# Modelowanie efektów skali w zagadnieniach kontaktowych

Rozprawa doktorska mgr inż. Maciej J. Lewandowski-Szewczyk

Ркомоток prof. dr hab. inż. Stanisław Stupkiewicz



Instytut Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa

Luty 2021

(...) omni enim habenti dabitur, et abundabit: ei autem qui non habet, et quod videtur habere, auferetur ab eo.

Mt 25,29

Zakład Mechaniki Materiałów Instytut Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa

#### Modelowanie efektów skali w zagadnieniach kontaktowych

mgr inż. Maciej J. Lewandowski-Szewczyk

Promotor: prof. dr hab. inż. Stanisław Stupkiewicz

#### Streszczenie

Jednym z obecnie aktywnych kierunków badań efektów skali są zagadnienia kontaktowe, np. indentacji. Do opisu efektów skali potrzebne są modele kontinuum zawierające w sobie długość charakterystyczną, co najczęściej pociąga za sobą występowanie dodatkowych stopni swobody — niewiadomych wyższego rzędu. Pomimo istnienia wielu modeli kontinuum wyższego rzędu wciąż niewiele uwagi poświęcono sformułowaniu modeli kontaktowych uwzględniających relacje pomiędzy klasycznymi warunkami kontaktowymi a niewiadomymi wyższego rzędu.

W niniejszej rozprawie podjęto tematykę modelowania efektów skali w zagadnieniach kontaktowych przy wykorzystaniu metody elementów skończonych na przykładzie dwóch wybranych modeli wyższego rzędu: ciała Cosseratów oraz gradientowej plastyczności kryształów.

Wybrano model mikropolarnej sprężystości Cosseratów, jako przykład najprostszego kontinuum wyższego rzędu. Stworzono nowy, bazujący na rozważaniach mikromechanicznych, model jednostronnego kontaktu bez tarcia, który uwzględnia interakcję klasycznych warunków kontaktowych z niewiadomymi wyższego rzędu bez wprowadzania dodatkowych parametrów. W celu zaprezentowania charakterystycznych cech zaproponowanego modelu kontaktowego przeanalizowano dwa zagadnienia: ściskanie pasma dwiema sztywnymi płaszczyznami i zagadnienie typu Hertza. W obu zagadnieniach pojawiły się warstwy brzegowe związane z warunkami brzegowymi wymuszonymi przez mikromechaniczny model kontaktowy. Ponadto w zagadnieniu typu Hertza otrzymano niestandardowe rozkłady ciśnienia kontaktowego, co zmodyfikowało przebieg twardości w funkcji zagłębienia.

W ramach modelowania efektów skali z zastosowaniem modelu gradientowej plastyczności kryształów stworzono model obliczeniowy wciskania klina w monokryształ niklu w płaskim stanie odkształcenia. Zredukowano w sposób konsystentny trójwymiarowy model plastyczności z efektami gradientowymi do przypadku dwuwymiarowego uwzględniając fizyczne pochodzenie efektywnych systemów poślizgu. Następnie wyznaczono parametry materiałowe na podstawie dostępnych w literaturze danych eksperymentalnych — niezależnych od modelowanego zagadnienia wciskania klina. Otrzymane w symulacji pola obrotów sieci krystalicznej, gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych oraz krzywe siła–zagłębienie porównano z wynikami eksperymentalnymi. Dane doświadczalne dotyczyły zagłębienia około 200 µm, dla którego efekty skali są pomijalne, dlatego przeprowadzono analizę przewidywanych efektów skali przy zmniejszaniu zagłębienia aż do 1 µm. Otrzymany wzrost twardości jest zgodny z przewidywaniami fenomenologicznego modelu Nixa i Gao (1998).

SŁOWA KLUCZOWE: efekty skali, zagadnienia kontaktowe, ciało Cosserat, plastyczność kryształów, gradientowa plastyczność, metoda elementów skończonych

Department of Mechanics of Materials Institute of Fundamental Technological Research Polish Academy of Sciences Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa

#### Modeling of size effects in contact problems

Maciej J. Lewandowski-Szewczyk, BEng, MSc

SUPERVISOR: Stanisław Stupkiewicz, Professor

#### Abstract

The size effects in contact problems, e.g., indentation, are one of the current research areas. To describe size effects, continuum models that include a characteristic length scale are needed, usually involving additional degrees of freedom—higher-order unknowns. Despite many higher-order continuum models available, still little attention has been paid to the formulation of contact models that deal with the relation between classical contact constraints and higher-order unknowns.

This dissertation deals with modeling the size effects in contact problems using the finite element method, considering two selected higher-order continuum models: the Cosserat body and the gradient crystal plasticity model.

The micropolar elasticity Cosserat model has been chosen as the simplest higherorder model available. A new unilateral frictionless contact model has been derived from micromechanical considerations. The proposed contact model considers the interaction between classical contact constraints and higher-order unknowns without introducing new material parameters. Two problems illustrating the proposed model's characteristic features have been analyzed: compression of an infinite strip by rigid surfaces and a Hertz-like contact problem. In both problems, boundary layers emerge due to boundary conditions enforced by the micromechanical contact model. Also, non-standard contact pressure distribution has been obtained in the Hertz-like problem, which affects size effects in hardness.

A computational model of wedge indentation into a nickel single crystal in a plane strain condition has been developed as part of the modeling of size effects using a gradient-enhanced crystal plasticity model. The 3D version of the gradient-enhanced crystal plasticity model has been consistently reduced to a 2D case considering the effective slip systems' physical origin. Next, material parameters have been calibrated using experimental data available in the literature—independent from the considered wedge indentation problem. Obtained in the simulation lattice rotations, geometrically necessary dislocations density, and force-penetration curves have been examined against experimental data. For the indentation depth of  $200 \,\mu$ m, as used in the experiment, the size effects have been found negligible. Thus a study of size effects has been performed for the indentation depth varying between 1  $\mu$ m and 200  $\mu$ m. The resulting increase in hardness is consistent with Nix and Gao's (1998) phenomenological model predictions.

KEYWORDS: size-effects, contact problems, Cosserat, crystal plasticity, gradient plasticity, finite element method

## Podziękowania

Chciałbym najserdeczniej podziękować mojemu promotorowi, prof. Stanisławowi Stupkiewiczowi za możliwość podjęcia studiów doktoranckich w IPPT, nieocenioną pomoc, przekazaną wiedzę, wyrozumiałość oraz niezmierzone pokłady cierpliwości.

Bardzo dziękuję prof. Henrykowi Petrykowi za możliwość uczestniczenia w projekcie OPUS 2014/13/B/ST8/04286 oraz Narodowemu Centrum Nauki za udzielone wsparcie w ramach projektu PRELUDIUM 2015/17/N/ST8/01113.

Dziekuję moim Rodzicom za to, że zadbali i umożliwili mi moją edukację.

Na koniec pragnę podziękować mojej ukochanej Żonie za wsparcie, niezachwianą wiarę we mnie i wyrozumiałość.

# Spis treści

1	Wstęp				
	1.1	Zakres	i cel pracy	1	
	1.2	Układ i	i zawartość rozprawy	4	
2	Przegląd literatury				
	2.1	Eksper	ymentalnie obserwowane efekty skali	7	
	2.2	Modele	e sprężystości wyższego rzędu	11	
	2.3	Gradie	ntowa plastyczność kryształów	12	
	2.4	Modele	e kontaktowe dla kontinuum wyższego rzędu	14	
3	Wybrane modele kontinuum wyższego rzędu				
	3.1	Model	mikropolarnej sprężystości Cosseratów	17	
		3.1.1	Kinematyka	17	
		3.1.2	Liniowa sprężystość	18	
	3.2	Model	plastyczności kryształów z efektami gradientowymi	20	
		3.2.1	Klasyczne sformułowanie bez efektów skali	20	
		3.2.2	Prawo umocnienia	22	
		3.2.3	Wzbogacenie o efekty gradientowe	23	
		3.2.4	Konsystentna redukcja modelu 3D do 2D	25	
		3.2.5	Regularyzacja warunku plastyczności	29	
		3.2.6	Uwagi na temat implementacji numerycznej	34	
4	Modele kontaktowe				
	4.1	Klasycz	zne sformułowanie zagadnienia kontaktowego	37	
		4.1.1	Małe odkształcenia i poślizgi	37	
		4.1.2	Skończone deformacje	40	
		4.1.3	Zagadnienie kontaktowe jako zadanie minimalizacji z ogranicze-		
			niami	44	
	4.2	Implem	nentacja numeryczna	45	

		4.2.1 Metoda rozszerzonych mnożników Lagrange'a	45
		4.2.2 Sformułowanie <i>node-to-segment</i>	46
		4.2.3 Sformułowanie typu <i>mortar</i>	48
5	Mikromechaniczny model kontaktowy ciał Cosseratów		
	5.1	Wyprowadzenie modelu z rozważań mikromechanicznych	55
	5.2	Ilustracja zachowania modelu w szczególnym przypadku przy zastosowa-	
		niu regularyzacji metodą funkcji kary	58
	5.3	Regularyzacja ograniczeń kontaktowych metodą rozszerzonych mnożni-	
		ków Lagrange'a	59
6	Moo	elowanie efektów skali w zagadnieniach mikropolarnej sprężystości	61
	6.1	Ściskanie sztywnymi płaszczyznami nieskończonego pasma ze wstępnie	
		obróconymi mikroblokami	61
	6.2	Zagadnienie kontaktowe typu Hertza	67
7	Moo	elowanie efektów skali w zagadnieniu wciskania klina	75
	7.1	Kalibracja stałych materiałowych niklu	76
	7.2	Model obliczeniowy zagadnienia wciskania klina	78
	7.3	Studium wpływu wybranych parametrów na otrzymane wyniki	80
		7.3.1 Regularyzacja warunku plastyczności	80
		7.3.2 Współczynnik tarcia	82
	7.4	Porównanie wyników symulacji numerycznej i eksperymentów	84
		7.4.1 Obroty sieci krystalicznej	84
		7.4.2 Gęstość dyslokacji geometrycznie niezbędnych	86
	7.5	Efekty skali	91
		7.5.1 Wpływ długości charakterystycznej $l_h$	95
8	Pod	umowanie i wnioski	99

### **Rozdział** 1

## Wstęp

#### **1.1** Zakres i cel pracy

Efekty skali wymiarowej stanowią jedną z głównych osi zainteresowań współczesnej inżynierii materiałowej, mechaniki ciała stałego oraz jej metod doświadczalnych, a wciąż postępująca miniaturyzacja sprawia, że badanie efektów skali wymiarowej z zagadnienia podstawowego powoli staje się zagadnieniem praktycznym. Jednym z kierunków podejmowanych badań są efekty skali w zagadnieniach kontaktowych, np. w indentacji. Niniejsza rozprawa wpisuje się w ten nurt badań i dostarcza skromnego wkładu w ich rozwój.

Jednym ze źródeł efektów skali może być wewnętrzna mikrostruktura materiału, która wpływa na otrzymywane wyniki przy badaniu próbek o rozmiarach zbliżonych do charakterystycznego wymiaru mikrostruktury. Klasyczne teorie kontinuum nie są w stanie opisać tego efektu, dlatego powstał szereg modeli uogólnionego kontinuum, które zawierają w sobie pewną charakterystyczną długość. Wśród nich możemy wyróżnić modele oparte na pochodnych wyższego rzędu przemiesz-czeń [np. 65, 97] lub wprowadzające dodatkowe stopnie swobody, takie jak model Cosseratów [16, 108] lub modele mikromorficzne [np. 22].

W przypadku uogólnionego kontinuum, oprócz efektów skali wynikających z wewnętrznej długości charakterystycznej, obserwowane są szczególne efekty skali w postaci warstw brzegowych wynikające z warunków brzegowych nałożonych na niewiadome wyższego rzędu: składowe drugiego gradientu przemieszczenia (*strain-gradient elasticity*), mikroobroty (kontinuum Cosseratów) lub niewiadome mikromorficzne. Jak do tej pory pytanie: "jak powiązać warunki brzegowe na niewiadome wyższego rzędu z klasycznymi warunkami kontaktu jednostronnego?" pozostaje otwarte. W szczególności jeśli model uogólnionego kontinuum opisuje ciało sprężyste to w przypadku kontaktu bez tarcia warunki kontaktowe narzucane na niewiadome wyższego rzędu nie mogą wprowadzać dyssypacji lub naruszać zasady zachowania energii. Innymi słowy — model kontaktowy musi mieć strukturę potencjalną. Próba sformułowania modelu kontaktowego spełniającego powyższe kryteria w przypadku jednego z najprostszych modeli uogólnionego kontinuum, jakim jest model Cosseratów, jest jednym z celów niniejszej rozprawy.

W przypadku deformacji plastycznych mechanizmem odpowiedzialnym za efekty skali, które są obserwowane eksperymentalnie np. przy skręcaniu cienkich drutów [30], zginaniu cienkich folii [138] oraz mikro- i nanoindentacji [91, 95, 119], są w głównej mierze dyslokacje geometrycznie niezbędne (*GNDs — geometrically neccesary dislocations*) [7, 109]. Podobnie jak w przypadku modeli sprężystości klasyczne sformułowania teorii plastyczności nie są w stanie poprawnie opisać tego zjawiska, ponieważ nie zawierają w sobie charakterystycznej długości koniecznej do opisu efektów skali.

Na przestrzeni ostatnich 30 lat powstał szereg modeli próbujących opisać te efekty wprowadzając na różne sposoby długość charakterystyczną do modeli plastyczności. Wybrane modele izotropowej plastyczności, które są w stanie opisać efekty skali, opisano w rozdziale 2. Jeśli chodzi o modele plastyczności kryształów z efektami gradientowymi to pomimo wielu propozycji takich modeli w literaturze [np. 25, 33, 41, 44, 70, 118] wciąż niewiele jest prac, w których podjęto się próby modelowania efektów skali w rzeczywistych kryształach. Wśród najważniejszych z nich należy wymienić prace [37, 84, 140].

W niniejszej rozprawie podjęto się próby budowy numerycznego modelu zagadnienia wciskania klina w monokryształ niklu. Motywację do stworzenia takiego modelu dostarczyły wyniki doświadczalne opublikowane w pracach [17, 76, 77, 132, 154]. W powyższych pracach przedstawiono nie tylko krzywe siła-zagłębienie, które są standardowo publikowane w pracach dotyczących mikro- i nanoindentacji, ale także pola obrotów sieci krystalicznej oraz miary całkowitej gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych. Dodatkową zaletą jest fakt, że eksperymenty zostały zaprojektowane tak, by wykorzystać płaski stan odkształcenia, który zachodzi przy pewnej orientacji kryształu o budowie regularnie ściennie centrowanej (*fcc*). Wykorzystanie założenia płaskiego stanu odkształcenia pozwala na znaczne ograniczenie kosztu numerycznego w analizie zagadnienia wciskania klina. W zadaniach przestrzennych przy stosowaniu modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi [118, 140] w każdym węźle jest 12 niewiadomych (3 składowe przemieszczenia i 12 przyrostów poślizgów plastycznych). W 2D liczba niewiadomych w każdym węźle wynosi tylko 5 (2 składowe przemieszcenia i 3 przyrosty poślizgów plastycznych). Ponadto struktura macierzy sztywności w zagadnieniach 3D powoduje, że jej przechowywanie wykorzystuje o wiele więcej pamięci operacyjnej komputera.

Podsumowując, celem niniejszej rozprawy jest analiza efektów skali w zagadnieniach kontaktowych dla dwóch wybranych modeli:

- mikropolarnej sprężystości Cosseratów przy wykorzystaniu stworzonego nowego modelu kontaktowego,
- plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe w zastosowaniu do zagadnienia wciskania klina w monokryształ niklu.

Model mikropolarnej sprężystości Cosseratów rozpatrywano tylko w zakresie małych odkształceń, a w przypadku modelu kontaktowego w zakresie małych poślizgów. W implementacji tego modelu nie są wymagane specjalne elementy skończone o podwyższonej regularności funkcji kształtu, jak ma to miejsce np. w przypadku sprężystości drugiego rzędu [134]. Dlatego w niniejszej rozprawie wykorzystano klasyczne elementy skończone o stopniu regularności funkcji kształtu  $C^0$ . Przy tworzeniu nowego modelu kontaktowego dla ciał Cosseratów ograniczono się do przypadku 2D i klasycznego sformułowania *node-to-segment* z wymuszeniem warunków kontaktowych metodą rozszerzonych mnożników Lagrange'a. W niniejszej rozprawie analizowano tylko kontakt pomiędzy ciałem sztywnym a ciałem Cosseratów bez tarcia. Dzięki temu skupiono się na analizie charakterystycznych cech proponowanego modelu bez dodatkowych efektów wynikających z kontaktu pomiędzy dwoma odkształcalnymi ciałami i z tarcia.

Model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi [115, 140] zredukowano konsystentnie do płaskiego stanu odkształcenia i wszystkie analizy zawarte w niniejszej rozprawie ograniczają się tylko do tego przypadku. Implementacja modelu w metodzie elementów skończonych nie wymaga specjalnych elementów skończonych o podwyższonej regularności funkcji kształtu, dlatego rozważano tylko elementy klasy  $C^0$ . Kontakt pomiędzy klinem a kryształem niklu modelowano przy wykorzystaniu podejścia bazującego na metodzie *mortar* z uwzględnieniem tarcia, a warunki kontaktowe wymuszano metodą rozszerzonych mnożników Lagrange'a. Przyjęto, że klin jest na tyle sztywniejszy od kryształu, że można go przybliżyć za pomocą ciała sztywnego.

Do realizacji celu badawczego niniejszej rozprawy konieczna była realizacja następujących celów szczegółowych:

- 1. Stworzenie nowego mikromechanicznego modelu kontaktowego dla mikropolarnej sprężystości Cosseratów uwzględniającego modelowaną mikrostrukturę materiału.
- 2. Analiza charakterystycznych cech zaproponowanego mikromechanicznego modelu kontaktowego oraz wyników otrzymanych przy jego zastosowaniu w wybranych zagadnieniach kontaktowych, w tym efektów skali.
- Konsystentna redukcja modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi z 3D do 2D uwzględniająca fizyczne pochodzenie efektywnych systemów poślizgów w prawie umocnienia.
- 4. Stworzenie numerycznego modelu zagadnienia wciskania klina w kryształ niklu z wykorzystaniem modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe.
- 5. Porównanie wyników symulacji wciskania klina w kryształ niklu z wynikami eksperymentalnymi, w tym rozkłady obrotów sieci krystalicznej i miary całkowitej gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych.
- 6. Analiza przewidywanych efektów skali w zagadnieniu wciskania klina w kryształ niklu.

Niniejsza rozprawa zwraca również uwagę na nowy aspekt zagadnień kontaktowych dla modeli uogólnionego kontinuum. Występujące w tych modelach dodatkowe, uogólnione stopnie swobody wymagają stworzenia nowych modeli kontaktowych, które wiążą klasyczne warunki kontaktu jednostronnego z warunkami narzuconymi na uogólnione stopnie swobody. Brak takiego powiązania może skutkować pominięciem istotnych zjawisk w strefie kontaktu. Jako pierwszy krok ku całej rodzinie nowych modeli kontaktowych zaproponowano nowy model kontaktowy dla mikropolarnej sprężystości Cosseratów.

Wyniki przedstawione w niniejszej rozprawie zostały w dużej mierze przedstawione w dwóch opublikowanych pracach [86, 87]. W szczególności wykorzystano rysunki i wykresy z wyżej wymienionych prac, stąd na niektórych rysunkach widoczne są oznaczenia w j. angielskim.

#### 1.2 Układ i zawartość rozprawy

W rozdziale 2 dokonano przeglądu aktualnego stanu wiedzy dotyczącego modelowania efektów skali w zakresie opisu kontynualnego. Przywołano i omówiono wybrane prace eksperymentalne, w których raportowano wyniki przedstawiające wzrost sztywności lub twardości wraz ze zmniejszaniem się badanych próbek. Następnie podsumowano najważniejsze modele kontynualne, które wprowadzają pewną charakterystyczną długość niezbędną do odwzorowania efektów skali. Skupiono się na modelach sprężystości oraz na modelach gradientowej plastyczności, a w szczególności na modelach gradientowej plastyczności kryształów. Na koniec rozdziału omówiono wybrane modele kontaktowe, w tym mikromechaniczne, oraz podsumowano aktualny stan wiedzy dotyczący powiązania klasycznych warunków kontaktowych z niewiadomymi wyższego rzędu.

Rozdział 3 w skrócie przedstawia główne założenia, równania i oznaczenia występujące w dwóch rozważanych w niniejszej rozprawie modelach kontynualnych wyższego rzędu: mikropolarnej sprężystości Cosseratów w zakresie małych odkształceń oraz plastyczności kryształów wzbogaconej o efekty gradientowe w zakresie skończonych deformacji. W niniejszej rozprawie rozważano zagadnienia 2D, dlatego konieczna była redukcja modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi z 3D do 2D. Dokonano konsystentnej redukcji modelu, nie tylko w zakresie warunków plastyczności, jak było to spotykane do tej pory w literaturze, ale także w zakresie prawa umocnienia, por. podrozdział 3.2.4. Konsystentna redukcja bazująca na fizycznym charakterze efektywnych systemów poślizgów jest elementem oryginalnym pracy, por. [86]. W podrozdziale 3.2.5 przedstawiono dwie najczęściej najczęściej występujące w literaturze metody regularyzacji warunków plastyczności występujących w plastyczności kryształów. Sprawdzono również rezultat całkowania równań konstytutywnych plastyczności kryształów przy zastosowaniu opisanych metod regularyzacji. W tym celu rozwiązano numerycznie test prostego ścinania przy pełnej kontroli kinematycznej, bazując na pomyśle i parametrach przedstawionych w pracy [75]. Wyniki otrzymane za pomocą dwóch opisywanych metod regularyzacji porównano z wynikami otrzymanymi metodą minimalizacji energii przyrostowej przedstawionymi w doktoracie [75]. Na koniec rozdziału 3 przedstawiono wybrane szczegóły implementacji modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi przy wykorzystaniu systemu MES *AceGen/AceFEM*.

W rozdziale 4 przedstawiono klasyczne sformułowanie kontaktowe w zakresie małych odkształceń i poślizgów oraz w zakresie dużych deformacji. Następnie przedstawiono metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a służącą do wymuszenia warunków kontaktowych, którą zastosowano we wszystkich obliczeniach w niniejszej rozprawie. Przedstawiono również dwa sformułowania kontaktu w MES: *node-to-segment*, które stosowano w zagadnieniach mikropolarnej sprężystości Cosseratów, oraz typu *mortar*, które stosowano w przypadku modelu plastyczności z efektami gradientowymi. Na koniec rozdziału przeanalizowano wpływ wyżej wymienionych sformułowań na otrzymane ciśnienie kontaktowe w początkowej fazie kontaktu pomiędzy sztywnym walcem a kryształem niklu. Wykazano, że stosowanie sformułowania typu *mortar* jest wskazane w analizie zagadnień kontaktowych przy użyciu modeli kontinuum wrażliwych na nagłe zmiany warunków brzegowych, takich jak rozpatrywany w niniejszej rozprawie model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi.

Następnie w rozdziale 5 przedstawiono nowy model kontaktowy dla ciał Cosseratów bazujący na rozważaniach mikromechanicznych. Model mikropolarnej sprężystości Cosseratów posiada w każdym punkcie materialnym dodatkowe stopnie swobody opisujące infinitezymalny obrót. Kinematykę ciała Cosseratów i długość charakterystyczną można interpretować rozważając pewną mikrostrukturę składającą się z mikrobloczków. Główny pomysł na stworzenie modelu kontaktowego polegał na wykorzystaniu tej interpretacji do sformułowania warunków kontaktowych w wierzchołkach mikrobloczków. Zaproponowany model wiąże występujące na powierzchni kontaktowej ciśnienie kontaktowe z mikromomentem kontaktowy dla mikropolarnej sprężystości jest elementem oryginalnym niniejszej rozprawy, por. [87]. Następnie zilustrowano charakterystyczne cechy modelu przy pomocy regularyzacji warunków kontaktowych metodą funkcji kary. Wykazano, że nowy model kontaktowy wywodzi się z potencjału, co jest pożądaną cechą w przypadku rozpatrywania kontaktu ciał sprężystych bez tarcia.

Rozdział 6 poświęcono analizie efektów skali wymiarowej w zagadnieniach kontaktowych mikropolarnej sprężystości w 2D. Przeanalizowano dwa zagadnienia. Pierwsze dotyczy ściskania nieskończonego pasma przez dwie sztywne powierzchnie. Założono, że mikrostruktura jest wstępnie obrócona, co spowodowało występowanie warstw brzegowych w rozwiązaniu. Zadanie to rozwiązano analitycznie wyprowadzając równania na długość pojawiających się warstw brzegowych. Ponadto rozwiązano zadanie numerycznie, a otrzymane wyniki porównano z analitycznymi, co pozwoliło na weryfikację poprawności implementacji modelu kontaktowego.

Drugim rozpatrywanym zagadnieniem było zagadnienie typu Hertza. Stworzono numeryczny model z wykorzystaniem zaproponowanego modelu kontaktowego oraz z zastosowaniem klasycznego modelu kontaktowego pomijającego efekty ciśnienia kontaktowego na mikromomenty. W zagadnieniu typu Hertza szerokość kontaktu, jest parametrem decydującym o wielkości efektów skali. Gdy szerokość kontaktu jest porównywalna do długości charakterystycznej ciała Cosseratów efekty skali odgrywają dominującą rolę. Przeanalizowano wpływ stosunku długości charakterystycznej do szerokości kontaktu na rozkład ciśnienia kontaktowego i rozkład mikromomentu na powierzchni kontaktowej. Ponadto zbadano jak zmienia się obserwowana twardość przy zmianie wyżej wymienionego stosunku. Przy zastosowaniu proponowanego modelu kontaktowego uzyskano niestandardowe rozkłady ciśnienia kontaktowego oraz odwrotny efekt skali na twardość wynikający z rozszerzania się strefy kontaktu oraz jej rozdzielania się na dwa obszary. Na koniec rozdziału przeanalizowano pojawiające się warstwy brzegowe w różnicy mikroobrotu otrzyma-nego przy zastosowaniu mikromechanicznego i klasycznego modelu kontaktowego. Grubość tej warstwy brzegowej powiązano z wyznaczoną analitycznie grubością warstwy brzegowej w zagadnieniu ściskania pasma.

W rozdziale 7 przedstawiono wyniki analizy efektów skali wymiarowej w zagadnieniu wciskania klina w kryształ niklu. Na początku rozdziału opisano procedurę kalibracji parametrów materiałowych modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi na podstawie danych eksperymentalnych dostępnych w literaturze, niezależnych od rozważanego zagadnienia indentacji. Następnie przedstawiono stworzony model numeryczny eksperymentu wciskania klina w monokryształ niklu, dla którego wyniki są dostępne w literaturze. Przeprowadzono studium wpływu zastosowanej metody regularyzacji warunków plastyczności oraz wartości współczynnika tarcia na otrzymywane wyniki. W podrozdziale 7.3 porównano wyniki otrzymane stworzonym modelem numerycznym z wynikami eksperymentalnymi dostępnymi w literaturze uzyskując bardzo dobrą zgodność. Na bazie stworzonego i skalibrowanego modelu numerycznego przeprowadzono analizę efektów skali wymiarowej zmniejszając zagłębienie klina w kryształ niklu. Otrzymane efekty skali wykazują zgodność z powszechnie znanym fenomenologicznym modelem Nixa i Gao [106]. Na koniec rozdziału przedstawiono wpływ numerycznego parametru determinującego zakres uśredniania przyrostów poślizgów plastycznych na otrzymywane wyniki.

Podsumowanie niniejszej rozprawy, wnioski oraz dalsze plany badawcze zostały przedstawione w ostatnim 8 rozdziale.

### Rozdział 2

## Przegląd literatury

#### 2.1 Eksperymentalnie obserwowane efekty skali

Obserwowane eksperymentalnie efekty skali mogą mieć charakter sprężysty, plastyczny lub wiązać się z uszkodzeniami i pęknięciami. W przypadku sprężystości przyczyną efektów skali może być wewnętrzna mikrostruktura. Gdy rozmiar badanej próbki zbliża się do charakterystycznego wymiaru mikrostruktury obserwowany jest wzrost sztywności badanej próbki. Na przykład zaobserwowano efekty skali w próbach skręcania [81] i zginania [156] kości, które tłumaczono interakcjami pomiędzy budującymi kość osteonami. Podobnie w przypadku skręcania i zgiania belek wykonanych z pianek poliuretanowych obserwowano wzrost sztywności [80]. Jedną z powszechnych metod indentyfikacji parametrów materiałowych jest pomiar twardości poprzez wciskanie różnego kształtu wgłębników: kulistych (metoda Brinella) lub ostrosłupów o podstawie trójkątnej (metoda Berkovicha) lub czterokątnej (metoda Vickersa). O ile w przypadku metali źródłem obserwowanych efektów skali w testach indentacji jest tłumaczy się generowanymi w materiale dyslokacjami geometrycznie niezbędnymi, to w przypadku polimerów źródło efektów skali nie jest jednoznacznie ustalone. Co istotne, w przypadku polimerów w głównej mierze mamy do czynienia z odkształceniami sprężystymi, co potwierdzają dane eksperymentalne [43, 45, 105] i referencje wymienione tamże.

W przypadku metali powszechnie przyjęte jest, że za efekty skali w główniej mierze odpowiadają dyslokacje geometrycznie niezbędne i związane z nimi gradienty odkształceń plastycznych. Przez dyslokację w inżynierii materiałowej rozumie się liniowy defekt w strukturze krystalicznej metalu polegający na istnieniu dodatkowej płaszczyzny atomów (dyslokacja krawędziowa) lub na przesunięciu atomów wzdłuż linii (dyslokacja śrubowa), por. rys. 2.1. Ruch dyslokacji stanowi podstawowy mechanizm odkształcenia plastycznego. Ponadto rozróżnia się dyslokacje statystycznie zmagazynowane (*SSDs — statistically stored dislocations*) oraz dyslokacje geometrycznie niezbędne (*GNDs — geometrically neccessary dislocations*). Dyslokacje statystycznie zmagazynowane generowane są w losowych kierunkach w trakcie jednorodnej deformacji plastycznej, które



Rysunek 2.1: Uproszczony schemat idealnej sieci krystalicznej kubicznej a), z pokazanymi dyslokacjami: krawędziową DC w postaci dodatkowej płaszczyzny ABCD atomów b), śrubową lewoskrętną c) i prawoskrętną d) w postaci przesunięcia idealnej sieci krystalicznej e) wzdłuż linii CD f). Ilustracja zaczerpnięta z monografii [54].

w końcowej fazie tworzą tzw. komórki dyslokacyjne — obszary o niskiej (wnętrze komórki) i wysokiej (granice komórek) gęstości dyslokacji. Natomiast dyslokacje geometrycznie niezbędne są to dyslokacje generowane w trakcie niejednorodnej deformacji plastycznej w miejscu występowania dużych zmian (gradientów) odkształceń plastycznych. W pracy Nye'a [109] i Ashby'ego [7] zapostulowano istnienie dyslokacji geometrycznie niezbędnych w celu wyjaśnienia akomodacji sieci krystalicznej w regionach silnie niejednorodnej deformacji plastycznej (gradientów poślizgów plastycznych).

Klasycznym przykładem przedstawiającym ideę dyslokacji geometrycznie niezbędnych i ich związku z gradientem odkształceń plastycznych jest przykład niejednorodnego ścinania kryształu. Na rys. 2.2a) przedstawiono schematycznie deformację plastyczną kryształu poprzez niejednorodny, narastający poślizg na systemie poślizgu o normalnej  $\mathbf{n}$  i kierunku poślizgu  $\mathbf{s}$ . Ścinany kryształ można podzielić myślowo na trzy części, a każda z nich jest poddana ścinaniu z inną amplitudą. Dyslokacje krawędziowe realizujące poślizg plastyczny, gdy docierają do powierzchni



**Rysunek 2.2:** Kryształ ścinany niejednorodnie na systemie poślizgu o normalnej **n** i kierunku **s** generuje dyslokacje geometrycznie niezbędne i wynikającą z nich krzywiznę. Ilustraca zaczerpnięta z pracy [5].

swobodnych powodują ich zchropowacenie, por. rys. 2.2c). W rzeczywistości kryształ stanowi całość. W związku z powyższym część dyslokacji na krawędziach wydzielonych myślowo części ulegnie anihilacji, ale część pozostanie, por. rys. 2.2d), wymuszając krzywiznę sieci krystalicznej. Tok rozumowania można odwrócić: wymuszając krzywiznę generuje się dyslokacje akomodujące sieć krystaliczną do wymuszenia w celu zachowania ciągłości kryształu. Stąd wzięła się nazwa tak powstałych defektów: dyslokacje geometrycznie niezbędne. Zależność wiążąca gęstość dyslokacji geometrycznie niezbędnych  $\rho_{GND}$  z gradientem poślizgu plastycznego w rozpatrywanym przypadku określa zależność

$$\rho_{\rm GND}b = -\nabla\gamma \cdot \mathbf{s} = -\gamma_{,k}s_k,\tag{2.1}$$

gdzie *b* oznacza długość wektora Burgersa na rozpatrywanym systemie poślizgu, a  $\gamma$  oznacza poślizg plastyczny.

Idea dyslokacji geometrycznie niezbędnych była podstawą sformułowania powszechnie znanego modelu fenomenologicznego Nixa i Gao [106], który służy do modelowania efektów skali w zagadnieniu indentacji. Założono rozkład dyslokacji geometrycznie niezbędnych w pobliżu wgłębnika konieczny do akomodacji sieci krystalicznej do geometrii wgłębnika. Na podstawie tego założenia i prawa Taylora wiążącego naprężenie płynięcia  $\tau$  z gęstością dyslokacji  $\rho$ 

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \tag{2.2}$$

poprzez moduł ścinania  $\mu$ , długość wektora Burgersa *b* i pewną stałą wyznaczoną eksperymentalnie  $\alpha$ , wyprowadzono zależność na przewidywane efekty skali. Przewidywania modelu poprawnie opisują efekty skali obserwowane eksperymentalnie w zakresie mikroindentacji [np. 19, 91, 95, 110, 137], ale już nie nanoindentacji (dla zagłębień poniżej 100 nm [np. 27, 88, 143]. W nanoindentacji zaczynają dominować inne efekty, które zaburzają relację modelu Nixa i Gao, takie jak:

- zaokrąglenie wgłębnika [62, 124],
- inna niż założona w modelu Nixa i Gao objętość, w której gromadzą się dyslokacje geometrycznie niezbędne,
- naprężenia ścinające na skutek tarcia [123],
- chropowatość powierzchni [90, 158].

W niniejszej rozprawie zagadnienia nanoindentacji nie będą rozpatrywane.

Dyslokacje geometrycznie niezbędne są także odpowiedzialne za efekty skali obserwowane w takich zagadnieniach jak: zginanie cienkich belek [100, 138], skręcanie cienkich drutów [30], czy zginanie cienkich folii [99]. We wszystkich tych zagadnieniach obserwuje się ten sam trend: mniejsze jest mocniejsze (*"smaller is stronger"*).

Ponadto dyslokacje geometrycznie niezbędne odpowiadają za efekt Halla-Petcha polegający na tym, że wraz ze zmniejszeniem się wielkości ziaren polikryształu rośnie jego wytrzymałość. Przyczyną tego zachowania jest zwiększenie liczby granic ziaren w metalu, które stanowią naturalną barierę dla swobody ruchu dyslokacji. Podobnie jak w przypadku mikro- i nanoindentacji efekt Halla-Petcha ma swoją naturalną granicę. Przy pewnym rozdrobnieniu ziaren deformacja pla-styczna zaczyna być realizowana poprzez poślizg całych ziaren, a nie poprzez poślizgi plastyczne wewnątrz ziaren.

Na koniec tego podrozdziału należy wspomnieć o serii prac [17, 76, 77, 132, 154] dotyczących mikroindentacji klina w monokryształ niklu, które stanowiły inspirację do opracowania modelu numerycznego tego zagadnienia. Co prawda w pracach tych nie badano bezpośrednio efektów skali w zagadnieniu mikroindetnacji, ale za to przedstawiono w nich bardzo dobrej jakości wyniki całych pól obrotów sieci krystalicznej oraz miary gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych. Dzięki temu możliwe było sprawdzenie czy skalibrowany na podstawie danych doświadczalnych [42, 63] model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi jest w stanie poprawnie odwzorować te pola. Jedyna dostępna w literaturze praca badająca efekty skali w zagadnieniu wciskania klina dotyczy monokryształu glinu [15]. Niestety dane przedstawione w tej pracy nie były wystarczające do kalibracji modelu plastyczności kryształów ani do zbadania efektów skali wymiarowej.

#### 2.2 Modele sprężystości wyższego rzędu

W celu opisania efektów skali obserwowanych eksperymentalnie powstało wiele modeli posiadających wewnętrzną długość charakterystyczną. Jednym z pierwszych modeli tego typu był model stworzony przez braci Cosserat: matematyka i inżyniera [16], który powstał z rozważań geometrii różniczkowej. Na podstawie niezmienności energii zagadnienia wariacyjnego względem transformacji Euklidesowych zostały wyprowadzone równania równowagi sił i momentów. Niestety bracia Cosserat nie podali żadnych równań konstytutywnych, a sam model zapisany w mocno sformalizowany sposób w zakresie skończonych deformacji został zapomniany na prawie pół wieku.

Najważniejszą cechą modelu Cosseratów jest to, że oprócz klasycznych przemieszczeniowych stopni swobody, występują niezależne niewiadome w postaci obrotów. W oryginalnej pracy [16] autorzy interpretowali swój model jako kontinuum sztywnych triad, a nie jak w przypadku klasycznej teorii sprężystości kontinuum punktów materialnych. Izotropowy model Cosseratów sformułowany w wersji przestrzennej i z liniowo-sprężystymi związkami konstytutywnymi wymaga aż 4 dodat-kowych parametrów materiałowych poza tymi występującymi w klasycznej teorii sprężystości. Natomiast w rozpatrywanym w niniejszej rozprawie przypadku 2D potrzebne są tylko dwa nowe parametry materiałowe: długość charakterystyczna  $\ell$  oraz moduł  $\mu_c$  wiążący mikroobroty (infinitezymalna wersja niezależnych obrotów) i obrót wynikający z antysymetrycznej części gradientu przemieszczenia.

Powrót do idei zawartych w modelu Cosseratów nastąpił w latach 60. wraz z pracami [65, 96– 98], w których zaproponowano szereg modeli wyższego rzędu. Najprostszym spośród nowych modeli jest modelu typu *couple-stress* [65, 98], w którym przyjęto, że obrót Cosseratów nie jest niezależną niewiadomą, lecz jest równy antysymetrycznej części gradientu przemieszczenia  $(\mu_c \rightarrow \infty)$ . Występujące w funkcji gęstości energii sprężystości krzywizny (gradienty obrotów) powodują, że za zmagazynowaną energię sprężystości są odpowiedzialne również drugie pochodne przemieszczeń (a dokładnie gradient antysymetrycznej części gradientu przemieszczenia). Kolejną odmianą jest liniowy model znany w literaturze pod nazwą *strain-gradient elasticity* [97], w którym w funkcji gęstości energii sprężystości oprócz odkształcenia (symetrycznej części gradientu przemieszczenia) jest uwzględniana druga pochodna przemieszczeń. Rok później Mindlin opublikował pracę [97], w której w gęstości energii sprężystości uwzględniane są nawet trzecie pochodne przemieszczeń.

Inną grupę modeli sprężystości wyższego rzędu stanowią modele mikromorficzne, w których zapostulowano istnienie dodatkowych stopni swobody kontinuum w postaci podobnej do gradientu przemieszczenia [24]. Model mikromorficzny można zinterpretować jako kontinuum odkształcalnych triad, co wprowadza dziewięć niezależnych od przemieszczeń stopni swobody. Odpowiadający dodatkowym stopniom swobody "mikroelement" (triada) zatopiony w ciele może obracać się i odkształcać niezależnie od "makroelementu" — otoczenia punktu materialnego w klasycznym kontinuum. Dwoma szczególnymi przypadkami modelu mikromorficznego są: model mikrorozciągnięć (*microstrech*) [23] z czterema spośród dziewięciu dodatkowych stopni swobody (trzy obroty i rozciągnięcie) oraz model mikropolarnej sprężystości [21] z trzema niezależnymi obrotami, co sprowadza się do modelu Cosseratów.

Wszystkie wymienione powyżej modele wyższego rzędu charakteryzują się tym, że tensor naprężenia Cauchy'ego jest niesymetryczny, a w równaniu równowagi momentów zamiast warunku symetrii tensora naprężenia występują naprężenia wyższego rzędu sprzężone energetycznie z wyższymi pochodnymi przemieszczeń lub obrotów (w przypadku modelu Cosseratów). Na występujące w modelach wyższego rzędu dodatkowe niewiadome albo na sprzężone z nimi naprężenia wyższego rzędu należy określić warunki brzegowe nieznane w klasycznym kontinuum. W niniejszej rozprawie wybrano model Cosseratów jako jedną z najprostszych teorii wyższego rzędu w celu wyprowadzenia na podstawie rozważań mikromechanicznych nowego modelu kontaktowego wiążącego ciśnienie kontaktowe z niewiadomymi wyższego rzędu.

Sam model Cosseratów jest wykorzystywany w literaturze dwojako. Pierwsze zastosowanie polega na wykorzystaniu wewnętrznej długości charakterystycznej modelu Cosseratów w celu regularyzacji pewnych źle postawionych problemów mechanicznych, które bez uwzględnienia pewnej długości charakterystycznej tracą eliptyczność, co objawia się m.in. patologiczną zależnością wyników od zastosowanej siatki w metodzie elementów skończonych. Należy tu wymienić prace dotyczące plastyczności [18] plastyczności z uszkodzeniami [1, 136], osobliwości w pobliżu rysy [32, 101] oraz pasm ścinania w gruntach [145, 146, 150].

Drugim obszarem zastosowań modelu Cosseratów jest ten, w którym próbowano poprzez występujące w modelu dodatkowe stopnie swobody modelować istniejącą w materiale mikrostrukturę. Należy tu wymienić pionierskie prace Lakesa dotyczące kości [81, 155, 156] i pianek polimerowych [79, 80]. Innym przykładem zasotosowania teorii Cosseratów było modelowanie materiałów o budowie komórkowej [np. 57, 89, 135, 147]. Model Cosseratów był także wykorzystywany do modelowania w sposób kontynualny murów [12, 14, 94, 142]. I wreszcie przybliżano w procesie homogenizacji za pomocą modelu Cosseratów pewne heterogeniczne mikrostruktury: warstwowe [31], zbudowane ze sztywnych bloczków [8, 93], czy materiały z pustkami [11].

