

## ESTUDO DOS CAMPOS DE TENSÕES NA PONTA DE TRINCAS SOB MODO I EM MONOCRISTAIS CONSIDERANDO VISCO-PLASTICIDADE

### STUDY OF THE STRESS FIELDS IN CRACK TIPS UNDER MODE I IN SINGLE CRYSTALS CONSIDERING VISCOPLASTICITY

Eduardo Braun<sup>a</sup>, Eduardo Bittencourt<sup>b</sup>, Guilherme Fiorin Fornel<sup>c</sup>

*Programa de Pós Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Osvaldo Aranha, 99, 3<sup>o</sup> andar, Porto Alegre, Brasil, <sup>a</sup>eduardo.braun@ufrgs.br, <sup>b</sup>eduardo.bittencourt@ufrgs.br, <sup>c</sup>guilherme.fornel@ufrgs.br, <https://www.ufrgs.br/ppgec/>*

**Palavras-chave:** Fratura em Cristais, Visco-Plasticidade Cristalina, Elementos Finitos.

**Resumo.** O presente trabalho trata da análise do escoamento plástico na ponta de uma trinca em uma peça em Estado Plano de Deformações (EPD), estando a trinca sob tração (Modo I). É feito uso da teoria de visco-plasticidade cristalina e as análises são realizadas para pequenas deformações. Considera-se a ponta da trinca inserida em um grão (monocristal), metálico e cúbico de face centrada (CFC), onde somente três sistemas de deslizamento são ativados. A plasticidade cristalina independente do tempo pode apresentar problemas de unicidade de solução para determinadas condições e propriedades dos materiais. Para eliminar tais problemas foi adotada a relação constitutiva viscosa. Tal modelo introduz propriedades que são dependentes da velocidade de aplicação de carga. Uma malha de elementos finitos com elementos retangulares bilineares é usada para discretizar a estrutura. Um campo de deslocamentos compatível com condição de tração é imposto no contorno do domínio analisado. O campo de tensões em torno da ponta da trinca foi comparado com soluções similares nas quais efeitos viscosos não são considerados.

**Keywords:** Fracture in Crystals, Crystalline Visco-Plasticity, Finite Elements.

**Abstract.** In the present work the plastic yielding at a crack tip in a plane strain body, with the crack under traction (Mode I), is considered. The theory of crystal visco-plasticity is used and the analyses are made for small strains. The crack tip is considered as if it is inserted in a face centered cubic (FCC) metallic grain (single crystal), where only three slip systems are activated. Rate independent crystal plasticity may present some uniqueness problems for certain conditions and material properties. To overcome such problems, the viscous constitutive law has been adopted. Such model brings properties to the problem that depend on the velocity of the applied load. A finite element mesh with rectangular bilinear elements is used to discretize the structure. A compatible traction displacement field condition is imposed on the analyzed domain contour. The tension field around the crack tip has been compared with similar solutions where viscous effects were not considered.

## 1 INTRODUÇÃO

A plasticidade cristalina independente do tempo pode apresentar problemas de unicidade de solução para determinadas condições e propriedades dos materiais: ver, por exemplo, discussão em Peirce et al. (1983). Para eliminar tais problemas se adota uma relação constitutiva viscosa. Esta relação insere novas propriedades, dependentes da velocidade de aplicação de carga, sendo elas a taxa de deslizamentos de referência ( $da/dt$ ) e a taxa de sensibilidade do material ( $m$ ). O presente trabalho consiste em uma implementação desta relação constitutiva viscosa, e uma aplicação da mesma em um problema da mecânica da fratura, sendo que assim se verifica o bom funcionamento da implementação, bem como se realiza uma análise da influência das propriedades dependentes do tempo.

A apreciação de aspectos da mecânica da fratura fazendo uso da plasticidade cristalina está presente em estudos como, por exemplo, o de Rice (1987), que trata do assunto sem que ocorra endurecimento, e em Saeedvafa e Rice (1989), que aborda o tema com endurecimento em lei de potência. Já exemplos de estudos da mecânica da fratura onde os efeitos viscosos são considerados na plasticidade cristalina são os de Columbus e Grujicic (2002), de Nielsen et al. (2012) e de Martínez-Pañeda e Niordson (2016). No capítulo 2 o modelo cristalino é discutido, no capítulo 3 é feita a definição do problema, no capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos e no capítulo 5 estão as conclusões finais do trabalho.

