popsat rovnicí

$$\sigma_{th} = \frac{\zeta_{Cmin}}{1 + tJ_{\zeta11}}, \quad (3.2)$$

kde  $t$  (tolerance)  $\approx 0,3$  a  $\zeta_{Cmin}$  pro oceli  $\approx 0,13$ .

Výsledné predikce jsou ukázány na obr. 3.10 či podrobněji v přílohách B6 a B7. Jedná se o přenos z malého tělesa s trhlinou (PCVN) na těleso standardních rozměrů (SENB).



Obrázek 3.10: Predikované lomové houževnatosti pro 2 typy ocelí, převzato z Přílohy B7.

### 3.3 GTN model a použití kohezních prvků

Hlavní důraz je kladen na možnost predikce chování tělesa s trhlinou za předpokladu deformačně řízeného mechanismu porušování. Tento úkol ve skutečnosti představuje využití hybridní metodologie spojující numerické modelování, experiment a mikroskopické pozorování v jeden poměrně složitý celek. Experimentální data použitá pro modelování lze nalézt převážně v práci [40]. Výsledky predikce jak pro model GTN, tak pro použití kohezních prvků, byly ověřovány pomocí experimentálně získaných tzv.  $J - \Delta a$  neboli  $J - R$  křivek.

Stručně řečeno, přílohy C1 až C3 jsou zaměřeny na modelování šíření trhliny oběma metodami. Využívají možností programových systémů Abaqus a Warp3D a věnují se spíše vlivu jednotlivých parametrů v modelech na korektní predikci šíření trhliny. Jako modelový materiál byla zvolena kovaná ocel, kde díky tvárnému porušení se mohlo využít obou předložených metod.

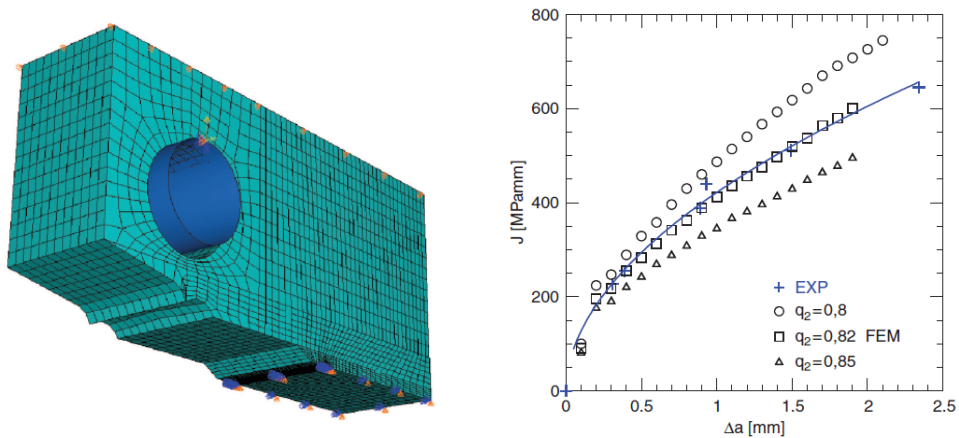
Přílohy C4 až C7 ukazují modelování šíření trhliny pro jinou třídu materiálů. Jedná se o kompozity zpevněné vlákny SiC se skelnou maticí. Z velikostního pohledu jsme o řády níže a zde návrh trakčně separačního zákona vyžaduje ještě více pochopení fyzikální podstaty probíhajících dějů. Proto byla vyvinuta uživatelská procedura v jazyce Fortran, která byla implementována do komerčního systému Abaqus.

Na obr. 3.11 jsou prezentovány výsledky pro experimentální ocel a je testován vliv parametru  $q_2$  pro model GTN na tvar predikce, podrobněji na obr. 3.12.

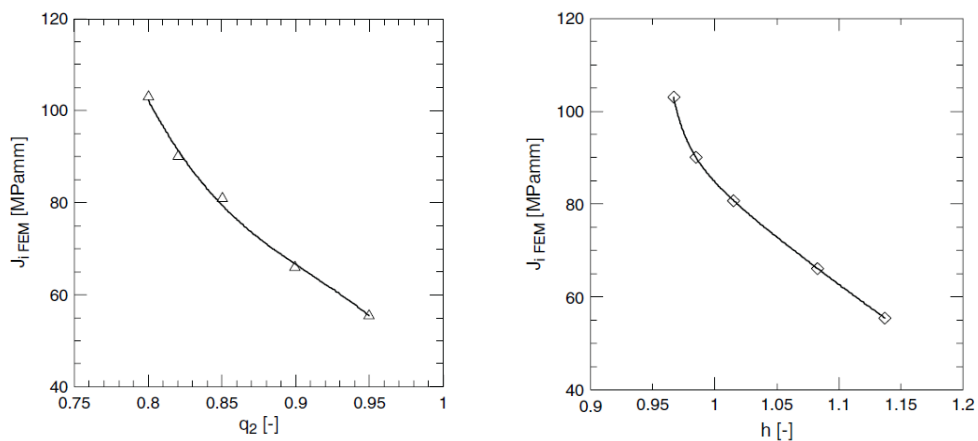
V Příloze C1 a C2 lze je uvedeno porovnání obou metod modelování šíření trhliny pro experimentální ocel, viz obr. 3.13. Za zásadní výsledek v případě modelování šíření

### 3.3. GTN MODEL A POUŽITÍ KOHEZNÍCH PRVKŮ

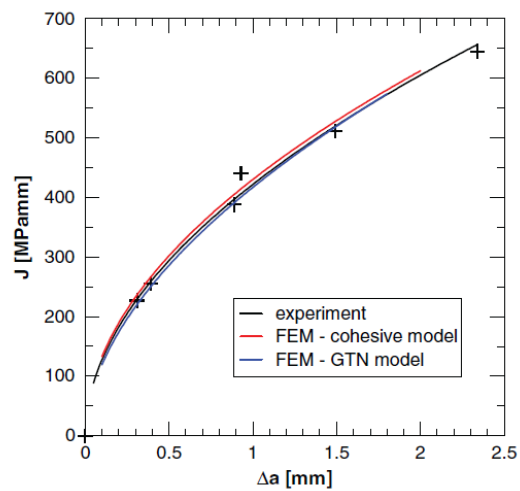
trhliny je považována nutnost kalibrace základních parametrů  $q_1$  a  $q_2$  modelu GTN, což



Obrázek 3.11: Zkušební CT těleso a predikce J-R křivky pro experimentální ocel, převzato z Přílohy C2 a C1.



