

Nestandardní periodické podmínky - příklad kompozitu s bobtnající maticí

Ján Šomvársky



COMSOL – setkání uživatelů 27. května 2016

V čem je problém?

- **Periodické podmínky**

- Standardní periodické podmínky v COMSOLu: $\mathbf{u}(\mathbf{x}_d) = \mathbf{u}(\mathbf{x}_s)$
- Bobtnající polymer s částicemi plniva mění objem i geometrii \Rightarrow
- $\mathbf{u}(\mathbf{x}_d) \neq \mathbf{u}(\mathbf{x}_s)$ a v COMSOLu zabudované periodické podmínky jsou nepoužitelné
- Problém řeší kombinace *Boundary Similarity* a *Prescribed Displacement*

- **Sít' zdrojových a cílových ploch**

- měla by být stejná
- jak toho docílit?
- síťování zdrojové plochy a kopírování na cílovou je nejhorší varianta

Obsah prezentace

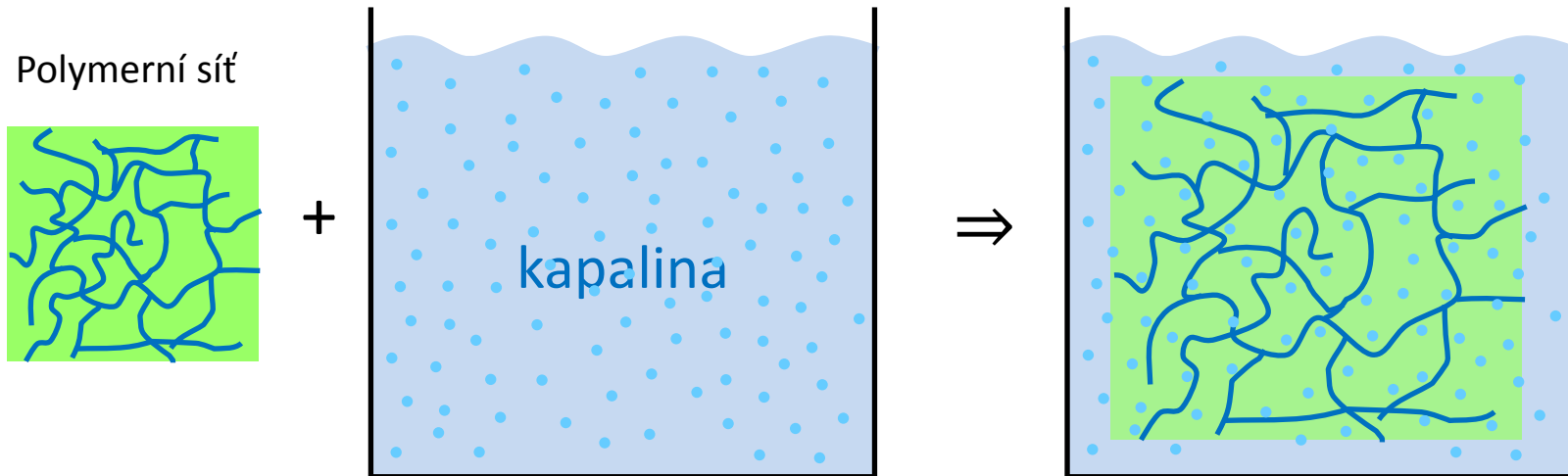
- Stručný popis fyziky a geometrie kompozitních materiálů s bobtnající polymerní maticí
- Implementace periodických podmínek pomocí mechanismu *Boundary Similarity* a *Prescribed Displacement*
- Sítování zdrojových a cílových ploch pro periodické opakování
- Ukázka výsledků

Polymerní síť – (makro)molekula přes celý vzorek



Rovnováha:

bobtnací expanzní síly versus
elastické síly působící proti roztahování

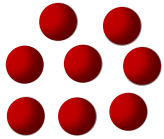


$$\Delta G_{sw} = F(\text{relativního prodloužení, interakce s kapalinou})$$

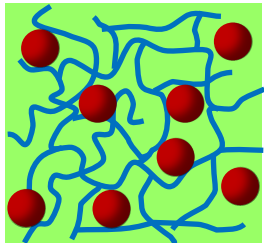
$$\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$$

$$g(\phi_2)$$

Kompozitní materiály – důležité pro biomedicínské aplikace + technické, inženýrské materiály



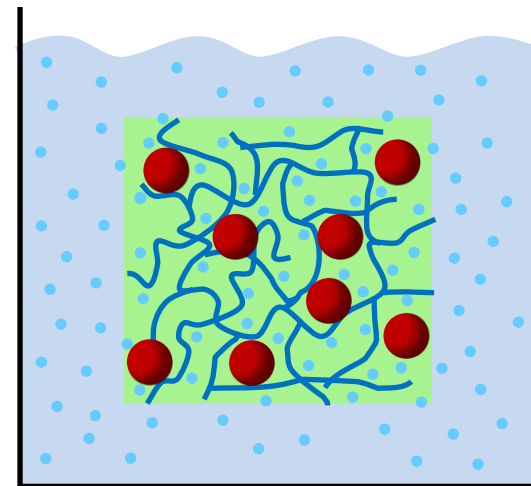
Tuhé částice
zabudované do
polym. sítě



+



⇒



⇒ tužší materiál

bobtná méně

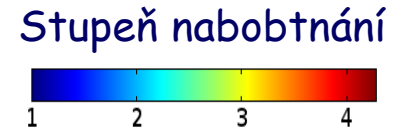
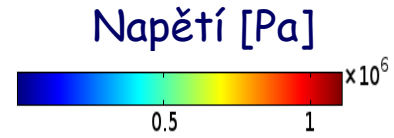
- přilnavá polymerní matrice

⇒ zdroj dalšího omezení ⇒ vliv na λ a ΔG_{sw}

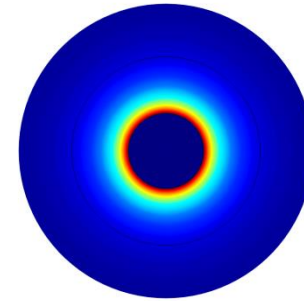
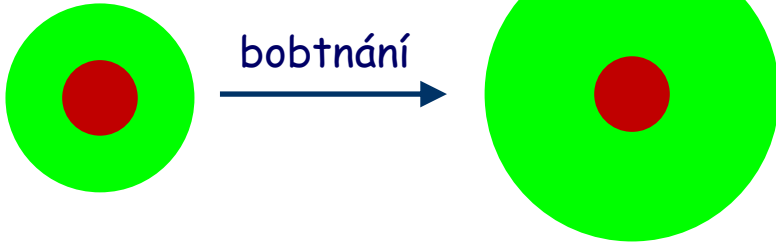
problém: nehomogenní napěťové a deformační pole