## 2 O MODELO CRISTALINO

O modelo de plasticidade utilizado baseia-se nos modelos de Peirce et al. (1983) e Asaro (1983) e considera aqui somente pequenas deformações. Desta forma, o fluxo de deformação plástica está relacionado com os deslizamentos nos sistemas cristalográficos, conforme mostrado na Equação (1).

$$\frac{d\epsilon_{ij}^p}{dt} = \sum_{\alpha} P_{ij}^{(\alpha)} \frac{d\gamma^{(\alpha)}}{dt} \quad (1)$$

Sendo que  $P_{ij}^{(\alpha)}$  é dado pela Equação (2).

$$P_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left( m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} + m_j^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} \right) \quad (2)$$

Onde  $P_{ij}^{(\alpha)}$  representa a componente  $ij$  do tensor de orientação de Schmid para o sistema  $\alpha$ . Para a configuração cristalográfica proposta por Rice (1987), os vetores para os três sistemas de deslizamento são:  $\mathbf{m}^{(1)} = (0;1)$ ,  $\mathbf{s}^{(1)} = (1;0)$ ,  $\mathbf{m}^{(2)} = (-0,816;0,577)$ ,  $\mathbf{s}^{(2)} = (0,577;0,816)$ ,  $\mathbf{m}^{(3)} = (-0,816;-0,577)$ ,  $\mathbf{s}^{(3)} = (-0,577;0,816)$ . A taxa de deslizamento plástico no sistema  $\alpha$  ( $d\gamma^{(\alpha)}/dt$ ) depende da tensão resolvida no sistema de deslizamento ( $\tau^{(\alpha)}$ ), conforme discutido mais abaixo.

Para resolver o problema elasto-visco-plástico faz-se uso de uma abordagem incremental *preditor-corretor* de deformações, onde para cada incremento de deformação  $\Delta\epsilon_{kl}$  se calcula o incremento de tensões através da relação dada na Equação (3):

$$\Delta\sigma_{ij}^E = C_{ijkl} \Delta\epsilon_{kl} \quad (3)$$

O estado de tensões do preditor elástico ( $\sigma_{ij}^E$ ) é então atualizado à partir do estado de tensões inicial ( $\sigma_{ij}^0$ ) conforme mostrado na Equação (4).

$$\sigma_{ij}^E = \sigma_{ij}^0 + \Delta\sigma_{ij}^E \quad (4)$$

Uma vez calculado o estado de tensões do preditor elástico, o mesmo é levado à tensões resolvidas, como indicado na Equação (5):

$$\tau^{(\alpha)} = P_{ij}^{(\alpha)} \sigma_{ij}^E \quad (5)$$

A equação que calcula a taxa de deslizamento de cada sistema neste trabalho é da forma da lei de potência utilizada por Peirce et al. (1983).

$$\frac{d\gamma^{(\alpha)}}{dt} = \frac{da^{(\alpha)}}{dt} \left[ \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right] \left[ \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right]^{(1/m)-1} \quad (6)$$

Na Equação (6),  $da^{(\alpha)}/dt$  é a taxa de deslizamentos de referência no sistema  $\alpha$ . No expoente,  $m$  caracteriza a taxa de sensibilidade do material. O caso elasto-plástico, que é independente desta taxa, corresponde ao limite em que  $m \rightarrow 0$ . A função  $g^{(\alpha)}$  é a tensão crítica resolvida efetiva, que é tomada com um valor  $g_0^{(\alpha)}$  inicialmente e atualizada dependendo da soma das magnitudes dos deslizamentos, conforme ilustram as Equações (7) e (8).

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)} + \frac{dg^{(\alpha)}}{dt} \quad (7)$$

No caso de um endurecimento linear, a Equação (8) descreve  $dg^{(\alpha)}/dt$ .

$$\frac{dg^{(\alpha)}}{dt} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \left| \frac{d\gamma^{(\beta)}}{dt} \right|, \text{ onde: } h_{\alpha\beta} = qh + (1-q)h\delta_{\alpha\beta} \quad (8)$$

No presente estudo,  $h=0$ , o que faz com que  $dg^{(\alpha)}/dt=0$ , e portanto  $g^{(\alpha)}=g_0^{(\alpha)}$  ao longo da resolução de todo o problema. Em Rice (1987), um valor de tensão crítica resolvida do material ( $\tau_c$ ) que não distingue os sistemas de deslizamento é definido. Um fator leva as tensões críticas resolvidas do material ao seu valor efetivo, de acordo com sua orientação. Para a orientação definida acima, têm-se as tensões críticas iniciais:  $\tau_{c0}^{(1)}=(\sqrt{3})\tau_c$  e  $\tau_{c0}^{(2)}=\tau_{c0}^{(3)}=2\tau_c/(\sqrt{3})$ . Neste trabalho adota-se  $g_0^{(\alpha)}=\tau_{c0}^{(\alpha)}$ .

A taxa de deformação plástica do material ( $d\varepsilon_{ij}^P/dt$ ) é obtida com a Equação (1). Com esta se atualizam as tensões na peça descontando a parcela que deformou plasticamente com a Equação (9) (onde  $\sigma_{ij}^1$  representa as tensões atualizadas e  $G$  é o módulo de elasticidade transversal do material). Por fim calculam-se as tensões resolvidas atualizadas do material, como é mostrado na Equação (5), podendo se prosseguir para o próximo incremento de deslocamento prescrito.

$$\sigma_{ij}^1 = \sigma_{ij}^E - 2G \frac{d\varepsilon_{ij}^P}{dt} \quad (9)$$

### 3 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Foi resolvido um problema onde se analisa uma trinca sob tração (Modo I), em um monocristal cúbico de face centrada (CFC) de dimensões  $1000\mu\text{m} \times 1000\mu\text{m}$  sob estado plano de deformações (EPD) e com o comprimento da trinca de  $500\mu\text{m}$ , estando a ponta da trinca situada no centro do domínio, conforme ilustrado na Figura 1. São aplicados, então, deslocamentos prescritos verticais de  $0,625\mu\text{m}$  ao longo dos contornos superior e inferior. O material tem módulo de elasticidade de  $60840\text{MPa}$ ,  $\tau_c^0=60,84\text{MPa}$  e um coeficiente de

Poisson  $\nu=0,3$ .