Warto zauważyć, że pomimo ponad stu lat istnienia modelu Cosseratów wciąż badane są wymagania stawiane parametrom materiałowym. Olbrzymią pracę na tym polu wykonał zespół Neffa w serii prac poświęconych modelowi Cosseratów zarówno w wersji liniowej, jak i skończonych deformacji [np. 59, 102, 104]

#### 2.3 Gradientowa plastyczność kryształów

W celu opisania efektów skali obserwowanych w eksperymentach z udziałem metali zaczęto poszukiwać modeli ze skalą wymiarową. Początkowo wykorzystywano fenomenologiczne modele

bazujące na ideach sprężystości wyższego rzędu [28–30, 36] stosując je do odkształcenia plastycznego. Modele te potrafiły oddać efekty skali w wybranych zagadnieniach takich jak zginanie cienkich belek [138], skręcanie cienkich drutów [30] czy w końcu mikro- i nanoindentacji [52, 53, 125]. Niewątpliwą wadą powyższych modeli było nieuwzględnienie anizotropii materiału wynikającej z symetrii sieci krystalicznej na poziomie pojedynczego kryształu, co ma istotne znaczenie w zagadnieniach plastyczności kryształów. Stąd potrzeba wprowadzenia długości charakterystycznej do klasycznego modelu plastyczności kryształów [47, 48, 127], co skutkuje dołożeniem kolejnego stopnia skomplikowania do już istniejących problemów modelu plastyczności kryształów takich jak np. niejednoznaczność wyboru aktywnych systemów poślizgu, które wciąż są przedmiotem badań [np. 115–117].

Od początku XXI wieku powstał szereg modeli plastyczności kryształów zawierających charakterystyczną skalę wymiarową powiązaną z dyslokacjami [np. 3, 9, 25, 33, 41, 44, 50, 74, 153]. Modele te różnią się stopniem skomplikowania, liczbą dodatkowych parametrów materiałowych i tym jak bardzo odnoszą się do fizycznych podstaw efektów skali. Jak dotąd nie ma konsensusu, co do tego, który model najlepiej oddaje istotę zagadnienia i który można by uznać za model referencyjny. W pracach [118, 140] postanowiono stworzyć model uwzględniający efekty skali, a zarazem bazujący na fizycznych założeniach i posiadający minimalną liczbę dodatkowych parametrów materiałowych. Stąd przez autorów nazwany został minimalnym modelem plastyczności kryształów wzbogaconym o efekty gradientowe. Istotną cechą tego modelu na tle pozostałych dostępnych w literaturze modeli jest to, że nie wprowadza nowych parametrów materiałowych oprócz parametrów krystalograficznych, dobrze znanych w literaturze inżynierii materiałowej, oraz zmiennych występujących w prawie umocnienia, które można wybrać dowolnie nie zmieniając istoty modelu. Ponadto występująca w modelu długość charakterystyczna odpowiadająca za efekty skali nie jest wielkością stałą, tylko zależną od aktualnej wartości izotropowego naprężenia płynięcia i modułu umocnienia, co pociąga za sobą pewne konsekwencje. Mianowicie model umocnienia i występujące w nim parametry materiałowe musza być fizycznie umotywowane. W przeciwnym przypadku, np. gdy pominie się etap IV umocnienia, model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi może przewidywać niefizyczne osłabienie materiału.

W niniejszej rozprawie do modelowania efektów skali wybrano właśnie minimalny model plastyczności kryształów wzbogacony o efekty gradientowe [118, 140]. Wybór ten podyktowany został tym, co zostało wymienione powyżej, tzn.: model poprawnie odwzorowuje efekty skali [140] oraz wymaga minimalnej liczby dodatkowych parametrów materiałowych, które można wyznaczyć na podstawie danych dostępnych w literaturze. Ponadto jest to jeden z nielicznych modeli plastyczności kryształów z efektami gradientowymi, który wykorzystano do przeprowadzenia symulacji eksperymentu indentacji monokryształu miedzi [73] z uwzględnieniem wszystkich systemów poślizgu. Zazwyczaj proponowane modele plastyczności kryształów z efektami gradientowymi przedstawia się na przykładzie uwzględniającym ograniczoną liczbę systemów poślizgu, co jest podyktowane stopniem skomplikowania proponowanych modeli lub brakiem możliwości ustalenia wartości dodatkowych parametrów materiałowych.

#### 2.4 Modele kontaktowe dla kontinuum wyższego rzędu

Zagadnienia kontaktowe spotyka się prawie w każdej dziedzinie technicznej poczynając od wielkich konstrukcji inżynierskich po skalę mikro, gdzie kontakt odbywa się poprzez nierówności powierzchniowe. Jako jedną z pierwszych udokumentowanych prac na temat modeli kontaktowych w historii można przyjąć notatki Leonarda da Vinci [55], który badał siłę tarcia pomiędzy bloczkami o różnych powierzchniach kontaktowych, ale takich samych ciężarach. W wyniku obserwacji doszedł do wniosku, że siła tarcia jest proporcjonalna do ciężaru bloczku i niezależna od powierzchni kontaktu, czyli do zależności znanej dzisiaj jako prawo Coulomba. Sam Coulomb jako inżynier wojskowy budujący ufortyfikowania przeprowadził własne badania, w których sformułował zależność siły tarcia od ciężaru, współczynnika tarcia i kohezji [152].

Niewątpliwie ogromny wpływ na rozwój modeli kontaktowych miała opublikowana w 1882 r. praca Hertza [46]. Młody asystent w Uniwersytecie Berlińskim obserwując wzory interferencyjne dwóch kontaktujących się szklanych soczewek zapostulował, że rozkład ciśnienia kontaktowego pomiędzy dwoma sprężystymi sferami ma kształt eliptyczny. Po raz pierwszy w tej pracy pojawia się warunek braku penetracji pomiędzy dwoma ciałami będącymi w kontakcie. To klasyczne rozwiązanie analityczne miało ogromny wpływ na rozwój techniczny m.in.: kolei, łożysk tocznych, a także przekładni morskich.

Na podstawie klasycznego rozwiązania Hertza budowano modele analityczne dla ważnych z punktu widzenia technicznego zagadnień rozszerzając rozwiązanie na ciała o innych kształtach, uwzględniając niesprężyste właściwości materiałów czy wreszcie uwzględniając tarcie pomiędzy ciałami. Przegląd dostępnych rozwiązań analitycznych podsumowujący rozwój mechaniki kontaktu do lat 80. zestawiono w klasycznej monografii [60]. Niestety wiele zagadnień technicznych nie posiada rozwiązań analitycznych i konieczne jest odwołanie się do metod numerycznych, w tym metody elementów skończonych. Metody numeryczne nie zmieniają jednak samych modeli, tzn. warunków kontaktowych wywodzących się z klasycznej pracy Hertza, które muszą być spełnione na powierzchni kontaktu. Najważniejsze osiągnięcia w zakresie metod komputerowych mechaniki kontaktu w skali makroskopowej można znaleźć w monografii [152], gdzie podsumowano najbardziej popularne metody wymuszania warunków kontaktowych takie jak: metoda funkcji kary, mnożników Lagrange'a, czy też rozszerzonych mnożników Lagrange'a.

Niezwykle istotnym i złożonym zjawiskiem związanym z kontaktem jest tarcie. Historyczną perspektywę rozwoju modeli tarcia można znaleźć w przeglądzie [26]. W niniejszej rozprawie nie analizowano żadnych bardziej zaawansowanych modeli tarcia — jedynie klasyczne prawo tarcia Coulomba zastosowane w zagadnieniu indentacji klina w monokryształ niklu.

Biorac pod uwage, że modele wyższego rzedu powstały po to aby opisywać mikrostrukture i efekty skali, które mają znaczenie w skalach mikro, należy wspomnieć o niejako drugim nurcie mechaniki kontaktu zajmującym się mikromechaniką kontaktu. To właśnie zjawiska mikromechaniczne są w głównej mierze odpowiedzialne za zużycie i degradację powierzchni kontaktowych. Bezpośredni wpływ na skalę zużycia mają [61] m.in.: nierówności powierzchniowe, tarcie, czy jako środek przeciwdziałający tarciu — smarowanie. Jednym z pierwszych modeli uwzględniających czynniki mikromechaniczne w kontakcie pomiędzy ciałami jest fundamentalna praca [40], w której sformułowano model kontaktu odbywającego się przez nierówności powierzchniowe przybliżone w postaci parabolicznych chropowatości o statystycznie zróżnicowanych parametrach: wysokości i promieniu krzywizny chropowatości. Drugą fundamentalną pracą dotyczącą mikromechaniki kontaktu jest praca Perssona [113], w której zaproponowano nowy model o dużo większym zakresie stosowalności niż model Greenwooda i Williamsona [40]. Z powodu założeń model G&W sprawdza się, gdy udział rzeczywistego pola kontaktu do nominalnego pola kontaktu jest stosunkowo mały. Natomiast model zaproponowany przez Perssona dość dobrze przewiduje ewolucję rzeczywistego pola kontaktu wraz z rosnącym ciśnieniem kontaktowym w szerokim zakresie, nieomalże do stanu pełnego kontaktu.

Nierówności oraz ich wpływ na makroskopowe właściwości powierzchni kontaktowych jest przedmiotem intensywnych badań z użyciem m.in. metody elementów skończonych [np. 78, 131, 139, 141, 148]. Jednakże szczegółowy przegląd mikromechaniki kontaktu nie jest celem niniejszej rozprawy. W niedawno opublikowanym przeglądzie [149] przedstawiono aktualny stan wiedzy w tym zakresie.

Rozważania mikromechaniczne mogą być punktem wyjścia do stworzenia nowych modeli kontaktowych uwzględniających interakcję pomiędzy klasycznymi warunkami kontaktowymi i warunkami brzegowymi na niewiadome wyższego rzędu. Do tej pory, gdy używano modeli wyższego rzędu w zagadnieniach kontaktowych zazwyczaj nie uwzględniano dodatkowych stopni swobody w warunkach kontaktowych zakładając jednorodne warunki brzegowe na naprężenia wyższego rzędu (warunki Neumanna). Na przykład w serii prac [38, 39, 159, 160] rozważających klasyczne zagadnienia kontaktowe przy zastosowaniu modelu *couple-stress* zastosowano jednorodne warunki na mikromomenty — naprężenia wyższego rzędu sprzężone z gradientem obrotów.

Jedyną do tej pory pracą, według wiedzy autora niniejszej rozprawy, która postulowała warunki kontaktowe na niewiadome wyższego rzędu zależne od klasycznych zmiennych pojawiających się w warunkach kontaktowych, jest praca [157]. W pracy tej rozpatrywano model Cosseratów i zapostulowano zależność mikromomentu od ciśnienia kontaktowego w postaci nieznanej funkcji, którą należy wyznaczyć na podstawie eksperymentu. Jednak w przeprowadzonych w tej pracy obliczeniach zastosowano klasyczne warunki jednorodne na mikromoment w strefie kontaktu.

W celu zwrócenia uwagi na potrzebę stworzenia nowych modeli kontaktowych dla ciał opisywanych modelami wyższego rzędu zaproponowano w niniejszej rozprawie (za pracą [87]) nowy model kontaktowy dla ciał Cosseratów, który bazuje na rozważaniach mikromechanicznych. Otrzymano niestandardowe rozkłady ciśnienia kontaktowego w zagadnieniu typu Hertza przy zastosowaniu zaproponowanego modelu oraz dodatkowe efekty skali. Autor niniejszej rozprawy ma nadzieję, że zaprezentowany model kontaktowy będzie stanowił punkt wyjścia do stworzenia innych, nowych modeli kontaktowych dla ciał opisywanych modelami wyższego rzędu.

### **Rozdział 3**

# Wybrane modele kontinuum wyższego rzędu

#### 3.1 Model mikropolarnej sprężystości Cosseratów

#### 3.1.1 Kinematyka

Model kontinuum Cosseratów [16] postuluje istnienie dodatkowych stopni swobody oprócz klasycznego pola przemieszczeń **u**. Dodatkowe stopnie swobody, zebrane w wektor oznaczony przez  $\psi$ , są niezależnymi, infinitezymalnymi obrotami, nazywanymi dalej mikroobrotami. Spośród wielu dostępnych notacji opisujących kinematykę małych odkształceń ciała Cosseratów, w niniejszej rozprawie zastosowano opis użyty w pracach [14, 151]. Podstawową tzw. relatywną miarą deformacji wprowadzoną w tych pracach jest

$$\boldsymbol{\gamma} = \nabla \mathbf{u} + \boldsymbol{\epsilon} \, \boldsymbol{\psi},\tag{3.1}$$

gdzie  $\epsilon$  jest symbolem permutacyjnym (pseudo-tensorem trzeciego rzędu Levi-Civita). Symetryczna część  $\gamma$  jest tożsama z tensorem małych odkształceń występującym w klasycznym kontinuum

$$\boldsymbol{\gamma}^{\text{sym}} = \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u})^{\text{sym}}. \tag{3.2}$$

Natomiast część antysymetryczna  $\gamma$  opisuje relatywny obrót w punkcie materialnym ciała Cosseratów

$$\boldsymbol{\gamma}^{\mathrm{skw}} = \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\psi}, \tag{3.3}$$

gdzie  $\omega = (\nabla \mathbf{u})^{\text{skw}}$ . Tensor inifnitezymalnego obrotu  $\omega$  może być wyrażony za pomocą wektora

$$\mathbf{r} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon}:\boldsymbol{\omega}.\tag{3.4}$$

Odwrotne przekształcenie jest także możliwe, wtedy  $\omega = -\epsilon \mathbf{r}$ , które można wykorzystać do przedstawienia wektora mikroobrotu  $\psi$  jako tensora tensora drugiego rzędu

$$[\boldsymbol{\psi}] = -\boldsymbol{\epsilon} \, \boldsymbol{\psi}. \tag{3.5}$$

Uwzględniając powyższe zależności można zinterpretować antysymetryczną część relatywnej miary deformacji  $\gamma$  jako różnicę pomiędzy infinitezymalnym obrotem sąsiadujących punktów materialnych  $\omega$  a mikroobrotem Cosseratów  $\psi$ ,

$$\boldsymbol{\gamma}^{\text{skw}} = -\boldsymbol{\epsilon} \left( \mathbf{r} - \boldsymbol{\psi} \right) = \boldsymbol{\omega} - [\boldsymbol{\psi}]. \tag{3.6}$$

Ponadto model Cosseratów wprowadza miarę deformacji związaną ze zmianą mikroobrotu  $\psi$  w otoczeniu punktu materialnego kontinuum. Wielkością opisującą te zmiany jest gradient mikroobrotów

$$\boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\psi},\tag{3.7}$$

nazywany tensorem krzywizn.

#### 3.1.2 Liniowa sprężystość

Model liniowej sprężystości Cosseratów sprowadza się do zagadnienia minimalizacji po dwóch polach

$$\min_{\mathbf{u},\boldsymbol{\psi}} \Pi[\mathbf{u},\boldsymbol{\psi}],\tag{3.8}$$

sformułowanego dla następującego funkcjonału energii potencjalnej

$$\Pi \left[ \mathbf{u}, \boldsymbol{\psi} \right] = \int_{\Omega} \left( W_{\text{el}}(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\psi} \right) \mathrm{d}V - \int_{\Gamma_{\text{t}}} \mathbf{t}^* \cdot \mathbf{u} \, \mathrm{d}S - \int_{\Gamma_{\text{M}}} \mathbf{M}^* \cdot \boldsymbol{\psi} \, \mathrm{d}S, \qquad (3.9)$$

gdzie  $\Gamma_t$  i  $\Gamma_M$  oznaczają część brzegu, gdzie odpowiednio wektor naprężenia  $\mathbf{t}^*$  i wektor mikromomentu  $\mathbf{M}^*$  są zadane. W ogólności, te dwie części brzegu mogą mieć część wspólną lub być rozłączne. Skutkuje to większą liczbą kombinacji warunków brzegowych niż w klasycznej teorii sprężystości. Ponadto, **f** i **l** oznaczają odpowiednio siły i mikromomenty objętościowe.

Funkcja gęstości energii odkształceń sprężystych liniowego, izotropowego ciała Cosseratów składa się z dwóch części

$$W_{\rm el}(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\kappa}) = W_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\gamma}) + W_{\boldsymbol{\kappa}}(\boldsymbol{\kappa}). \tag{3.10}$$

Pierwsza z nich to funkcja gęstości energii sprężystości znana z klasycznego, izotropowego kontinuum wzbogacona o człon sprzęgający mikroobroty  $\psi$  z infinitezymalnymi obrotami  $\omega$  wynikającymi z gradientu przemieszczenia

$$W_{\gamma} = \frac{1}{2}\lambda \left( \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \right)^{2} + \mu \|\boldsymbol{\varepsilon}\|^{2} + \mu_{c} \|\boldsymbol{\gamma}^{\mathrm{skw}}\|^{2}, \qquad (3.11)$$

gdzie  $\lambda$  i  $\mu$  są stałymi Lamégo, a  $\mu_c \ge 0$  pełni funkcję modułu sprzęgającego. Gdy moduł  $\mu_c$  dąży do nieskończoności, model Cosseratów staje się modelem typu mikropolarnego o związanych obrotach (*couple-stress*), gdzie mikroobroty  $\psi$  nie występują jako niezależna zmienna, ponieważ

 $[\psi] = \omega$ . Krzywizna  $\kappa$  jest wtedy wyrażona poprzez wyższe pochodne przemieszczeń, co ma swoje określone konsekwencje, które nie są przedmiotem rozważań w niniejszej rozprawie.

Druga część funkcji gęstości energii sprężystości odpowiada za energię związaną z krzywiznami i może być wyrażona w różnych postaciach. W niniejszej rozprawie użyto notacji zaproponowanej w pracy [102]

$$W_{\kappa}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2}\ell^{2}\mu \left( \alpha' (\operatorname{tr}\boldsymbol{\kappa})^{2} + (\gamma' + \beta') \|\boldsymbol{\kappa}^{\operatorname{sym}}\|^{2} + (\gamma' - \beta') \|\boldsymbol{\kappa}^{\operatorname{skw}}\|^{2} \right).$$
(3.12)

Parametry materiałowe w (3.12) muszą spełniać warunki eliptyczności (rzeczywiste prędkości fal w zagadnieniach propagacji fal),

$$\lambda + \mu > 0, \qquad \mu_{c} + \mu > 0, \qquad \gamma' > 0, \qquad \alpha' + \beta' + \gamma' > 0,$$
(3.13)

jak dowiedziono w pracy [103]. Inny wariant mniej restrykcyjnych ograniczeń nałożonych na stałe materiałowe tzw. warunków *conformal invariance curvature* zaproponowano w pracy [104]. Jednak w niniejszej rozprawie, model ten nie będzie analizowany, ponieważ prowadzone tu rozważania dotyczą zagadnień w płaskim stanie odkształcenia, w którym to część funkcji gęstości energii sprężystości związana z tensorem krzywizny znacząco się upraszcza, por. (3.18).

Zasadę pracy wirtualnej dla ciała Cosseratów otrzymuje się poprzez przyrównanie wariacji energii potencjalnej (3.9) względem pól **u** i  $\psi$  do zera,  $\delta \Pi = 0$ , tj.,

$$G[\mathbf{u},\boldsymbol{\psi};\delta\mathbf{u},\delta\boldsymbol{\psi}] = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma}\cdot\delta\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{m}\cdot\delta\boldsymbol{\psi} - \mathbf{f}\cdot\delta\mathbf{u} - \mathbf{l}\cdot\delta\boldsymbol{\psi}) \,\mathrm{d}V + -\int_{\Gamma_{\mathrm{t}}} \mathbf{t}^*\cdot\delta\mathbf{u} \,\mathrm{d}S - \int_{\Gamma_{\mathrm{M}}} \mathbf{M}^*\cdot\delta\boldsymbol{\psi} \,\mathrm{d}S = 0 \qquad \forall \,\delta\mathbf{u},\delta\boldsymbol{\psi},$$
(3.14)

gdzie  $\delta \mathbf{u}$  i  $\delta \boldsymbol{\psi}$  są funkcjami próbnymi (uogólnionymi przemieszczeniami wirtualnymi) spełniającymi warunki

$$\delta \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{na} \ \Gamma_{\mathbf{u}} \quad \mathbf{i} \quad \delta \boldsymbol{\psi} = \mathbf{0} \quad \text{na} \ \Gamma_{\boldsymbol{\psi}}, \qquad \delta \boldsymbol{\gamma} = \nabla \delta \mathbf{u} + \boldsymbol{\epsilon} \ \delta \boldsymbol{\psi}, \tag{3.15}$$

przy czym  $\Gamma_u$  i  $\Gamma_{\psi}$  są częściami brzegu, gdzie odpowiednio przemieszczenia **u** i mikroobroty  $\psi$  są zadane. Tak jak w przypadku  $\Gamma_t$  i  $\Gamma_M$ , części brzegu  $\Gamma_u$  i  $\Gamma_{\psi}$  mogą mieć część wspólną lub być rozłączne.

W powyższych równaniach  $\sigma$  jest niesymetrycznym odpowiednikiem tensora naprężenia Cauchy'ego występującego w klasycznym kontinuum,

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \left( \operatorname{tr} \boldsymbol{\gamma} \right) \mathbf{I} + 2\mu \, \boldsymbol{\gamma}^{\operatorname{sym}} + 2\mu_c \, \boldsymbol{\gamma}^{\operatorname{skw}}, \tag{3.16}$$

a m jest tensorem mikromomentów (couple-stress tensor),

$$\mathbf{m} = \ell^2 \mu \left( \alpha' \left( \operatorname{tr} \boldsymbol{\kappa} \right) \mathbf{I} + \left( \gamma' + \beta' \right) \boldsymbol{\kappa}^{\operatorname{sym}} + \left( \gamma' - \beta' \right) \boldsymbol{\kappa}^{\operatorname{skw}} \right).$$
(3.17)

W płaskim stanie odkształcenia, pierwsza część funkcji gęstości energii sprężystości  $W_{\gamma}$  pozostaje bez zmian. Jednakże wszystkie wielkości tensorowe dotyczące mikromomentów mogą zostać zredukowane o jeden rząd, co oznacza, że wektor mikroobrotów  $\boldsymbol{\psi}$  i tensor drugiego rzędu krzywizny  $\boldsymbol{\kappa}$  redukują się odpowiednio do skalara  $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}_3$  i wektora  $\boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\psi}$ . Zatem druga część funkcji gęstości energii sprężystości,  $W_{\kappa}$ , upraszcza się do postaci

$$W_{\kappa}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2}\ell^{2}\mu \|\boldsymbol{\kappa}\|^{2}, \qquad (3.18)$$

a równanie konstytutywne mikromomentów do  $\mathbf{m} = \ell \mu \kappa$ .

Dla kompletności wywodu poniżej zestawiono równania równowagi w postaci silnej wraz z warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} &= 0 & \operatorname{w} \Omega, \\ \operatorname{div} \mathbf{m} - \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{l} &= 0 & \operatorname{w} \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} &= \mathbf{t}^* & \operatorname{na} \Gamma_{\mathrm{t}}, \\ \mathbf{m} \mathbf{n} &= \mathbf{M}^* & \operatorname{na} \Gamma_{\mathrm{M}}, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}^* & \operatorname{na} \Gamma_{\mathrm{u}}, \\ \boldsymbol{\psi} &= \boldsymbol{\psi}^* & \operatorname{na} \Gamma_{\boldsymbol{\psi}}, \end{aligned}$$
(3.19)

gdzie  $\mathbf{u}^*$  jest przemieszczeniem zadanym na  $\Gamma_u$ , a  $\boldsymbol{\psi}^*$  jest mikroobrotem zadanym na  $\Gamma_{\boldsymbol{\psi}}$ .

#### 3.2 Model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi

#### 3.2.1 Klasyczne sformułowanie bez efektów skali



Rysunek 3.1: Konfiguracje w teorii skończonych deformacji plastycznych kryształów.

W klasycznej teorii plastyczności skończonych deformacji kryształów [47, 48, 127], kinematyka bazuje na multiplikatywnym rozkładzie gradientu deformacji **F** [71, 83],

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^p, \qquad \mathbf{F}^* = \mathbf{R}^* \mathbf{U}^e, \tag{3.20}$$

gdzie  $\mathbf{F}^p$  jest plastyczną częścią gradientu deformacji, a część sprężysta  $\mathbf{F}^*$  składa się ze sprężystego rozciągnięcia  $\mathbf{U}^e$  i obrotu  $\mathbf{R}^*$ , por. rys. 3.1. Następnie zakłada się, że deformacja plastyczna jest efektem plastycznego poślizgu na krystalograficznych systemach poślizgu,

$$\dot{\mathbf{F}}^{p} = \mathbf{L}^{p} \mathbf{F}^{p}, \qquad \mathbf{L}^{p} = \sum_{\alpha=1}^{N_{s}} \dot{\gamma}_{\alpha} \mathbf{s}_{\alpha} \otimes \mathbf{m}_{\alpha}, \qquad (3.21)$$

gdzie ortogonalne wersory  $\mathbf{s}_{\alpha}$  i  $\mathbf{m}_{\alpha}$  definiują system poślizgu  $\alpha$ . Wersor  $\mathbf{s}_{\alpha}$  wskazuje kierunek poślizgu plastycznego, a  $\mathbf{m}_{\alpha}$  kierunek normalny do płaszczyzny poślizgu. W tej pracy przyjęto konwencję, że prędkość poślizgu plastycznego  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  może być zarówno dodatnia jak i ujemna. W związku z powyższym liczba systemów poślizgu w krysztale o strukturze regularnej ściennie centrowanej (*fcc*) wynosi  $N_s = 12$ .

W ciągliwych kryształach odkształcenia sprężyste są małe (z wyjątkiem przypadku bardzo wysokiego ciśnienia hydrostatycznego, który nie będzie analizowany), więc odpowiedź sprężystą przyjęto w postaci prostego prawa anizotropowego St. Venanta-Kirchhoffa,

$$\mathbf{P}^{e} = \mathbb{L}\mathbf{E}^{e}, \qquad \mathbf{E}^{e} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^{e} - \mathbf{I}), \qquad \mathbf{C}^{e} = (\mathbf{U}^{e})^{2} = (\mathbf{F}^{*})^{\mathrm{T}}\mathbf{F}^{*},$$
 (3.22)

gdzie  $\mathbb{L}$  jest anizotropowym tensorem sprężystości czwartego rzędu,  $\mathbf{P}^e$  jest symetrycznym, drugim tensorem naprężenia Pioli-Kirchhoffa w odniesieniu do konfiguracji pośredniej. Powyższy związek pomiędzy  $\mathbf{P}^e$  a tensorem sprężystego odkształcenia Greena-Lagrange'a  $\mathbf{E}^e$  jest liniowy. Zależności pomiędzy drugim tensorem Pioli-Kirchhoffa  $\mathbf{P}^e$  a tensorem naprężenia Cauchy'ego  $\boldsymbol{\sigma}$  i tensorem naprężenia Mandela **M** są następujące

$$\boldsymbol{\sigma} = (\det \mathbf{F}^*)^{-1} \mathbf{F}^* \mathbf{P}^e (\mathbf{F}^*)^{\mathrm{T}}, \qquad \mathbf{M} = \mathbf{C}^e \mathbf{P}^e, \tag{3.23}$$

przy czym tensor naprężenia Mandela **M** jest szczególnie istotny, ponieważ jest energetycznie sprzężony z częścią plastyczną gradientu prędkości  $L^p$ , por. (3.21).

Warunek plastyczności typu Schmida wraz ze stowarzyszonym prawem płynięcia i warunkami komplementarności,

$$f_{\alpha} = |\tau_{\alpha}| - \tau_{\alpha}^{c} \le 0, \qquad \operatorname{sign}(\tau_{\alpha})\dot{\gamma}_{\alpha} \ge 0, \qquad \dot{\gamma}_{\alpha}f_{\alpha} = 0, \tag{3.24}$$

jest definiowany indywidualnie na każdym systemie poślizgu poprzez efektywne naprężenie ścinające  $\tau_{\alpha}$  (resolved shear stress) na danym systemie poślizgu  $\alpha$ ,

$$\tau_{\alpha} = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{s}_{\alpha} \otimes \mathbf{m}_{\alpha}), \tag{3.25}$$

i poprzez krytyczne naprężenie ścinające na danym systemie poślizgu  $\tau_{\alpha}^{c}$  (*critical resolved shear stress*). Ewolucję krytycznego naprężenia ścinającego opisuje prawo umocnienia, które zostanie podane później. Umocnienie kinematyczne może być uwzględnione jako naprężenie wewnętrzne  $\xi_{\alpha}$  (*back-stress*) w warunku plastyczności  $f_{\alpha} = |\tau_{\alpha} - \xi_{\alpha}| - \tau_{\alpha}^{c}$  razem z prawem ewolucji  $\xi_{\alpha}$ . Efekt umocnienia kinematycznego jest kluczowy w zagadnieniach obciążeń cyklicznych i nieproporcjonalnych. W analizowanym zagadnieniu indentacji ścieżka odkształcenia jest w przeważającej mierze monotoniczna, więc umocnienie kinematyczne nie jest brane pod uwagę.

Opisany powyżej model jest niewrażliwy na prędkość deformacji (*rate-independent*). Ponadto model ten jest obarczony dobrze znanym problemem niejednoznacznego wyboru aktywnych systemów poślizgu. Jedną z propozycji kryterium wyboru aktywnych systemów poślizgu jest metoda

przyrostowej minimalizacji energii [np. 111, 117]. Niestety jej implementacja w systemach MES nie jest oczywista i jak do tej pory nie udało się tego zrobić w ogólnym przypadku plastyczności z dużą liczbą potencjalnie aktywnych systemów poślizgów. Z tego powodu stosuje się zregularyzowane modele, które zostaną pokrótce przedstawione w podrozdziale 3.2.5. Tamże przedstawiono porównanie rozwiązań uzyskanych w ramach modeli zregularyzowanych z wynikami uzyskanymi metodą przyrostowej minimalizacji energii dla zadanej ścieżki deformacji w punkcie materialnym zaprezentowanymi w pracy [75].

#### 3.2.2 Prawo umocnienia

Ewolucja krytycznego naprężenia ścinającego  $\tau^c_{\alpha}$  jest zadana przez prawo umocnienia

$$\dot{\tau}_{\alpha}^{c} = \sum_{\beta=1}^{N_{s}} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_{\beta}| = \theta \sum_{\beta=1}^{N_{s}} q_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_{\beta}|, \qquad (3.26)$$

gdzie macierz umocnienia  $h_{\alpha\beta}$  może zostać podana bezpośrednio lub może być wyrażona poprzez izotropowy moduł umocnienia  $\theta$  i bezwymiarową macierz interakcji  $q_{\alpha\beta}$ , wtedy  $h_{\alpha\beta} = \theta q_{\alpha\beta}$ . Macierz interakcji  $q_{\alpha\beta}$  może być zdefiniowana na wiele sposobów, na przykład może uwzględniać efekty współpłaszczyznowych, współliniowych lub przecinających się systemów poślizgu [10, 34]. W niniejszej rozprawie macierz interakcji uwzględnia jedynie różnicę pomiędzy umocnieniem będącym wynikiem poślizgu na rozważanym systemie poślizgu a poślizgiem na pozostałych systemach poprzez współczynnik umocnienia utajonego q (*latent hardening*). W związku z powyższym  $q_{\alpha\beta} = 1$  dla  $\alpha = \beta$  i  $q_{\alpha\beta} = q$  dla  $\alpha \neq \beta$ , gdzie q > 1 jest parametrem materiałowym, a macierz interakcji ma postać  $q_{\alpha\beta} = q + (1 - q)\delta_{\alpha\beta}$ , Należy zauważyć, że przy redukcji modelu trójwymiarowego do modelu dwuwymiarowego trzeba zwrócić szczególną uwagę na modyfikację prawa umocnienia. Szczegóły redukcji przedstawiono w podrozdziale 3.2.4.

Mając na uwadze wzbogacenie o efekty gradientowe, wygodnie jest przedstawić prawo umocnienia jako zależność modułu umocnienia  $\theta$  od naprężenia uplastyczniającego  $\tau$  zdefiniowanym jako

$$\dot{\tau} = \theta \dot{\gamma}, \qquad \dot{\gamma} = \sum_{\alpha=1}^{N_s} |\dot{\gamma}_{\alpha}|,$$
(3.27)

gdzie  $\dot{\gamma}$  jest efektywną prędkością poślizgu plastycznego a  $\tau$  jest interpretowane jako izotropowa część krytycznego naprężenia ścinającego  $\tau_{\alpha}^{c}$ . Anizotropowe prawo umocnienia (3.26) może być równoważnie zapisane jako

$$\dot{\tau}_{\alpha}^{c} = \dot{\tau} + \theta \sum_{\beta=1}^{N_{s}} (q_{\alpha\beta} - 1) |\dot{\gamma}_{\beta}|.$$
(3.28)

Przyjęte w niniejszej pracy równanie konstytutywne definiujące zależność modułu umocnienia  $\theta$  od  $\tau$  ma postać biliniową

$$\theta = \theta_{\tau}(\tau) = \max(\theta_{III}(\tau), \theta_{IV}), \qquad \theta_{III}(\tau) = \theta_0 \left(1 - \frac{\tau}{\tau_{max}}\right), \qquad \tau \ge \tau_0 \ge 0, \tag{3.29}$$

gdzie  $\theta_{III}(\tau)$  odpowiada liniowemu spadkowi  $\theta$  przy rosnącym  $\tau$ , co jest charakterystyczne dla etapu III umocnienia,  $\theta_{IV}$  jest stałym modułem umocnienia charakteryzującym etap IV umocnienia, a  $\tau_0$ ,  $\tau_{IV}$  są parametrami materiałowymi. Powody, dla których uwzględniono tylko etapy III i IV umocnienia zostały omówione w podrozdziale 7.1, w którym przedstawiono kalibrację prawa umocnienia (3.29) dla kryształu niklu.

Po scałkowaniu prawa ewolucji  $(3.27)_1$  uwzględniając, że dla  $\gamma = 0$  naprężenie uplastyczniające  $\tau = \tau_0$ , otrzymujemy prawo umocnienia, znane jako prawo Voce'a, w następującej postaci

$$\tau = \tau_{\gamma}(\gamma) = \tau_0 + (\tau_{max} - \tau_0) \left( 1 - \exp\left(\frac{-\theta_0 \gamma}{\tau_{max}}\right) \right), \qquad 0 \le \gamma \le \gamma_{IV}, \tag{3.30}$$

gdzie  $\gamma_{IV}$  odpowiada wartości  $\gamma$  przy przejściu z etapu III do etapu IV umocnienia. Dla  $\gamma > \gamma_{IV}$ , moduł umocnienia jest stały,  $\theta = \theta_{IV}$ , więc naprężenie uplastyczniające  $\tau$  rośnie liniowo wraz ze wzrostem  $\gamma$ .

#### 3.2.3 Wzbogacenie o efekty gradientowe

Propozycja wzbogacenia klasycznego prawa umocnienia plastyczności kryształów o efekty gradientowe została zaprezentowana w pracy [118]. W towarzyszącej pracy [140] przedstawiono szczegóły implementacji numerycznej modelu w ramach metody elementów skończonych. W niniejszej rozprawie został wykorzystany ten model w postaci zredukowanej do przypadku dwuwymiarowego. Poniżej pokrótce przedstawiono najważniejsze elementy modelu. Szczegóły wszystkich wyprowadzeń można znaleźć w pracy [118].

W prezentowanym modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi, który przez jego autorów nazywany jest "minimalnym", efekt gradientu prędkości poślizgu, i związane z tym umocnienie wynikające z dyslokacji geometrycznie niezbędnych (*GNDs*), wpływa tylko na izotropową część prawa umocnienia (3.27)<sub>1</sub>,

$$\dot{\tau} = \theta(\dot{\gamma} + \ell \dot{\chi}),\tag{3.31}$$

gdzie  $\dot{\chi}$  jest efektywnym gradientem prędkości poślizgu (zdefiniowanym później), a  $\ell$  jest długością charakterystyczną, która *została wyprowadzona*, a nie założona, w następującej postaci

$$\ell = \frac{a^2 \mu^2 b}{2\tau \theta}.\tag{3.32}$$

Powyższe gradientowe wzbogacenie zostało wyprowadzone przy wykorzystaniu klasycznego równania Taylora [144]

$$\tau = a\mu b\sqrt{\rho},\tag{3.33}$$

które łączy naprężenie uplastyczniające  $\tau$  z gęstością dyslokacji  $\rho$ . Współczynnik umocnienia a, moduł ścinania  $\mu$  i długość wektora Burgersa b są dla danego kryształu znanymi parametrami. Drugim fundamentalnym pomysłem prowadzącym do wzbogacenia gradientowego (3.31)–(3.32) jest rozdzielenie prędkości zmian całkowitej gęstości dyslokacji na części wynikające z dyslokacji statystycznie zmagazynowanych i geometrycznie niezbędnych, w przeciwieństwie do zwykle stosowanego podziału samej całkowitej gęstości dyslokacji [np. 7, 28, 106]. Jak omówiono szczegółowo w pracy [118], długość charakterystyczna  $\ell$  ma bezpośrednią interpretację fizyczną i jest powiązana z długością średniej drogi dyslokacji. Ponadto wyrażona jest przez aktualne naprężenie uplastyczniające  $\tau$  i moduł umocnienia  $\theta$  (a więc  $\ell$  zmienia się w trakcie deformacji) oraz poprzez znane parametry a,  $\mu$  i b. Po wyznaczeniu prawa umocnienia  $\theta = \theta_{\tau}(\tau)$ , żadne dodatkowe założenia i parametry materiałowe nie są potrzebne do zdefiniowania długości charakterystycznej  $\ell$ .

Wzbogacone o efekty gradientowe, anizotropowe prawo umocnienia wynika z połączenia izotropowego prawa umocnienia (3.31) z anizotropowym prawem umocnienia (3.28) dając w rezultacie

$$\dot{\tau}_{\alpha}^{c} = \theta \left( \sum_{\beta=1}^{N_{s}} q_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_{\beta}| + \ell \dot{\chi} \right).$$
(3.34)

Efekty gradientowe w prawie umocnienia (3.34) są uwzględnione poprzez efektywny gradient prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$ , którego postać została zaproponowana w pracy [118] jako

$$\dot{\boldsymbol{\chi}} = \| \overset{\circ}{\mathbf{G}} \|, \qquad \overset{\circ}{\mathbf{G}} = \sum_{\alpha=1}^{N_s} \mathbf{s}_{\alpha} \otimes (\nabla^{\#} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_{\alpha} \times \mathbf{m}_{\alpha}), \qquad \nabla^{\#} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_{\alpha} = (\mathbf{F}^p)^{-\mathrm{T}} \, \nabla \dot{\boldsymbol{\gamma}}_{\alpha}, \tag{3.35}$$

gdzie G jest tensorem gęstości dyslokacji [13], a G jest jego pochodną plastycznie konwekcyjną (Oldroyda),

$$\mathbf{\ddot{G}} = \mathbf{\dot{G}} - \mathbf{L}^{p}\mathbf{G} - \mathbf{G}(\mathbf{L}^{p})^{\mathrm{T}}.$$
(3.36)

W równaniu (3.35),  $\nabla \dot{\gamma}_{\alpha}$  oznacza gradient prędkości poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  w konfiguracji odniesienia, a  $\nabla^{*}\dot{\gamma}_{\alpha}$  jego transformację do konfiguracji pośredniej. Tensor gęstości dyslokacji **G** opisuje niekompatybilność **F**<sup>*p*</sup> i w teorii skończonych deformacji jest odpowiednikiem klasycznego tensora Nye'a  $\alpha$  [72, 109]. W teorii małych odkształceń równanie ewolucji (3.35) dla  $\dot{\chi}$  zredukowałoby się do  $\dot{\chi} = ||\dot{\alpha}||$ , gdzie  $\dot{\alpha} = \sum_{\alpha} \mathbf{s}_{\alpha} \otimes (\nabla \dot{\gamma}_{\alpha} \times \mathbf{m}_{\alpha})$ , co zostało szczegółowo omówione w pracy [118]. Efektywny gradient prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$  zdefiniowany powyżej nie zależy od składowych gradientu prędkości poślizgu normalnych do płaszczyzny poślizgu, a tylko od składowych w płaszczyźnie, które odpowiadają dyslokacjom geometrycznie niezbędnym [7].

Podsumowując, to stosunkowo proste wzbogacenie gradientowe klasycznej plastyczności kryształów sprowadza się do zastąpienia prawa umocnienia (3.26) przez wersję wzbogaconą o efekty gradientowe (3.34), w której gradienty prędkości poślizgu są uwzględnione poprzez  $\dot{\chi}$ , por. (3.35). Sam model jest sformułowany w ramach klasycznego kontinuum, tak więc nie wprowadza dodatkowych równań równowagi. Długość charakterystyczna  $\ell$  została wyprowadzona w postaci zamkniętej (3.32) i jej wartość zmienia się w trakcie deformacji. Jest to cecha wyróżniająca ten model na tle wielu istniejących modeli, w których długość charakterystyczna jest niezależnym i stałym parametrem materiałowym. Poza tym model gradientowego wzbogacenia jest prosty — stąd określenie "minimalny" nadane mu przez jego autorów [118] — a więc, oczywiście, nie uwzględnia różnych efektów, które zostały uwzględnione w bardziej rozbudowanych modelach. W szczególności nie jest uwzględnione umocnienie kinematyczne zależne od efektów gradientowych [np. 25, 41]. Stąd model ten jest przeznaczony do analizy zagadnień, w których ścieżka deformacji jest w przeważającej mierze monotoniczna, jak w przypadku analizowanego zagadnienia indentacji.

Jak przedyskutowano w pracy [140], jednoznaczność rozwiązania zagadnienia brzegowego w postaci przyrostowej nie jest zapewniona przy zastosowaniu modelu wzbogaconego o efekty gradientowego przedstawionego powyżej. W szczególności skokowe zmiany wartości gradientu prędkości poślizgu nie są wykluczone i mogą prowadzić do rozwiązań z oscylacjami, jak zaprezentowano w rozwiązaniu analitycznym jednowymiarowego zagadnienia warstwy brzegowej w pracy [140]. Stąd wynika potrzeba regularyzacji, której propozycję użytą w niniejszej rozprawie przedstawiono w podrozdziale 3.2.6.

#### 3.2.4 Konsystentna redukcja modelu 3D do 2D

W pracy Rice'a [128] pokazano, że deformację kryształu o strukturze regularnej ściennie centrowanej obciążonego w płaszczyźnie (1 1 0) można przybliżyć przez płaski stan odkształcenia pod warunkiem, że geometria próbki i obciążenie spełniają założenia płaskiego stanu odkształcenia. Deformacja plastyczna jest w tym przypadku realizowana na trzech, efektywnych, działających w jednej płaszczyźnie systemach poślizgu. Przy czym każdy z systemów reprezentuje dwa fizyczne, krystalograficzne systemy poślizgu, które są albo współpłaszczyznowe, albo współliniowe. Na każdym z dwóch systemów tworzących wypadkowy system poślizgu efektywne naprężenia ścinające  $\tau_{\alpha}$  są sobie równe, więc uplastyczniają się one równocześnie i z taką samą intensywnością. Pod warunkiem, że początkowe krytyczne naprężenia ścinające są sobie równe. Zakłada się, że wkład pozostałych sześciu systemów poślizgu jest mało znaczący do całkowitej deformacji, a w konsekwencji, że są one nieaktywne.