Obrázek 3.12: Vliv parametru  $q_2$  a faktoru triaxiality  $h$  na hodnotu  $J$ , převzato z Přílohy C2.



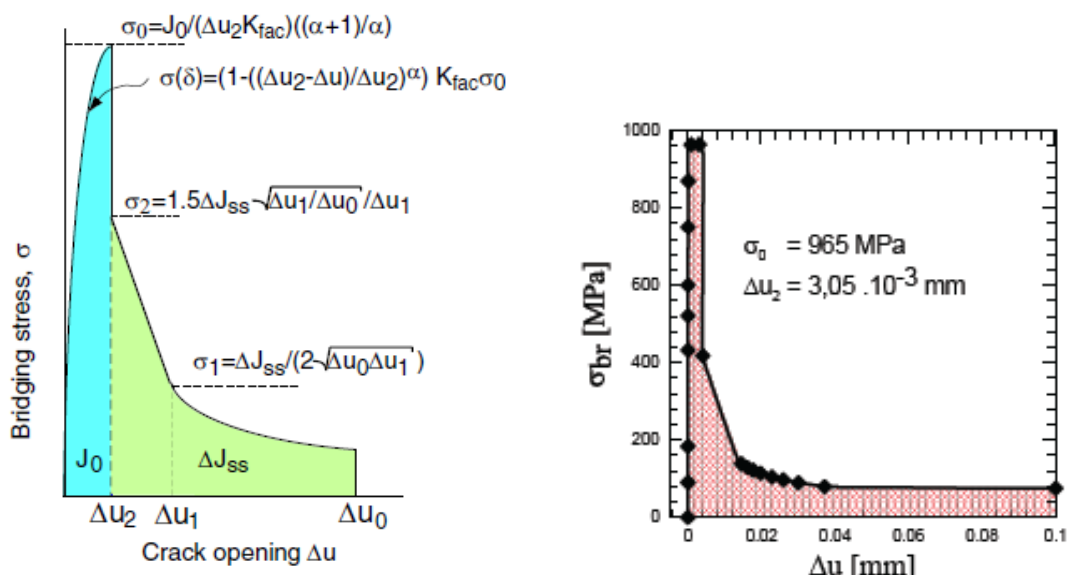
Obrázek 3.13: Určení J - R křivky pro obě metody, převzato z Přílohy C2.



### 3. VLASTNÍ VÝSLEDKY - KOMENTÁŘ PUBLIKOVANÝCH PRACÍ

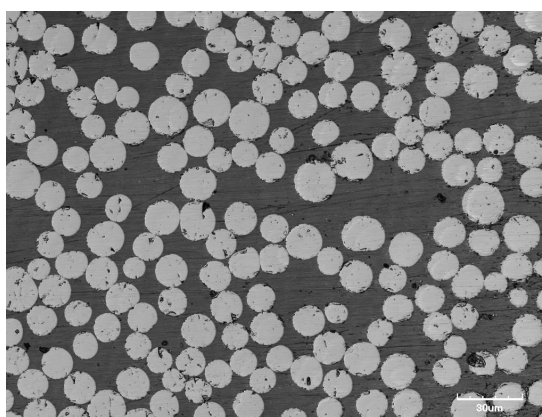
lze pozorovat nejen na obr. 3.13; nutno je také poukázat na přesné modelování závislosti skutečné napětí - skutečná deformace, viz Příloha C2.

Pro případ modelování kompozitů se skelnou maticí, jejichž příprava je ukázána v Příloze C5, byl použit speciální tvar trakčně separačního zákona, který byl matematicky popsán v Příloze C6. Příklad kalibrace trakčně separačního zákona je podrobně popsán v Příloze C4.



Obrázek 3.14: Kalibrace trakčně separačního zákona pro SiC, převzato z Přílohy C4.

Materiál použitý pro modelování přemostňovacích napětí byl komerčně dostupný kompozit z borosilikátové skelné matrice vyztužené vlákny *SiC* Nicalon (viz 3.15). Vlastnosti skleněné matrice, *SiC* vláken a kompozitu byly následující: Youngův modul 63, 198, 118 GPa, Poissonův číslo 0,22, 0,20, 0,21, pevnost v tahu 60, 2750, 600-700 MPa. Pro modelování růstu trhlin byla použita následující experimentálně stanovená data:  $J_0 = 6200 \text{ J/m}^2$ ,  $J_{ss} = 18500 \text{ J/m}^2$ ,  $\Delta u_c = 0,1 \text{ mm}$ ,  $\Delta u_1 = 0,013 \text{ mm}$ . Kalibrovaná data a konečný tvar překlenovacího zákona lze vidět na obr. 3.14.



Obrázek 3.15: Snímek mikrostruktury borosilikátového skla, převzato z Přílohy C4.