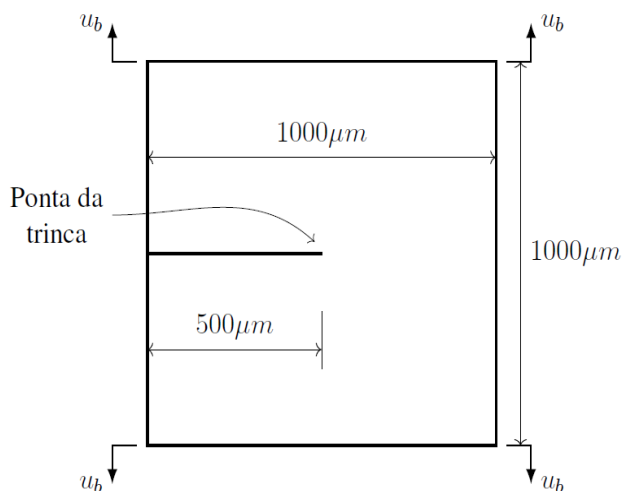


Figura 1: Peça com trinca em tração – Modo I.  $u_b$  denota o campo de deslocamentos no contorno.

O problema é resolvido considerando a decorrência de um tempo total de 1000 segundos, divididos em 1000 passos de 1 segundo cada. Assim,  $0,000625\mu\text{m}$  de deslocamento é imposto à cada passo de tempo.

### 3.1 Malha de elementos finitos

O domínio físico é discretizado considerando a simetria vertical do problema, de maneira que somente a parte superior da peça é simulada, conforme demonstrado na Figura 2. Adotou-se uma malha de  $1000\mu\text{m} \times 500\mu\text{m}$  discretizada em 4476 elementos finitos quadriláteros bilineares, com um refinamento maior na região da ponta da trinca, conforme apresentado na Figura 2. O deslocamento prescrito é aplicado em cada nó da face superior.

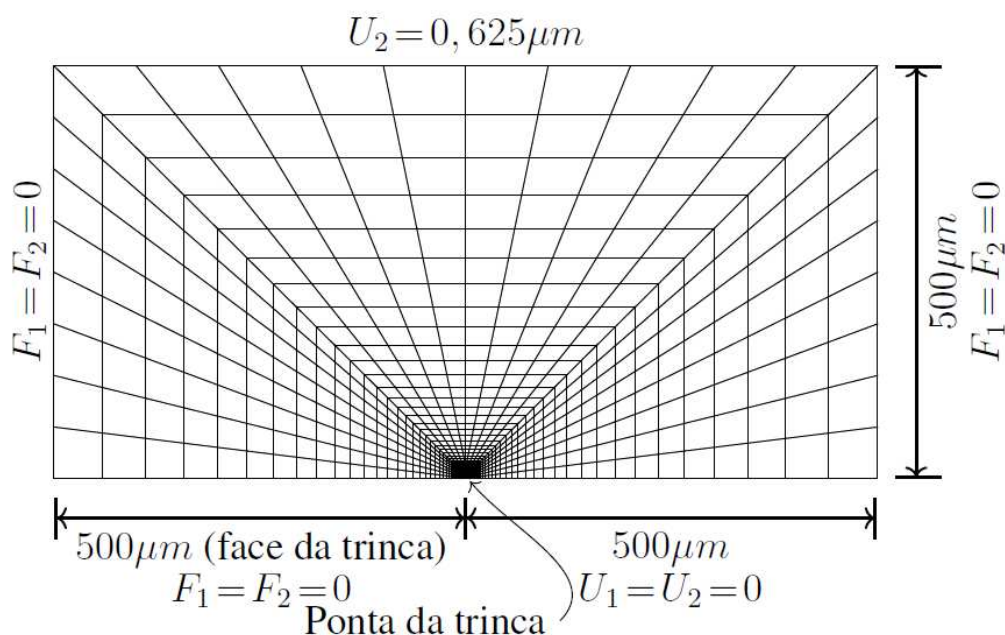


Figura 2: Domínio computacional: malha e condições de contorno do problema.  $F_i$  e  $U_i$  são as componentes do vetor de forças e de deslocamentos, respectivamente.

A malha utilizada é similar à utilizada por Columbus e Grujicic (2002). Na Figura 3 é apresentado um detalhe da malha na região próxima à ponta da trinca. A ponta da trinca está inserida em uma região aqui denominada *janela refinada*, de dimensões  $10\mu\text{m} \times 8,6\mu\text{m}$ , discretizada em  $50 \times 50$  elementos.