Przeprowadzone testy eksperymentalne indentacji klina ustawionego wzdłuż kierunku (110) w monokryształ niklu [76, 77] zostały zaplanowane tak, by wykorzystać warunki płaskiego stanu odkształcenia. Schemat tego doświadczenia pokazano na rys. 3.2. Po indentacji, monokryształ został przecięty w połowie, a obroty sieci krystalicznej zostały zmierzone za pomocą mikroskopii elektronowej (detektora EBSD). Pomiary pokazały, że obroty sieci krystalicznej z płaszczyzny (110) są praktycznie zerowe [77, 132], potwierdzając tym samym słuszność założenia o płaskim stanie odkształcenia.

W tym podrozdziale trójwymiarowy model plastyczności kryształów, przedstawiony w poprzedzających podrozdziałach, zostanie konsystentnie zredukowany do dwuwymiarowego modelu w płaskim stanie odkształcenia. Rozważania geometryczne dotyczące wypadkowych systemów



**Rysunek 3.2:** Schemat indentacji klina. Monokryształ o sieci regularnie ściennie centrowanej ulega odkształceniu w płaszczyźnie (110), a sama deformacja odbywa się na trzech efektywnych systemach poślizgu.

poślizgu w płaszczyźnie (1 1 0) zostały omówione szczegółowo przez Rice'a [128] oraz Kysara i innych [77]. Jednakże Rice [128] omawiał idealnie plastyczny model kryształu wraz z towarzyszącą mu stałą powierzchnią plastyczności. W pracy Lewandowski i Stupkiewicz [86] zaprezentowano, po raz pierwszy, prawo umocnienia, które uwzględnia zależności pomiędzy efektywnymi, wypadkowymi systemami poślizgu a fizycznymi, krystalograficznymi systemami poślizgu. W dalszej części niniejszej rozprawy prędkości na efektywnych systemach poślizgu będą określane mianem wypadkowych prędkości poślizgu, tak by odróżnić je od efektywnej prędkości poślizgu plastycznego  $\dot{\gamma}$  i efektywnego gradientu prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$ .

Jak wspomniano wcześniej, tylko sześć krystalograficznych systemów poślizgów jest potencjalnie aktywnych w płaskim stanie odkształcenia. Systemy te wyszczególniono w tab. 3.1. Przyjęto, że wielkości odnoszące się do systemów krystalograficznych oznaczane są greckimi indeksami,  $\alpha, \beta = 1, ..., 6$ . Indeksy oznaczone wielkimi literami A, B = 1, 2, 3 będą oznaczać wielkości odnoszące się do wypadkowych systemów poślizgów. Systemy krystalograficzne 1 i 2 są współpłaszczyznowe i odpowiadający im wypadkowy system poślizgu (A = 1) ma tę samą płaszczyznę poślizgu  $(1\bar{1}1)$ , natomiast kierunek poślizgu  $[1\bar{1}\bar{2}]$  jest wynikiem złożenia krystalograficznych kierunków poślizgu. Taka sama sytuacja zachodzi w przypadku krystalograficznych systemów 5 i 6 tworzących złożony system A = 3. Natomiast krystalograficzne systemy 3 i 4 są współliniowe. Posiadają ten sam kierunek poślizgu  $[1\bar{1}0]$ , a płaszczyzna poślizgu o normalnej (001) jest wynikiem złożenia krystalograficznych płaszczyzn poślizgu. Zestawienie płaszczyzn i kierunków wypadkowych systemów poślizgów wraz z odpowiadającymi im parami krystalograficznych systemów poślizgu  $(\alpha, \beta)$  przedstawiono w tab. 3.2.

Efektywne wypadkowe naprężenie ścinające  $\tau_A^{eff} = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{s}_A^{eff} \otimes \mathbf{m}_A^{eff})$  na wypadkowym systemie poślizgu *A* jest zdefiniowane analogicznie jak w przypadku krystalograficznych systemów pośli-
Tabela 3.1: Potencjalnie aktywne systemy poślizgu kryształu o strukturze regularnie ściennie centrowanej odkształcanego w płaszczyźnie (110).

α	1	2	3	4	5	6
$\mathbf{m}_{lpha}$	$(1\overline{1}1)$	$(1\overline{1}1)$	(111)	$(\overline{1}\overline{1}1)$	$(1\overline{1}\overline{1})$	$(1\overline{1}\overline{1})$
$\mathbf{s}_{\alpha}$	$[10\overline{1}]$	$[0\overline{1}\overline{1}]$	$[1\overline{1}0]$	$[1\overline{1}0]$	$[\overline{1}0\overline{1}]$	$[01\overline{1}]$

Tabela 3.2: Wypadkowe systemy poślizgu w płaszczyźnie (110).

Α	1	2	3
$\mathbf{m}_A^{e\!f\!f}$	$(1\overline{1}1)$	(001)	$(1\overline{1}\overline{1})$
$\mathbf{s}_A^{e\!f\!f}$	$[1\overline{1}\overline{2}]$	$[1\overline{1}0]$	$[\overline{1}1\overline{2}]$
$(\alpha, \beta)$	(1,2)	(3,4)	(5,6)

zgu (3.25). Zależność pomiędzy  $\tau_A^{eff}$  i krystalograficznymi efektywnymi naprężeniami ścinającymi  $\tau_{\alpha}$  wynika z geometrii systemów, jak w pokazano w pracy [128], i ma następującą postać

$$\tau_A^{eff} = \sum_{\alpha=1}^6 \Lambda_{A\alpha} \tau_\alpha, \qquad \tau_A^{c,eff} = \sum_{\alpha=1}^6 \Lambda_{A\alpha} \tau_\alpha^c, \tag{3.37}$$

która jest tożsama dla krytycznego naprężenia ścinającego  $(3.37)_2$ , a  $\Lambda_{A\alpha}$  jest macierzą transformacji wyprowadzoną w pracy [86]

$$\begin{bmatrix} \Lambda_{A\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}.$$
(3.38)

Ta sama macierz (po transpozycji) występuje w zależności pomiędzy prędkościami poślizgów krystalograficznych  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  i wypadkowymi prędkościami poślizgu  $\dot{\gamma}_{A}^{eff}$ ,

$$\dot{\gamma}_{\alpha} = \sum_{A=1}^{3} \Lambda_{A\alpha} \dot{\gamma}_{A}^{eff}, \qquad (3.39)$$

a efektywna prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}$  ma wtedy następującą postać

$$\dot{\gamma} = \sum_{\alpha=1}^{6} |\dot{\gamma}_{\alpha}| = \sum_{\alpha=1}^{6} \sum_{A=1}^{3} \Lambda_{A\alpha} |\dot{\gamma}_{A}^{eff}| = \sum_{A=1}^{3} \lambda_{A} |\dot{\gamma}_{A}^{eff}|, \qquad (3.40)$$

gdzie wektor  $\lambda_A$  jest zdefiniowany jako

$$\lambda_A = \sum_{\alpha=1}^{6} \Lambda_{A\alpha}, \qquad \begin{bmatrix} \lambda_A \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{3} & \frac{2}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}^T.$$
(3.41)

Z powyższego wynika, że efektywna prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}$  nie jest zwykłą sumą prędkości na wypadkowych systemach poślizgu  $\dot{\gamma}_A^{eff}$ , ale zawiera w sobie wagi  $\lambda_A$ . To zapewnia, że prędkość

umocnienia w modelu dwuwymiarowym jest fizycznie umotywowana i zgodna z pełnowymiarowym modelem.

Używając równań (3.37)<sub>2</sub>, (3.26) i (3.39), otrzymujemy prawo umocnienia, które opisuje ewolucję wypadkowego krytycznego naprężenia ścinającego  $\dot{\tau}_A^{c,eff}$  w funkcji wypadkowych prędkości poślizgu  $\dot{\gamma}_A^{eff}$ 

$$\dot{\tau}_{A}^{c,eff} = \theta \sum_{\alpha=1}^{6} \Lambda_{A\alpha} \sum_{\beta=1}^{6} q_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_{\beta}| = \theta \sum_{\alpha=1}^{6} \sum_{\beta=1}^{6} \Lambda_{A\alpha} q_{\alpha\beta} \sum_{B=1}^{3} \Lambda_{B\beta} |\dot{\gamma}_{B}^{eff}| = \theta \sum_{B=1}^{3} q_{AB}^{eff} |\dot{\gamma}_{B}^{eff}|, \quad (3.42)$$

gdzie  $q_{AB}^{e\!f\!f}$  jest złożoną macierzą interakcji

$$q_{AB}^{eff} = \sum_{\alpha=1}^{6} \sum_{\beta=1}^{6} \Lambda_{A\alpha} q_{\alpha\beta} \Lambda_{B\beta}.$$
(3.43)

Jeśli macierz interakcji  $q_{\alpha\beta}$  jest zdefiniowana jako  $q_{\alpha\beta} = q + (1-q)\delta_{\alpha\beta}$ , por. podrozdział 3.2.2, to złożona macierz interakcji  $q_{AB}^{eff}$  ma postać

$$\begin{bmatrix} q_{AB}^{eff} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3}(1+q) & 2q & \frac{4}{3}q \\ 2q & \frac{3}{2}(1+q) & 2q \\ \frac{4}{3}q & 2q & \frac{2}{3}(1+q) \end{bmatrix}.$$
 (3.44)

Macierz  $q_{AB}^{eff}$  zależy od współczynnika umocnienia utajonego q w nietrywialny sposób, który jest wynikiem geometrii krystalograficznych i wypadkowych systemów poślizgu. Godnym uwagi jest to, że złożone współczynniki umocnienia własnego, tj. znajdujące się na diagonali  $q_{AB}^{eff}$  nie są równe jedności i  $q_{11}^{eff} = q_{33}^{eff} \neq q_{22}^{eff}$ . Pozadiagonalne złożone współczynniki interakcji również zależą od rozważanej pary wypadkowych systemów poślizgu.

Ewolucja wypadkowego krytycznego naprężenia ścinającego  $\dot{\tau}_A^{c,eff}$  we wzbogaconym o efekty gradientowe prawie umocnienia ma postać

$$\dot{\tau}_A^{c,eff} = \theta \left( \sum_{B=1}^3 q_{AB}^{eff} |\dot{\gamma}_B^{eff}| + \lambda_A \ell \dot{\chi} \right), \tag{3.45}$$

gdzie współczynnik  $\lambda_A$ , zob. (3.41), który skaluje część zależną od efektywnego gradientu  $\ell \dot{\chi}$ , wynika z reguły transformacji (3.37)<sub>2</sub>. Można sprawdzić, że efektywny gradient prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$  (3.35) wyraża się wprost przez wielkości zdefiniowane na wypadkowych systemach poślizgu

$$\dot{\chi} = \| \overset{\circ}{\mathbf{G}} \|, \qquad \overset{\circ}{\mathbf{G}} = \sum_{A=1}^{3} \mathbf{s}_{A}^{eff} \otimes (\nabla^{\#} \dot{\gamma}_{A}^{eff} \times \mathbf{m}_{A}^{eff}).$$
(3.46)

Powyższe modyfikacje dają w rezultacie dwuwymiarowy model plastyczności kryształów w płaskim stanie odkształcenia, który jest w pełni zgodny z wyjściowym modelem trójwymiarowym. Jak pokazano, ogólna struktura modelu zredukowanego jest identyczna jak w przypadku pełnego modelu trójwymiarowego, w której krystalograficzne systemy poślizgu są zastąpione przez wypadkowe systemy poślizgu, zob. tab. 3.3. Jednakże efektywna prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}$  (3.40), złożona macierz interakcji  $q_{AB}^{eff}$  (3.43) i człon wzbogacenia gradientowego w anizotropowym prawie umocnienia (3.45) muszą być odpowiednio przedefiniowane, aby osiągnąć takie samo umocnienie jak w pełnym modelu trójwymiarowym.

	Pełen model 3D	Zredukowany model 2D	
	Klasyczny model plastyczności kryształów		
Wypadkowe naprężenie ścinające	$\tau_{\alpha} = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{s}_{\alpha} \otimes \mathbf{m}_{\alpha})$	$\tau^{e\!f\!f}_A = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{s}^{e\!f\!f}_\alpha \otimes \mathbf{m}^{e\!f\!f}_\alpha)$	
Warunek plastyczności	$  au_{lpha}  -  au_{lpha}^c \leq 0$	$ \tau_A^{e\!f\!f}  - \tau_A^{c,e\!f\!f} \le 0$	
Prawo płynięcia	$\mathbf{L}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}_{\alpha} \mathbf{s}_{\alpha} \otimes \mathbf{m}_{\alpha}$	$\mathbf{L}^{p} = \sum_{A} \dot{\gamma}_{A}^{e\!f\!f} \mathbf{s}_{\alpha}^{e\!f\!f} \otimes \mathbf{m}_{\alpha}^{e\!f\!f}$	
Anizotropowe prawo umocnienia	$\dot{\tau}_{\alpha}^{c}=\theta\sum_{\beta}q_{\alpha\beta} \dot{\gamma}_{\beta} $	$\dot{\tau}_A^{c,e\!f\!f} = \theta \sum_B q_{AB}^{e\!f\!f}  \dot{\gamma}_B^{e\!f\!f} $	
Efektywna prędkość płynięcia	$\dot{\gamma} = \sum_{\alpha}  \dot{\gamma}_{\alpha} $	$\dot{\gamma} = \sum_A \lambda_A  \dot{\gamma}_A^{e\!f\!f} $	
	Wzbogacenie o efekty gradientowe		
Efektywny gradient prędkości poślizgu	$\dot{\chi} = \left\  \sum_{\alpha} \mathbf{s}_{\alpha} \otimes (\nabla^{\#} \dot{\gamma}_{\alpha} \times \mathbf{m}_{\alpha}) \right\ $	$\dot{\boldsymbol{\chi}} = \left\  \sum_A \mathbf{s}_A^{e\!f\!f} \otimes (\nabla^{\#} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_A^{e\!f\!f} \times \mathbf{m}_A^{e\!f\!f}) \right\ $	
Anizotropowe prawo umocnienia	$\dot{\tau}_{\alpha}^{c} = \theta \big( \sum_{\beta} q_{\alpha\beta}  \dot{\gamma}_{\beta}  + \ell \dot{\chi} \big)$	$\dot{\tau}_A^{c,ef\!f} = \theta \big( \sum_B q_{AB}^{ef\!f}  \dot{\gamma}_B^{ef\!f}  + \lambda_A \ell \dot{\chi} \big)$	

Tabela 3.3: Zestawienie równań modelu zredukowanego 2D i pełnego modelu 3D.

#### 3.2.5 Regularyzacja warunku plastyczności

#### Regularyzacja typu rate-dependent

Klasycznym sposobem regularyzacji warunku plastyczności, powszechnie stosowanym w literaturze, jest zastosowanie regularyzacji typu lepkościowego zaproponowanego przez Hutchinsonsa [56]. W tym sformułowaniu prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  jest silnie nieliniową funkcją aktualnego efektywnego naprężenia ścinającego  $\tau_{\alpha}$  na danym systemie poślizgu,

$$\dot{\gamma}_{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sign}(\tau_{\alpha}) \left( \frac{|\tau_{\alpha}|}{\tau_{\alpha}^{c}} \right)^{\mathrm{m}}.$$
(3.47)

W ten sposób do modelu wprowadzone są dwa nowe parametry: referencyjna prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}_0$ , zwykle przyjmowana jako równa dla wszystkich systemów poślizgu oraz wykładnik  $m \gg 1$ , opisujący stopień wrażliwości na prędkość deformacji. W tym podejściu, nie ma obszaru sprężystego i wszystkie systemy poślizgu są jednocześnie aktywne.

Alternatywnym podejściem jest sformułowanie lepkościowe podobne w swej istocie do modelu Perzyny [114], w którym prędkość poślizgu jest funkcją nadwyżki efektywnego naprężenia ścinającego  $\tau_{\alpha}$  powyżej krytycznego naprężenia ścinającego  $\tau_{\alpha}^{c}$ . Natomiast, gdy efektywne naprężenie ścinające nie przekracza krytycznego naprężenia ścinającego to kryształ pozostaje sprężysty [np. 6, 130]. Jednakże to podejście nie jest wykorzystane w tej pracy.

#### Regularyzacja typu rate-independent

W pracach [4, 35] zaproponowano regularyzację poprzez wprowadzenie jednej powierzchni plastyczności dla wszystkich systemów poślizgu

$$F = \left(\sum_{\alpha=1}^{N_s} \left(\frac{\tau_{\alpha}}{\tau_{\alpha}^c}\right)^{2n}\right)^{\frac{1}{2n}} - 1 \le 0,$$
(3.48)

gdzie  $n \gg 1$  jest liczbą naturalną, która jest jedynym dodatkowym parametrem materiałowym w stosunku do modelu niezregularyzowanego. Niegładki, wypukły obszar sprężysty ograniczony warunkami plastyczności  $f_{\alpha} \leq 0$  jest więc zastąpiony przez pojedynczy, gładki i wypukły obszar wpisany w wyjściowy obszar sprężysty. Prawo stowarzyszonego płynięcia ma postać typu Mandela [92]

$$\mathbf{L}^{p} = \dot{\zeta} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{M}}, \qquad \dot{\zeta} \ge 0, \qquad \dot{\zeta}F = 0, \tag{3.49}$$

gdzie  $\dot{\zeta}$  jest mnożnikiem plastycznym spełniającym warunek komplementarności. Z powyższego wynika, że część plastyczna gradientu prędkości  $\mathbf{L}^p$  ma dokładnie postać (3.21)<sub>2</sub>, charakterystyczną dla plastyczności kryształów

$$\mathbf{L}^{p} = \sum_{\alpha=1}^{N_{s}} \dot{\gamma}_{\alpha} \mathbf{s}_{\alpha} \otimes \mathbf{m}_{\alpha}, \qquad \dot{\gamma}_{\alpha} = \underbrace{\left(\sum_{\beta=1}^{N_{s}} \left(\frac{\tau_{\beta}}{\tau_{\beta}^{c}}\right)^{2n}\right)^{\frac{1}{2n}-1}}_{\underbrace{\mathcal{L}^{c}}{\tau_{\alpha}^{c}}} \frac{\dot{\zeta}}{\tau_{\alpha}^{c}} \left(\frac{\tau_{\alpha}}{\tau_{\alpha}^{c}}\right)^{2n-1}.$$
(3.50)

Choć nie jest to oczywiste, zależność  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  od  $\tau_{\alpha}$  w równaniu (3.50)<sub>2</sub> jest dokładnie taka sama, jak w przypadku regularyzacji typu *rate-dependent* (3.47). Różnica polega na tym, że w tym przypadku referencyjna prędkość poślizgu nie jest stała i jest inna dla każdego systemu poślizgu. W szczególności zależy ona od mnożnika plastycznego  $\dot{\zeta}$ , który jest wyznaczany z warunku komplementarności  $\dot{F} = 0$ .

Podkreślone wyrażenie w równaniu  $(3.50)_2$  jest równe jeden, gdy F = 0 i może zostać pominięte w sformułowaniu przyrostowym. Jednakże, kiedy rozwiązanie jest poszukiwane w sposób iteracyjny, podkreślony składnik nie jest równy jedności i jego pominięcie skutkuje pogorszeniem zbieżności schematu iteracyjnego.

#### Porównanie obrotów sieci krystalicznej

W celu zbadania wpływu regularyzacji typu *rate-dependent* i *rate-independent* na otrzymywane wyniki przeprowadzono próbę prostego ścinania przy pełnej kontroli kinematycznej, tzn. przy zadanym gradiencie deformacji

$$\mathbf{F}(\lambda) = \mathbf{I} + \lambda \ \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3,\tag{3.51}$$

gdzie  $\lambda$  oznacza mnożnik obciążenia wyrażający zarazem amplitudę ścinania na płaszczyźnie o normalnej  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$  w kierunku osi  $x_1$ . Dzięki zastosowaniu pełnej kontroli kinematyki rozwiązanie ogranicza się do całkowania równań konstytutywnych modelu plastyczności kryształów.

Otrzymane wyniki przy zastosowaniu dwóch omawianych w tej pracy metod regularyzacji bez uwzględniania efektów gradientowych porównano z wynikami przedstawionymi w pracy [75], gdzie obliczenia przeprowadzono z użyciem nowatorskiego algorytmu minimalizacji energii przyrostowej [117]. Algorytm ten pozwala na wybór aktywnych systemów poślizgów plastycznych do realizacji deformacji plastycznej (maksymalnie 5) spośród wszystkich potencjalnie aktywnych systemów poślizgu (maksymalnie 12). Jak do tej pory algorytmu minimalizacji energii przyrostowej nie udało się zaimplementować w systemie MES, dlatego w tej pracy zastosowano regularyzację.

W pracy [75] przeprowadzono test prostego ścinania zadając gradient deformacji w postaci (3.51) dla czterech wybranych orientacji kryształu względem globalnego układu odniesienia. Orientację kryształu określono poprzez kierunki krystalograficzne odpowiadające wersorom  $\mathbf{e}_1$ i  $\mathbf{e}_3$ . Przyjęte orientacje zestawiono w tab. 3.4.

	Orientacja			
	Ι	II	III	IV
$\mathbf{e}_1$	(100)	(100)	(100)	(110)
<b>e</b> <sub>3</sub>	(011)	(013)	(001)	(001)

Tabela 3.4: Zestawienie orientacji kryształu w próbie prostego ścinania.

Aby zachować zgodność z pracą [75] w poniższych obliczeniach zastosowano potęgowe prawo umocnienia, w którym moduł umocnienia zdefiniowano nastepująco

$$\theta(\gamma) = h_0 \left(\frac{h_0 \gamma}{\tau_0 n_0} + 1\right)^{n_0 - 1},$$
(3.52)

gdzie  $h_0$  oznacza początkowy moduł umocnienia,  $\tau_0$  początkowe naprężenie płynięcia,  $n_0$  bezwymiarowy wykładnik,  $\gamma$  efektywny poślizg plastyczny, por. podrozdział 3.2.2. Pozostałe elementy procedury całkowania równań konstytutywnych pozostają bez zmian. W szczególności naprężenia krytyczne na danym systemie poślizgu  $\alpha$  wyznacza się zgodnie z równaniem (3.26). Parametry materiałowe odpowiadające kryształowi miedzi przyjęto takie same jak w pracy [75] i zestawiono je w tab. 3.5. Model umocnienia wraz z pocedurą całkowania równań konstytutywnych plastyczności kryształów zaimplementowano w systemie *Mathematica* [58], przy czym wykorzystano możliwości pakietu *AceGen* dotyczące automatycznego różniczkowania [66].

Tabela 3.5: Parametry materiałowe dla miedzi i modelu umocnienia potęgowego [75].

	$c_{11}$	<i>c</i> <sub>12</sub>	C44	$ au_0$	$h_0$	$n_0$	q
	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[MPa]	[MPa]		
-	170	123	75	16	180	0.16	1.4

W przypadku zastosowania regularyzacji typu *rate-dependent* zastosowano parametry specyficzne dla tej regularyzacji o wartościach: wykładnik m = 20, referencyjna prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}_0 = 10^{-3}$  1/s, czas trwania obciążenia  $t_{\text{max}} = \lambda_{\text{max}}/\dot{\gamma}_0 = 10^4$  s, stały krok czasowy  $\Delta t = 10^{-3}$  s. Przyjęto, że cały proces deformacji odbędzie się z prędkością równą referencyjnej prędkości poślizgu, tak jak w przypadku obliczeń MES w rozdziale 7. Ponadto stosunkowo niska prędkość deformacji pozwala na minimalizację wpływu efektów lepkościowych, które mogłbyby zaburzyć rezultaty. Celem porównania jest zbadanie wpływu samego sposobu regularyzacji, więc dodatkowe efekty lepkościowe mogłyby zaburzać otrzymane wyniki.

Regularyzacja typu *rate-indendent* wymaga podania tylko jednego dodatkowego parametru, wykładnika *n*, który przyjęto n = 20. Taką samą wartość wykładnika użyto w obliczeniach w rozdziale 7. Wynik całkowania równań konstytutywnych przy zastosowaniu regularyzacji *rate-independent* w niewielkim stopnium zależy od wielkości kroku, więc do obliczeń przyjęto stały krok o wielkości  $\Delta \lambda = 0.01$ . We wszystkich obliczeniach maksymalny mnożnik obciążenia ustalono na  $\lambda_{max} = 10$ , co pozwala na zbadanie kryształu przy bardzo dużych odkształceniach postaciowych niemożliwych do osiągnięcia w podejściu MES z uwagi na znaczne dystorsje siatki.

Porównanie ograniczono do zakresu, który można porównać z rezultatami przedstawionymi w pracy [75], a więc do zmiany naprężenia Kirchhoffa  $\tau_{13}$  w funkcji mnożnika obciążenia  $\lambda$  i obrotów sieci krystalicznej względem początkowej konfiguracji. Do analizy obrotów sieci krystalicznej posłużono się rzutem stereograficznym, na którym przedstawiono początkową orientację kryształu względem układu współrzędnych i ewolucję obrotu w trakcie deformacji.

Otrzymane wyniki, przedstawione na rys. 3.3, należy podzielić na dwie grupy. Pierwsza grupa, obejmująca orientacje I i IV, dotyczy przypadku, gdy potencjalnie aktywne są nieliczne systemy poślizgu. Odpowiednio w orientacji I i IV potencjalnie aktywne są 4 i 2 systemy poślizgu [75]. Charakter krzywych naprężenie  $\tau_{13}$  w funkcji deformacji  $\lambda$  oraz obrotów sieci krystalicznej jest praktycznie identyczny z tym otrzymanym przy zastosowaniu minimalizacji energii przyrostowej. Wynika to z tego, że cała deformacja plastyczna przy danej orientacji jest możliwa do zrealizowania przez mniej niż 5 aktywnych systemów poślizgu.

W drugiej grupie, obejmującej orientacje II i III, mamy do czynienia ze znaczącymi różnicami pomiędzy wynikami otrzymanymi za pomocą modelu zregularyzowanego a wynikami otrzymanymi metodą minimalizacji energii przyrostowej. Powodem tych różnic jest to, że w przypadku zastosowania regularyzacji wszystkie systemy poślizgu są aktywne i w trakcie całkowania równań konstytutywnych w zależności od wielkości efektywnego naprężenia ścinającego wyznaczane są odpowiednie poślizgi plastyczne. Natomiast w przypadku minimalizacji energii przyrostowej na każdym kroku wyznaczany jest zbiór aktywnych systemów poślizgu i tylko na tych systemach następuje poślizg plastyczny. W rezultacie można zaobserwować znaczące różnice zarówno w przebiegu naprężenia ścinającego  $\tau_{13}$  jak i w przypadku obrotów sieci krystalicznej. W szczególności ścinanie w przypadku orientacji o wysokiej symetrii (III) obserwowana różnica jest szczególnie wyraźna.

Analizując różnice pomiędzy wynikami otrzymanymi przy pomocy regularyzacji *rate-dependent* i *rate-independent* należy stwierdzić, że przy odpowiednio niskiej prędkości deformacji, są



**Rysunek 3.3:** Naprężenie ścinające Kirchhoffa  $\tau_{13}$  (po lewej) i obrót sieci krystalicznej przedstawiony na rzucie stereograficznym (po prawej) otrzymane przy zastosowaniu regularyzacji *rate-dependent* i *rate-independent* wraz z wynikami przedstawionymi w pracy [75]. Obrót wyznaczony modelami zregularyzowanymi zaznaczono czarnymi punktami, a przedstawiony w pracy [75] czerwonymi. Początkową orientację wskazują okręgi.

one pomijalne. Obserwacje te potwierdzają również wyniki zaprezentowane w podrozdziale 7.3.1, gdzie porównywano wpływ metody regularyzacji na wyniki otrzymane w zagadnieniu wciskania klina w monokryształ niklu.

#### 3.2.6 Uwagi na temat implementacji numerycznej

W niniejszym podrozdziale, pokrótce zostaną przedstawione najważniejsze aspekty komputerowej implementacji opisanego powyżej modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe z wykorzystaniem metody elementów skończonych (MES). Zredukowany model w płaskim stanie odkształcenia ma dokładnie taką samą strukturę jak pełen model trójwymiarowy. Stąd, sposób implementacji zaprezentowany w pracy [140] dla pełnego modelu może zostać zastosowany w przypadku modelu zredukowanego. Implementacja modelu plastyczności kryształów bez wzbogacenia gradientowego, który także został użyty w symulacjach, jest standardowa i nie wymaga osobnego opisu.

Model jest sformułowany w ramach klasycznego kontinuum, a wzbogacenie o efekty gradientowe zostało wprowadzone poprzez prawo umocnienia (3.34). Efektywny gradient prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$ , który pojawia się w prawie umocnienia, zależy od gradientów prędkości poślizgów  $\nabla \dot{\gamma}_{\alpha}$ , por. (3.35). Potrzeba obliczenia tych gradientów stanowi główną różnicę w stosunku do implementacji modelu bez wzbogacenia gradientowego. W klasycznym sformułowaniu MES, prędkości poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$ , a właściwie przyrosty  $\Delta \gamma_{\alpha}$ , są wyznaczane lokalnie w punktach całkowania Gaussa jako rozwiązanie przyrostowych równań konstytutywnych, więc ich gradienty nie są dostępne.

W podejściu przyjętym w niniejszej rozprawie, tożsamym z tym z pracy [140], każda lokalna prędkość poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  jest przybliżona przez odpowiadającą jej ciągłą, nielokalną prędkość poślizgu  $\dot{\bar{\gamma}}_{\alpha}$ , której wartość wyznaczana jest z równania typu Helmholtza

$$\dot{\bar{\gamma}}_{\alpha} - l_h^2 \nabla^2 \dot{\bar{\gamma}}_{\alpha} = \dot{\gamma}_{\alpha}, \tag{3.53}$$

gdzie  $\nabla^2$  jest operatorem Laplace'a, a  $l_h$  jest wymiarem charakterystycznym, który zostanie omówiony poniżej. Nielokalne prędkości poślizgu  $\dot{\bar{\gamma}}_{\alpha}$  są wynikiem uśredniania lokalnych prędkości poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  z pewną długością charakterystyczną  $l_h$  w procesie uśredniania wynikającym z równania (3.53), por. pracę [112]. W prezentowanym schemacie implementacji w środowisku MES, nielokalne prędkości poślizgu  $\dot{\bar{\gamma}}_{\alpha}$  są niezależnymi globalnymi niewiadomymi, które podlegają standardowej interpolacji o stopniu regularności  $C^0$ . Dzięki temu możliwe jest wyliczenie ich gradientów, które następnie są użyte do wyznaczenia efektywnego gradientu prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$ .

Numeryczny parametr  $l_h$  w równaniu (3.53) przyjęto jako proporcjonalny do rozmiaru elementu skończonego h, przez co jest niezależny od fizycznej długości charakterystycznej  $\ell$  w modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi. W szczególności przyjmując  $l_h = h$ , równanie (3.53) zapewnia uśrednianie i wygładzenie lokalnych prędkości poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  zdefiniowanych tylko w punktach Gaussa proporcjonalne do wielkości elementu skończonego. Należy zauważyć, że popularne modele gradientowe uszkodzenia lub plastyczności z osłabieniem [np. 112] używają identycznego równania typu Helmholtza w celu zregularyzowania zjawiska lokalizacji odkształcenia. Jednakże w tych modelach zakłada się, że długość charakterystyczna jest parametrem materiałowym, który określa grubość pasma lokalizacji.

Wymiar charakterystyczny  $l_h$  może też być interpretowany jako parametr regularyzacji. W zasadzie równanie uśredniające (3.53) zapewnia potrzebną w modelu regularyzację, o której była mowa w podrozdziale 3.2.3 i która została szczegółowo omówiona w pracy [140]. Alternatywnie, zamiast uzależniać wymiar charakterystyczny  $l_h$  od rozmiaru elementu h, można przyjąć, że wymiar charakterystyczny  $l_h$  jest stały, jako dodatkowy parametr modelu. Wpływ parametru regularyzacji  $l_h$  na otrzymane efekty skali przedstawiono w podrozdziale 7.5.1.

Równanie (3.53) jest rozwiązywane przy założeniu jednorodnych warunków brzegowych Dirichleta lub Neumanna. W symulacjach przedstawionych w tej pracy przyjęto warunki Neumanna. Sprawdzono, że w zagadnieniu indentacji klina, analizowanym w niniejszej rozprawie, przyjęte warunki brzegowe nie mają wpływu na ogólną odpowiedź. Warunki brzegowe mają wpływ na nielokalne prędkości poślizgu  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  tylko w warstwie przy brzegu o zasięgu proporcjonalnym do  $l_h = h$ . Dla stosunkowo gęstej siatki elementów skończonych, jak w przypadku prezentowanych obliczeń, ten efekt jest pomijalny. W przypadku rozwiązania zagadnienia ścinania półprzestrzeni lub warstwy, przyjęcie warunku brzegowego  $\dot{\gamma}_{\alpha} = 0$  prowadzi do uzyskania warstwy brzegowej tak jak przewiduje to rozwiązanie analityczne oryginalnego modelu, które nie zawiera równania uśredniającego (3.53), por. [140].

Przyrostowe równania konstytutywne otrzymano w wyniku zastosowania niejawnego schematu całkowania Eulera. Wprowadzone do modelu nielokalne przyrosty poślizgu  $\Delta \bar{\gamma}_{\alpha}$ , które są globalnymi niewiadomymi, ich gradienty  $\nabla(\Delta \bar{\gamma}_{\alpha})$  oraz aktualny gradient deformacji **F** stanowią dane wejściowe do całkowania równań konstytutywnych. Rozwiązaniem równań lokalnych na poziomie punktu całkowania Gaussa są między innymi lokalne przyrosty poślizgów plastycznych  $\Delta \gamma_{\alpha}$ . Komplet równań przyrostowych można znaleźć w pracy [140].

Sprzężenie nielokalnych przyrostów poślizgów plastycznych z lokalnymi odbywa się za pomocą równania uśredniającego (3.53) (w postaci przyrostowej), które jest rozwiązywane dla każdego systemu poślizgu na poziomie globalnym równocześnie z równaniami równowagi. Stąd wynika, że globalnymi niewiadomymi są przemieszczenia węzłowe i nielokalne przyrosty poślizgów plastycznych. W przypadku kryształu o strukturze regularnej ściennie centrowanej otrzymujemy 3+12 = 15 niewiadomych w pełnym modelu trójwymiarowym oraz 2 + 3 = 5 niewiadomych w płaskim stanie odkształcenia. Do rozwiązania równań na poziomie globalnym i lokalnym (w punkcie całkowania Gaussa) użyto metody Newtona, co prowadzi do klasycznego zagnieżdżonego schematu iteracyjnego [68].

W celu zredukowania liczby niewiadomych globalnych implementowanego modelu w płaskim stanie odkształcenia, zastosowano wielomiany interpolujące o mieszanym stopniu. Przemieszcze-

nia są interpolowane przez standardowe, pełne, bikwadratowe wielomiany, a nielokalne przyrosty poślizgów plastycznych przez biliniowe funkcje kształtu. Pojedynczy element skończony posiada zatem 18 niewiadomych przemieszczeń (9 węzłów) i 12 niewiadomych przyrostów poślizgów plastycznych (4 węzły). Mieszany rząd interpolacji jest naturalnym wyborem, ponieważ uśredniane lokalne przyrosty poślizgów plastycznych są funkcjami gradientu przemieszczeń. Redukcja liczby stopni swobody byłaby jeszcze bardziej odczuwalna w przypadku pełnego modelu trójwymiarowego, gdzie nielokalne przyrosty poślizgów stanowią aż 12 dodatkowych niewiadomych. W pracy [140] zastosowano najprostsze podejście i oba pola interpolowano za pomocą trójliniowych funkcji kształtu, a w celu zredukowania przesztywnienia objętościowego (*volumetric locking*) użyto techniki *F-bar* [20].

Elementy o pełnym bikwadratowym stopniu interpolacji dobrze zachowują się w zagadnieniach prawie nieściśliwej sprężysto-plastyczności [np. 69]. Stąd nie ma potrzeby stosowania dodatkowych zabiegów (takich jak techniki *enhanced-strain, F-bar* lub zredukowanego całkowania), które są konieczne w przypadku elementów o biliniowych funkcjach kształtu. Po przeprowadzeniu testów elementów kwadratowych typu *serendipity* (interpolacja niepełnym bikwadratowym wielomianem) okazało się, że elementy z pełnym wielomianem bikwadratowym zachowują się lepiej w analizowanych zagadnieniach indentacji.

Model zaimplementowano w środowisku *AceGen/AceFEM* [66, 68]. *AceGen* jest narzędziem do generowania kodu, które wykorzystuje możliwości obliczeń symbolicznych programu *Mathematica* [58] i algorytmów automatycznego różniczkowania oraz optymalizacji generowanego kodu. Dzięki automatycznemu różniczkowaniu wszystkie nieliniowe układy równań różniczkowych zarówno na poziomie globalnym jak i lokalnym (równania konstytutywne) zostały konsystentnie zlinearyzowane, co skutkuje bardzo dobrą zbieżnością schematu Newtona. Obliczenia zostały przeprowadzone za pomocą systemu MES *AceFEM*, który jest ściśle powiązany z modułem *Ace-Gen*.

# **Rozdział 4**

# Modele kontaktowe

#### 4.1 Klasyczne sformułowanie zagadnienia kontaktowego

Zagadnienia kontaktowe są obecne w szeroko rozumianej współczesnej inżynierii niemalże na każdym kroku. Rozwiązania analityczne istnieją tylko w bardzo ograniczonym zakresie, np. klasyczne zagadnienie Hertza dotyczące kontaktu dwóch idealnie sprężystych kul, które można rozszerzyć na zagadnienie kontaktu kuli z półprzestrzenią. Więcej przykładów klasycznych rozwiązań analitycznych można znaleźć w monografii Johnsona [60]. W ogólnym przypadku zagadnienie kontaktowe jest formułowane jako jednostronne ograniczenie nałożone na pole przemieszczeń, a całe zagadnienie w przypadku sprężystości (także nieliniowej) pod względem matematycznym zmienia się z minimalizacji energii potencjalnej w minimalizację energii potencjalnej z ograniczeniami. Poniżej zostaną przedstawione najważniejsze założenia i równania pojawiające się w sformułowaniu kontynualnym kontaktu pomiędzy dwoma ciałami w zakresie małych odkształceń oraz w zakresie skończonych deformacji.

#### 4.1.1 Małe odkształcenia i poślizgi

Już na wstępie należy zaznaczyć, że zagadnienie kontaktowe sformułowane w zakresie małych odkształceń nie ma formalnie, w sensie matematycznym, żadnych ograniczeń — podobnie jak w przypadku liniowej teorii sprężystości. Należy stosować te same zasady w ocenie zasadności sformułowania problemu mechanicznego w zakresie małych odkształceń. Mając na uwadze powyższe, nie należy stwierdzeń o bliskiej odległości traktować jako wymagań formalnych, a jedynie jako zdroworozsądkowe. Ponadto, ograniczenia kontaktowe wprowadzają nieliniowość nawet w przypadku kontaktu dwóch ciał liniowo sprężystych.

Niech dane będą dwa ciała  $\mathcal{B}^1$  i  $\mathcal{B}^2$  zajmujące obszary odpowiednio  $\Omega^1$  z brzegiem  $\Gamma^1$  i  $\Omega^2$ z brzegiem  $\Gamma^2$ . Przez  $\Gamma_c^1$  i  $\Gamma_c^2$  oznaczmy te części brzegu  $\Gamma^1$  i  $\Gamma^2$ , na których może dojść do kontaktu. Pierwszym założeniem w zakresie małych odkształceń jest to, że te dwa brzegi są nierozróżnialne, tj.  $\Gamma_c^1 \approx \Gamma_c^2 \equiv \Gamma_c$ . Stąd wynika, że punkty na brzegu  $\Gamma_c$  mają tę samą współrzędną  $\mathbf{X}^1 = \mathbf{X}^2 = \mathbf{X}$ . Konsekwencją tego założenia jesto to, że normalne  $\mathbf{n}^1$  i  $\mathbf{n}^2$  w każdym punkcie **X** na brzegu  $\Gamma_c$  mają taki sam kierunek i przeciwny zwrot i można je zastąpić jedną normalną,  $-\mathbf{n}^1 = \mathbf{n}^2 = \mathbf{n}$ , która jest ustalona przez początkową geometrię i nie zmienia się w trakcie deformacji, por. rys. 4.1.



Rysunek 4.1: Schemat zagadnienia kontaktowego w zakresie małych odkształceń.

Następnie wprowadza się względne przemieszczenie

$$\mathbf{d}(\mathbf{X}) = \mathbf{u}^1(\mathbf{X}) - \mathbf{u}^2(\mathbf{X}) \tag{4.1}$$

oraz w każdym punkcie **X** można zdefiniować wielkość początkowej separacji  $g_0(\mathbf{X})$ , która wynika ze znanej początkowej geometrii kontaktujących się ciał. Podstawową zmienną kinematyczną występującą w zagadnieniu kontaktowym jest separacja  $g_n(\mathbf{X})$ ,

$$g_{\mathbf{n}}(\mathbf{X}) = g_{0}(\mathbf{X}) + \mathbf{d}(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{X}) = g_{0} + d_{\mathbf{n}},$$
(4.2)

która może przyjmować tylko wartości nieujemne,  $g_n \ge 0$ . Dla przejrzystości zapisu w dalszej części określenie położenia  $\cdot(\mathbf{X})$  będzie pomijane, ponieważ wszystkie wielkości są zdefiniowane w danym punkcie  $\mathbf{X}$  na brzegu  $\Gamma_c$ .

Jeżeli rozważamy kontakt z tarciem to potrzebna jest również składowa styczna do brzegu  $\Gamma_c$ ,

$$\mathbf{d}_{\mathbf{t}} = \mathbf{d} - d_{\mathbf{n}} \, \mathbf{n} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{d}. \tag{4.3}$$

W zakresie małych odkształceń prędkość składowej stycznej jest zależna tylko od prędkości względnego przemieszczenia

$$\dot{\mathbf{d}}_{t} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \dot{\mathbf{d}},\tag{4.4}$$

ponieważ normalna  $\mathbf{n}$  jest ustalona przez początkową geometrię ciał. Wektory naprężenia na powierzchni ciał są wyznaczony poprzez tensory naprężenia i normalne

$$\mathbf{t}^1 = \boldsymbol{\sigma}^1 \mathbf{n}^1, \qquad \mathbf{t}^2 = \boldsymbol{\sigma}^2 \mathbf{n}^2. \tag{4.5}$$

Z warunku równowagi wynika, że  $\mathbf{t}^2 = -\mathbf{t}^1$ . Pamiętając, że normalna  $\mathbf{n}^2$  została wyróżniona, podobnie wyróżniony jest wektor naprężenia  $\mathbf{t}^2 = -\mathbf{t}^1 = \mathbf{t}$ . Składowa normalna i styczna wektora naprężenia kontaktowego jest wyznaczona analogicznie do składowej normalnej i stycznej względnego przemieszczenia

$$t_{\mathbf{n}} = \mathbf{t} \cdot \mathbf{n}, \qquad \mathbf{t}_{\mathbf{t}} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \mathbf{t}.$$
 (4.6)

W przyjętej notacji drugie ograniczenie kontaktowe przybiera klasyczną postać braku przyciągania (np. adhezji)  $t_n \leq 0$ .

