Mikrostrukturno modeliranje elastoplastičnog ponašanja nodularnog lijeva primjenom homogenizacije s reduciranim brojem stupnjeva slobode

Plavšić, Luka

Master's thesis / Diplomski rad

2023

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:674885

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-03**

Repository / Repozitorij:

Repository of Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture University of Zagreb

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Luka Plavšić

Zagreb, 2023.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Mentor:

doc. dr. sc. Tomislav Lesičar, mag. ing.

Student:

Luka Plavšić

Zagreb, 2023.

Izjavljujem da sam ovaj rad izradio samostalno koristeći znanja stečena tijekom studija i navedenu literaturu.

Velike zahvale mentoru doc. dr. sc. Tomislavu Lesičaru na pruženoj prilici, svim savjetima i uputama tijekom izrade diplomskog rada. Vaš pristup je uvelike učinio suradnju ugodnijom.

Zahvaljujem se asistentu Anti Jurčeviću, mag. ing. mech. koji je posebno doprinio izradi ovog rada svojim savjetima, smjernicama i susretljivosti. Bez Vas bi tijek izrade ovog rada bio mnogostruko mukotrpniji i teži.

Hvala svim prijateljima i kolegama s kojima sam imao priliku dijeliti lijepe trenutke tijekom studentskih dana.

Posebne zahvale mojim roditeljima Zlatku i Višnji, bratu Marinu i sestri Marini, kao i cijeloj široj obitelji na nebrojenim savjetima i velikoj podršci. Hvala što ste me usmjerili u pravom smjeru te postavili temelje mog bića. Bez vas ovaj rad ne bi bio moguć.

I šećer na kraju, hvala dragoj djevojci Barbari na ukazanoj ljubavi i emocionalnoj potpori tijekom teški trenutaka, te na neizmjernoj sreći tijekom lijepih.

Luka Plavšić

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE
Središnje povjerenstvo za završne i diplomske ispite
Povjerenstvo za diplomske ispite studija strojarstva za smjerove:
Procesno-energetski, konstrukcijski, inženjersko modeliranje i računalne simulacije i brodostrojarski

Sveučilište u Zagrebu Fakultet strojarstva i brodogradnje	
Datum	Prilog
Klasa: **602 - 04 / 23 - 6 / 1**	
Ur.broj: **15 - 1703 - 23 -**	

DIPLOMSKI ZADATAK

Student: **Luka Plavšić** JMBAG: 0035203717

Naslov rada na hrvatskom jeziku: **Mikrostrukturno modeliranje elastoplastičnog ponašanja nodularnog lijeva primjenom homogenizacije s reduciranim brojem stupnjeva slobode**

Naslov rada na engleskom jeziku: **Microstructural modelling of elastoplastic behaviour of nodular cast iron by reduced homogenization method**

Opis zadatka:

Gotovo svi materijali se mogu na nekoj razini razmatranja smatrati heterogenima, što ujedno znači da je njihovo ponašanje uvjetovano međusobnom interakcijom različitih konstituenata na nižim razinama. Zahvaljujući ubrzanom razvoju naprednih numeričkih algoritama, numeričkom modeliranju materijala se sve češće pristupa s gledišta njegove mikrostrukture primjenom višerazinskih (multiscale) metoda. Na taj način je moguće odrediti direktnu vezu mikrostrukture i konstitutivnog ponašanja materijala na makrorazini, što omogućuje razvoj materijala optimalnih svojstava odabirom odgovarajuće raspodjele, volumenskog udjela i samih svojstava mikrokonstituenata. Za provedbu višerazinskih metoda nužno je poznavanje mehaničkih svojstava mikrokonstituenata, no njihovo eksperimentalno određivanje nije trivijalan postupak te i sami rezultati mogu biti upitne točnosti. Zbog toga se vrlo često za određivanje mehaničkih svojstava razmatranog mikrokonstituenta koriste numeričke simulacije i višerazinske metode. U ovom diplomskom radu razmatrat će se nodularni lijev EN-GJS-400-18-LT proizveden tehnikama lijevanja Tundish i Inmould, za koji su u okviru istraživanja provedenih na Katedri za mehaniku i čvrstoću provedena statička i metalografska eksperimentalna ispitivanja. Mikrostruktura nodularnog lijeva sastoji se od tri faze: grafitnih nodula, koje imaju vrla niska mehanička svojstva, perlitnih zrna, koja čine mali udio mikrostrukture i duktilne feritne matrice, koja čini dominantnu fazu mikrostrukture. Potrebno je:

1. Proučiti potrebnu literaturu vezanu uz numeričko modeliranje elastoplastičnog ponašanja materijala i metodu homogenizacije s reduciranim brojem stupnjeva slobode.
2. Odrediti reprezentativni volumenski element (RVE) nodularnog lijeva za svaku tehniku lijevanja te ispitati utjecaj broj klastera na rezultate homogenizacije.
3. Odrediti parametre elastičnog ponašanja feritne matrice nodularnog lijeva za svaku tehniku lijevanja.
4. Odrediti parametre nelinearnog izotropnog očvršćenja feritne matrice nodularnog lijeva za svaku tehniku lijevanja.

Prilikom generiranja RVE nodularnog lijeva zanemariti utjecaj perlitnih zrna. Numeričke simulacije potrebno je provesti uz prepostavku malih deformacija. Za provedbu numeričkih simulacija primijeniti komercijalni programski paket Abaqus. U radu je potrebno navesti korištenu literaturu i eventualno dobivenu pomoć.

Zadatak zadan:	Datum predaje rada:	Predviđeni datumi obrane:
17. studenoga 2022.	19. siječnja 2023.	23.- 27. siječnja 2023.

Zadatak zadao: Predsjednik Povjerenstva:

Doc. dr. sc. Tomislav Lesičar Prof. dr. sc. Tanja Jurčević Lulić

SADRŽAJ

SADRŽAJ I
POPIS SLIKA II
POPIS TABLICA III
POPIS OZNAKA IV
SAŽETAK VII
SUMMARY VIII
1. UVOD 1
2. NODULARNI LIJEV 3
2.1. Proizvodni postupak nodularnog lijeva EN-GJS-400-18-LT 5
2.1.1. Tundish postupak proizvodnje 5
2.1.2. Inmould postupak proizvodnje 6
2.1.3. Dijagram stvarno naprezanje – istezanje nodularnog lijeva 6
3. VIŠERAZINSKO (*multiscale*) MODELIRANJE 9
4. METODA KONAČNIH ELEMENATA 12
4.1. Uvod u metodu konačnih elemenata 12
4.2. Osnovni prizmatični element 12
5. METODA HOMOGENIZACIJE S REDUCIRANIM BROJEM STUPNJEVA SLOBODE 16
5.1. Metodologija 16
5.1.1. Lippman-Schwingerova homogenizacija klastera 17
5.1.2. Offline korak 19
5.1.3. Online korak 20
5.1.3.1. Algoritam s konstantnim tenzorom elastičnosti [15] 21
5.1.3.2. Algoritam s konzistentnim (self-consistent) tenzorom elastičnosti 22
6. MODELIRANJE ELASTOPLASTIČNOG PONAŠANJA MATERIJALA 24
6.1. Uvod u elastoplastičnost 24
6.2. Modeli elastoplastičnog ponašanja 25
6.3. Zakoni očvršćenja elastoplastičnih materijala 29
6.3.1. Idealna plastičnost 29
6.3.2. Izotropno očvršćenje 30
6.3.3. Kinematičko očvršćenje 32
6.3.4. Numeričko modeliranje elastoplastičnosti 33
7. GENERIRANJE MIKROSTRUKTURE 34
8. NUMERIČKI PRORAČUN MIKROSTRUKTURE 40
8.1. Određivanje parametara linearno elastičnog ponašanja feritne matrice 40
8.2. Određivanje parametara elastoplastičnog ponašanja feritne matrice 45
9. ZAKLJUČAK 52
LITERATURA 53
PRILOZI 55

POPIS SLIKA

Slika 2.1. Primjer mikrostrukture nodularnog lijeva[3] 3
Slika 2.2. Utjecaj oblika grafita na koncentraciju naprezanja [2] 4
Slika 2.3. Dijagram stvarno naprezanje – deformacija [4] 6
Slika 2.4. Usporedni prikaz eksperimenta te aproksimacija krivulje za Inmould način lijevanja 7
Slika 2.5. Usporedni prikaz eksperimenta te aproksimirane krivulje za Tundish način lijevanja 8
Slika 3.1. Višerazinske (*multiscale*) metode [6] 9
Slika 3.2. Vizualni prikaz homogenizacije prvog reda 10
Slika 4.1. Osnovni prizmatični element s 24 stupnja slobode [12] 13
Slika 4.2. C3D8R konačni element [13] 15
Slika 5.1. a) RVE diskretiziran s 10 000 trokutnih elemenata prvog reda, b) RVE diskretiziran s 8 klastera [14] 20
Slika 6.1. Prikaz dijagrama ovisnosti naprezanja i deformacije za jednoosni vlačni test metalne epruvete [16] 24
Slika 6.2. Linearno elastični – idealno plastični model [17] 26
Slika 6.3. Elastično-linearno očvršćujući materijalni model [17] 27
Slika 6.4. Ramberg-Osgoodov materijalni model 28
Slika 6.5. Prikaz idealne plastičnosti [16] 30
Slika 6.6. Shema izotropnog očvršćenja i prikaz jednoosnog cikličkog testa [16] 30
Slika 6.7. Von Misesova i Trescina ploha tečenja[[17] 32
Slika 6.8. Prikaz kinematičkog očvršćenja [16] 33
Slika 7.1. Primjer mikrostrukture Inmould nodularnog lijeva [4] 34
Slika 7.2. Softverski obrađena mikrostruktura 34
Slika 7.3. a) Raspodjela promjera nodula za Inmould način lijevanja, b) Raspodjela promjera nodula za Tundish način lijevanja 37
Slika 7.4. a) Raspodjela najmanje udaljenosti nodula za Inmould način lijevanja, b) raspodjela najmanje udaljenosti nodula za Tundish način lijevanja 37
Slika 7.5. Generirana mikrostruktura za Inmould način lijevanja 38
Slika 7.6. Generirana mikrostruktura za Tundish način lijevanja 39
Slika 8.1. Makromodel s prikazanim opterećenjem i rubnim uvjetima te brojem čvorova .. 45
Slika 8.2. Zakon očvršćenja prema modificiranom Swiftovom zakonu 47
Slika 8.3. Dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za Inmould način lijevanja 50
Slika 8.4. Dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za Tundish način lijevanja 50
Slika 8.5. Dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za feritnu matricu 51

POPIS TABLICA

Tablica 2.1. Optimalni kemijski sastav početne taline [2] 5
Tablica 2.2. Vrijednosti aproksimiranih parametara vlačnog testa nodularnog lijeva 7
Tablica 7.1. Parametri Weibull distribucije 35
Tablica 7.2. Parametri Log-normalne distribucije 36
Tablica 7.3. Prametri Gamma distribucije 36
Tablica 8.1. Prikaz relativne razlike parametara prilikom odabira gustoće mreže 41
Tablica 8.2. Prikaz odstupanja rezultata Youngovog modula elastičnosti [MPa] u odnosu na odabrani smjer 42
Tablica 8.3. Ulazne vrijednosti i rezultati za Inmould način lijevanja 42
Tablica 8.4. Ulazne vrijednosti i rezultati za Tundish način lijevanja 43
Tablica 8.5. Koeficijenti sustava jednadžbi 43
Tablica 8.6. Optimalne vrijednosti materijalnih parametara feritne matrice 44
Tablica 8.7. Konačni rezultati linearno-elastične analize 44
Tablica 8.8. Utjecaj broja klastera na parametre Swiftovog zakona 47
Tablica 8.9. Usporedba rezultata po osima 48
Tablica 8.10. Homogenizirane vrijednosti parametara matrice 49
Tablica 8.11. Usporedba stvarnih vrijednosti s rezultatima numeričkih simulacija 49

POPIS OZNAKA

Oznaka	Jedinica	Opis
$\bar{\sigma}_{Y0}$	MPa	Inicijalna granica tečenja materijala
$\bar{K}$	-	Parametar Swiftovog zakona
$\bar{n}$	-	Parametar Swiftovog zakona
$\mathbf{u}_m$	-	Vektor mikrostrukturnih pomaka
$\boldsymbol{\varepsilon}_M$	-	Matrica makrodeformacija
$\mathbf{x}$	-	Vektor makroskopskog položaja
$\mathbf{r}$	-	Vektor mikrofluktuacija
u	mm	Lokalni pomak elementa u smjeru osi *x*
v	mm	Lokalni pomak elementa u smjeru osi y
w	mm	Lokalni pomak elementa u smjeru osi z
$a_{1\ldots24}$	-	Koeficijenti polinoma raspodjele pomaka konačnog elementa
$\mathbf{v}$	-	Vektor čvornih pomaka
$u_{1\ldots8}$	mm	Pomaci čvorova u smjeru osi *x*
$v_{1\ldots8}$	mm	Pomaci čvorova u smjeru osi y
$w_{1\ldots8}$	mm	Pomaci čvorova u smjeru osi z
l_1	-	Lagrangeov polinom prvog stupnja
$\mathbf{N}$	-	Matrica funkcija oblika
$N_{1\ldots8}$	-	Funkcije oblika za pojedini čvor
$\mathbf{B}$	-	Matrica međusobne ovisnosti deformacije u elementu i pomaka u čvorovima
$\mathbf{D}_k$	-	kinematički diferencijalni operator
$\mathbf{k}$	-	Lokalna matrica krutosti konačnog elementa
$\boldsymbol{\beta}$	-	Lokalna varijabla materijala
$\boldsymbol{\beta}^I$	-	Lokalna varijabla svakog klastera
χ^I		Karakteristična funkcija domene *I*-tog klastera
Ω^I	-	Domena *I*-tog klastera
Ω	-	Ukupna domena promatranog materijala
σ_{ij}	-	Tenzor stvarnog naprezanja
x_i	-	Promatrana os
$\boldsymbol{\sigma}$	-	Tenzor stvarnog naprezanja
$\mathbf{C}^0$	-	Matrica elastičnosti
$\boldsymbol{\varepsilon}$		Tenzor makrodeformacije
$\mathbf{p}$	-	Tenzor polarizacijskog naprezanja
$\mathbf{x}'$	-	Položaj u referentnom homogenom materijalu
$\boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}')$	-	Greenova funkcija
$\boldsymbol{\varepsilon}^0$	-	Nominalna deformacija unutar referentnog materijala

$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$	-	Inkrementalni tenzor makrodeformacije
$\Delta\boldsymbol{\sigma}$	-	Inkrementalni tenzor makrodeformacije
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^0$	-	Inkrementalni tenzor nominalne deformacije u homogenom refrentnom materijalu
c^I	mm^3	Volumen *I*-tog klastera
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^J$	-	Inkrementalni tenzor makrodeformacije u *J*-tom klasteru
$\Delta\boldsymbol{\sigma}^J$	-	Inkrementalni tenzor makrodeformacije u *J*-tom klasteru
$\mathbf{D}^{IJ}$	-	Interakcijski tenzor (*interaction tensor*)
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^I$	-	Inkrementalni tenzor makrodeformacije u *I*-tom klasteru
$\Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$	-	Tenzor homogene makrodefromacije
$\Delta\boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{I}}$	-	Inkrementalni tenzor makrodeformacije u *I*-tom klasteru
$\Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}$	-	Tenzor homogenog makronaprezanja
$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{m}}$	-	Tenzor mikrodeformacije
$\mathbf{A}(\mathbf{x})$	-	Tenzor koncentracije deformacije
$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{M}}$	-	Tenzor makrodeformacije
δ_{ik}	-	Kronneckerov delta
ξ_j	-	Koordinata u Fourierovom prostoru
λ^0	-	Prva Laméova konstanta referentnog materijala
μ^0	-	Druga Laméova konstanta referentnog materijala
$\mathbf{r}^I$	-	Rezidual deformacije *I*-tog klastera u iteracijskom koraku *n*
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^I$	-	Inkrement tenzora deformacije *I*-tog klastera u iteracijskom koraku *n*
$\Delta\boldsymbol{\sigma}_n^J$	-	Inkrement tenzora naprezanja *I*-tog klastera u iteracijskom koraku *n*
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^J$	-	Inkrement tenzora deformacije *J*-tog klastera u iteracijskom koraku *n*
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^0$	-	Inkrement nominalnog tenzora deformacije u homogenom referentnom materijalu *J*-tog klastera u iteracijskom koraku *n*
$\mathbf{M}$	-	Jakobijeva matrica
λ_{opt}^0	-	Optimalna prva Laméova konstanta referentnog materijala
μ_{opt}^0	-	Optimalna druga Laméova konstanta referentnog materijala
$\Delta\boldsymbol{\sigma}_n^{\mathrm{M}}$	-	Inkrement tenzora makroskopskog naprezanja u iteracijskom koraku *n*
$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^{\mathrm{M}}$		Inkrement tenzora makroskopske deformacije u iteracijskom koraku *n*
σ	MPa	Naprezanje
ε	-	Deformacija
E	GPa	Youngov modul elastičnosti
ε^e	-	Elastična deformacija
ε^p	-	Plastična deformacija
σ_{Y}	MPa	Granica tečenja
E_T	MPa	Tangentni modul elastičnosti

K	MPa	Plastični tangentni modul elastičnosti
κ	- GPa	Parametar očvršćenja; modul kompresibilnosti
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	MPa	Glavna naprezanja prema glavnim osima
$\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$	-	Deformacija u smjeru osi *x*, *y* i *z*
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	MPa	Naprezanja u smjeru osi *x*, *y* i *z*
$\gamma_{xy}, \gamma_{xz}, \gamma_{zy}$		Kutne deformacije u smjeru osi *x*, *y* i *z*
$\tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}$	MPa	Tangencijalna naprezanja u smjeru osi *x*, *y* i *z*
μ	GPa	Modul smičnosti
ν	-	Poissonov faktor
$\bar{E}$	MPa	Homogenizirani Youngov modul elastičnosti
$\bar{\nu}$		Homogenizirani Poissonov faktor
σ_y		Granica tečenja u točki s plastičnom deformacijom
σ_{Y0}		Inicijalna granica tečenja materijala
K		Parametar Swiftovog zakona
n		Parametar Swiftovog zakona
$\bar{\varepsilon_p}$		Homogenizirana plastična deformacija

SAŽETAK

Većina materijala je heterogena, ovisno na kojoj se skali promatraju. Prema tome, može se reći da su i mehanička svojstva materijala uvelike ovisna o heterogenoj mikrostrukturi, odnosno međusobnom interakcijom različitih konstituenata na mikrostrukturnoj razini. U novije vrijeme dolazi do ubrzanog razvoja naprednih višerazinskih numeričkih algoritama uz pomoć kojih je moguće definirati direktnu vezu između mikrostrukture i konstitutivnog ponašanja materijala na makrorazini. Na taj je način moguće razviti materijal optimalnih svojstava manipulirajući raspodjelom, volumenskim udjelom i svojstvima mikrokonstituenata.

U ovom radu razmatran je nodularni lijev oznake EN-GJS-400-18-LT proizveden tehnikama lijevanja Tundish i Inmould. Provedena je analiza postojećih mikrostruktura uz pomoć opisanih razdioba prema promjeru nodula grafita te njihove međusobne udaljenosti. Određena je najtočnija razdioba za obje varijable te je generirana mikrostruktura nodularnog lijeva za oba načina lijevanja. Metodom homogenizacije s reduciranim brojem stupnjeva slobode izračunate su vrijednosti materijalnih parametara feritne matrice nodularnog lijeva. Uz pomoć k-means algoritma klasteriranja koji se temelji na strojnom učenju, materijalne točke mikrostrukture su grupirane u elemente sa sličnim svojstvima, u kojima je vrijednost naprezanja i deformacija jednaka. Sve navedeno omogućuje metodi da proračunski model diskretizira s razmjerno malim brojem klastera što omogućuje značajnu uštedu vremena računanja. Nakon provedenog klasteriranja inkrementalno se rješavaju Lippmann-Schwingerova jednadžba. Na temelju numeričkih simulacija, određeni su koeficijenti potpunih polinoma drugog i trećeg reda koji definiraju elastoplastična svojstva feritne matrice prema Swiftovom zakonu očvršćenja, pomoću kojih su određene stvarne vrijednosti materijalnih parametara feritne matrice. Točnost same metode je demonstrirana usporedbom parametara izračunatih numeričkim simulacijama sa stvarnim vrijednostima preuzetima iz literature.

Ključne riječi:

Heterogeni materijal, homogenizacija s reduciranim brojem stupnjeva slobode, *k-means* klasteriranje, Lippman-Schwingerova jednadžba, nodularni lijev, Inmould, Tundish

SUMMARY

Most materials are heterogeneous, depending on the scale at which they are observed. Therefore, it can be said that the mechanical properties of the material are largely dependent on the heterogeneous microstructure, i.e., on the mutual interaction of different constituents at the microstructural level. In recent times, there has been an accelerated development of advanced multilevel numerical algorithms with the help of which is possible to define a direct connection between the microstructure and the constitutive behavior of the material at the macrolevel. In this way, it is possible to develop a material with optimal properties by manipulating the distribution, volume fraction and properties of microconstituents.

