

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DOS CAMPOS DE TENSÃO NA PONTA DE TRINCAS SOB MODO I EM MONOCRISTAIS

NUMERICAL SIMULATION OF THE STRESS FIELDS AT CRACK TIPS UNDER MODE I IN SINGLE CRYSTALS

Guilherme F. Fornel ^(a), **Eduardo Bittencourt** ^(b) e **Eduardo Braun** ^(c)

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil (PPGEC/UFRGS), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Osvaldo Aranha 99, 3º andar, Porto Alegre, Brasil, ^(a)guilherme.fornel@ufrgs.br, ^(b)eduardo.bittencourt@ufrgs.br, ^(c)eduardo.braun@ufrgs.br.

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

Resumo. O campo de tensões em torno de uma trinca sob modo tração (modo I) e estado plano de deformações em monocristais de estrutura cúbica de face centrada é obtido numericamente. As hipóteses de pequenas deformações e trinca estacionária são consideradas. Utiliza-se o método dos elementos finitos como ferramenta de discretização numérica de um domínio retangular em torno da ponta da trinca. Adota-se uma relação constitutiva cristalina não viscosa e material não endurecível (perfeitamente plástico). Os campos de tensões são comparados com uma solução por aproximação assintótica à ponta da trinca.

Keywords: Crystal Fracture, Crystal Plasticity, Finite Element.

Abstract. The stress field around a crack under tensile mode (mode I) and plane strain in single crystals with face centered cubic structure is obtained numerically. The assumptions of small strains and stationary crack are considered. The finite element method is used as numerical discretization tool of a rectangular domain around the crack tip. It is adopted a non-viscous crystalline constitutive relation and perfectly-plastic material. The stress fields are compared with a solution by asymptotic crack tip analysis.

1 INTRODUÇÃO

Sabe-se que o comportamento de metais à fratura depende principalmente do estado de tensões na ponta de trincas, em escalas onde a estrutura cristalina é relevante. Nestas escalas é admissível considerar a ponta da trinca imersa em um monocristal metálico. Dessa forma, o estudo do comportamento de monocristais à fratura é de grande relevância ao estudo da *Mecânica da Fratura* em si. Além disso é de importância também às aplicações industriais, tais como aeronáuticas e microtecnologias.

No presente trabalho os campos de tensões em torno de uma trinca estacionária imersa em um monocristal metálico de estrutura cúbica de face-centrada (CFC) são obtidos numericamente considerando uma relação constitutiva elasto-plástica cristalina não viscosa. Considera-se o monocristal como não-endurecível (perfeitamente plástico). Os campos obtidos são comparados com os resultados de aproximação assintótica a ponta da trinca.

Apesar da importância do problema, trabalhos abordando o tema são relativamente escassos, como os de [Cuitino e Ortiz \(1993\)](#), [Cleveringa et al. \(2000\)](#) e [Columbus e Grujicic \(2002\)](#). Abaixo é descrita a solução analítica aproximada de [Rice \(1987\)](#) e a contribuição de [Drugan \(2001\)](#). Posteriormente neste trabalho é apresentada uma solução numérica para o problema.

2 SOLUÇÕES DE RICE (1987) E DRUGAN (2001)

Aplicando o método de aproximação assintótica à ponta da trinca [Rice \(1987\)](#) obteve uma solução aproximada para o campo de tensões em cristais CFC perfeitamente plásticos sob estado plano de deformações (EPD) que atendem o critério de Schmid¹, considerando uma situação de fluxo plástico em toda a região próxima a ponta. Devido a geometria e condições de contorno o problema é resolvido considerando três sistemas de deslizamento “efetivos”². A solução consiste no estados de tensões constante ao longo de setores circulares.

Na [Figura 1](#) é representado o campo de tensões em um sistema de coordenadas polares com a ponta da trinca sobre a origem (a) e superfície de escoamento (b). Na [Tabela 1](#) os valores das componentes do tensor de tensões de Cauchy normalizadas pela tensão crítica (τ_c) do cristal são apresentados conforme deduzidos por [Rice \(1987\)](#). $s^{(\alpha)}$ e $m^{(\alpha)}$ são os vetores diretores da direção e deslizamento e do plano cristalino α respectivamente; r é o raio e θ é o ângulo relativos ao sistema de coordenadas, medidos a partir da ponta da trinca.

Setor	σ_{11}/τ_c	σ_{22}/τ_c	σ_{12}/τ_c
A	4,90	7,35	0
B	3,67	4,90	-1,73
C	3,67	2,45	-1,73
D	2,45	0	0

Tabela 1: Componentes do tensor de tensões normalizadas pela tensão crítica para os setores na ponta da trinca. Fonte: adaptado de [Rice \(1987, p. 322\)](#).