Kontakujące się ciała w sformułowaniu kontynualnym bez tarcia muszą na brzegu  $\Gamma_c$  spełniać poniższe warunki

$$g_n \ge 0, \quad t_n \le 0, \quad g_n t_n = 0,$$
 (4.7)

które stanowią ograniczenia kontaktowe, zwane warunkami Signoriniego [152]. Podobne warunki spotyka się w zagadnieniach optymalizacji z ograniczeniami nierównościowymi, gdzie znane są pod nazwą warunków Karusha-Kuhna-Tuckera [107].

Jeżeli rozważane jest zagadnienie kontaktowe z tarciem to oprócz warunków (4.7) potrzebne jest ograniczenie na składowe styczne wektora naprężenia i względnego przemieszczenia. Takie ograniczenia formułuje się w postaci prawa tarcia. W niniejszej rozprawie ograniczono się do najprostszego prawa tarcia Coulomba

$$\Phi = \|\mathbf{t}_{\mathsf{t}}\| + \mu \, t_{\mathsf{n}} \le 0,\tag{4.8}$$

gdzie  $\mu$  oznacza współczynnik tarcia. Drugim niezbędnym elementem prawa tarcia jest reguła płynięcia

$$\|\dot{\mathbf{g}}_t\|\mathbf{t}_t = \dot{\mathbf{g}}_t\|\mathbf{t}_t\|,\tag{4.9}$$

całość uzupełnia znany z teorii plastyczności warunek komplementarności

$$\Phi \| \dot{\mathbf{g}}_t \| = 0. \tag{4.10}$$

Punktem wyjścia do implementacji w metodzie elementów skończonych jest sformułowanie zagadnienia kontaktowego w postaci słabej wykorzystującej zasadę pracy wirtualnej, które zapisane dla każdego z ciał ma postać

$$\int_{\Omega^{i}} \boldsymbol{\sigma}^{i} \cdot \delta \boldsymbol{\varepsilon}^{i} \, \mathrm{d}V - \int_{\Gamma_{t}^{i}} \mathbf{t}^{*i} \cdot \delta \mathbf{u}^{i} \, \mathrm{d}S - \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{t}^{i} \cdot \delta \mathbf{u}^{i} \, \mathrm{d}S = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}^{i}, \tag{4.11}$$

gdzie  $\delta \mathbf{u}^i$  jest funkcją próbną (wirtualnym przemieszczeniem), która przyjmuje wartość  $\delta \mathbf{u}^i = \mathbf{0}$ na brzegu  $\Gamma_u^i$  oraz  $\delta \boldsymbol{\varepsilon}^i = \frac{1}{2} (\nabla \delta \mathbf{u}^i + (\nabla \delta \mathbf{u}^i)^T)$ . Suma prac wirtualnych daje funkcjonał  $G[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}]$ systemu składającego się z dwóch ciał w kontakcie

$$G[\mathbf{u};\delta\mathbf{u}] = \sum_{i=1}^{2} \left( \int_{\Omega^{i}} \boldsymbol{\sigma}^{i} \cdot \delta\boldsymbol{\varepsilon}^{i} \, \mathrm{d}V - \int_{\Gamma_{t}^{i}} \mathbf{t}^{*i} \cdot \delta\mathbf{u}^{i} \, \mathrm{d}S - \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{t}^{i} \cdot \delta\mathbf{u}^{i} \, \mathrm{d}S \right) = 0 \quad \forall \delta\mathbf{u}, \qquad (4.12)$$

gdzie  $\mathbf{u} = {\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2}, \, \delta \mathbf{u} = {\delta \mathbf{u}^1, \delta \mathbf{u}^2}.$  Rozdzielając funkcjonał na część zależną od pracy sił wewnętrznych i zewnętrznych działających na każde z ciał,  $G^i[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}],$ 

$$G^{i}[\mathbf{u}^{i};\delta\mathbf{u}^{i}] = \int_{\Omega^{i}} \boldsymbol{\sigma}^{i} \cdot \delta\boldsymbol{\varepsilon}^{i} \,\mathrm{d}V - \int_{\Gamma^{i}_{t}} \mathbf{t}^{*i} \cdot \delta\mathbf{u}^{i} \,\mathrm{d}S \tag{4.13}$$

oraz na część pracy zależną od sił kontaktowych  $G^{c}[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}]$ ,

$$G^{c}[\mathbf{u};\delta\mathbf{u}] = -\sum_{i=1}^{2} \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{t}^{i} \cdot \delta\mathbf{u}^{i} \,\mathrm{d}S \tag{4.14}$$

otrzymujemy podział zagadnienia kontaktowego na część związaną z ciałami i warunkami brzegowymi i część wynikającą z kontaktu pomiędzy nimi. Z tego wynika, że równania konstytutywne rządzące ciałami są niezależne od zagadnienia kontaktu, np. ciała mogą być sprężyste, sprężystoplastyczne, co nie wpływa bezpośrednio na samo zagadnienie kontaktu pomiędzy ciałami.

Pamiętając, że  $\Gamma_c^1 = \Gamma_c^2 = \Gamma_c$  oraz, że  $\mathbf{t}^2 = -\mathbf{t}^1 = \mathbf{t}$  możemy przekształcić funkcjonał  $G^c[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}]$ do następującej postaci

$$G^{c}[\mathbf{u};\delta\mathbf{u}] = -\sum_{i=1}^{2} \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{t}^{i} \cdot \delta\mathbf{u}^{i} \, \mathrm{d}S = \int_{\Gamma_{c}} \mathbf{t} \cdot (\delta\mathbf{u}^{1} - \delta\mathbf{u}^{2}) \, \mathrm{d}S = \int_{\Gamma_{c}} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{d} \, \mathrm{d}S \,. \tag{4.15}$$

Wygodnie jest przedstawić funkcjonał  $G^{c}[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}]$  przy pomocy wariacji wielkości kinematycznych  $g_{n}$  i  $\mathbf{g}_{t}$  występujących w ograniczeniach kontaktowych. W przypadku małych odkształceń, gdy normalna **n** jest wyznaczona przez początkową geometrię nie trzeba stosować żadnych założeń i uproszczeń

$$g_{n} = g_{0} + (\mathbf{u}^{1} - \mathbf{u}^{2}) \cdot \mathbf{n} \quad \rightarrow \quad \delta g_{n} = (\delta \mathbf{u}^{1} - \delta \mathbf{u}^{2}) \cdot \mathbf{n},$$
  

$$\mathbf{g}_{t} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})(\mathbf{u}^{1} - \mathbf{u}^{2}) \quad \rightarrow \quad \delta \mathbf{g}_{t} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})(\delta \mathbf{u}^{1} - \delta \mathbf{u}^{2}).$$
(4.16)

Ostatecznie funkcjonał  $G^{c}[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}]$  przedstawiający wkład kontaktu do funkcjonału prac wirtualnych ma następującą postać

$$G^{c}[\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}] = \int_{\Gamma_{c}} (t_{n} \delta g_{n} + \mathbf{t}_{t} \cdot \delta \mathbf{g}_{t}) \,\mathrm{d}S, \qquad (4.17)$$

a zasada prac wirtualnych przyjmuje następującą postać

$$G[\mathbf{u};\delta\mathbf{u}] = G^{1}[\mathbf{u}^{1};\delta\mathbf{u}^{1}] + G^{2}[\mathbf{u}^{2};\delta\mathbf{u}^{2}] + G^{c}[\mathbf{u};\delta\mathbf{u}] = 0 \quad \forall \delta\mathbf{u}.$$
(4.18)

#### 4.1.2 Skończone deformacje

W zakresie skończonych deformacji, interpretacja poszczególnych wielkości występujących w zagadnieniu kontaktowym jest bardziej intuicyjna, ponieważ opis kinematyki jest zgodny z obserwacjami. Wraz z dokładniejszym opisem kinematyki zwiększa się stopień skomplikowania równań i przyjęcia pewnych założeń upraszczających. Weźmy dwa ciała  $\mathcal{B}^i$ , które w konfiguracji początkowej zajmują obszary  $\Omega^i$  z warunkami brzegowymi przemieszczeniowymi na częściach brzegu  $\Gamma_u^i$  oraz naprężeniowymi na częściach brzegu  $\Gamma_t^i$ , por. rys. 4.2. W wyniku deformacji opisanej w każdym punkcie  $\mathbf{X}^i$  funkcjami  $\boldsymbol{\varphi}^i(\mathbf{X}^i, t)$ ciała w konfiguracji aktualnej zajmują obszary  $\omega^i$  z brzegami  $\gamma^i$ ,

$$\mathbf{x}^{i} = \varphi^{i}(\mathbf{X}^{i}, t) \qquad \mathbf{X}^{i} \in \Omega^{i}, \quad \mathbf{x}^{i} \in \omega^{i}.$$
(4.19)

Załóżmy, że w konfiguracji aktualnej na częściach brzegu  $\gamma_c^1$  i  $\gamma_c^2$  może dojść do kontaktu pomiędzy ciałami  $\mathcal{B}^i$ . W przeciwieństwie do małych odkształceń, nie utożsamia się  $\gamma_c^1$  z  $\gamma_c^2$ . Następnie należy uporządkować ciała, dzieląc je na ciało *master* (cel) oraz *slave* (kontaktujące się). Przyporządkowanie roli *master* i *slave* jest dowolne, ale nie jest przemienne (brak symetrii).



Rysunek 4.2: Schemat zagadnienia kontaktowego w zakresie skończonych deformacji.

Po ustaleniu, które z ciał wyróżniamy jako *master*, a które jako *slave*, parametryzujemy powierzchnię ciała *master* za pomocą współrzędnych konwekcyjnych  $\zeta = {\zeta^1, \zeta^2}$ . Załóżmy, że ciało  $\mathcal{B}^2$  będzie odgrywać rolę *master*, wtedy jego powierzchnię parametryzujemy następująco

$$\mathbf{X}^2 = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\zeta}), \quad \mathbf{x}^2 = \boldsymbol{\varphi}^2(\mathbf{X}^2, t) = \boldsymbol{\varphi}^2(\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\zeta}), t) = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\zeta}, t) = \hat{\mathbf{x}}^2(\boldsymbol{\zeta}). \tag{4.20}$$

Dla każdego punktu  $\mathbf{x}^1 \in \gamma_c^1$  szukamy współrzędnych konwekcyjnych  $\overline{\zeta}$  rzutu punktu  $\mathbf{x}^1$  na powierzchnię  $\gamma_c^2$ 

$$\bar{\boldsymbol{\zeta}} = \arg\min\left\|\mathbf{x}^1 - \hat{\mathbf{x}}^2(\boldsymbol{\zeta})\right\|, \qquad \bar{\mathbf{x}}^2 = \hat{\mathbf{x}}^2(\bar{\boldsymbol{\zeta}}). \tag{4.21}$$

Zagadnienie jednoznaczności rzutowania nie jest przedmiotem niniejszej rozprawy. Rozpatrywane w tej pracy przypadki dotyczą kontaktu ciała odkształcalnego z wypukłymi ciałami sztywnymi, por. rozdział 6 i 7.

Rezultatem rzutowania oprócz wyznaczenia współrzędnych konwekcyjnych  $\bar{\zeta}$  jest wyznaczenie normalnej  $\mathbf{n}^2(\zeta) = \bar{\mathbf{n}}$  oraz prostopadłych do niej wektorów stycznych  $\bar{\tau}_{\alpha} = \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}^2}{\partial \zeta^{\alpha}}$ , gdzie  $\alpha = 1, 2$ , por. rys. 4.3. Wektory  $\bar{\tau}_{\alpha}$  pełnią rolę wektorów bazowych lokalnej bazy na powierzchni ciała  $\mathcal{B}^2$ 



**Rysunek 4.3:** Rzutowanie punktu  $\mathbf{x}^1$  na powierzchnię *master*.

w konfiguracji aktualnej. Wielkości kinematyczne występujące w ograniczeniach kontaktowych to separacja  $g_n$  oraz wektor prędkości poślizgu  $\dot{\mathbf{g}}_t$ , które wyznaczamy z następujących zależności

$$g_{\mathbf{n}} = (\mathbf{x}^1 - \bar{\mathbf{x}}^2) \cdot \bar{\mathbf{n}}, \qquad \dot{\mathbf{g}}_{\mathbf{t}} = \dot{\zeta}^{\alpha} \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha}.$$
 (4.22)

Gdy ciała są w kontakcie w danym punkcie ( $g_n = 0$ ), wtedy prędkość współrzędnych konwekcyjnych ma postać

$$\dot{\zeta}^{\alpha} = \left[ \mathbf{v}^{1}(\mathbf{X}^{1}) - \mathbf{v}^{2}(\hat{\mathbf{X}}^{2}(\mathbf{X}^{1})) \right] \cdot \bar{\tau}^{\alpha}, \qquad \text{gdzie } \bar{\tau}^{\alpha} \cdot \bar{\tau}_{\beta} = \delta^{\alpha}_{\beta}.$$
(4.23)

Oprócz wielkości kinematycznych  $g_n$  i  $\dot{\mathbf{g}}_t$  do sformułowania ograniczeń kontaktowych, potrzebny jest wektor naprężenia kontaktowego. W skończonych deformacjach, gdzie rozróżniamy konfiguracje, dwoma najpopularniejszymi sformułowaniami są: sformułowanie posługujące się tensorem naprężenia Cauchy'ego  $\sigma$ , zdefiniowanym w konfiguracji aktualnej,

$$\mathbf{t}^i = \boldsymbol{\sigma}^i \mathbf{n}^i \tag{4.24}$$

oraz sformułowanie wykorzystujące I-szy tensor naprężenia Pioli-Kirchhoffa **P**, który jest tensorem dwupunktowym łączącym aktualną siłę z początkową geometrią,

$$\mathbf{T}^i = \mathbf{P}^i \mathbf{N}^i. \tag{4.25}$$

Zależność łączącą wektor naprężenia  $\mathbf{t}^i$  z wektorem naprężenia  $\mathbf{T}^i$  opisuje równanie Nansona

$$\mathbf{T}^i = j^i \mathbf{t}^i, \tag{4.26}$$

gdzie  $j = ds/dS = (\det \mathbf{F}) \|\mathbf{F}^{-T}\mathbf{N}\|$ , a **F** oznacza gradient deformacji. Z warunków równowagi otrzymujemy, że  $\mathbf{t}^2 ds^2 = -\mathbf{t}^1 ds^1$ , a w konsekwencji  $\mathbf{t}^2 \approx -\mathbf{t}^1$ . Podobnie jak w małych odkształceniach wyróżniamy jedno z naprężeń kontaktowych  $\mathbf{t} = -\mathbf{t}^1 \approx \mathbf{t}^2$  i dzielimy na składową normalną i wektor styczny

$$\mathbf{t} = t_{\mathrm{n}}\bar{\mathbf{n}} + \mathbf{t}_{\mathrm{t}}.\tag{4.27}$$

Analogicznie można postąpić z nominalnym naprężeniem kontaktowym

$$\mathbf{T} = j^{1}\mathbf{t}, \quad \mathbf{T} = T_{n}\bar{\mathbf{n}} + \mathbf{T}_{t}, \quad T_{n} = j^{1}t_{n}, \quad \mathbf{T}_{t} = j^{1}t_{t}.$$
(4.28)

Wektor naprężenia stycznego rozkładamy w lokalnej bazie  $\bar{\tau}^{\alpha}$ 

$$t_{t\alpha} = \mathbf{t} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha}, \qquad \mathbf{t}_{t} = t_{t\alpha} \bar{\boldsymbol{\tau}}^{\alpha}. \tag{4.29}$$

Ograniczenia kontaktowe sformułowane w konfiguracji aktualnej, przybierają następującą postać

$$g_{n} \geq 0, \quad t_{n} \leq 0, \quad g_{n}t_{n} = 0,$$

$$\Phi = \|\mathbf{t}_{t}\| + \mu t_{n} \leq 0, \quad \|\dot{\mathbf{g}}_{t}\|\mathbf{t}_{t} = \dot{\mathbf{g}}_{t}\|\mathbf{t}_{t}\|, \quad \Phi \|\dot{\mathbf{g}}_{t}\| = 0.$$
(4.30)

Analogicznie warunki kontaktowe mogą być wyrażone przez wielkości nominalne

$$g_{n} \geq 0, \quad T_{n} \leq 0, \quad g_{n}T_{n} = 0,$$

$$\Phi = \|\mathbf{T}_{t}\| + \mu T_{n} \leq 0, \quad \|\dot{\mathbf{g}}_{t}\|\mathbf{T}_{t} = \dot{\mathbf{g}}_{t}\|\mathbf{T}_{t}\|, \quad \Phi \|\dot{\mathbf{g}}_{t}\| = 0.$$
(4.31)

Poniżej zostanie przedstawione sformułowanie zagadnienia brzegowego kontaktowego w postaci słabej przy wykorzystaniu wielkości nominalnych. Zasada wirtualna zapisana dla każdego z ciał ma postać

$$\int_{\Omega^{i}} \mathbf{P}^{i} \cdot \operatorname{Grad}\delta\boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d}V - \int_{\Gamma_{t}^{i}} \mathbf{T}^{*i} \cdot \delta\boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d}S - \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{T}^{*i} \cdot \delta\boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d}S = 0 \quad \forall \delta\boldsymbol{\varphi}^{i}, \tag{4.32}$$

gdzie  $\delta \varphi^i$  jest wirtualnym przemieszczeniem takim, że  $\delta \varphi^i = \mathbf{0}$  na części brzegu  $\Gamma_{\mathbf{u}}^i$ .

Funkcjonał pracy wirtualnej dla układu dwóch ciał w kontakcie

$$G[\boldsymbol{\varphi}; \delta \boldsymbol{\varphi}] = \sum_{i=1}^{2} \left( \int_{\Omega^{i}} \mathbf{P}^{i} \cdot \operatorname{Grad} \delta \boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d} V - \int_{\Gamma_{t}^{i}} \mathbf{T}^{*i} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d} S - \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{T}^{i} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d} S \right) = 0 \quad \forall \delta \boldsymbol{\varphi}, \quad (4.33)$$

gdzie  $\varphi = \{\varphi^1, \varphi^2\}, \ \delta \varphi = \{\delta \varphi^1, \delta \varphi^2\}$ . Tak jak w przypadku małych odkształceń, funkcjonał pracy wirtualnej można podzielić na części zależne od pracy sił wewnętrznych i zewnętrznych niezależnych od kontaktu oraz na część zależną od sił kontaktowych działających na brzegach  $\Gamma_c^i$ ,

$$G^{c}[\boldsymbol{\varphi};\delta\boldsymbol{\varphi}] = -\sum_{i=1}^{2} \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{T}^{i} \cdot \delta\boldsymbol{\varphi}^{i} \,\mathrm{d}S \quad \forall \delta\boldsymbol{\varphi}.$$

$$(4.34)$$

Ponownie odwołując się do zasady równości reakcji działających na oba ciała wiadomo, że ( $\mathbf{t}^2 ds^2 = -\mathbf{t}^1 ds^1$ ), a stąd część funkcjonału pracy wirtualnej dotyczącej sił kontaktowych można zapisać jako

$$G^{c}[\boldsymbol{\varphi};\delta\boldsymbol{\varphi}] = -\sum_{i=1}^{2} \int_{\Gamma_{c}^{i}} \mathbf{T}^{i} \cdot \delta\boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d}S = -\sum_{i=1}^{2} \int_{\gamma_{c}^{i}} \mathbf{t}^{i} \cdot \delta\boldsymbol{\varphi}^{i} \, \mathrm{d}s$$

$$= -\int_{\gamma_{c}^{1}} \mathbf{t}^{1} \cdot (\delta\boldsymbol{\varphi}^{1} - \delta\bar{\boldsymbol{\varphi}}^{2}) \, \mathrm{d}s = \int_{\Gamma_{c}^{1}} \mathbf{T} \cdot (\delta\boldsymbol{\varphi}^{1} - \delta\bar{\boldsymbol{\varphi}}^{2}) \, \mathrm{d}S \quad \forall \delta\boldsymbol{\varphi},$$
(4.35)

gdzie  $\mathbf{T} dS = -\mathbf{T}^1 dS$ .

W celu implementacji w metodzie elementów skończonych, bardziej przydatne będzie wyrażenie funkcjonału  $G^c[\varphi; \delta \varphi]$  poprzez wielkości występujące w ograniczeniach kontaktowych. Wariacje  $\delta g_n$  i  $\delta \mathbf{g}_t$  w przypadku, gdy  $g_n = 0$  [82] mają postać

$$\delta g_{n} = (\delta \boldsymbol{\varphi}^{1} - \delta \bar{\boldsymbol{\varphi}}^{2}) \cdot \bar{\mathbf{n}}, \quad \delta \bar{\zeta}^{\alpha} = (\delta \boldsymbol{\varphi}^{1} - \delta \bar{\boldsymbol{\varphi}}^{2}) \cdot \bar{\tau}^{\alpha}, \quad \delta \mathbf{g}_{t} = \delta \bar{\zeta}^{\alpha} \bar{\tau}_{\alpha}. \tag{4.36}$$

Uwzględniając powyższe wariacje funkcjonał  $G^c(\boldsymbol{\varphi}, \delta \boldsymbol{\varphi})$  przyjmuje postać

$$G^{c}[\boldsymbol{\varphi};\delta\boldsymbol{\varphi}] = \int_{\Gamma_{c}^{1}} \left( T_{n}\delta g_{n} + T_{t\alpha}\delta\bar{\zeta}^{\alpha} \right) dS = \int_{\Gamma_{c}^{1}} \left( T_{n}\delta g_{n} + \mathbf{T}_{t}\cdot\delta\mathbf{g}_{t} \right) dS \quad \forall \delta\boldsymbol{\varphi}, \tag{4.37}$$

która jest punktem wyjścia do zarówno regularyzacji ograniczeń kontaktowych jak i do implementacji w metodzie elementów skończonych.

#### 4.1.3 Zagadnienie kontaktowe jako zadanie minimalizacji z ograniczeniami

Rozważmy kontakt ciała sztywnego z ciałem sprężystym, dla którego istnieje funkcjonał energii potencjalnej

$$\Pi[\boldsymbol{\varphi}] = \int_{\Omega} W(\nabla \boldsymbol{\varphi}) \, \mathrm{d}V - \int_{\Gamma_t} \mathbf{T}^* \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}S, \qquad (4.38)$$

gdzie  $W(\nabla \varphi)$  oznacza funkcję gęstości energii odkształceń sprężystych. Zagadnienie kontaktowe bez tarcia może być sformułowane jako zagadnienie minimalizacji z ograniczeniami

$$\min_{\boldsymbol{\varphi}} \Pi[\boldsymbol{\varphi}] \quad \text{z ograniczeniem} \quad g_n \ge 0 \quad \text{na brzegu} \quad \Gamma_c. \tag{4.39}$$

Wprowadźmy lagranżjan,

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{\varphi},\lambda_{n}] = \Pi[\boldsymbol{\varphi}] + \int_{\Gamma_{c}} \lambda_{n} g_{n} \, \mathrm{d}S, \qquad (4.40)$$

gdzie  $\lambda_n$  jest mnożnikiem Lagrange'a. Warunek stacjonarności lagranżjanu względem wariacji pola  $\varphi$  ma następującą postać,

$$\delta_{\varphi} \mathcal{L} = \int_{\Gamma} \mathbf{P} \cdot \nabla \delta \varphi \, \mathrm{d}V - \int_{\Gamma_t} \mathbf{T}^* \cdot \delta \varphi \, \mathrm{d}S + \int_{\Gamma_c} \lambda_n \delta g_n \, \mathrm{d}S = 0 \qquad \forall \delta \varphi, \tag{4.41}$$

gdzie  $\mathbf{P} = \partial W / \partial \mathbf{F}$ . Równanie (4.41) przedstawia zasadę prac wirtualnych ze znanymi z teorii optymalizacji warunkami Karusha-Kuhna-Tuckera [107] nałożonymi na separację  $g_n$  i mnożnik Lagrange'a  $\lambda_n$ 

$$g_{\rm n} \ge 0, \qquad \lambda_{\rm n} \le 0 \quad \text{oraz} \quad g_{\rm n}\lambda_{\rm n} = 0, \tag{4.42}$$

które znane są jako warunki jednostronnego kontaktu Signoriniego [152].

#### 4.2 Implementacja numeryczna

Opis implementacji numerycznej zagadnienia kontaktowego ograniczono do szczególnego przypadku kontaktu ciała odkształcalnego z ciałem sztywnym w sformułowaniu *node-to-segment* w podrozdziale 4.2.2 oraz *mortar* w podrozdziale 4.2.3, ponieważ tylko takie przypadki były analizowane w niniejszej rozprawie. Ogólna implementacja zagadnienia kontaktowego jest złożonym zadaniem, które wymaga włożenia wiele wysiłku w celu rozwiązania problemów takich jak, np. w przypadku *node-to-segment*: poszukiwanie par kontaktowych, niejednoznaczność rzutowania, niejednoznaczność normalnej w węźle, brak ciągłości rzutowania przy dyskretyzacji powierzchni zakrzywionej, penetracja węzłów w przypadku zbliżania się do brzegu ciała.

W następnym podrozdziale zostanie opisany sposób regularyzacji warunków kontaktowych zastosowany w niniejszej rozprawie. Wybrano metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a [2, 120] z uwagi na dokładne spełnienie warunków kontaktowych oraz możliwość wykorzystania globalnego schematu rozwiązywania równań nieliniowych Newtona, co skutkuje bardzo dobrą zbieżnością [85].

#### 4.2.1 Metoda rozszerzonych mnożników Lagrange'a

W niniejszej rozprawie do wymuszenia ograniczeń (4.42) w obliczeniach MES przyjęto metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a [2, 120]. Zagadnienie minimalizacji z ograniczeniami (4.39) zostaje zastąpione przez lagranżjan

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{\varphi},\lambda_{n}] = \Pi[\boldsymbol{\varphi}] + \int_{\Gamma_{c}} l_{n}(g_{n},\lambda_{n}) \,\mathrm{d}S\,, \qquad (4.43)$$

gdzie

$$l_{n}(g_{n},\lambda_{n}) = \begin{cases} (\lambda_{n} + \frac{\rho}{2}g_{n})g_{n} & \text{gdy } \hat{\lambda}_{n} \leq 0 \text{ (kontakt),} \\ -\frac{1}{2\rho}\lambda_{n}^{2} & \text{w przeciwnym przypadku (separacja).} \end{cases}$$
(4.44)

W powyższym równaniu  $\hat{\lambda}_n = \lambda_n + \rho g_n$  jest rozszerzonym mnożnikiem Lagrange'a, a  $\rho$  jest parametrem regularyzującym, którego wielkość nie wpływa na samo rozwiązanie, tylko na promień zbieżności całego zadania. W ten sposób zagadnienie minimalizacji z ograniczeniami (4.39) zostało zamienione na poszukiwanie punktu siodłowego bez ograniczeń

$$\min_{\boldsymbol{\varphi}} \max_{\lambda_n} \mathcal{L}[\boldsymbol{\varphi}, \lambda_n]. \tag{4.45}$$

Warunek stacjonarności funkcjonału (4.43) ma postać

$$\delta \mathcal{L} = \delta \Pi[\boldsymbol{\varphi}] + \int_{\Gamma_c} \left( \hat{\lambda}_n^{eff} \delta g_n + C_n \delta \lambda_n \right) dS = 0 \quad \forall \delta \boldsymbol{\varphi}, \delta \lambda_n$$
(4.46)

gdzie

$$\hat{\lambda}_{n}^{eff} = \frac{\partial l_{n}}{\partial g_{n}} = \begin{cases} \hat{\lambda}_{n} & \hat{\lambda}_{n} \leq 0, \\ 0 & \hat{\lambda}_{n} > 0, \end{cases} \quad C_{n} = \frac{\partial l_{n}}{\partial \lambda_{n}} = \begin{cases} g_{n} & \hat{\lambda}_{n} \leq 0, \\ -\frac{\lambda_{n}}{\rho} & \hat{\lambda}_{n} > 0. \end{cases}$$
(4.47)

Porównując (4.46) z (4.37) można zauważyć, że mnożnik  $\lambda_n$  pełni funkcję ciśnienia kontaktowego. Z tego wynika, że pierwszy człon pod całką w równaniu (4.46) wyraża pracę sił kontaktowych, a drugi odpowiada za spełnienie ograniczeń kontaktowych. Gdy ciała znajdują się w kontakcie  $\lambda_n$ , interpretowane jako ciśnienie kontaktowe, wykonuje pracę na wariacji separacji  $\delta g_n$ , a sama  $g_n$  musi być wyzerowana na mocy równania  $C_n \delta \lambda_n$ . Natomiast w przypadku separacji, to właśnie wyzerowanie ciśnienia kontaktowego jest wymuszane mnożnikami Lagrange'a, które nie wykonują żadnej pracy na wariacji separacji  $\delta g_n$ . Dzięki temu, że Lagrangian  $\mathcal{L}(\varphi, \lambda_n)$  posiada ciągłą pochodną, czyli jest klasy  $C^1$ , możliwe jest zastosowanie metody Newtona do jednoczesnego rozwiązania równań równowagi oraz wymuszenia ograniczeń kontaktowych w monolitycznym schemacie numerycznym.

W metodzie elementów skończonych oprócz interpolacji dyskretnych zmiennych potrzebnych do rozwiązania równań równowagi rozpatrywanego ciała, np. przemieszczeń, interpolowane są również mnożniki Lagrange'a, co zwiększa liczbę niewiadomych w globalnym układzie równań. Funkcje kształtu przyjęte do interpolacji mnożników Lagrange'a zależą od zastosowanego podejścia. W tej pracy zastosowano interpolację mnożników Lagrange'a zarówno takimi samymi funkcjami kształtu jak przemieszczenia w przypadku sformułowania *node-to-segment* jak i funkcjami dualnymi w przypadku sformułowania *mortar*.

#### 4.2.2 Sformułowanie node-to-segment

Sformułowanie *node-to-segment* jest jednym z najbardziej popularnych sformułowań dostępnych w komercyjnych programach metody elementów skończonych. Główna idea tej metody polega na wyróżnieniu jednego z ciał jako *master* (cel) oraz drugiego jako *slave* (kontaktujące się). W ogólności wybór ten nie jest przemienny. Po dyskretyzacji węzły na powierzchni ciała *slave* są rzutowane na segmenty utworzone na powierzchni ciała *master*. Po rozwiązaniu, często nietrywialnego, zadania rzutowania węzłów na segmenty, wyznaczane są zmienne kinematyczne występujące w zagadnieniu kontaktowym  $g_n$ ,  $\Delta \mathbf{g}_t \approx \mathbf{g}_t$ . Po zastosowaniu jednej z dostępnych metod regularyzacji warunków kontaktowych, znajdywane jest rozwiązanie.

Ważną cechą odróżniającą sformułowanie *node-to-segment* od sformułowania typu *mortar*, opisanego w podrozdziale 4.2.3, jest to, że możliwe jest zastosowanie standardowego podejścia budowania globalnej macierzy sztywności element po elemencie. W przypadku sformułowania typu *mortar* konieczne jest uwzględnienie informacji z sąsiadujących elementów skończonych w celu wyznaczenia wielkości kinematycznych występujących w warunkach kontaktowych. Szczegółowy opis tej procedury zamieszczono w podrozdziale 4.2.3.

W niniejszej rozprawie analizowano kontakt ciał odkształcalnych z ciałem sztywnym w 2D. Ciało sztywne, które przyjmowano jako *master* ( $\mathcal{B}^2$ ), było zawsze zadane wypukłą funkcją analityczną: walcem lub klinem z walcowym wyokrągleniem w wierzchołku. Dzięki temu wyeliminowano możliwe problemy z niejednoznacznością rzutowania węzłów na powierzchnię *master*. Z uwagi na postać analityczną powierzchni rzutowanie było jednoznaczne oraz miało dobrze określoną normalną  $\mathbf{n} = \bar{\mathbf{n}}^2$ . W przypadku małych odkształceń analizowanym w rozdziale 6 przyjmowano normalną jako  $\bar{\mathbf{n}} = -\mathbf{n}^1$ .

W metodzie elementów skończonych ciało deformowalne dzieli się na podobszary zwane elementami skończonymi, a w obrębie każdego z elementów skończonych poszukiwane funkcje, np. przemieszczenie, przybliża się za pomocą funkcji kształtu. Wybrane punkty ciała, w których wyznacza się wartości poszukiwanych funkcji określa się mianem węzłów. Zarazem wartości w węzłach stanowią punkty interpolacji przez funkcje kształtu w obrębie każdego z elementów skończonych. To podejście jest również aktualne na brzegu ciała, który może kontaktować się z drugim ciałem, w tym z ciałem sztywnym.

Poszukiwane przemieszczenie w obrębie danego elementu skończonego  $\mathbf{u}_e$  na brzegu  $\Gamma_c$  ma postać

$$\mathbf{u}_{e} \approx \mathbf{u}_{e}^{h}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} N_{\alpha}(\boldsymbol{\xi}) \, \mathbf{u}_{\alpha}, \tag{4.48}$$

gdzie  $\mathbf{u}_{e}^{h}(\boldsymbol{\xi})$  jest przybliżeniem funkcji  $\mathbf{u}_{e}$  w obrębie elementu skończonego,  $\boldsymbol{\xi}$  są bezwymiarowymi współrzędnymi lokalnymi zdefiniowanymi na referencyjnym elemencie skończonym o idealnym kształcie: w 2D odcinek ( $\boldsymbol{\xi} \in [-1, 1]$ ), w 3D kwadrat ( $\boldsymbol{\xi} \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ );  $\alpha$  jest indeksem węzła w obrębie danego elementu skończonego,  $N_{\alpha}(\boldsymbol{\xi})$  są funkcjami kształtu interpolującymi wartości węzłowe  $\mathbf{u}_{\alpha}$ ,  $n_{\alpha}$  oznacza liczbę węzłów w elemencie skończonym. W elementach izoparametrycznych, współrzędne położenia  $\mathbf{X}$  są również interpolowane funkcjami kształtu. Najczęściej takimi samymi jak poszukiwane niewiadome, np. przemieszczenie,

$$\mathbf{X}_{e} \approx \mathbf{X}_{e}^{h}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} N_{\alpha}(\boldsymbol{\xi}) \, \mathbf{X}_{\alpha}, \tag{4.49}$$

gdzie  $\mathbf{X}_{\alpha}$  są współrzędnymi węzłów. Całkowanie numeryczne odbywa się za pomocą kwadratury Gaussa lub Lobatto, ponieważ wagi oraz współrzędne, w których wyznacza się wartości całkowanych funkcji, łatwiej wyznacza się we współrzędnych bezwymiarowych. Zmiana zmiennej całkowania wymaga znajomości zależności pomiędzy d**X** i d $\boldsymbol{\xi}$ , która w rozważanym przypadku kontaktu w 2D ma postać

$$dX = \frac{d\mathbf{X}_{e}^{h}(\xi)}{d\xi} d\xi = \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} \frac{dN_{\alpha}(\xi)}{d\xi} \mathbf{X}_{\alpha} d\xi .$$
(4.50)

Załóżmy dla uproszczenia rozważań, że brzeg jest prostoliniowy, a węzły są rozłożone równomiernie, wtedy niezależnie od stopnia interpolacji zależność dX od d $\xi$  ma jawną postać

$$\mathrm{d}X = \frac{h^e}{2} \,\mathrm{d}\xi\,,\tag{4.51}$$

gdzie  $h^e$  stanowi rozmiar (długość) elementu skończonego kontaktowego.

W zagadnieniu kontaktowym, w którym zastosowano metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a, interpolacji podlegają również mnożniki Lagrange'a  $\lambda_n$ ,

$$\lambda_{\mathbf{n},e} \approx \lambda_{\mathbf{n},e}^{h}(\xi) = \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} M_{\alpha}(\xi) \lambda_{\mathbf{n},\alpha}.$$
(4.52)

W ogólności funkcje interpolujące  $M_{\alpha}(\xi)$  nie muszą być takie same jak funkcje interpolujące przemieszczenia i współrzędne  $N_{\alpha}(\xi)$ . W sformułowaniu *node-to-segment* najczęściej  $M_{\alpha}(\xi) = N_{\alpha}(\xi)$ . Taką interpolację zastosowano w niniejszej rozprawie przy stosowaniu sformułowania *node-to-segment* w rozdziałe 6. W sformułowaniu mortar zastosowano dualne funkcje kształtu  $\Phi_{\alpha}(\xi)$ , por. podrozdział 4.2.3.

Istotną cechą sformułowania *node-to-segment* jest to, że wszystkie zmienne występujące w ograniczeniach kontaktowych ( $g_n \ge 0, T_n \le 0$  i  $g_n T_n = 0$ ) wyznaczane są w danym węźle na powierzchni *slave* dzięki zastosowaniu całkowania numerycznego w schemacie Lobatto. W szczególności w sformułowaniu wykorzystującym rozszerzone mnożniki Lagrange'a, to czy ciała w danym węźle są w kontakcie czy nie, zależy tylko od wartości  $\hat{\lambda}_{n,\alpha}$  wyznaczonej w danym węźle  $\alpha$ . W rozważanym przypadku kontaktu ciała odkształcalnego z ciałem sztywnym wartość rozszerzonego mnożnika w węźle  $\alpha$  wynosi

$$\hat{\lambda}_{\mathbf{n},\alpha} = \lambda_{\mathbf{n},\alpha} + \rho \, g_{\mathbf{n},\alpha} \tag{4.53}$$

gdzie  $\bar{\mathbf{n}}_{\alpha}$  jest normalną wyznaczoną w węźle. Jeżeli w poprzednim kroku dany węzeł  $\alpha$  był w separacji ( $g_{n,\alpha} > 0$ ), to mnożnik  $\lambda_{n,\alpha} = 0$  i wartość rozszerzonego mnożnika w pierwszej iteracji zależy tylko i wyłącznie od  $\rho g_{n,\alpha}$ .

Z uwagi na zastosowanie kwadratury Lobatto oraz klasycznych funkcji kształtu do interpolacji pozycji  $\mathbf{X}^h$ , przemieszczenia  $\mathbf{u}^h$  oraz mnożników Lagrange'a  $\lambda_n^h$ , które przyjmują wartość 1 w węźle  $\alpha$  i wartość 0 w węzłach  $\beta \neq \alpha$ , praca wirtualna  $G^c$  ma postać

$$G^{c} = \sum_{e=1}^{n_{e}} \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} \frac{h^{e}}{2} \left( \lambda_{n,\alpha}^{eff} \delta g_{n,\alpha} + C_{n,\alpha} \delta \lambda_{n,\alpha} \right), \tag{4.54}$$

gdzie  $n_e$  oznacza liczbę elementów kontaktowych na brzegu  $\Gamma_c$ ,  $\alpha$  numer węzła w obrębie elementu kontaktowego,  $n_{\alpha}$  liczbę węzłów w elemencie skończonym, a  $\lambda_{n,\alpha}^{eff}$  i  $C_{n,\alpha}$  są węzłowymi odpowiednikami (4.47)

$$\hat{\lambda}_{n,\alpha}^{eff} = \begin{cases} \hat{\lambda}_{n,\alpha} & \hat{\lambda}_{n,\alpha} \le 0, \\ 0 & \hat{\lambda}_{n,\alpha} > 0, \end{cases} \qquad C_{n,\alpha} = \begin{cases} g_{n,\alpha} & \hat{\lambda}_{n,\alpha} \le 0, \\ -\frac{\lambda_{n,\alpha}}{\rho} & \hat{\lambda}_{n,\alpha} > 0. \end{cases}$$
(4.55)

#### 4.2.3 Sformułowanie typu *mortar*

Sformułowanie kontaktowe typu *mortar* wywodzi się z zagadnienia powiązania ze sobą dwóch niedopasowanych siatek elementów skończonych. Jest to sformułowanie mniej popularne niż *node-to-segment*, ponieważ implementacja numeryczna jest zdecydowanie bardziej skomplikowana.

W przypadku kontaktu dwóch ciał w 3D, w celu wyznaczenia pracy wirtualnej  $G^c$  należy dokonać triangulacji obszarów powstałych z przecięcia się dwóch niedopasowanych siatek i stosowania kwadratury Gaussa wysokiego rzędu w celu otrzymania dokładnego wyniku [122].

W niniejszej rozprawie przez sformułowanie typu *mortar* rozumie się szczególny przypadek kontaktu ciała odkształcalnego z ciałem sztywnym w 2D, co eliminuje wyżej wymienione trudności implementacyjne związane z całkowaniem po obszarach powstałych z przecięcia dwóch siatek. Niemniej jednak, korzystne cechy tej metody pozostają w mocy. Przede wszystkim chodzi o wykorzystanie koncepcji ważonej separacji  $\hat{g}_n$ . Jak zostanie pokazane poniżej, wartość  $\hat{g}_n$  jest proporcjonalna do rozmiaru elementu skończonego. Jest to istotna różnica w stosunku do sformułowania *node-to-segment*, gdzie  $g_n$  jest wielkością czysto geometryczną zależną wyłącznie od zmiany wzajemnego położenia dwóch ciał w kontakcie. W obu sformułowaniach, separacja  $g_n$  bądź  $\hat{g}_n$  ma bezpośredni wpływ na zbieżność procedury iteracyjnej. W szczególności, jeżeli ciała modelowane są materiałami wrażliwymi na nagłe zmiany warunków brzegowych, jak analizowany w niniejszej rozprawie model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi. Niewątpliwą zaletą sformułowania *mortar* jest proporcjonalność  $\hat{g}_{n,J}$  do rozmiaru elementów skończonych przyległych do węzła *J*, gdzie *J* oznacza globalną numerację węzła w przeciwieństwie do lokalnej numeracji  $\alpha$ używanej w podrozdziale 4.2.2.

W sformułowaniu *node-to-segment* wektor residuum i macierz styczną buduje się element po elemencie. Jest to możliwe, ponieważ warunki kontaktowe (4.47) sprawdza się w punktach całkowania (w węzłach przy zastosowaniu kwadratury Lobatto). W przypadku sformułowania *mortar* takie podejście jest niemożliwe. Wynika to ze sprawdzania warunków kontaktowych nie na wartościach lokalnych  $g_n$ , ale z wykorzystaniem separacji ważonej  $\hat{g}_n$  wyznaczonej jako

$$\hat{g}_{n,J} = \int_{\Gamma^h_{c,J}} \hat{\Phi}_J(\hat{\xi}) g_n(\hat{\xi}) \frac{\mathrm{d}\mathbf{X}(\hat{\xi})}{\mathrm{d}\hat{\xi}} \,\mathrm{d}\hat{\xi} \tag{4.56}$$

gdzie  $\Gamma_{c,J}^h$  oznacza zdyskretyzowany brzeg ciała *slave* przyległy do węzła *J*,  $g_n$  została zdefiniowana w równaniu (4.22),  $\hat{\Phi}_J$  oznacza globalną dualną funkcję kształtu związaną z mnożnikiem  $\lambda_{n,J}$ , a  $\hat{\xi}$  globalną parametryzację brzegu  $\Gamma_c$ , por. rys. 4.4. Z uwagi na to, że  $\hat{g}_{n,J}$  jest wynikiem całkowania po elementach przyległych do węzła *J* oraz, że to  $\hat{g}_{n,J}$  występuje w warunkach kontaktowych, nie jest możliwe budowanie wektora residuum oraz macierzy stycznej w standardowy sposób, tj. element po elemencie jak to ma miejsce w metodzie *node-to-segment*. W niniejszej rozprawie stworzono specjalne elementy kontaktowe w postaci węzłów, które odczytują informacje z przyległych elementów (w przypadku węzłów wspólnych dla dwóch elementów) lub z całego elementu skończonego (w przypadku węzłów pośrednich). Następnie na poziomie danego węzła *J* obliczana jest  $\hat{g}_{n,J}$  według (4.56). Ograniczeniem wynikającym z takiego podejścia jest możliwość stosowania wyłącznie siatek strukturalnych.