⇒ FEM

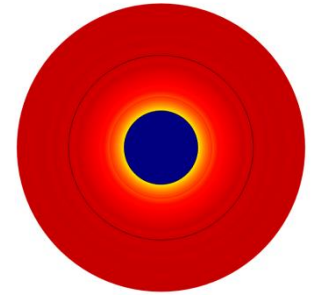
Adheze



Dokonalá adheze

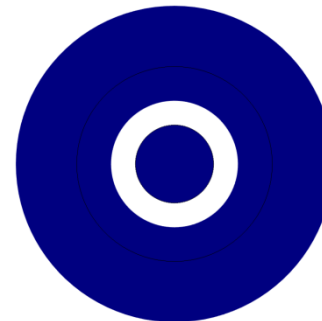
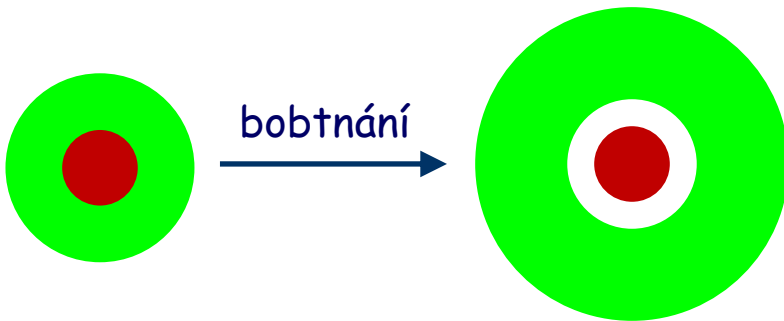


mění se napětí

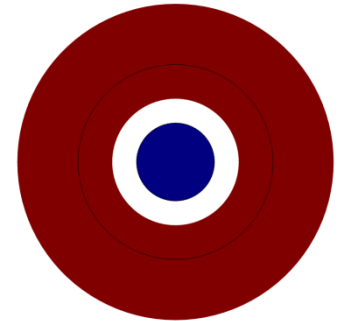


mění se nabobtnání

Nepřilnavý polymer



nulové napětí



konstantní nabobtnání

Gibbsův elastický a směšovací potenciál polymerní matrice

$$\Delta G_{sw} = \Delta G_{el} + \Delta G_{mix} \quad (\square \text{ předpoklad aditivity})$$

Gibbsův potenciál elasticity sítě – různé modely

Gauss:
$$\frac{\Delta G_{el}}{RT} = \frac{1}{2} N_e (\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2 - 3) - \frac{2}{f_e} N_e \ln \lambda_x \lambda_y \lambda_z$$

Gent:
$$\frac{\Delta G_{el}}{RT} = -\frac{J_{1,max}}{2} N_e \ln \left(1 - \frac{J_1}{J_{1,max}} \right) - \frac{2}{f_e} N_e \ln \lambda_x \lambda_y \lambda_z$$

$$J_1 = I_1 - 3, \quad I_1 = \lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2$$

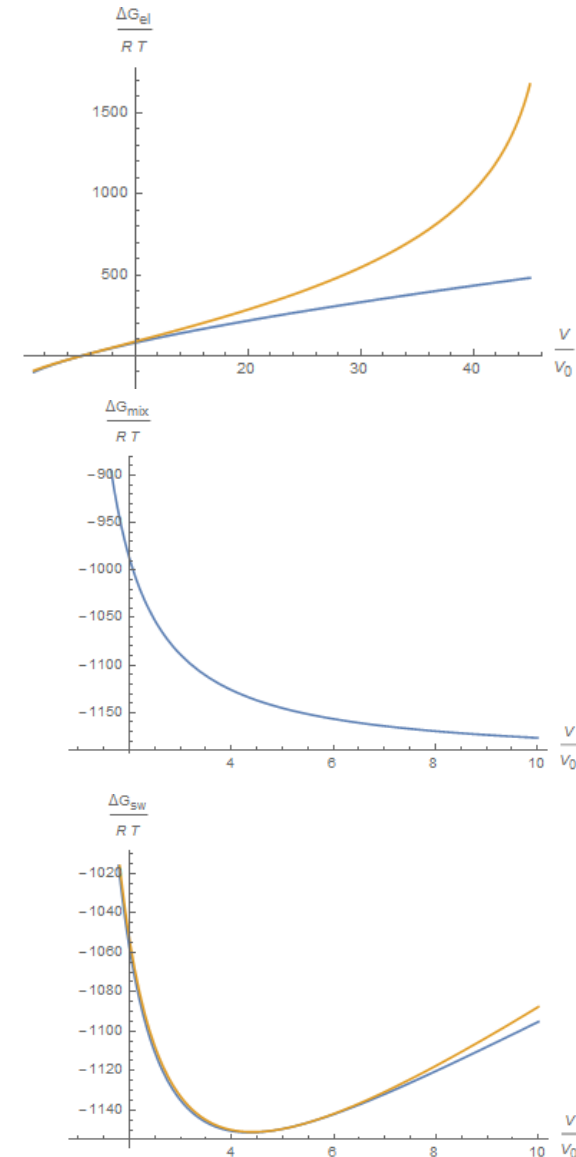
Gibbsův potenciál směšování polymer – rozpouštědlo

Flory – Huggins:
$$\frac{\Delta G_{mix}}{RT} = N_1 \ln \phi_1 + g(\phi_2) N_1 \phi_2$$

$$\phi_2 = \frac{V_{polym}}{V_{polym} + V_{solv}} \quad (\text{roste s klesajícím stupněm nabobtnání})$$

$$\phi_1 = 1 - \phi_2$$

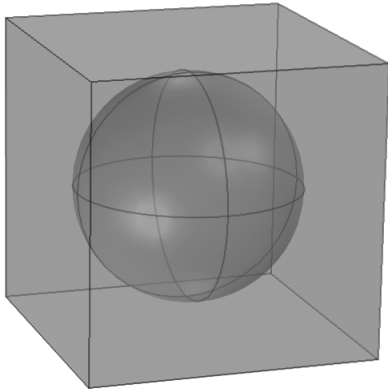
Materiál plniva (keramika) \Rightarrow Hookovský, modul o 4 – 5 řádů vyšší ($E = 300 \text{ GPa}$) \Rightarrow prakticky se nedeformuje



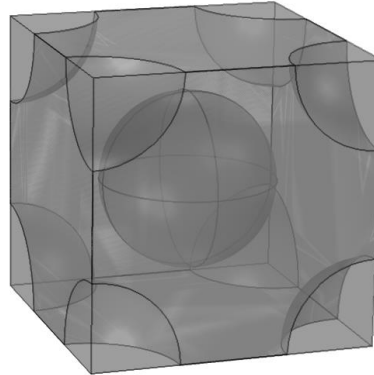
Representative Volume Element (RVE)

– periodicky opakující se ve všech třech dimenzích

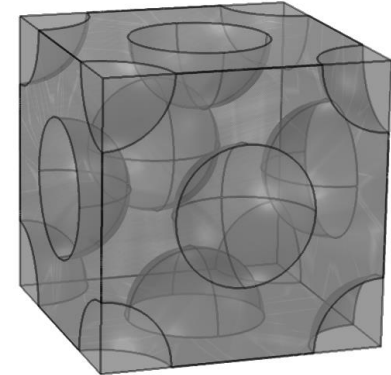
SC



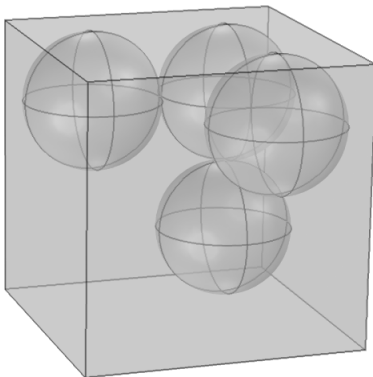
BCC



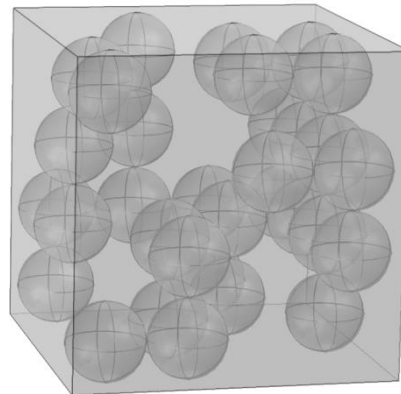
FCC



2x2x2(4) vláknité



4x4x4(32)-náhodné



Jiné použité RVE:

- 6x6x6 náhodné
- 6x6x6 vláknité
- 6x6x6 zhlukovité

Periodické podmínky

pro opakování
ve směru

$$x: \quad \mathbf{u}(0, Y, Z) - \mathbf{u}(0, 0, 0) = \mathbf{u}(a_0, Y, Z) - \mathbf{u}(a_0, 0, 0)$$

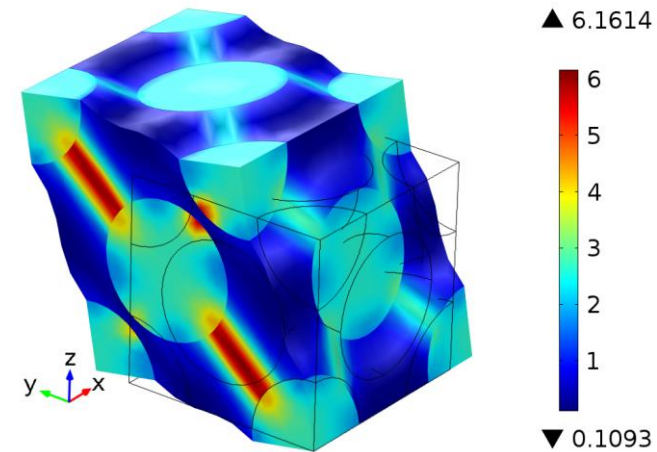
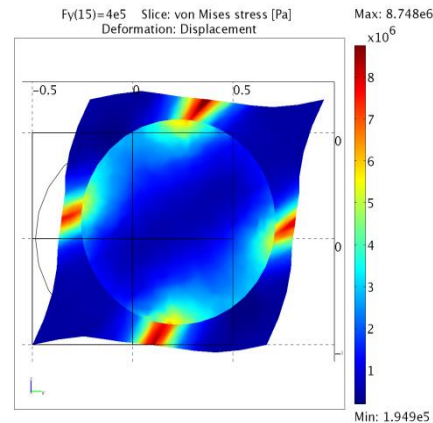
$$y: \quad \mathbf{u}(X, 0, Z) - \mathbf{u}(0, 0, 0) = \mathbf{u}(X, a_0, Z) - \mathbf{u}(0, a_0, 0)$$

$$z: \quad \mathbf{u}(X, Y, 0) - \mathbf{u}(0, 0, 0) = \mathbf{u}(X, Y, a_0) - \mathbf{u}(0, 0, a_0)$$

$\mathbf{u} = (u, v, w)$ – vektor posunutí,

a_0 – délka hrany RVE

- Okrajové roviny mohou měnit velikost i tvar dokonce na nerovinný, ale vzdálenost mezi odpovídajícími body je konstantní ale jiná než původně o hodnotu $\mathbf{u}(a_0, 0, 0) - \mathbf{u}(0, 0, 0)$ pro x , ...
např. smyk nabobtnalého SC nebo FCC



- Prostředek COMSOL Multiphysics® „Periodic conditions“ není určen pro podmínky s nenulovým posunutím $\mathbf{u}(a_0, 0, 0) - \mathbf{u}(0, 0, 0)$ ve směru x , podobně y , z).
- Prostředek „Boundary Similarity“ + „Prescribed displacement“ řeší tento problém

COMSOL Boundary Similarity

- Propojovací (párovací) operátor mapuje výraz (funkci) definovanou na ploše (její části) na jinou plochu (část) stejného tvaru. Lehce se liší pro 2D a 3D
- Ve 3D: cílová (destination) plocha je mapována na sadu zdrojových (source) ploch. Síť je nahlížena z geometrického rámce (ne prostorového, materiálového či síťového). V případě více možností (když existují symetrie), algoritmus automaticky vybere jednu z nich, nebo výběr lze ovlivnit pomocí One-Point Map, Two-Point Map, nebo Edge Map podpoložky v menu
- V našem případě
 - zdrojové roviny jsou ty vzdálenější od počátku, procházející bodem $(a_0, 0, 0)$ pro rovinu kolmou na x , podobně y , z
 - cílové roviny procházejí počátkem (jeden roh kostky RVE je v počátku a je fixovaný kvůli zabránění translaci RVE: $\mathbf{u}(0, 0, 0) = \mathbf{0}$)
 - destinační plocha má *Prescribed Displacement* dané rovnicemi na předchozím slajdu: $\mathbf{u}(0, Y, Z) = \mathbf{u}(a_0, Y, Z) - \mathbf{u}(a_0, 0, 0)$ pro x , podobně pro y , z

Příklad Boundary Similarity



The screenshot displays the COMSOL Multiphysics interface with the following components:

- Model Builder:** Shows a tree view of the model structure. Under "Definitions", several "Boundary Similarity" objects are listed, including "Boundary Similarity X_b1 (bndsimX_b1)".
- Settings:** The "Boundary Similarity" settings panel is open for "Boundary Similarity X_b1".
 - Label: Boundary Similarity X_b1
 - Operator name: bndsimX_b1
 - Source Boundaries: Selection: Manual, Active: 185
 - Destination Boundary: Destination boundary: 126, Active: +
 - Advanced: Use source map; x-expression: x; y-expression: y; z-expression: z
 - Mesh search method: Use tolerance
 - Extrapolation tolerance: 0.3
 - Use NaN when mapping fails
- Graphics:** A 3D plot of a sphere centered in a cube. The cube's edges are labeled with $\times 10^{-5}$. A pink face on the left is labeled "destination" with a green arrow, and a yellow face on the right is labeled "source" with a green arrow. The axes are labeled x, y, and z.
- Messages:** Shows the software version (COMSOL 5.2.0.220), license expiration (7 days), and the opened file name.

Prescribed Displacement definuje periodické podmínky

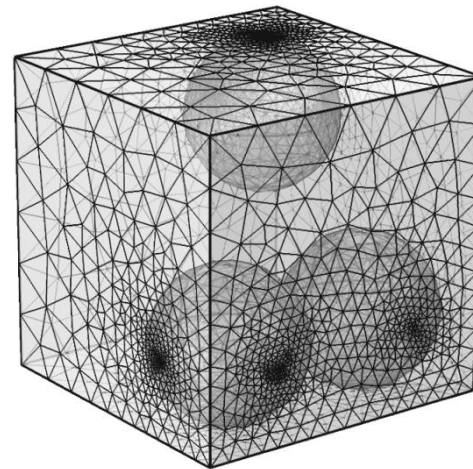
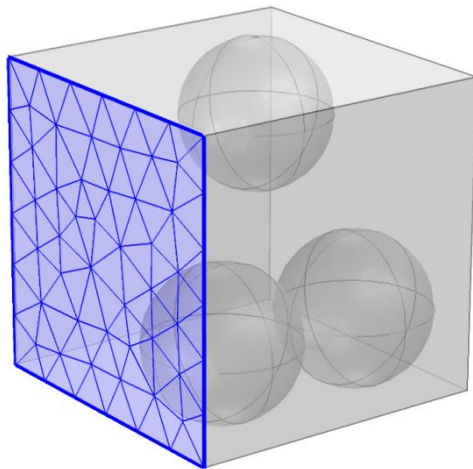
$$\text{bndsimX_b1}(u) - \text{intop1}(u) = u(a_0, Y, Z) - u(a_0, 0, 0), \dots$$