In this paper, nodular cast EN-GJS-400-18-LT produced by Tundish and Inmould casting techniques was considered. An analysis of the existing microstructures was carried out with the help of the described distributions according to the diameter of the graphite nodules and their mutual distance. The most accurate distribution for both variables was determined and the microstructure of ductile iron was generated for both methods of casting. The values of the material parameters of the ferrite matrix of nodular cast iron were calculated using the reduced homogenization method. With the help of the k-means clustering algorithm based on machine learning, the material points of the microstructure are grouped into elements with similar properties, in which the stress and strain values are equal. All of the above allows the method to discretize the computational model with a relatively small number of clusters, which enables a significant saving of computation time. After clustering, the Lippmann-Schwinger equation is solved incrementally. On the basis of numerical simulations, the coefficients of complete polynomials of the second and third order that define the elastoplastic properties of the ferrite matrix according to Swift's law of hardening were determined, by means of which the actual values of the material parameters of the ferrite matrix were determined. The accuracy of the method itself was demonstrated by comparing parameters calculated by numerical simulations with real values taken from the literature.

Key words:

Heterogeneous material, reduced homogenization method, k-means clustering, Lippman-Schwinger equation, nodular casting (ductile iron), Inmould, Tundish

1. UVOD

Inženjeri stvaraju svijet, za što su im potrebni materijali. Većina materijala koji se danas koriste su razvijeni u posljednjih 100 godina što pokazuje kontinuiranu potrebu pronalaska novih i boljih materijala, a danas ih je dostupno oko 160 000 [1]. Svi materijali imaju međusobno različite strukture i kemijski sastav iz kojih proizlaze njihova fizikalna svojstva. Variranjem spomenutog sastava i strukture moguće je mijenjati svojstva svakog materijala, te čak i stvoriti potpuno novi materijal. Materijalna struktura se može promatrati na četiri razine, od kojih su dvije najkorištenije i istražene, a to su: makrostruktura i mikrostruktura.

Mikrostruktura materijala predstavlja mali strukturalni dio materijala koji opisuje položaj, veličinu, raspodjelu te oblik kristalnih zrna. Veličina promatranog dijela materijala mjeri se u mikrometrima, a nekad i manje. Promatrajući materijal na ovoj razini lako se uočava njegova heterogenost koja se očituje u postojanju različitih faza, praznina i nesavršenosti.

Heterogena mikrostruktura snažno utječe na makrostrukturna svojstva materijala. Modeliranje mehaničkog makroponašanja s uračunatom heterogenosti se tijekom povijesti pokazalo kao veliki izazov inženjerima. Primjerice, mehanika kontinuuma koja se koristi za modeliranje mehaničkog ponašanja materijala ne uzima u obzir materijalnu heterogenost na mikroskopskom nivou. Kao pokušaj savladavanja problema heterogenosti materijala uveden je Cosserat kontinuum i drugi kontinuumi višeg reda, s kojima su se mogli analitički rješavati samo jednostavni problemi. Tek nedavno, razvojem velike računalne moći računala, počinju se razvijati numeričke metode i modeli kojima bi se mogli riješiti problemi višeg reda, a samim time i heterogenost materijala – osobito metoda konačnih elemenata. Spomenuta metoda, iako vrlo korisna u mnogim današnjim problemima, nije u potpunosti zaobišla ograničenja kontinuuma višeg reda zbog strukturne kompleksnosti i same kompleksne formulacije konačnih elemenata potrebnih za rješavanje problema višeg reda.

Rješenje navedenih problema je inicijalno pronađeno u različitim matematičkim postupcima osrednjavanja, tzv. homogenizaciji [2]. Utvrđeno je da homogenizacija prvog reda također ima nezaobilazne nedostatke iako dobro opisuje pretpostavke mehanike kontinuuma – ne može dobro opisati velike gradijente naprezanja te lokalizacije istih [2]. Stoga se razvijaju metode modeliranja heterogenih materijala na više razina – tzv. *multiscale* metode, u kojima se rezultati koji su izračunati na mikrorazini prenose se na makrorazinu. Na taj način je problem heterogenosti postavljen kao ugnježđeni problem rubnih vrijednosti povezivajući tako obje

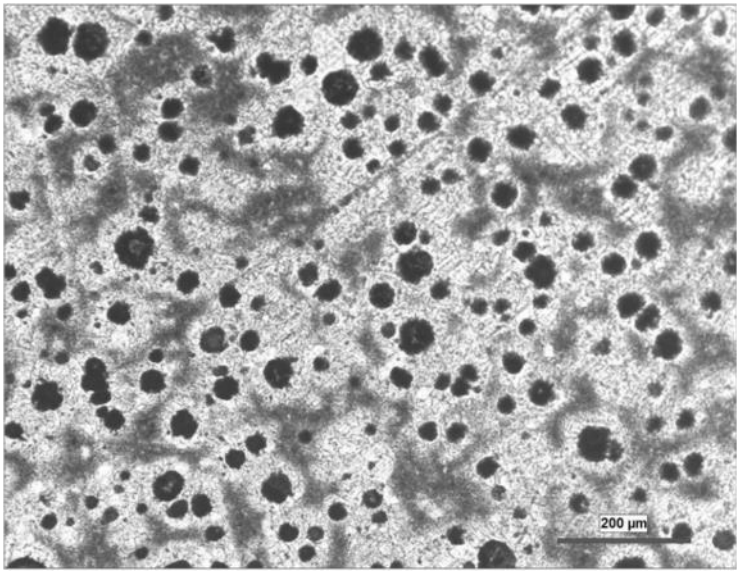
razine. Mikrorazina je definirana reprezentativnim volumenskim elementom (RVE) uz pomoću kojeg je moguće procijeniti ponašanje materijala na makrorazini iz poznatih svojstava i geometrije konstituenata.

Cilj ovog rada je provesti analizu mehaničkih parametara matrice nodularnog lijeva uz pomoć homogenizacijske metode s reduciranim brojem stupnjeva slobode. Analiza je provedena za načine lijevanja Tundish i Inmould. Generirana je mikrostruktura nodularnog lijeva za oba načina lijevanja na temelju mikroskopskih slika preuzetih iz doktorskog rada dr. Čanžara. Prema slikama je napravljena distribucija grafitnih nodula te cjelokupna mikrostruktura. Nakon generiranja mikrostrukture proveden je određen broj analiza uz pretpostavku linearno-elastičnog i elastoplastičnog ponašanja materijala iz kojih su iznijeseni zaključci vezani uz korištenu metodu te načine lijevanja nodularnog lijeva.

2. NODULARNI LIJEV

U ovom radu je kao predmet istraživanja korišten nodularni lijev EN-GJS-400-18-LT, prema europskoj normi EN 1563. Prema normi ima minimalnu vlačnu čvrstoću 400 MPa, dok mu je minimalna istezljivost normirana na 18%.

Nodularni lijev se svrstava u ljevove koji su bazirani na željezu, a to su redom: bijeli tvrdi lijev BTL, čelični lijev ČL, sivi lijev SL, nodularni lijev NL, temper lijev – koji se dijeli na bijeli temper lijev BTEL, crni feritni lijev FTEL te crni perlitni lijev PTEL. Zbog raznovrsnosti svoje strukture je pogodan za ostvarivanje širokog spektra svojstava kontroliranjem konstituenata. Ime je dobio po mikrostrukturi koja sadrži grafit u obliku nodula tj. kuglica. Nodule su raspršene u feritno-perlitnoj matrici koja se može mijenjati odgovarajućim metodama lijevanja, kemijskim ili toplinskim obradama kako bi se postigla optimalna svojstva za zahtijevanu eksploataciju. Slika 2.1. prikazuje mikrostrukturu nodularnog lijeva.



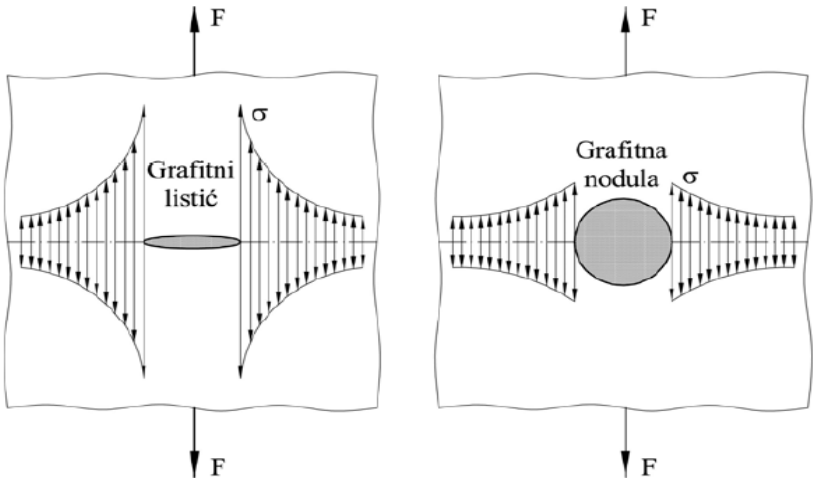
Slika 2.1. Primjer mikrostrukture nodularnog lijeva[3]

Prema [4] svojstva nodularnog lijeva su sljedeća:

- grafit prisutan u obliku nodula djeluje kao zaustavljač pukotina,
- povećana duktilnost i žilavost u odnosu na druge ljevove na bazi željeza, no jednaka kao kod mnogih lijevanih i kovanih čelika,
- mogućnost odabira tipa NL optimalnih svojstava, kombiniranjem kemijskog sastava i toplinske obrade,

- mehanička svojstva bolja od sivog lijeva (SL) (grafiti u obliku listića), slabija od čeličnog lijeva (ČL),
- otpornost na trošenje i korozijska postojanost bolja od SL,
- visoka dinamička izdržljivost kao i vlačna čvrstoća (preko 620 MPa za martenzitni NL) posebno u poboljšanom stanju,
- prigušivanje vibracija – povećava otpornost na zamor (2 puta niže od SL, viša od čelika),
- toplo i ograničeno hladno oblikovljiv,
- dobro se obrađuje odvajanjem čestica,
- bolja ljevačka svojstva od čelika (skupljanje oko skrućivanja manje nego kod SL),
- zavarljivost (uvjetna) – za razliku od SL ima veliku istezljivost *A* (kod SL < 1%, kos SL s feritnom osnovom od 30%),
- smanjeni troškovi proizvodnje – unutarnja ekspanzija stvaranjem grafita tijekom skrućivanja.

Bitno je za naglasiti da su sva spomenuta svojstva direktni rezultat mikrostrukturnih faza te kugličastog grafita nodularnog lijeva. Feritna faza je mekša te materijalu omogućuje veću duktilnost, dok je perlitna faza povisuje tvrdoću i čvrstoću materijala [4]. Kuglice grafita koje se pojavljuju u mikrostrukturi smanjuju vlačnu čvrstoću te granicu tečenja, no zbog svog oblika pozitivno utječu na otpornost nastanku i rastu mikropukotina unutar materijala. Razlog tome je sam oblik izlučenog grafita, kružni oblik stvara znatno manje zarezno djelovanje od npr. lističastog, kakav se javlja u sivom lijevu [2,4]. Utjecaj oblika grafita je prikazan na slici Slika 2.2.



Slika 2.2. Utjecaj oblika grafita na koncentraciju naprezanja [2]

2.1. Proizvodni postupak nodularnog lijeva EN-GJS-400-18-LT

Nodularni lijev je ljevačka pseudobinarna legura željeza i ugljika u kojoj se ugljik izlučuje pretežno u obliku grafitnih nodula (kuglica) [4]. Nodularni lijev se dobiva taljenjem specijalnog sivog sirovog željeza u elektropećima, dok se talina dodatno obrađuje globuratorima – kemijskim elementima koji pridonose izlučivanju grafita u matrici lijeva u obliku kuglica [2]. Kako bi se postigla stabilna mikrostruktura lijeva potrebno je kontrolirati te upravljati udjelima ugljika, silicija, mangana, fosfora i sumpora, jer direktno utječu na izlučivanje grafita u obliku nodula, zavarljivost materijala, pojavu mjehurića te općenitih mehaničkih svojstava. Zbog toga je sam sastav slitine određen ili normom ili zahtjevima kupaca. Optimalan kemijski sastav početne taline za nodularni lijev EN-GJS-400-18-LT je prikazan u sljedećoj tablici.

Tablica 2.1. Optimalni kemijski sastav početne taline [2]

Kemijski element	Udjel(%)
Ugljik	3,5-3,8
Silicij	0,8-1,0
Mangan	0,1-0,15
Fosfor	Maksimalno 0,04
Sumpor	Maksimalno 0,01

Postoje četiri najkorištenija proizvodna postupka spomenutog nodularnog lijeva, a to su: Floret, Tundish, Inmould te nestandardni postupak. S obzirom na ograničenja ovog rada, detaljnije će biti objašnjena samo dva – Tundish i Inmould.

2.1.1. Tundish postupak proizvodnje

Tundish postupak proizvodnje nodularnog lijeva je suvremena bezdimna tehnologija koja se temelji na principu prelijevanja taljevine s niskim sadržajem sumpora preko nodulatora spremljenog u zatvorenom ljevačkom loncu, a primjenjuje se pri ručnom ukapljivanju [4]. Prilikom lijevanja potrebno je obložiti unutarnje stijenke ljevačkog lonca vatrostalnom opekom te napraviti posebni vatrostalni poklopac od termobetona. Nakon pripreme lonac je potrebno sušiti u trajanju od dva do tri dana te ga naknadno obraditi plinom. Tundish postupak omogućava: visok stupanj nodulacije, manju potrošnju nodulatora (oko 1,5 %), manji pad temperature, nema isijavanja i blještavosti za vrijeme obavljanja nodulacije, nema oštećenja

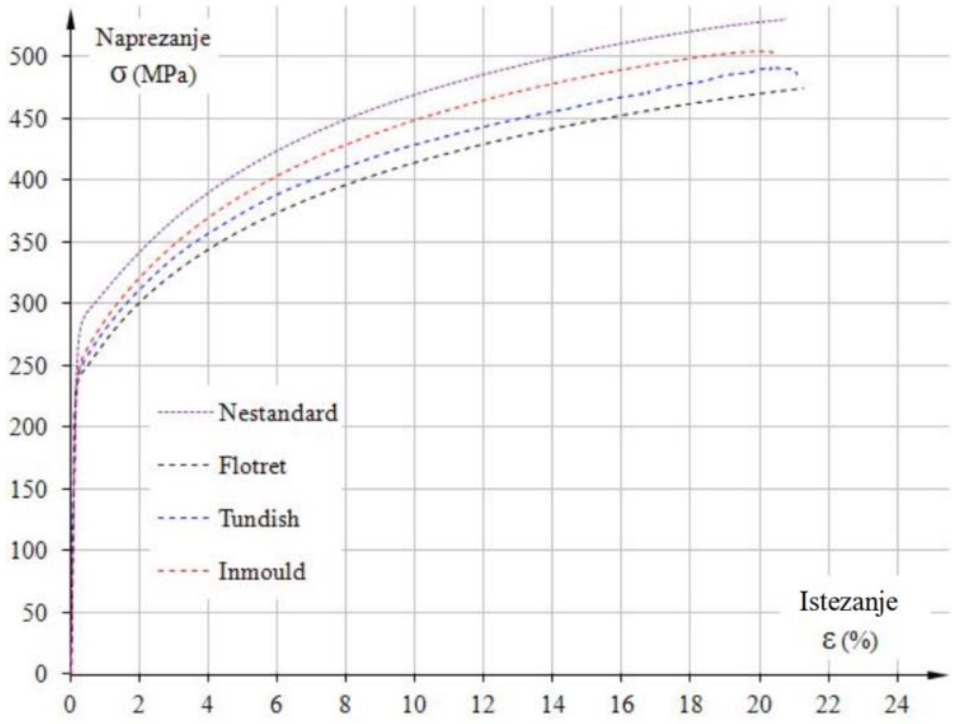
radne okoline, veću produktivnost te ekonomičnost za pojedinačnu i maloserijsku proizvodnju odljevaka [4].

2.1.2. Inmould postupak proizvodnje

Inmould je postupak proizvodnje nodularnog lijeva je bezdimna metoda lijevanja prema kojoj se nodulacija odvija u komori kalupa. Nodulator se nalazi unutar kalupa preko kojeg se prelijeva talina. Unutarnja reakcijska komora mora biti konstruirana tako da odnos između mase taline i kalupa te brzine lijevanja bude optimalan. Ukoliko je komora prevelika, postoji opasnost da se nodulator potroši prije nego se ispuni cijeli kalup. S druge strane, ukoliko je komora premala, bit će nedovoljno nodulatora te se neće postići nodularna struktura u cijelom lijevu [2].

2.1.3. Dijagram stvarno naprezanje – istezanje nodularnog lijeva

Slika 2.3. prikazuje dijagram stvarno naprezanje – istezanje nodularnog lijeva preuzetog iz [4]. Stvarno naprezanje predstavlja naprezanje koje se javlja u materijalu s obzirom na deformaciju u koju je uzeto u obzir suženje poprečnog presjeka epruvete. Na dijagramu su prikazane krivulje jednoosnog vlačnog testa epruveta različitih tehnika lijevanja nodularnog lijeva. Kako je spomenuto, u ovom radu će se obraditi dvije – Tundish i Inmould.



Slika 2.3. Dijagram stvarno naprezanje – deformacija [4]

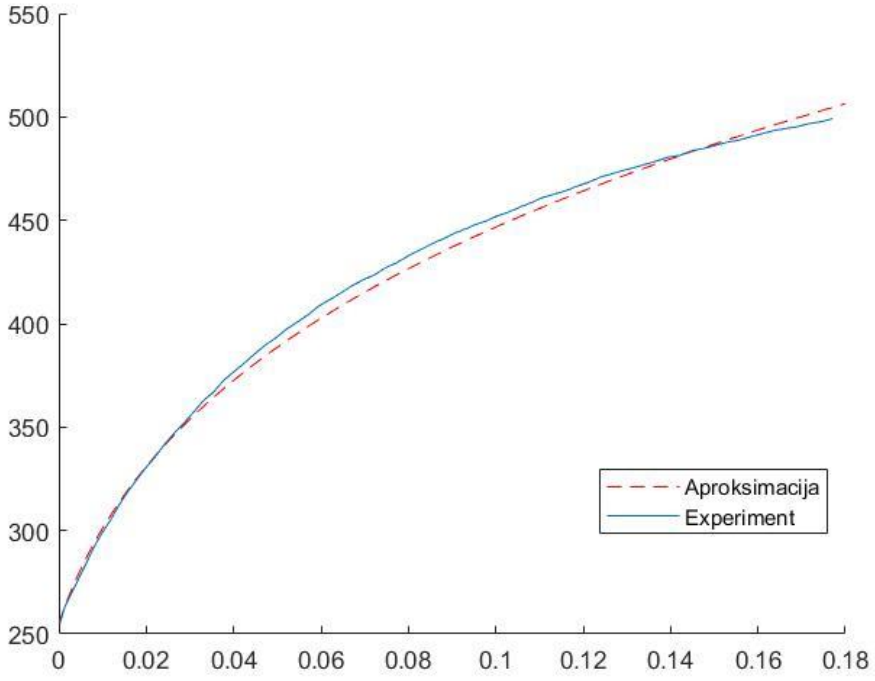
Iz prikazanog dijagrama se uz pomoć web aplikacije *WebPlotDigitizer* [5] prikupljaju vrijednosti naprezanja i deformacija pojedinih točaka. Web aplikacija funkcionira na način da je potrebno učitati željenu sliku, što je u ovom slučaju bio dijagram stvarno naprezanje – deformacija. Nakon učitavanja potrebno je kalibrirati osi kako bi se postigli točni podatci. Dalje se ručno postavljaju točke duž željenog grafa te se vrijednosti spremaju. Bitno je naglastiti da su se točke postavljale duž plastičnog područja.

Spremljeni podatci su aproksimirani jednadžbom Swiftovog zakona koji će biti opisan u daljnjem tekstu. Aproksimacija krivulje se napravljena u programskom paketu *Matlab.* Tablica 2.2. prikazuje parametre Swiftovog zakona dobivene aproksimacijom spremljenih podataka.

Tablica 2.2. Vrijednosti aproksimiranih parametara vlačnog testa nodularnog lijeva

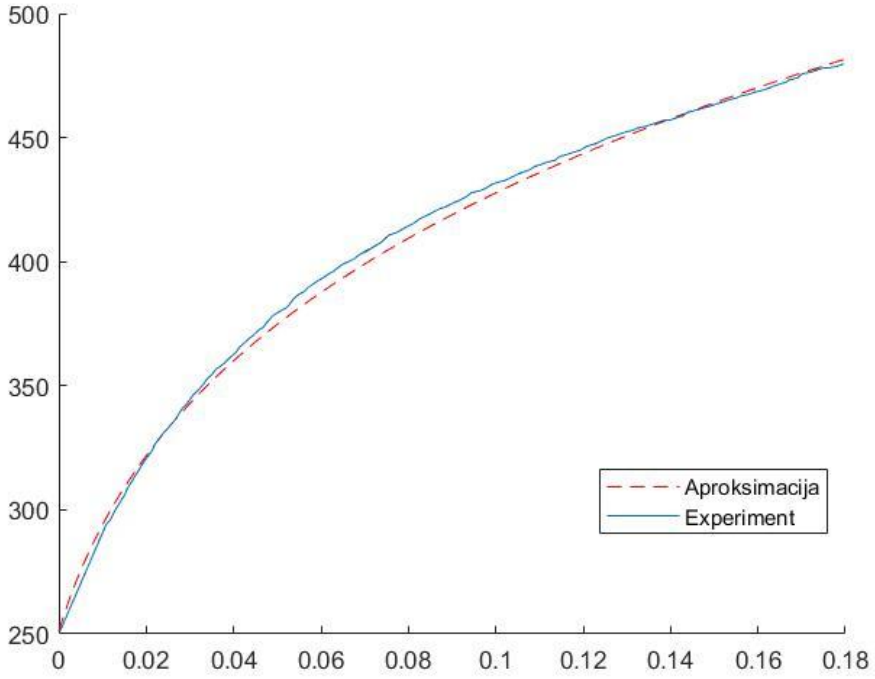
	$\bar{\sigma}_{Y0}$	$\bar{K}$	$\bar{n}$
Inmould	255.13511	106.25435	0.22835
Tundish	251.08108	107.46385	0.21623

Slika 2.4. i Slika 2.5. prikazuju izgled aproksimiranih krivulja.