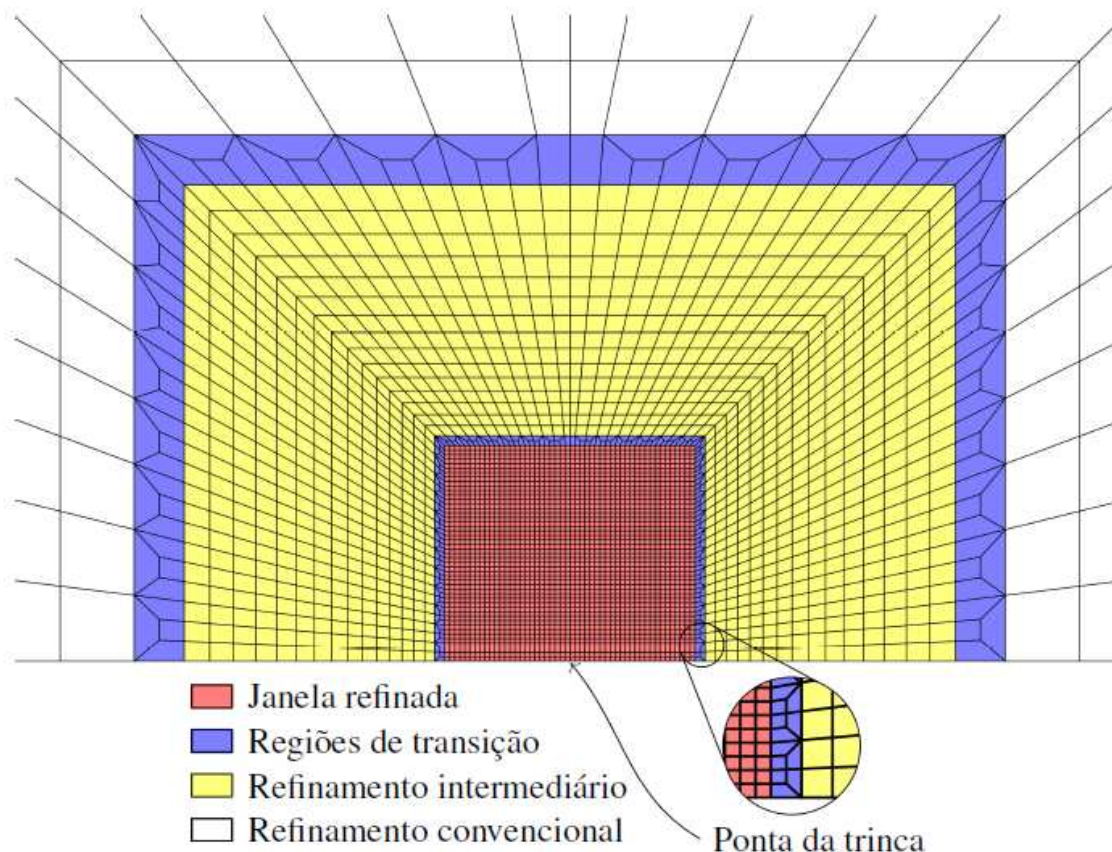


Figura 3: Detalhe da malha na região próxima à ponta da trinca. A ponta da trinca situa-se no ponto médio da aresta inferior da *janela refinada*.

## 4 RESULTADOS

Os resultados obtidos na presente pesquisa são comparados aos encontrados em Fornel et al. (2018), cujos resultados são a resposta ao problema conforme a teoria elasto-plástica independente do tempo. Os resultados a seguir estão organizados da seguinte forma: são plotados no eixo das abscissas um ângulo  $\theta$ , que inicia à direita da ponta da trinca e percorre a peça até atingir a face superior da trinca (de  $0^\circ$  até  $180^\circ$ ), e no eixo das ordenadas o quociente de uma componente de tensão dividido pela tensão crítica resolvida no material ( $\tau_c$ ). Adotou-se um raio de  $2,8\mu\text{m}$ .

Duas diferentes análises são feitas, uma quanto à variação da taxa de deslizamentos de referência ( $da/dt$ ), mantendo a taxa de sensibilidade do material ( $m$ ) constante e a outra análise variando a taxa de sensibilidade do material ( $m$ ), mantendo constante a taxa de deslizamentos de referência ( $da/dt$ ).