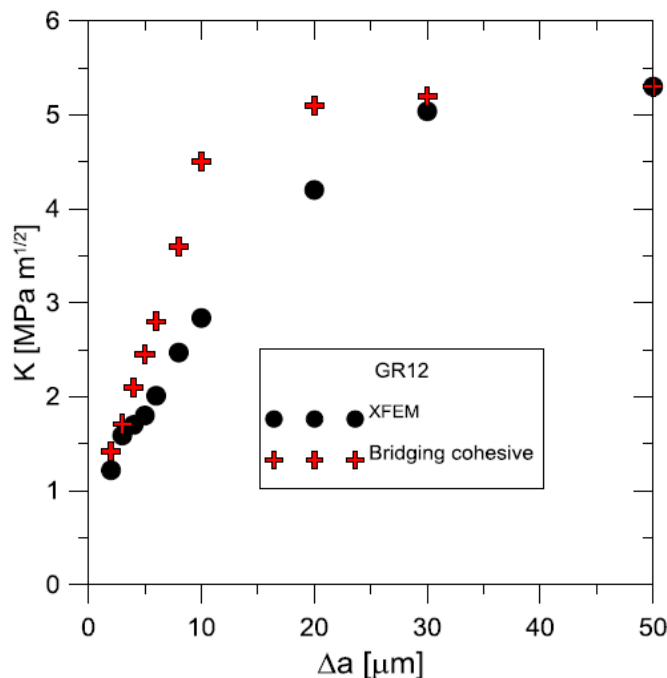
Finální modelování pro kompozit s  $Si_3N_4$ , viz Příloha C7, je prezentováno na obr. 3.17. Následující tabulka 3.16 ukazuje různé modifikace testovaných kompozitů. V práci je uveden výsledek modelování pro variantu A a srovnání predikce pro standardní XFEM

### 3.3. GTN MODEL A POUŽITÍ KOHEZNÍCH PRVKŮ

s výsledky získanými pomocí kohezních prvků. Tvar křivky pro speciálně kalibrovaný trakčně separační zákon lépe vystihují experimentální pozorování.

material	GR12 A	SKF B	GR25 C	GR36 D
$\Delta J_{ss}$ [J/m <sup>2</sup> ]	64	77	67	108
$\Delta_c$ [μm]	0.30	0.30	0.35	0.35
$\Delta_1$ [μm]	0.08	0.055	0.045	0.045
$dJ_0$ [J/m <sup>2</sup> ]	21	24	24	25
$\sigma_0$ [MPa]	1063	1590	1350	1590

Obrázek 3.16: Materiálové charakteristiky pro návrh trakčně separačního zákona pro  $Si_3N_4$ , převzato z Přílohy C7.



Obrázek 3.17: Predikce J-R křivky pomocí XFEM a kohezních prvků, převzato z Přílohy C7.

Na základě aplikace na konkrétní materiál  $Si_3N_4$  lze konstatovat:

- Mechanismy přemostění trhlin mohou poskytnout podstatné zvýšení houževnatosti.
- Saturace v křivce  $J - R$  byla pro modelování XFEM dosažena podstatně později, obvykle pro délku trhlin větší než 20 μm. Použitý model XFEM byl bez začlenění přemostujícího mechanismu.
- Saturace v křivce  $J - R$  byla dosažena pro soudržné modelování obvykle pro trhlinu pro délku v intervalu 10 - 15 μm. Pravděpodobný je brzký začátek skutečného přemostění; kvůli numerickým oscilacím mohou být získané hodnoty  $K$  menší.

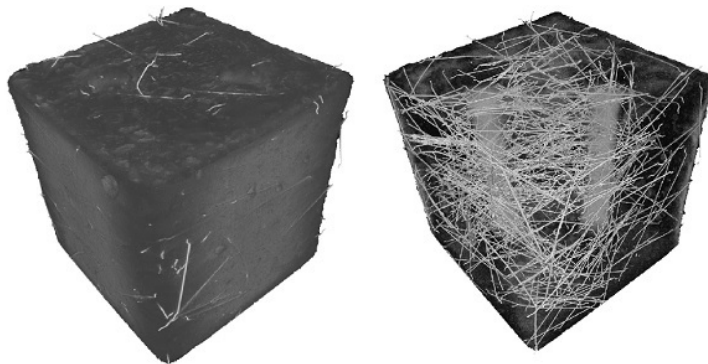
- Získané parametry pro trakčně separační zákon (přemostění) umožnily predikci  $J - R$ ; pro přesnou předpověď se jeví jako nezbytné určit alespoň maximální napětí  $\sigma_0$  experimentálně.

### 3.4 Modelování porušení stavebních kompozitů

Nedestruktivní testování struktury materiálu nabízí zpracování obrazu (2D rentgenové, 3D tomografické), stacionární magnetické a nestacionární elektromagnetické přístupy. I v případě vláknobetonu, nejčastěji používaného kompozitu s (téměř) náhodně distribuovanými vlákny používanými ve stavebnictví, je kontrola nad objemovým podílem a orientací vláken dosud možná pouze při výrobě čerstvé vláknobetonové směsi. Přidání vláken může významně zlepšit mnoho technických vlastností betonu, zejména lomové houževnatosti, pevnosti v tlaku, rázové houževnatosti a životnosti konstrukcí. Navíc v tahu také se zvyšuje pevnost, únavová pevnost a schopnost odolat praskání.

Výpočtová homogenizace makroskopického materiálu [38] se opírá o semi-analytické směřovací vzorce pro speciální tvary vláken (přijatelné zejména pro jejich nízké objemové podíly), o dvouškálovou homogenizaci periodických struktur nebo o alternativní výsledky z asymptotické analýzy ( $G$ -konvergenci,  $H$ -konvergenci,  $\Gamma$ -konvergenci atd.), až po velmi obecné (deterministické i stochastické) výsledky pro  $\sigma$ -konvergenci na homogenizačních strukturách s četnými otevřenými problémy, srov. [32]. Žádoucí je jednotný přístup zohledňující makroskopické a mikroskopické měřítko, pokrývající elastické a plastické chování společně s degradací a lomem.

Přílohy D1 a D2 se tedy věnují testování a hledání struktury vláknového kompozitu, konkrétně drátkobetonu. Z hlediska modelování metodou konečných prvků je řešen zásadní problém, tj. stanovení reprezentativního objemu RVE (v angličtině Representative Volume Element) pro korektní výpočet, jak naznačuje obr. 3.18.