Slika 2.4. Usporedni prikaz eksperimenta te aproksimacija krivulje za Inmould način lijevanja

Vidi se da opisana krivulja prikazuje manje vrijednosti naprezanja u intervalu deformacija od 0.03 do 0.14. Takvo odstupanje je zanemarivo te se može pripisati akumuliranoj grešci prilikom prikupljanja podataka.

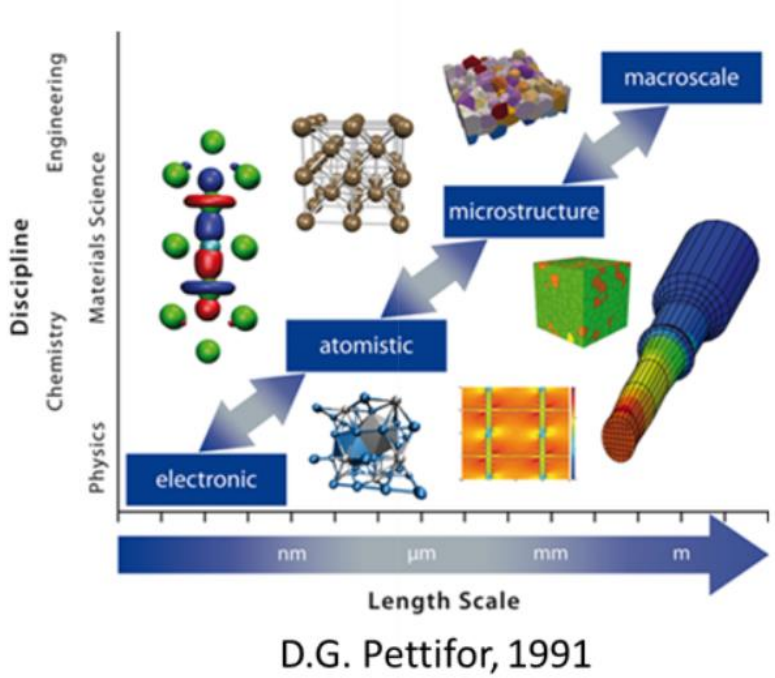


Slika 2.5. Usporedni prikaz eksperimenta te aproksimirane krivulje za Tundish način lijevanja

Također se i iz Slika 2.5. vidi odstupanje aproksimacije od eksperimenta, u ovom slučaju u intervalu defromacija od 0.03 do 0.13. Odstupanje će se također pripisati akumuliranoj grešci prilikom prikupljanja podataka.

3. VIŠERAZINSKO (*multiscale*) MODELIRANJE

Početkom dvadesetog stoljeća znanstvenici su shvatili da je nemoguće promatrati zbivanja i promjene na mikrorazini iz istog ugla gledišta koji se koristi pri promatranju promjena na makrorazini. Mikrostrukture (kristalne rešetke, razne uključine i dodatci) svojim pravilima ponašanja uvelike utječu na generalno ponašanje materijala, a samim time i konstrukcije u eksploataciji. Veliki izazov je bio povezati spomenute dvije razine. Kako je spomenuto, veća važnost se počela pridavati ovome izazovu porastom računalne moći računala, te razvojem raznih numeričkih metoda. Grupni naziv za metode koje povezuju ponašanje materijala na mikrorazini s ponašanjem na makrorazini zovu se višerazinske (*multiscale*) metode. Cilj tih metoda je u realnom vremenu omogućiti prenošenje tenzora naprezanja i deformacija između različitih razina razmatranja materijala. Slika 3.1 vizualno prikazuje ideju *multiscale* metoda.



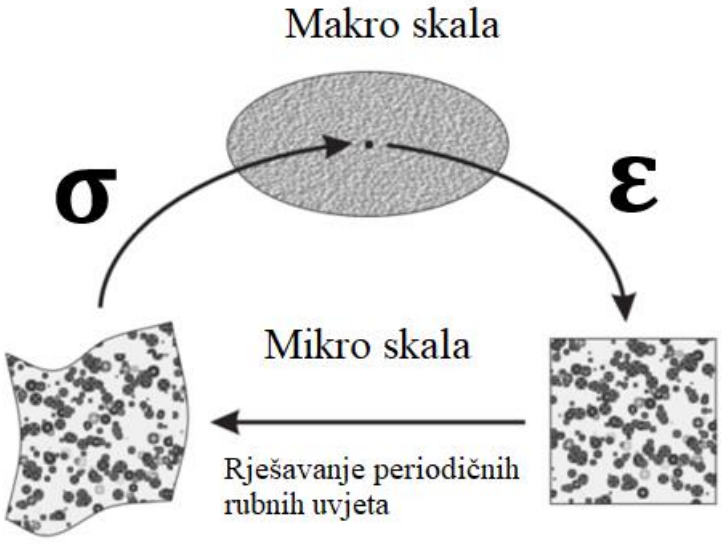
Slika 3.1. Višerazinske (*multiscale*) metode [6]

Pod *multiscale* metode spadaju konkurentne, sekvencijalne, homogenizacijske, paralelne i hibridne metode. Homogenizacijske metode su višerazinske metode koje se baziraju na osrednjavanju tenzora makrodeformacije ili makrogradijenta deformiranja i virtualnog rada po volumenu reprezentativnog volumenskog elementa [2]. Reprezentativni volumenski element (RVE) predstavlja mali mikrostrukturni dio materijala koji se periodično ponavlja u prostoru

duž cijelog promatranog materijala. RVE statistički predstavlja sva makroskopska svojstva mikrostrukture heterogenog materijala te ograničava utrošak računalne snage na najmanji, reprezentativni dio mikrostrukture [7], stoga su dimenzije RVE-a izrazito male u odnosu na cijeli materijal [8].

Homogenizacija prvog reda predstavlja metodu koja se temelji na standardnoj lokalnoj mehanici kontinuuma, gdje se ponašanje materijalne točke opisuje uz pomoć gradijenta polja pomaka [7]. Polje pomaka se na mikrorazini sastoji od dva dijela: jedan ovisi o makrodeformaciji, a drugi je neovisan te predstavlja fluktuacije. Fluktuacije u ovom slučaju prikazuju doprinos mikrorazine polju pomaka [2], što je i prikazano jednadžbom (1). U prikazanoj jednadžbi matrica $\boldsymbol{\varepsilon}_M$ predstavlja makrodeformacije koje se iz referentnog makrosustava prenose u mikrosustav gdje se rješavaju rubni uvjeti iz kojih slijede mirkropomaci $\mathbf{u_m}$. Uz pomoć izračunatih pomaka računa se polje mikrodeformacija, a posljedično i tenzor naprezanja. Vektor *r* predstavlja već spomenute mikrofluktuacije [9,10]. Slika 3.2. prikazuje vizualnu ideju homogenizacije prvog reda.

$$\mathbf{u}_m = \boldsymbol{\varepsilon}_M \cdot \mathbf{x} + \mathbf{r} \qquad \textbf{(1)}$$



Slika 3.2. Vizualni prikaz homogenizacije prvog reda

Homogenizacija prvog reda ima svoje nedostatke. Iako je bitan utjecaj u povijesti modeliranja heterogenih materijala jer eksplicitno modelira mikrokonstituente, ne uzima u obzir apsolutnu veličinu mikrostrukture. Zbog toga geometrijski utjecaji ne mogu biti uzeti u obzir. Nadalje, pretpostavlja jednolikost raspodjele makroskopskog polja naprezanja i deformacija dodjeljenog

pojedinom RVE-u te zbog toga ne može dovoljno točno riješiti probleme koji imaju velike gradijente makroskopskih polja.

Kako bi se riješili nedostatci, izvedena je metoda homogenizacija drugog reda. Potrebno je koristiti nelokalnu teoriju kontinuuma koja zadovoljava C^1 kontinuitet. Na taj su način prvi i drugi gradijenti pomaka određeni kroz rubne uvjete RVE-a, dok je RVE na mikrorazini promatran kao standardni kontinuum koristeći konstitutivne jednadžbe. Rješavajući rubne uvjete RVE-a direktno se izračunavaju tenzor naprezanja, tenzor sekundarnog naprezanja te konstitutivne matrice [7]. Problemi homogenizacije drugog reda su otežani prikaz lokalizacije plastičnih deformacija i oštećenja, odnosno metoda nije pogodna za prikaz lokalizacija na skali manjoj od RVE-a. Predloženo je rješenje u vidu provođenja analize u svim točkama u kojima bi se lokalizacija mogla dogoditi, no takav pristup ima velik utrošak računalne moći [11]. U ovom diplomskom radu koristit će se računalna homogenizacija prvog reda uz pretpostavku malih deformacija.

4. METODA KONAČNIH ELEMENATA

4.1. Uvod u metodu konačnih elemenata

Metoda konačnih elemenata (eng. Finite Element Method - FEM) je računalna metoda koja se koristi za rješavanje različitih inženjerskih problema u svim granama inženjerstva. Ova metoda se temelji na ideji da se kompleksni problemi podijele na manje dijelove, koji se zatim rješavaju zasebno, a potom se rezultati spajaju kako bi se dobio rješenje za cijeli problem. Analitička rješenja izvedena uz pomoć parcijalnih diferencijalnih jednadžbi mogu riješiti vrlo jednostavne proračunske modele, no promatranje cijelog područja nekog modela često ne može zadovoljiti pravila parcijalnih diferencijalnih jednadžbi. Opći kontinuum se sastoji od beskonačno točaka, odnosno beskonačno stupnjeva slobode. Zbog toga posežemo za metodom konačnih elemenata, uz pomoć koje je moguće podijeliti kontinuum na konačni broj manjih područja. Proces podjele kontinuuma na manje jedinice naziva se diskretizacija [12].

Spomenuta manja područja se nazivaju konačni elementi te su međusobno povezani. Točke međusobno povezanih elemenata nazivamo čvorovi. Pomoću interpolacijskih funkcija možemo opisivati polje pomaka, deformacija, naprezanja ili temperature. Postoji velik broj tipova konačnih elemenata različitih stupnjeva slobode. Povećanjem ukupnog broja stupnjeva slobode nekog područja (tj. odabirom elemenata s većim brojem stupnjeva slobode ili povećanjem broja elemenata općenito) raste točnost rješenja.

Zbog kompleksnosti podjele nekog područja na elemente te samog opsega potrebnih računskih operacija, metodu konačnih elemenata se rješava uz pomoć različitih računalnih alata kao što je npr. *Abaqus.*

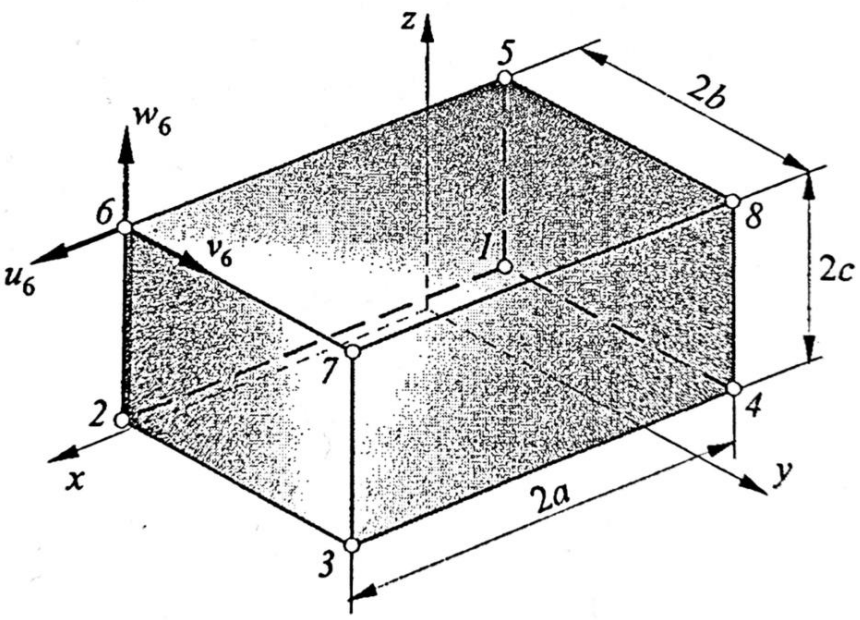
4.2. Osnovni prizmatični element

S obzirom da se u ovom radu obrađuje trodimenzijski problem, prikazan je izvod osnovnog prizmatičnog konačnog elementa korištenog u *Abaqus*-u. Prizmatični konačni element je oblika paralelopipeda s osam čvorova s po tri stupnja slobode, prema Slika 4.1. Raspodjela pomaka prikazana je nepotpunim polinomom trećeg stupnja [12]:

$$u = a_1 + a_2x + a_3y + a_4z + a_5xy + a_6yz + a_7zx + a_8xyz, \quad \textbf{(2)}$$

$$v = a_9 + a_{10}x + a_{11}y + a_{12}z + a_{13}xy + a_{14}yz + a_{15}zx + a_{16}xyz, \quad \textbf{(3)}$$

$$w = a_{17} + a_{18}x + a_{19}y + a_{20}z + a_{21}xy + a_{22}yz + a_{23}zx + a_{24}xyz. \quad \textbf{(4)}$$



Slika 4.1. Osnovni prizmatični element s 24 stupnja slobode [12]

Ovakva raspodjela pomaka omogućuje zadovoljavanje svih potrebnih kriterjia za monotonu konvergenciju rješenja.

Vektor stupnjeva slobode prikazuje pomake čvorova u smjeru osi *x*, *y* i *z*:

$$\mathbf{v}^T = [u_1 \quad v_1 \quad w_1 \quad u_2 \quad v_2 \quad w_3 \quad \cdots \quad u_8 \quad v_8 \quad w_8]. \tag{5}$$

Funkcije oblika osnovnog prizmatičnog elementa se izvode uz pomoć jednodimenzijskih Lagrangeovih polinoma. Funkcije oblika su jednake umnošku jednodimenzijskih polinoma u pravcu tri koordinatne osi. Koordinatni sustav je definiran na Slika 4.1. Lagrangeovi polinomi su izvedeni uz pomoć vrijednosti koordinata čvorova prema svim osima te za osi *x*, *y* i *z* glase [12]:

$$l_1(x) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{x}{a}\right), l_2(x) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{x}{a}\right) \tag{6}$$

$$l_1(y) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{y}{b}\right), l_2(y) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{y}{b}\right) \tag{7}$$

$$l_1(z) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{z}{c}\right), l_2(z) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{z}{c}\right) \tag{8}$$

Čvoru 1 su pridružene koordinate x_1, y_1 i z_1e pa funkcija oblika za taj čvor glasi:

$$N_1 = l_1(x)l_1(y)l_1(z) = \frac{1}{8}\left(1-\frac{x}{a}\right)\left(1-\frac{y}{b}\right)\left(1-\frac{z}{c}\right). \quad \textbf{(9)}$$

Čvor 2 je određen koordinatama x_2, y_1 i z_1 pa je izraz za funkciju oblika :

$$N_2 = l_2(x)l_1(y)l_1(z) = \frac{1}{8}\left(1+\frac{x}{a}\right)\left(1-\frac{y}{b}\right)\left(1-\frac{z}{c}\right). \quad \textbf{(10)}$$

Analogno se izračunavaju sve ostale funkcije oblika:

$$\begin{aligned}
N_3 &= l_2(x)l_2(y)l_1(z) = \frac{1}{8}\left(1+\frac{x}{a}\right)\left(1+\frac{y}{b}\right)\left(1-\frac{z}{c}\right),\\
N_4 &= l_1(x)l_2(y)l_1(z) = \frac{1}{8}\left(1-\frac{x}{a}\right)\left(1+\frac{y}{b}\right)\left(1-\frac{z}{c}\right),\\
N_5 &= l_1(x)l_1(y)l_2(z) = \frac{1}{8}\left(1-\frac{x}{a}\right)\left(1-\frac{y}{b}\right)\left(1+\frac{z}{c}\right),\\
N_6 &= l_2(x)l_1(y)l_2(z) = \frac{1}{8}\left(1+\frac{x}{a}\right)\left(1-\frac{y}{b}\right)\left(1+\frac{z}{c}\right),\\
N_7 &= l_2(x)l_2(y)l_2(z) = \frac{1}{8}\left(1+\frac{x}{a}\right)\left(1+\frac{y}{b}\right)\left(1+\frac{z}{c}\right),\\
N_8 &= l_1(x)l_2(y)l_2(z) = \frac{1}{8}\left(1-\frac{x}{a}\right)\left(1+\frac{y}{b}\right)\left(1+\frac{z}{c}\right).
\end{aligned} \quad \textbf{(11)}$$

Ukoliko se uvedu prirodne koordinate prema izrazima:

$$\begin{aligned}
\xi &= \frac{x}{a}, i\\
\eta &= \frac{y}{b},\\
\zeta &= \frac{z}{c},
\end{aligned} \quad \textbf{(12)}$$

funkcije oblika poprimaju oblik:

$$N_i = \frac{1}{8}(1+\xi\xi_i)(1+\eta\eta_i)(1+\zeta\zeta_i), \quad i = 1 \ldots .8. \quad \textbf{(13)}$$

Matrica funkcija oblika za osnovni prizmatični element glasi:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & \cdots & N_8 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & \cdots & 0 & N_8 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & \cdots & 0 & 0 & N_8 \end{bmatrix} \quad \textbf{(14)}$$

Matrica **B** izračunava se deriviranjem matrice funkcije oblika prema relaciji:

$$\mathbf{B} = \mathbf{D}_k\mathbf{N}, \quad \textbf{(15)}$$

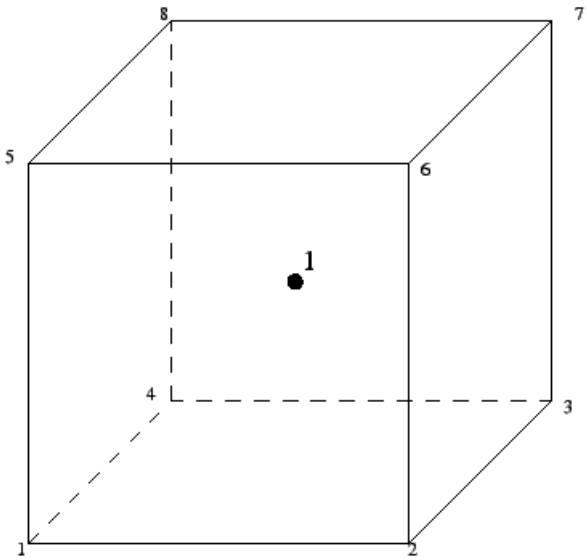
gdje je $\mathbf{D}_k$ kinematički diferencijalni operator koji je definiran izrazom:

$$\mathbf{D}_k = \begin{bmatrix} \partial_x & 0 & 0 \\ 0 & \partial_y & 0 \\ 0 & 0 & \partial_z \\ \partial_y & \partial_x & 0 \\ 0 & \partial_z & \partial_y \\ \partial_z & 0 & \partial_x \end{bmatrix}. \tag{16}$$

Deriviranjem funkcije oblika se primjećuje da je raspodjela deformacije u elementu linearna, što u konačnici uvjetuje i linearnu raspodjelu naprezanja [12]. Lokalna matrica krutosti se izračunava uz pomoć slijedeće relacije:

$$\mathbf{k} = \int_{-c}^{c} \int_{-b}^{b} \int_{-a}^{a} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z. \tag{17}$$

Prilikom provođenja numeričkih simulacija u ovom diplomskom radu je korišten prizmatični konačni element definiran u programskom paketu *Abaqus* pod imenom C3D8R. Iz samog imena se da zaključiti da se radi o konačnom elementu koji je namijenjen za trodimenzionalnu analizu te sadrži osam čvorova. Oznaka „R“ definira reduciranu integraciju koja znači da će se matrica krutosti prikazana jednadžbom (17) računati samo u jednoj točki integracije u težištu elementa. Takav pristup za rezultat ima smanjenje potrebnog vremena računanja, no moguće je unijeti neke netočnosti kao što je npr. povećanje ili smanjenje krutosti samog elementa u odnosu na standardni element. Slika 4.2. prikazuje C3D8R s jednom točkom integracije.



Slika 4.2. C3D8R konačni element [13]

5. METODA HOMOGENIZACIJE S REDUCIRANIM BROJEM STUPNJEVA SLOBODE

Problem većine *multiscale* metoda se svodi na dugotrajno vrijeme računanje te visok utrošak računalnih resursa. Homogenizacijska metoda s reduciranim brojem stupnjeva slobode je metoda koja nastoji postići ravnotežu između točnosti te utrošenog vremena računanja. Osmišljena je na način da je podijeljena na dva koraka: *offline* i *online* korak. U *offline* koraku algoritam diskretizira složenu heterogenu strukturu materijala odgovarajućim brojem klastera u kojima je polje deformacija i naprezanja konstantno. Nakon podjele stvara se interakcijski tenzor (*interaction tensor*) koji definira međusobni utjecaj klastera. *Online* korak rješava jednadžbe ravnoteže klastera, odnosno Lippmann-Schwingerovu jednadžbu [14].

Tri su temeljna cilja ove metode: izbjeći dugotrajni *offline* korak koristeći isključivo elastično ponašanje RVE-a, eliminirati potrebu za reduciranim makrokonstitutivnim jednadžbama korištenjem samo lokalnih konstitutivnih jednadžbi svakog konstituenta materijala i značajno smanjenje vremena računanja bez primjetnog gubitka točnosti [15].