The screenshot displays the COMSOL Multiphysics software interface, divided into three main panels:

- Model Builder:** Shows a hierarchical tree of model components. The 'Displacement X_b1' component is selected and highlighted in blue. Other components include 'Alumina (mat1)', 'PMMA (mat2)', 'Solid Mechanics (solid)', 'Linear Elastic Material 1', 'Free 1', 'Initial Values 1', 'Hyperelastic Material 1', 'Fixed Constraint 1', 'Prescribed Displacement 1', 'Prescribed Displacement 2', 'Displacement Y_b1', 'Displacement Z_b1', 'Boundary Load 1', 'Boundary Load 2', and 'Mesh 1'.
- Settings:** Displays the configuration for the 'Displacement X_b1' component. The 'Boundary Selection' is set to 'B2X0_b1'. The 'Coordinate system' is 'Global coordinate system'. Under 'Prescribed Displacement', the 'Standard notation' is selected, and the 'Prescribed in x', 'y', and 'z' directions are all checked. The equations for the prescribed displacements are:
 - $u_{0x} = \text{bndsimX_b1}(u) - \text{intop1}(u)$ (m)
 - $u_{0y} = \text{bndsimX_b1}(v) - \text{intop1}(v)$ (m)
 - $u_{0z} = \text{bndsimX_b1}(w) - \text{intop1}(w)$ (m)
- Graphics:** Shows a 3D visualization of a cube with a sphere inside. The axes are labeled x, y, and z. The dimensions of the cube are indicated as 8×10^{-5} m. The sphere is centered within the cube.

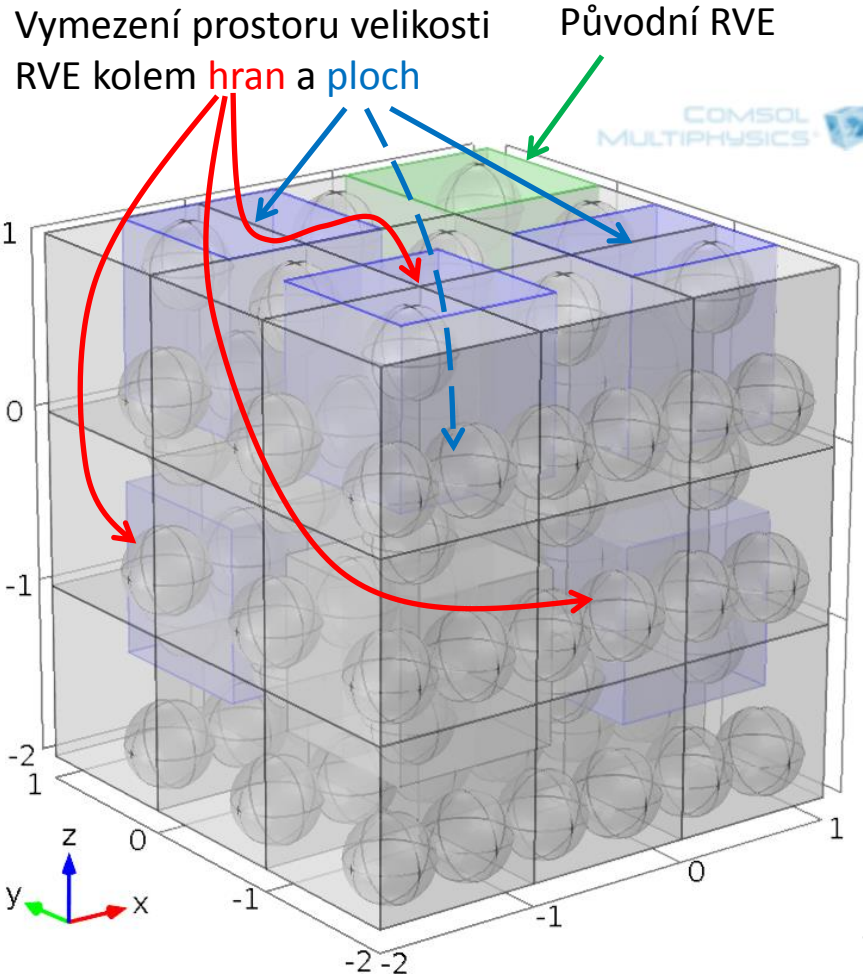
Periodické podmínky a síť (Mesh)

- Plochy mapované při periodickém opakování by měly mít stejnou síť
- Síťování pouze plochy (2D object) \Rightarrow objekty blízké této ploše neovlivní síť \Rightarrow \Rightarrow nepoužitelná síť
- Síťování celého 3D vzorku vede k různým sítím na odpovídajících plochách \Rightarrow \Rightarrow nevhodné pro periodické podmínky