Obrázek 3.18: Rentgenografický snímek betonového vzorku o hraně 150 mm, axonometrický pohled na povrch a dovnitř vzorku, viz Příloha D1.

Stejně jako u zjednodušeného modelového příkladu, vycházejícího z úvah podrobně rozebraných v Příloze D3, můžeme pro potřebu výpočtového modelování vyjít z abstraktního (obecně nelineárního) kvazistatického problému

$$\langle G(\dot{u}), v \rangle + \langle A(u), v \rangle = \langle F, v \rangle, \quad (3.3)$$

kde závorky odkazují na jistá duální přiřazení (v nejjednodušších případech skalární součiny) pro reflexivní a separabilní Banachovy prostory  $V$ ,  $v \in V$  označuje potřebnou virtuální veličinu, například posunutí vztažené k referenční konfiguraci. Tečka zde naznačuje

### 3.4. MODELOVÁNÍ PORUŠENÍ STAVEBNÍCH KOMPOZITŮ

parciální derivaci podle času,  $F$  je lineární funkcionál  $A(\cdot)$  a  $G(\cdot)$  jsou (spíše speciální) zobrazení definované na  $V$ ; naším cílem je, aby abstraktní funkce  $u$ , zobrazující jistý časový interval, splňovala v každém čase  $t$  integrální rovnici (3.3) a mimoto vyhovovala jistým předepsaným (zejména okrajovým a počátečním) podmínkám. Hlavní obtížnost hypotetického přímého přístupu souvisí s nelinearitou  $A(\cdot)$ .

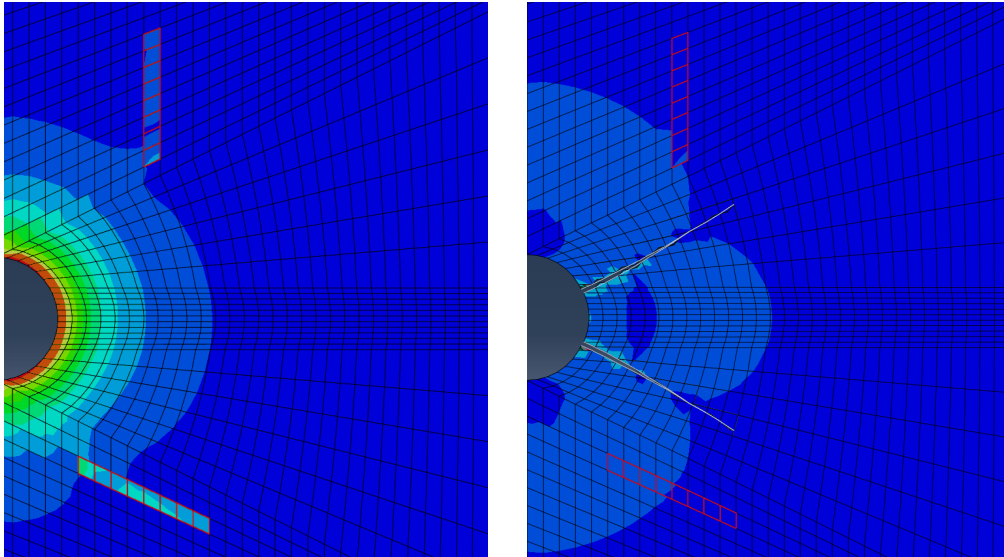
Rovnici (3.3) však lze metodou časové diskretizace (díky konvergenčním vlastnostem Rotheho posloupností) převést na tvar

$$\langle G(u_s - u_{s-1}), v \rangle + h \langle A(u_{s-1}, u_s), v \rangle = \langle F_s, v \rangle, \quad (3.4)$$

kde  $u_s$  a  $u_{s-1}$  aproximují neznámou abstraktní funkci  $u$  v diskrétních časech  $t = sh$  a  $t = (s-1)h$ , stejně jako  $F_s$  v případě neznámé  $F$ ; zde  $s \in \{1, \dots, m\}$  pro  $m = \tau/h$ , kde  $\tau$  je délka uvažovaného časového intervalu ( $0 \leq t \leq \tau$ ), přičemž potřebujeme limitní případ  $h \rightarrow 0$ , tedy  $m \rightarrow \infty$ . Po doplnění některých dodatečných podmínek a použitím normy  $\|\cdot\|$  v prostoru  $V$  dostaneme

$$\|u_s\|^2 + \sum_{r=1}^s \|u_r - u_{r-1}\|^2 \leq c \left( \|u_0\|^2 + h \sum_{r=1}^s \|F_r\|^2 \right), \quad (3.5)$$

kde  $c$  je generická konstanta; odtud je mj. zřejmá klesající norma  $\|u_m - u_{m-1}\|$  pro  $m \rightarrow \infty$ .



Obrázek 3.19: Modelování šíření trhliny pro prosté použití XFEM, viz Příloha D3.

Jelikož (3.4) představuje v každém kroku lineární úlohu, ale stále v nekonečněrozměrném prostoru  $V$ , je nutná další výpočetní diskretizace (kromě velmi speciálních konfigurací se známými analytickými nebo semianalytickými řešeními). Takovou diskretizaci lze naznačit podobně jako (2.10) ve tvaru