[Drugan \(2001\)](#), baseando-se em resultados experimentais para cristais metálicos, modificou a solução de [Rice \(1987\)](#) a fim de impedir o modo de cisalhamento em dobra nos monocris-

¹O fluxo plástico em um sistema cristalino começa quando a tensão “resolvida” neste sistema atinge a tensão “crítica” do material.

²Os sistemas efetivos serão definidos na [Seção 3](#).

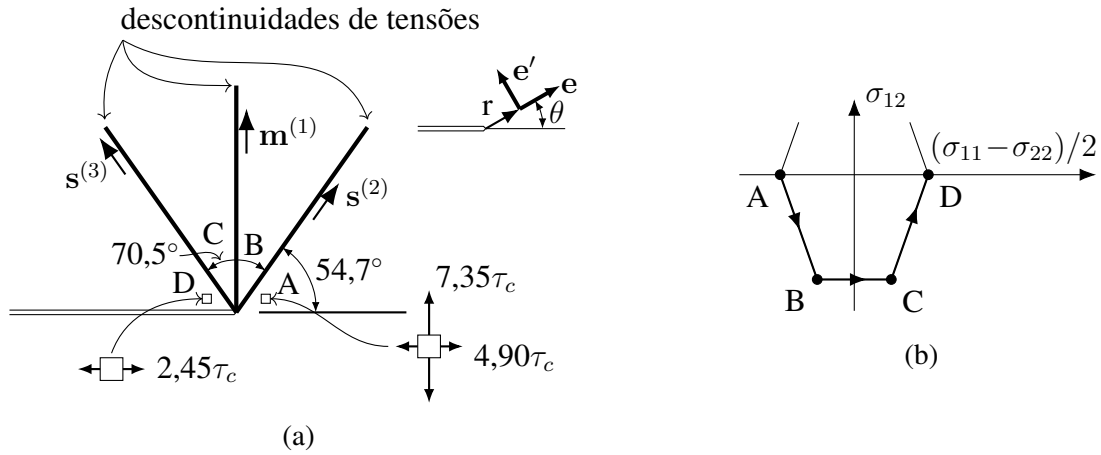


Figura 1: (a) Campo de tensões para trinca estacionária e (b) superfície de escoamento no plano $\{(\sigma_{11} - \sigma_{22})/2, \sigma_{12}\}$. τ_c é a tensão crítica do material. Fonte: adaptado de Rice (1987, p. 322).

tais. Com isso obteve soluções próximas às anteriores porém contemplando setores elásticos próximos à face da trinca.

3 MODELO PARA ESTADO PLANO DE DEFORMAÇÕES

O modelo utilizado neste trabalho segue a linha do trabalho de Asaro (1983), adaptado ao caso de pequenas deformações. O fluxo de deformação plástica é relacionado com os deslizamentos nos sistemas cristalográficos *ativos* α por

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = (\dot{\mathbf{E}}^p)_{ij} = \sum_{\alpha} P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad \text{com } P_{ij}^{(\alpha)} = (\mathbf{P}^{(\alpha)})_{ij} = \frac{1}{2} \left(m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} + m_j^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} \right) \quad (1)$$

onde $\gamma^{(\alpha)}$ representa o deslizamento plástico no sistema α e $P_{ij}^{(\alpha)}$ a componente ij do tensor de orientação de Schmid para o sistema α . Na Equação 1 $m_i^{(\alpha)}$ e $s_i^{(\alpha)}$ representam as componentes dos vetores $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ e $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ respectivamente. Para a configuração cristalográfica adotada neste trabalho temos: $\mathbf{m}^{(1)} = (0; 1)$, $\mathbf{s}^{(1)} = (1; 0)$, $\mathbf{m}^{(2)} = (-0,816; 0,577)$, $\mathbf{s}^{(2)} = (0,577; 0,816)$, $\mathbf{m}^{(3)} = (-0,816; -0,577)$, $\mathbf{s}^{(3)} = (-0,577; 0,816)$. As tensões críticas dos sistemas são $\tau_c^{(1)} = 1,73 \tau_c$ e $\tau_c^{(2)} = \tau_c^{(3)} = 1,15 \tau_c$.

Na condição de pequenas deformações a equação constitutiva proposta por Asaro (1983, p. 40) assume a forma

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} - \sum_{\beta=1}^n C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad (2)$$

C_{ijkl} é o tensor de Hooke.