5.1. Metodologija

Početna ideja ove metode je pregrupirati RVE u materijalne klastere koji su grupirani prema sličnosti materijalnih svojstava koje imaju. Klasteri su dimenzijama manji od standardnih RVE-ova te su nepravilnih oblika. Sam način i uvjet grupiranja će biti prikazan u potpoglavlju *Offline* korak. Kako bi se prezentirala metoda za rješavanje analize klastera potrebno je unijeti inicijalne pretpostavke.

Potrebno je pretpostaviti da je svaka lokalna varijabla unutar svakog materijalnog klastera jednoliko raspodijeljena, što je prikazano jednadžbom:

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{k} \boldsymbol{\beta}^I \chi^I(\mathbf{x}). \tag{18}$$

U jednadžbi $\boldsymbol{\beta}^I$ predstavlja homogenu varijablu *I*-tog materijalnog klastera dok $\chi^I(\mathbf{x})$ predstavlja karakterističnu funkciju domene *I*-tog klastera prikazanog Ω^I. $\boldsymbol{\beta}^I$ može biti bilo koja varijabla koja nas zanima. Karakteristična funkcija se definira na sljedeći način:

$$\chi^I(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{ako je } x \in \Omega^I, \\ 0 & \text{inače.} \end{cases} \tag{19}$$

Uz pomoć navedenih jednadžbi moguće je definirati odnos uprosječenih vrijednosti klastera:

$$\int_{\Omega} \chi^I(\mathbf{x})[\boldsymbol{\vartheta}]d\mathbf{x} \equiv \int_{\Omega^I} [\boldsymbol{\vartheta}]d\mathbf{x}, \tag{20}$$

gdje ϑ definira bilo koju željenu varijablu u *I*-tom klasteru Ω^I.

5.1.1. Lippman-Schwingerova homogenizacija klastera

Za početak je potrebno definirati Newtonov zakon gibanja tijela na koje ne djeluje vanjska sila te je prikazan jednadžbom:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = 0 \text{ u cijeloj domeni materijala } \Omega. \tag{21}$$

Također, uvodi se jednadžba stvarnog naprezanja koja je podijeljena na dva dijela. Prvi dio je definiran preko matrice elastičnosti $\mathbf{C}^0$ te se odnosi na pretpostavku linearne elastičnosti homogenog referentnog materijala. Drugi dio jednadžbe $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ prikazuje tzv. polarizacijsko naprezanje

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}(\mathbf{x}). \tag{22}$$

Polarizacijsko naprezanje prikazuje razliku između stvarnog naprezanja te naprezanja unutar homogenog materijala izloženog istim deformacijama. Nakon supstitucije jednadžbe (22) u jednadžbu (21) dobiva se:

$$C^0_{ijkl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = -\frac{\partial p_{ij}(\mathbf{x})}{\partial x_i} \text{ u } \Omega. \tag{23}$$

Kako bi dalje prikazali ovisnost tenzora deformacije u klasteru uvodi se Greenova funkcija $\boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. Funkcija prikazuje doprinos deformaciji na položaju $\mathbf{x}$ od strane naprezanja na položaju $\mathbf{x}'$ u homogenom referentnom materijalu. Prema tome jednadžba (22) se može zapisati u integralnom obliku na način da se tenzor $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ promatra kao vanjsko opterećenje na referentni materijal:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') : \mathbf{p}(\mathbf{x}')\mathrm{d}\mathbf{x}' - \boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{0}. \tag{24}$$

U jednadžbi (24) $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ predstavlja nominalnu deformaciju u homogenom referentnom materijalu. Supstitucijom jednadžbe (22) u jednadžbu (24) dobije se:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}'): [\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}') - \mathbf{C}^0: \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}')]\mathrm{d}\mathbf{x}' - \boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{0}. \tag{25}$$

Prilikom rješavanja jednadžbe (25) potrebno je adekvatno postaviti rubne uvjete.

Jednadžbu (25) možemo zapisati i u inkrementalnom obliku. Zapisana jednadžba se naziva Lippman-Schwingerova jednadžba:

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}'): [\Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}') - \mathbf{C}^0: \Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}')]d\mathbf{x}' - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{0}. \tag{26}$$

Jednadžbu je potrebno uprosječiti za svaki klaster:

$$\begin{gathered}\frac{1}{c^I|\Omega|}\int_{\Omega} \chi^I(\mathbf{x})\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \\ \frac{1}{c^I|\Omega|}\int_{\Omega}\int_{\Omega} \chi^I(\mathbf{x})\boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}'): [\Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}') - \mathbf{C}^0: \Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}')]d\mathbf{x}'d\mathbf{x} - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{0},\end{gathered} \tag{27}$$

gdje je c^I volumen *I*-tog klastera, a $|\Omega|$ opisuje volumen cijele domene materijala. Ukoliko se iskoristi pretpostavka o jednolikoj raspodjeli varijabli unutar klastera prema kojoj vrijedi:

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \sum_{J=1}^{k} \chi^J(\mathbf{x})\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^J, \;\; \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \sum_{J=1}^{k} \chi^J(\mathbf{x})\Delta\boldsymbol{\sigma}^J, \tag{28}$$

jednadžba (27) se može pojednostaviti na način:

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^I + \sum_{J=1}^{k}\left[\frac{1}{c^I|\Omega|}\int_{\Omega}\int_{\Omega} \chi^I(\mathbf{x})\chi^J(\mathbf{x}')\boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}')d\mathbf{x}'d\mathbf{x}\right]: [\Delta\boldsymbol{\sigma}^J - \mathbf{C}^0: \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^J] - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{0}, \tag{29}$$

pri čemu $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^J$ i $\Delta\boldsymbol{\sigma}^J$ predstavljaju inkrementalne deformacije i naprezanja u *J*-tom klasteru. Iz jednadžbe (29) proizlazi:

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^I + \sum_{J=1}^{k} \mathbf{D}^{IJ}: [\Delta\boldsymbol{\sigma}^J - \mathbf{C}^0: \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^J] - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{0}, \tag{30}$$

gdje je $\mathbf{D}^{IJ}$ definiran kao interakcijski tenzor (*interaction tensor*) te ga opisuje izraz:

$$\mathbf{D}^{IJ} = \frac{1}{c^I|\Omega|}\int_{\Omega}\int_{\Omega} \chi^I(\mathbf{x})\chi^J(\mathbf{x}')\boldsymbol{\Phi}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}')d\mathbf{x}'d\mathbf{x}. \tag{31}$$

Uz pomoć sljedeće jednadžbe moguće je izračunati homogenu makrodeformaciju te homogenizirano makronaprezanje:

$$\sum_{I=1}^{k} c^I \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^I = \Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\,,\ \sum_{I=1}^{k} c^I \Delta\sigma^I = \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}. \tag{32}$$

5.1.2. Offline korak

U *offline* koraku algoritma potrebno je napraviti pripremu za *online* korak. Točnije, potrebno je izračunati tenzor interakcije klastera $\mathbf{D}^{IJ}$ koji u principu opisuje utjecaj naprezanja u *J*-tom klasteru na deformaciju u *I*-tom klasteru [14], te grupirati točke u materijalne klastere. Ideja je provesti grupiranje na temelju sličnih mehaničkih svojstava i ponašanja pod narinutim opterećenjem [15].

Grupiranje se temelji na procijeni elastičnog odziva RVE-a te izračunu tenzora koncentracije deformacije $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ u svakoj točki. Spomenuti tenzor predstavlja vezu između elastične mikrodeformacije $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{m}}$ te homogene elastične makrodeformacije $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{M}}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{m}}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{M}}. \tag{33}$$

Uvjet prema kojem se definira sličnost između dvije točke je prikazan razlikom njihovih tenzora koncentracije deformacija. Ukoliko dvije točke imaju isti tenzor koncentracije naprezanja, može se reći da iskazuju potpuno identično elastično ponašanje pod narinutim opterećenjem. Nadalje, može se zaključiti da te dvije točke imaju slično i nelinearno elastoplastično ponašanje jer do lokalizacije plastičnih deformacija dolazi tek prilikom izrazito velikih vrijednosti tenzora koncentracije deformacija [15].

Nakon određivanja vrijednosti tenzora koncentracije deformacija, potrebno je grupirati točke koje imaju slične podatke koristeći *k-means* klastering algoritam.

Algoritam radi na principu minimiziranja funkcije razlike kvadrata unutar klastera za svaki od setova klastera kako bi postigao oblik i veličinu klastera. Optimizacijska funkcija je prikazana sljedećom jednadžbom:

$$\mathbf{S} = \underset{\mathbf{S}'}{\operatorname{argmin}} \sum_{J=1}^{k} \sum_{n \in S^J} \left\| \mathbf{A}_n - \bar{\mathbf{A}}_J \right\|^2. \tag{34}$$

U jednadžbi (34) $\mathbf{S}^J$ označava *J*-ti klaster, $\mathbf{A}_n$ tenzor koncentracije deformacije *n*-te točke, a $\bar{\mathbf{A}}_J$ srednju vrijednost svih tenzora koncentracije deformacija unutar klastera $\mathbf{S}^J$.

Točke koje su grupirane ne moraju biti u neposrednoj blizini jedna druge, već se grupiranje vrši isključivo na principu vrijednosti tenzora koncentracije deformacija. Slika 5.1. prikazuje primjer diskretizacije RVE-a klasterima.

Slika 5.1. a) RVE diskretiziran s 10 000 trokutnih elemenata prvog reda, b) RVE diskretiziran s 8 klastera [14]

Izračun interakcijskog tenzora slijedi nakon stvaranja klastera. Tenzor interakcije $\mathbf{D}^{IJ}$ računa se prema jednadžbi (31) uz pomoć Greenove funkcije u domeni Ω RVE-a s periodičkim rubnim uvjetima. Green-ova funkcija je funkcija četvrtog reda koja je povezana s tenzorom elastičnosti $\mathbf{C}^0$ [15].

Green-ova funkcija za linearno-elastične materijale (izotropne ili anizotropne) je izvedena i poznata u Fourierovom prostoru. Za izotropne linearno elastične materijale ona glasi:

$$\widehat{\Phi}^0_{ijkl}(\xi) = \frac{1}{4\mu^0|\xi|^2}\left(\delta_{ik}\xi_j\xi_l + \delta_{il}\xi_j\xi_k + \delta_{jl}\xi_i\xi_k + \delta_{jk}\xi_i\xi_l\right) - \frac{\lambda^0+\mu^0}{\mu^0(\lambda^0+2\mu^0)}\frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l}{|\xi|^4}. \quad \textbf{(35)}$$

U prethodnoj jednadžbi ξ označava koordinatu u Fourierovom prostoru koja odgovara $\mathbf{x}$ u stvarnosti, dok su λ^0 i μ^0 Laméove konstante referentnog materijala [15].

5.1.3. Online korak

Online korak se svodi na rješavanje Lippmann-Schwingerove jednadžbe koja je prikazana u kontinuiranom te inkrementalnom obliku jednadžbama (25) i (26). Kontinuirana jednadžba ne ovisi o izboru tenzora elastičnosti referentnog materijala $\mathbf{C}^0$ te se lokalna deformacija $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ može izračunati. Problem nastaje prilikom korištenja inkrementalne jednadžbe (koja se koristi u numeričkim algoritmima) i dokazano je da izbor tenzora elastičnosti referentnog materijala

uvelike ovisi o brzini konvergencije samog sustava iako je moguće doći do rješenja i s konstantnim tenzorom elastičnosti $\mathbf{C}^0$ [15].

U radu će biti prikazan algoritam za oba slučaja – s konstantnim tenzorom elastičnosti, te konzistentnim (*self-consistent*) tenzorom elastičnosti (iterativno računanje tenzora).

5.1.3.1. *Algoritam s konstantnim tenzorom elastičnosti* [15]

Prije definiranja samog algoritma metode potrebno je prikazati bitne jednadžbe:

$$\mathbf{r}^I(\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_n) = \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^I + \sum_{J=1}^{k} \mathbf{D}^{IJ}\colon\left[\Delta\boldsymbol{\sigma}_n^J - \mathbf{C}^0\colon\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^J\right] - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^0 \text{ gdje je } I = 1,2,\dots,k. \qquad \textbf{(36)}$$

Prikazana jednadžba opisuje način izračuna reziduala inkrementalne deformacije u pojedinom klasteru tijekom iteracijskog koraka. Sljedeća jednadžba prikazuje izračun reziduala makrodeformacija te makronaprezanja:

$$\mathbf{r}^{k+1}(\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_n) = \sum_{I=1}^{k} c^I\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^I - \Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \mathbf{r}^{k+1}(\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_n) = \sum_{I=1}^{k} c^I\Delta\boldsymbol{\sigma}_n^I - \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}. \qquad \textbf{(37)}$$

Algoritam tada glasi [15]:

1. Postavljanje inicijalnih uvjeta te inicijalizacija: postavljanje $\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_0 = \mathbf{0}; n = 0; \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}} = \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_0; \mathbf{C}^0 = \mathbf{C}^{\text{ulaz}}$,
2. Provođenje iteracija uz pomoć Newton-Raphsonove metode za inkrement opterećenja n+1:
    a. Izračunati inkrementalna naprezanja $\{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{\text{novi}}$ prema konstitutivnim zakonima,
    b. Koristeći jednadžbe (36) i (37) izračunati rezidual $\mathbf{r} = \mathbf{f}(\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}}, \{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{\text{novi}})$,
    c. Stvoriti Jakobijevu matricu sustava $\mathbf{M}$,
    d. Riješiti linearnu jednadžbu $\{\delta\boldsymbol{\varepsilon}\} = -\{\mathbf{M}\}^{-1}\{\mathbf{r}\}$,
    e. Ažurirati inkrement deformacija $\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}} \leftarrow \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}} + \{\delta\boldsymbol{\varepsilon}\}$,
    f. Provjeriti je li rezidual zadovoljava kriterij točnosti, ukoliko ne zadovoljava povratak na 2a,
3. Ažurirati inkrementalnu deformaciju i naprezanje: $\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{n+1} = \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}}, \{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{n+1} = \{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{\text{novi}}; n \leftarrow n + 1$,
4. Ukoliko simulacija nije gotova, vratiti se na korak 2.

5.1.3.2. Algoritam s konzistentnim (self-consistent) tenzorom elastičnosti

U ovome algoritmu unosimo nove pretpostavke. Uvidjevši utjecaj koji matrica elastičnosti tj. tangentni modul RVE-a ima na točnost rješenja, tangentni modul se računa iterativno. Naime, za svaki *n*-ti inkrement je zaključeno da tangentni modul $\mathbf{C}_n^0$ teži homogeniziranom tangentnom modulu RVE-a, $\mathbf{C}_n^{\mathrm{M}}$. Samim time i nominalna deformacija $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^0$ teži makroskopskoj deformaciji $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^{\mathrm{M}}$. Na taj način moguće je zapisati jednadžbu:

$$\mathbf{C}_n^0 = \mathbf{f}(\lambda_n^0, \mu_n^0). \tag{38}$$

Zapisani izraz prikazuje tangentni modul elastičnosti *n*-te iteracije kao funkciju λ_n^0 i μ_n^0 koji su Laméovi parametri unutar *n*-te iteracije. Potrebno je pronaći optimalne vrijednosti Laméovih parametara što se izračunava uz pomoć sljedeće jednadžbe:

$$g(\lambda_n^0, \mu_n^0) = \|\Delta\boldsymbol{\sigma}_n^{\mathrm{M}} - \mathbf{f}(\lambda_n^0, \mu_n^0) : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n^{\mathrm{M}}\|^2. \tag{39}$$

Kako bi pronašli optimalnu vrijednost potrebno je jednadžbu (23) parcijalno derivirati:

$$\left.\frac{\partial g}{\partial \lambda_n^0}\right|_{\lambda_{\mathrm{opt}}^0, \mu_{\mathrm{opt}}^0} = 0 \quad , \quad \left.\frac{\partial g}{\partial \mu_n^0}\right|_{\lambda_{\mathrm{opt}}^0, \mu_{\mathrm{opt}}^0} = 0. \tag{40}$$

Tenzor interakcije (*interaction tensor*) $\mathbf{D}^{IJ}$ se izračunava uz pomoć Greenove funkcije čiji je izgled prikazan jednadžbom (35). S obzirom da se svaku iteraciju mijenjaju vrijednosti korištenih Laméovih konstanti, potrebno je nakon svake iteracije ponovo izračunati i tenzor interakcije klastera.

Self-consistent algoritam glasi [15]:

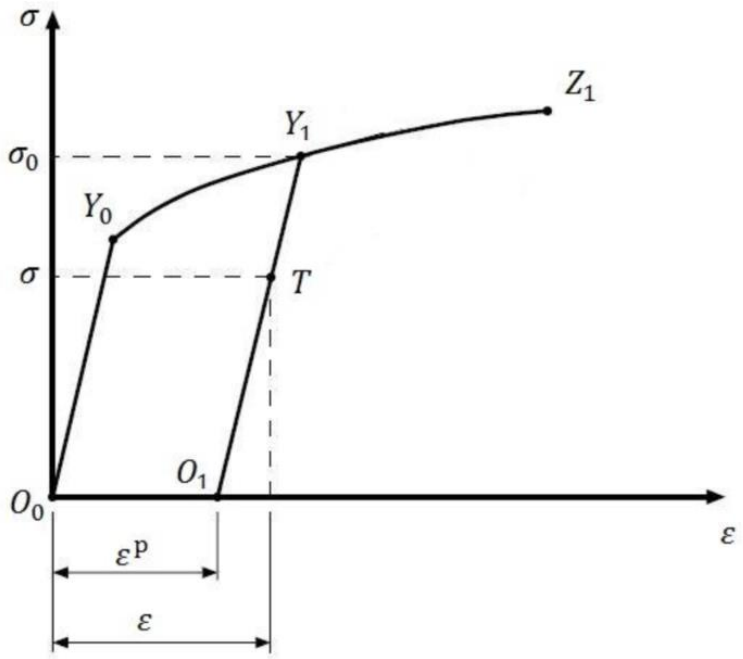
1. Postavljanje inicijalnih uvjeta te inicijalizacija: postavljanje (λ^0, μ^0); $\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_0 = \mathbf{0}; n = 0; \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\mathrm{novi}} = \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_0$,
2. Za inkrementalno opterećenje *n*+1 potrebno je ažurirati tenzor interakcije $\mathbf{D}^{IJ}$ i tenzor elastičnosti $\mathbf{C}^0$,
3. Izračun iteracija uz pomoć Newton-Raphsonove metode za inkrement opterećenja n+1:
    a. Izračunati inkrementalna naprezanja $\{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{\mathrm{novi}}$ prema konstitutivnim zakonima,

   b. Koristeći jednadžbe (36) i (37) izračunati rezidual $\mathbf{r} = \mathbf{f}(\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}}, \{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{\text{novi}})$,
   c. Stvoriti Jakobijevu matricu sustava **M**,
   d. Riješiti linearnu jednadžbu $\{\delta\boldsymbol{\varepsilon}\} = -\{\mathbf{M}\}^{-1}\{\mathbf{r}\}$,
   e. Ažurirati inkrement deformacija $\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}} \leftarrow \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}} + \{\delta\boldsymbol{\varepsilon}\}$,
   f. Provjeriti je li rezidual zadovoljava kriterij točnosti, ukoliko ne zadovoljava povratak na 3a,
4. Rješiti jednadžbu (40) te zapisati optimalne vrijednosti Laméovih parametara $(\lambda^0, \mu^0) \leftarrow (\lambda^0_{\text{opt}}, \mu^0_{\text{opt}})$,
5. Provjeriti uvjet, ukoliko ne zadovoljava povratak na 2,
6. Ažurirati inkrementalnu deformaciju i naprezanje: $\{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{n+1} = \{\Delta\boldsymbol{\varepsilon}\}_{\text{novi}}, \{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{n+1} = \{\Delta\boldsymbol{\sigma}\}_{\text{novi}}; n \leftarrow n + 1$,
7. Ukoliko simulacija nije gotova, vratiti se na korak 2.

6. MODELIRANJE ELASTOPLASTIČNOG PONAŠANJA MATERIJALA

6.1. Uvod u elastoplastičnost

Kad se u materijalima nakon opterećenja, uz povrative elastične deformacije, pojavljuju trajne deformacije, kažemo da se materijal ponaša elastoplastično. Takvo ponašanje materijala opisuje teorija plastičnosti. Plastično tečenje materijala je ireverzibilan proces te plastične deformacije ostaju u materijalu i nakon rasterećenja. Slika 6.1 prikazuje dijagram jednoosnog vlačnog testa metalne epruvete na kojoj su prikazane sve kritične točke. U nastavku će se približiti i opisati ponašanje materijala u pojedinim područjima dijagrama.



Slika 6.1. Prikaz dijagrama ovisnosti naprezanja i deformacije za jednoosni vlačni test metalne epruvete [16]

Ispitivanje je provedeno na način da je opterećenje narinuto u aksijalnom smjeru te djeluje monotono od početne točke O_0 do sile koja izaziva naprezanje σ_0. Uzorak je potom u potpunosti rasterećen te ponovo opterećen većom silom.

Postoje dva vidljivo različita područja na dijagramu: linearno područje koje se proteže od O_0 do Y_0 te područje nakon Y_0. Tijekom linearnog područja ponašanje materijala je prikazano Hookeovim pravcem. Veza između naprezanja i deformacije je opisana linearnom jednadžbom te se javljaju samo elastične deformacije. Ukoliko bi se epruveta opteretila do blizine točke Y_0, nakon rasterećenja bi se vratila u točku O_0 zbog spomenute povrativosti elastičnih deformacija.

Spomenuta veza između deformacija i naprezanja je prikazana Hookeovim zakonom koji glasi:

$$\frac{\sigma}{\varepsilon} = E, \tag{41}$$

gdje σ predstavlja naprezanja, ε deformaciju, a E Youngov modul elastičnosti.