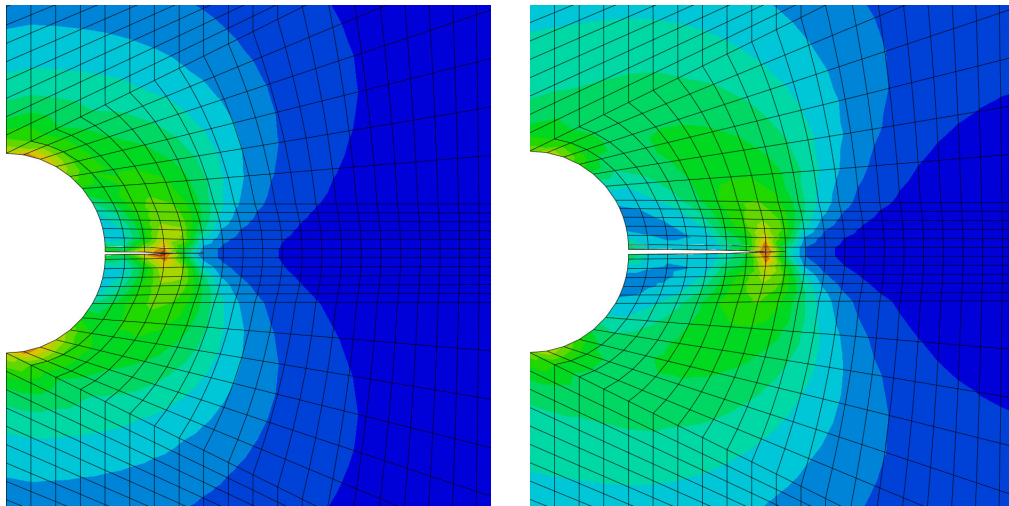
$$u_{si}(x) = u_{sia}\psi(x) + u_{sib}\psi_b(x) + u_{sic}\psi_c(x), \quad (3.6)$$

kde první člen obsahuje standardní tvarovou funkci na  $\Omega$ , druhý „enrichment“ tvarovou funkci na  $\Theta$  a třetí kohezní „enrichment“ tvarovou funkci pro rozhraní.

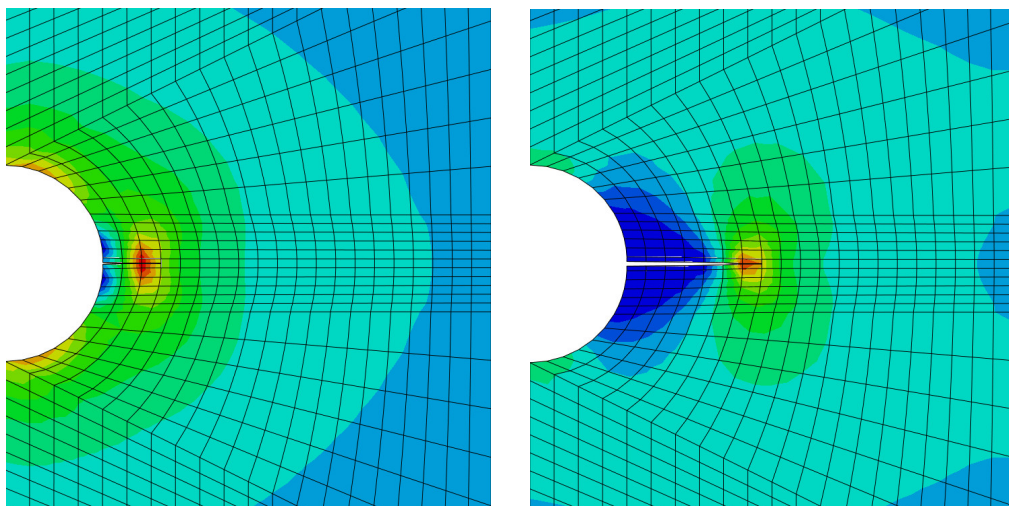
### 3. VLASTNÍ VÝSLEDKY - KOMENTÁŘ PUBLIKOVANÝCH PRACÍ

Pro výpočetní modelování byl vybrán vzorek s cementovou maticí a ocelovými vlákny, viz Příloha D3. Numerické výsledky ukazují plošné šíření trhlin v porušeném tělese v závislosti na umístění vlákna a vlastnostech materiálu. Výztužný účinek vláken hraje významnou roli ve směru šíření trhlin, viz obr. 3.19: levý ukazuje počáteční stav, pravý rozběhnutou trhlinu, která se vyhýbá vláknům.

Výpočtový model pro prakticky nejdůležitější případ cementových kompozitů obsahujících krátká záměrně nebo kvazi-náhodně orientovaná ocelová, keramická, resp. polymerní vlákna s jejich primárním potlačením některých složek napětí, je zaveden v Příloze D4 a D5, přičemž podrobnější matematická formulace je v Příloze D5. Jeho numerický přístup se opírá o upravenou metodu „eXtended Finite Element“, kde lze použít jako kritérium vzniku trhliny kohezní trakční separační zákon. To představuje implementaci nějakého nelokálního konstitutivního vztahu napětí a napětí integrálního typu. Pak je věnována pozornost zejména Eringenovu modelu pro generování multiplikativního faktoru poškození, související kvazi-statické analýze, existenci slabého řešení odpovídajícího okrajového a počátečního hodnotového problému s parabolickým systémem parciální diferenciální rovnice a konvergenci algoritmu založeného na 3 typech Rotheho posloupnosti.



Obrázek 3.20: Mazarsův model, viz Příloha D5.



Obrázek 3.21: Aplikace homogenizačních postupů, viz Příloha D5.



### 3.4. MODELOVÁNÍ PORUŠENÍ STAVEBNÍCH KOMPOZITŮ

Navržený postup tedy kombinuje možnosti několika přístupů pro modelování šíření trhliny ve vláknových kompozitech. Primární je metoda XFEM, napětí před čelem trhliny se přepočítává podle nelokálního přístupu, v celém tělese dle exponenciálního zákona porušení. Na následujících obr. 3.20 a obr. 3.21 jsou prezentovány některé výsledky z Přílohy D5.



## 4 Shrnutí dosažených výsledků

Předložená práce ukazuje možnosti metody konečných prvků pro modelování různých typů materiálů s odlišnou mikrostrukturou. Všechny úlohy mají společnou myšlenku: na základě pochopení fyzikální podstaty probíhajících procesů využít mnohdy omezené možnosti komerčních systémů. Tam, kde to jde, provést modifikaci či implementaci upraveného konstitutivního vztahu nebo se pokusit naprogramovat nový prvek do systému. Většina modelovaných úloh řešila problémy viskoelasticity, elastoplasticity či zobecnění kontaktu. Komentované práce by však nevznikly bez spoluautorů, kteří se spíše věnují experimentální oblasti výzkumu.