Contraindo a Equação 2 com $P_{ij}^{(\alpha)}$ e notando que a tensão resolvida no sistema α é $\dot{\tau}^{(\alpha)} = P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\sigma}_{ij}$ fica

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} - \sum_{\beta=1}^n P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\tau}^{(\alpha)}. \quad (3)$$

4 SOLUÇÃO DO PROBLEMA ELASTO-PLÁSTICO

Aplicando o método de Euler implícito a [Equação 3](#) pode ser aproximada por

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \Delta \epsilon_{kl} - \sum_{\beta=1}^n P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \Delta \gamma^{(\beta)} = \Delta \tau^{(\alpha)}. \quad (4)$$

Para a solução do problema elasto-plástico descrito pela [Equação 4](#) adota-se a abordagem incremental *preditor-corretor*, descrita a seguir.

Em cada incremento de deformação $\Delta \epsilon_{kl}$ calcula-se o incremento de tensões através da relação $\Delta \sigma_{ij}^E = C_{ijkl} \Delta \epsilon_{kl}$ (preditor elástico). O estado de tensões do preditor elástico σ_{ij}^E é então atualizado a partir do estado de tensões inicial σ_{ij}^0 por $\sigma_{ij}^E = \sigma_{ij}^0 + \Delta \sigma_{ij}^E$. Verifica-se então se houve plastificação e, caso ocorra, corrige-se o estado de tensões em termos da deformação plástica.

A verificação e correção são realizadas pelas etapas:

- Primeiramente calcula-se a tensão resolvida do preditor elástico $\tau^{(\alpha),E} = P_{ij}^{(\alpha)} \sigma_{ij}^E$;
- Verifica-se a condição de escoamento $f = |\tau^{(\alpha),E}| - |\tau_c^{(\alpha),0}|$. Se $f < 0$ então o sistema α é não-crítico e $\Delta \gamma^{(\alpha)} = 0$. Se $f \geq 0$, α é crítico;
- Para os sistemas críticos $\Delta \tau^{(\alpha),E} = |f| = \left| |\tau^{(\alpha),E}| - |\tau_c^{(\alpha),0}| \right|$;
- Os deslizamentos $\Delta \gamma^{(\beta)}$ nos sistemas críticos necessários ao cumprimento da equação constitutiva são obtidos pela [Equação 4](#) fazendo $P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \Delta \epsilon_{kl} = \Delta \tau^{(\alpha),E}$ e $\Delta \tau^{(\alpha)} = 0$ (a fim de que as tensões mantenham-se sobre a superfície de plastificação);

Com isso a [Equação 4](#) torna-se

$$\sum_{\beta=1}^n N_{\alpha\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} = \Delta \tau^{(\alpha),E}, \quad (5)$$

na qual o tensor $N_{\alpha\beta} = P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)}$ é o tensor constitutivo cristalino, que relaciona “tensões” e “deformações” a nível da microestrutura do cristal.

Em notação matricial a [Equação 5](#) fica

$$\mathbb{N} \mathbb{G} = \mathbb{T}, \quad (6)$$

com \mathbb{G} o vetor dos $\Delta \gamma^{(\beta)}$, \mathbb{T} o vetor dos $\Delta \tau^{(\alpha),E}$ e \mathbb{N} a matriz dos $N_{\alpha\beta}$.

5 DISCRETIZAÇÃO EM ELEMENTOS FINITOS

Sejam V o domínio e S a fronteira do problema elasto-plástico. Segundo princípio dos trabalhos virtuais temos

$$\int_V \sigma_{ij} \delta u_{i,j} dV = \int_S T_i \delta u_i dS,$$

³Logo utiliza-se na [Equação 4](#) somente a parcela da tensão resolvida “desequilibrada” (no sentido da equação constitutiva).

onde u_i e T_i são a componente i dos campos de deslocamentos e vetores tensão externos respectivamente. Aplicando a interpolação para $u_i(x, y)$ da forma $u_i = \sum_n \Phi^n U_i^n$, Φ^n funções de interpolação e U_i^n deslocamentos nodais, o problema torna-se

$$F_i^{n,int} = \int_V \sigma_{ij} \Phi_{,j}^n dV = \int_S T_i \Phi^n dS = F_i^{n,ext}, \quad (7)$$

no qual $F_i^{n,int}$ denota forças internas e $F_i^{n,ext}$ forças externas, que é a condição de equilíbrio.