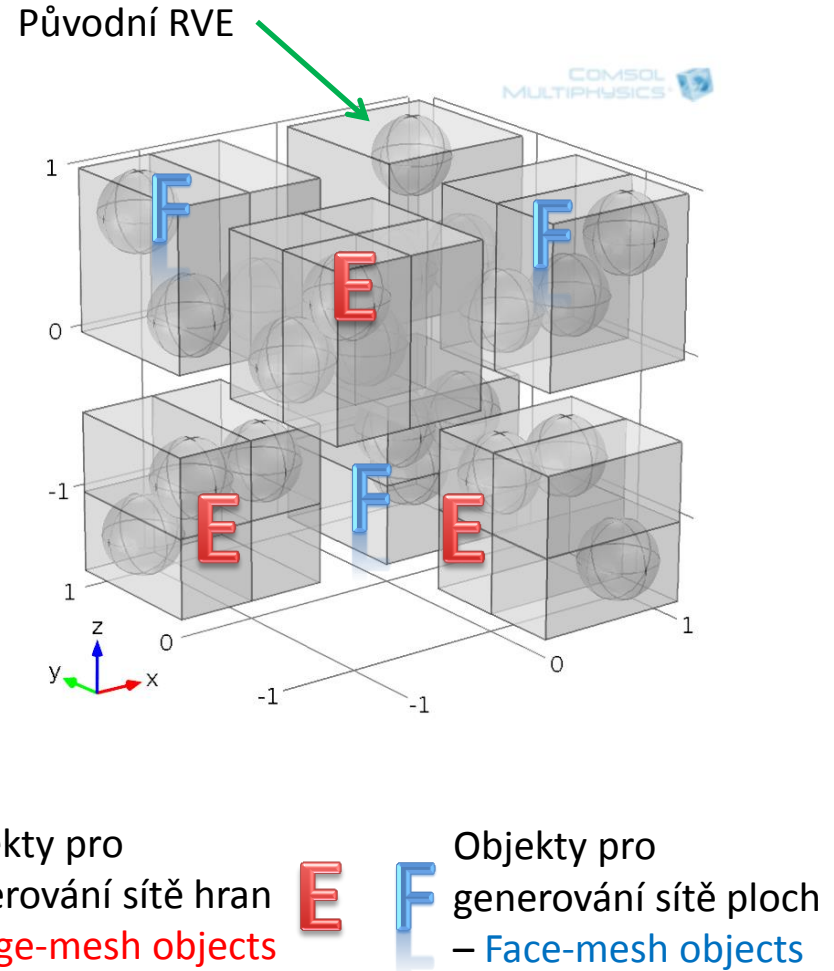


Vytvoření pomocných objektů pro síťování

Blok 3x3x3 RVE



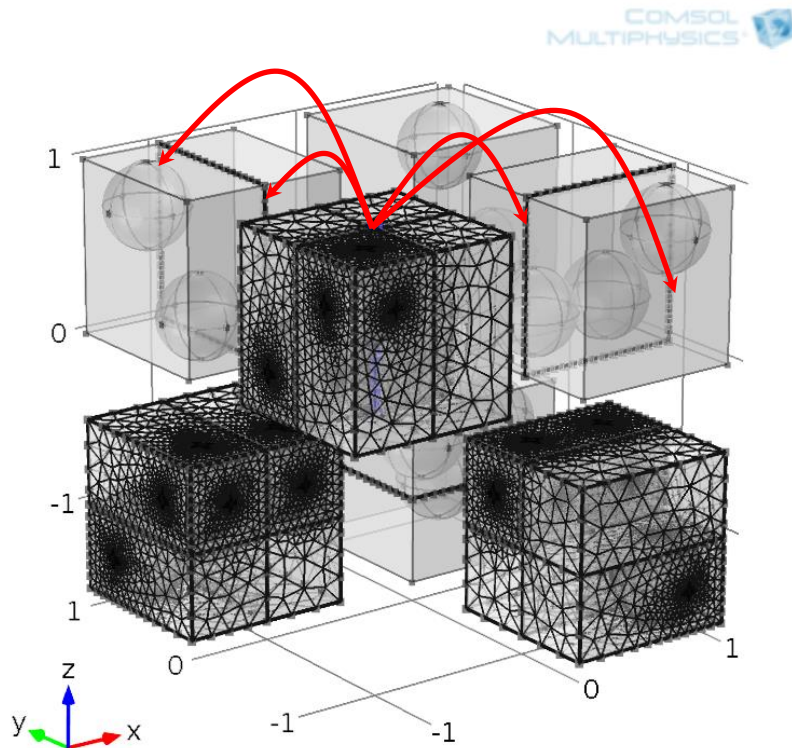
Pomocné objekty pro generování sítě



Generování a kopírování sítí hran a ploch

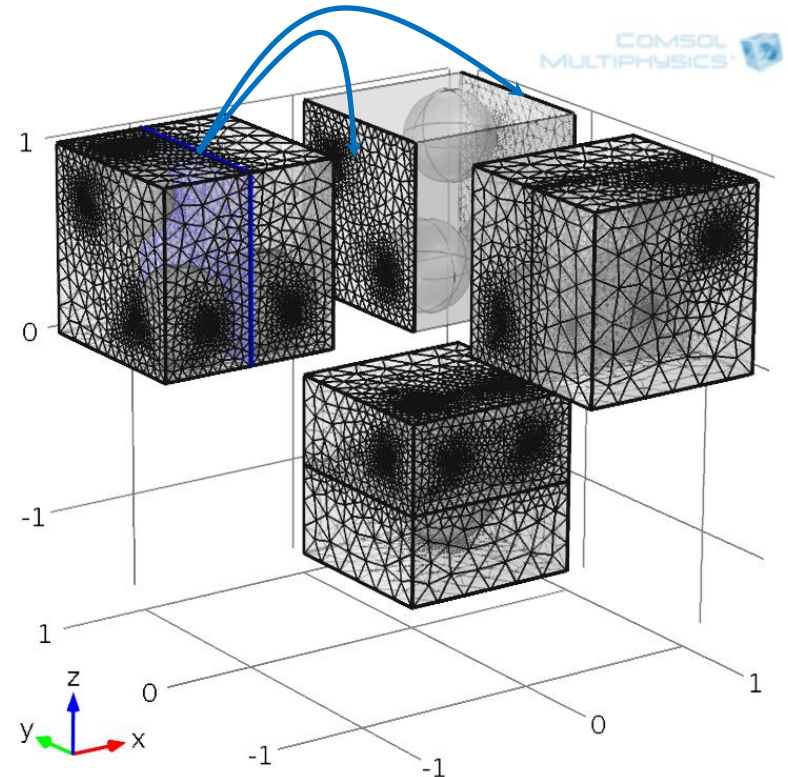
- Síťování **Edge objects**

- Kopírování sítí hran na odpovídající hrany **Face-mesh objects** (4 pro x, stejně pro y a z směr)



- Síťování **Face-mesh objects**

- Kopírování sítí ploch na hranice RVE (2 pro x, stejně pro y a z směr)