### 4.1 Taxa de deslizamentos de referência constante e análise de diferentes valores de $m$

Mantendo-se a taxa de deslizamentos de referência constante em  $da/dt=0,001\text{s}^{-1}$  (este valor



foi utilizado em diferentes trabalhos, como Peirce et al. (1983), Steinmann e Stein (1996), Columbus e Grujicic (2002) e Groh et al. (2009), foi feita uma variação nos valores da taxa de sensibilidade do material ( $m$ ). O esperado é que com a diminuição de  $m$  os resultados se aproximem da solução elasto-plástica (Fornel et al., 2018). Nas Figuras 4, 5 e 6 pode se verificar que isto ocorre: à medida que  $m$  diminui, a solução se aproxima da elasto-plástica (para as 3 componentes de tensão), sendo que para  $m$  foram adotados valores como  $m=0,005$  – utilizado por Steinmann e Stein (1996) e Peirce et al. (1983),  $m=0,01$ , utilizado por Columbus e Grujicic (2002) e Nielsen et al. (2012),  $m=0,25$  – usado nos estudos de Groh et al. (2009) e  $m=0,02$  – limite máximo admitido em Peirce et al. (1983). No trabalho de Martínez-Pañeda e Niordson (2016) o valor máximo admitido para  $m$  é 0,05. O valor de  $m=0,25$  não produziu resultados satisfatórios, ficando os mesmos consideravelmente distantes da solução elasto-plástica. Valores muito baixos (como  $m=0,002$ ) acabaram produzindo resultados instáveis numericamente (não mostrados nas figuras).

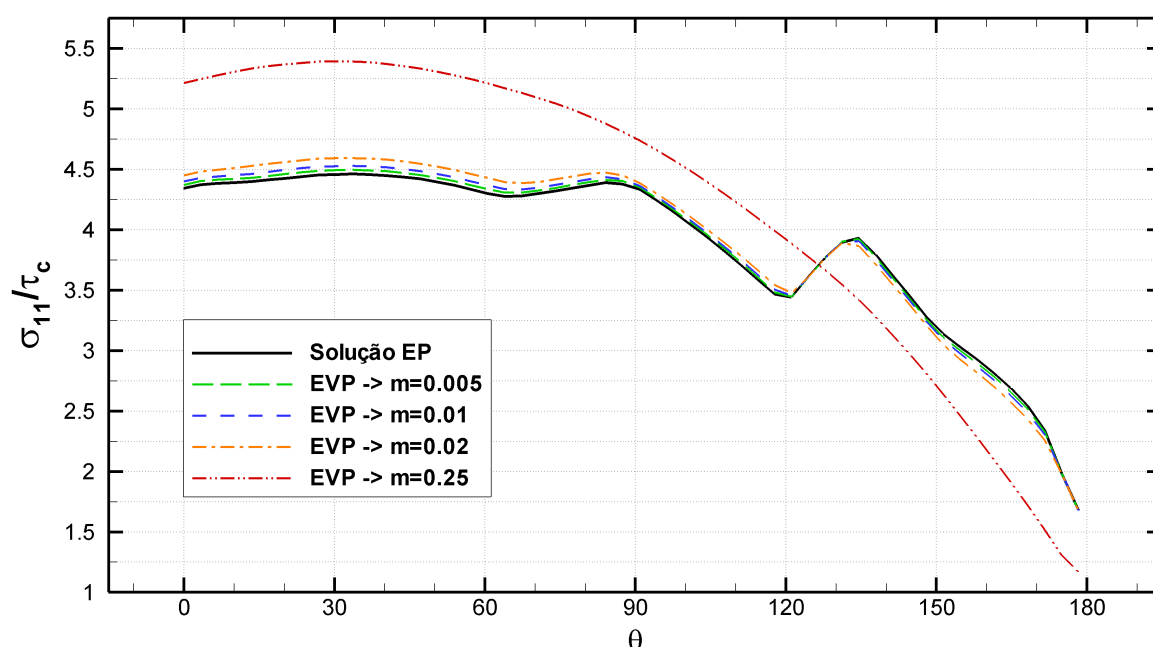


Figura 4: Análise da influência de  $m$ , observando o quociente  $\sigma_{11}/\tau_c$ . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-visco-plástica.