A solução do problema não linear é feita pelo método de Newton-Raphson. Sejam \mathbb{F}^{int} o vetor de forças internas, \mathbb{F}^{ext} o vetor de forças externas, \mathbb{R} o vetor de resíduo (forças desequilibradas) e \mathbb{U} o vetor de deslocamentos. Então

$$\mathbb{F}^{int} - \mathbb{F}^{ext} = \mathbb{R}.$$

A expansão de \mathbb{R} em termos de \mathbb{U}

$$\left(\frac{d\mathbb{R}^T}{d\mathbb{U}} \right) \Big|_{N-1} \Delta\mathbb{U}|_N = -\mathbb{R}|_{N-1},$$

em que $|_N$ denota avaliação na iteração N e $\frac{d\mathbb{R}^T}{d\mathbb{U}}$ é a matriz de rigidez tangente \mathbb{K}_t .

$$\mathbb{K}_t = \frac{d\mathbb{R}^T}{d\mathbb{U}} = \frac{d\mathbb{F}^{intT}}{d\mathbb{U}} - \frac{d\mathbb{F}^{extT}}{d\mathbb{U}} = \frac{d\mathbb{F}^{intT}}{d\mathbb{U}},$$

pois $\frac{d\mathbb{F}^{extT}}{d\mathbb{U}} = 0$ para forças conservativas, consideradas neste trabalho.

Utilizando a [Equação 7](#) e denotando por \mathbb{B} a matriz dos $\Phi_{,j}^n$,

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_t &= \frac{d\mathbb{F}^{intT}}{d\mathbb{U}} = \frac{1}{d\mathbb{U}} \int_V [d\sigma_{ij}]^T \mathbb{B} dV = \frac{1}{d\mathbb{U}} \int_V [d\epsilon_{kl}]^T \mathbb{C} \mathbb{B} dV \\ &= \frac{d\mathbb{U}^T}{d\mathbb{U}} \int_V \mathbb{B}^T \mathbb{C} \mathbb{B} dV = \int_V \mathbb{B}^T \mathbb{C} \mathbb{B} dV, \end{aligned}$$

no qual \mathbb{C} é a matriz constitutiva elasto-plástica.

Devido a natureza multiescala da teoria, com sistema de equações resolvido na “microestrutura”, e critério de escoamento em termos de valores absolutos, a obtenção explícita da matriz \mathbb{C} é dificultada. Dessa forma, a matriz de rigidez tangente é avaliada numericamente através de perturbação nas coordenadas nodais a cada passo de tempo.

6 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

A fim de comparar o modelo numérico com o resultado analítico (aproximado) é proposto um problema compatível com uma trinca sob tração. O problema consiste em um monocristal CFC de dimensões $1000\mu m \times 1000\mu m$ sob EPD com uma trinca de $500\mu m$ de comprimento, cuja ponta está situada no centro do domínio (ver o diagrama da [Figura 2\(a\)](#)). São aplicados deslocamentos prescritos de $0,625\mu m$ nos contornos superior e inferior.

O domínio físico é discretizado considerando a simetria do problema. Adota-se uma malha de $1000\mu m \times 500\mu m$ discretizada em 4476 elementos quadriláteros bilineares, como apresentado na [Figura 2\(b\)](#). Os deslocamentos prescritos são aplicados em 1000 passos de tempo.