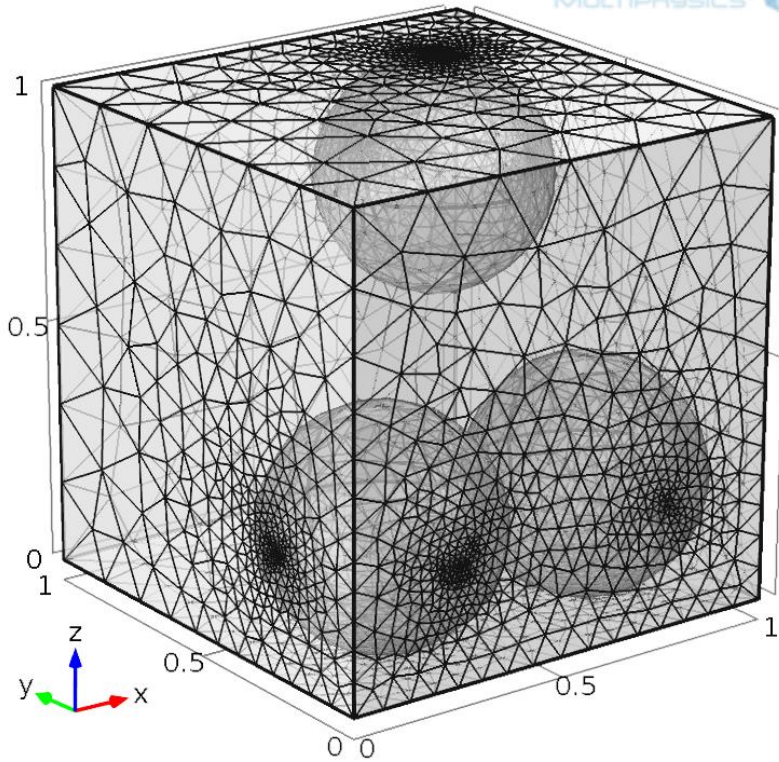


- Nakonec síťování RVE s danými sítěmi ploch

Porovnání sítí

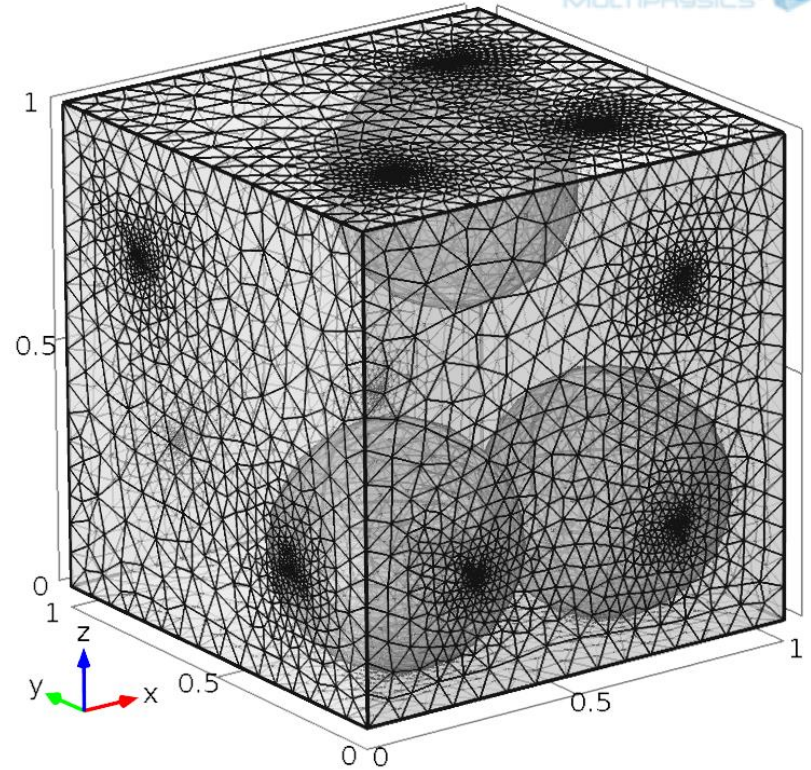
Přímé síťování RVE

COMSOL
MULTIPHYSICS

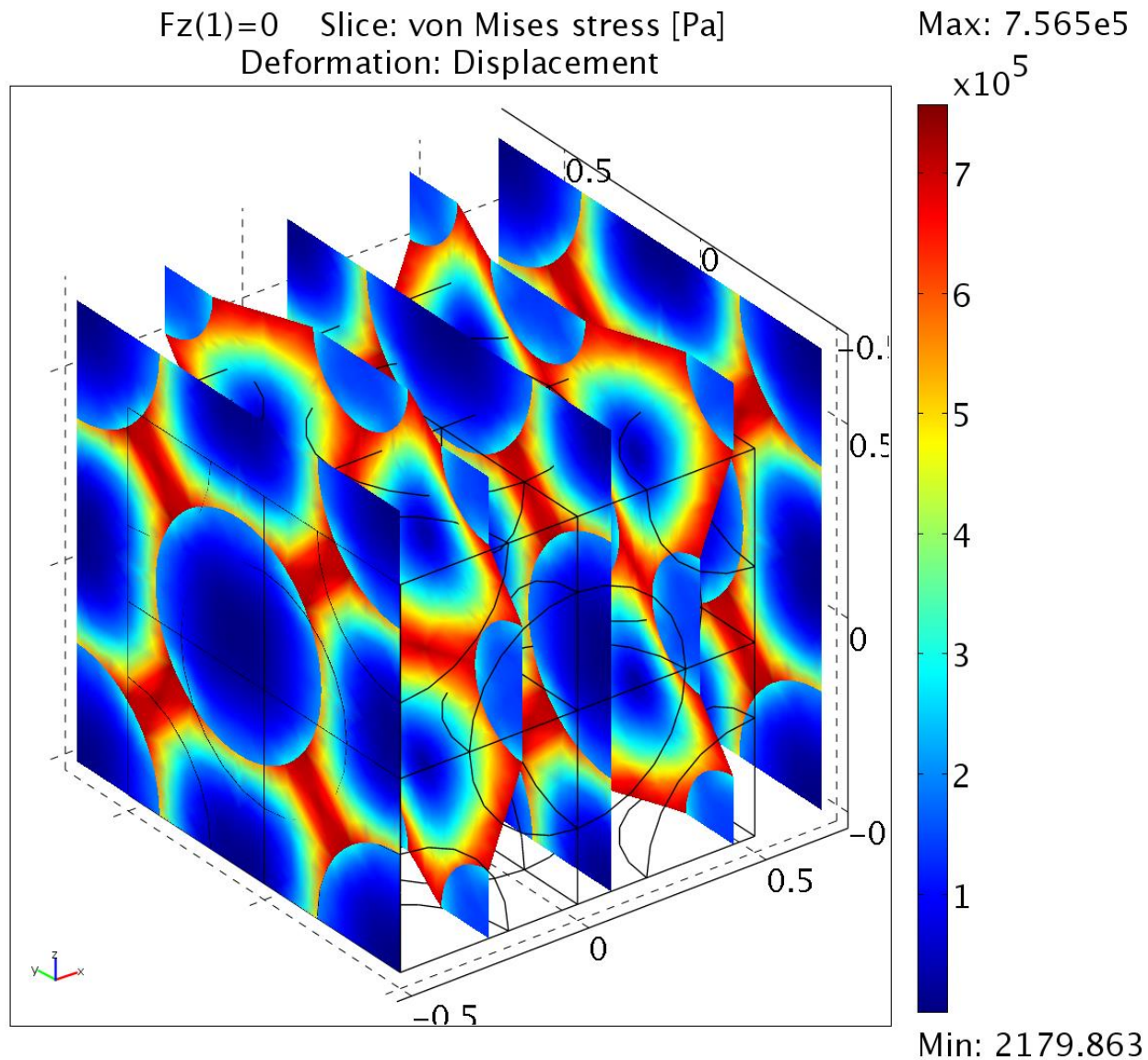


Síťování RVE popsanou procedurou

COMSOL
MULTIPHYSICS

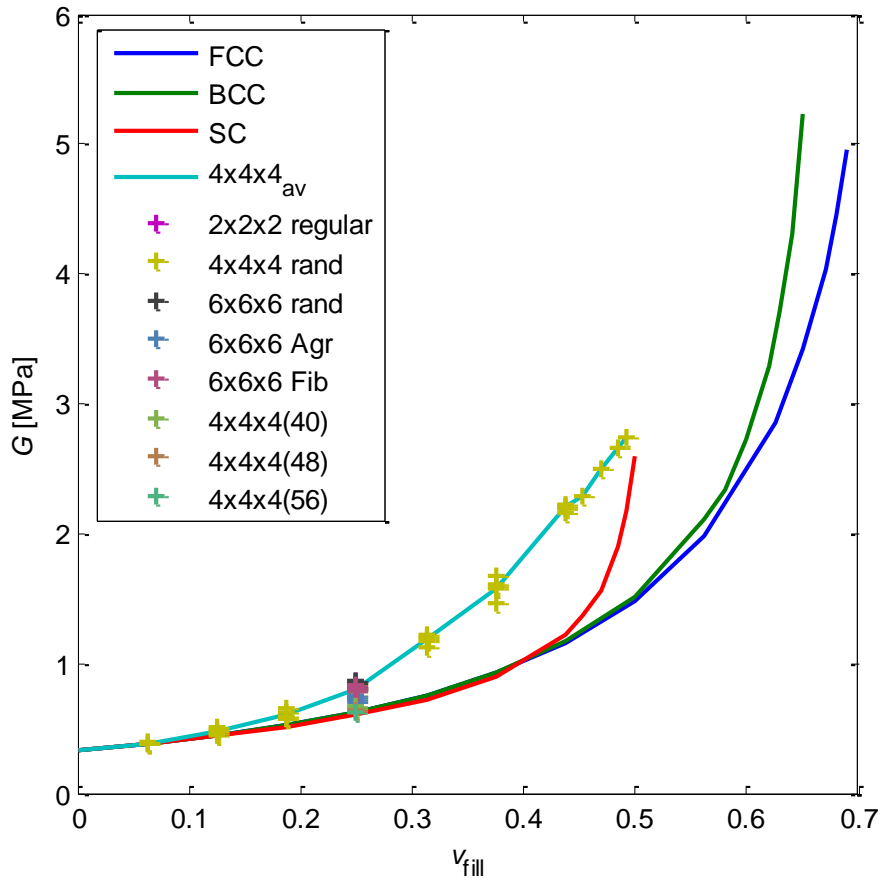


Pole napětí pro kompozit s nabobtnalou maticí, FCC

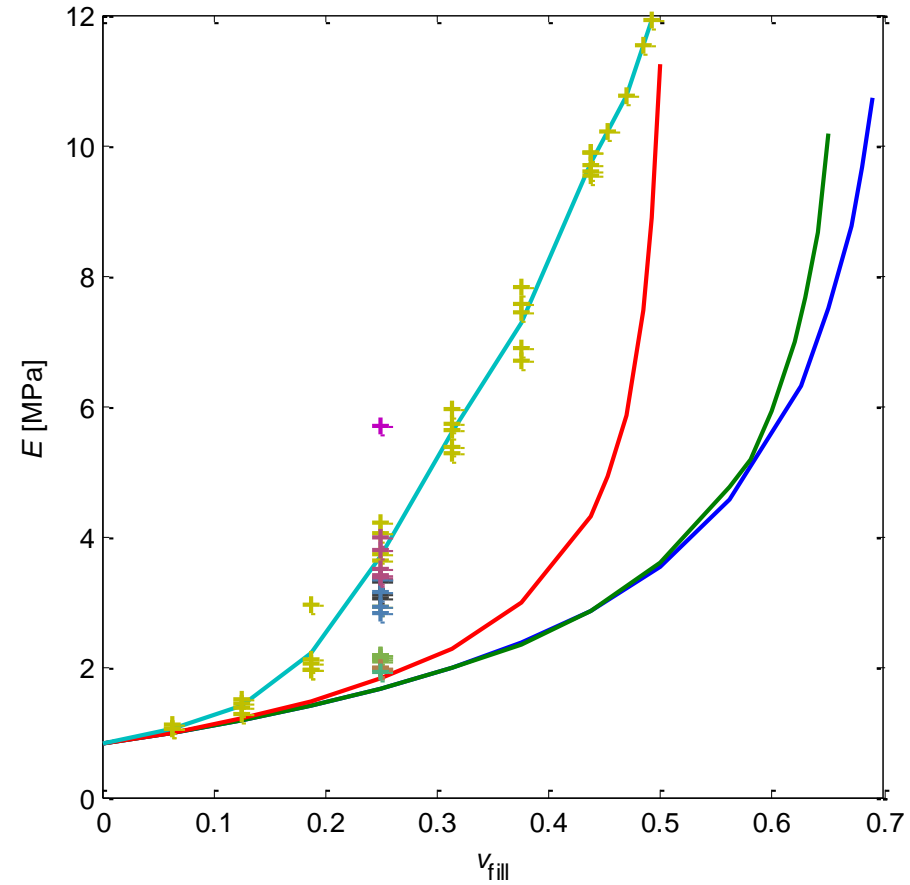


Vliv rozmístění částic na moduly

G vs. v_{fill} , for different particle-position-distributions

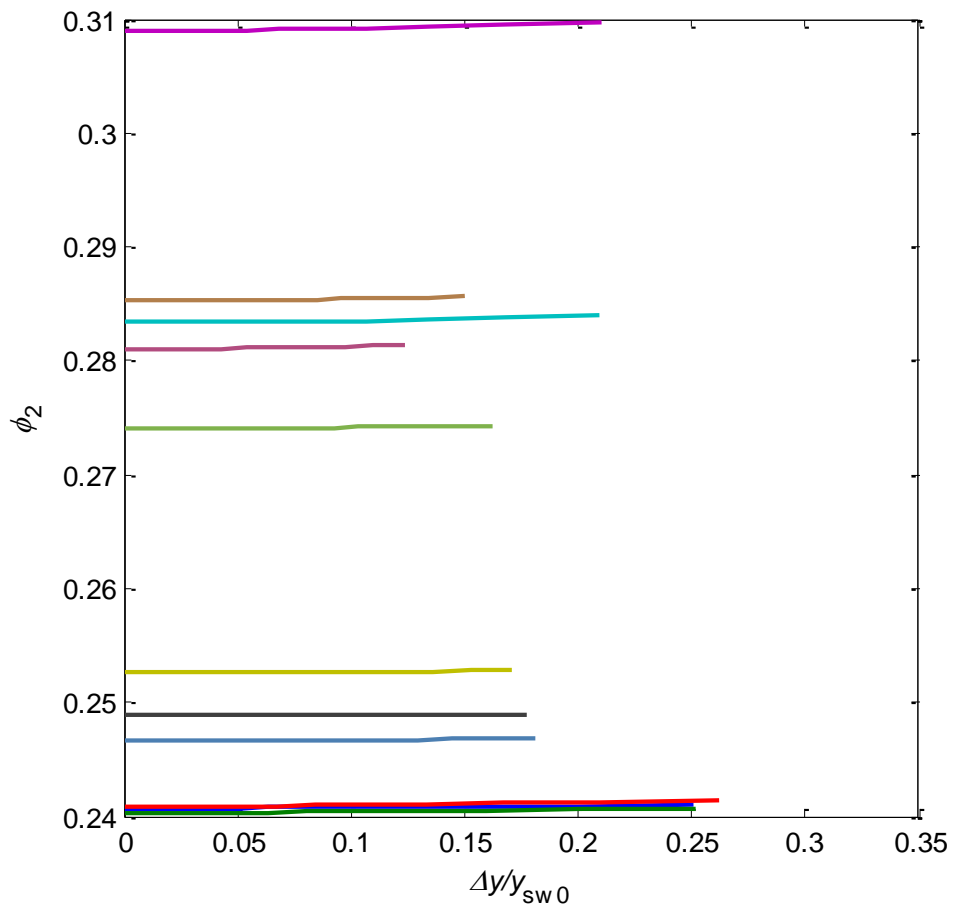


E vs. v_{fill} , for different particle-position-distributions

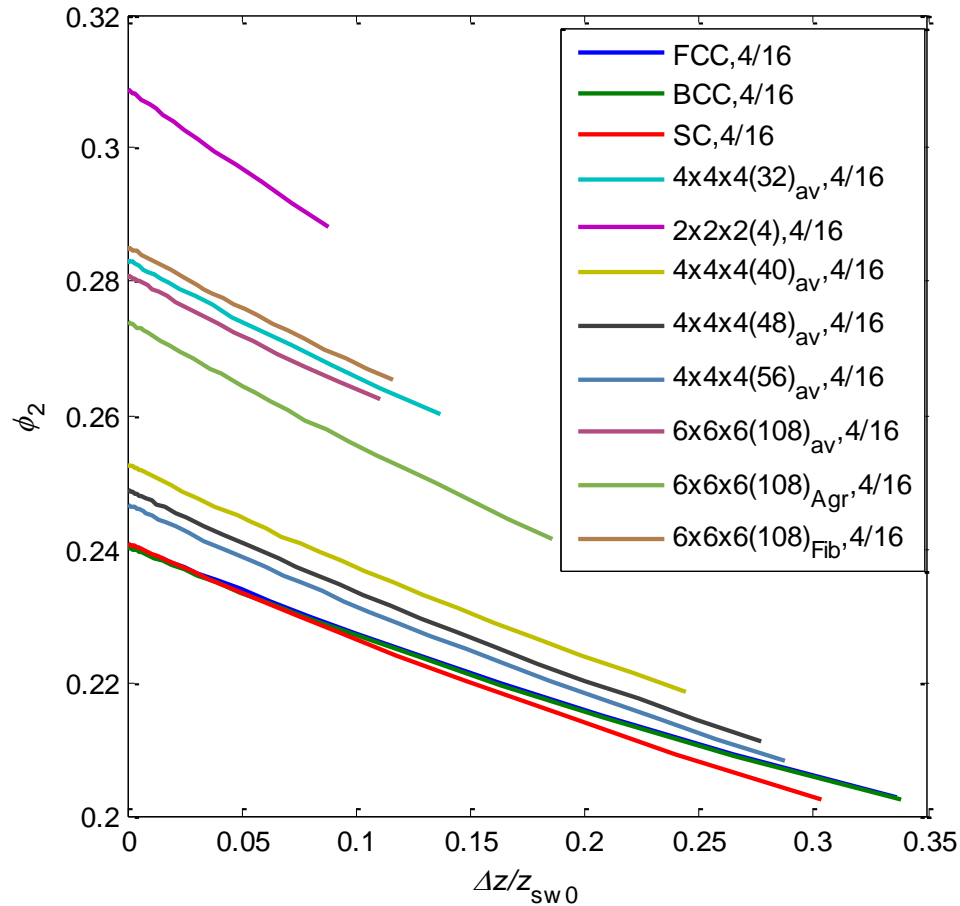