Lokalne dualne funkcje kształtu  $\Phi_{\alpha}$  są to specjalnie wyznaczone funkcje, które w obszarze



**Rysunek 4.4:** Globalna funkcja kształtu  $\hat{N}_J$  i globalna dualna funkcja kształtu  $\hat{\Phi}_J$  dla węzła J w przypadku węzła skrajnego (a) i węzła środkowego (b).

(b)

elementu skończonego spełniają warunek biortogonalności [121]

(a)

$$\int_{-1}^{1} \Phi_{\alpha}(\xi) N_{\beta}(\xi) \,\mathrm{d}\xi = \delta_{\alpha\beta} \int_{-1}^{1} N_{\beta}(\xi) \,\mathrm{d}\xi \quad \text{bez sumowania,}$$
(4.57)

gdzie  $N_{\beta}(\xi)$  oznaczono standardowe wielomianowe funkcje kształtu, takie same jak w sformułowaniu *node-to-segment*. Zastosowano standardową notację węzłów: lewy ( $\beta = 1$ ) dla  $\xi = -1$ , prawy ( $\beta = 2$ ) dla  $\xi = 1$  oraz środkowy ( $\beta = 3$ ) dla  $\xi = 0$ . Dla węzłów środkowych globalna funkcja dualna  $\hat{\Phi}_J$  jest równa lokalnej funkcji dualnej  $\Phi_3^{\text{lok}}$ , w przypadku węzłów łączących dwa elementy skończone globalna funkcja dualna jest złożeniem funkcji  $\Phi_1$  i  $\Phi_2$ , por. rys. 4.4. Dzięki powyższemu całkowanie iloczynu globalnych dualnych funkcji kształtu  $\hat{\Phi}_J$  i  $g_n$  daje wynik tylko dla wartości określonych w węźle *J* na mocy (4.57),

$$\int_{\Gamma_c} \hat{\Phi}_J(\hat{\xi}) \cdot \sum_{I=1}^{N_n} g_n\left(\hat{N}_I(\hat{\xi})\right) dx = \int_{\Gamma_c} \hat{\Phi}_J(\hat{\xi}) g_n\left(\hat{N}_J(\hat{\xi})\right) dx \quad \text{bez sumowania}, \tag{4.58}$$

gdzie  $\hat{N}_I$  jest globalną funkcją kształtu dla przemieszczeń określonych w węźle *I*, a  $N_n$  oznacza liczbę węzłów na powierzchni kontaktu *slave*. To sprawia, że dla danego węzła *J* w pracy wirtualnej

 $G^c$  występują wielkości związane tylko z tym węzłem — podobnie jak w sformułowaniu *node-to-segment*. Z tą różnicą, że w sformułowaniu *node-to-segment* wynika to z wyznaczenia wielkości  $\lambda_n$  oraz  $g_n$  w danym węźle (przy zastosowaniu kwadratury Lobatto), a w sformułowaniu *mortar* z zastosowania specjalnych funkcji interpolujących mnożniki Lagrange'a.

W przypadku kontaktu pomiędzy dwoma ciałami odkształcalnymi, funkcje dualne należy konstruować w każdym kroku obliczeniowym w aktualnej konfiguracji [121]. Natomiast w sytuacji kontaktu ciała odkształcalnego z ciałem sztywnym, lokalne funkcje dualne można zdefiniować dla elementu referencyjnego ( $\xi \in [-1,1]$  w 2D). Postać lokalnych funkcji dualnych wyznacza się jako kombinację liniową podstawowych funkcji kształtu użytych do interpolacji przemieszczeń **u** i położenia **X**. Poniżej zestawiono postać zastosowanych w niniejszej rozprawie lokalnych funkcji dualnych do podstawowych kwadratowych funkcji kształtu w trójwęzłowym elemencie kontaktowym,

$$\Phi_{1}(\xi) = \frac{3}{2}N_{1}(\xi) + \frac{1}{2}N_{2}(\xi) - \frac{1}{4}N_{3}(\xi) = \frac{1}{4}\left(5\xi^{2} - 2\xi - 1\right)$$

$$\Phi_{2}(\xi) = \frac{1}{2}N_{1}(\xi) + \frac{3}{2}N_{2}(\xi) - \frac{1}{4}N_{3}(\xi) = \frac{1}{4}\left(5\xi^{2} + 2\xi - 1\right)$$

$$\Phi_{1}(\xi) = -N_{1}(\xi) + -N_{2}(\xi) + \frac{3}{2}N_{3}(\xi) = \frac{1}{2}\left(-5\xi^{2} + 3\right).$$
(4.59)

Wykresy funkcji kształtu dla przemieszczeń oraz lokalnych dualnych funkcji kształtu dla mnożników Lagrange'a przedstawiono na rys. 4.5 odpowiednio liniami ciągłymi i przerywanymi.



**Rysunek 4.5:** Wykres funkcji kształtu  $N_i$  oraz lokalnych dualnych funkcji kształtu  $\Phi_i$  dla elementu kontaktowego trójwęzłowego.

Kolejną różnicą w stosunku do sformułowania *node-to-segment* jest zastosowanie kwadratury Gaussa do całkowania równania (4.56) w obrębie elementów skończonych przyległych do węzła J. Iloczyn podstawowych funkcji kształtu  $N_{\alpha}(\xi)$  oraz dualnych funkcji kształtu  $\Phi_{\beta}(\xi)$  dla elementu trójwęzłowego jest wielomianem czwartego stopnia. Pochodna d**X**/d $\xi$  w najogólniejszym przypadku może być maksymalnie wielomianem pierwszego stopnia. Stąd wynika, że w równaniu (4.56) wyrażenie pod całką jest w obrębie elementu skończonego wielomianem piątego stopnia. Aby otrzymać dokładny wynik całkowania należy zastosować kwadraturę co najmniej trzeciego rzędu. W obliczeniach przedstawionych w rozdziale 7 zastosowano kwadraturę czwartego rzędu do wyznaczenia pracy wirtualnej  $G^c$  oraz macierzy stycznej.

Po wyznaczeniu wielkości kinematycznych występujących w ograniczeniach kontaktowych możliwe jest przejście do metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a. Podobnie jak w przypadku sformułowania *node-to-segment*, o tym czy ciała w danym węźle *J* znajdują się w kontakcie decyduje wartość rozszerzonego mnożnika Lagrange'a

$$\hat{\lambda}_{n,J} = \lambda_{n,J} + \hat{\rho}\,\hat{g}_{n,J},\tag{4.60}$$

z tą różnicą, że w sformułowaniu *mortar* wykorzystuje się będącą wynikiem całkowania wielkość  $\hat{g}_{n,J}$  zamiast wyznaczonej lokalnie  $g_n$ .

Praca wirtualna  $G^c$  jest sumą wielkości wyznaczonych w węzłach  $J = 1, ..., N_n$ ,

$$G^{c} = \sum_{J=1}^{N_{n}} \left( \lambda_{n,J}^{eff} \delta \hat{g}_{n,J} + C_{n,J} \delta \lambda_{n,J} \right), \tag{4.61}$$

gdzie  $\delta \hat{g}_{n,J}$  wyznacza się analogicznie jak  $\hat{g}_{n,J}$  poprzez całkowanie iloczynu dualnej funkcji kształtu i  $\delta g_n(\xi)$ . Efektywny mnożnik  $\lambda_n^{eff}$  oraz funkcja  $C_{n,J}$  mają następującą postać

$$\hat{\lambda}_{n,J}^{eff} = \begin{cases} \hat{\lambda}_{n,J} & \hat{\lambda}_{n,J} \le 0, \\ 0 & \hat{\lambda}_{n,J} > 0, \end{cases} \quad C_{n,J} = \begin{cases} \hat{g}_{n,J} & \hat{\lambda}_{n,J} \le 0, \\ -\frac{\lambda_{n,J}}{\hat{g}_n} & \hat{\lambda}_{n,J} > 0. \end{cases}$$
(4.62)

W sformułowaniu *mortar*, efektywny mnożnik Lagrange'a  $\lambda_{n,J}^{eff}$  jest identyczny jak w sformułowaniu *node-to-segment*. Natomiast parametr regularyzujący  $\hat{\rho}$  jest wyrażony w innych jednostkach niż parametr  $\rho$  występujący w sformułowaniu *node-to-segment*. Występująca w (4.53) wielkość  $g_{n,\alpha}$ jest wyrażona w jednostkach odległości, natomiast będąca wynikiem całkowania wielkość  $\hat{g}_{n,J}$  jest wyrażona w jednostkach powierzchni, por. (4.56). W związku z powyższym, aby jednostki  $\hat{\lambda}_{n,J}$ i  $\lambda_{n,J}$  się zgadzały, por. (4.60), parametr regularyzujący  $\hat{\rho}$  musi być wyrażony w jednostkach SI N/m<sup>4</sup>.

#### Przykład

Rozważmy przykład kontaktu ciała odkształcalnego o płaskiej powierzchni, którego wierzch znajduje się na współrzędnej y = 0, z ciałem sztywnym o powierzchni zadanej funkcją

$$y = f(x) = \frac{x^2}{R}.$$
 (4.63)

Na podstawie rozważań czysto geometrycznych można przyjąć, że dla zadanej szerokości kontaktu a = R/10, powierzchnia ciała odkształcalnego przemieściła się w kierunku ciała sztywnego



**Rysunek 4.6:** Wykres stosunku  $\rho g_n$  oraz  $\hat{\rho} \hat{g}_n$  do naprężenia płynięcia  $\tau_0$  w modelu plastyczności kryształów przy zastosowaniu sformułowania *node-to-segment* oraz *mortar* przy różnej gęstości siatki.

o  $u_{n0} = R/100$ . Przyjmijmy, że brzeg ciała odkształcalnego zdyskretyzowano elementami skończonymi o kwadratowych funkcjach kształtu, a bazowy rozmiar elementu skończonego wynosi  $h_0 = R/360$ . Taka wartość odpowiada w przybliżeniu rozmiarowi elementu skończonego zastosowanego w zagadnieniu wciskania klina w monokryształ niklu, którego szczegółowa analiza została przedstawiona w rozdziale 7.

Na rys. 4.6 przedstawiono przebieg iloczynu  $\rho g_n$  i  $\hat{\rho} \hat{g}_n$  wyznaczonych w węźle o współrzędnej x = a = R/10 znromalizowanych przez naprężenie płynięcia plastycznego w modelu plastyczności kryształów  $\tau_0$  w funkcji przemieszczenia  $u_n$ . Dzięki temu można zaobserwować wpływ zastosowanego sformułowania i rozmiaru elementu skończonego h na wysokość ciśnienia kontaktowego w stosunku do granicy plastyczności w modelu plastyczności kryształów  $\tau_0$ . Przyjęto następujące parametry  $\rho = 10 \text{ GPa}/\mu\text{m}^3$ ,  $\hat{\rho} = 10 \text{ GPa}/\mu\text{m}^4$ ,  $R = 18.5 \,\mu\text{m}$ ,  $\tau_0 = 8 \text{ MPa}$ , które odpowiadają parametrom użytym w zagadnieniu wciskania klina na głębokość 185  $\mu\text{m}$  w rozdziale 7.

Najważniejsza różnica pomiędzy sformułowaniem *node-to-segment* a sformułowaniem *mortar* polega na tym, że w sformułowaniu *mortar*  $\hat{g}_n$  zależy od rozmiaru elementu skończonego. Zagęszczając siatkę elementów skończonych uzyskujemy pozytywny efekt w postaci łagodniejszej zmiany  $\hat{g}_n$  w funkcji przemieszczenia. Jest to korzystny efekt, szczególnie z punktu widzenia rozwiązywania równań metodą iteracyjną Newtona. W danym kroku obliczeniowym, po zadanym przyroście przemieszczenia  $\Delta u_n$ , następuje m.in. aktualizacja aktywnych mnożników Lagrange'a o wartości proporcjonalnej do  $-\rho g_n$  i  $-\hat{\rho}\hat{g}_n$  odpowiednio w sformułowaniu *node-to-segment* i *mortar*. W zagadnieniach takich jak plastyczność kryształów z efektami gradientowymi nagły skok ciśnienia na brzegu ciała może prowadzić do poważnego zaburzenia równowagi i w efekcie do problemów ze zbieżnością. Stąd zastosowanie sformułowania typu *mortar*, w którym przebieg  $\hat{g}_n$  jest bardziej łagodny i skalowalny wraz z zagęszczeniem siatki, jest korzystniejsze, ponieważ pozwala na ograniczenie problemów ze zbieżnością modeli wrażliwych na gwałtowne zmiany naprężenia. Jest to wyraźna przewaga nad sformułowaniem typu *node-to-segment*, w którym wartość  $g_n$  nie zależy od rozmiaru elementu skończonego, a zaktualizowane mnożniki Lagrange'a przyjmą wartość zależną tylko od zmiany geometrii wynikającej z przyrostu  $\Delta u_n$ .

### **Rozdział 5**

# Mikromechaniczny model kontaktowy ciał Cosseratów

#### 5.1 Wyprowadzenie modelu z rozważań mikromechanicznych

Rozważmy zagadnienie kontaktowe 2D bez tarcia ciała Cosseratów z ciałem sztywnym o gładkiej powierzchni  $\Gamma_r$  z normalną  $\mathbf{n}_r$ . Niech  $\Gamma_c$  oznacza tę część brzegu ciała Cosserat, która może zetknąć się z ciałem sztywnym, a przez  $\mathbf{n}$  oznaczmy normalną na brzegu  $\Gamma_c$ . Przywołując założenie z teorii małych odkształceń, że części brzegu dwóch ciał, na których może dojść do kontaktu, są nierozróżnialne, por. podrozdział 4.1.1, otrzymujemy, że  $\Gamma_c \approx \Gamma_r$  oraz  $\mathbf{n}_r \approx -\mathbf{n}$ . Początkowa separacja lub penetracja dwóch powierzchni jest opisywana przez funkcję początkowej separacji  $g_0 = g_0(\mathbf{x})$ , która jest zdefiniowana dla każdego  $\mathbf{x} \in \Gamma_c$ .

W celu uwzględnienia mikrostruktury, której makroskopowy opis reprezentuje model Cosserat, założono że w każdym punkcie na powierzchni kontaktowej  $\Gamma_c$  kontakt z ciałem sztywnym realizowany jest poprzez *sztywne mikrobloczki*. W szczególności założono, że to wierzchołki każdego mikrobloczku oznaczane jako A i B, por. rys. 5.1, kontaktują się z ciałem sztywnym. W związku z powyższym możliwe są trzy stany kontaktowe: *separacja* – żaden z wierzchołków nie jest w kontakcie, *częściowy kontakt* – tylko jeden z wierzchołków jest w kontakcie oraz *pełen kontakt* – oba wierzchołki są w kontakcie z ciałem sztywnym.

Dla ustalonego punktu *C* na powierzchni  $\Gamma_c$  o współrzędnych  $\mathbf{x} \in \Gamma_c$ , położenie środka mikrobloczku *O* oraz jego dwóch wierzchołków *A* i *B* jest określone następująco

$$\mathbf{x}^{O} = \mathbf{x} - \frac{1}{2}\ell \mathbf{N}, \qquad \mathbf{x}^{A} = \mathbf{x}^{O} + \frac{1}{2}\ell(\mathbf{N} - \mathbf{S}), \qquad \mathbf{x}^{B} = \mathbf{x}^{O} + \frac{1}{2}\ell(\mathbf{N} + \mathbf{S}), \tag{5.1}$$

gdzie  $\ell$  oznacza długość boku mikrobloczku, którą przyjęto jako równą długości charakterystycznej ciała Cosseratów, **N** i **S** = **N** × **e**<sub>3</sub> są odpowiednio normalną i styczną do boku mikrobloczku pomiędzy wierzchołkami *A* i *B*, por. rys. 5.1. Należy zauważyć, że mikrobloczki mogą być początkowo obrócone względem powierzchni ciała o mały kąt  $\psi_0$ , którego wartość w ogólności



może zależeć od położenia **x**. Początkowy brak współliniowości mikrobloczków i powierzchni ciała ( $\mathbf{N} \neq \mathbf{n}$ ) można interpretować jako rodzaj nierówności powierzchniowej, ponieważ kontakt może nastąpić pomimo separacji pomiędzy nominalną powierzchnią ciała Cosserat i ciałem sztywnym. Ponadto, w wyniku obrotu  $\psi_0$  pojawia się asymetria oddziaływań kontaktowych związana z mikromomentem kontaktowym. Oba efekty zostały przedstawione w rozdziale 6.

Infinitezymalna translacja i obrót mikrobloczku są opisane przez przemieszczenie  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ punktu kontaktowego *C* oraz mikrobrót  $\psi = \psi(\mathbf{x})$ . Przemieszczenie wierzchołków *A* i *B* jest wtedy dane przez następujące wyrażenia

$$\mathbf{u}^{A} = \mathbf{u} + (\mathbf{I} + [\psi])(\mathbf{x}^{A} - \mathbf{x}^{O}) - (\mathbf{x}^{A} - \mathbf{x}^{O}) = \mathbf{u} + \frac{1}{2}\ell [\psi] (\mathbf{N} - \mathbf{S}) = \mathbf{u} - \frac{1}{2}\ell (\mathbf{S} + \mathbf{N})\psi,$$
  

$$\mathbf{u}^{B} = \mathbf{u} + (\mathbf{I} + [\psi])(\mathbf{x}^{B} - \mathbf{x}^{O}) - (\mathbf{x}^{B} - \mathbf{x}^{O}) = \mathbf{u} + \frac{1}{2}\ell [\psi] (\mathbf{N} + \mathbf{S}) = \mathbf{u} - \frac{1}{2}\ell (\mathbf{S} - \mathbf{N})\psi,$$
(5.2)

gdzie  $\mathbf{I} + [\boldsymbol{\psi}]$ , takie, że  $(\mathbf{I} + [\boldsymbol{\psi}])_{ij} = \delta_{ij} - \psi \epsilon_{ij}$ , jest tensorem infinitezymalnego obrotu wokół osi z skierowanego przeciwnie do ruchu wskazówek zegara dla  $\psi > 0$ , a  $\epsilon_{ij}$  oznacza psuedotensor permutacyjny Leviego-Civity w 2D.

Jak wspomniano powyżej, warunki kontaktowe są sprawdzane w dwóch wierzchołkach A i B. Stąd dla każdego z nich zdefiniowana jest separacja  $g^{\alpha}$ ,

$$g^{\alpha} = g_0^{\alpha} - \mathbf{u}^{\alpha} \cdot \mathbf{n}, \qquad \alpha = A, B, \tag{5.3}$$

gdzie  $g_0^{\alpha}$  oznacza początkową separację w wierzchołku  $\alpha$ , która jest zdeterminowana przez początkową geometrię. Należy zauważyć, że początkowa separacja  $g_0^{\alpha}$  może być inna niż nominalna początkowa separacja  $g_0$ , która jest zdefiniowana w punkcie *C*, por. rys 5.1. Różnica ta może wynikać z kąta  $\psi_0$  wzajemnej orientacji mikrobloku i powierzchni  $\Gamma_c$  oraz z samej geometrii powierzchni  $\Gamma_c$  i  $\Gamma_r$  zcharakteryzowanej przez mały kąt  $\psi_g \approx \sin(\psi_g) = (\mathbf{n} \times \mathbf{n}_r) \cdot \mathbf{e}_3$ , por. rys. 5.1. W przypadku pełnego kontaktu mikroobrót na powierzchni ciała Cosserat wynosi  $\psi = -(\psi_0 + \psi_g)$ .

Zagadnienie kontaktowe sformułowane jako zadanie minimalizacji z ograniczeniami, por. podrozdział 4.1.3, przyjmuje następującą postać

$$\min_{\mathbf{u},\psi} \Pi[\mathbf{u},\psi] \quad \text{z ograniczeniami } g^A \ge 0, \ g^B \ge 0 \text{ na } \Gamma_c, \tag{5.4}$$

gdzie zależności  $g^A$  i  $g^B$  od **u** i  $\psi$  są zdefiniowane przez równania (5.3) i (5.2). Zgodnie ze standardowym podejściem [np. 107] wprowadza się lagranżjan,

$$\mathcal{L}[\mathbf{u},\psi,\lambda^{\alpha}] = \Pi[\mathbf{u},\psi] + \int_{\Gamma_c} (\lambda^A g^A + \lambda^B g^B) \,\mathrm{d}S\,, \tag{5.5}$$

w którym  $\lambda^{\alpha}$  są mnożnikami Lagrange'a zdefiniowanymi na powierzchni  $\Gamma_c$ . Dla **u** i  $\psi$  stanowiących rozwiązanie zadania minimalizacji z ograniczeniami (5.4), lagranżjan  $\mathcal{L}$  jest stacjonarny względem wariacji  $\delta$ **u** i  $\delta\psi$ , stąd

$$G[\mathbf{u},\psi;\delta\mathbf{u},\delta\psi] + \int_{\Gamma_c} (\lambda^A \delta g^A + \lambda^B \delta g^B) \,\mathrm{d}S = 0 \qquad \forall \,\delta\mathbf{u},\delta\psi,$$
(5.6)

gdzie G przedstawia wariację energii potencjalnej  $\Pi$ , por. (3.14) oraz spełnione są następujące warunki komplementarności są spełnione

$$\lambda^{\alpha} \le 0, \qquad g^{\alpha} \ge 0, \qquad \lambda^{\alpha} g^{\alpha} = 0, \qquad \alpha = A, B.$$
(5.7)

Warunki komplementarności (5.7) stanowią odpowiednik warunków kontaktowych Signoriniego, por. (4.42), z tym że zapostulowanych w wierzchołkach mikrobloczka, a nie w punkcie *C* na powierzchni kontaktowej  $\Gamma_c$ .

Uwzględniając równania (5.3) i (5.2), wariacje separacji  $g^{\alpha}$  przyjmują następującą postać,

$$\delta g^{A} = -\delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} \ell \mathbf{n} \cdot (\mathbf{S} + \mathbf{N}) \, \delta \psi,$$
  

$$\delta g^{B} = -\delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} \ell \mathbf{n} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{N}) \, \delta \psi,$$
(5.8)

a warunek stacjonarności (5.6) można zapisać jako,

$$G[\mathbf{u},\psi;\delta\mathbf{u},\delta\psi] - \int_{\Gamma_c} (t_n \mathbf{n} \cdot \delta\mathbf{u} + M\,\delta\psi)\,\mathrm{d}S = 0 \qquad \forall\,\delta\mathbf{u},\delta\psi,\tag{5.9}$$

gdzie

$$t_{\mathbf{n}} = \lambda^{A} + \lambda^{B}, \qquad M = -\frac{1}{2}\ell\left(\mathbf{n} \cdot (\mathbf{S} + \mathbf{N})\lambda^{A} + \mathbf{n} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{N})\lambda^{B}\right).$$
(5.10)

Z powyższego wynika, że  $\mathbf{t} = t_n \mathbf{n}$  jest wektorem naprężenia kontaktowego, przy czym  $t_n$  jest jego składową normalną (z uwagi na to, że rozpatrywany jest kontakt bez tarcia, nie występuje składowa styczna), a M jest kontaktowym mikromomentem, por. odpowiadające całki po brzegach  $\Gamma_t$  i  $\Gamma_M$  w równaniu pracy wirtualnej (3.14). Ponadto równanie (5.10) pozwala na fizyczną interpretację mnożników Lagrange'a  $\lambda^{\alpha}$ , które mają swój udział zarówno w naprężeniu kontaktowym  $t_n$  jak i w mikromomencie M (tu proporcjonalnie do rozmiaru mikrobloku  $\ell$ ).

# 5.2 Ilustracja zachowania modelu w szczególnym przypadku przy zastosowaniu regularyzacji metodą funkcji kary

W celu zobrazowania cech zaproponowanego modelu mikromechanicznego, poniżej zostanie przeanalizowany szczególny przypadek kontaktu pomiędzy sztywną płaszczyzną i ciałem Cosserat o płaskiej równoległej powierzchni i mikroblokach bez wstępnego mikroobrotu, a więc  $\mathbf{N} = \mathbf{n}$ ( $\psi_0 = 0$ ). Zgodnie z równaniami (5.3) i (5.2), separacje  $g^{\alpha}$  mają postać

$$g^{A} = g_{0}^{A} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2}\ell\psi, \qquad g^{B} = g_{0}^{B} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2}\ell\psi.$$
(5.11)

Dodatni mikroobrót  $\psi$  zwiększa separację w wierzchołku *A* i zmniejsza separację w wierzchołku *B*. Oczywiście dodatnia składowa normalna przemieszczenia zmniejsza separację w obu wierzchołkach.

Po zastosowaniu metody funkcji kary do regularyzacji ograniczeń nierównościowych  $g^{\alpha} \ge 0$  [np. 152], zagadnienie minimalizacji z ograniczeniami (5.4) przekształca się w zagadnienie minimalizacji bez ograniczeń,

$$\min_{\mathbf{u},\psi} \Pi^{\text{pen}}[\mathbf{u},\psi], \qquad \Pi^{\text{pen}}[\mathbf{u},\psi] = \Pi[\mathbf{u},\psi] + \int_{\Gamma_c} \frac{1}{2} \varrho\left(\langle g^A \rangle_-^2 + \langle g^B \rangle_-^2\right) \mathrm{d}S.$$
(5.12)

Zregularyzowany funkcjonał całkowitej energii potencjalnej  $\Pi^{\text{pen}}$  zawiera człon kontaktowy z parametrem kary  $\rho > 0$ . Separacje  $g^{\alpha}$  umieszczono w specjalnych nawiasach, które są operatorami o następującej definicji

$$\langle x \rangle_{-} = \begin{cases} x & \text{for } x \le 0, \\ 0 & \text{for } x > 0. \end{cases}$$
(5.13)

Wartość parametru kary  $\rho$  należy dobrać tak by zminimalizować penetrację, ale jednocześnie nie spowodować złego uwarunkowania zagadnienia kontaktowego. To zagadnienie jest powszechnie znane w literaturze i może być źródłem potencjalnych problemów [np. 152].

Warunkiem koniecznym osiągnięcia minimum przez funkcjonał  $\Pi^{\text{pen}}$  jest osiągnięcie stacjonarności  $\Pi^{\text{pen}}$  względem wariacji **u** oraz  $\psi$ , co w rezultacie daje zasadę prac wirtualnych w postaci (5.9) z kontaktowym ciśnieniem  $t_n$  i mikromomentem M danymi jako

$$t_{\rm n} = t_{\rm n}^A + t_{\rm n}^B, \qquad M = \frac{1}{2}\ell(t_{\rm n}^B - t_{\rm n}^A), \qquad t_{\rm n}^\alpha = \varrho \langle g^\alpha \rangle_{-}.$$
 (5.14)

W przypadku pełnego kontaktu, tzn.  $g^A < 0$  i  $g^B < 0$  otrzymujemy

$$t_{\rm n} = 2\rho \left( \frac{1}{2} (g_0^A + g_0^B) - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \right), \qquad M = \frac{1}{2} \rho \ell (g_0^B - g_0^A - \ell \psi).$$
(5.15)

Ciśnienie kontaktowe  $t_n$  zależy tylko od składowej normalnej przemieszczenia, a kontaktowy mikromoment M zależy tylko od mikroobrotu  $\psi$ , czyli zależności na uogólnione naprężenia kontaktowe nie są ze sobą powiązane. Z kolei efektywna sztywność kontaktowa związana ze składową normalną przemieszczenia  $u_n$  wynosi  $2\varrho$ , a efektywna separacja jest równa średniej z separacji wyznaczonych w wierzchołku A i B, por.  $(5.15)_1$ .

W przypadku częściowego kontaktu, np. gdy  $g^A < 0$  i  $g^B > 0$ , otrzymujemy

$$t_{\mathbf{n}} = \varrho \left( g_0^A - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} \ell \psi \right), \qquad M = -\frac{1}{2} \varrho \ell \left( g_0^A - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} \ell \psi \right).$$
(5.16)

Tym razem zarówno  $t_n$  jak i M zależą od składowej normalnej przemieszczenia  $u_n$  i mikroobrotu  $\psi$ . To oznacza, że w przypadku częściowego kontaktu wielkości  $t_n$  i M są ze sobą powiązane. Ponadto zachodzi symetria

$$\frac{\partial(t_{n}\mathbf{n})}{\partial\psi} = \frac{\partial M}{\partial\mathbf{u}} = \frac{1}{2}\varrho\ell\mathbf{n},\tag{5.17}$$

co świadczy o tym, że prawo kontaktowe wywodzi się z potencjału. W sposób oczywisty symetria pochodnych mieszanych zachodzi w przypadku pełnego kontaktu, gdy ciśnienie kontaktowe i mikromoment są zależne odpowiednio tylko od składowej normalnej przemieszczenia i mikroobrotu.

### 5.3 Regularyzacja ograniczeń kontaktowych metodą rozszerzonych mnożników Lagrange'a

Zastosowanie metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a [2] sprawia, że zagadnienie minimalizacji z ograniczeniami (5.4) jest przeformułowane do równoważnego zagadnienia poszukiwania punktu siodłowego bez ograniczeń, por. podrozdział 4.2.1,

$$\min_{\mathbf{u},\psi} \max_{\lambda^{\alpha}} \mathcal{L}[\mathbf{u},\psi,\lambda^{\alpha}], \qquad \mathcal{L}[\mathbf{u},\psi,\lambda^{\alpha}] = \Pi[\mathbf{u},\psi] + \int_{\Gamma_{c}} \sum_{\alpha} l^{\alpha}(g^{\alpha},\lambda^{\alpha}) \,\mathrm{d}S, \qquad (5.18)$$

gdzie

$$l^{\alpha}(g^{\alpha},\lambda^{\alpha}) = \begin{cases} \left(\lambda^{\alpha} + \frac{\varrho}{2}g^{\alpha}\right)g^{\alpha} & \text{dla } \hat{\lambda}^{\alpha} \le 0 \text{ (kontakt),} \\ -\frac{1}{2\varrho}(\lambda^{\alpha})^{2} & \text{dla } \hat{\lambda}^{\alpha} > 0 \text{ (separacja),} \end{cases}$$
(5.19)

a  $\rho > 0$  jest parametrem regularyzacyjnym. Ponadto przez  $\lambda^{\alpha}$  oznaczono mnożniki Lagrange'a zdefiniowane na powierzchni kontaktowej  $\Gamma_c$ , a  $\hat{\lambda}^{\alpha} = \lambda^{\alpha} + \rho g^{\alpha}$  są rozszerzonymi mnożnikami Lagrange'a, które służą do ustalenia czy w danym wierzchołku doszło do kontaktu ( $\hat{\lambda}^{\alpha} \leq 0$ ) lub separacji ( $\hat{\lambda}^{\alpha} > 0$ ).

Funkcje  $l^{\alpha}$ , zdefiniowane w równaniu (5.19), są klasy  $C^1$ . Dzięki temu punkt siodłowy funkcjonału  $\mathcal{L}$  jest równoważny z warunkiem stacjonarności  $\mathcal{L}$  względem wariacji wszystkich jego argumentów. Stąd otrzymujemy następującą rozszerzoną zasadę prac wirtualnych

$$G[\mathbf{u},\psi;\delta\mathbf{u},\delta\psi] + \int_{\Gamma_{\rm c}} \sum_{\alpha} (\hat{\lambda}^{\alpha}_{\rm eff} \delta g^{\alpha} + C^{\alpha} \delta \lambda^{\alpha}) \,\mathrm{d}S = 0 \qquad \forall \,\delta\mathbf{u},\delta\psi,\delta\lambda^{\alpha},\tag{5.20}$$

gdzie wariacje  $\delta g^{\alpha}$  są zdefiniowane przez równanie (5.8) oraz

$$\hat{\lambda}_{\text{eff}}^{\alpha} = \frac{\partial l^{\alpha}(g^{\alpha}, \lambda^{\alpha})}{\partial g^{\alpha}} = \begin{cases} \hat{\lambda}^{\alpha} & \text{dla } \hat{\lambda}^{\alpha} \le 0, \\ 0 & \text{dla } \hat{\lambda}^{\alpha} > 0, \end{cases} \quad C^{\alpha} = \frac{\partial l^{\alpha}(g^{\alpha}, \lambda^{\alpha})}{\partial \lambda^{\alpha}} = \begin{cases} g^{\alpha} & \text{dla } \hat{\lambda}^{\alpha} \le 0, \\ -\frac{1}{\varrho} \lambda^{\alpha} & \text{dla } \hat{\lambda}^{\alpha} > 0. \end{cases}$$
(5.21)

W rozszerzonej zasadzie pracy wirtualnej (5.20) wariacja względem  $\lambda^{\alpha}$  wymusza  $C^{\alpha} = 0$ , co oznacza że w stanie kontaktu mamy  $g^{\alpha} = 0$ , a w stanie separacji  $\lambda^{\alpha} = 0$  — zgodnie z warunkami komplementarności (5.7). Ponadto mnożniki Lagrange'a  $\lambda^{\alpha}$  można utożsamiać z ciśnieniem kontaktowym w wierzchołku  $\alpha$  mikrobloku. Wpływ ciśnienia kontaktowego na składową normalną przemieszczenia  $u_n$  i mikroobrót  $\psi$  wynika z wariacji  $\delta g^{\alpha}$  zgodnie z równaniem (5.8).

Dzięki zastosowaniu metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a pozostają w mocy wszystkie zalety tego sformułowania wymienione w podrozdziale 4.2.1, tj.: możliwość wykorzystania monolitycznego schematu Newtona oraz dokładne spełnienie warunków kontaktowych.

## **Rozdział 6**

# Modelowanie efektów skali w zagadnieniach mikropolarnej sprężystości

### 6.1 Ściskanie sztywnymi płaszczyznami nieskończonego pasma ze wstępnie obróconymi mikroblokami

W celu zobrazowania cech mikromechanicznego modelu kontaktowego opisanego w rozdziale 5 przeanalizowano zagadnienie ściskania nieskończonego pasma o grubości 2*H* przez dwie sztywne płaszczyzny. Jednym z powodów wybrania tego zagadnienia jest to, że dane zagadnienie może być rozwiązane analitycznie. Dzięki temu cała uwaga jest skupiona na właściwościach modelu i efektach wynikających z przyjęcia wstępnego mikroobrotu  $\psi_0$  mikrobloków, por. rys. 6.1. Dodatkowo możliwe jest sprawdzenia poprawności implementacji modelu w systemie MES.

Niech sztywne płaszczyzny w chwili początkowej stykają się z wierzchołkami *B* mikrobloków, stąd  $g_0^B = 0$  oraz  $g_0^A = \ell \psi$ . Separacja pomiędzy nominalną powierzchnią pasma, a sztywnymi płaszczyznami wynosi zatem  $\frac{1}{2}\ell\psi$ . Następnie sztywne płaszczyzny ściskają pasmo poprzez zbliżanie się względem siebie o  $2\delta$ , por. rys. 6.1. Zagadnienie jest jednowymiarowe i wszystkie niewiadome zależą tylko od współrzędnej  $x_2$ . Zależność poziomego przemieszczenia  $u_1$  tylko od  $x_2$  implikuje, że przemieszczenie poziome jest ograniczone i równe 0 dla  $x_1 \rightarrow \pm \infty$ . Samo rozwiązanie wykazuje pewne symetrie względem płaszczyzny  $x_2 = 0$ , tj.  $u_i(x_2) = -u_i(-x_2)$  oraz  $\psi(x_2) = \psi(-x_2)$ . W związku z powyższym warunki kontaktowe można rozpatrywać jednostronnie, np. na górnej powierzchni  $x_2 = H$ .

Biorąc pod uwagę, że początkowy obrót  $\psi_0$  jest mały, wektor normalny do powierzchni mikrobloku ma postać

$$\mathbf{N} = (-\sin\psi_0, \cos\psi_0) \approx (-\psi_0, 1), \tag{6.1}$$



Rysunek 6.1: Nieskończone sprężyste pasmo Cosserat ściskane przez dwie sztywne płaszczyzny.

a wektor  $\mathbf{S} \approx (1, \psi_0)$ . Wierzchołek *B* jest w stałym kontakcie ze sztywną płaszczyzną, a więc

$$g^{B} = -\mathbf{u}^{B} \cdot \mathbf{n} - \delta = -\left(\mathbf{u} - \frac{1}{2}\ell \left(\mathbf{S} - \mathbf{N}\right)\psi\right) \cdot \mathbf{n} - \delta = -\left(u_{2} + \frac{1}{2}\ell \left(1 - \psi_{0}\right)\psi\right) - \delta = 0.$$
(6.2)

Natomiast wierzchołek *A* jest początkowo w separacji, ale w trakcie deformacji może dojść do kontaktu pomiędzy wierzchołkiem a sztywną płaszczyzną, stąd

$$g^{A} = \ell \psi_{0} - \mathbf{u}^{A} \cdot \mathbf{n} - \delta = \ell \psi_{0} - \delta - \left(\mathbf{u} - \frac{1}{2}\ell \left(\mathbf{S} + \mathbf{N}\right)\psi\right) \cdot \mathbf{n} = \ell \psi_{0} - \delta - \left(u_{2} - \frac{1}{2}\ell \left(1 + \psi_{0}\right)\psi\right) \ge 0.$$
(6.3)

Równania równowagi w postaci silnej (3.19) w połączeniu z równaniami konstytutywnymi (3.16) dają w rezultacie następujący układ równań różniczkowych,

$$\begin{cases} \beta \psi' + u_1'' = 0, \\ \left(1 - \frac{1}{2}\beta\right) \left(\ell^2 \psi'' + u_1'\right) - \beta \psi - u_1' = 0, \\ u_2'' = 0, \end{cases}$$
(6.4)

gdzie prim oznacza różniczkowanie względem współrzędnej  $x_2$ , parametr  $\beta = 2\eta/(1 + \eta)$ , przy czym  $\eta = \mu_c/\mu$ . W szczególnym przypadku  $\eta = 0$ , co odpowiada  $\beta = 0$ , otrzymujemy układ trzech niesprzężonych i harmonicznych równań na  $u_1$ ,  $u_2$  i  $\psi$ .

Rozważmy w pierwszej kolejności przypadek częściowego kontaktu, tj.  $g^A > 0$ . Uwzględniając mikromechaniczny model kontaktowy i symetrię zagadnienia względem płaszczyzny  $x_2 = 0$  otrzymujemy następujące warunki brzegowe,

$$u_1(0) = 0, u_2(0) = 0, m_2(0) = 0, 
\sigma_{12}(H) = 0, g^B(H) = 0, m_2(H) = \frac{1}{2}\ell(1 - \psi_0)\sigma_{22}(H).$$
(6.5)

Warunek na mikromoment w punkcie  $x_2 = H$  wynika z równania (5.10). Normalna do powierzchni nominalnej **n** jest współliniowa z **e**<sub>2</sub>, stąd ciśnienie kontaktowe  $t_n$  odpowiada naprężeniu  $\sigma_{22}$  na powierzchni pasma, a efektywne ramię mikromomentu kontaktowego względem środka mikrobloku wynosi  $\frac{1}{2}\ell(1-\psi_0)$ . Powyższe warunki brzegowe pozostają w mocy tak długo jak mikroobrót  $\psi$
na powierzchni pasma nie osiągnie wartości  $-\psi_0$ . Wtedy warunek brzegowy Neumanna dotyczący  $m_2(H)$  zostanie zastąpiony warunkiem brzegowym Dirichleta  $\psi(H) = -\psi_0$ , ponieważ  $g^A = 0$ .

Otrzymane rozwiązanie analityczne składa się z dwóch przypadków. W zależności od wielkości przemieszczenia sztywnych płaszczyzn  $\delta$  otrzymujemy

$$u_{1}(x_{2}) = \begin{cases} \ell \sqrt{\beta} A_{1} \sinh\left(\frac{x_{2}\sqrt{\beta}}{\ell}\right) & \text{dla } \delta < \delta_{\text{fc}}, \\ \ell \sqrt{\beta} A_{2} \sinh\left(\frac{x_{2}\sqrt{\beta}}{\ell}\right) & \text{dla } \delta \ge \delta_{\text{fc}}, \end{cases}$$

$$\psi(x_{2}) = \begin{cases} -A_{1} \cosh\left(\frac{x_{2}\sqrt{\beta}}{\ell}\right) & \text{dla } \delta < \delta_{\text{fc}}, \\ -A_{2} \cosh\left(\frac{x_{2}\sqrt{\beta}}{\ell}\right) & \text{dla } \delta \ge \delta_{\text{fc}}, \end{cases}$$

$$u_{2}(x_{2}) = \begin{cases} -4A_{1} \frac{\sqrt{\beta}}{1-\psi_{0}} \frac{\mu}{\lambda+2\mu} \sinh\left(\frac{H\sqrt{\beta}}{\ell}\right) x_{2} & \text{dla } \delta < \delta_{\text{fc}}, \\ -\left(\delta - \frac{1}{2}\psi_{0}\ell(1-\psi_{0})\right) \frac{x_{2}}{H} & \text{dla } \delta \ge \delta_{\text{fc}}, \end{cases}$$
(6.6)

gdzie  $A_1$ ,  $A_2$  i  $\delta_{\rm fc}$  są zdefiniowane następująco

$$A_{1} = \frac{2(\lambda + 2\mu)(1 - \psi_{0})\delta}{\ell(\lambda + 2\mu)(1 - \psi_{0})^{2}\cosh\left(\frac{H\sqrt{\beta}}{\ell}\right) + 8H\sqrt{\beta}\mu\sinh\left(\frac{H\sqrt{\beta}}{\ell}\right)},$$

$$A_{2} = \psi_{0}\operatorname{sech}\left(\frac{H\sqrt{\beta}}{\ell}\right),$$

$$\delta_{fc} = \frac{1}{2}\psi_{0}\left(\ell(1 - \psi_{0}) + \frac{8H\sqrt{\beta}\mu\tanh\left(\frac{H\sqrt{\beta}}{\ell}\right)}{(\lambda + 2\mu)(1 - \psi_{0})}\right).$$
(6.7)

Parametr  $\delta_{fc}$  oznacza wartość przemieszczenia  $\delta$  przy której separacja  $g^A$  osiąga wartość zero i następuje przejście ze stanu częściowego kontaktu do stanu pełnego kontaktu. Poza grubością pasma *H* i początkowym mikroobrotem  $\psi_0$ , rozwiązanie zależy od parametrów  $\beta$  i  $\ell$ , które charakteryzują izotropowe sprężyste ciało Cosserat w 2D oraz od współczynnika Poissona *v* (poprzez stałe Lamégo:  $\lambda$  i  $\mu$ ).