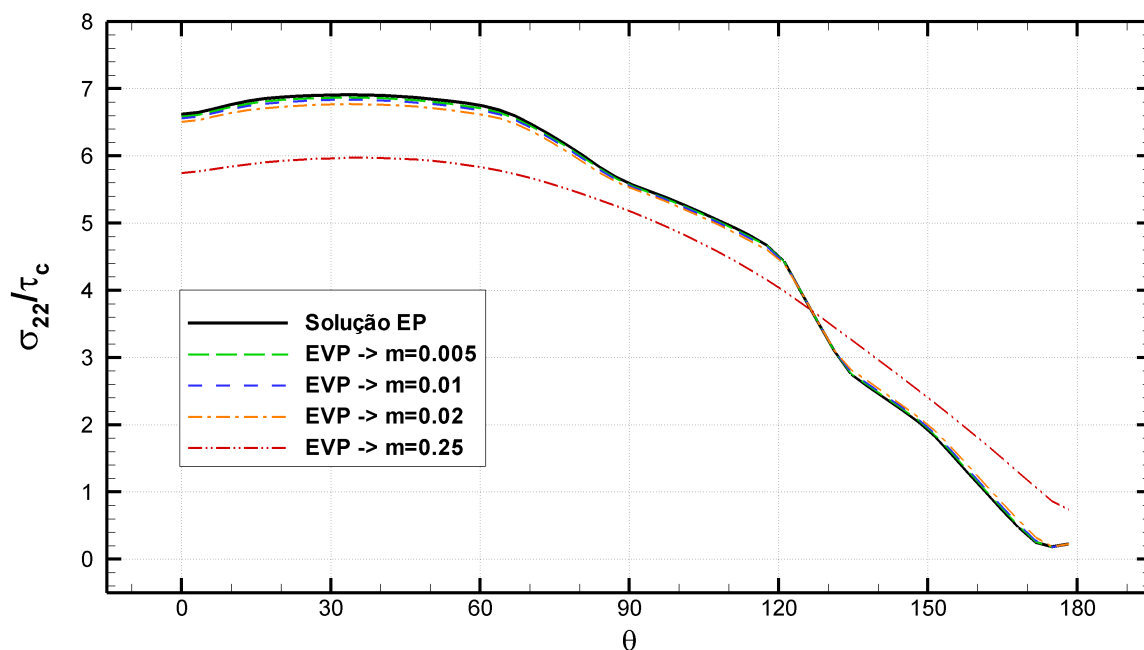


Figura 5: Análise da influência de  $m$ , observando o quociente  $\sigma_{22}/\tau_c$ . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-visco-plástica.

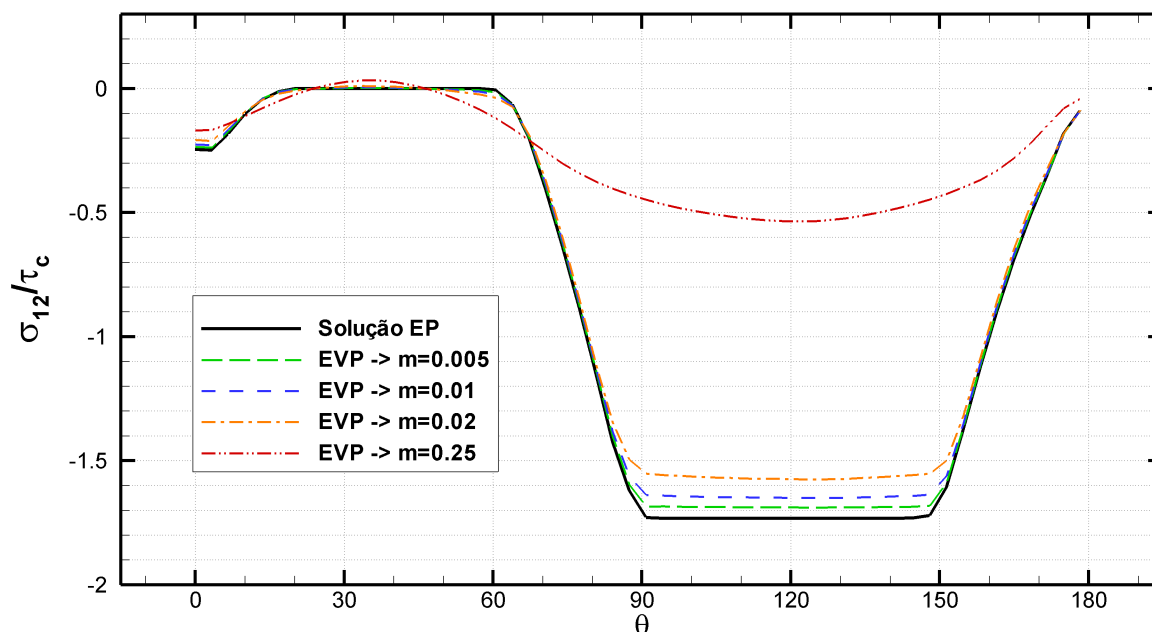


Figura 6: Análise da influência de  $m$ , observando o quociente  $\sigma_{12}/\tau_c$ . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-visco-plástica.

#### 4.2 Taxa de sensibilidade do material constante e análise de diferentes valores da taxa de deslizamentos de referência

Nestes casos manteve-se a taxa de sensibilidade do material constante a um valor de  $m=0,01$ . Dois valores das taxas de deslizamentos de referência foram testados:  $da/dt=0,001s^{-1}$ , representada aqui na cor azul nas figuras a seguir; e  $da/dt=0,000003s^{-1}$  foi uma estimativa do

valor real da taxa, fazendo uso da implementação de Fornel et al. (2018) – que não considera o efeito viscoso – da seguinte maneira: se encontrou o somatório dos deslizamentos totais de todos os nós da estrutura e então se estimou o deslizamento médio de cada nó que deslizou. Este valor é então dividido pelo tempo total da simulação, fornecendo finalmente o valor acima. Nas Figuras 7, 8 e 9 nota-se que os resultados obtidos com essa taxa de deslizamentos de referência retirada da solução elasto-plástica praticamente se sobrepõem à própria solução elasto-plástica para as três componentes de tensão, o que evidencia que é interessante buscar um valor ótimo para este parâmetro antes de resolver algum problema com o modelo elasto-visco-plástico, caso seja buscado um alto grau de precisão. Porém, também fica claro que com a taxa de deslizamentos de referência  $da/dt=0,001s^{-1}$  obtém-se uma boa aproximação dos resultados elasto-plásticos.