Problematika predikce lomového chování pomocí Weibulova napětí  $\sigma_w$  byla velmi perspektivní pro třídu ocelí využívaných pro jaderný průmysl. Bylo zjištěno, že odvození a použití těchto parametrů musí proběhnout nezbytně pro tělesa s podobným tvarem koncentrátoru napětí. Později, dle výsledků v publikovaných pracích, se ukázala spíše možnost použít  $\sigma_w$  pro přenositelnost naměřených hodnot lomové houževnatosti na malých tělesech na tělesa standardní velikosti, tedy řešit vliv velikosti a geometrie tělesa na vznik a šíření trhliny. Jediným problémem se jeví velmi plochá křivka transformačního diagramu TSM. Zajímavé a praktické pro technickou praxi je zavedení prahové hodnoty napětí  $\sigma_{th}$  ve vzorci pro výpočet  $\sigma_w$ . Tento parametr vyžaduje dobré znalosti o příčinách a mikromechanismech vzniku oblasti poškození před čelem trhliny pro daný typ materiálu.

Následující kapitola používající model GTN pro tvárné poškození ukázala velmi dobré výsledky při predikci  $J - R$  křivky. Získané výsledky také prokázaly, že některé parametry tohoto modelu jsou závislé na geometrii a velikosti tělesa. Z hlediska konvergence byl také otestován a ověřen technický postup při návrhu tvarů prvků použitých před čelem trhliny, což lze nalézt v některých komentovaných pracích. Zároveň si autor této práce vyzkoušel postupy pro návrh trakčně separačního zákona a návrh a implementaci tzv. kohezních prvků do systému na bázi metody konečných prvků. Tyto zkušenosti byly využity při práci s několika druhy vláknových kompozitů jak na bázi skelné, tak i cementové matrice.

Poškození vláknových kompozitů je ve velké míře určeno chováním trhliny na rozhraní odlišných materiálů. To bylo ukázáno již v úvodní kapitole pro úlohy v oblasti creepu a snad nejvíce v poslední kapitole věnované stavebním kompozitům. Autor se zde pokusil na základě dlouholetých zkušeností kombinovat některé známé postupy; zatím získané výsledky mohou být motivací pro následný výzkum. Ukazuje se, že řešení těchto úloh je z matematického pohledu velmi náročné a řešitelnost či konvergence výpočtových algoritmů pro komplexní chování těchto úloh nebyla mnohdy formálně verifikována. To by opětovně mohlo být námětem dalšího výzkumu v blízké budoucnosti.

## 5 Literatura

- [1] Anderson, T. L., Dodds, R. H., A framework for predicting constraint effects in shallow notched specimens, *TWI Paper* 30, (1992).
- [2] Babuška, I., Melenk, J. M., The partition of unity method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 40, (1997), 727–758.
- [3] Beremin, F. M., A Local Criterion for Cleavage Fracture of a Nuclear Pressure Vessel Steels *Metallurgical Transactions* 14A, (1983), 2277–2287.
- [4] Bouhala, L., Makradi, A., Belouettar, S., Kiefer-Kamal, H., Frères, P., Modelling of failure in long fibres reinforced composites by X-FEM and cohesive zone model *Composites Part B* 55, (2013), 352–361.
- [5] Brighenti, R., Scorza, D., Numerical modelling of the fracture behaviour of brittle materials reinforced with unidirectional or randomly distributed fibres, *Mechanics of Materials* 52, (2012), 12–27.
- [6] Brocks, W., Klingbeil, D., Künecke, G., Sun, D. Z., Application of the Gurson model to Ductile tearing Resistance, *TM STP 1244*, Second Volume, (1995), 232–252.
- [7] Cooks, A. C. F., The structure of constitutive law for sintering of fine grained materials, *Acta Metallurgica et Materialia* 42/7, (1994), 2191–2210.
- [8] Dodds, R. H., Shih, C. F., Anderson, T. L., Continuum and micromechanics treatment of constraint in fracture, *Int. Journal of Fracture* 64, (1993), 101–133.
- [9] Dragone, T. L., Nix, W. D., Geometric factors affecting the internal stress distribution and high temperature rate of discontinuous fibre reinforced metal, *Acta Metallurgica et Materialia* 38/10, (1990), 1941–1953.
- [10] Eringen, A. C., Theory of Nonlocal Elasticity and Some Applications, Princeton University Press (1984), technical report 62.
- [11] Faleskog, J., Gao, X., Shih, C. F., Cell Model for Nonlinear Fracture Analysis-I. Micromechanics Calibration, *Int. Journal of Fracture* 89, (1998), 355–373.
- [12] Fries, T. P., Belytschko, T., The intrinsic XFEM: a method for arbitrary discontinuities without additional unknowns, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 68, (2006), 1358–1385.
- [13] Folch, L. C. A., Burdekin, F. M., Application of coupled brittle-ductile model to study correlation between Charpy energy and fracture toughness values, *Engineering Fracture Mechanics* 63, (1999), 57-80.