Ukoliko se prilikom aksijalnog testa opterećenjem izazovu naprezanja u materijalu koje je iznad točke Y_0 tada smatramo da se u materijalu uz elastične deformacije u materijalu javljaju i plastične deformacije koje su ireverzibilne. Krivulja od toga trenutka više nije linearna. Slika 6.1 također prikazuje rasterećenje epruvete nakon ulaska u plastično područje. Prilikom rasterećenja materijal prati pravac definiranog Hookeovog zakona te dolazi u točku O_1. Potrebno je primjetiti da je O_1 odmaknuta od točke O_0 za iznos zaostalih plastičnih deformacija. Ukoliko se epruveta ponovo optereti do naprezanja σ dolazi se do točke T u kojoj se ukupna suma deformacija prikazuje kao kombinacja elastičnih i plastičnih:

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p. \tag{42}$$

Iz dijagrama se jasno vidi da se materijal nakon ponovnog opterećenja između točaka O_1 i Y_1 ponaša elastično. Spomenuto ponašanje je definirano kao očvršćenje materijala. Prema tome točka Y_1 sada predstavlja novu granicu tečenja materijala nakon koje dolazi do pojavljivanja novih plastičnih deformacija daljnjim opterećivanjem. Točka Y_0 se sada naziva inicijalna granica tečenja.

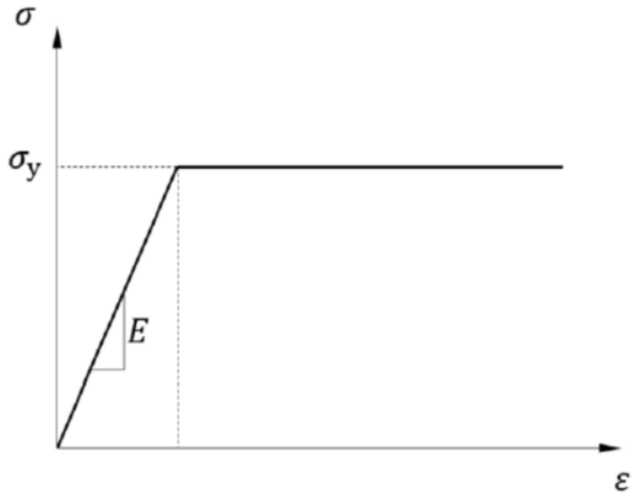
Linearno-elastično ponašanje materijala nakon unesenih plastičnih deformacija se može opisati jednadžbom:

$$\frac{\sigma}{\varepsilon - \varepsilon^p} = E. \tag{43}$$

6.2. Modeli elastoplastičnog ponašanja

Postoji veći broj modela koji opisuju konstitutivno ponašanje materijala u elastoplastičnom području. Svaki od tih modela (osim nelinearnog) unosi neke pretpostavke ili idealizacije kako bi se smanjila kompleksnost matematičkog modela. Nelinearni elastoplastični model se temelji na iterativnoj metodi proračuna konstitutivnih relacija te ga nije moguće provesti bez korištenja računala za proračun složenijih problema. Najčešće korišten algoritam za proračun naziva se algoritam povratnog projiciranja te će detaljnije biti pojašnjen u zasebnom potpoglavlju.

Linearno elastični – savršeno plastični model pretpostavlja linearno-elastično ponašanje materijala tijekom Hookeovog pravca te je prikazan na Slika 6.2. Nadalje, smatra se da nakon što naprezanje postigne vrijednost granice tečenja σ_Y tangentni modul teži u nulu. Takvo ponašanje ne uzima u obzir očvršćenje materijala.



Slika 6.2. Linearno elastični – idealno plastični model [17]

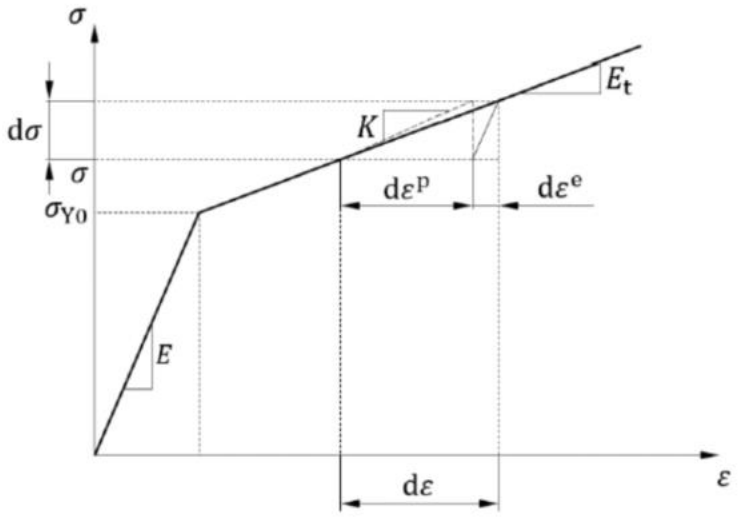
Jednadžbe koje opisuju prikazano ponašanje materijala su sljedeće:

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} \text{ za } \sigma < \sigma_Y, \tag{44}$$

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \lambda \text{ , za } \sigma = \sigma_Y. \tag{45}$$

λ predstavlja skalar koji u jednadžbu unosi plastične deformacije.

Linearno-elastični – linearno očvrščujući materijalni model je model u kojemu se kontinuirana nelinearna krivulja očvršćenja aproksimira s dva pravca. Dijagram modela je prikazan slikom:



Slika 6.3. Elastično-linearno očvršćujući materijalni model [17]

Kontinuirani prijelaz između elastičnog i plastičnog područja prikazuje kao oštar prijelaz u točki granice tečenja σ_{Y0}. Prvi pravac prikazuje linearno elastično ponašanje opisano Hookeovim zakonom, dok drugi pravac predstavlja idealizaciju plastičnog očvršćenja. Nagib pravca idealizacije plastičnog očvršćenja je uvijek manji od nagiba Hookeovog pravca $K < E$. Jednadžbe koje opisuju prikazani materijalni model su:

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} \text{ za } \sigma < \sigma_{Y0}, \tag{46}$$

$$\varepsilon = \frac{\sigma_{Y0}}{E} + \frac{1}{K}(\sigma - \sigma_{Y0}), \text{za } \sigma > \sigma_{Y0}. \tag{47}$$

K predstavlja plastični tangentni modul. Kako bi ga definirali kreće se od jednadžbe (42) koja se diferencira na način:

$$\mathrm{d}\varepsilon = \mathrm{d}\varepsilon^e + \mathrm{d}\varepsilon^p. \tag{48}$$

Odnos između naprezanja i deformacija na diferencijalnoj razini je definiran kao:

$$\mathrm{d}\varepsilon = \frac{\mathrm{d}\sigma}{E_T}, \tag{49}$$

gdje $\mathrm{d}\varepsilon$ predstavlja diferencijal deformacije u nekoj točki dijagrama, a $\mathrm{d}\sigma$ diferencijal naprezanja. E_T je ukupni tangentni modul koji se mijenja u ovisnosti o deformaciji te predstavlja trenutni nagib pravca u trenutnoj točki dijagrama. Na isti način se mogu prikazati zasebne ovisnosti plastičnih i elastičnih deformacija o elastičnim i plastičnim naprezanjima na način:

$$\mathrm{d}\varepsilon^e = \frac{\mathrm{d}\sigma}{E}, \tag{50}$$

$$\mathrm{d}\varepsilon^p = \frac{\mathrm{d}\sigma}{K}. \tag{51}$$

Supstitucijom relacija (49), (50) i (51) u jednadžbu (48) dobije se:

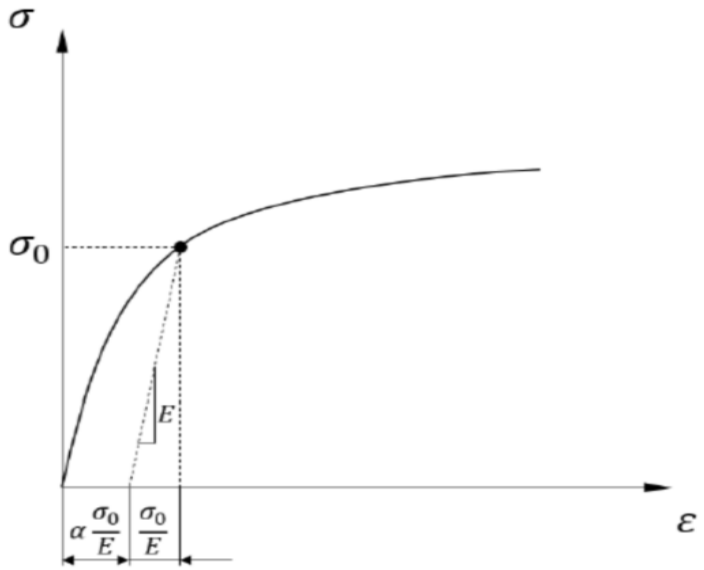
$$\frac{1}{E_T} = \frac{1}{E} + \frac{1}{K}. \tag{52}$$

Iz čega slijedi izraz za plastični tangentni modul:

$$K = \frac{E_T E}{E - E_T}. \tag{53}$$

Plastični tangentni modul predstavlja nagib pravca u nekoj točki koja se nalazi u plastičnom području, a da pri tom ne uzima u utjecaj nagib Hookeovog pravca koji opisuje linearno elastično područje.

Ramberg-Osgoodov materijalni model opisuje elastoplastično ponašanje materijala na način da elastično područje prikazuje Hookeovim pravcem, dok plastično ponašanje prikazuje kao nelinearno. Dobro opisuje ponašanje duktilnih materijala pri vlačnom i tlačnom testu. Dijagram modela je prikazan Slika 6.4.



Slika 6.4. Ramberg-Osgoodov materijalni model

Materijalni model je definiran jednadžbom:

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \alpha \frac{\sigma}{E} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^{n-1}, \quad \textbf{(54)}$$

u kojoj su α i n parametri materijala. α predstavlja naprezanje pod kojim materijal ulazi u plastično područje, dok ekponent n predstavlja brzinu očvršćenja.

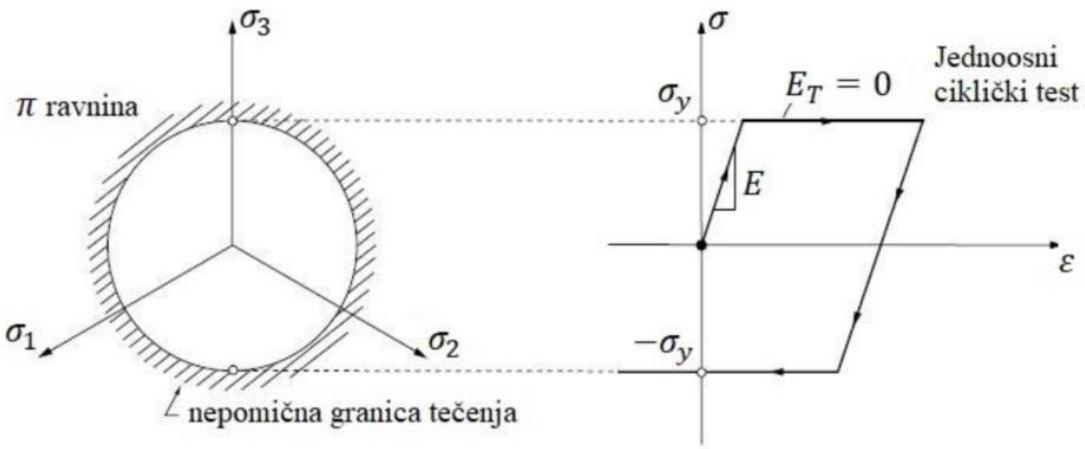
6.3. Zakoni očvršćenja elastoplastičnih materijala

Prethodno opisani fenomen povećanja granice tečenja materijala unoseći plastične deformacije izlaganjem obradka ponavljajućim ciklusima opterećenja naziva se očvršćenje. Na taj način materijali postaju čvršći i otporniji daljnjim deformacijama. Očvršćenje prikazuje način na koji se čvrstoća i duktilnost materijala mijenja u ovisnosti o plastičnim deformacijama. Prikazano je kao funkcija tečenja materijala prema ukupnoj povijesti pojave plastičnih deformacija. Očvršćenje utječe na veličinu i položaj granice tečenja u prostoru glavnih naprezanja. Postoje tri glavna načina očvršćenja, a to su:

- idealna plastičnost,
- izotropno očvršćenje,
- kinematičko očvršćenje.

6.3.1. Idealna plastičnost

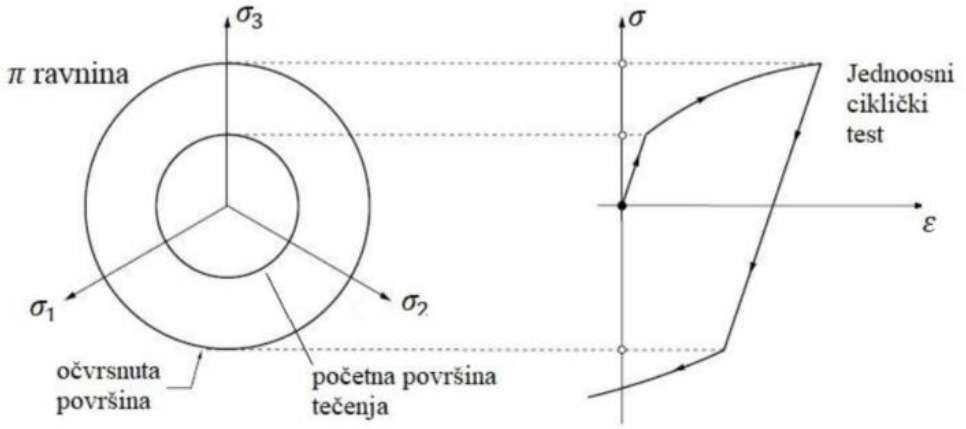
Idealna plastičnost je model očvršćenja prema kojem nema očvršćenja. Dijagram takvog modela prikazan je na Slika 6.2. Granica tečenja se ne mijenja ovisno o unešenim plastičnim deformacijama bez obzira na proces deformiranja. Slika 6.5 prikazuje dijagram granice tečenja na površini tečenja, kao i jednoosni ciklički test .



Slika 6.5. Prikaz idealne plastičnosti [16]

6.3.2. Izotropno očvršćenje

Izotropno očvršćenje predstavlja model prema kojem se granica tečenja povećava jednoliko (izotropno) u odnosu na početnu granicu tečenja. Ne uzima u obzir tzv. Bauschingerov efekt prema kojem granica tečenja u povratnom tlačnom opterećenju bude manja od postignute prilikom inicijalnog vlačnog opterećenja. Funkcija tečenja za višeosni elastoplastični model se najčešće definira prema von Misesu. Izotropno očvršćenje se očituje kroz povećanje volumena von Misesovog cilindra u prostoru glavnih naprezanja.



Slika 6.6. Shema izotropnog očvršćenja i prikaz jednoosnog cikličkog testa [16]

Kako bi se adekvatno opisao model izotropnog očvršćenja prema von Misesu potrebno je definirati uvjet tečenja koji prema jednoosnom stanju naprezanja ima oblik:

$$\sigma = \sigma_y, \tag{55}$$

dok je za višeosno stanje definiran preko skalarne funkcije koja ovisi o naprezanju σ_{ij}, plastičnoj deformaciji ε_{ij}^{p} te promjeni plastične defomracije koja je definirana uz pomoć parametra očvršćenja κ :

$$f = f\left(\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^{p}, \kappa\right) = 0. \tag{56}$$

Prikazana jednadžba (56) predstavlja plohu tečenja oblika hiperbole. Kada je vrijednost funkcije $f < 0$ tada ne dolazi do povećanja plastične deformacije, već se točka materijala nalazi u elastičnom području. Ukoliko vrijednost iznosi $f > 0$ tada dolazi do plastičnih deformacija te se ploha povratno korigira. Funkcija f ne može imati vrijednosti veće od 0 jer bi to značilo da se točka nalazi izvan plohe tečenja.

Za izvod funkcije tečenja su potrebne tri invarijante tenzora naprezanja:

$$I_1 = \sigma_{ii}, \qquad I_2 = \frac{1}{2}\sigma_{ij}\sigma_{ij}, \qquad I_3 = \frac{1}{2}\sigma_{ik}\sigma_{kl}\sigma_{li}. \tag{57}$$

Tenzor naprezanja, pa tako i njegove invarijante možemo podijeliti na devijatorski i hidrostatski dio. Devijatorske invarijante su:

$$J_1 = S_{ii}, \qquad J_2 = \frac{1}{2}S_{ij}S_{ij}, \qquad J_3 = \frac{1}{2}S_{ik}S_{kl}S_{li}. \tag{58}$$

Funkcija tečenja ne ovisi o pravcima glavnih naprezanja. Prema tome funkcija glasi:

$$f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = 0. \tag{59}$$

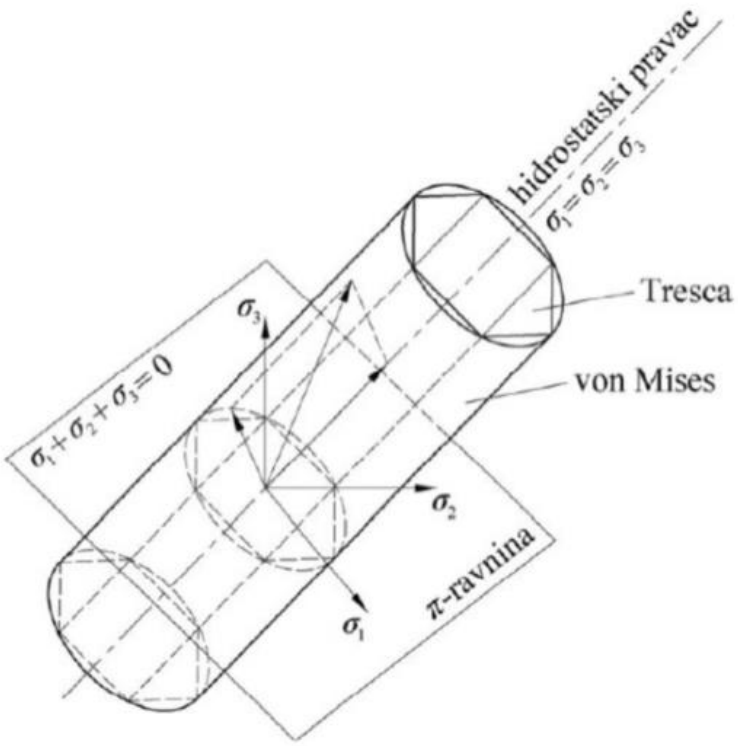
Devijatorski dio tenzora naprezanja opisuje plastično tečenje materijala. Funkcija tečenja ovisi samo o drugoj i trećoj invarijanti devijatora naprezanja, što je dokazano eksperimentom.

$$f(J_1, J_2) = 0. \tag{60}$$

Trodimenzijska funkcija tečenja se prikazuje u trodimenzijskom koordinatnom sustavu gdje su osi glavna naprezanja. Hidrostatski pravac zatvara jednake kutove sa svim osima te su duž toga pravca sva glavna naprezanja jednaka $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$. Ravnina koja je okomita na taj pravac i prolazi ishodištem naziva se π-ravnina i opisana je jednadžbom:

$$\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 0. \tag{61}$$

Slika 6.7 prikazuje funkciju tečenja u trodimenzijonalnom prostoru koja je opisana valjkom:



Slika 6.7. Von Misesova i Trescina ploha tečenja[[17]

Može postojati beskonačan broj ravnina koje su paralelne π ravnini te se nazivaju devijatorske ravnine. Presjek između plohe tečenja i π ravnine zovemo krivulja tečenja. Srednje normalno naprezanja u bilo kojoj točki π ravnine je jednako nuli [17,18].

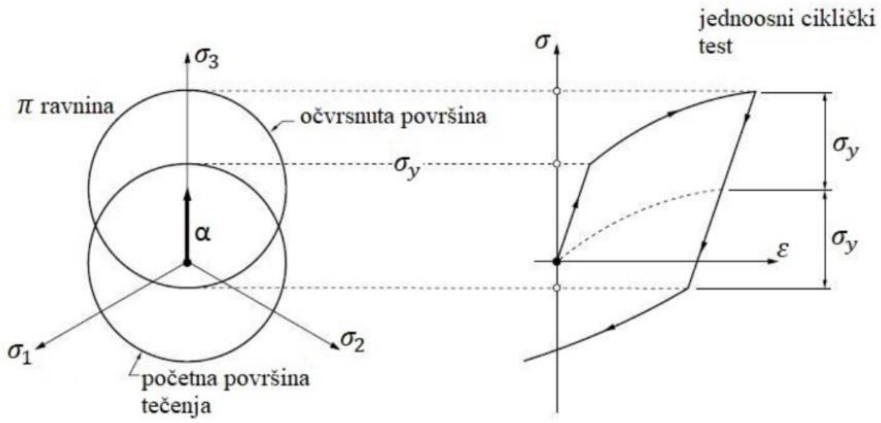
6.3.3. Kinematičko očvršćenje

Kinematičko očvršćenje predstavlja fenomen pri kojemu ploha tečenja materijala translatira u prostoru glavnih naprezanja, pri tom zadržavajući svoj oblik i veličinu. Kinematičko očvršćenje je otkriveno prilikom provođenja eksperimenata na raznim materijalima prilikom kojih su u jednom smjeru opterećenja ostvarivali smanjenu granicu tečenja od suprotnog smjera opterećenja [19]. Spomenuta pojava se naziva Bauschingerov efekt te je prikazana na Slika 6.8. Kinematičko očvršćenje se prikazuje jednadžbama:

$$f = f\left(\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^{p}, \kappa\right) = 0. \quad \textbf{(62)}$$

$$f\left(\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^{p}\right) = F\left(\sigma_{ij} - \alpha_{ij}\right) - \kappa = 0, \quad \textbf{(63)}$$

gdje α_{ij} predstavlja koordinate središta plohe tečenja.