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

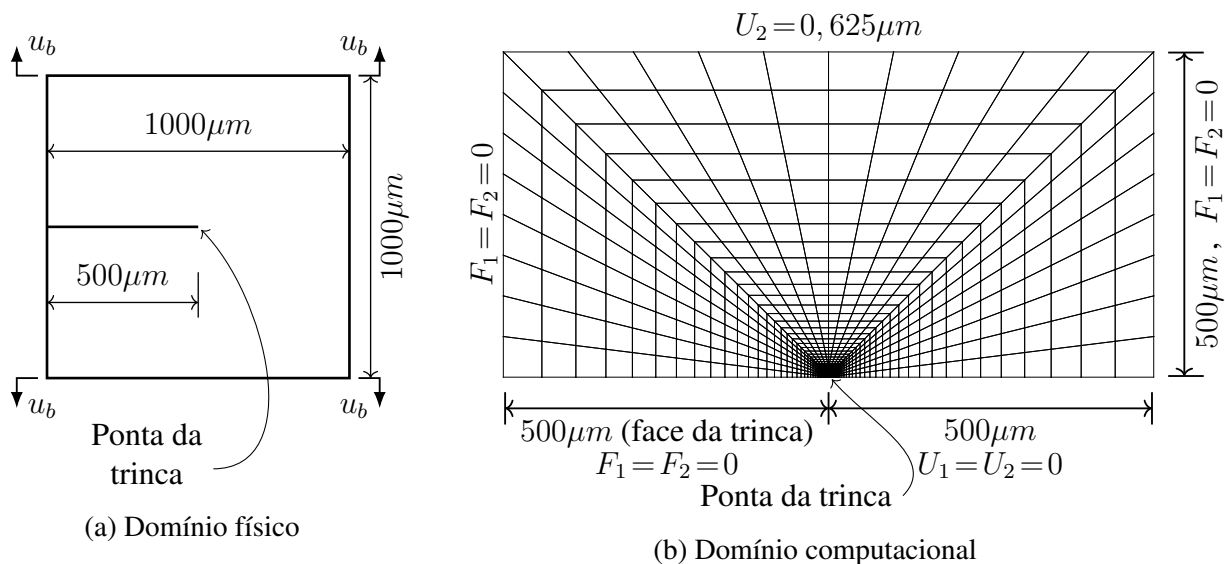


Figura 2: (a) Domínio físico do problema, $1000\mu m \times 1000\mu m$; u_b denota o campo de deslocamentos impostos no contorno. (b) Domínio computacional: malha e condições de contorno do problema. F_i e U_i são das componentes i do vetor de forças e vetor de deslocamentos respectivamente.

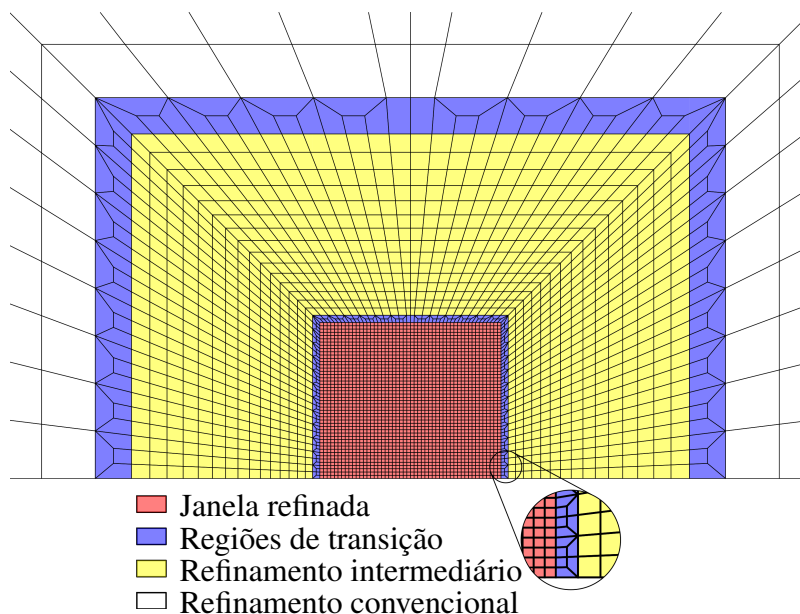


Figura 3: Detalhe da malha próxima à ponta da trinca. A ponta da trinca situa-se no ponto médio da aresta da *janela refinada* de $10\mu m \times 8,6\mu m$.

Os parâmetros para o material são $\tau_c = 60,84\text{MPa}$, módulo de elasticidade 60840MPa e

coeficiente de Poisson 0,3, da ordem de valores utilizados em simulações numéricas (e.g. Columbus e Grujicic (2002) e Peirce et al. (1982)).

7 RESULTADOS

7.1 Campos de tensão e deformação

A Figura 4 apresenta os campos de tensões e de deformação plástica em uma região próximo a janela refinada.

Os valores das tensões foram interpolados linearmente em malhas polares definindo os quatro setores da Figura 1. O Setor A para σ_{22} normalizada pela tensão crítica do material é apresentado na Figura 4(e). Na Figura 4(f) é mostrado um mapa de isovalores para ϵ_{22}^{pl} na região da janela refinada; a zona em branco representa um setor elástico para esta componente do tensor de tensões.

Na Figura 5 são apresentados mapas de isovalores para os deslizamentos nos sistemas efetivos. A Figura 6 apresenta os valores das tensões normalizadas em função do ângulo para os raios de 1, $8\mu m$, 2, $8\mu m$ e 3, $8\mu m$ a partir da ponta da trinca.

7.2 Discussão

Na Figura 4 é apresentado o campo para a pressão hidrostática, cujo valor é da ordem de três vezes o valor das componentes desviadoras das tensões. Percebe-se na Figura 4(e) a variação do estado de tensões com o raio em relação a ponta da trinca. Além disso, é observado um setor elástico na região próxima a face da trinca, concordando com os resultados de Drugan (2001).