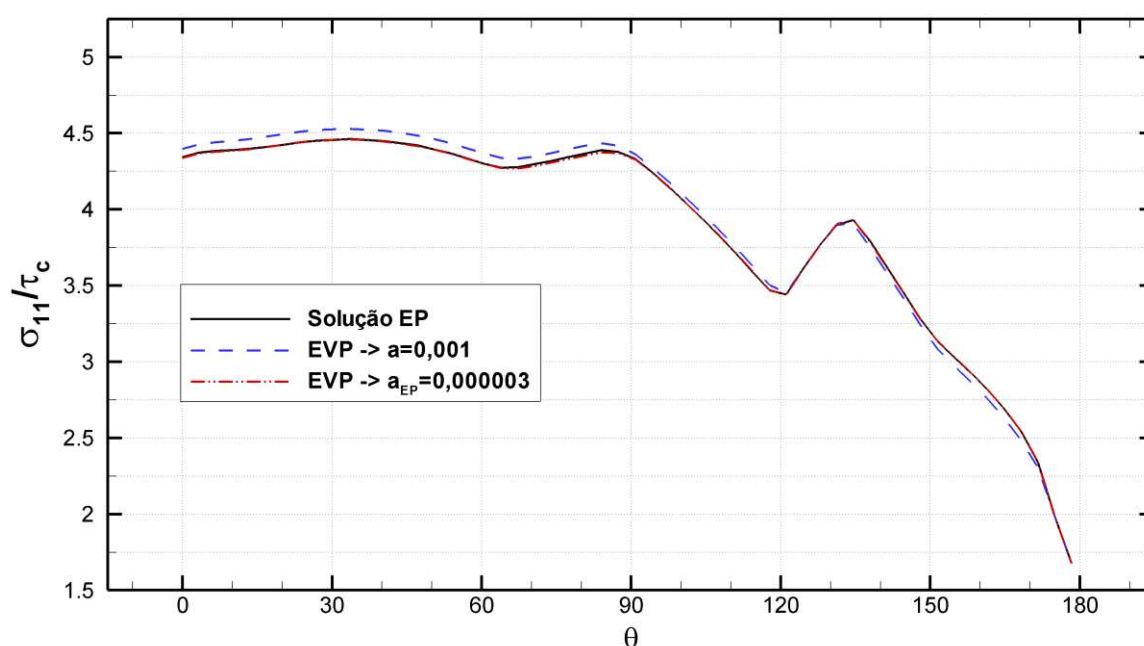


Figura 7: Análise da influência de  $da/dt$ , observando o quociente  $\sigma_{11}/\tau_c$ . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-visco-plástica.



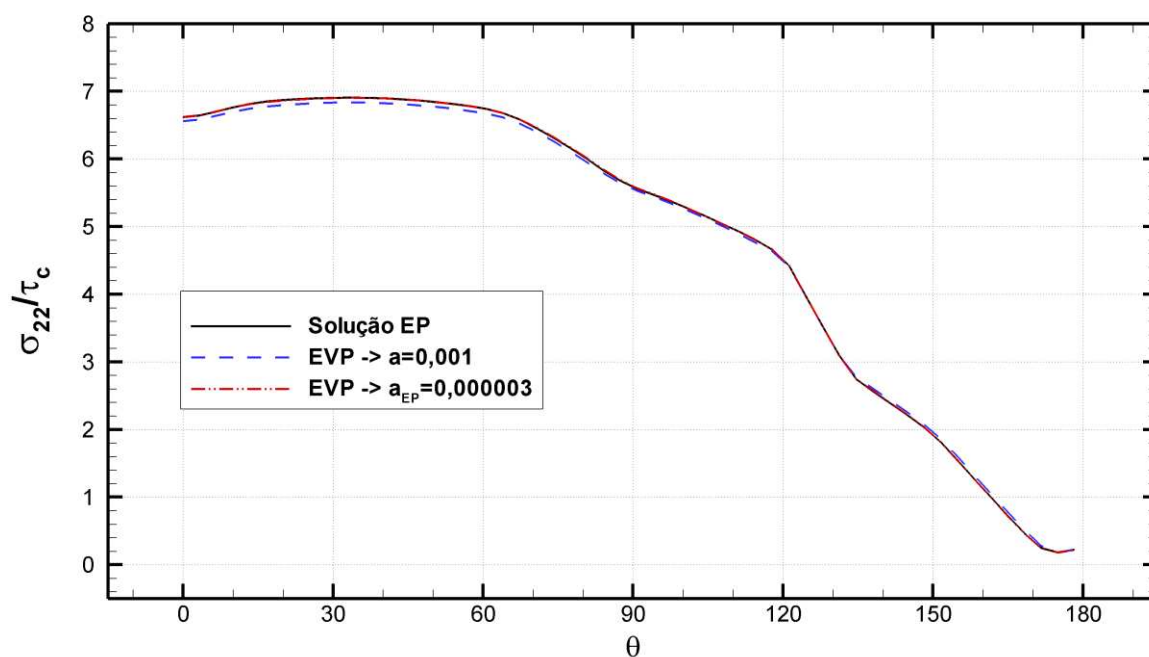


Figura 8: Análise da influência de  $da/dt$ , observando o quociente  $\sigma_{22}/\tau_c$ . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-visco-plástica.