Deformacja pasma dla wybranych stosunków długości charakterystycznej do grubości pasma  $\ell/H$  została pokazana na rys. 6.2. Jeśli nie zaznaczono inaczej, przedstawione w tym podrozdziale wyniki odpowiadają  $\psi_0 = 1^\circ$ ,  $\nu = 0.3$ ,  $\beta = 1$  (co oznacza  $\eta = 1$ ) i  $\delta = 0.02H$ . Na rys. 6.2 poziome przemieszczenie  $u_1$  przedstawiono za pomocą linii ciągłej jako odchylenie od stanu początkowego, któremu odpowiada pionowa linia przerywana. W wybranych czterech pozycjach pomiędzy  $x_2 = 0$  i  $x_2 = H$  przedstawiono mikroobrót mikrobloku o boku  $\ell$  o kąt  $\psi$  względem początkowej orientacji  $\psi_0$  (mikroobrót został zwiększony 30-krotnie dla lepszego zobrazowania zachowania się mikrobloków). Przemieszczenie pionowe  $u_2$  jest funkcją liniową względem  $x_2$ , więc nie zostało pokazane na rys. 6.2.

Wykresy przedstawiające przebieg mikroobrotu  $\psi$  i przemieszczenia  $u_1$  wzdłuż grubości pasma H przedstawiono na rys. 6.3. Znacznikami zaznaczono rozwiązanie numeryczne otrzymane



**Rysunek 6.2:** Warstwy brzegowe powstające wskutek warunków kontaktowych w paśmie ściskanym przez dwie sztywne powierzchnie. Linie ciągłe ilustrują przemieszczenie poziome powiększone 25--krotnie (przemieszczenie pionowe  $u_2$  nie zostało pokazane). Kwadraty pokazują mikroobrót  $\psi$  w stosunku do początkowego mikroobrotu  $\psi_0$ . Mikroobroty powiększono 30-krotnie.

metodą elementów skończonych, w której został zaimplementowany mikromechaniczny model kontaktowy. W obliczeniach użyto 20 elementów skończonych na grubości pasma *H*. Na rys. 6.3 pokazano znaczniki odpowiadające co drugiemu węzłowi.

We wszystkich obliczeniach, których wyniki zaprezentowano w tym rozdziale, do dyskretyzacji kontinuum wykorzystano czterowęzłowe elementy skończone o biliniowej interpolacji przemieszczeń i mikroobrotów. W konsekwencji w elementach kontaktowych użyto liniowych funkcji kształtu do interpolacji przemieszczeń, mikroobrotów oraz mnożników Lagrange'a  $\lambda^{\alpha}$ , por. podrozdział 5.3. Ograniczenia kontaktowe występujące w rozszerzonej zasadzie pracy wirtualnej (5.20), zgodnie z podejściem *node-to-segment* (por. podrozdział 4.2.2), wymuszano w węzłach, co odpowiada zastosowaniu kwadratury Lobatto do całkowania wkładu modelu kontaktowego w rozszerzonej zasadzie pracy wirtualnej. W obrębie kontinuum zastosowano standardową kwadraturę Gaussa o czterech punktach całkowania. Implementację i obliczenia przeprowadzono w systemie MES *AceGen/AceFEM* [67, 68].

W przypadku grubego pasma, np. gdy  $\ell/H = 0.1$  na rys. 6.2 i 6.3, w rozwiązaniu pojawiają się warstwy brzegowe spowodowane warunkami kontaktowymi. W szczególności powodem pojawienia się warstw brzegowych są mikromomenty kontaktowe, które w mikromechanicznym modelu kontaktowym są sprzężone z ciśnieniem kontaktowym. Otrzymany mikroobrót  $\psi$  i przemieszczenie poziome  $u_1$  przybierają kształt funkcji eksponencjalnej, która wygasa w odpowiednim oddaleniu od powierzchni kontaktowej. W przypadku dwukrotnie cieńszego pasma  $\ell/H = 0.2$ , warstwy brzegowe zajmują praktycznie całą grubość pasma. Gdy rozważane pasmo jest jeszcze cieńsze,



**Rysunek 6.3:** Nieskończone pasmo ściskane przez sztywne płaszczyzny: (a) mikroobrót  $\psi$  znormalizowany przez  $-\psi_0$  oraz (b) przemieszczenie poziome  $u_1$  znormalizowane przez  $\delta = 0.02H$ . Linie ciągłe i znaczniki oznaczają odpowiednio rozwiązanie analityczne i MES.

 $\ell/H > 0.2$ , warstwy brzegowe nie zanikają, tylko łączą się z warstwami brzegowymi wywołanymi warunkami kontaktowymi na powierzchni  $x_2 = -H$ .

Grubość warstwy brzegowej opisuje pewna charakterystyczna długość, która jest zdefiniowana jako iloraz danego pola i pochodnej tego pola w punkcie  $x_2 = H$  ze znakiem minus,

$$L_{\psi} = -\frac{\psi(H)}{\psi'(H)}, \qquad L_{u} = -\frac{u_{1}(H)}{u_{1}'(H)}.$$
(6.8)

Na rys. 6.3 długości charakterystyczne  $L_{\psi}$  i  $L_u$  odpowiadają odległości pomiędzy rzędną  $x_2/H = 1$ a punktem przecięcia się stycznej wyznaczonej dla wartości  $x_2/H = 1$ . Co ciekawe, wyrażenia na długości charakterystyczne  $L_{\psi}$  i  $L_u$  nie zmieniają się przy przejściu od częściowego do pełnego kontaktu i upraszczają się po wprowadzeniu normalizacji przez  $\ell/\sqrt{\beta}$ ,

$$\frac{\sqrt{\beta}L_{\psi}}{\ell} = \coth\left(\frac{\sqrt{\beta}H}{\ell}\right), \qquad \frac{\sqrt{\beta}L_{u}}{\ell} = \tanh\left(\frac{\sqrt{\beta}H}{\ell}\right). \tag{6.9}$$

rys. 6.4 przedstawia zależność znormalizowanych długości charakterystycznych od znormalizowanej grubości pasma  $\sqrt{\beta}H/\ell$ . Z wykresu wynika, że dla stosunkowo grubych pasm znormalizowane długości charakterystyczne  $\sqrt{\beta}L_{\psi}/\ell$  i  $\sqrt{\beta}L_{u}/\ell$  są sobie równe i zarazem równe jedności. Ten zakres odpowiada sytuacji, gdy warstwy brzegowe są w pełni rozwinięte. Ze zmniejszającą się znormalizowaną grubością pasma, znormalizowane długości charakterystyczne zaczynają się rozdzielać. Zakres znormalizowanej grubości pasma, w której znormalizowane długości charakterystyczne różnią się od siebie, odpowiada sytuacji gdy warstwy brzegowe wypełniają całą grubość pasma *H*.

Na koniec tego podrozdziału zostaną omówione warunki brzegowe wynikające z zastosowania mikromechanicznego modelu kontaktowego. Na rys. 6.5a przedstawiono ewolucję mikromomentu kontaktowego M dla  $\ell/H = 0.5$ . Na wykresie wartość mikromomentu M znormalizowano przez:

•  $M(\delta_{\rm fc})$ , który odpowiada wartości mikromomentu w punkcie granicznym zmiany stanu kontaktowego z częściowego na pełen kontakt, tj. przy  $\delta = \delta_{\rm fc}$ ,



**Rysunek 6.4:** Zależność znormalizowanych grubości warstw brzegowych  $\sqrt{\beta}L_{\psi}/\ell$  i  $\sqrt{\beta}L_{u}/\ell$  od znormalizowanej grubości pasma  $\sqrt{\beta}H/\ell$ , por. (6.9).



**Rysunek 6.5:** Nieskończone pasmo ściskane przez dwie sztywne płaszczyzny: zmiana mikromomentu M (a) oraz mikroobrotu  $\psi$  i przemieszczeń  $u_i$  (b) na powierzchni kontaktowej w trakcie deformacji.

• przez iloczyn ciśnienia kontaktowego  $t_n$  i efektywnego ramienia mikromomentu  $\frac{1}{2}\ell(1-\psi_0)$ .

W zakresie częściowego kontaktu ( $\delta < \delta_{fc}$ ) mikromoment rośnie liniowo, ponieważ jest proporcjonalny do ciśnienia kontaktowego  $t_n$  Z kolei efektywne ramię mikromomentu jest stałe i równe  $\frac{1}{2}\ell(1-\psi_0)$ , ponieważ tylko jeden wierzchołek jest w kontakcie. Przy przejściu do pełnego kontaktu ( $\delta > \delta_{fc}$ ) wartość mikromomentu jest stała i równa granicznej wartości osiągniętej dla  $\delta = \delta_{fc}$ . Jednocześnie efektywne ramię się zmniejsza, ponieważ występujące w mianowniku ciśnienie kontaktowe  $t_n = t_n^A + t_n^B$  rośnie a mikromoment M w tym zakresie zależy od różnicy ciśnień w wierzchołkach, która jest stała  $M = \frac{1}{2}\ell(t_n^B - t_n^A)(1 - \psi_0)$ .

Przebieg mikroobrotu  $\psi(H)$  i składowych przemieszczenia  $u_i(H)$  na powierzchni kontaktowej pokazano na rys. 6.5b. W pierwszej fazie odkształcenia mikroobrót  $\psi(H)$  narasta liniowo aż do osiągnięcia wartości  $-\psi_0$  w momencie przejścia ze stanu częściowego do pełnego kontaktu, tj. dla  $\delta = \delta_{fc}$ . W dalszej fazie deformacji wartość mikroobrotu jest stała. Poziome przemieszczenie  $u_1(H)$ zachowuje się analogicznie. W fazie częściowego kontaktu rośnie liniowo, a po przejściu do pełnego kontaktu jest stałe. Natomiast przebieg przemieszczenia pionowego  $u_2(H)$  ma charakter odcinkowoliniowy. Zmiana nachylenia, która następuje przy przejściu do pełnego kontaktu, ilustruje zmianę sztywności normalnej ściskanego pasma.

Podsumowując ten podrozdział należy zauważyć, że zastosowanie mikromechanicznego modelu kontaktowego, wprowadzającego niestandardowe warunki brzegowe, daje w rezultacie nieoczekiwane wyniki. W szczególności w rozwiązaniu zaobserwowano warstwy brzegowe, których grubość jest zależna od długości charakterystycznej ciała Cosseratów  $\ell$ . W następnym podrozdziale zostanie przeanalizowane bardziej skomplikowane zagadnienie kontaktowe typu Hertza.

#### 6.2 Zagadnienie kontaktowe typu Hertza

W niniejszym podrozdziałe przeanalizowano zagadnienie typu Hertza w 2D. W sprężystą półpłaszczyznę, modelowaną jako ciało Cosserat, wciskany jest siłą *P* sztywny walec o promieniu *R*, por. rys. 6.6a. Do modelowania oddziaływań kontaktowych zastosowano mikromechaniczny model kontaktowy opisany w rozdziałe 5 oraz klasyczny model kontaktowy z jednorodnym warunkiem Neumanna M = 0.



Rysunek 6.6: Zagadnienie kontaktowe typu Hertza dla sprężystej półpłaszczyzny Cosserat: (a) schemat zagadnienia 2D, (b) schematycznie przedstawiona siatka elementów skończonych, (c) powiększenie obszaru zagęszczenia siatki w pobliżu strefy kontaktu. W obliczeniach użyto siatki zagęszczonej 5-krotnie, tzn. każdy element na schemacie powyżej jest podzielony na 5 × 5 = 25 elementów skończonych.

Na rys. 6.6b przedstawiono schematycznie siatkę elementów skończonych zastosowaną w obliczeniach. Siatka zastosowana w obliczeniach była zagęszczona 5-krotnie w stosunku do tej zaprezentowanej na rys. 6.6b, co dało w sumie około 130 000 niewiadomych. Siatkę podzielono na dwa obszary: pierwszy o rozmiarze  $2a_{Hz}$  w pobliżu strefy kontaktu, w którym zastosowano regularną i gęstą siatkę elementów skończonych, oraz stopniowo rozrzedzającą się promieniście



**Rysunek 6.7:** Zagadnienie kontaktowe typu Hertza: (a) znormalizowane ciśnienie kontaktowe  $p_n$  i (b) znormalizowanego mikromomentu M w funkcji znormalizowanego obciążenia  $\bar{P} = P/P_{\text{max}}$  dla stosunku  $\alpha = 0.25$ .

poczynając od obszaru z regularną siatką aż do granicy rozważanego wycinka półpłaszczyzny o boku 18 $a_{\text{Hz}}$ . Przez  $a_{\text{Hz}}$  oznaczono połowę szerokości kontaktu klasycznego liniowo-sprężystego zagadnienia Hertza dla siły  $P = P_{\text{max}}$ ,

$$a_{\rm Hz} = \sqrt{\frac{4P_{\rm max}R}{\pi E^*}}, \qquad p_{\rm Hz} = \frac{2P_{\rm max}}{\pi a_{\rm Hz}}, \qquad E^* = \frac{E}{1 - \nu^2}.$$
 (6.10)

Powyżej podano również wzór na maksymalne ciśnienie kontaktowe w klasycznym zagadnieniu Hertza  $p_{\text{Hz}}$ , które będzie służyć m.in. do normalizacji otrzymywanych wyników. Wykorzystano symetrię zagadnienia i przyjęto schemat połówkowy z następującymi warunkami brzegowymi na osi symetrii  $x_1 = 0$ :  $u_1 = 0$  oraz  $\psi = 0$ .

Na rys. 6.7 przedstawiono rozkład ciśnienia kontaktowego  $p_n = -t_n$  i mikromomentu M znormalizowanych przez  $p_{Hz}$  dla wybranych etapów wciskania walca scharakteryzowanych przez znormalizowaną siłę  $\bar{P} = P/P_{max}$ . Wszystkie wyniki pokazano w postaci bezwymiarowej. Było to możliwe, ponieważ wyniki zależą tylko od dwóch parametrów materiałowych: v = 0.3 i  $\beta = 1$ oraz od stosunku  $\alpha$  długości charakterystycznej  $\ell$  do szerokości obszaru kontaktu w rozwiązaniu Hertza  $a_{Hz}$ . Innymi słowy parametr  $\alpha$  mówi o tym, jak dużych efektów skali należy się spodziewać. Przy ustalonych parametrach materiałowych (w tym  $\ell$ ) parametr  $\alpha$  może być interpretowany jako parametr obciążenia, ponieważ  $a_{Hz}$  zależy od obciążenia  $P_{max}$ , por. (6.10). Przy zwiększającym się obciążeniu, zwiększa się obszar kontaktu  $a_{Hz}$ , a zmniejsza się parametr  $\alpha$ . Wyniki pokazane na rys. 6.7 otrzymano przy ustalonym parametrze  $\alpha = 0.25$  oraz przy następujących parametrach materiałowych: E = 100, R = 10 i P = 1 o odpowiednich jednostkach fizycznych.

Na początku zagłębiania, tj. przy  $\overline{P} < 0.07$ , pojawiają się dwie oddzielne strefy częściowego kontaktu realizowanego przez tylko jeden wierzchołek mikrobloczków. Wraz ze zwiększającym się obciążeniem, strefy te rozszerzają się i łączą się na osi symetrii przy obciążeniu  $\overline{P} \approx 0.07$ . Następnie w środkowej części pojawia się strefa pełnego kontaktu wraz z symetrycznymi strefami częściowego kontaktu po bokach. W punktach przejścia pomiędzy strefami częściowego i pełnego



**Rysunek 6.8:** Zagadnienie kontaktowe typu Hertza w przypadku mikrobloczków wstępnie obróconych o kąt  $\psi_0 = 5^\circ$ : (a) znormalizowane ciśnienie kontaktowe  $p_n$  i (b) znormalizowany mikromoment M w funkcji znormalizowanego obciążenia  $\bar{P} = P/P_{max}$  dla stosunku  $\alpha = 0.25$ .

kontaktu widoczne jest załamanie zarówno na wykresie ciśnienia kontaktowego, jak i na wykresie mikromomentu, por. rys. 6.7. Załamanie to jest wynikiem sprzężenia ciśnienia kontaktowego z mikromomentem w mikromechanicznym modelu kontaktowym: przy przejściu ze stanu częściowego kontaktu do stanu pełnego kontaktu następuje zmianą sztywności związanej ze składową normalną przemieszczenia i z mikromomentami, co można było zaobserwować również w podrozdziale 6.1.

Następnie przeanalizowano przypadek zagadnienia typu Hertza, w którym mikrobloki są obrócone względem powierzchni nominalnej, podobnie jak w podrozdziale 6.1. Z powodu wstępnego mikroobrotu mikrobloków symetria zagadnienia jest zaburzona i nie można zastosować schematu połówkowego. Analizę przeprowadzono więc na obszarze o podwojonej szerokości ( $36a_{Hz} \times 18a_{Hz}$ ) przy początkowym mikroobrocie mikrobloków o 5° przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Na rys. 6.8 przedstawiono ciśnienie kontaktowe oraz mikromoment dla tych samych wartości  $\overline{P}$  jak w przypadku braku wstępnego mikroobrotu rozważanego powyżej. Zgodnie z przewidywaniami otrzymane rozwiązanie utraciło symetrię względem osi  $x_1 = 0$ . Pomimo zaburzenia, charakterystyczne cechy rozwiązania takie jak występowanie oddzielnych obszarów częściowego kontaktu w początkowej fazie oraz załamania na wykresach ciśnienia kontaktowego i mikromomentu w późniejszej fazie zostały zachowane. Wstępny mikroobrót przeciwnie do ruchu wskazówek zegara spowodował, że dla  $x_1 < 0$  ciśnienia kontaktowe są wyższe niż dla  $x_1 > 0$ . Ponadto punkty przejścia pomiędzy strefami częściowego i pełnego kontaktu przesunęły się w kierunku dodatniej współrzędnej  $x_1$ , tj. w prawo, por. rys. 6.8.

Jak pokazano na rys. 6.7 i 6.8 charakter otrzymanych wyników silnie zależy od przyłożonego obciążenia. Obserwowane zmiany dowodzą tego, że mamy do czynienia z efektami skali. Przy zmieniającym się obciążeniu zmienia się szerokość kontaktu, a przez to stosunek szerokości kontaktu do długości charakterystycznej  $\ell$ , co jest źródłem efektów skali w rozpatrywanym zagadnieniu kontaktowym. W celu zbadania efektów skali wynikających z zastosowania mikromechanicznego modelu kontaktowego przeprowadzono analizę wpływu zmiany długości charakterystycznej Cos-

serat  $\ell$  na otrzymywane wyniki przy utrzymywaniu stałej siły  $P_{\text{max}}$ , a przez to szerokości kontaktu w klasycznym zagadnieniu Hertza  $a_{\text{Hz}}$ . Badanie efektów skali ograniczono do przypadku bez wstępnego mikroobrotu mikrobloków. Do opisu wyników użyto parametru  $\alpha$ , który opisuje jaką część  $a_{\text{Hz}}$  stanowi długość charakterystyczna  $\ell$ . Z uwagi na to, że sam model Cosserat posiada długość charakterystyczną, to pewnych efektów należy się spodziewać również przy zastosowaniu klasycznego modelu kontaktowego. Dlatego równolegle analizowano efekty skali pojawiające się przy zastosowaniu klasycznego modelu kontaktowego z jednorodnym warunkiem Neumanna M = 0.



**Rysunek 6.9:** Efekty skali w zagadnieniu typu Hertza: wpływ stosunku  $\alpha = \ell/a_{\text{Hz}}$  na znormalizowane ciśnienie kontaktowe  $p_n$  otrzymane przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego (a) i klasycznego modelu kontaktowego (b).

Na rys. 6.9 przedstawiono znormalizowane ciśnienie kontaktowe dla zmieniającego się stosunku  $\alpha$  od 0.01 do 1.25 zarówno przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego jak i z użyciem klasycznego modelu kontaktowego. W celu poprawy dokładności rozwiązania otrzymanego metodą elementów skończonych, a w szczególności, aby dokładnie wyznaczyć szerokość kontaktu, wyniki przedstawione na rys. 6.9 otrzymano w wyniku specjalnej procedury. Położenie węzłów siatki elementów skończonych wyznaczono w sposób iteracyjny tak, aby ich położenie pokrywało się z granicą stref kontaktu. Dla stosunkowo małych wartości  $\alpha$  strefa kontaktu jest jedna i połączona. Szerokość kontaktu a wyznaczono z jednocześnie zachodzących warunków  $g^A = 0$ i  $p_n^A = w$  węźle o współrzędnej  $x_1 = a$ . Z kolei dla stosunkowo dużych wartości  $\alpha$  występują dwie, oddzielne strefy kontaktu. Położenie węzłów stanowiących wewnętrzną  $x_1 = b$  oraz zewnętrzną  $x_1 = a$  granicę obszaru kontaktu wyznaczono z warunków  $g^A = 0$  oraz  $p_n^A$  spełnionych jednocześnie w obu punktach granicznych. Ostatnim, szczególnym przypadkiem jest występowanie dwóch stref częściowego kontaktu, które stykają się w  $x_1 = 0$ . Oprócz wyznaczenia szerokości kontaktu  $x_1 = a$ , gdzie  $g^A$  i  $p_n^A = 0$ , należy wyznaczyć wartość stosunku  $\alpha = \alpha_{mid}$ , dla której w punkcie  $x_1 = 0$  zachodzi  $g^a = 0$  oraz  $p_n^A = 0$ . W rozważanym zagadnieniu poszukiwany stosunek  $\alpha$  wynosi  $\alpha_{mid} = 0.8874$ . W przypadku klasycznego modelu kontaktowego szerokość kontaktu a wyznaczono przez warunki zerowania się separacji i ciśnienia kontaktowego dla  $x_1 = a$ . Separacja i ciśnienie kontaktowe w przypadku klasycznego modelu kontaktowego zdefiniowane są w punkcie na powierzchni odpowiadającemu punktowi *C* w modelu mikromechanicznym.

Zarówno przy zastosowaniu modelu mikromechanicznego jak i klasycznego modelu kontaktowego zaobserwowano znaczne efekty skali, por. rys. 6.9. W obu przypadkach dla  $\alpha \rightarrow 0$  otrzymane rozwiązanie, np. dla  $\alpha = 0.01$ , dąży do klasycznego rozwiązania Hertza, które oznaczono czarnymi znacznikami. Przy zwiększającym się stosunku  $\alpha$  zaobserwowano znaczącą różnicę jakościową w otrzymanych wynikach w zależności od zastosowanego modelu kontaktowego.

W przypadku klasycznego modelu kontaktowego rozkład ciśnienia kontaktowego niezależnie od stosunku  $\alpha$  przypomina eliptyczny kształt znany z klasycznego rozwiązania Hertza. Wraz z rosnącym stosunkiem  $\alpha$  maksymalne ciśnienie kontaktowe rośnie, a szerokość kontaktu maleje. Stąd twardość, zdefiniowana jako średnie ciśnienie kontaktowe  $H = P_{\text{max}}/(2a)$ , rośnie w stosunku do twardości uzyskanej w klasycznym rozwiązaniu Hertza  $H_{\text{Hz}}$ , por. rys. 6.10a.



**Rysunek 6.10:** Efekty skali w zagadnieniu kontaktowym typu Hertza: (a) znormalizowana twardość  $H/H_{\text{Hz}}$ i (b) znormalizowana twardość nominalna  $H_{\text{nom}}/H_{\text{nom}}^{\infty}$  w funkcji  $1/\alpha$ . Wyniki otrzymane przy zastosowaniu klasycznego modelu kontaktowego oznaczono kolorem czerwonym. Znormalizowaną twardość  $H/H_{\text{Hz}}$  (a) wyznaczoną z rzeczywistej i pozornej powierzchni kontaktu oznaczono odpowiednio kolorem żółtym i niebieskim.

W przypadku mikromechanicznego modelu kontaktowego szerokość kontaktu *a* zwiększa się wraz ze wzrostem stosunku  $\alpha$ . Towarzyszy temu znacząca zmiana w kształcie rozkładu ciśnienia kontaktowego, co zostało już pokazane na rys. 6.7a. W dość szerokim zakresie wartości, dla  $\alpha > 0.5$ , maksymalne ciśnienie kontaktowe pozostaje na stałym poziomie, podczas gdy strefy częściowego kontaktu rozsuwają się. Z powodu wzrostu szerokości kontaktu *a* twardość *H* maleje wraz ze wzrostem stosunku  $\alpha$ , por. rys. 6.10a. Dla  $\alpha > \alpha_{mid}$  strefy kontaktu się rozdzielają, przez co twardość można wyznaczyć na dwa sposoby. W wyniku podzielenia siły przez szerokość kontaktu *2a* uzyskujemy twardość pozorną, ponieważ rzeczywista szerokość kontaktu jest mniejsza i wynosi 2(a-b), gdzie *b* oznacza połowę szerokości strefy rozdzielenia się ciśnienia kontaktowego. Twardość wyznaczona drugim sposobem, tj. przez podzielenie siły przez rzeczywistą szerokość kontaktu, wykazuje niemonotoniczny przebieg w funkcji  $1/\alpha$ . Dla  $\alpha = \alpha_{mid}$  następuje rozdzielenie

się krzywych i twardość rzeczywista ponownie rośnie wraz ze zwiększaniem się stosunku  $\alpha$ , por. powiększenie na rys. 6.10a.

Zaobserwowane efekty skali przy zastosowaniu klasycznego modelu kontaktowego są typowe. Przy zmniejszającej się sile, a więc rosnącym stosunku  $\alpha$ , twardość rośnie. Natomiast przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego zaobserwowano odwrotny efekt. Twardość zmniejsza się wraz z malejącą siłą, a dodatkowo uwzględniając rzeczywisty obszar kontaktu zaobserwowano niemonotoniczny przebieg twardości w zakresie gdy szerokość kontaktu staje się porównywalna z długością charakterystyczną Cosserat  $\ell$ .

Na rys. 6.10b przedstawiono wpływ efektów skali na otrzymaną twardość nominalną  $H_{nom} = P_{max}/(2a_{nom})$ , gdzie  $a_{nom} = \sqrt{d(2R - d)}$  oznacza nominalną szerokość kontaktu wyznaczoną z czysto geometrycznych rozważań przy danym zagłębieniu *d*. Twardość nominalną znormalizowano przez  $H_{nom}^{\infty}$ , która odpowiada twardości nominalnej bez efektów skali, tj. dla  $1/\alpha \rightarrow \infty$ . Tym razem w obu przypadkach zaobserwowano wzrost twardości przy rosnącym stosunku  $\alpha$ . Z powyższego wynika, że całkowita sztywność układu rośnie wraz z rosnącym stosunkiem  $\alpha$ , oraz że efekt ten jest silniejszy przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego. W przypadku klasycznego modelu kontaktowego wzrost sztywności wynika z dodatkowych członów pojawiających się w wyrażeniu na gęstość energii sprężystej związanych z obrotami i gradientami krzywizn, których wpływ jest tym większy, im mniejsza jest skala rozważanego zagadnienia. Zastosowanie mikromechanicznego modelu kontaktoweg owprowadza do modelu dodatkowe efekty skali, które skutkują dodatkowym wzrostem twardości nominalnej. Jedną z przyczyn dodatkowej sztywności jest powstanie mikromentów na powierzchni kontaktowej, które oddziaływują na ciało już w warstwie przypowierzchniowej, w przeciwieństwie do klasycznego modelu kontaktowego, w którym warunek brzegowy ma postać M = 0.



Rysunek 6.11: Wpływ zastosowanego modelu kontaktowego na mikroobrót ψ w warstwach przypowierzchniowych: (a) zależność mikroobrotu od współrzędnej x<sub>2</sub>/a<sub>Hz</sub> dla stosunku α = 0.05 przy zastosowaniu modelu mikromechanicznego (linia przerywana) i klasycznego (linia ciągła), (b) różnica pomiędzy rozwiązaniami Δψ wgłąb półpłaszczyzny otrzymana MES (linia przerywana) oraz aproksymacja funkcjami eksponencjalnymi (linia ciągła), por. (6.11).

Następnie przeanalizowano wpływ zastosowanego modelu kontaktowego na rozwiązanie w warstwach przypowierzchniowych. Jak pokazano na rys. 6.9 przy zastosowaniu obu modeli kontaktowych otrzymane rozwiązanie dąży do klasycznego rozwiązania Hertza przy  $\alpha \rightarrow 0$ . W przypadku zastosowania klasycznego modelu kontaktowego, warunek brzegowy na mikromoment w strefie kontaktu ma postać M = 0, co odpowiada zerowaniu się składowej normalnej pochodnej mikroobrotu, tj.  $\partial \psi / \partial x_2 = 0$ . Natomiast mikromechaniczny model kontaktowy wymusza niezerowy mikromoment kontaktowy, a więc składowa normalna pochodnej mikroobrotu musi być różna od zera. Z powyższego wynika, że w warstwach przypowierzchniowych musi występować różnica w rozkładzie mikroobrotu  $\psi$ . Na rys. 6.11a przedstawiono tę różnicę dla stosunku  $\alpha = 0.05$ .

Różnica pomiędzy rozwiązaniami jest wyraźnie widoczna przy samej powierzchni (tzn. dla  $x_2/a_{\text{Hz}} > -0.1$ ) i zanika wraz z oddalaniem się od niej. Na rys. 6.11b przedstawiono różnicę pomiędzy rozwiązaniami, którą oznaczono  $\Delta \psi$ , dla wybranych dwóch odległości od osi symetrii  $x_1/a_{\text{Hz}}$  i trzech wartości stosunku  $\alpha$ . Kształt wykresu  $\Delta \psi$  przypomina wykres funkcji eksponencjalnej. Uzyskano bardzo dobre przybliżenie różnicy  $\Delta \psi$  za pomocą funkcji składającej się z dwóch eksponencjalnych o następującej postaci

$$\Delta \psi = A_{\rm sol} e^{x_2/L_{\rm sol}} + A_{\rm bl} e^{x_2/L_{\rm bl}}.$$
(6.11)

Pierwszy człon odpowiada za ogólną różnicę pomiędzy rozwiązaniami, a współczynniki  $A_{sol}$  oraz  $L_{sol}$  zależą od  $x_1/a_{Hz}$  i słabiej od stosunku  $\alpha$ . Natomiast drugi człon,  $A_{bl}e^{x_2/L_{bl}}$ , odpowiada za warstwę brzegową będącą rezultatem różnicy w warunkach brzegowych, którą omówiono powyżej. Parametr  $L_{bl}$  charakteryzuje grubość tej warstwy brzegowej, przy czym  $L_{bl} < L_{sol}$ . Wynik aproksymacji różnicy  $\Delta \psi$  za pomocą wyżej opisanych funkcji pokazano na rys. 6.11b linią ciągłą, a wyniki numeryczne linią przerywaną. Obliczenia, których wyniki przedstawiono na rys. 6.11 (oraz 6.12), uzyskano stosując znacząco zagęszczoną siatkę elementów skończonych. Rozmiar elementu skończonego w obszarze zagęszczonej siatki przyjęto wielkości około  $\ell/8$  dla  $\ell = 0.01a_{Hz}$ , a całkowita liczba niewiadomych w zagadnieniu MES wynosiła około trzech milionów.



**Rysunek 6.12:** Zależność znormalizowanej grubości warstwy brzegowej  $L_{\rm bl}/\ell$  od współrzędnej  $x_1/a_{\rm Hz}$ i stosunku  $\alpha$ .

Na rys. 6.12 pokazano jak zmienia się parametr  $L_{bl}$  opisujący grubość warstwy brzegowej wzdłuż powierzchni kontaktu. Uzyskany stosunek grubości warstwy brzegowej do długości charakterystycznej ciała Cosserat  $\ell$  jest bliski jedności prawie w całym zakresie powierzchni kontaktu, oprócz stosunku  $\alpha = 0.01$  dla  $x_1/a_{Hz} > 0.7$ . Otrzymane wyniki można odnieść do analizy warstw brzegowych przedstawionej w podrozdziale 6.1. W rozwiązaniu analitycznym ściskania pasma wyprowadzono wzór (6.9)<sub>1</sub> na grubość warstwy brzegowej  $L_{\psi}$ . W przypadku stosunkowo grubego pasma, co odpowiada rozważanemu zagadnieniu typu Hertza, stosunek  $\sqrt{\beta}L_{\psi}/\ell = 1$ , por. rys. 6.4. Dla wartości  $\beta = 1$ , którą przyjęto w obliczeniach numerycznych analizowanego zagadnienia typu Hertza, wynika że grubość warstwy brzegowej  $L_{bl} \approx L_{\psi}$ . Powyższa obserwacja potwierdza, że różnica w otrzymanym rozwiązaniu przy zastosowaniu mikromechanicznego i klasycznego modelu kontaktowego wynika z różnicy w warunkach brzegowych na mikroobrót  $\psi$ .

W niniejszym podrozdziale przeanalizowano efekty skali w zagadnieniu typu Hertza przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego. Powiązanie mikromomentów z klasycznym warunkami kontaktowymi spowodowało, że otrzymano niestandardowe rozkłady ciśnienia kontaktowego, co miało wpływ na obserwowane efekty skali. Przy zwiększającym się stosunku  $\alpha = a_{\text{Hz}}/\ell$ , co odpowiada względnemu zmniejszaniu siły wciskającej walec, rozkład ciśnienia kontaktowego zmienia się z w przybliżeniu eliptycznego, dla  $\alpha = 0.01$ , w nieregularny i rozszerzający się przy prawie stałym poziomie maksymalnego znormalizowanego ciśnienia  $p_n/p_{\text{Hz}}$ . Powyżej wartości  $\alpha = \alpha_{\text{mid}} = 0.8874$  następuje rozdzielenie się obszarów kontaktu. Opisana powyżej zmiana rozkładu ciśnienia kontaktowego spowodowała odwrotny efekt skali — zmniejszenie twardości przy zwiększającym się stosunku  $\alpha = a_{\text{Hz}}/\ell$  — odwrotnie niż w przypadku zastosowania klasycznego modelu kontaktowego.

Na koniec podrozdziału przeanalizowano warstwy brzegowe spowodowane warunkami brzegowymi wymuszonymi przez mikromechaniczny model kontaktowy. Otrzymane grubości warstwy brzegowej odpowiadają w przybliżeniu wartościom wyznaczonym analitycznie w podrozdziale 6.1.

## **Rozdział 7**

# Modelowanie efektów skali w zagadnieniu wciskania klina w monokryształ niklu

W tym rozdziale przedstawiono wyniki modelowania efektów skali w zagadnieniu wciskania klina w monokryształ niklu z użyciem modelu plastyczności kryształów bez efektów gradientowych oraz z uwzględnieniem efektów gradientowych w prawie umocnienia, które w większości zostały opublikowane w pracy Lewandowski i Stupkiewicz [86]. W podrozdziale 7.4 porównano otrzymane wyniki z wynikami eksperymentalnymi przedstawionymi w pracach [17, 132]. Opublikowane wyniki eksperymentalne dotyczą zagłębiania klinów o trzech różnych kątach rozwarcia: 60°, 90° oraz 120° w monokryształ niklu na około 185 µm. Dla danego zagłębienia przewidywania modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi nie różnią się znacząco od przewidywań klasycznego modelu, jednakże dobra zgodność z wynikami eksperymentalnymi potwierdza poprawność implementacji i kalibracji parametrów materiałowych modelu plastyczności kryształów dla niklu.

Modelowanie efektów skali przy zmniejszającym się zagłębianiu klina w monokryształ niklu przedstawiono w podrozdziale 7.5. Przeprowadzono serię symulacji ze zmniejszającym się zagłębieniem od 200 µm do 1 µm zachowując geometryczne podobieństwo klinów. Model plastyczności kryształów z prawem umocnienia wzbogaconym o efekty gradientowe poprawnie zasymulował teoretycznie przewidywane efekty skali przez fenomenologiczny model zaproponowany w pracy Nixa i Gao [106].

W podrozdziale 7.1 przedstawiono kalibrację parametrów materiałowych modelu plastyczności kryształów dla niklu opartą na danych eksperymentalnych dostępnych w literaturze, w głównej mierze niezależnych od eksperymentu wciskania klina. Następnie w podrozdziale 7.2 opisano model numeryczny stworzony i zastosowany do symulacji zagłębiania klina w monokryształ niklu płaskim stanie odkształcenia. Studium wpływu modelu regularyzacji warunków plastyczności oraz

wpływu współczynnika tarcia pomiędzy klinem a kryształem niklu przedstawiono odpowiednio w podrozdziałach 7.3.1 oraz 7.3.2.

#### 7.1 Kalibracja stałych materiałowych niklu

Długość charakterystyczna  $\ell$ , wprowadzona w modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi w podrozdziale 3.2.3, nie jest stała i zależy od aktualnego naprężenia płynięcia  $\tau$  i modułu umocnienia  $\theta$ , por. równanie (3.32). Pozostałe parametry definiujące  $\ell$  to moduł sprężystości ścinania na płaszczyznach poślizgu  $\mu$ , długość wektora Burgersa *b* i współczynnik *a*, których wartości dla danego kryształu są znane, por. tab. 7.1. Dlatego dokładne wyznaczenie parametrów materiałowych występujących w prawie umocnienia jest kluczowe do poprawnego modelowania efektów skali. Na podstawie dostępnych w literaturze inżynierii materiałowej danych eksperymentalnych dotyczących czystego niklu [42, 63] wyznaczono parametry materiałowe występujące w modelu plastyczności kryształów.

W prawie umocnienia typu Voce'a (3.29) występują cztery parametry. Początkowy moduł umocnienia  $\theta_0 = 240$  MPa oraz naprężenie płynięcia  $\tau_{max} = 150$  MPa zostały wyznaczone na podstawie krzywej eksperymentalnej zamieszczonej w pracy [63, Fig. 13b], która przedstawia zależność pomiędzy modułem umocnienia  $\theta$  i naprężeniem płynięcia  $\tau$  otrzymaną dla polikrystalicznego niklu. W szczególności w przybliżeniu prostoliniowa część krzywej eksperymentalnej dla pośrednich wartości  $\tau$  i  $\theta$ , która odpowiada tzw. III etapowi umocnienia, została przybliżona przez prostoliniową zależność reprezentującą prawo umocnienia Voce'a (3.29), por. rys. 7.1a.



**Rysunek 7.1:** Kalibracja prawa umocnienia typu Voce'a: (a) wyznaczenie parametrów  $\theta_0$  i  $\tau_{max}$  na podstawie danych eksperymentalnych podanych w pracy [63]; (b) porównanie krzywej umocnienia dostępnej w pracy [42] do krzywej otrzymanej po wyznaczeniu parametrów materiałowych ( $\tau_0 = 8$  MPa).

To podejście jest często stosowane [np. 64, 133] oraz ma swoje fizyczne uzasadnienie. Przede wszystkim etap III umocnienia jest dominujący w złożonych deformacjach plastycznych realizowanych przez poślizgi plastyczne na wielu systemach poślizgu, a etap I w tym przypadku ma znikome znaczenie [64]. Etap II umocnienia można wyraźnie zaobserwować w bardzo niskich temperaturach dla kryształów o bardzo wysokiej czystości [51]. Rozważane eksperymenty wciskania klina były przeprowadzone w temperaturach pokojowych, dlatego zdecydowano się na pominięcie etapu II umocnienia. Wyznaczona wartość  $\theta_0 = 240$  MPa zawiera się w zakresie  $1-2 \times \mu/300$ , typowych dla kryształów typu fcc [133], gdzie  $\mu = (c_{11} - c_{12} + c_{44})/3 = 74.6$  GPa oznacza moduł ścinania dla systemów poślizgu typu  $(1 \ 1 \ 1)\langle 1 \ \overline{1} \ 0 \rangle$ . Ponadto typowe wartości modułu umocnienia  $\theta_{II}$  w etapie II, który odpowiada wartości modułu umocnienia  $\theta_0$  w prawie Voce'a, zawierają się w przedziale od 195 MPa do 240 MPa [42].

Stały moduł  $\theta_{IV}$  charakteryzujący etap IV umocnienia, por. rys. 7.1a, przyjęto równy 0.05 $\tau_{max}$  = 7.5 MPa. Na podstawie dostępnych danych eksperymentalnych, szacuje się, że moduł  $\theta_{IV}$  przyjmuje wartość od 0.05 do 0.1  $\tau_{max}$  [64]. Zastosowane prawo umocnienia, uwzględniające etap IV umocnienia, poprawiło zachowanie się modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe w złożonych zagadnieniach brzegowych, w stosunku do prawa umocnienia uwzględniającego tylko etap III umocnienia zastosowanego w pracy [140]. Brak uwzględnienia etapu IV umocnienia w przypadku zagadnień w płaskim stanie odkształcenia skutkował problemami ze zbieżnością w modelowaniu efektów skali w podrozdziale 7.5. W przypadku pełnego modelu trójwymiarowego, zastosowanego w pracy [140], nie napotkano takich trudności. Być może jest to wynikiem tego, że w przypadku trójwymiarowym jest aż 12 systemów poślizgów, z których tylko 5 jest w stanie zrealizować każdą deformację plastyczną. Natomiast w płaskim stanie odkształcenia do wyboru są tylko trzy efektywne systemy poślizgu.

Ostatnim parametrem wymagającym kalibracji jest początkowe krytyczne naprężenie ścinające  $\tau_0$ . Wartość  $\tau_0$  wyznaczono na podstawie krzywej siła-zagłębienie dla klina o kącie rozwarcia równym 120°. W szczególności, starano się tak dobrać wartość  $\tau_0$ , żeby maksymalna siła otrzymana w wyniku symulacji numerycznej, jak najlepiej odpowiadała wartości eksperymentalnej. Zdecydowano się na wybór klina o kącie rozwarcia 120°, ponieważ w tym przypadku wpływ zaokrąglenia klina na otrzymywane wyniki numeryczne jest najmniejszy. Dla wartości  $\tau_0 = 8$  MPa maksymalna siła jest najbardziej zbliżona do wartości eksperymentalnej jak pokazano w podrozdziale 7.4, rys. 7.9. Ponadto wyznaczona wartość  $\tau_0 = 8$  MPa zawiera się w przedziale wartości początkowego naprężenia płynięcia obserwowanego eksperymentalnie [42], tj. od 4.5 MPa do 11.5 MPa. Początkowe naprężenie płynięcia  $\tau_0 = 8$  MPa użyto we wszystkich obliczeniach numerycznych.

Rys. 7.1b przedstawia zależność naprężenia płynięcia  $\tau$  od efektywnego poślizgu plastycznego  $\gamma$ , por. równanie (3.30), dla wyznaczonych parametrów materiałowych oraz krzywą eksperymentalną w temperaturze pokojowej przedstawioną w pracy [42]. Na krzywej eksperymentalnej można zauważyć etap I umocnienia, który występuje do wartości poślizgu plastycznego równego około 0.1. Prawo Voce'a pomija etap I umocnienia, który i tak nie występuje w przypadku deformacji plastycznej realizowanej na wielu systemach poślizgu, co zostało zaznaczone wcześniej.