Analisando a variação das tensões para um mesmo raio (i.e. a Figura 6), os setores A e B são os quais há menor variabilidade dos valores para σ_{11}/τ_c e σ_{22}/τ_c e os setores A e C para σ_{12}/τ_c . Portanto o setor A está bem definido no modelo numérico, e os setores B, C e D apresentam desvios maiores aos resultados analíticos.

Resultados numéricos apresentados em Cuitino e Ortiz (1993), Cleveringa et al. (2000) e Columbus e Grujicic (2002) também apresentam certa dependência do raio, embora isto não seja mostrado de forma explícita como no presente trabalho. Tais referências também não empregam exatamente as mesmas condições usadas em Rice (1987), seja na abordagem (discordâncias discretas, modelos não locais, modelos em grandes deformações) ou seja no comportamento do material sobre deformação (modelos de endurecimento).

Em Rice (1987) é empregada uma aproximação na qual a dependência em r é eliminada nas equações de equilíbrio,

$$r \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r} \right) e_i + \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \theta} \right) e'_i = 0, \quad r \rightarrow 0 \Rightarrow \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \theta} \right) e'_i = 0,$$

i.e., o termo $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r}$ é desprezado.

Os resultados presentes neste trabalho sugerem que um estudo da influência de $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r}$ poderia ser interessante ao entendimento do campo de tensões na ponta da trinca.

Adicionalmente, os mapas de isovalores para os deslizamentos nos sistemas efetivos apresentados na Figura 5 têm boa concordância com a distribuição em setores obtida por Cuitino e Ortiz (1993) em simulações numéricas.