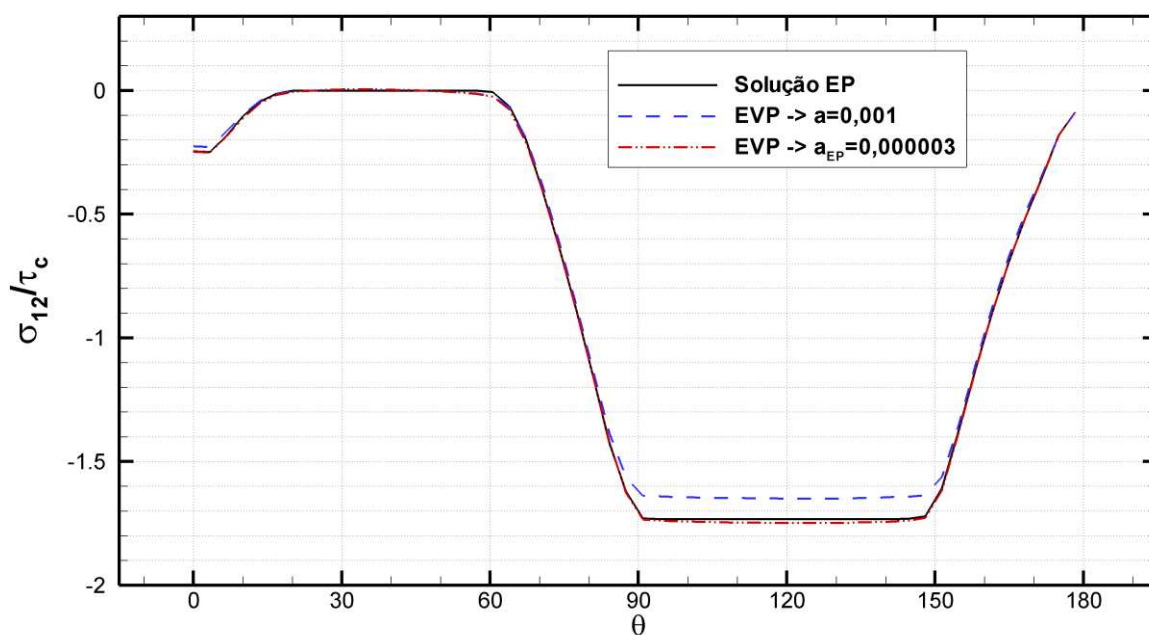


Figura 9: Análise da influência de  $da/dt$ , observando o quociente  $\sigma_{12}/\tau_c$ . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-visco-plástica.

## 5 CONCLUSÕES

Com os resultados apresentados é possível concluir que com  $m \leq 0,02$  os valores convergem para a solução plástica, sendo que quanto menor o valor de  $m$ , maior a convergência, até um limite de aproximadamente  $m=0,002$  para este estudo em específico, onde ocorrem

instabilidades numéricas. Valores de  $da/dt$  na ordem de  $10^{-3}s^{-1}$  também levam a uma convergência com a solução plástica, contudo, se for utilizado um  $da/dt$  que representa mais proximamente a taxa média de deslizamentos reais, existirá uma maior precisão da representação prevista. Na continuação deste trabalho serão investigados os efeitos da taxa de carregamento nos campos de tensão e na propagação das trincas.

## REFERÊNCIAS

- Asaro, R.J., Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in applied mechanics*, 23:1-115, 1983.
- Columbus, D., and Grujicic, M., A comparative discrete-dislocation/nonlocal crystal-plasticity analysis of plane-strain mode I fracture. *Materials Science and Engineering*, A323:386–402, 2002.
- Fornel, G.F., Bittencourt, E., e Braun, E., Simulação numérica dos campos de tensão na ponta de trincas sob Modo I em monocristais. *Trabalho a ser publicado neste congresso (MECOM 2018)*, 2018.
- Groh, S., Marin, E.B., Horstemeyer, M.F., and Zbib, H.M., Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal. *International Journal of Plasticity*, 25:1456-1473, 2009.
- Martínez-Pañeda, E., Niordson, C.F., On fracture in finite strain gradient plasticity. *International Journal of Plasticity*, 80:154-167, 2016.
- Nielsen, K.L., Niordson, C.F., Hutchinson, J.W., Strain gradient effects on steady state crack growth in rate-sensitive materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 96:61-71, 2012.
- Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta metall*, v. 31, n. 12, 1951–1976, 1983.
- Rice, J.R., Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. *Mechanics of Materials*. Elsevier, v. 6, n. 4, 317-335, 1987.
- Saeedvafa, M., Rice, J.R., Crack tip singular fields in ductile crystals with Taylor power-law hardening. II: plane strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v.37, n. 6673-691, 1989.
- Steinmann, P., and Stein, E., On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 129:325-254, 1996.