Parametry materiałowe użyte w symulacjach numerycznych zestawiono w tab. 7.1. Stałe sprężystości  $c_{ij}$  dla niklu przyjęto z literatury [49]. Parametry występujące w prawie umocnienia zostały wyznaczone na podstawie danych eksperymentalnych, jak opisano powyżej. Współczynnik umocnienia utajonego przyjęto q = 1.4. Parametr *a* występujący w równaniu (3.33) przyjęto równy 0.33. Typowe wartości parametru *a* dla kryształów *fcc* spotykane w literaturze przyjmują wartości z zakresu od 0.30 do 0.36 [133]. Moduł ścinania dla systemów poślizgu typu  $(111)\langle 1\overline{10}\rangle$  przyjęto na podstawie stałych sprężystości,  $\mu = (c_{11} - c_{12} + c_{44})/3$ . Ostatnim parametrem jest długość wektora Burgersa b = 0.248 nm, która jest stałą krystalograficzną.

<i>c</i> <sub>11</sub>	<i>c</i> <sub>12</sub>	C44	$ au_0$	$ au_{max}$	$\theta_0$	$\theta_{IV}$	q	а	μ	$b_1$
[GPa]	[GPa]	[GPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]			[GPa]	[nm]
246.5	147.3	124.7	8	150	240	7.5	1.4	0.33	74.6	0.248

Tabela 7.1: Parametry materiałowe dla niklu.

## 7.2 Model obliczeniowy zagadnienia wciskania klina

Celem stworzonego modelu obliczeniowego było przeprowadzenie symulacji eksperymentu zagłębiania klina wykonanego z węglika wolframu w monokryształ niklu, których wyniki zostały przedstawione w pracach [17, 132]. Eksperyment został zaprojektowany tak, aby wymusić deformację plastyczną w płaskim stanie odkształcenia. Udało się to osiągnąć poprzez obciążenie klinem, którego krawędź była równoległa do kierunku krystalograficznego (1 1 0). W ten sposób deformacja plastyczna, zgodnie z przewidywaniami Rice'a [128], ma miejsce w płaszczyźnie o normalnej (1 1 0), co potwierdzają wyniki pomiarów obrotu sieci krystalograficznej z tej płaszczyzny metodą dyfrakcji elektronowej (EBSD) zaprezentowane w pracy [77]. Dzięki temu możliwe było przeprowadzenie obliczeń zredukowanym do płaskiego stanu odkształcenia modelem plastyczności kryształów przedstawionym w podrozdziale 3.2.4, co znacząco redukuje koszt numeryczny w stosunku do pełnych obliczeń trójwymiarowych.

Wykorzystując symetrię rozpatrywanego zagadnienia, zamodelowano tylko połowę próbki monokryształu niklu uwzględniając odpowiednie warunki brzegowe na osi symetrii. Zablokowano przemieszczenie poziome oraz powiązano przyrosty poślizgów plastycznych na efektywnych systemach poślizgu A = 1,3 oraz zablokowano przyrosty poślizgów plastycznych na systemie poślizgu A = 2, por. podrozdział 3.2.4. Występowanie w sposób jawny przyrostów poślizgów plastycznych wynika z przyjętego sposobu implementacji modelu plastyczności kryształów uwzględniającego efekty gradientowe, który został opisany w podrozdziale 3.2.6. Parametry materiałowe przyjęto takie jak zestawione w tab. 7.1, które uzyskano w wyniku kalibracji opisanej w podrozdziale 7.1.

Klin z węglika wolframu zamodelowano jako ciało sztywne. Ostrą krawędź klina zastąpiono zaokrągleniem, którego promień r przyjęto jako 1/10 zagłębienia klina  $h_{max}$ , co przy zagłębieniu

zastosowanym w eksperymentach [17, 132] daje  $r = 18.5 \,\mu\text{m}$ . Był to najmniejszy stosunek  $r/h_{max}$ , dla którego udało się otrzymać wyniki dla wszystkich trzech rozpatrywanych kątów rozwarcia klina. W rzeczywistości promień wyokrąglenia klina użytego w eksperymentach był zdecydowanie mniejszy, bo wynosił tylko 100 nm [77]. Tym niemniej zastosowany promień wyokrąglenia r jest zdecydowanie mniejszy od tego, który został użyty w symulacjach numerycznych w pracy [17], gdzie zastosowano promień wyokrąglenia  $r = 0.5h_{max}$ . Stosunek  $r/h_{max} = 0.1$  zastosowano we wszystkich symulacjach numerycznych, w szczególności w modelowaniu efektów skali przedstawionym w podrozdziale 7.5 w celu zachowania geometrycznego podobieństwa.

Do opisu oddziaływań kontaktowych pomiędzy sztywnym klinem a monokryształem niklu zastosowano sformułowanie kontaktowe bazujące na sformułowaniu typu *mortar*, której szczegóły teoretyczne i sposób implementacji w MES opisano w podrozdziale 4.2.3. Zdecydowano się na to podejście, ponieważ klasyczne sformułowanie *node-to-segment* okazało się nieskuteczne w przypadku rozpatrywanego zagadnienia. Kontakt kolejnych węzłów z ciałem sztywnym skutkował nagłym skokiem w naprężeniu na powierzchni kontaktowej, co przekładało się na problemy ze zbieżnością modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe. Sformułowanie typu *mortar* w sposób bardziej płynny przekazuje naprężenia z klina na kryształ, co skutkowało znaczącym poprawieniem zbieżności w rozpatrywanym zagadnieniu. Współczynnik tarcia pomiędzy klinem a kryształem przyjęto f = 0.5. Wybór współczynnika tarcia poprzedziła analiza wpływu wielkości współczynnika tarcia na otrzymywane wyniki, której rezultaty zaprezentowano w podrozdziale 7.3.2.

Po analizie wpływu regularyzacji warunków Schmida na otrzymywane wyniki i zbieżność, której wyniki przedstawiono w podrozdziale 7.3.1, wybrano regularyzację typu *rate-dependent*. Wykładnik w funkcji określającej prędkość poślizgu, por. (3.47), przyjęto m = 40, taki sam dla wszystkich systemów poślizgu, referencyjną prędkość poślizg  $\dot{\gamma}_0 = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  oraz całkowity czas zagłębiania klina t = 100 s. Przy powyższych parametrach otrzymano zadowalający kompromis pomiędzy zbieżnością procedury całkowania równań konstytutywnych a wpływem lepkości na maksymalną siłę w trakcie zagłębiania klina.



**Rysunek 7.2:** Siatka elementów skończonych użyta w modelu obliczeniowym indentacji klinem o kącie rozwarcia 90°.



**Rysunek 7.3:** Efektywny poślizg plastyczny  $\gamma$  po odciążeniu w przypadku zagłębienia  $h_{max} = 185 \,\mu\text{m}$  i kąta rozwarcia klina 90° w zawężonym obszarze  $10h_{max} \times 10h_{max}$ .

Siatkę elementów skończonych użytą w obliczeniach dla kąta rozwarcia klina 90° przedstawiono na rys. 7.2. Rozmiar obszaru najbardziej zagęszczonej siatki elementów skończonych oraz rozmiar próbki zależy od danego kąta rozwarcia klina  $\alpha$  i zagłębienia  $h_{max}$ . Najbardziej zagęszczona siatka obejmuje kwadrat o boku  $B = 1.5 \times \max(h_{max}; d_{geom})$ , gdzie  $d_{geom}$  oznacza szerokość kontaktu wynikającą z czystych rozważań geometrycznych danych zależnością

$$d_{geom} = \left( r \left( \frac{1}{\sin(\alpha/2)} - 1 \right) + h_{max} \right) \cdot \tan\left(\frac{\alpha}{2}\right).$$
(7.1)

Obszar kwadratowy, o tak wyznaczonym boku *B*, podzielono siatką  $72 \times 72$  elementów skończonych, a wielkość całej próbki przyjęto  $18B \times 18B$ . Siatka wraz z oddalaniem się od strefy kontaktu jest rozrzedzana, tak by zmniejszyć koszt numeryczny otrzymanego rozwiązania. Jednocześnie przyjęty całkowity rozmiar próbki kryształu jest na tyle duży, aby wpływ warunków brzegowych na spodzie i zewnętrznej krawędzi próbki na wyniki otrzymane w strefie dużych deformacji plastycznych był pomijalny. Na rys. 7.3 przedstawiono mapę konturową efektywnego poślizgu plastycznego w przypadku kąta rozwarcia  $90^\circ$ , która potwierdza, że zdecydowana większość deformacji plastycznej ma miejsce w strefie zagęszczonej siatki elementów skończonych.

## 7.3 Studium wpływu wybranych parametrów na otrzymane wyniki

#### 7.3.1 Regularyzacja warunku plastyczności

W literaturze wyróżnia się dwa dominujące podejścia do problemu niejednoznaczności w wyborze zbioru aktywnych systemów poślizgu, które opisano w podrozdziale 3.2.5. Z punktu widzenia planowanych symulacji numerycznych przeanalizowano wpływ zastosowanej regularyzacji oraz wpływ wykładników w obu regularyzacjach na otrzymywane wyniki. Do tego celu wybrano przypadek wciskania klina o kącie rozwarcia równym 90° na głębokość  $h_{max} = 185 \,\mu\text{m}$ . Przeprowadzono serię symulacji numerycznych z użyciem wykładnika m = 20, 40, 100 w funkcji prędkości poślizgu (3.47) dla regularyzacji typu *rate-dependent* oraz z wykładnikiem n = 6, 10, 20 w przypadku regularyzacji typu *rate-independent*, por. (3.48). Zastosowano model plastyczności kryształów wzbogacony o efekty gradientowe z parametrami materiałowymi zestawionymi w tab. 7.1, współczynnik tarcia w sformułowaniu kontaktowym typu *mortar* przyjęto f = 0.5.



**Rysunek 7.4:** Krzywe siła–zagłębienie dla klina o kącie rozwarcia 90°: (a) porównanie krzywych otrzymanych przy zastosowaniu regularyzacji typu *rate-dependent* i *rate-independent* z krzywą eksperymentalną; (b) wpływ wykładnika *m* w regularyzacji typu *rate-dependent*; (c) wpływ wykładnika *n* w regularyzacji typu *rate-independent*.

W wyniku przeprowadzonych symulacji wykazano, że wpływ metody regularyzacji oraz rozważanych zakresów wykładników *m* oraz *n* na otrzymywane wyniki jest niewielki. Na rys. 7.4 przedstawiono wyniki studium na przykładzie krzywych siła-zagłębienie w przypadku analizowanych metod regularyzacji oraz wykładników. Różnice pomiędzy poszczególnymi wynikami są pomijalnie małe. Taki sam wniosek można wyciągnąć z porównania przebiegu kąta obrotu sieci krystalicznej wzdłuż przekroju poziomego na ustalonej głębokości poniżej krawędzi klina, por. podrozdział 7.4, które przedstawiono na rys. 7.5.

Z uwagi na fakt, że wyniki otrzymane przy regularyzacji typu *rate-dependent* i *rate-independent* nie różnią się od siebie znacząco, postanowiono w obliczeniach używać modelu typu *rate-dependent*. Jest to podyktowane tym, że w przypadku modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe zredukowanego do płaskiego stanu odkształcenia, model typu *rate-dependent* zapewniał lepszą zbieżność. Różnica ta była szczególnie wyraźna w przypadku badania efektów skali, kiedy próbka i zagłębienie ulegały zmniejszaniu, co przekładało się na większy udział efektów gradientowych w prawie umocnienia. Warto zauważyć, że takich problemów nie odnotowano w pracy [140], gdzie analizowano efekty skali z regularyzacją typu *rate-independent* w przypadku pełnego modelu trójwymiarowego. We wszystkich analizach przedstawionych w niniejszej rozprawie stosowano model typu *rate-dependent* o wykładniku m = 40.



Rysunek 7.5: Obrót sieci krystalicznej ω w przypadku klina o kącie rozwarcia 90°, por. rys. 7.11: (a) porównanie krzywych otrzymanych przy zastosowaniu regularyzacji typu *rate-dependent* i *rate-independent* z krzywą eksperymentalną; (b) wpływ wykładnika m w regularyzacji typu *rate-dependent*; (c) wpływ wykładnika n w regularyzacji typu *rate-independent*.

#### 7.3.2 Współczynnik tarcia

Przeanalizowano wpływ współczynnika tarcia pomiędzy klinem a kryształem niklu na otrzymywane wyniki dla czterech wartości współczynnika tarcia f: 0.1, 0.3, 0.5 i 0.7. Do analizy porównawczej wybrano przypadek klina o kącie rozwarcia 90° i zagłębienie  $h_{max} = 185 \,\mu\text{m}$ , co odpowiada wartości użytej w eksperymencie, por. podrozdział 7.4. Zastosowano model plastyczności kryształów wzbogacony o efekty gradientowe z regularyzacją warunków Schmida typu *rate-dependent*. Zdecydowano się na model ze wzbogaceniem gradientowym z uwagi na możliwy wpływ współczynnika tarcia na wystąpienie dodatkowych efektów umocnienia w warstwie brzegowej w wyniku przylegania klina do kryształu.

Na rys. 7.6a przedstawiono wpływ współczynnika tarcia na krzywe siła–zagłębienie. W globalnej odpowiedzi wpływ współczynnika tarcia jest pomijalny. Jednak porównując deformację kryształu bezpośrednio pod klinem, por. rys. 7.7, wpływ współczynnika tarcia jest znaczny. W przypadku f = 0.1 siatka elementów skończonych jest silnie zdeformowana w pobliżu zaokrąglenia krawędzi klina, co wskazuje na duży poślizg kryształu wzdłuż powierzchni kontaktu. Wraz ze zwiększającym się współczynnikiem tarcia zaczyna dominować przyleganie kryształu do wgłębnika. Dla f = 0.5i f = 0.7 deformacja w bezpośrednim otoczeniu klina jest identyczna, dlatego deformacja dla f = 0.7 nie została pokazana jako nic nie wnosząca. Powyższe spostrzeżenia potwierdzają mapy konturowe kąta obrotu sieci krystalicznej  $\omega$  przedstawione na rys. 7.8 oraz szczegółowy przebieg  $\omega$  wzdłuż poziomej linii pod wgłębnikiem w konfiguracji odkształconej przedstawiony na rys. 7.6b. Linie oraz mapy konturowe przedstawiające kąt obrotu sieci krystalicznej dla f = 0.5i 0.7 pokrywają się. Natomiast dla f = 0.1 można zauważyć wyraźne zaburzenie w rozkładzie



**Rysunek 7.6:** Wpływ współczynnika tarcia f na: (a) krzywą siła–zagłębienie dla klina o kącie rozwarcia 90°; (b) obrót sieci krystalicznej  $\omega$  wzdłuż poziomej linii poniżej wgłębnika, por. rys. 7.11b.



**Rysunek 7.7:** Zdeformowana siatka elementów skończonych w bezpośrednim otoczeniu wgłębnika dla (a) f = 0.1; (b) f = 0.3 i (c) f = 0.5.

 $\omega$  na rys. 7.8 i 7.6b.

W wyniku analizy porównawczej stwierdzono niewielkie różnice w wynikach dla f w zakresie od 0.3 do 0.7, ze szczególnym naciskiem na właściwie brak różnic w przypadku dwóch największych współczynników tarcia. Ponadto należy zaznaczyć, że wartość f = 0.1 jest mało realistyczna. We wszystkich dalszych obliczeniach w niniejszej rozprawie używano współczynnika tarcia f = 0.5.



**Rysunek 7.8:** Wpływ współczynnika tarcia f na kąt obrotu sieci krystalicznej  $\omega$ .

## 7.4 Porównanie wyników symulacji numerycznej i eksperymentów

#### 7.4.1 Obroty sieci krystalicznej

W tym i następnym podrozdziale przedstawiono wyniki symulacji numerycznych wciskania klinów o kącie rozwarcia 60°, 90° i 120° w monokryształ niklu i porównano otrzymane rezultaty z wynikami eksperymentalnymi przedstawionymi w pracach [17, 132]. Szczegóły stworzonego modelu numerycznego przedstawiono w podrozdziale 7.2. W tym podrozdziale główny nacisk położono na porównanie wyników symulacji z danymi eksperymentalnymi przedstawionymi w pracy [17]. W pracy [17] analizowano kąt obrotu sieci krystalicznej  $\omega$  przy pomocy dyfrakcji elektronowej (EBSD) w przypadku trzech różnych kątów rozwarcia klina. Oprócz tego w pracy [17] przedstawiono krzywe siła-zagłębienie, które także stanowią cenne dane eksperymentalne. Ponadto autorzy przedstawili wyniki symulacji klasycznym modelem plastyczności kryształów, które nie będą analizowane w niniejszej rozprawie.

Autorzy podali maksymalne zagłębienie  $h_{max}$  zastosowane w eksperymencie jako 200 µm. Jednak po przeanalizowaniu krzywych siła-zagłębienie zaobserwowano, por. rys. 7.9, że sztywność w trakcie odciążania jest zbyt mała. Prawdopodobną przyczyną zbyt małej sztywności jest podatność aparatury badawczej. Zakładając, że rzeczywista sztywność kryształu jest zbliżona do tej otrzymanej w wyniku analizy numerycznej dla przypadku wciskania klina o kącie rozwarcia 120°, skorygowano wartości  $h_{max} = 200 \,\mu\text{m}$  do 185–190 µm. Wyniki eksperymentalne przed i po korekcie dla wszystkich trzech analizowanych kątów rozwarcia klina przedstawiono na rys. 7.9. Wszystkie obliczenia, których wyniki były porównywane z wynikami eksperymentalnymi, przeprowadzono przy zagłębieniu 185 µm niezależnie od kąta rozwarcia klina.

Porównanie otrzymanych w wyniku symulacji numerycznych krzywych siła-zagłębienie z wynikami eksperymentalnymi przedstawia rys. 7.9. Tak jak opisano to w podrozdziale 7.1, początkowe naprężenie płynięcia  $\tau_0$  zostało wyznaczone na podstawie krzywej siła-zagłębienie dla kąta 120°.



**Rysunek 7.9:** Krzywe siła–zagłębienie otrzymane z zastosowaniem modelu plastyczności kryształów bez oraz z efektami gradientowymi porównano ze skorygowanymi danymi eksperymentalnymi z pracy [17]. Pokazano także krzywe eksperymentalne bez korekty aby zilustrować różnicę.

Krzywe dla kąta 60° i 90° zostały uzyskane dla tych samych parametrów materiałowych, a więc są to przewidywania modelu. Otrzymane krzywe potwierdzają poprawność wyznaczonych parametrów materiałowych.

Na rys. 7.9 pokazano wyniki numeryczne zarówno uwzględniające efekty gradientowe, jak i przy użyciu klasycznego modelu plastyczności kryształów. Uwzględniając efekty gradientowe różnica w maksymalnej sile przy zagłębieniu  $h_{max} = 185 \,\mu\text{m}$  jest niewielka i wynosi około 2.5%. Biorąc pod uwagę, że analizowane zagłębienie jest dość duże, niewielka różnica przy zastosowaniu modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe jest uzasadniona. Efekty skali spodziewane są przy dużo mniejszym zagłębieniu, np. w przypadku wciskania klina w monokryształ glinu, efekty skali w twardości zaczynają być zauważalne dopiero przy zagłębieniach mniejszych niż 10 µm [15]. Podobnie w przypadku trójwymiarowym przy pomiarze twardości metodą Berkovicha lub typu Brinella, efekty skali były odnotowywane przy zagłębieniach co najmniej rząd mniejszych [95, 143] niż analizowane w tym podrozdziale zagłębienie  $h_{max} = 185 \,\mu\text{m}$ . Analizę efektów skali na bazie zbudowanego modelu numerycznego przedstawiono w podrozdziale 7.5. Przeprowadzone studium potwierdza, że efekty skali zaczynają być widoczne przy zagłębieniach poniżej 50 µm.

Na rys. 7.10 przedstawiono odkształconą siatkę elementów skończonych w bezpośrednim sąsiedztwie klina po odciążeniu. Wrysowane kontury wgłębników ilustrują kąt rozwarcia oraz stosunek promienia wyokrąglenia krawędzi klina do zagłębienia  $r/h_{max} = 0.1$ . W szczególności rys. 7.10c pokazuje, że dla kąta rozwarcia 120° wpływ zaokrąglenia na deformację kryształu jest najmniejszy i dlatego właśnie ten przypadek został użyty do kalibracji początkowego naprężenia płynięcia  $\tau_0$ . W przypadku klina o kącie rozwarcia 60°, od razu można zauważyć duże deformacje plastyczne oraz znaczny wpływ zaokrąglenia na geometrię klina.

Na rys. 7.11 przedstawiono porównanie obrotów sieci krystalicznej  $\omega$  otrzymanych w wyniku



Rysunek 7.10: Odkształcona siatka elementów skończonych w otoczeniu klina.

symulacji do wyników eksperymentalnych otrzymanych metodą dyfrakcji elektronowej (EBSD) w pracy [17]. Pole obrotu sieci krystalicznej wyznaczono z wyników MES jako  $\omega \equiv \omega_3 = \arcsin(R_{21}^*)$ , gdzie  $\mathbf{R}^* = \mathbf{F}^*(\mathbf{U}^e)^{-1}$ , por. (3.20). Otrzymane numerycznie mapy konturowe obrotów sieci krystalicznej dość dobrze oddają główne cechy i wartości obserwowane eksperymentalnie. Ponadto porównano przebieg  $\omega$  wzdłuż poziomej linii w konfiguracji odkształconej z wynikami przedstawionymi w pracy [17]. Niestety w cytowanej pracy nie podano dokładnego położenia linii, wzdłuż której dokonano pomiaru. W związku z powyższym położenie poziomej linii prezentującej wyniki numeryczne dobrano tak, by uzyskać najlepszą zgodność z wynikami eksperymentalnymi, a jej położenie wskazano cienką linią na mapie konturowej wyników numerycznych. Ponownie kształt i wartości przebiegu kąta obrotu są więcej niż zadowalające, a różnica pomiędzy modelem plastyczności kryształów bez i z uwzględnieniem efektów gradientowych jest niewielka. Na koniec należy nadmienić, że zaburzenia  $\omega$  widoczne na liniach przebiegu otrzymanych eksperymentalnie są wynikiem niejednorodności deformacji plastycznej, której fenomenologiczny model plastyczności kryształów nie jest w stanie odwzorować.

#### 7.4.2 Gęstość dyslokacji geometrycznie niezbędnych

W pracy [132] otrzymane eksperymentalnie obroty sieci krystalicznej [17] poddano dodatkowej analizie. Zostały wyznaczone pochodne obrotów sieci krystalicznej względem zmiennych przestrzennych, które wykorzystano do wyznaczenia składowych tensora gęstości dyslokacji  $\alpha$  (tensor Nye'a). Sposób wyliczenia składowych tensora Nye'a na podstawie krzywizn (pochodnych kątów obrotu sieci krystalicznej) oraz transformacja do układu odkształconego została szczegółowo omówiona w pracy [76]. Na podstawie tensora Nye'a  $\alpha$  można wyznaczyć wektor  $\mathbf{B} = \alpha \mathbf{n}$  nazywany w literaturze inżynierii materiałowej *net Burgers vector density*. Norma wektora  $\mathbf{B}$  jest utożsamiana z sumą długości wszystkich wektorów Burgersa dyslokacji geometrycznie niezbędnych, przecinających płaszczyznę o normalnej  $\mathbf{n}$  odniesioną do jednostki powierzchni. Założony w zredukowanym modelu plastyczności kryształów płaski stan odkształcenia dotyczy również odkształceń



**Rysunek 7.11:** Mapy obrotu sieci krystalicznej (środkowa kolumna) otrzymane w symulacji numerycznej z zastosowaniem modelu plastyczności kryształów bez efektów gradientowych porównane do wyników eksperymentalnych z pracy [17] (lewa kolumna). W prawej kolumnie przedstawiono przebieg  $\omega$  wzdłuż poziomej linii zaznaczonej na mapach w środkowej kolumnie. Współrzędne  $x_i$  są znormalizowane przez zagłębienie  $h_{max}$  (oznaczone *a* w pracy [17]).



Rysunek 7.12: Rozkład dyslokacji geometrycznie niezbędnych (GNDs) w otoczeniu klina 90°: (a) długość wektora |B| przedstawiona w pracy [132]; (b) norma tensora gęstości dyslokacji ||G|| przewidziana przez model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi.

plastycznych, tj. składowa części plastycznej gradientu prędkości  $L_{33}^p = 0$ , co wynika wprost z założonej kinematyki, por. tab. 3.2 i 3.3. Biorąc pod uwagę powyższe oraz pomijając wpływ odkształceń sprężystych, tensor Nye'a ma tylko dwie niezerowe składowe  $\alpha_{13} \approx -\partial \omega_3/\partial x_1$  oraz  $\alpha_{23} \approx -\partial \omega_3/\partial x_2$  [76, 132]. W płaszczyźnie deformacji plastycznej  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$ , wektor  $\mathbf{B} = (\alpha_{13}, \alpha_{23}, 0)$  w pełni odzwierciedla niekompatybilność deformacji plastycznej oraz gęstość dyslokacji geometrycznie niezbędnych (w płaskim stanie odkształcenia  $|\mathbf{B}| = ||\boldsymbol{\alpha}||$ ). Na rys. 7.12a przedstawiono mapę konturową  $|\mathbf{B}|$  zaczerpniętą z pracy [132], którą wyznaczono na podstawie danych eksperymentalnych dla klina 90°.

Odpowiednikiem tensora Nye'a  $\alpha$  w skończonych deformacjach jest tensor gęstości dyslokacji **G** [13]. Mapę konturową normy tensora **G** będącą wynikiem symulacji dla klina 90° przedstawiono na rys. 7.12b. Na marginesie należy nadmienić, że model numeryczny nadal wykorzystuje warunki symetrii pozwalające na modelowanie tylko połowy kryształu niklu, a wyniki dla  $x_1 < 0$ są reprodukowane na podstawie dostępnych wyników dla  $x_1 \ge 0$ . Zgodność z wynikami eksperymentalnymi przedstawionymi na rys. 7.12a jest zadowalająca. Zarówno rozkład, jak i rząd wielkości gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych otrzymany w wyniku symulacji jest porównywalny do wyników eksperymentalnych. Na rys. 7.12a po raz kolejny można zaobserwować niejednorodność deformacji plastycznej, której fenomenologiczny model plastyczności kryształów nie jest w stanie odwzorować. Uzyskana w symulacji wartość gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych wyrażona przez ||**G**|| jest niedoszacowana z powodu niewystarczającej gęstości siatki elementów skończonych oraz z powodu niejednorodności deformacji plastycznej. Tym niemniej największe wartości gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych w obu przypadkach można zaobserwować na osi symetrii, gdzie następuje gwałtowna zmiana kąta obrotu sieci krystalicznej. Tensor gęstości dyslokacji **G** wyznaczono całkując **G**, czyli plastycznie konwekcyjną pochodną **G**, por. równanie (3.36). Wielkość **G** jest elementem modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe i jest używana do wyznaczenia efektywnego gradientu prędkości poślizgu  $\dot{\chi}$  według zależności (3.35).

W pracy [132] wyznaczono również wielkość  $\beta = \arctan(\alpha'_{23}/\alpha'_{13})$  charakteryzującą kierunek wektora **B**, gdzie składowe  $\alpha'_{ij}$  odnoszą się do pośredniej, lokalnej konfiguracji odpowiadającej odkształconej plastycznie sieci krystalicznej. Wyznaczone w konfiguracji odkształconej składowe tensora Nye'a  $\alpha_{ij}$  należy obrócić o kąt obrotu sieci krystalicznej zgodnie z zasadami rachunku tensorowego. Szczegóły transformacji można znaleźć w pracy [132]. Następnie tak wyznaczone pole  $\beta$  zostało wygładzone, aby móc przeanalizować granicę pomiędzy strefami o dominującej orientacji, która jest powiązana z aktywnością dominujących w danej strefie systemów poślizgu. Na rys. 7.13a przedstawiono, otrzymaną w wyniku eksperymentu i wyżej opisanej obróbki, mapę orientacji  $\beta$  dla klina 90°. Natomiast w przypadku skończonych deformacji, kierunek wektora **B** wyznaczają dwie, niezerowe składowe tensora dyslokacji **G**, tj.  $\beta = \arctan(G_{23}/G_{13})$ . Wyznaczone w ten sposób pole orientacji wektora **B**, uzyskane w obliczeniach, przedstawiono na rys. 7.13b.



**Rysunek 7.13:** Orientacja wektora **B** wyrażona przez kąt  $\beta$  w przypadku klina 90°: (a) wyniki eksperymentalne przedstawione w pracy [132]; (b) wyniki symulacji numerycznej.

Dokładniejsze, jakościowe porównanie wyników numerycznych i eksperymentalnych  $\beta$  przedstawiono na rys. 7.14. Przebieg zmienności kąta  $\beta$  przedstawiono wzdłuż łuków kołowych, których początek leży na osi symetrii (kąt odniesienia  $\theta = -90^{\circ}$ ), a koniec na powierzchni odkształconego kryształu ( $\theta \approx 0^{\circ}$ ). Środek łuku kołowego leży na przecięciu osi symetrii i powierzchni nieodkształconego kryształu, por. rys. 7.13. Najmniejszą zgodność w przebiegu  $\beta$  otrzymano w pobliżu krawędzi klina, tj. dla promieni  $R = 1.5 h_{max}$  i  $R = 2 h_{max}$ . Prawdopodobną przyczyną tej rozbieżności jest promień wyokrąglenia krawędzi klina, który w symulacji jest dwa rzędy wielkości większy niż ten rzeczywiście zastosowany w eksperymencie. W przypadku większej odległości od krawędzi klina, dla  $R = 2.5 h_{max}$  i  $R = 3 h_{max}$ , otrzymane wyniki są zgodne z wynikami eksperymentalnymi, co może stanowić potwierdzenie tezy o wpływie zaokrąglenia na wyniki w bezpośrednim sąsiedztwie krawędzi klina. Ponadto, po raz kolejny, wpływ zastosowania modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi był niewielki na otrzymywane wyniki przy analizowanym zagłębieniu  $h_{max} = 185 \,\mu$ m.



**Rysunek 7.14:** Porównanie przebiegu kąta  $\beta$  wzdłuż łuków kołowych o promieniu *R* dla klina 90° otrzymanych eksperymentalnie [132] i wyników numerycznych.

Podsumowując, przedstawione w tym i poprzednim podrozdziale wyniki symulacji wciskania klina w monokryształ niklu przy zastosowaniu modelu plastyczności kryształów z i bez efektów gradientowych wykazywały dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi. Porównano krzywe siła-zagłębienie, rozkład kąta obrotu sieci krystalicznej i wskaźników niekompatybilności deformacji plastycznej. W pracach [17, 126, 132] także modelowano zagadnienie wciskania klina, jednak zgodność uzyskana przez autorów była gorsza od tej zaprezentowanej w niniejszej rozprawie i pracy Lewandowski i Stupkiewicz [86]. Prawdopodobną przyczyną otrzymania tak dobrej zgodności była konsystentna redukcja modelu trójwymiarowego do płaskiego stanu odkształcenia uwzględniająca krystalograficzne pochodzenie efektywnych systemów poślizgu nie tylko w warunku plastyczności, ale także w prawie umocnienia, por. podrozdział 3.2.4. Dodatkowym atutem przedstawionych

wyników jest staranna kalibracja stałych materiałowych niklu, por. podrozdział 7.1, która jest kluczowa do poprawnego zachowania się modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe. Gwoli przypomnienia, zmienna długość charakterystyczna  $\ell$  występująca w modelu zależy bezpośrednio od modułu umocnienia  $\theta$  i aktualnego naprężenia płynięcia  $\tau$ , por. podrozdział 3.2.3. Ponadto efektywna implementacja modelu w systemie MES *AceFEM/AceGen* i zastosowanie modelu kontaktowego, bazującego na sformułowaniu *mortar*, pozwoliła na zastosowanie gęstej siatki elementów skończonych i stosunkowo małego promienia wyokrąglenia.

### 7.5 Efekty skali

Zagłębienie  $h_{max} = 185 \,\mu$ m, którego używano w eksperymencie jest stosunkowo duże, przez co efekty skali są właściwie pomijalne. Potwierdzają to niewielkie różnice w otrzymanych wynikach numerycznych przy zastosowaniu modelu plastyczności kryształów z i bez efektów gradientowych, por. podrozdział 7.4. Z tego powodu w tym podrozdziale zostaną przedstawione przewidywane efekty skali wymiarowej przy coraz mniejszym zagłębianiu klina w monokryształ niklu, które otrzymano przy zastosowaniu modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty gradientowe. Niestety otrzymanych wyników nie będzie można odnieść do wyników eksperymentalnych, ponieważ nie przeprowadzono takich badań dla monokryształu niklu. Jedyna praca, w której badano eksperymentalnie efekty skali w płaskim stanie odkształcenia, dotyczy monokryształu glinu [15]. Przedstawiono w niej szereg krzywych siła-zagłębienie tylko dla jednego z trzech analizowanych kątów rozwarcia klina. Pozostałe wyniki dotyczące twardości są wynikiem nie tylko eksperymentu, ale także pewnego modelu analitycznego, który szacuje szerokość kontaktu, bazując na klasycznym rozwiązaniu znanym z teorii sprężystości. Niestety to oraz fakt, że nie podano żadnych danych dotyczących monokryształu glinu (jak chociażby stopień czystości) utrudnia poprawną identyfikację parametrów materiałowych i odniesienie się do wyników eksperymentalnych.

W celu przebadania efektów skali przeprowadzono serię symulacji wciskania klina w monokryształ niklu dla zagłębień  $h_{max}$  od 200 µm do 1 µm i dla trzech kątów rozwarcia klina 60°, 90° i 120°. Jak już wspomniano w podrozdziale 7.2, stosunek promienia wyokrąglenia klina do zagłębienia jest stały i wynosi  $r/h_{max} = 0.1$ . Podobnie rozmiar próbki, a przez to siatka elementów skończonych, jest skalowana liniowo z analizowanym zagłębieniem  $h_{max}$ . Dzięki powyższym zabiegom zachowane jest samopodobieństwo geometryczne wszystkich symulacji dla klina o zadanym kącie rozwarcia. Długość charakterystyczną  $l_h$  występującą w równaniu (3.53), uśredniającym przyrosty poślizgów plastycznych, przyjęto równą rozmiarowi elementu skończonego  $h_{el}$ . W ten sposób długość charakterystyczna  $l_h$  nie jest parametrem materiałowym, lecz parametrem numerycznym, rzeczywiście odpowiadającym za uśrednianie przyrostów poślizgów plastycznych w obrębie najbliższego sąsiedztwa danego elementu skończonego. Porównanie z podejściem, w którym  $l_h$  jest stałą materiałową niezależną od wielkości elementu skończonego, przedstawiono w podrozdziale 7.5.1.



**Rysunek 7.15:** Wpływ zagłębienia  $h_{max}$  na znormalizowane krzywe siła–zagłębienie.

Znormalizowane krzywe siła-zagłębienie przedstawiono na rys. 7.15. Zarówno siłę P, jak i aktualne zagłębienie h, przeskalowano przez maksymalne zagłębienie  $h_{max}$ . Efekt skali ujawnia się w postaci wzrostu maksymalnej znormalizowanej siły  $P_{max}/h_{max}$  przy zmniejszającym się zagłębieniu  $h_{max}$ , co można zaobserwować w przypadku wszystkich trzech kątów rozwarcia klina. Znormalizowana maksymalna siła  $P_{max}$ , przy zmniejszeniu zagłębienia  $h_{max}$  z 200 µm do 1 µm, wzrasta około 2.5-krotnie.



**Rysunek 7.16:** Przewidziany efekt skali w twardości przy zagłębianiu klina: twardość H (a) i znormalizowana twardość  $H/H_0$  (b) w zależności od zagłębienia  $h_{max}$  oraz znormalizowana twardość  $H/H_0$  w zależności od szerokości kontaktu d (c).

Efekt skali jest jeszcze bardziej widoczny gdy przeanalizuje się twardość. Na rys. 7.16a przedstawiono twardość  $H = P_{max}/d$  w funkcji maksymalnego zagłębienia  $h_{max}$ , gdzie  $P_{max}$  oznacza maksymalną siłę dla danego  $h_{max}$ , a *d* oznacza szerokość kontaktu. Szerokość kontaktu *d* wyznaczono jako odległość poziomą pomiędzy punktami zerowania się ciśnienia kontaktowego na końcu ścieżki obciążenia, tj. gdy  $P = P_{max}$  i  $h = h_{max}$ , por. rys. 7.10b. Tak wyznaczona szerokość kontaktu jest oczywiście obarczona niepewnością rzędu połowy wielkości elementu kontaktowego,  $d \pm 0.5h_{el}$ , z uwagi na zastosowane kwadratowe funkcje interpolacji przemieszczeń. Na rys. 7.16a przedstawiono twardość H w funkcji maksymalnego zagłębienia  $h_{max}$ , a na rys. 7.16b przedstawiono względny wzrost twardości  $H/H_0$ , gdzie  $H_0$  oznacza twardość dla największego zagłębienia  $h_{max} = 200 \,\mu$ m. Największy wzrost twardości, wynoszący około 4.2, odnotowano dla klina 60°, a najmniejszy, wynoszący około 3.6, dla klina 120°. Tę tendencję potwierdzają wyniki eksperymentalne dla glinu przedstawione w pracy [15], gdzie również dla klina o mniejszym kącie rozwarcia obserwowane efekty skali były największe. Ciekawa cecha ujawniła się, gdy przedstawiono względny wzrost twardości  $H/H_0$  w funkcji szerokości kontaktu d. W tym przypadku krzywe dla wszystkich trzech kątów rozwarcia klina w przybliżeniu nakładają się na siebie, por. rys. 7.16c.

Nix i Gao [106] stworzyli fenomenologiczny model opisujący efekty skali w przypadku wciskania wgłębnika stożkowego. Zakładając wyidealizowany rozkład dyslokacji geometrycznie niezbędnych, model ten przewiduje, że kwadrat względnej twardości jest liniową funkcją zagłębienia  $(H/H_0)^2 = 1 + h^*/h_{max}$ , gdzie  $h^*$  jest pewną charakterystyczną długością. Zależność kwadratu względnej twardości od odwrotności zagłębienia otrzymaną na podstawie wyników symulacji przedstawiono na rys. 7.17. Rzeczywiście w zakresie analizowanych zagłębień  $h_{max}$ , otrzymana zależność jest w przybliżeniu liniowa dla wszystkich trzech kątów rozwarcia klina. Jednak dla bardzo małych zagłębień, których nie udało się zasymulować z użyciem aktualnego modelu plastyczności z efektami gradientowymi, obserwuje się w eksperymentach [np. 119] zależność pomiędzy  $(H/H_0)^2$  a odwrotnością zagłębienia  $h_{max}$ , która odbiega od liniowej zależności przewidzianej przez model Nixa i Gao [106].



**Rysunek 7.17:** Zależność kwadratu znormalizowanej twardości  $(H/H_0)^2$  od odwrotności zagłębienia  $h_{max}$ .

Na rys. 7.18 przedstawiono wpływ efektów skali na odcisk wgłębnika po odciążeniu. Dla mniejszych zagłębień  $h_{max}$ , znormalizowana szerokość kontaktu  $d/h_{max}$  zmniejsza się, co bezpośrednio przekłada się na większy wzrost twardości (około 4-krotny) niż znormalizowanej maksymalnej siły  $P_{max}/h_{max}$  (około 2.5-krotny), por. rys. 7.15. Ponadto przy zmniejszającym się zagłębieniu, odpowiednio znormalizowana powierzchnia kryształu poza miejscem bezpośredniego kontaktu zapada się bardziej niż w przypadku większych zagłębień. Zjawisko to nazywane jest w literaturze *sink-in*. Podobne rezultaty otrzymano przy zastosowaniu modelu wzbogaconego o efekty gradien-



towe w trójwymiarowym zagadnieniu wciskania kulki w monokryształ miedzi o orientacji (100) w pracy [140].

**Rysunek 7.18:** Wpływ zagłębienia  $h_{max}$  na odcisk klina i profil powierzchni kryształu po odciążeniu.



**Kysunek 7.17.** W pryw Zagiębienia  $n_{max}$  na rozkrad obrotu sieci krystancznej dla kniha 90.

Wpływ efektów gradientowych w prawie umocnienia na kąt obrotu sieci krystalicznej pokazano na rys. 7.19. Wybrano przypadek klina o kącie rozwarcia 90° i pięć zagłębień  $h_{max}$ : 200, 20, 5, 2 i 1 µm. Efekty gradientowe nie mają zasadniczo wpływu na kształt rozkładu kąta obrotu sieci krystalicznej, na którym występują dwa wyraźne pasma o ujemnym i dodatnim kącie obrotu. Natomiast wraz ze zmniejszającym się zagłębieniem, zmniejsza się zasięg ekstremalnych wartości kąta obrotu sieci krystalicznej. Taki sam efekt występuje w przypadku klinów o kącie rozwarcia 60° i 120°. Ponadto rys. 7.19 przedstawia jeszcze jeden efekt, który należy omówić. Otóż przy zmniejszającym się zagłębieniu pojawiają się oscylacje kąta obrotu sieci krystalicznej na długości pasma dodatniego obrotu. Oscylacje są bardzo wyraźne dla zagłębienia  $h_{max} = 1$  µm, ale również w przypadku 2 µm są już zauważalne. O ile niejednorodność deformacji plastycznej jest zjawiskiem fizycznym, które obserwuje się eksperymentalnie właściwie w każdej skali, o tyle widoczne na rys. 7.19 oscylacje są artefaktem numerycznym. Wskazuje na to fakt, że oscylacje pojawiają się w regularnych odstępach powiązanych z wielkością elementów skończonych. Prawdopodobną przyczyną występowania tych artefaktów jest niedostateczna regularyzacja, wprowadzona do modelu za pomocą równania uśredniającego przyrosty poślizgów plastycznych (3.53) oraz powiązanie długości charakterystycznej  $l_h$  z rozmiarem elementu skończonego  $h_{el}$ . Potwierdzeniem tej tezy są wyniki przedstawione na rys. 7.22 w podrozdziale 7.5.1, gdzie przy większych długościach charakterystycznych  $l_h$  oscylacje są mniejsze, a nawet zanikają. Z powodu oscylacji dla zagłębień  $h_{max} = 1 \,\mu\text{m}$  i 2  $\mu\text{m}$  należy do tych wyników podchodzić z pewną dozą nieufności, pomimo że pozostałe rezultaty dotyczące twardości i maksymalnej siły wydają się być zgodne z ogólnym trendem wyznaczonym przez wyniki dla pozostałych zagłębień.



**Rysunek 7.20:** Wpływ zagłębienia  $h_{max}$  na normę tensora dyslokacji  $\|\mathbf{G}\|$  dla klina 90°.

Efekty skali są szczególnie widoczne na rys. 7.20, na którym przedstawiono gęstość dyslokacji geometrycznie niezbędnych wyrażoną przez normę tensora gęstości dyslokacji  $||\mathbf{G}||$  w przypadku klina 90° przy zmniejszającym się zagłębieniu  $h_{max}$ . Ponieważ tensor  $\mathbf{G}$  jest obliczany na podstawie gradientów poślizgów plastycznych, więc norma tensora  $\mathbf{G}$  jest odwrotnie proporcjonalna do maksymalnego zagłębienia  $h_{max}$ . Właśnie to skalowanie jest źródłem dodatkowego umocnienia wynikającego z dyslokacji geometrycznie niezbędnych. Wpływ umocnienia zależnego od dyslokacji geometrycznie niezbędnych uwidacznia się poprzez zmianę rozkładu  $||\mathbf{G}||$  przy zmniejszającym się zagłębieniu, co można zauważyć na rys. 7.20. Należy podkreślić, że na rys. 7.20 skala odniesienia zmienia się odwrotnie proporcjonalnie do zagłębienia, a więc różnica w rozkładzie  $||\mathbf{G}||$  wynika ze zmiany mechanizmu plastycznego płynięcia. Ponownie na rys. 7.20c widoczne są oscylacje, które można było zauważyć na mapie obrotu sieci krystalicznej na rys. 7.8d, choć w tym przypadku są mniej wyraźne.