Slika 6.8. Prikaz kinematičkog očvršćenja [16]

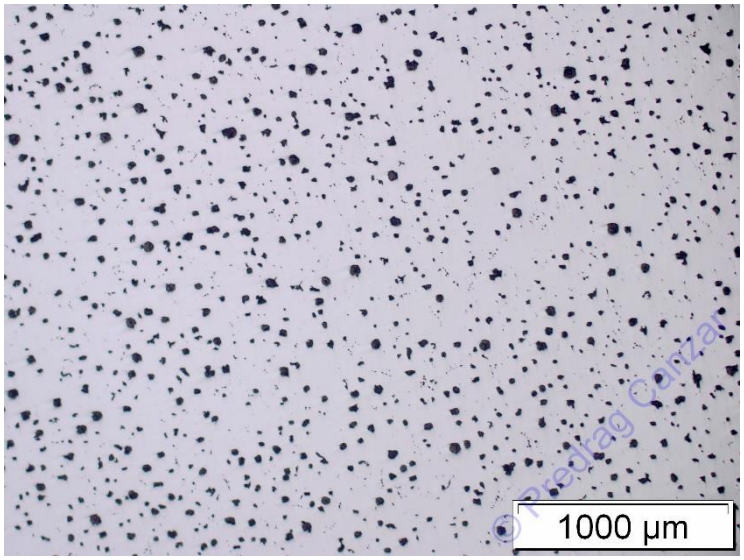
6.3.4. Numeričko modeliranje elastoplastičnosti

Numeričko modeliranje se vrši uz pomoć Simo-Hughes algoritma povratnog projiciranja (eng. *return mapping algorithm*). Temelji se na ideji ažuriranja stanja naprezanja i deformacija materijala uz pomoć trenutnih vrijednosti naprezanja i deformacija za svaki inkrement. Algoritam se sastoji od sljedećih koraka [20]:

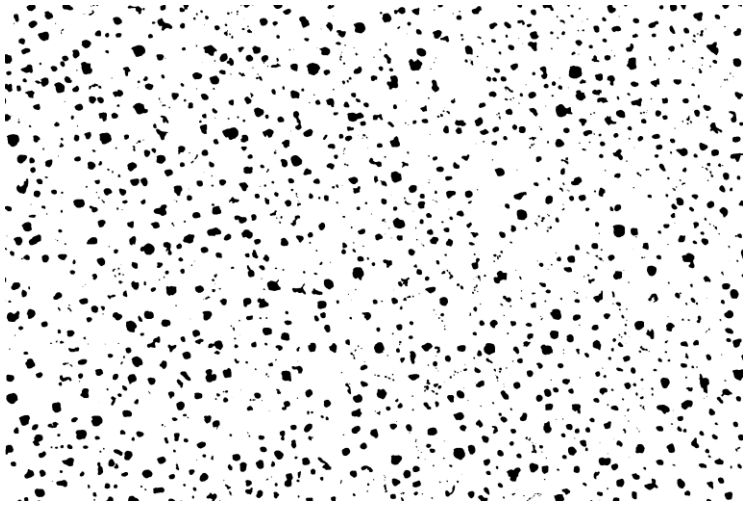
1. Predikcija novog stanja naprezanja – pretpostavlja se stanje naprezanja za idući inkrement algoritma temeljem trenutnih vrijednosti naprezanja i deformacija.
2. Izračun elastičnog stanja – izračun se vrši uz pomoć lineariziranih jednadžbi ravnoteže pretpostavljenog stanja.
3. Izračun plastičnih deformacija – na temelju nelinearnih konstitutivnih jednadžbi izračunavaju se plastične deformacije za pretpostavljeno stanje.
4. Korigiranje plastičnih deformacija – provjerava se da li izračunato stanje plastične deformacije prelazi granice krivulje tečenja. Ukoliko prelazi, pretpostavlja se da je došlo do plastične deformacije.
5. Povratno projiciranje – Ako se pojavila plastična deformacija, izračunava se novo stanje naprezanja koje zadovoljava jednadžbu (59). U tom slučaju točka novog stanja se nalazi na samoj krivulji tečenja. Plastična deformacija se ponovo računa u točki novog stanja.
6. Ažuriranje stanja naprezanja i deformacija [20].

7. GENERIRANJE MIKROSTRUKTURE

Kako bi se provele simulacije linearno-elastičnog te elastoplastičnog ponašanja materijala, potrebno je generirati mikrostrukturu samog materijala. Ideja je uz pomoć slika mikrostrukture postojećih nodularnih ljevova izvedenih u Tundish i Inmould izvedbi preuzetih iz doktorskog rada dr. Predraga Čanžara [4] generirati modele koji realno opisuju mikrostrukturu . Generirani model mikrostrukture je stvorena isključivo za potrebe ovoga rada te nikada nije izvedena u ljevaonici. Mikrostrukturne slike su softverski obrađene kako bi se postigao veći kontrast između područja grafitnih nodula te feritne matrice, a samim time pospješio postupak prikupljanja podataka. Slika 7.1. prikazuje primjer mikostrukture izvedene Inmould načinom lijevanja, a Slika 7.2. prikazuje softverski obrađenu mikrostrukturu.



Slika 7.1. Primjer mikrostrukture Inmould nodularnog lijeva [4]



Slika 7.2. Softverski obrađena mikrostruktura

Određivanje mikrostrukture je izvršeno korištenjem tri metode distribucije vjerojatnosti: Weibullova distribucija, Log-normalna distribucija te Gamma distribucija. Prilikom obrade korištene su po četiri mikrostrukture za svaku metodu lijevanja nodularnog lijeva. Parametri pojedinih distribucija bit će dani u tablicama.

Weibullova distribucija je prikazana jednadžbom:

$$f(x \mid a,b) = \begin{cases} \frac{b}{a}\left(\frac{x}{a}\right)^{b-1} e^{-(x/a)^b} & \text{ako je } x \geq 0 \\ 0 & \text{ako je } x < 0, \end{cases} \quad \textbf{(64)}$$

gdje *x* označava slučajnu varijablu parametar *b* predstavlja parametar oblika, dok je *a* parametar skale [21].

Parametri postignuti Weibullovom distribucijom su sljedeći:

Tablica 7.1. Parametri Weibull distribucije

		Raspodjela promjera čestica		Raspodjela udaljenosti čestica	
	Mikrostruktura	*a*	*b*	*a*	*b*
Inmould	Mikrostruktura 1	33,19292	3,17084	37,24912	2,10349
	Mikrostruktura 2	30,24803	3,09236	44,35855	2,24170
	Mikrostruktura 3	32,39083	3,31804	39,23693	2,09299
	Mikrostruktura 4	34,69034	3,63818	32,11995	1,89032
Tundish	Mikrostruktura 1	32,42813	3,64019	37,79173	2,07135
	Mikrostruktura 2	29,18096	3,09448	48,73162	2,27448
	Mikrostruktura 3	31,48782	3,77217	34,90533	2,05226
	Mikrostruktura 4	26,59483	4,09468	35,05680	1,94171

Log-normalna distribucija prikazuje raspodjelu slučajne varijable čiji je logaritam normalno raspodijeljen te je opisuje jednadžba:

$$y = f(x \mid \mu,\sigma) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{\frac{-(\log x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, x > 0. \quad \textbf{(65)}$$

U jednadžbi (65) μ označava srednju vrijednost, dok σ označava devijaciju [22]. Tablica 7.2. prikazuje parametre postignute aproksimiranjem podataka prema longormalnoj distribuciji.

Tablica 7.2. Parametri Log-normalne distribucije

		Raspodjela promjera čestica		Raspodjela udaljenosti čestica	
	Mikrostruktura	μ	σ	μ	σ
Inmould	Mikrostruktura 1	3,33494	0,33802	3,34436	0,61574
	Mikrostruktura 2	3,24430	0,32466	3,55049	0,51445
	Mikrostruktura 3	3,31749	0,32467	3,39481	0,61016
	Mikrostruktura 4	3,39174	0,32390	3,16697	0,68323
Tundish	Mikrostruktura 1	3,32617	0,31588	3,37031	0,55270
	Mikrostruktura 2	3,20920	0,32171	3,65073	0,49476
	Mikrostruktura 3	3,30388	0,30003	3,28316	0,57520
	Mikrostruktura 4	3,14967	0,26350	3,26914	0,61731

Gamma distribucija je generalizacija eksponencijalne distribucije te je opisuje jednadžba:

$$y = f(x \mid a, b) = \frac{1}{b^a \Gamma(a)} x^{a-1} e^{\frac{-x}{b}}, \quad \textbf{(66)}$$

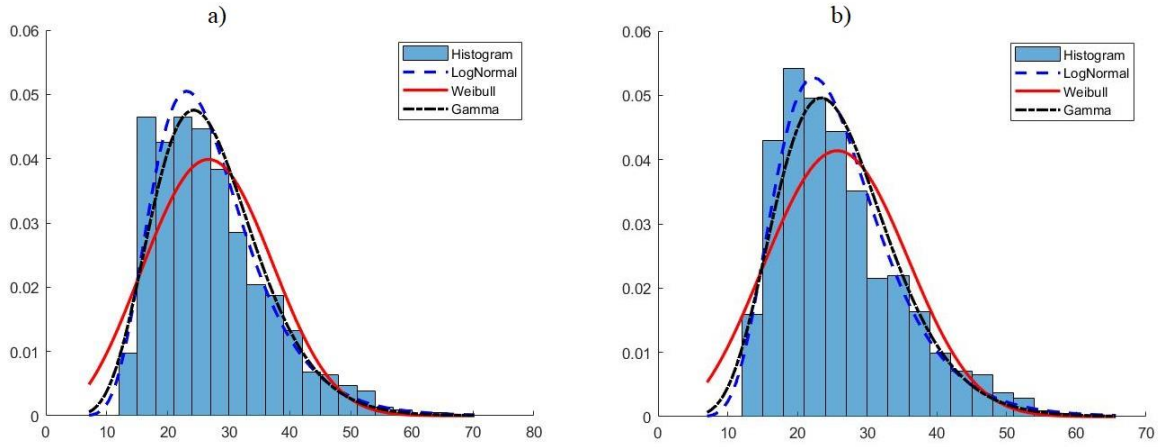
gdje je b faktor skale, dok a predstavlja parametar oblika. $\Gamma(a)$ predstavlja gama funkciju parametra oblika [23].

Tablica 7.3. prikazuje parametre Gamma distribucije.

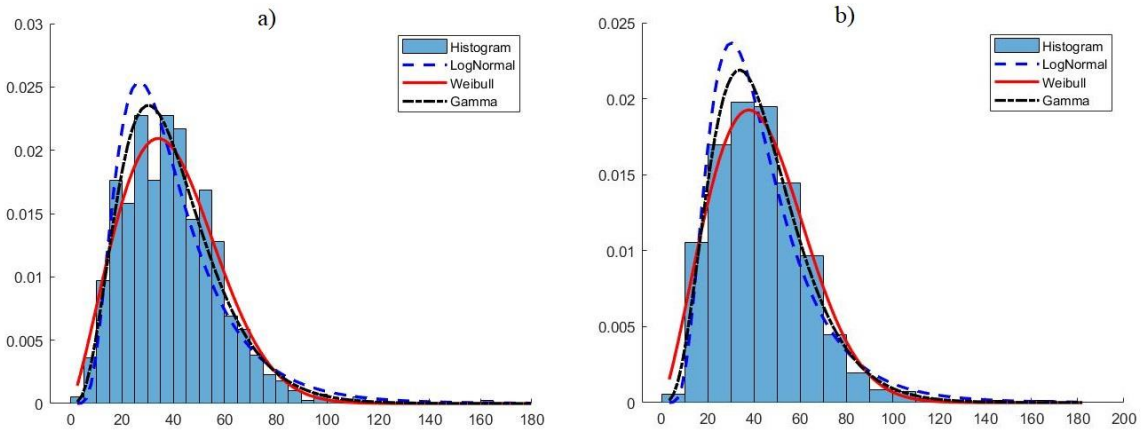
Tablica 7.3. Prametri Gamma distribucije

		Raspodjela promjera čestica		Raspodjela udaljenosti čestica	
	Mikrostruktura	a	b	a	b
Inmould	Mikrostruktura 1	9,04807	3,28271	3,43056	9,62546
	Mikrostruktura 2	9,49630	2,84903	4,34534	9,03260
	Mikrostruktura 3	9,81170	2,96164	3,41349	10,18219
	Mikrostruktura 4	10,19539	3,06378	2,88214	9,89305
Tundish	Mikrostruktura 1	10,57150	2,76226	3,78275	8,82709
	Mikrostruktura 2	9,62454	2,71212	4,58550	9,40102
	Mikrostruktura 3	11,63082	2,44447	3,58414	8,60704
	Mikrostruktura 4	14,67533	1,64537	3,17447	9,77373

Distribucijama su odvojeno promatrana dva glavna parametra – promjeri nodula grafita i najmanja međusobna udaljenost nodula. Slika 7.3. prikazuje primjer raspodjele promjera nodula za Inmould i Tundish način lijevanja, dok Slika 7.4. prikazuje primjer raspodjele najmanje međusobne udaljenosti. Analiza raspodjele glavnih parametara je provedena u programskom paketu *Matlab.*



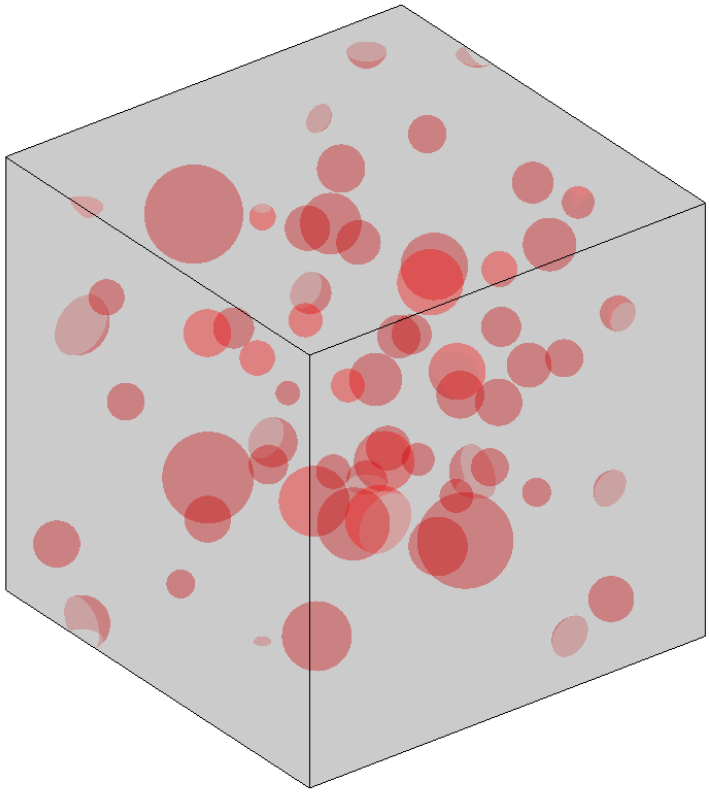
Slika 7.3. a) Raspodjela promjera nodula za Inmould način lijevanja, b) Raspodjela promjera nodula za Tundish način lijevanja



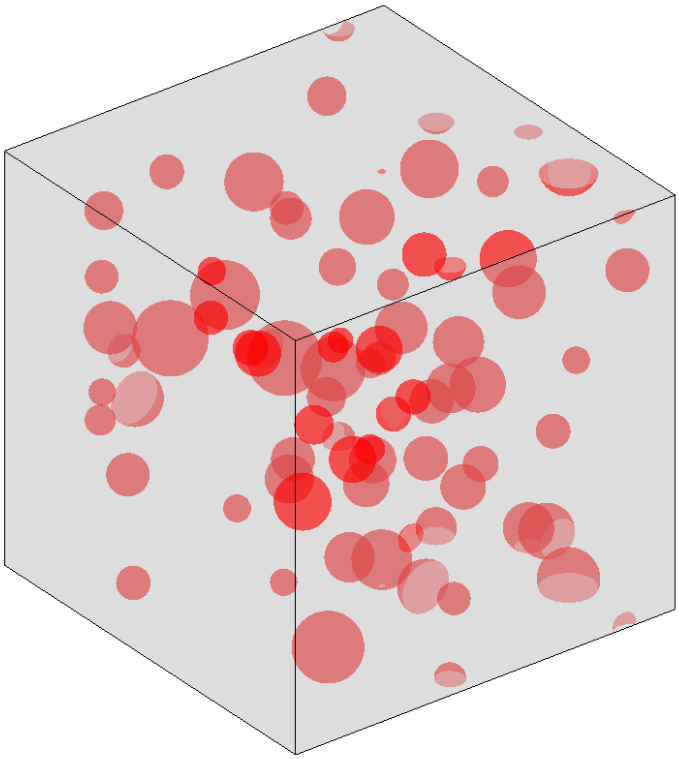
Slika 7.4. a) Raspodjela najmanje udaljenosti nodula za Inmould način lijevanja, b) raspodjela najmanje udaljenosti nodula za Tundish način lijevanja

Nakon što su napravljene raspodjele za svih osam mikrostruktura, odabrana je najtočnija raspodjela po kojoj je generirana mikrostruktura. Točnost raspodjele je definirana kroz opažanje koliko dobro opisuje histogram podataka. Za promjer čestica je odlučeno da ga najbolje opisuje Log-normalna raspodjela, dok međusobnu udaljenost čestica najbolje opisuje Weibullova raspodjela.

Nakon provedene analize prikazanih parametara generirane su mikrostrukture za pojedine načine lijevanja. Mikrostrukture RVE-a su generirane uz pomoć softverskog paketa *Matlab.* Generirane mikrostrukture su periodičnog karaktera što znači da će se cijeli promatrani kontinuum opisati generiranom mikrostrukturom.



Slika 7.5. Generirana mikrostruktura za Inmould način lijevanja



Slika 7.6. Generirana mikrostruktura za Tundish način lijevanja

8. NUMERIČKI PRORAČUN MIKROSTRUKTURE

8.1. Određivanje parametara linearno elastičnog ponašanja feritne matrice

Kako bi prema metodi opisanoj u poglavlju 5 izvršili analizu materijalnih parametara nodularnog lijeva, potrebno je prvo napraviti linearno elastičnu analizu referentnog materijala koji je diskretiziran uz pomoć RVE-a koji se periodično ponavljaju te su prikazani kao generirane mikrostrukture u prethodnom poglavlju. Cilj rada je definirati vrijednosti materijalnih parametara feritne matrice koja čini 96% ukupnog materijala. Za ostalih 4% smatramo da se sastoji od grafitnih nodula koje imaju vrijednost Youngovog modula elastičnosti $E_{\text{grafit}} = 25500$ MPa i Poissonovog faktora $\nu_{\text{grafit}} = 0.313$. Zanemaruje se utjecaj perlitnih struktura u sastavu materijala kao i u ponašanju samog materijala. Linearno-elastična analiza je bitna kako bi se definiralo referentno homogeno stanje materijala makrodeformacija te makronaprezanja.

Napravljene su ukupno 32 analize, po 16 za svaku tehnologiju lijevanja. Svaka simulacija je provedena koristeći različite kombinacije materijalnih parametara feritne matrice, dok su materijalni parametri grafitnih nodula pretpostavljeni kao konstanta. Kombinacije parametara pojedinih analiza su prikazani u Tablica 8.3 i Tablica 8.4. Svaka analiza je ispisala vrijednosti homogenih naprezanja i deformacija u smjeru osi *x, y* i *z* , kao i homogeniziranih kutnih deformacija i tangencijalnih naprezanja u smjeru svih osi. Dobiveni rezultati su povezani jednadžbama (67) i (69):

$$\mu = A \cdot \Big(\varepsilon_z(\sigma_x + \sigma_y - 2\sigma_z) + \varepsilon_y(\sigma_x - 2\sigma_y + \sigma_z) + \varepsilon_x(-2\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)\Big) + 3\big(\gamma_{xy}\tau_{xy} + \gamma_{xz}\tau_{xz} + \gamma_{yz}\tau_{yz}\big) \tag{67}$$

U prethodnoj jednadžbi μ označava modul smičnosti koji se u hrvatskoj literaturi često označava sa G. Oznaka A je uvedena kao supstitucija zbog lakšeg prikaza korištene jednadžbe te glasi:

$$A = \frac{-2}{3\gamma_{xy}^2 + 3\gamma_{xz}^2 + 3\gamma_{yz}^2 + 8\big(\varepsilon_z^2 - \varepsilon_z\varepsilon_x + \varepsilon_x^2 - (\varepsilon_z + \varepsilon_x)\varepsilon_y + \varepsilon_y^2\big)} \tag{68}$$

U prikazanim jednadžbama postoje članovi koji ne pridonose konačnoj vrijednosti parametra μ zbog svoje izrazito male vrijednosti koja je $\approx 1 \cdot 10^{-12}$. Članovi koji ne doprinose konačnoj vrijednosti su: $\varepsilon_y, \varepsilon_z, \gamma_{xy}, \gamma_{xz}, \gamma_{yz}$.