- [14] Gao, X., Ruggieri, C., Dodds, R. H., Calibration of Weibull stress parameters using fracture toughness data, *International Journal of Fracture* 92, (1998), 175–200.
- [15] Hillerborg, A., Modeer, M., Peterson, P. E., *Cement and Concrete Research* 6, (1976), 773–782.
- [16] Jirásek, M., Damage and smeared crack models, *Numerical Modeling of Concrete Cracking* (Hofstetter, G., Meschke, G., eds). Springer: CISM International Centre for Mechanical Sciences 532, (2011), 1–49.
- [17] Khoei, A. R., *Extended Finite Element Method: Theory and Applications*, J. Wiley and Sons, Hoboken, (2015).
- [18] Kotrechko, S. A., Meshkov, Yu., Dlouhý, I., *J. of Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 51, (2011), 255.
- [19] Koppenhoefer, K. C., Dodds, R. H. Loading Rate Effect on Cleavage Fracture of pre-Cracked CVN Specimens: 3-D studies, *Engineering Fracture Mechanics* 58, (1997), 249–270.
- [20] Landes, J. D., Application of a J-Q Model for Fracture in the Ductile-Brittle Transition, *Fatigue and Fracture Mechanics* Vol. 27, ASTM STP 1296, (1997), 27–40.
- [21] Lemaitre, J. A., A Continuous Damage Mechanics Model for Ductile Fracture, *Journal of Eng. Materials and Technology* 107, (1985), 83.
- [22] Li, X., Chen, J., An extensive cohesive damage model for simulation arbitrary damage propagation in engineering materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 315, (2017), 744–759.
- [23] Minami, F., Brückner-Foit, A., Munz, D., Trollidiner, B., Estimation procedure for the Weibull parameters used in the local approach, *Int. Journal of Fracture* 54, (1992), 197–210.
- [24] Morandotti, M., Structured deformations of continua: theory and applications, *Continuum Mechanics Focusing on Singularities (CoMFoS)*, II – 16th Conference in Fukuoka ,Springer, (2016), 125–138.
- [25] Moskovic, R., Modelling of fracture toughness data in the ductile to brittle transition temperature region by statistical analysis, *Engineering Fracture Mechanics* No. 69, (2001), 511–530.
- [26] Mudry, F., Di Fant, M., A Round-Robin on the Measurement of Local Criteria for Fracture, *BCR Report EUR 15352EN*, ECSC, (1994).
- [27] Nečas, J., Hlaváček, I., *Mathematical theory of elastic and elastoplastic bodies: An introduction*, Elsevier Amsterdam, (1991).
- [28] Niu, L., Chehimi, C., Pluvinage, G., Stress field near large blunted V-notch, *Engineering Fracture Mechanics* 49, (1994), 325–335.

- [29] Park, K., Paulino, G. H., Roesler, J. R., Cohesive fracture model for functionally graded fiber reinforced concrete, *Cement and Concrete Research* 40, (2010), 956–965.
- [30] Pike, M. G., Oskay, C., XFEM modeling of short microfiber reinforced composites with cohesive interfaces, *Finite Elements in Analysis and Design* 106, (2005), 16–31.
- [31] Rabinowitch, O., *Engineering Fracture Mechanics* 75, (2008), 2842–2859.
- [32] Roubíček, T., *Nonlinear Partial Differential Equations with Applications*, Birkhäuser, Basel (2013).
- [33] Ruggieri, C., Dodds, R. H., A transferability model for brittle fracture including constraint and ductile tearing effects: a probabilistic approach, *International Journal of Fracture* 79, (1996), 309–340.
- [34] Seok, C. S., Kim, S. Y., Effect of specimen configurations on the fracture resistance curve, *Nuclear Engineering and Design* 214, (2002), 47–56.
- [35] Sih, G. C., Ho, J. W., The role of microstructure in brittle fracture behaviour of low alloy tempered bainitic steel, *Mater. Science Engineering A*, (1997), 723–726.
- [36] Sorensen, B. F., Jacobsen, T. K., *Composites: Part A* 29 A, (1998), 1443–1451.
- [37] Tvergaard, V., Needleman, A., Analysis of the Cup-Cone Fracture in a Round Tensile Bar, *Acta Metallurgica* 32, (1984), 157–169.
- [38] Vala, J., Structure identification of metal fibre reinforced cementitious composites, *Algoritmy*, 20th Conference on Scientific Computing in Podbanské, (2016), 244–253.
- [39] Vašek, A., Vogelesang, L. B., Mechanism and mechanics of damage and failure, *ICF11*, Poitiers, (1996), 1685–1690.
- [40] Vlček, L., Numerická analýza tětes s trhlinou, *doktorská práce*, (2004), VUT Brno.
- [41] Wiesner, C. S., The Local Approach to Cleavage Fracture, *Concepts and applications*, TWI, (1996).
- [42] Zhang, Z. L., A complete Gurson model, *Nonlinear Fracture and Damage Mechanics*, ed. M. H. Aliabadi, (2001), 223–248.
- [43] Zhang, H. H., Rong, G., Li, L. X., Numerical study on deformation in a cracked viscoelastic body with the XFEM, *Eng. Analysis with Boundary Elements* 34, (2010), 619–624.
- [44] Zhu, X. K., Jang, S. K., J-R curves corrected by load-independent constraint parameter in ductile crack growth, *Eng. Fracture Mechanics* 68, (2001), 285–301.

## 6 Vybrané články komentované v práci

A1 Riedel, H., Kozák, V., Svoboda, J., Densification and creep in the final stage of sintering, *Acta Metallurgica et Materialia* 42, (1994), 3093-3103, IF 1,297.

A2 Vala, J., Svoboda, J., Kozák, Čadek., J., Modelling discontinuous metal-matrix composite behaviour under creep conditions, *Scripta Metallurgica et Materialia* 30, Issue 9, (1994), 1201-1206, IF 0,600.

A3 Vašek, A., Polák, J., Kozák, V., Fatigue crack initiation in fibre-metal laminate GLARE2, *Microstructure and Processing* 234, (1997), 621-624, IF 0,896.

A4 Pluvinage, G., Azari, Z., Kozák, V., Effect of ferritic microstructure on local damage zone, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 31, (1999), No. 2, 149-156, IF 1,391.

A5 Vlček, L., Chlup, Z., and Kozák, V., Problems in Q-parameter calculation, NATO Science Series: Mathematics, Physics and Chemistry 78, *book Transferability of Fracture Mechanical Characteristics*, ed. Dlouhý, (2002), 79-92.

A6 Kozák, V., Vlček, L., Influence of constraint effect on transferability of fracture mechanics characteristics, *Engineering Mechanics*, (2003), Praha: Institute of Theoretical and Applied Mechanic, čl. 321.