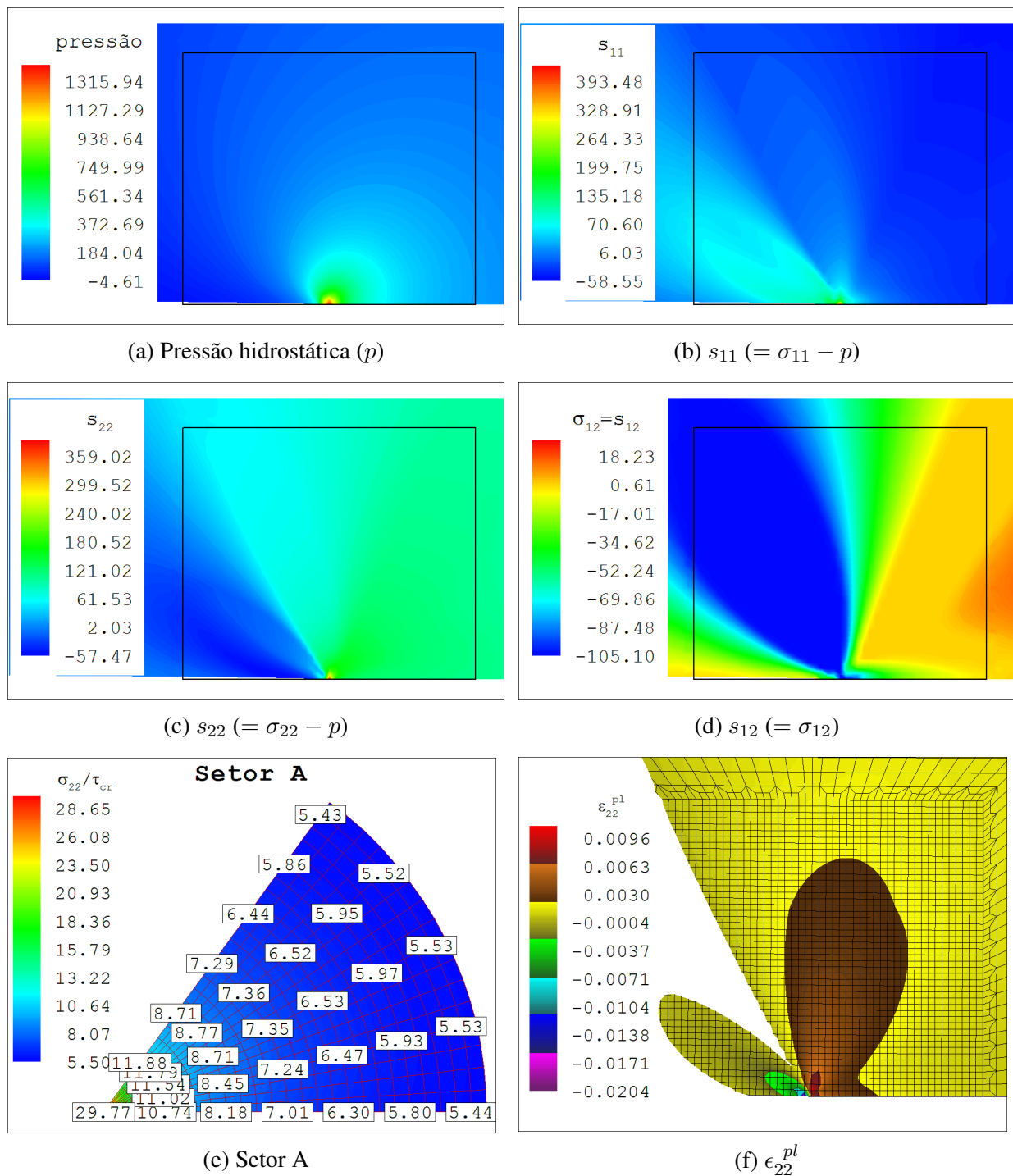


Figura 4: (a)-(d) Campos de tensões na ponta da trinca; o retângulo delimita a janela refinada; s_{ij} são as componentes desviadoras das tensões. (e) Malha auxiliar (polar) definindo o Setor A da Figura 1 para σ_{22}/τ_{cr} e (f) valor de ϵ_{22}^{pl} na janela refinada com setor elástico (em branco) próximo a face da trinca.

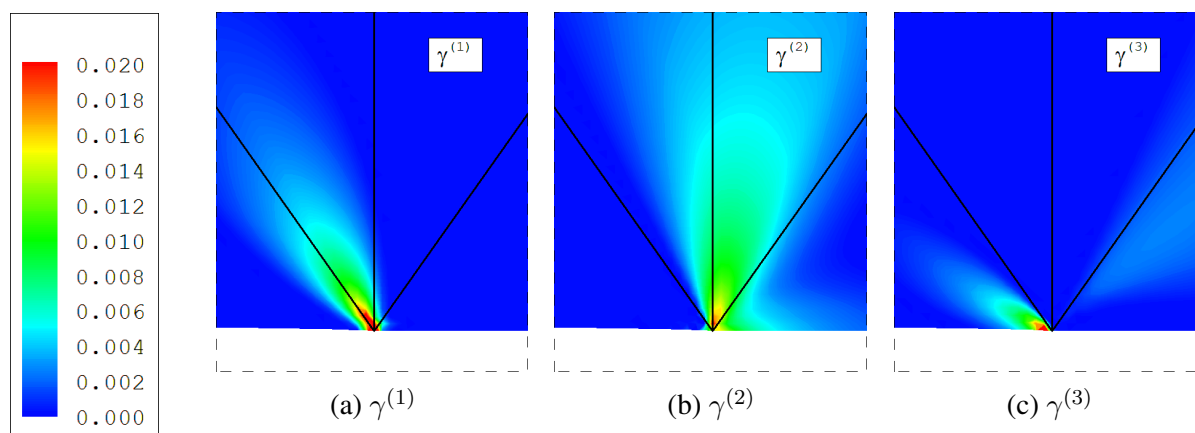


Figura 5: Mapas de isovalores dos deslizamentos cristalinos para (a) $\gamma^{(1)}$, (b) $\gamma^{(2)}$ e (c) $\gamma^{(3)}$.

8 CONCLUSÕES

O modelo numérico aproxima-se da solução analítica aproximada (Rice (1987)) para determinados valores do raio e do ângulo. Porém a solução mostra-se claramente dependente do raio, contrário ao que seria esperado pela solução teórica.

O modelo numérico também contempla de forma correta setores elásticos descritos por Drugan (2001) para modo de cisalhamento em dobra impedido.

Uma solução dos campos de tensão por métodos perturbativos (e.g. Van Dyke (1975), Nayfeh (2008)) está sendo desenvolvida pelos autores de modo a investigar a influência da dependência do raio na solução.

AGRADECIMENTOS:

Os autores agradecem o apoio do Governo Brasileiro através de bolsas do CNPq e CAPES.

REFERÊNCIAS

- Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in applied mechanics*, 23:1–115, 1983.
- Cleveringa H., Van der Giessen E., e Needleman A. A discrete dislocation analysis of mode I crack growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6):1133–1157, 2000.
- Columbus D. e Grujicic M. A comparative discrete-dislocation/nonlocal crystal-plasticity analysis of plane-strain mode I fracture. *Materials Science and Engineering: A*, 323(1):386–402, 2002.
- Cuitino A.M. e Ortiz M. Computational modelling of single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1(3):225, 1993.
- Drugan W. Asymptotic solutions for tensile crack tip fields without kink-type shear bands in elastic-ideally plastic single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9):2155–2176, 2001.
- Nayfeh A.H. *Perturbation methods*. John Wiley & Sons, 2008.
- Peirce D. et al. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta metallurgica*, 30(6):1087–1119, 1982.
- Rice J.R. Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. *Mechanics of Materials*, 6(4):317–335, 1987.
- Van Dyke M. *Perturbation methods in fluid mechanics*. Parabolic Press, 1975.