Također je uz pomoć vrijednosti postignutih analizom moguće izračunati modul kompresibilnosti (*bulk modulus)* koji predstavlja sposobnost tijela da se odupre volumenskim promjenama, jednadžbom prikazan kao:

$$\kappa = \frac{\sigma_{\mathrm{x}} + \sigma_{\mathrm{y}} + \sigma_{\mathrm{z}}}{3\left(\varepsilon_{\mathrm{z}} + \varepsilon_{\mathrm{x}} + \varepsilon_{\mathrm{y}}\right)} \tag{69}$$

S obzirom da su definirana dva neovisna parametra materijala μ i κ, zbog pretpostavke homogenog izotropnog linearno-elastičnog materijala moguće je izračunati Youngov modul elastičnosti *E* i Poissonovog faktora ν feritne matrice koristeći konverzijske formule Laméovih parametara [24]:

$$E = \frac{9\kappa\mu}{3\kappa + \mu}\ , \qquad \nu = \frac{3\kappa - 2\mu}{2(3\kappa + \mu)}. \tag{70}$$

Za početak je potrebno definirati potrebnu gustoću mreže. Definirane su tri mreže s različitim brojem konačnih elemenata naziva C3D8R. Odabrani konačni element je prizmatični element s osam čvorova te jednom točkom integracije. Osnovne jednadžbe ovog elementa su prikazani u potpoglavlju 3.2. Gustoće mreža su: mreža 1 - 125000, mreža 2 - 216000 te mreža 3 - 343000. Provedena je analiza s pretpostavljenim vrijednostima Youngovog modula elastičnosti te Poissonov faktora feritne matrice u iznosu $E_{mat} = 180000\mathrm{MPa}$ i $\nu_{\mathrm{mat}} = 0.2$. Tablica 8.1 prikazuje uprosječene vrijednosti Youngovog modula elastičnosti i Poissonovog faktora po svim smjerovima opterećenja za pojedinu gustoću mreže. Mreža jedan je uzeta kao referentna te se sve relativne postotne razlike računaju prema njoj.

Tablica 8.1. Prikaz relativne razlike parametara prilikom odabira gustoće mreže

		Youngov modul elastičnosti *E* [MPa]	Relativna razlika[%]	Poissonov faktor ν	Relativna razlika[%]
Inmould	**Mreža 1**	**187808.99**	**0**	**0.2318**	**0**
	Mreža 2	187017.84	0.421251726	0.2436	5.079009863
	Mreža 3	187099.38	0.377835641	0.2436	5.090733225
Tundish	**Mreža 1**	**186828.41**	**0**	**0.24347**	**0**
	Mreža 2	186918.44	0.048190347	0.24363	0.066493906
	Mreža 3	187009.63	0.097001802	0.243684	0.086527853

Vidljivo je da je najveće odstupanje Poissonovog faktora za Inmould način lijevanja te je shodno tome odabrana mreža 2 s 216000 konačnih elemenata. Nakon što je odabrana finoća mreže kojom će se diskretizirat referentni materijal, potrebno je potvrditi neovisnost analize o odabiru smjera opterećenja. Tablica 8.2 prikazuje usporedbu postignutih vrijednosti Youngovo modula elastičnosti po smjerovima za Inmould način lijevanja. Kao referentni smjer naprezanja je uzet smjer *x*.

Tablica 8.2. Prikaz odstupanja rezultata Youngovog modula elastičnosti [MPa] u odnosu na odabrani smjer

	Smjer *x*	Smjer y	Smjer z
Mreža 2	**168688.16**	168688.16	168688.16
Relativno odstupanje [%]	**0**	0	0

Analogno je za Tundish način lijevanja zaključeno da odstupanja neće postojati te je za provođenje daljnjih analiza korišten samo smjer *x*.

Nakon svih provedenih analiza u programskom paketu *Abaqus* prikazani su rezultati u tablicama:

Tablica 8.3. Ulazne vrijednosti i rezultati za Inmould način lijevanja

Ulazne vrijednosti		Rezultati analiza	
E_{mat}[MPa]	ν_{mat}	$\bar{E}$[MPa]	$\bar{\nu}$
180000	0.1	170744.2613	0.106612109
180000	0.2	170549.238	0.2021204
180000	0.3	170470.3173	0.297586539
180000	0.4	170514.8597	0.393194022
200000	0.1	189453.3778	0.107046035
200000	0.2	189160.1115	0.201921111
200000	0.3	189078.5999	0.297379976
200000	0.4	189135.4657	0.392958898
220000	0.1	207985.5041	0.10621104
220000	0.2	207759.8346	0.201747292
220000	0.3	207675.9683	0.297199701
220000	0.4	207745.5688	0.392754686
240000	0.1	226591.3387	0.106048342
240000	0.2	226350.4166	0.201594604
240000	0.3	226264.3567	0.297041202
240000	0.4	226346.9926	0.392575756

Tablica 8.4. Ulazne vrijednosti i rezultati za Tundish način lijevanja

Ulazne vrijednosti		Rezultati analiza	
E_{mat}[MPa]	ν_{mat}	$\bar{E}$[MPa]	$\bar{\nu}$
190000	0.1	180034.3633	0.106576261
190000	0.2	179827.5195	0.202082278
190000	0.3	179739.4526	0.297532161
190000	0.4	179772.951	0.393108011
210000	0.1	198646.646	0.106382816
210000	0.2	198423.6208	0.201900399
210000	0.3	198331.7185	0.297341007
210000	0.4	198375.0488	0.392888165
230000	0.1	217248.234	0.1062144
230000	0.2	217009.0525	0.2017411
230000	0.3	216913.4803	0.297173448
230000	0.4	216966.9591	0.392696227
250000	0.1	235840.9818	0.106066663
250000	0.2	235585.6351	0.20160064
250000	0.3	235486.4993	0.297025549
250000	0.4	235550.3551	0.392527278

Koristeći rezultate analiza te ulazne vrijednosti moguće je stvoriti sustav jednadžbi uz pomoć kojih izračunavamo vrijednosti materijalnih parametara matrice:

$$\bar{E} = a_0 + a_1 E_{\mathrm{mat}} + a_2 \nu_{\mathrm{mat}}, \tag{71}$$

$$\bar{\nu} = a_3 + a_4 E_{\mathrm{mat}} + a_5 \nu_{\mathrm{mat}}. \tag{72}$$

Sustav jednadžbi je riješen u programskom paketu *Matlab.* Vrijednosti koeficijenata su dani u Tablica 8.5.

Tablica 8.5. Koeficijenti sustava jednadžbi

	Inmould	Tundish
a_0	3.46735272500021	3.36052569000002
a_1	0.929535308125000	0.930203257250000
a_2	-0.922352625000174	-0.856285950000020
a_3	0.0127269396250000	0.0131069968625000
a_4	$-8.65369374999979 \cdot 10^{-6}$	$-1.01909987499997 \cdot 10^{-5}$
a_5	0.954921592750000	0.954630379750000

Prema literaturi [4] vrijednosti Youngovog modula elastičnosti i Poissonov faktor za Inmould način lijevanja iznosi $E_{\text{Inmould}} = 200$ GPa i $\nu_{\text{Inmould}} = 0.28$, dok za Tundish iznose $E_{\text{Tundish}} = 216$ GPa i $\nu_{\text{Tundish}} = 0.28$. Koristeći spomenute vrijednosti, te izračunate koeficijente moguće je odrediti vrijednosti Youngovog modula elastičnosti i Poissonovog faktora feritne matrice tako da se u jednadžbe (71) i (72) uvrste izračunate vrijednosti koeficijenata prikazanih u Tablica 8.5 te stvarne vrijednosti preuzete iz literature na način:

$$E_{\text{Inmould}} = a_0 + a_1 E_{\text{mat,opt}} + a_2 \nu_{\text{mat,opt}} \quad \textbf{(73)}$$

$$\nu_{\text{Inmould}} = a_3 + a_4 E_{\text{mat,opt}} + a_5 \nu_{\text{mat,opt}} \quad \textbf{(74)}$$

Analogno se izračunavaju optimanle vrijednosti i za Tundish način lijevanja. Optimalne vrijednosti feritne materice prikazane su u Tablica 8.6.

Tablica 8.6. Optimalne vrijednosti materijalnih parametara feritne matrice

	Inmould	Tundish
$E_{\text{mat,opt}}$[GPa]	211.654	228.924
$\nu_{\text{mat,opt}}$	0.281837	0.281965

Analiza je ponovo provedena s dobivenim materijalnim parametrima feritne matrice te su homogenizirani materijalni parametri, kao i usporedba s preuzetim vrijednostima materijalnih parametara nodularnog lijeva dani u tablici:

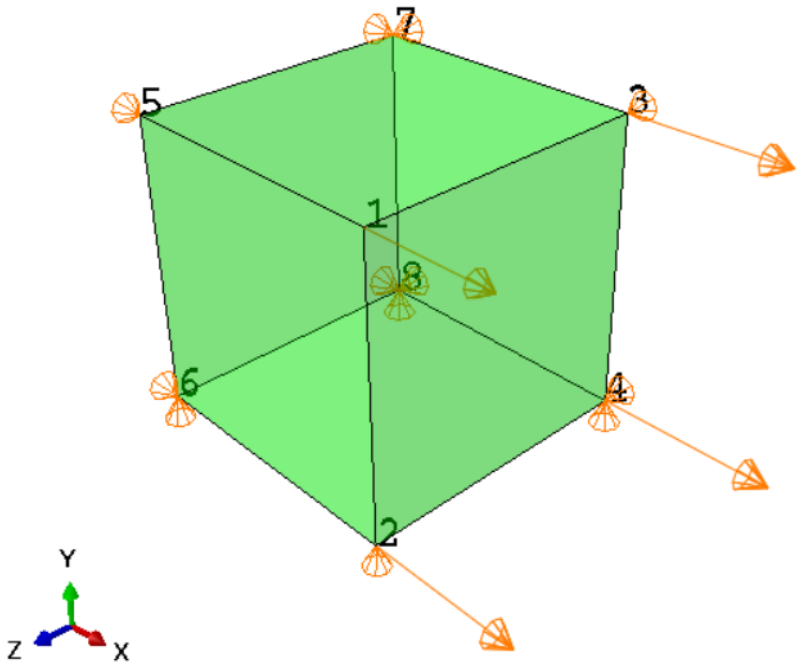
Tablica 8.7. Konačni rezultati linearno-elastične analize

	Youngov modul elastičnosti $\bar{E}$ [GPa]	Poissonov faktor $\bar{\nu}$
Inmould	199.92085	0.27993
	200	0.28
Razlika [%]	0.039573	0.024195
Tundish	215.97488	0.27991
	216	0.28
Razlika [%]	0.11629	0.031807

Lako se primijeti da su odstupanja od stvarnih vrijednosti izrazito mala, prema tome se može zaključiti da homogenizirani rezultati vjerno prikazuju ponašanje materijala u stvarnosti. Kao takva se može koristiti za daljnji proračun koji slijedi u sljedećem potpoglavlju.

8.2. Određivanje parametara elastoplastičnog ponašanja feritne matrice

U elastoplastičnoj analizi je odabran makroskopski model u obliku kocke koji sadržava jedan konačni element s reduciranom integracijom, odnosno integraciju u jednoj točki. Radi se o jednoosnom testu koji opterećuje sustav u smjeru osi *x*. Korišteni model s rubnim uvjetima i opterećenjem je prikazan na Slika 8.1. Kasnije će biti dokazano da rezultati analize ne ovise o odabiru osi zbog pretpostavljene izotropije materijala.



Slika 8.1. Makromodel s prikazanim opterećenjem i rubnim uvjetima te brojem čvorova

Rubni uvjeti modela su raspisani prema čvorovima te glase:

$$\text{Čvor } 1 : \text{slobodni čvor}, \tag{75}$$

$$\text{Čvor } 2 : y = 0, \tag{76}$$

$$\text{Čvor } 3: z = 0, \tag{77}$$

$$\text{Čvor } 4: y = 0, z = 0, \tag{78}$$

$$\text{Čvor } 5: x = 0, \tag{79}$$

$$\text{Čvor } 6: y = 0, x = 0, \tag{80}$$

$$\text{Čvor } 7: x = 0, z = 0, \tag{81}$$

$$\text{Čvor } 8: x = 0, y = 0, z = 0. \tag{82}$$

Programski kod elastoplastične analize metodom homogenizacije s reduciranim brojem stupnjeva slobode napisan je uz pomoć programskog jezika Fortran. Rutina definira elastoplastično ponašanje materijala te obavlja proces *k-means* klasteriranja uz pomoć strojnog učenja. Kako bi se koristile Fortran rutine s osnovnom verzijom *Abaqus*-a potrebno je instalirati dodano okruženje kroz programski paket Visual Studio te solver Intel Parallel. Svi parametri analiza su definirani u *input file*-ovima te se pokreću iz pomoć funkcije *Abaqus Command*. Prilikom pokretanja je potrebno postaviti se u zadani direktorij koji sadržava Fortran rutinu te *input file* analize. Funkcija koju je potrebno napisati u *command* prostor uz pomoć koje se pokreće *Abaqus* rutina glasi:

abaqus job="input_file.inp" user="fortran_rutina.for" int

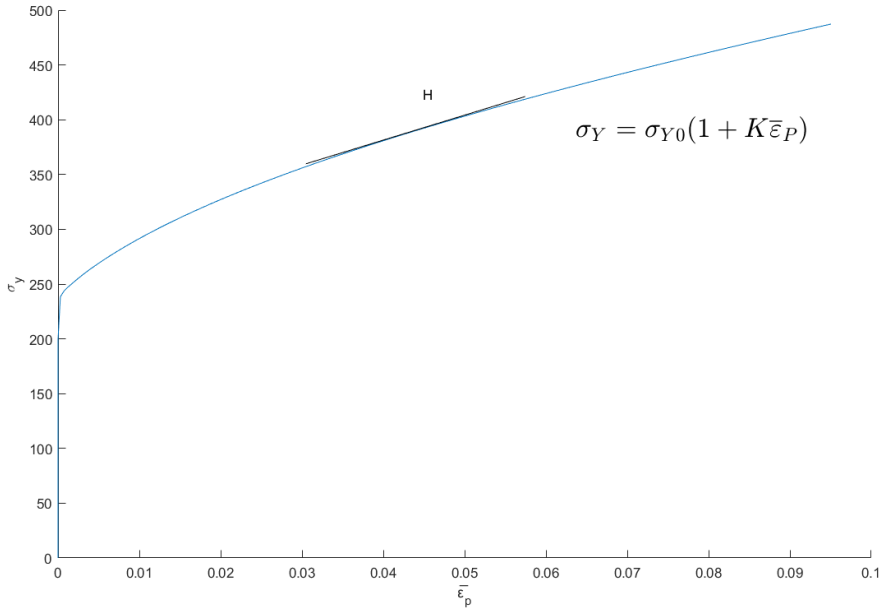
Očvršćenje je modelirano prema Swiftovom zakonu očvršćenja koji za problem koji se obrađuje glasi:

$$\sigma_{\mathrm{y}} = \sigma_{\mathrm{Y0}}\left(1 + K \cdot \bar{\varepsilon_p}\right)^{\mathrm{n}}. \tag{83}$$

σ_{y} označava granicu tečenja u točki koja ima ekvivalentnu plastičnu deformaciju $\bar{\varepsilon_p}$. σ_{Y0} prikazuje inicijalnu granicu tečenja materijala za koju se javlja plastična deformacija od 0.2%. Zakon je modificiran tako da prikazuje ponašanje materijala isključivo u plastičnom području te se sve informacije o elastičnom ponašanju materijala preuzimaju iz linearno elastične analize. Slika 8.2. prikazuje primjer dijagrama aproksimiranih podataka prema prikazanom zakonu za parametre $\sigma_{\mathrm{Y0}} = 243{,}1316\ \mathrm{MPa}, K = 68{,}79980, \mathrm{n} = 0{,}35219$.

Nulta vrijednost parametra plastične deformacije $\bar{\varepsilon_p}$ je definiran kao 0.2% plastične deformacije. Na grafu varijabla *H* prikazuje tangentni modul prikazan jednadžbom:

$$H = \frac{\mathrm{d}\sigma_y}{\mathrm{d}\varepsilon_\mathrm{p}}. \tag{84}$$



Slika 8.2. Zakon očvršćenja prema modificiranom Swiftovom zakonu

Nakon definiranja modela te korištenog zakona očvršćivanja, potrebno je definirati željen broj klastera za diskretizaciju mikrostrukture. Provedena je analiza s 16, 32 i 64 klastera za Tundish način lijevanja. Kao referentni su pretpostavljeni podatci postignuti analizom sa 16 klastera. Rezultati su prikazani u Tablica 8.8.

Tablica 8.8. Utjecaj broja klastera na parametre Swiftovog zakona

	σ_{Y0}[MPa]	K	n
16 klastera	**243,35058**	**66,83814**	**0,36153**
32 klastera	243,22059	68,09383	0,35644
Razlika[%]	0,05341	1,87869	1,4083
64 klastera	243,13162	68,79980	0,35219
Razlika[%]	0,03658	1,03675	1,19322

Na temelju rezultata u tablici, vidljivo je da će se najveća točnost postići diskretizicijom sa 64 klastera. Uz to, provedena je analiza sa 64 klastera u svim smjerovima kako bi se utvrdilo moguće odstupanje rezultata po osima. Najveće odstupanje se ostvarilo između osi *x* i *z* za parametar inicijalne granice tečenja σ_{Y0}, no odstupanje od 1.76% bitno ne mijenja konačne parametre analize, dok bi provođenje analize prema svim osima bilo vremenski 3 puta zahtjevnije.

Tablica 8.9. Usporedba rezultata po osima

	σ_{Y0}[MPa]	K	n
X	**243.2206**	**68.09383**	**0.356445**
Y	240.8682	67.99302	0.351746
Razlika[%]	0.967176	0.148055	1.31841
Z	238.9384	67.61153	0.352179
Razlika[%]	1.760622	0.708289	1.196927

Za dobivanje parametara Swiftovog zakona, napravljeno je ukupno 128 analiza, 64 po tehnici lijevanja nodularnog lijeva. Kako bi uspješno definirale optimalne materijalnih parametara matrice variraju se tri parametra: σ_{y0} naprezanje koje se javlja pri plastičnoj deformaciji od 0.2% te parametri *K* i *n*. Numeričke simulacije su provedene uz pomoć programskog paketa *Abaqus.* Uz pomoć dijagrama promjene naprezanja u odnosu na plastičnu deformaciju koji su dobiveni iz numeričkih analiza napravljena je aproksimacija podataka prema Swiftovom zakonu očvršćenja prikazanim jednadžbom (83).

Koristeći izračunate parametre te Pascalov tetraedar formirani su potpuni polinomi drugog i trećeg stupnja. Uz pomoć polinoma moguće je izračunati optimalnu inicijalnu granicu tečenja $\sigma_{\mathrm{Y0,opt}}$ te optimalne parametre koji opisuju Swiftov zakon K_{opt} i n_{opt}. U polinom drugog stupnja prikazan jednadžbama (85), (86) i (87) uvrštavaju se homogenizirna rješenja materijalnih parametara te pretpostavljene vrijednosti parametara za matricu prikazani prilozima III i IV. Na taj način je moguće izračunati koeficijente $a_{1\ldots30}$. Koristeći izračunate koeficijente $a_{1\ldots30}$ te stvarne vrijednosti parametara Swiftovog zakona prikazanih u potpoglavlju 1.1.3. u jednadžbama (85), (86) i (87) moguće je dobiti vrijednosti parametara Swiftovog zakona za feritnu matricu uz pomoć kojih je moguće točno opisati makroskopsko ponašanje nodularnog lijeva u stvarnosti. Sljedeća jednadžba prikazuje razvijen polinom drugog stupnja za svaki parametar:

$$\bar{\sigma}_{\mathrm{Y0}} = a_0 + a_1\sigma_{\mathrm{Y0}} + a_3 K + a_4 n + a_5\sigma_{\mathrm{Y0}} K + a_6\sigma_{\mathrm{Y0}} n + a_7 Kn + a_8\sigma_{\mathrm{Y0}}^2 + a_9 K^2 + a_{10} n^2, \quad \textbf{(85)}$$

$$\bar{K} = a_{11} + a_{12}\sigma_{\mathrm{Y0}} + a_{13} K + a_{14} n + a_{15}\sigma_{\mathrm{Y0}} K + a_{16}\sigma_{\mathrm{Y0}} n + a_{17} Kn + a_{18}\sigma_{\mathrm{Y0}}^2 + a_{19} K^2 + a_{20} n^2, \quad \textbf{(86)}$$

$$\bar{n} = a_{21} + a_{22}\sigma_{\mathrm{Y0}} + a_{23} K + a_{24} n + a_{25}\sigma_{\mathrm{Y0}} K + a_{26}\sigma_{\mathrm{Y0}} n + a_{27} Kn + a_{28}\sigma_{\mathrm{Y0}}^2 + a_{29} K^2 + a_{30} n^2. \quad \textbf{(87)}$$

Analogno prikazu polinoma drugog stupnja za sve parametre raspisuju se polinomi trećeg, stupnja. U Tablica 8.10. su prikazane vrijednosti materijalnih parametara matrice te je vidljivo da je konvergencija rješenja postignuta.