#### 7.5.1 Wpływ długości charakterystycznej *l<sub>h</sub>*

W tym podrozdziale przeanalizowano wpływ długości charakterystycznej  $l_h$  występującej w równaniu uśredniającym (3.53) na otrzymywane wyniki przy zastosowaniu modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi.

Studium przeprowadzono dla klina o kącie rozwarcia 120°, ponieważ w tym przypadku od-

kształcenia plastyczne w bezpośrednim sąsiedztwie klina nie są tak duże jak w przypadku kątów 60° i 90°. Dzięki temu obserwowane oscylacje w rozkładzie kąta obrotu sieci krystalicznej w głównej mierze są skutkiem parametru numerycznego  $l_h$ , występującego w równaniu uśredniającym (3.53). Przeanalizowano w sumie cztery przypadki. W dwóch przypadkach,  $l_h = h_{el}$  i  $l_h = 2 h_{el}$ , przyjęto że długość charakterystyczna  $l_h$  jest parametrem numerycznym zależnym od rozmiaru elementu skończonego  $h_{el}$ , a przez to zależnym od zagłębienia  $h_{max}$ . Natomiast w pozostałych dwóch przypadkach przyjęto, że długość charakterystyczna  $l_h = 50$  nm i  $l_h = 100$  nm, przez to czyniąc ją parametrem materiałowym niezwiązanym z rozmiarem elementu skończonego i zagłębieniem. Dla porównania, w przypadku zagłębienia  $h_{max} = 1$  µm, rozmiar najmniejszego elementu skończonego w okolicy klina wynosi w przybliżeniu 37 nm.



**Rysunek 7.21:** Wpływ długości charakterystycznej  $l_h$  w przypadku klina 120° na przewidywany wzrost twardości w zależności od zagłębienia  $h_{max}$  (a) i szerokości kontaktu d (b).

Na rys. 7.21 przedstawiono zależność znormalizowanej twardości  $H/H_0$  od zagłębienia  $h_{max}$  oraz od szerokości kontaktu d. Przy większych wartościach  $l_h$ , uśrednianie lokalnych poślizgów plastycznych  $\dot{\gamma}_{\alpha}$  następuje na większej powierzchni, co skutkuje mniejszymi gradientami nielokalnych przyrostów poślizgów plastycznych  $\dot{\gamma}_{\alpha}$ . W rezultacie umocnienie wynikające z dyslokacji geometrycznie niezbędnych jest mniejsze, co pociąga za sobą mniejszą maksymalną twardość przy zagłębieniu  $h_{max} = 1 \,\mu$ m. Ponadto zmianie ulega kształt krzywej znormalizowanej twardości, gdy  $l_h$  jest traktowane jako parametr materiałowy, niezależny od  $h_{max}$ . Nadal dla większego  $l_h = 100 \,\text{nm}$ , otrzymano mniejszy wzrost twardości. Można też zauważyć, że dla  $l_h = 50 \,\text{nm}$ , które jest bliskie  $l_h = h_{el} = 37 \,\text{nm}$ , w przypadku  $h_{max} = 1 \,\mu$ m otrzymane twardości są zbliżone. Podobnie dla  $l_h = 100 \,\text{nm}$  i  $h_{max} = 2 \,\mu$ m, otrzymujemy twardość plasującą się pomiędzy wynikiem dla  $l_h = h_{el} = 74 \,\text{nm}$  i  $l_h = 2 \,h_{el} = 148 \,\text{nm}$ .

Przeanalizowano także wpływ parametru  $l_h$  na obserwowane w rozkładzie kąta obrotu sieci krystalicznej oscylacje przy zagłębieniu  $h_{max} = 1 \,\mu\text{m}$ , które są widoczne na rys. 7.19. Na rys. 7.22 przedstawiono rozkład kąta obrotu sieci krystalicznej w przypadku klina 120° i zagłębieniu  $h_{max} = 1 \,\mu\text{m}$ . Podobnie jak w podrozdziale 7.5, w przypadku gdy  $l_h = h_{el}$ , widać wyraźne oscylacje w obrębie pasma dodatniego kąta obrotu sieci krystalicznej. Przy zwiększeniu parametru  $l_h$  o 13 nm, czyli w przypadku  $l_h = 50$  nm, oscylacje są zredukowane. Natomiast w pozostałych dwóch przypadkach, oscylacje w ogóle nie występują. Te wyniki potwierdzają obserwację przedstawioną w podrozdziale 7.5, mówiącą o tym, że źródłem oscylacji jest niedostateczna regularyzacja wprowadzona przez równanie (3.53).



**Rysunek 7.22:** Wpływ długości charakterystycznej  $l_h$  na rozkład kąta obrotu sieci krystalicznej dla klina 120° przy zagłębieniu  $h_{max} = 1 \,\mu\text{m}$ .

Podsumowując, długość charakterystyczna  $l_h$  ma wpływ na przewidywane efekty skali w zagadnieniu wciskania klina. Długość charakterystyczna  $\ell$ , występująca w modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi, por. podrozdział 3.2.3, jest w głównej mierze odpowiedzialna za efekty skali. Niestety w aktualnej implementacji modelu, która wykorzystuje regularyzację lokalnych przyrostów poślizgów plastycznych poprzez równanie (3.53), pojawia się dodatkowy parametr  $l_h$ , mający drugorzędny wpływ na przewidywane efekty skali. Jak pokazano na rys. 7.21 i 7.22, wpływ parametru  $l_h$  objawia się w ten sposób, że przyjęcie zbyt dużej wartości parametru  $l_h$  skutkuje zmniejszeniem przewidywanych efektów skali, ale nie wprowadza oscylacji zależnych od siatki. Natomiast przyjęcie, że  $l_h$  jest parametrem numerycznym równym  $h_{el}$ , odpowiadającym za uśrednianie lokalnych poślizgów plastycznych tylko w najbliższym sąsiedztwie danego elementu skończonego, przy odpowiednio małym zagłębieniu  $h_{max}$ , skutkuje artefaktami numerycznymi w postaci oscylacji. Pytanie, jak dopasować parametr  $l_h$  lub jak zaimplementować model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi bez wprowadzania regularyzacji w postaci (3.53) jest otwartym problemem badawczym. Przeprowadzenie eksperymentu badającego efekty skali mogłoby pomóc w ustaleniu długości charakterystycznej  $l_h$  w postaci parametru numerycznego (właściwie stosunku do rozmiaru elementu skończonego) bądź jako parametru materiałowego.
## **Rozdział 8**

## Podsumowanie i wnioski

Przedmiotem niniejszej rozprawy jest modelowanie efektów skali w zagadnieniach kontaktowych. Analizowano dwie klasy zagadnień: efekty skali w modelach sprężystości wyższego rzędu na przykładzie modelu Cosseratów oraz efekty skali w symulacji indentacji kryształu niklu przy zastosowaniu modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi.

W ramach pierwszego zagadnienia stworzono nowy model kontaktowy dla modelu mikropolarnej sprężystości Cosseratów bazujący na podejściu mikromechanicznym, który uwzględnia interakcję klasycznych warunków kontaktowych z niewiadomymi wyższego rzędu. Ponadto zaproponowany model nie wprowadza dodatkowych parametrów materiałowych, poza tymi występującymi w modelu Cosseratów. Było to możliwe, dzięki wykorzystaniu interpretacji parametrów materiałowych jako wielkości powiązanych z mikrostrukturą reprezentowaną przez model mikropolarnej sprężystości. Model został zaimplementowany w systemie MES *AceGen/AceFEM* z wykorzystaniem metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a. Przeprowadzono analizę dwóch zagadnień kontaktowych w 2D: ściskania pasma dwiema sztywnymi płaszczyznami oraz wciskania walca w półpłaszczyznę (zagadnienie typu Hertza).

W części dotyczącej mikropolarnej sprężystości Cosseratów otrzymano następujące oryginalne rezultaty:

- W proponowanym mikromechanicznym modelu kontaktowym ciśnienie kontaktowe jest powiązane z mikromomentem kontaktowym przez efektywne ramię momentu, którego wartość zależy od długości charakterystycznej l występującej w modelu mikropolarnej sprężystości. Wynika to z założenia leżącego u podstaw proponowanego modelu, że kontakt odbywa się przez wierzchołki mikrobloczków o boku l.
- 2. Obserwowane makroskopowo efekty z założenia wynikają ze sprężystych oddziaływań w skali mikro. Stąd model kontaktu bez tarcia, opisujący efekty makroskopowe, powinien wywodzić się z potencjału, czyli nie powinien rozpraszać lub generować energii w trakcie deformacji. Zaproponowany model spełnia powyższe warunki i, według wiedzy autora

niniejszej rozprawy, jest pierwszym modelem tego typu w literaturze.

- 3. Model przewiduje powstawanie warstw brzegowych, których grubość jest porównywalna do długości charakterystycznej l. W rozwiązaniu analitycznym zagadnienia ściskania pasma wyznaczono funkcję opisującą grubość warstw w zależności od przyjętych parametrów materiałowych. Otrzymane w zagadnieniu typu Hertza warstwy brzegowe wykazują grubość porównywalną do tych otrzymanych w zagadnieniu ściskania pasma.
- 4. W zagadnieniu typu Hertza zaobserwowano niestandardowe rozkłady ciśnienia kontaktowego wynikające z zastosowania proponowanego modelu kontaktowego. Przy odpowiednio dużym stosunku długości charakterystycznej Cosseratów  $\ell$  do szerokości kontaktu z rozwiązania Hertza  $a_{\rm Hz}$ , tj. dla  $\ell/a_{\rm Hz} > 0.8874$ , zaobserwowano rozdzielenie się stref kontaktu.
- 5. Obserowane w zagadnieniu typu Hertza efekty skali przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego przyjmują nieoczekiwany przebieg. Dla twardości wyznaczonej jako stosunek siły do pola odcisku otrzymujemy odwrotny efekt skali, co wynika z rozdzielenia się stref kontaktu, a przez to zwiększenia się pola odcisku. Uwzględniając rzeczywistą powierzchnię kontaktu otrzymujemy niemonotoniczną zmianę twardości przy zmniejszającym się zagłębieniu. Biorąc pod uwagę twardość nominalną, tzn. przy wyznaczeniu pola odcisku na podstawie głębokości zagłębienia z rozważań czysto geometrycznych, otrzymujemy zwykły efekt skali, a obserwowany wzrost twardości jest większy przy zastosowaniu mikromechanicznego modelu kontaktowego niż w przypadku klasycznego modelu kontaktowego.

Druga klasa zagadnień obejmowała stworzenie modelu obliczeniowego eksperymentu wciskania klina w kryształ niklu. W tym celu wykorzystano model plastyczności kryształów wzbogacony o efekty gradientowe, którego sformułowanie w 3D przedstawiono w pracach [118, 140]. Model został konsystentnie zredukowany do płaskiego stanu odkształcenia uwzględniając fizyczne pochodzenie efektywnych systemów poślizgu. Parametry materiałowe zostały wyznaczone na podstawie danych eksperymentalnych [42, 63] niezależnych od eksperymentu wciskania klina. Jedynie początkowe naprężenie płynięcia  $\tau_0$  zostało wyznaczone na podstawie wyników eksperymentu wciskania klina, ale przy wykorzystaniu tylko jednej geometrii klina o kącie rozwarcia 120°. Najważniejszymi wynikami otrzymanymi w tej części rozprawy są:

 Dokonano konsystentnej redukcji trójwymiarowego modelu plastyczności kryształów wzbogaconego o efekty skali do płaskiego stanu odkształcenia. Po raz pierwszy w literaturze uwzględniono fizyczny charakter efektywnych systemów poślizgu w prawie umocnienia, a nie tylko w warunkach plastyczności. Jest to element oryginalny niniejszej rozprawy.

- 2. Niezależnie skalibrowane parametry materiałowe niklu, występujące w modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi, pozwoliły na bardzo dobre odwzorowanie wyników eksperymentalnych w symulacji numerycznej. Zarówno otrzymane w obliczeniach obroty sieci krystalicznej, jak i miara gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych wykazują bardzo dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi dla wszystkich rozpatrywanych kątów rozwarcia klina.
- 3. W celu poprawy zbieżności całego zagadnienia zaimplementowano klasyczny model kontaktowy z tarciem i skończonymi poślizgami bazując na sformułowaniu typu *mortar*. Dzięki temu możliwe było przeanalizowanie efektów skali w zagadnieniu wciskania klina, ponieważ model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi w 2D jest o wiele bardziej wrażliwy na nagłą zmianę warunków brzegowych niż jego odpowiednik w 3D.
- 4. Model plastyczności kryształów z efektami gradientowymi poprawnie przewiduje efekty skali w zakresie, w którym obowiązuje klasyczna relacja Nixa i Gao [106]. Niezwykle istotne jest poprawne wyznaczenie parametrów materiałowych, ponieważ odpowiadają one za charakter i stopień umocnienia w części związanej z gradientami poślizgów plastycznych. Przyjęcie niepoprawnych lub niepopartych danymi eksperymentalnymi wartości skutkuje brakiem zbieżności całego zagadnienia.
- 5. Na otrzymane efekty skali ma wpływ długość charakterystyczna  $l_h$ , która występuje w równaniu uśredniającym przyrosty poślizgów plastycznych (3.53). Celowym jest przeprowadzenie eksperymentalnej analizy efektów skali w zagadnieniu wciskania klina, aby ustalić optymalną wartość parametru  $l_h$ .

Zaproponowany model kontaktowy dla ciał Cosseratów można rozszerzyć na przypadek 3D, skończone deformacje, czy uwzględniając tarcie w rozważaniach mikromechanicznych. Jednak, jak wiadomo, model Cosseratów jako najprostsze kontinuum wyższego rzędu nie jest w stanie w pełni uwzględnić wpływu mikrostruktury na odpowiedź makroskopową. Stąd celowym wydaje się poszukiwanie nowych sformułowań kontaktowych dla bardziej złożonych modeli wyższego rzędu. Szczególnie obiecującą grupę modeli wyższego rzędu stanowią modele mikromorficzne, które są szeroko stosowane nie tylko w zagadnieniach sprężystych, ale także w o wiele bardziej złożonych zagadnieniach takich jak plastyczność kryształów z efektami gradientowymi [np. 129].

Jak pokazano w podrozdziale 7.5.1, obecna implementacja modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi wprowadza pewną dodatkową długość charakterystyczną odpowiedzialną za uśrednianie przyrostów poślizgów plastycznych. Niestety wartość przyjętego parametru  $l_h$ ma pośredni wpływ na przewidywane efekty skali. Celowym jest opracowanie nowej, efektywnej implementacji modelu plastyczności kryształów z efektami gradientowymi w zakresie skończonych deformacji, która wyeliminowałaby numeryczny parametr  $l_h$  lub zastąpiła go nowym parametrem, który miałby mniejszy wpływ na otrzymywane wyniki. Ponadto w istniejących modelach plastyczności kryształów z efektami gradientowymi również pojawiają się niewiadome wyższego rzędu, np. w używanym w niniejszej rozprawie modelu są to przyrosty poślizgów plastycznych. Stąd kolejnym kierunkiem badawczym jest stworzenie nowych modeli kontaktowych uwzględniających wpływ warunków kontaktowych na występujące w tych modelach niewiadome wyższego rzędu, co powinno prowadzić do powstawania dodatkowych efektów skali wynikających z warunków brzegowych nałożonych na niewiadome wyższego rzędu.

## Referencje

- [1] D. Addessi. A 2D Cosserat finite element based on a damage-plastic model for brittle materials. *Comput. Struct.*, 135:20–31, 2014.
- [2] P. Alart and A. Curnier. A mixed formulation for frictional contact problems prone to Newton like solution methods. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 92:353–375, 1991.
- [3] L. Anand, M. E. Gurtin, and B. D. Reddy. The stored energy of cold work, thermal annealing, and other thermodynamic issues in single crystal plasticity at small length scales. *Int. J. Plast.*, 64:1–25, 2015.
- [4] M. Arminjon. A regular form of the schmid law. Application to the ambiguity problem. *Texture Microstruct.*, 14:1121–1128, 1991.
- [5] A. Arsenlis and D. M. Parks. Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density. *Acta Mater.*, 47:1597–1611, 1999.
- [6] R. J. Asaro. Crystal plasticity. J. Appl. Mech., 50:921–934, 1983.
- [7] M. F. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philos. Mag.*, 21: 399–424, 1970.
- [8] A. Bacigalupo and L. Gambarotta. Non-local computational homogenization of periodic masonry. Int. J. Multiscale Comput. Eng., 9, 2011.
- [9] S. Bargmann, B. Svendsen, and M. Ekh. An extended crystal plasticity model for latent hardening in polycrystals. *Comput. Mech.*, 48:631–645, 2011.
- [10] J. L. Bassani and T. Y. Wu. Latent hardening in single crystals. II. Analytical characterization and predictions. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 435:21–41, 1991.
- [11] D. Bigoni and W. J. Drugan. Analytical Derivation of Cosserat Moduli via Homogenization of Heterogeneous Elastic Materials. J. Appl. Mech., 74:741–753, 2007.
- [12] S. Casolo. Macroscopic modelling of structured materials: relationship between orthotropic cosserat continuum and rigid elements. *Int. J. Solids Struct.*, 43:475–496, 2006.

- [13] P. Cermelli and M. E. Gurtin. On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity. J. Mech. Phys. Solids, 49:1539–1568, 2001.
- [14] M. Cerrolaza, J. Sulem, and A. Elbied. A Cosserat non-linear finite element analysis software for blocky structures. *Adv. Eng. Software*, 30:69–83, 1999.
- [15] K. Chen, W. J. Meng, and G. B. Sinclair. Size dependence of the plane-strain response of single-crystal Al to indentation by diamond wedges. *Acta Mater.*, 60:4879–4887, 2012.
- [16] E. Cosserat and F. Cosserat. Théorie des corps déformables. A. Hermann et fils, 1909.
- [17] C. F. O. Dahlberg, Y. Saito, M. S. Öztop, and J. W. Kysar. Geometrically necessary dislocation density measurements associated with different angles of indentations. *Int. J. Plast.*, 54:81–95, 2014.
- [18] R. de Borst. Simulation of strain localization: a reappraisal of the Cosserat continuum. *Eng. Comput.*, 1991.
- [19] M. Sh. de Guzman, G. Neubauer, P. Flinn, and W. D. Nix. The role of indentation depth on the measured hardness of materials. *Mater. Res. Soc. Proc.*, 308, 1993.
- [20] E.A. de Souza Neto, D. Perić, M. Dutko, and D.R.J. Owen. Design of simple low order finite elements for large strain analysis of nearly incompressible solids. *Int. J. Solids Struct.*, 33:3277–3296, 1996.
- [21] A. C. Eringen. Linear theory of micropolar elasticity. J. Math. Mech., pages 909–923, 1966.
- [22] A. C. Eringen. Mechanics of micromorphic continua. In E. Kröner, editor, *Mechanics of Generalized Continua*, pages 18–35. Springer-Verlag, 1968.
- [23] A. C. Eringen. Theory of thermo-microstretch elastic solids. *Int. J. Eng. Sci.*, 28:1291–1301, 1990.
- [24] A. C. Eringen and E. S. Suhubi. Nonlinear theory of simple micro-elastic solids I. Int. J. Eng. Sci., 2:189–203, 1964.
- [25] L. P. Evers, W. A. M. Brekelmans, and M. G. D. Geers. Scale dependent crystal plasticity framework with dislocation density and grain boundary effects. *Int. J. Solids Struct.*, 41: 5209–5230, 2004.
- [26] B. Feeny, A. Guran, N. Hinrichs, and K. Popp. A Historical Review on Dry Friction and Stick-Slip Phenomena. *Applied Mechanics Reviews*, 51:321–341, 1998.
- [27] G. Feng and W. D. Nix. Indentation size effect in MgO. Scr. Mater., 51:599-603, 2004.

104

- [28] N. A. Fleck and J. W. Hutchinson. A phenomenological theory for strain gradient effects in plasticity. J. Mech. Phys. Solids, 41:1825–1857, 1993.
- [29] N. A. Fleck and J. W. Hutchinson. A reformulation of strain gradient plasticity. J. Mech. Phys. Solids, 49:2245–2271, 2001.
- [30] N. A. Fleck, G. M. Muller, M. F. Ashby, and J. W. Hutchinson. Strain gradient plasticity: Theory and experiment. *Acta Metall. Mater.*, 42:475–487, 1994.
- [31] S. Forest. Mechanics of generalized continua: construction by homogenizaton. *Le Journal de Physique IV*, 8:4–39, 1998.
- [32] S. Forest, P. Boubidi, and R. Sievert. Strain localization patterns at a crack tip in generalized single crystal plasticity. *Scr. Mater.*, 44:953–958, 2001.
- [33] S. Forest, R. Sievert, and E. C. Aifantis. Strain gradient crystal plasticity: Thermomechanical formulations and applications. J. Mech. Behav. Mater., 13:219–232, 2002.
- [34] P. Franciosi and A. Zaoui. Multislip in f.c.c. crystals a theoretical approach compared with experimental data. *Acta Metall.*, 30:1627–1637, 1982.
- [35] W. Gambin. Refined analysis of elastic-plastic crystals. *Int. J. Solids Struct.*, 29:2013–2021, 1992.
- [36] H. Gao, Y. Huang, W. D. Nix, and J. W. Hutchinson. Mechanism-based strain gradient plasticity—i. theory. J. Mech. Phys. Solids, 47:1239–1263, 1999.
- [37] Y. F. Gao, B. C. Larson, J. H. Lee, L. Nicola, J. Z. Tischler, and G. M. Pharr. Lattice rotation patterns and strain gradient effects in face-centered-cubic single crystals under spherical indentation. J. Appl. Mech., 82:061007, 2015.
- [38] P. A. Gourgiotis, Th. Zisis, and K. P. Baxevanakis. Analysis of the tilted flat punch in couple-stress elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 85–86:34–43, 2016.
- [39] P. A. Gourgiotis, Th. Zisis, A. E. Giannakopoulos, and H. G. Georgiadis. The Hertz contact problem in couple-stress elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 168:228–237, 2019.
- [40] J. A. Greenwood and J. B. P. Williamson. Contact of nominally flat surfaces. Proc. Math. Phys. Eng. Sci., 295:300–319, 1966.
- [41] M. E. Gurtin. On the plasticity of single crystals: free energy, microforces, plastic-strain gradients. J. Mech. Phys. Solids, 48:989–1036, 2000.
- [42] P. Haasen. Plastic deformation of nickel single crystals at low temperatures. *Philos. Mag.*, 3:384–418, 1958.

- [43] C.-S. Han and S. Nikolov. Indentation size effects in polymers and related rotation gradients. J. Mater. Res., 22:1662–1672, 2007.
- [44] C. S. Han, H. Gao, Y. Huang, and W. D. Nix. Mechanism-based strain gradient crystal plasticity - I. Theory. J. Mech. Phys. Solids, 53:1188–1203, 2005.
- [45] C.-S. Han, S. H. R. Sanei, and F. Alisafaei. On the origin of indentation size effects and depth dependent mechanical properties of elastic polymers. J. Polym. Eng., 36:103–111, 2016.
- [46] H. Hertz. Ueber die Berührung fester elastischer Körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 92:156–171, 1882.
- [47] R. Hill. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. J. Mech. Phys. Solids, 14:95–102, 1966.
- [48] R. Hill and J. R. Rice. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. J. Mech. Phys. Solids, 20:401–413, 1972.
- [49] J. P. Hirth and J. Lothe. *Theory of Dislocation*. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, 1992.
- [50] T. Hochrainer, S. Sandfeld, M. Zaiser, and P. Gumbsch. Continuum dislocation dynamics: Towards a physical theory of crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 63:167–178, 2014.
- [51] L. Hollang. Purification Process and Characterization of Ultra High Purity Metals: Application of Basic Science to Metallurgical Processing. Springer Science & Business Media, 2002.
- [52] Y. Huang, H. Gao, W. D. Nix, and J. W. Hutchinson. Mechanism-based strain gradient plasticity—II. Analysis. J. Mech. Phys. Solids, 48:99–128, 2000.
- [53] Y. Huang, F. Zhang, K. C. Hwang, W. D. Nix, G. M. Pharr, and G. Feng. A model of size effects in nano-indentation. J. Mech. Phys. Solids, 54:1668–1686, 2006.
- [54] D. Hull and D. J. Bacon. Introduction to dislocations. Elsevier, 5th edition, 2011.
- [55] I. M. Hutchings. Leonardo da Vinci's studies of friction. Wear, 360–361:51–66, 2016.
- [56] J. W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 348:101–127, 1976.
- [57] P. Hård af Segerstad, S. Toll, and R. Larsson. A micropolar theory for the finite elasticity of open-cell cellular solids. *Proc. R. Soc. A*, 465:843–865, 2009.

- [58] Wolfram Research, Inc. Mathematica, Version 11.0. URL https://www.wolfram.com/ mathematica. Champaign, IL, 2016.
- [59] J. Jeong and P. Neff. Existence, uniqueness and stability in linear cosserat elasticity for weakest curvature conditions. *Math. Mech. Solids*, 15:78–95, 2010.
- [60] K. L. Johnson. Contact Mechanics. Cambridge University Press, 1985.
- [61] Kato K. Wear in relation to friction a review. Wear, 241:151–157, 2000.
- [62] J.-Y. Kim, B.-W. Lee, D. T. Read, and D. Kwon. Influence of tip bluntness on the sizedependent nanoindentation hardness. *Scr. Mater.*, 52:353–358, 2005.
- [63] U. F. Kocks. Constitutive behavior based on crystal plasticity. In Alan K. Miller, editor, Unified Constitutive Equations for Creep and Plasticity, pages 1–88. Springer Netherlands, 1987.
- [64] U. F. Kocks and H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case. *Prog. Mater Sci.*, 48:171–273, 2003.
- [65] W. T. Koiter. Couple stresses in the theory of elasticity: I & II. Proc. K. Ned. Akad. Wet. (B), 67:17–44, 1964.
- [66] J. Korelc. Multi-language and multi-environment generation of nonlinear finite element codes. *Eng. Comput.*, 18:312–327, 2002.
- [67] J. Korelc. Automation of primal and sensitivity analysis of transient coupled problems. *Comput. Mech.*, 44:631–649, 2009.
- [68] J. Korelc and P. Wriggers. Automation of Finite Element Methods. Springer, 2016.
- [69] J. Korelc, U. Ŝolinc, and P. Wriggers. An improved EAS brick element for finite deformation. *Comput. Mech.*, 46:641–659, 2010.
- [70] J. Kratochvil and M. Kruzik. Statistically motivated model of mechanisms controlling evolution of deformation band substructure. *Int. J. Plast.*, 81:196–208, 2016.
- [71] E. Kröner. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 4:273–334, 1960.
- [72] E. Kröner. Dislocations and continuum mechanics. Appl. Mech. Rev., 15:599-606, 1962.
- [73] S. Kucharski, S. Stupkiewicz, and H. Petryk. Surface pile-up patterns in indentation testing of cu single crystals. *Exp. Mech.*, 54:957–969, 2014.

- [74] M. Kuroda and V. Tvergaard. A finite deformation theory of higher-order gradient crystal plasticity. J. Mech. Phys. Solids, 56:2573–2584, 2008.
- [75] M. Kursa. Modelowanie deformacji plastycznych w kryształach metali metodą przyrostowej minimalizacji energii. rozprawa doktorska pod kierunkiem prof. H. Petryka, Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa, 2010.
- [76] J. W. Kysar, Y. X. Gan, T. L. Morse, X. Chen, and M. E. Jones. High strain gradient plasticity associated with wedge indentation into face-centered cubic single crystals: geometrically necessary dislocation densities. J. Mech. Phys. Solids, 55:1554–1573, 2007.
- [77] J. W. Kysar, Y. Saito, M. S. Oztop, D. Lee, and W. T. Huh. Experimental lower bounds on geometrically necessary dislocation density. *Int. J. Plast.*, 26:1097–1123, 2010.
- [78] De Lorenzis L. and Wriggers P. Computational homogenization of rubber friction on rough rigid surfaces. *Comput. Mater. Sci.*, 77:264–280, 2013.
- [79] R. S. Lakes. Size effects and micromechanics of a porous solid. J. Mater. Sci., 18:2572–2580, 1983.
- [80] R. S. Lakes. Experimental microelasticity of two porous solids. Int. J. Solids Struct., 22: 55–63, 1986.
- [81] R. S. Lakes. On the torsional properties of single osteons. J. Biomech., 28:1409–1409, 1995.
- [82] T. A. Laursen and J. C. Simo. A continuum-based finite element formulation for the implicit solution of multibody, large deformation-frictional contact problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 36:3451–3485, 1993.
- [83] E. H. Lee. Elastic-plastic deformation at finite strains. J. Appl. Mech., 36:1-6, 1969.
- [84] W. B. Lee and Y. P. Chen. Simulation of micro-indentation hardness of FCC single crystals by mechanism-based strain gradient crystal plasticity. *Int. J. Plast.*, 26:1527–1540, 2010.
- [85] J. Lengiewicz, J. Korelc, and S. Stupkiewicz. Automation of finite element formulations for large deformation contact problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 85:1252–1279, 2011.
- [86] M. J. Lewandowski and S. Stupkiewicz. Size effects in wedge indentation predicted by a gradient-enhanced crystal-plasticity model. *Int. J. Plast.*, 109:54–78, 2018.
- [87] M. J. Lewandowski-Szewczyk and S. Stupkiewicz. Non-standard contact conditions in generalized continua: microblock contact model for a Cosserat body. *Int. J. Solids Struct.*, 202:881–894, 2020.

- [88] Y. Y. Lim and M. M. Chaudhri. The effect of the indenter load on the nanohardness of ductile metals: an experimental study on polycrystalline work-hardened and annealed oxygen-free copper. *Philos. Mag. A*, 79:2979–3000, 1999.
- [89] X. N. Liu, G. L. Huang, and G. K. Hu. Chiral effect in plane isotropic micropolar elasticity and its application to chiral lattices. *J. Mech. Phys. Solids*, 60:1907–1921, 2012.
- [90] Y. Liu and A. H. W. Ngan. Depth dependence of hardness in copper single crystals measured by nanoindentation. *Scr. Mater.*, 44:237–241, 2001.
- [91] Q. Ma and D. R. Clarke. Size dependent hardness of silver single crystals. J. Mater. Res., 10:853–863, 1995.
- [92] J. Mandel. Plasticité classique et viscoplasticité. CISM Lectures Notes, 97, 1971.
- [93] R. Masiani and P. Trovalusci. Cosserat and cauchy materials as continuum models of brick masonry. *Meccanica*, 31:421–432, 1996.
- [94] R. Masiani, N. Rizzi, and P. Trovalusci. Masonry as Structured Continuum. *Meccanica*, 30: 673–683, 1995.
- [95] K. W. McElhaney, J. J. Vlassak, and W. D. Nix. Determination of indenter tip geometry and indentation contact area for depth-sensing indentation experiments. *J. Mater. Res.*, 13: 1300–1306, 1998.
- [96] R. D. Mindlin. Micro-structure in Linear Elasticity. Arch. Ration. Mech. Anal., 16:51–78, 1964.
- [97] R. D. Mindlin. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity. Int. J. Solids Struct., 1:417–438, 1965.
- [98] R. D. Mindlin and H. F. Tiersten. Effects of couple-stresses in linear elasticity. Arch. Ration. Mech. Anal., 11:415–448, 1962.
- [99] P. Moreau, M. Raulic, K. M. Y. P'ng\*, G. Gannaway, P. Anderson, W. P. Gillin, A. J. Bushby, and D. J. Dunstan. Measurement of the size effect in the yield strength of nickel foils. *Philos. Mag. Lett.*, 85:339–343, 2005.
- [100] C. Motz, T. Schöberl, and R. Pippan. Mechanical properties of micro-sized copper bending beams machined by the focused ion beam technique. *Acta Mater.*, 53:4269–4279, 2005.
- [101] S. Nakamura and R. S. Lakes. Finite element analysis of stress concentration around a blunt crack in a Cosserat elastic solid. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 66:257–266, 1988.

- [102] P. Neff. The Cosserat couple modulus for continuous solids is zero viz the linearized Cauchy-stress tensor is symmetric. *ZAMM J. Appl. Math. Mech.*, 86:892–912, 2006.
- [103] P. Neff. Relations of constants for isotropic linear Cosserat elasticity. Technical report, 2008.
- [104] P. Neff, J. Jeong, and A. Fischle. Stable identification of linear isotropic cosserat parameters: bounded stiffness in bending and torsion implies conformal invariance of curvature. *Acta Mech.*, 211:237–249, 2010.
- [105] S. Nikolov, C.-S. Han, and D. Raabe. On the origin of size effects in small-strain elasticity of solid polymers. *Int. J. Solids Struct.*, 44:1582–1592, 2007.
- [106] W. D. Nix and H. Gao. Indentation size effects in crystalline materials: a law for strain gradient plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 46:411–425, 1998.
- [107] J. Nocedal and S. Wright. Numerical optimization. Springer Science & Business Media, 2006.
- [108] W. Nowacki. Theory of Micropolar Elasticity. Springer, 1972.
- [109] J. F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. Acta Metall., 1:153–162, 1953.
- [110] W. C. Oliver and G. M. Pharr. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. J. Mater. Res., 7: 1564–1583, 1992.
- [111] M. Ortiz and L. Stainier. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 171:419–444, 1999.
- [112] R. Peerlings, R. De Borst, and J. H. P. De Vree. Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 39:3391–3403, 1996.
- [113] B. N. J. Persson. Theory of rubber friction and contact mechanics. J. Chem. Phys., 115: 3840–3861, 2001.
- [114] P. Perzyna. The constitutive equations for rate sensitive plastic materials. *Quarterly of Applied Mathematics*, 20:321–332, 1963.
- [115] H. Petryk and M. Kursa. Selective symmetrization of the slip-system interaction matrix in crystal plasticity. Arch. Mech., 63:287–310, 2011.
- [116] H. Petryk and M. Kursa. The energy criterion for deformation banding in ductile single crystals. J. Mech. Phys. Solids, 61:1854–1875, 2013.
- [117] H. Petryk and M. Kursa. Incremental work minimization algorithm for rate-independent plasticity of single crystals. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 104:157–184, 2015.

- [118] H. Petryk and S. Stupkiewicz. A minimal gradient-enhancement of the classical continuum theory of crystal plasticity. Part I: The hardening law. *Arch. Mech.*, 68:459–485, 2016.
- [119] G. M. Pharr, E. G. Herbert, and Y. Gao. The indentation size effect: A critical examination of experimental observations and mechanistic interpretations. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 40: 271–292, 2010.
- [120] G. Pietrzak and A. Curnier. Large deformation frictional contact mechanics: continuum formulation and augmented lagrangian treatment. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 177: 351–381, 1999.
- [121] A. Popp, B. I. Wohlmuth, M. W. Gee, and W. A. Wall. Dual quadratic mortar finite element methods for 3D finite deformation contact. *SIAM J. Sci. Comput.*, 34:421–446, 2012.
- [122] M. A. Puso and T. A. Laursen. A mortar segment-to-segment contact method for large deformation solid mechanics. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 193:601–629, 2004.
- [123] X. Qiu, Y. Huang, W. D. Nix, K. C. Hwang, and H. Gao. Effect of intrinsic lattice resistance in strain gradient plasticity. *Acta Mater.*, 49:3949–3958, 2001.
- [124] S. Qu, Y. Huang, W. D. Nix, H. Jiang, F. Zhang, and K. C. Hwang. Indenter tip radius effect on the Nix-Gao relation in micro-and nanoindentation hardness experiments. *J. Mater. Res.*, 19:3423–3434, 2004.
- [125] S. Qu, Y. Huang, G. M. Pharr, and K. C. Hwang. The indentation size effect in the spherical indentation of iridium: A study via the conventional theory of mechanism-based strain gradient plasticity. *Int. J. Plast.*, 22:1265–1286, 2006.
- [126] C. Reuber, P. Eisenlohr, F. Roters, and D. Raabe. Dislocation density distribution around an indent in single-crystalline nickel: Comparing nonlocal crystal plasticity finite-element predictions with experiments. *Acta Mater.*, 71:333–348, 2014.
- [127] J. R. Rice. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity. J. Mech. Phys. Solids, 19:433–455, 1971.
- [128] J. R. Rice. Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. *Mech. Mater.*, 6:317–335, 1987.
- [129] M. Ryś, S. Forest, and H. Petryk. A micromorphic crystal plasticity model with the gradientenhanced incremental hardening law. *Int. J. Plast.*, 128, 2020.
- [130] P. A. Sabnis, S. Forest, N. K. Arakere, and V. A. Yastrebov. Crystal plasticity analysis of cylindrical indentation on a Ni-base single crystal superalloy. *Int. J. Plast.*, 51:200–217, 2013.

- [131] P. Sadowski and S. Stupkiewicz. Combined effect of friction and macroscopic deformation on asperity flattening. *Tribol. Int.*, 43:1735–1741, 2010.
- [132] A. Sarac, M. S. Oztop, C. F. O. Dahlberg, and J. W. Kysar. Spatial distribution of the net Burgers vector density in a deformed single crystal. *Int. J. Plast.*, 85:110–129, 2016.
- [133] M. Sauzay and L. P. Kubin. Scaling laws for dislocation microstructures in monotonic and cyclic deformation of fcc metals. *Prog. Mater Sci.*, 56:725–784, 2011.
- [134] J. Y. Shu, W. E. King, and N. A. Fleck. Finite elements for materials with strain gradient effects. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 44:373–391, 1999.
- [135] A. Spadoni and M. Ruzzene. Elasto-static micropolar behavior of a chiral auxetic lattice. J. Mech. Phys. Solids, 60:156–171, 2012.
- [136] P. Steinmann. Theory and numerics of ductile micropolar elastoplastic damage. Int. J. Numer. Methods Eng., 38:583–606, 1995.
- [137] N. A. Stelmashenko, M. G. Walls, L. M. Brown, and Y. V. Milman. Microindentations on W and Mo oriented single crystals: an STM study. *Acta Metall. Mater.*, 41:2855–2865, 1993.
- [138] J. S. Stölken and A. G. Evans. A microbend test method for measuring the plasticity length scale. *Acta Mater.*, 46:5109–5115, 1998.
- [139] S. Stupkiewicz. Micromechanics of contact and interphase layers. Prace Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN, 2005.
- [140] S. Stupkiewicz and H. Petryk. A minimal gradient-enhancement of the classical continuum theory of crystal plasticity. Part II: Size effects. *Arch. Mech.*, 68:487–513, 2016.
- [141] S. Stupkiewicz, M. J. Lewandowski, and J. Lengiewicz. Micromechanical analysis of friction anisotropy in rough elastic contacts. *Int. J. Solids Struct.*, 51:3931–3943, 2014.
- [142] J. Sulem and H. B. Mühlhaus. A continuum model for periodic two-dimensional block structures. *Mech. of Cohesive-frict. Mater.*, 2:31–46, 1997.
- [143] J. G. Swadener, E. P. George, and G. M. Pharr. The correlation of the indentation size effect measured with indenters of various shapes. J. Mech. Phys. Solids, 50:681–694, 2002.
- [144] G. I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I. Theoretical. Proc. R. Soc. London, Ser. A, 145:362–387, 1934.
- [145] J. Tejchman. Shear Localization in Granular Bodies with Micro-Polar Hypoplasticity. Springer Science & Business Media, 2008.

- [146] J. Tejchman and E. Bauer. Numerical simulation of shear band formation with a polar hypoplastic model. *Comp. Geotech.*, 19:221–244, 1996.
- [147] C. Tekoğlu and P. R. Onck. Size effects in two-dimensional Voronoi foams: a comparison between generalized continua and discrete models. J. Mech. Phys. Solids, 56:3541–3564, 2008.
- [148] I. Temizer. Sliding friction across the scales: Thermomechanical interactions and dissipation partitioning. J. Mech. Phys. Solids, 89:126–148, 2016.
- [149] A.I. Vakis, V.A. Yastrebov, J. Scheibert, L. Nicola, D. Dini, C. Minfray, A. Almqvist, M. Paggi, S. Lee, G. Limbert, J.F. Molinari, G. Anciaux, R. Aghababaei, S. Echeverri Restrepo, A. Papangelo, A. Cammarata, P. Nicolini, C. Putignano, G. Carbone, S. Stupkiewicz, J. Lengiewicz, G. Costagliola, F. Bosia, R. Guarino, N.M. Pugno, M.H. Müser, and M. Ciavarella. Modeling and simulation in tribology across scales: An overview. *Tribol. Int.*, 125:169–199, 2018.
- [150] I. Vardoulakis. Shear banding and liquefaction in granular materials on the basis of a cosserat continuum theory. *Ingenieur Archiv.*, 59:106–113, 1989.
- [151] I. Vardoulakis. Cosserat Continuum Mechanics: With Applications to Granular Media. Springer, 2018.
- [152] P. Wriggers. Computational Contact Mechanics. Springer Science & Business Media, 2006.
- [153] S. Wulfinghoff and T. Boehlke. Gradient crystal plasticity including dislocation-based work-hardening and dislocation transport. *Int. J. Plast.*, 69:152–169, 2015.
- [154] Saito Y., Oztop M. S., and J. W. Kysar. Wedge indentation into elastic-plastic single crystals.2: Simulations for face-centered cubic crystals. *Int. J. Plast.*, 28:70–87, jan 2012.
- [155] J. F. C. Yang and R. S. Lakes. Transient Study of Couple Stress Effects in Compact Bone: Torsion. J. Biomech. Eng., 103:275–279, 1981.
- [156] J. F. C. Yang and R. S. Lakes. Experimental study of micropolar and couple stress elasticity in bone in bending. J. Biomech., 15:91–98, 1982.
- [157] H. W. Zhang, H. Wang, P. Wriggers, and B. A. Schrefler. A finite element model for contact analysis of multiple Cosserat bodies. *Comput. Mech.*, 36:444–458, 2005.
- [158] T.-Y. Zhang, W.-H. Xu, and M.-H. Zhao. The role of plastic deformation of rough surfaces in the size-dependent hardness. *Acta Mater.*, 52:57–68, 2004.
- [159] T. Zisis, P. A. Gourgiotis, K. P. Baxevanakis, and H. G. Georgiadis. Some basic contact problems in couple stress elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 51:2084–2095, 2014.

[160] T. Zisis, P. A. Gourgiotis, and F. Dal Corso. A contact problem in couple stress thermoelasticity: The indentation by a hot flat punch. *Int. J. Solids Struct.*, 63:226–239, 2015.