A7 Chlupová, A., Kozák, V., Fatigue crack growth and delamination in fiber metal laminate (GLARE), *18th International Conference Engineering Mechanics*, (2012), Svratka, 531-536.

B1 Kozák V., Novák A., Dlouhý I., The Transferability of Fracture Toughness Characteristics, *Numerical Methods in Continuum Mechanics 2000*, (VIII. Inter. Confer.), (2000), Liptovský Ján, SR, (sk. 64-1, 64-10), publikace na CD.

B2 Kozák, V., Dlouhý, I., The transferability of fracture toughness characteristics from point a view of the integrity of components with defects, *Computational Methods and Experimental Measurements (CMEM 2001)*, Alicante, Španělsko, (2001), 757-766, invited lecture.

B3 Kozák, V., Vlček, L., Constraint phenomena on the pre-cracked specimen: numerical and experimental evaluation, *ECF 14*, Cracow, (2002), 251-259.

B4 Kozák, V., Dlouhý, I., Holzmann, M., The fracture behaviour of cast steel and its prediction based on the local approach, *Nuclear Engineering and Design*, (2002), Elsevier Science, 67-73, IF 0.546.

B5 Kozák, V., Vlček, L., The Weibull stress parameters calibration upon the toughness scaling model between cracks having different constraint, *Nuclear Engineering and Design* 235, (2005), 1889-1896, IF 0,889.

B6 Kotrechko, S., Gryshchenko, V., Kozák, V., Dlouhý, I., Method of threshold stress determination for local approach to cleavage factor, *Solid State Phenomena* 258, (2017), 281-285.

B7 Kotrechko, S., Zatsarna, O., Kozák, V., Dlouhý, I., Threshold fracture stress: theory and application, *Procedia Structural Integrity* 23, (2019), 413-418.

C1 Kozák, V., Vlček, L., Parameters identification for GTN model and their verification, *Materials Science Forum* 482, (2005), 335-338.

C2 Kozák V., Ductile crack growth modelling using cohesive zone approach, *Computational Modelling and Experiments*, In: Computational Methods in Applied Science 9, Springer, (2008), 191-208, kapitola v knize.

C3 Kozák, V., Dlouhý, I., Chlup, Z., Cohesive zone model and GTN model collation for ductile crack growth, *Int. Conference Material Structure and Micromechanics of Fracture MSMF 5*, (2007), Brno, 4 pages.

C4 Kozák, V., Chlup, Z., Modelling of fibre matrix interface of brittle matrix long fibre composites by application of cohesive zone method, *Key Engineering Materials* 465, (2011), 231-234.

C5 Strachota, A., et al., Preparation of Silicon Oxycarbide Composites, *Acta Physica Polonia A* 120, Issue 2, (2011), 326-330, IF 0,875.

C6 Kozák, V., Chlup, Z., Bridging law shape for long fibre composites and its finite element construction, *Algoritmy 2012*, Slovakia, 1-10.

C7 Kozák, V., Chlup, Z., Padělek, P., Dlouhý, I., Prediction of traction separation law of ceramics using iterative finite element method, *Solid State Phenomena* 258, (2017), 186-189.

D1 Vala, J., Hobst, L., Kozák, V., Non- destructive detection of metal fibres in cementitious composites, *Advances in Engineering Mechanics and Materials*, Athens: EUROPEMENT, (2014), 125-128.

D2 Vala, J., Hobst, L., Kozák, V., Detection of metal fibre composites based on signal and image processing approaches, *WSAS Transaction on Applied and Theoretical Mechanics* 10, (2015), 39-46.

D3 Vala, J., Kozák, V., Computational analysis of quasi-brittle fracture in fibre reinforced cementitious composites, In 9th International Conference Materials Structure and Micromechanics of Fracture (MSMF9), *Procedia Structural Integrity*, (2019), 328-333.

D4 Vala, J., Kozák, V., Computational analysis of quasi-brittle fracture in fibre reinforced cementitious composites, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 107, (2020), No. 1, 5501-5510, IF 3,021.

D5 Vala, J., Kozák, V., Nonlocal damage modelling of quasi-brittle composites, *Applications of Mathematics*, January (2021), to appear, IF 0,544.



## 7 Abstrakty

### **Abstrakt**

Účelem předkládané habilitační práce je ukázat výsledky studia zaměřeného na vznik poškození heterogenních materiálů, zvláště na problematiku modelování vzniku a šíření trhliny. Ve čtyřech kapitolách jsou ukázány výsledky práce pomocí komentovaných autorových publikací. V první kapitole je věnována pozornost přímé aplikace metody konečných prvků na odlišné typy materiálů s cílem nalezení kritických parametrů určujících chování materiálů při poškozování. Druhá kapitola kombinuje elastoplastické výpočty pomocí MKP a vybrané parametry pro tzv. přístup kritického článku. Třetí kapitola je věnována aplikaci mechaniky poškození a dvěma možnými přístupy, jak modelovat vznik a šíření trhliny pomocí úprav v systémech MKP. Poslední čtvrtá kapitola je věnována cementovým vláknovým kompozitům a hledání nových metod pro jejich přesnější modelování zejména v oblasti koncentrátoru napětí, respektive před čelem trhliny.

### **Abstract**

The purpose of the presented habilitation thesis is to show the results of a study focused on the occurrence of damage heterogeneous materials, especially on the issue of modeling crack formation and propagation. At four chapters the results of the work are presented using annotated author's publications. In the first chapter attention is paid to the direct application of the finite element method to different types of materials in order to finding critical parameters determining behavior of materials at damage. The second chapter combines elastoplastic calculations using FEM and selected parameters for the so-called critical article approach. The third chapter is devoted to the application of damage mechanics and two possible approaches to model the origin of a crack propagation through modifications in FEM systems. The last fourth chapter is devoted to cement fiber composites and the search for new methods for their more accurate modeling, especially in the field stress concentrator, respectively ahead of the crack tip.