Tablica 8.10. Homogenizirane vrijednosti parametara matrice

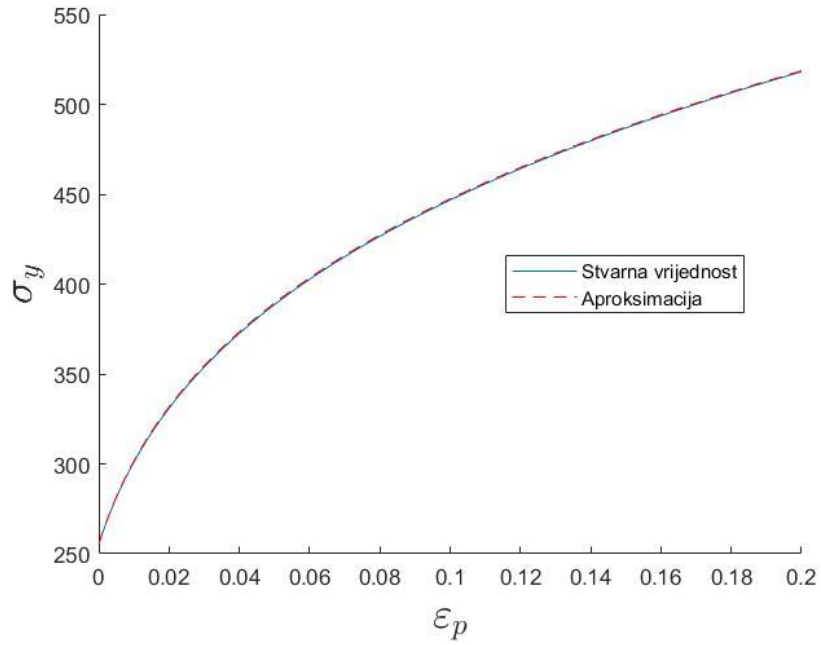
	Inmould			Tundish		
	$\sigma_{\mathrm{Y0,opt}}$[MPa]	K_{opt}	n_{opt}	$\sigma_{\mathrm{Y0,opt}}$[MPa]	K_{opt}	n_{opt}
Polinom drugog stupnja	249.761	118.648	0.21896	246.688	117.989	0.207407
Polinom trećeg stupnja	249.816	118.005	0.21964	246.667	117.9409	0.207968

Koristeći dijagram naprezanje-istezanje pojedinog načina lijevanja nodularnog lijeva iz [4] aproksimirani su podatci prema Swiftovom zakonu očvršćenja te su prikazani i uspoređeni s rezultatima postignutim korištenjem homogeniziranih parametara matrice.

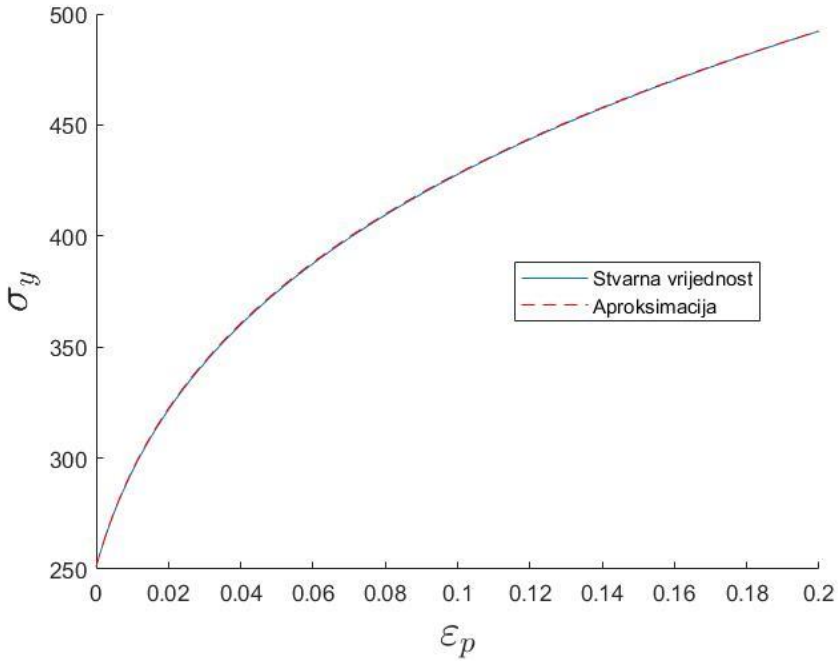
Tablica 8.11. Usporedba stvarnih vrijednosti s rezultatima numeričkih simulacija

	Inmould			Tundish		
	$\bar{\sigma}_{\mathrm{Y0}}$[MPa]	$\bar{K}$	$\bar{n}$	$\bar{\sigma}_{\mathrm{Y0}}$[MPa]	$\bar{K}$	$\bar{n}$
Stvarne vrijednosti	255.135	106.254	0.2283	251.0810	107.4630	0.2162
Homogenizirani rezultati	255.181	108.723	0.22698	251.169	109.623	0.2149
Razlika [%]	0.01803	2.323677	0.578187	0.035048	2.009994	0.601295

Dijagrami usporedbe stvarnih vrijednosti i aproksimiranog rješenja prikazani su Slika 8.3 i Slika 8.4.

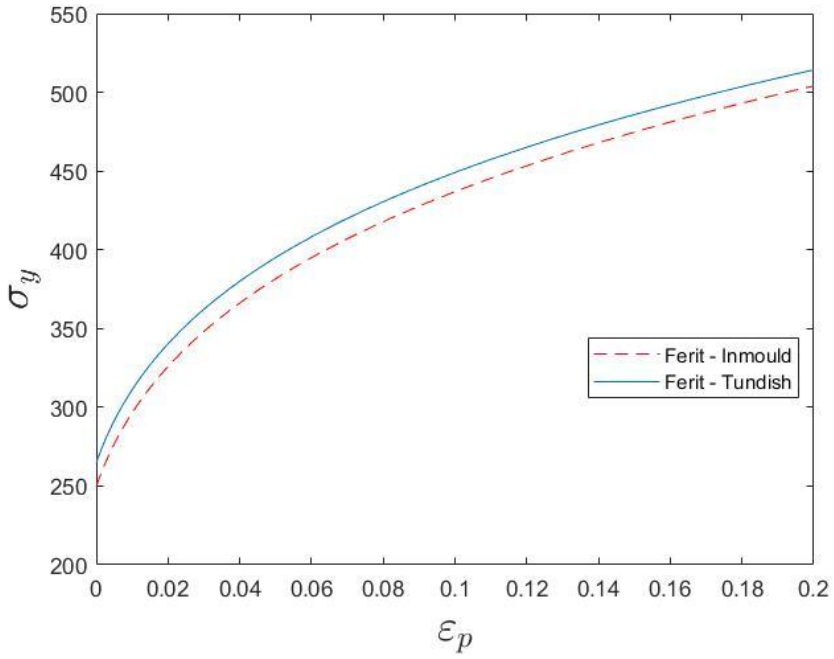


Slika 8.3. Dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za Inmould način lijevanja



Slika 8.4. Dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za Tundish način lijevanja

Vidi se da je postignuto jako dobro poklapanje između stvarnih vrijednosti i aproksimativnog rješenja. Također je prikazan dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za feritnu matricu na Slika 8.5.



Slika 8.5. Dijagram ovisnosti granice tečenja o ekvivalentnoj plastičnoj deformaciji za feritnu matricu

9. ZAKLJUČAK

Modeliranje utjecaja mikrostrukture materijala na makroskopsko ponašanje materijala je ideja koja postoji već duži niz godina. Napretkom računalne moći dolazi do povećanja broja istraživanja koja se bave opisivanjem konstitutivnog ponašanja heterogenih materijala. Stoga danas postoje mnoge metode koje su u mogućnosti simultano promatrati promjene na mikroskopskoj i makroskopskoj razini. Takve metode nerijetko zahtijevaju veliki broj numeričkih operacija što u konačnici dovodi do dugog vremena izvođenja analiza. Metoda homogenizacije s reduciranim brojem stupnjeva slobode pronalazi ravnotežu između točnosti rješenja te vremena računanja.

U ovom radu je korištena spomenuta metoda prilikom proračuna materijalnih parametara feritne matrice nodularnog lijeva u ljevačkoj izvedbi Tundish i Inmould. Iz rezultata homogenizacije za elastično i elastoplastično ponašanje materijala zaključeno je da metoda ostvaruje zadovoljavajuću inženjersku točnost prilikom proračuna, dok pri tom ostvaruje vrijeme računanja prihvatljivo za opsežniju primjenu. Korištena metoda se zasniva na ideji podjele na *offline* i *online* korak. U prvom koraku se odvija linearno elastična analiza klasičnom višerazinskom metodom konačnih elemenata te se uz pomoć *k-means* klastering algoritma pronalaze i grupiraju konačni elementi koji prikazuju slična svojstva. Bitno je za naglasiti da konačni elementi koji prikazuju slična svojstva ne moraju biti u neposrednoj blizini jedan drugog. U *online* koraku se inkrementalno rješava uprosječena Lippmann-Schwingerova jednadžba za pojedini klaster. Prednost metode se zasniva na činjenici da zamjenjuje veliki broj klasičnih konačnih elemenata s razmjerno malim brojem klastera. Kako bi se provela opisana metoda, potrebno je napraviti geometrijsku analizu raspodjele mikrokonstituenata stvarne mikrostrukture. Odabrana je najtočnija raspodjela prema kojoj je generirana mikrostruktura za oba načina lijevanja. Potom je generirana geometrija mikrostrukture unesena u programski paket *Abaqus* u kojem su provedene analize s elastičnim i elastoplastičnim ponašanjem materijala. Pomoću numeričkih simulacija provedenih na mikrostrukturi nodularnog lijeva, definirani su koeficijenti potpunih polinoma drugog i trećeg stupnja prema Pascalovom tetraedru, koji opisuju ovisnost parametara elastoplastičnog ponašanja feritne matrice o homogeniziniranim vrijednostima naprezanja i deformacija. Točnost dobivenih rješenja je potvrđena usporedbom dijagrama granica tečenja–plastična deformacija dobivenog aproksimativnom metodoma sa stvarnim dijagramom nodularnog lijeva za obje verzije lijevanja.

LITERATURA

[1.] Mackay S. MATERIALS: ENGINEERING, SCIENCE, PROCESSING AND DESIGN. Proceedings of the Institution of Civil Engineers - Construction Materials [Internet]. 2011 kol;164(4):215–215. Available from: https://www.icevirtuallibrary.com/doi/10.1680/coma.1000013

[2.] Jurčević A. Mikromehaničko modeliranje vlačnog testa nodularnog lijeva. 2022.

[3.] Ductile iron - Wikipedia [Internet]. [citirano 2023 sij 2]. Available from: https://en.wikipedia.org/wiki/Ductile_iron#cite_note-airuni-4

[4.] Čanžar P. Experimental and numerical modelling of fatigue behaviour of nodular cast iron. 2012.

[5.] WebPlotDigitizer - Extract data from plots, images, and maps [Internet]. [citirano 2023 sij 14]. Available from: https://automeris.io/WebPlotDigitizer/

[6.] Multiscale Modeling - Khalifa University [Internet]. [citirano 2023 sij 3]. Available from: https://www.ku.ac.ae/facilities/multiscale-modeling

[7.] Lesičar T, Sorić J, Tonković Z. Numerical Analysis of Heterogeneous Engineering Materials.

[8.] Guedes J, Kikuchi N. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. Comput Methods Appl Mech Eng [Internet]. 1990 lis;83(2):143–98. Available from: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/004578259090148F

[9.] Geers MGD, Kouznetsova VG, Massart TJ, Özdemir I. Computational homogenization of structures and materials. 2009;(May):17–28.

[10.] Lesičar T, Tonković Z. Multiscale Modeling of Heterogeneous Materials Using Second-Order Homogenization. Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture. 2015;183.

[11.] Luscher DJ, McDowell DL, Bronkhorst CA. A second gradient theoretical framework for hierarchical multiscale modeling of materials. Int J Plast [Internet]. 2010;26(8):1248–75. Available from: http://dx.doi.org/10.1016/j.ijplas.2010.05.006

[12.] Sorić J. Metoda konačnih elemenata - linearna i nelinearna analiza konstrukcija. GOLDEN MARKETING - TEHNIČKA KNJIGA; 2021. 644 str.

[13.] C3D8R and F3D8R [Internet]. [citirano 2023 sij 15]. Available from: https://web.mit.edu/calculix_v2.7/CalculiX/ccx_2.7/doc/ccx/node27.html

[14.] Jurčević A, Lesičar T, Tonković Z, Sorić J. Homogenizacija s reduciranim brojem stupnjeva slobode. 2020;2–7.

[15.] Liu Z, Bessa MA, Liu WK. Self-consistent clustering analysis: An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials. Comput Methods Appl Mech Eng [Internet]. 2016;306:319–41. Available from: http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2016.04.004

[16.] Begić A. Modeliranje konstitutivnog ponašanja sinteriranog čelika pri monotonom i cikličkom opterećenju. 2022.

[17.] Pavlović B. Numeričko modeliranje procesa deformiranja heterogenoga sinteriranoga materijala na mikrostrukturnoj razini. 2022.

[18.] Sorić J. Nelinearna numerička analiza konstrukcija, predavanja.

[19.] Chen WF, Han DJ. Plasticity for Structural Engineers [Internet]. Sv. 14, Journal of Constructional Steel Research. New York, NY: Springer New York; 1988. 243–244 str. Available from: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0143974X89900758

[20.] Simo JC, Hughes TJR. Computational Inelasticity [Internet]. Computers & Mathematics with Applications. New York: Springer-Verlag; 1998. 134 str.

(Interdisciplinary Applied Mathematics; sv. 7). Available from: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0898122199902778

[21.] Weibull Distribution - MATLAB & Simulink [Internet]. [citirano 2023 sij 8]. Available from: https://www.mathworks.com/help/stats/weibull-distribution.html#mw_e9866498-0076-4734-a73e-c1f8d7186d44

[22.] Lognormal Distribution - MATLAB & Simulink [Internet]. [citirano 2023 sij 9]. Available from: https://www.mathworks.com/help/stats/lognormal-distribution.html

[23.] Gamma Distribution - MATLAB & Simulink [Internet]. [citirano 2023 sij 9]. Available from: https://www.mathworks.com/help/stats/gamma-distribution.html

[24.] Lamé parameters - Wikipedia [Internet]. [citirano 2023 sij 9]. Available from: https://en.wikipedia.org/wiki/Lam%C3%A9_parameters

PRILOZI

I. Tablica korištenih parametara prilikom analize te homogenih rješenja za Inmould način lijevanja

II. Tablica korištenih parametara prilikom analize te homogenih rješenja za Tundish način lijevanja

Prilog I: Parametri elastoplastične analize i homogenizirane vrijednosti feritne matrice za Inmould način lijevanja

Vrijednosti matrice			Homogenizirane vrijednosti		
σ_{Y0}[MPa]	K	n	$\bar{\sigma}_{Y0}$[MPa]	$\bar{K}$	$\bar{n}$
240	80	0.1	238.7161	19.08076	0.424576
240	80	0.24	244.2931	37.46688	0.438985
240	80	0.38	249.8669	48.12261	0.52793
240	80	0.52	255.4314	54.01763	0.638495
240	100	0.1	239.6145	22.57114	0.39328
240	100	0.24	246.4526	45.06096	0.41897
240	100	0.38	253.2849	57.89952	0.512796
240	100	0.52	260.1023	64.8513	0.626992
240	120	0.1	240.4807	25.75294	0.371478
240	120	0.24	248.5348	52.11912	0.404971
240	120	0.38	256.5811	66.99684	0.502296
240	120	0.52	264.6042	74.93257	0.619138
240	140	0.1	241.3167	28.67911	0.35525
240	140	0.24	250.5457	58.69719	0.394577
240	140	0.38	259.7647	75.49051	0.494567
240	140	0.52	268.9498	84.35938	0.613426
254	80	0.1	252.3608	19.70097	0.405887
254	80	0.24	258.085	38.23423	0.42944
254	80	0.38	263.7935	48.69829	0.522078
254	80	0.52	269.4813	54.40196	0.634963
254	100	0.1	253.2867	23.36469	0.376243
254	100	0.24	260.3048	46.03514	0.41044
254	100	0.38	267.2989	58.64083	0.507684
254	100	0.52	274.2607	65.37057	0.624011
254	120	0.1	254.1794	26.71698	0.355567
254	120	0.24	262.4444	53.28929	0.397202
254	120	0.38	270.6782	67.89916	0.497746
254	120	0.52	278.8642	75.59301	0.616555
254	140	0.1	255.0415	29.80501	0.340204
254	140	0.24	264.5116	60.0656	0.387352
254	140	0.38	273.9411	76.56644	0.490395
254	140	0.52	283.3048	85.17463	0.611112
268	80	0.1	265.985	20.33809	0.388866
268	80	0.24	271.8356	38.98062	0.420821
268	80	0.38	277.6567	49.26076	0.516774
268	80	0.52	283.4489	54.7818	0.631775
268	100	0.1	266.9341	24.17288	0.360777
268	100	0.24	274.1076	46.9757	0.402797
268	100	0.38	281.2379	59.3595	0.503097
268	100	0.52	288.3208	66.24465	0.619923
268	120	0.1	267.8505	27.69217	0.341197

268	120	0.24	276.2957	54.4364	0.390191
268	120	0.38	284.6895	68.8793	0.493351
268	120	0.52	293.0102	77.0938	0.611533
268	140	0.1	268.7359	30.94097	0.326657
268	140	0.24	278.4131	61.40945	0.380829
268	140	0.38	288.0214	78.05847	0.485527
268	140	0.52	297.5305	87.41206	0.605177
282	80	0.1	279.585	20.98874	0.373345
282	80	0.24	285.5455	39.80978	0.412507
282	80	0.38	291.4652	50.27746	0.509789
282	80	0.52	297.3414	56.03604	0.624553
282	100	0.1	280.5559	24.9957	0.346719
282	100	0.24	287.8616	48.16675	0.394841
282	100	0.38	295.1099	60.89949	0.495977
282	100	0.52	302.2894	67.84652	0.613373
282	120	0.1	281.4937	28.68128	0.32817
282	120	0.24	290.0976	56.01587	0.382443
282	120	0.38	298.622	70.9489	0.486175
282	120	0.52	307.047	79.05381	0.605434
282	140	0.1	282.3999	32.09155	0.314395
282	140	0.24	292.2581	63.42191	0.373151
282	140	0.38	302.0118	80.48752	0.478786
282	140	0.52	311.6317	89.73683	0.599409

Prilog II: Parametri elastoplastične analize i homogenizirane vrijednosti feritne matrice za Tundish način lijevanja

Vrijednosti matrice			Homogenizirane vrijednosti		
σ_{Y0}[MPa]	K	n	$\bar{\sigma}_{Y0}$[MPa]	$\bar{K}$	$\bar{n}$
240	80	0.1	237.4154	20.36267	0.414726
240	80	0.24	242.0524	40.28707	0.42964
240	80	0.38	246.676	52.08887	0.516063
240	80	0.52	256.1475	53.59269	0.640026
240	100	0.1	238.1759	24.16844	0.384359
240	100	0.24	243.8743	48.77478	0.409971
240	100	0.38	249.5524	63.19075	0.501023
240	100	0.52	261.0147	64.27879	0.628254
240	120	0.1	238.9125	27.69177	0.362959
240	120	0.24	245.6388	56.78916	0.396105
240	120	0.38	257.3195	66.19886	0.504236
240	120	0.52	265.71	74.19959	0.620212
240	140	0.1	239.6267	30.965	0.346966
240	140	0.24	247.3498	64.38841	0.385669
240	140	0.38	260.6292	74.53462	0.496307
240	140	0.52	270.2459	83.45856	0.614345
254	80	0.1	251.0195	21.37914	0.392736
254	80	0.24	258.3796	37.68528	0.433314
254	80	0.38	264.34	48.18544	0.524486
254	80	0.52	270.2959	53.95186	0.636444
254	100	0.1	253.3784	22.84295	0.383383
254	100	0.24	260.6857	45.33164	0.41389
254	100	0.38	267.9946	57.96848	0.509774
254	100	0.52	275.2938	64.76485	0.62522
254	120	0.1	254.3027	26.09897	0.362133
254	120	0.24	262.9098	52.43985	0.400295
254	120	0.38	271.519	67.06418	0.499583
254	120	0.52	280.1122	74.82065	0.617559
254	140	0.1	255.1946	29.09122	0.346362
254	140	0.24	265.0574	59.06452	0.390195
254	140	0.38	274.9231	75.55806	0.492051
254	140	0.52	284.7644	84.21928	0.61198
268	80	0.1	266.0651	19.89051	0.396478
268	80	0.24	272.1789	38.40614	0.424559
268	80	0.38	278.283	48.72109	0.519115
268	80	0.52	284.3701	54.30945	0.633191
268	100	0.1	267.0527	23.61891	0.367583
268	100	0.24	274.5484	46.25567	0.406024
268	100	0.38	282.0293	58.65712	0.505092
268	100	0.52	289.483	65.24646	0.62248
268	120	0.1	268.0038	27.03419	0.347453

268	120	0.24	276.8336	53.54749	0.393129
268	120	0.38	285.6413	67.90802	0.495382
268	120	0.52	294.4091	75.43536	0.615171
268	140	0.1	268.9227	30.17915	0.332522
268	140	0.24	279.0403	60.35217	0.383551
268	140	0.38	289.1293	76.55754	0.488214
268	140	0.52	299.1625	84.97433	0.609851
282	80	0.1	279.6911	20.5083	0.38069
282	80	0.24	285.9419	39.11566	0.416562
282	80	0.38	292.1707	49.23899	0.514248
282	80	0.52	298.3671	54.6623	0.630246
282	100	0.1	280.7039	24.40219	0.353265
282	100	0.24	288.3674	47.14559	0.398944
282	100	0.38	295.9939	59.33044	0.50084
282	100	0.52	303.5802	65.72349	0.619999
282	120	0.1	281.6808	27.97463	0.334186
282	120	0.24	290.7069	54.61923	0.386673
282	120	0.38	299.6835	68.73239	0.491577
282	120	0.52	308.6003	76.26322	0.61231
282	140	0.1	282.6243	31.26921	0.320053
282	140	0.24	292.9626	61.61643	0.377527
282	140	0.38	303.2456	77.54721	0.484704
282	140	0.52	313.4408	86.42748	0.606011