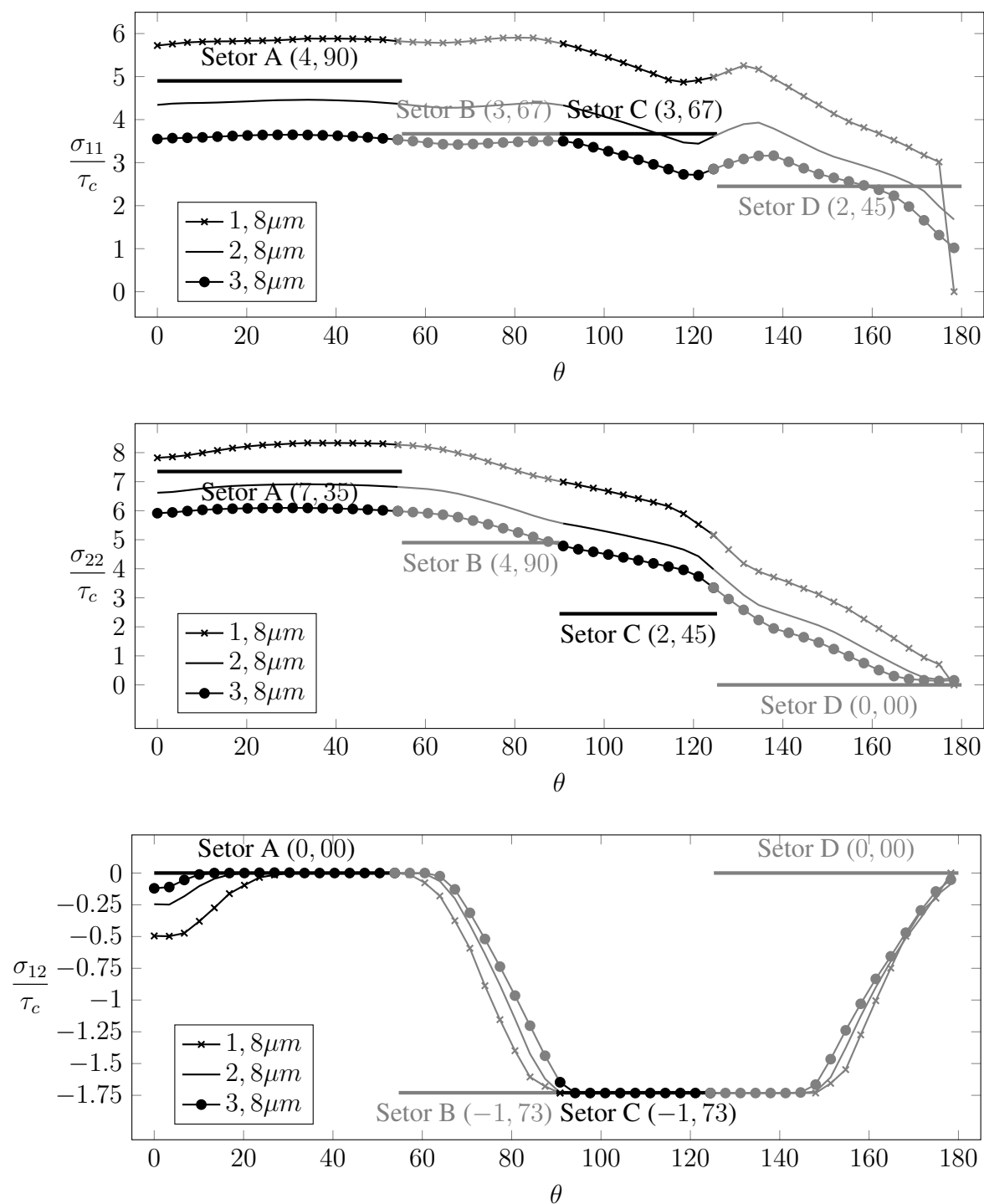


Figura 6: Comparação das tensões obtidas na simulação numérica com os valores da Tabela 1 para os raios de $1, 8\mu\text{m}$, $2, 8\mu\text{m}$ e $3, 8\mu\text{m}$ a partir da ponta da trinca.