Bobtnání vs deformace pro smyk a tah, $v_{\text{fill}} = 4/16$

ϕ_2 vs. $\Delta y/y_{\text{sw}0}$, for different particle-position-distributions

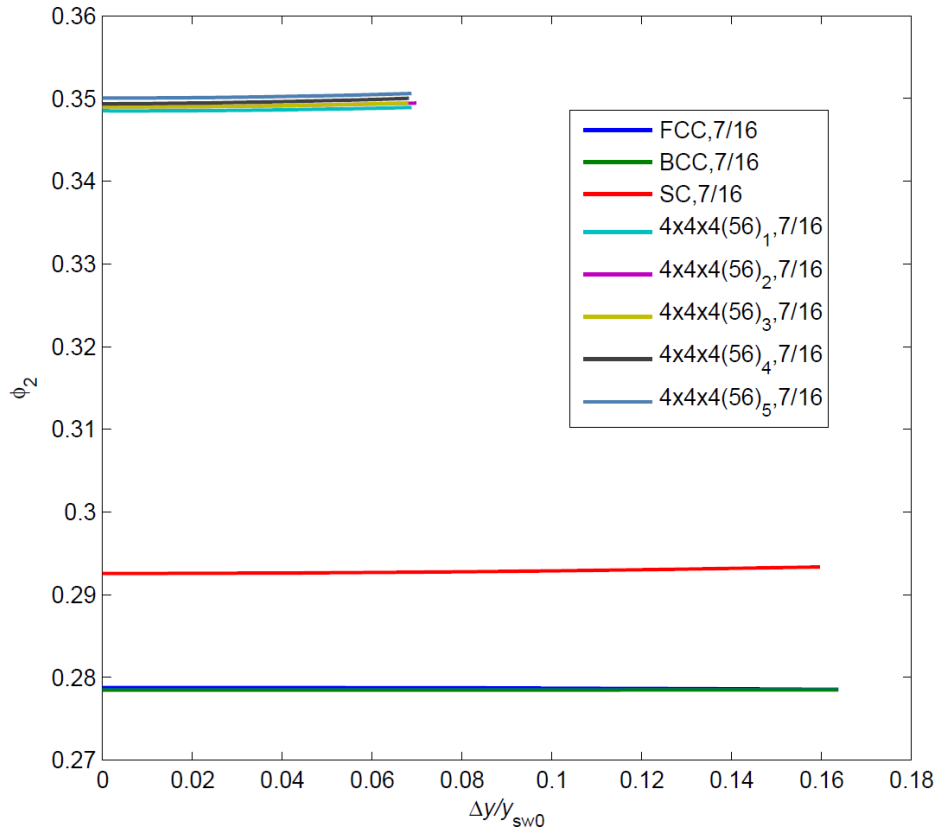


ϕ_2 vs. $\Delta z/z_{\text{sw}0}$, for different particle-position-distributions

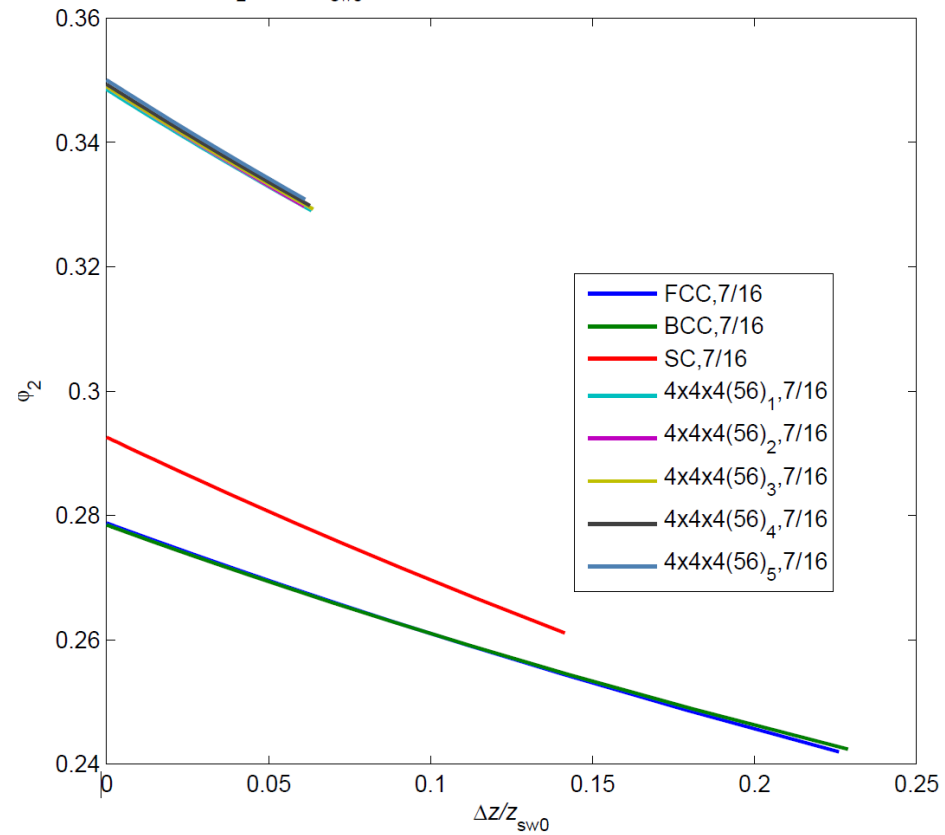


Bobtnání vs. deformace pro smyk a tah , $v_{\text{fill}} = 7/16$

ϕ_2 vs. $\Delta y/y_{\text{sw}0}$, for different particle-position-distributions



ϕ_2 vs. $\Delta z/z_{\text{sw}0}$, for different particle-position-distributions



Shrnutí

- Funkce *Periodic Conditions* je určena jen pro periodické a antiperiodické podmínky

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_d) = \pm \mathbf{u}(\mathbf{x}_s)$$

- Složitější periodické podmínky je nutné zadat pomocí kombinace mechanismů *Boundary Similarity* a *Prescribed Displacement*
- Odpovídající plochy se doporučuje síťovat stejně. Síťování zdrojových ploch a kopírování na cílové nevede k použitelné síti. Řešení: zavedeme pomocné skryté objekty velikosti RVE pro síťování hran a ploch. Nejdříve síťujeme objekty pro hrany. Síť hran kopírujeme do objektů pro síťování ploch, síť ploch pak kopírujeme do RVE a nakonec síťujeme RVE.
- Model kompozitu umožňuje studovat mechanické vlastnosti v závislosti na objemu plniva, rozmístění a tvaru částic, vlastnostech matrice a rozpouštědla, na silovém působení, ...

Děkuji za pozornost!