

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA STAVEBNÍ
KATEDRA MECHANIKY



DIPLOMOVÁ PRÁCE

Modelování fragmentace materiálů za vysokých
rychlostí deformace

Autor: Bc. Jan Stránský

Vedoucí práce: prof. Ing. Milan Jirásek, DrSc.

Praha, 2010

Název práce: Modelování fragmentace materiálů za vysokých rychlostí deformace

Autor: Bc. Jan Stránský

Katedra (ústav): Katedra mechaniky

Vedoucí diplomové práce: prof. Ing. Milan Jirásek, DrSc.

e-mail vedoucího: Milan.Jirasek@fsv.cvut.cz

Abstrakt Dynamická fragmentace (rozpad spojitého tělesa na menší části v důsledku dynamického zatížení) je fyzikální jev, se kterým se můžeme setkat v mnoha oblastech vědy a techniky. Vznik a rozvoj trhlin v materiálu je při dynamickém chování příčinou odtěžujících pružných vln, jejichž důsledkem může být zavírání jen zčásti rozevřených trhlin, případně opětovné rozevírání již zavřených trhlin. Navíc oba tyto jevy mohou produkovat další nové pružné vlny a celá situace se tak stává značně netriviální a obtížně popsatelná analytickými metodami

Tato práce se zabývá popisem dynamické fragmentace kruhového prstence (případně válcové skořepiny) za vysokých rychlostí deformace (způsobených například explozí uvnitř válcové skořepiny). Je ukázáno několik analytických modelů pro odhad průměrné velikosti fragmentů v závislosti na rychlosti zatěžování a porovnání s numerickými výsledky z dostupné literatury (získanými převážně za pomoci kohezivních prvků).

V rámci práce byl vytvořen konečně prvkový program *Fragment1d*, efektivní numerický nástroj pro řešení dané úlohy založený na mechanice poškození. Kromě samotného popisu a porovnání s jinými dostupnými programy jsou samozřejmě ukázány a diskutovány dosažené numerické výsledky (průměrná velikost fragmentů, rozdělení jejich velikosti a celková disipovaná energie) v závislosti na konečně prvkové diskretizaci (velikosti prvků) a způsobu perturbace materiálových vlastností (prostorově nekorelované vs. korelované parametry).

Porovnání našich výsledků s odbornou literaturou ukazuje v některých ohledech (např. konvergence disipované energie v závislosti na počtu použitých konečných prvků) na výrazně lepší chování naší metody.

Klíčová slova: dynamická fragmentace, metoda konečných prvků, závislost na velikosti prvku, průměrná velikost fragmentů, rozdělení velikosti fragmentů, konvergence disipované energie, prostorová korelace.

Title: Modeling of Material Fragmentation at High Strain Rates

Author: Bc. Jan Stránský

Department: Department of Mechanics

Supervisor: prof. Ing. Milan Jirásek, DrSc.

Supervisor's e-mail address: Milan.Jirasek@fsv.cvut.cz

Abstract Dynamic fragmentation (disintegration of a continuous body into smaller pieces under dynamic loading) is a physical phenomenon observed in many fields of engineering and science. In the dynamic case, crack initiation and propagation causes stress release elastic waves, whose consequence could be closure of partially opened cracks or reopening of already closed cracks. Both these effects can produce additional release waves and the situation becomes considerably nontrivial and difficult to describe properly without numerical analysis.

This thesis deals with the analysis of dynamic fragmentation of an expanding ring (or cylindrical shell) subjected to radial loading at a high strain rate (caused for example by explosion inside the cylindrical shell). Some simple analytical models for prediction of average fragment size as a function of strain rate are shown and compared to numerical results from literature (computed mainly by the cohesive element method).

As a part of the thesis, an efficient finite element tool *FragmentId* based on continuum damage mechanics was developed. Besides its description and comparison with other available programs, the obtained numerical results (average fragment size, fragment size distribution and total dissipated energy) are of course presented and discussed, with particular attention paid to their dependence on the finite element discretization (mesh size) and on the form of material properties perturbation (spatially correlated vs. uncorrelated parameters).

The comparison of our results with specialized literature shows considerably better behavior of our method in certain aspects (convergence of total dissipated energy with the number of used elements).

Keywords: dynamic fragmentation, finite element method, mesh size dependency, average fragment size, fragment size distribution, convergence of dissipated energy, spatial correlation.



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta stavební
Thákurova 7, 166 29 Praha 6

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

studijní program: Stavební inženýrství
studijní obor: Konstrukce a dopravní stavby
akademický rok: 2010/2011

Jméno a příjmení diplomanta: Bc. Jan Stránský
Zadávající katedra: K132 - Katedra mechaniky
Vedoucí diplomové práce: Prof. Ing. Milan Jirásek, DrSc.
Název diplomové práce: Modelování fragmentace materiálů za vysokých rychlostí deformace
Název diplomové práce
v anglickém jazyce: Modeling of Material Fragmentation at High Strain Rates

Rámcový obsah diplomové práce: Porovnání modelů pro fragmentaci založených na spojitém a diskrétním popisu, vývoj efektivního numerického algoritmu, zkoumání vlivu náhodného rozložení materiálových vlastností, studium konvergence při zjemňování prostorové diskretizace.

Datum zadání diplomové práce: 6.10.2010 Termín odevzdání: 20.12.2010
(vyplnit poslední den výuky příslušného semestru)

Diplomovou práci lze zapsat, kromě oboru A, v letním i zimním semestru.

Pokud student neodevzdal diplomovou práci v určeném termínu, tuto skutečnost předem písemně zdůvodnil a omluva byla děkanem uznána, stanoví děkan studentovi náhradní termín odevzdání diplomové práce. Pokud se však student řádně neomluvil nebo omluva nebyla děkanem uznána, může si student zapsat diplomovou práci podruhé. Studentovi, který při opakovaném zápisu diplomovou práci neodevzdal v určeném termínu a tuto skutečnost řádně neomluvil nebo omluva nebyla děkanem uznána, se ukončuje studium podle § 56 zákona o VŠ č.111/1998 (SZŘ ČVUT čl 21, odst. 4).

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.

.....
vedoucí diplomové práce

.....
vedoucí katedry

Zadání diplomové práce převzal dne: 6.10.2010

.....
diplomant

Formulář nutno vyhotovit ve 3 výtiscích – 1x katedra, 1x diplomant, 1x studijní odd. (zašle katedra)

Nejpozději do konce 2. týdne výuky v semestru odešle katedra 1 kopii zadání DP na studijní oddělení a provede zápis údajů týkajících se DP do databáze KOS.
(Směrnice děkana pro realizaci stud. programů a SZZ na FSv ČVUT čl. 5, odst. 7)

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci napsal samostatně, pouze za odborného vedení vedoucího práce prof. Ing. Milana Jiráska, DrSc. Dále prohlašuji, že veškeré podklady, ze kterých jsem čerpal, jsou uvedeny v seznamu literatury.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu §60 Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne 20. prosince 2010

Jan Stránský

Na tomto místě bych rád srdečně poděkoval všem, kteří jakkoliv (třeba i nepřímo) přispěli k zdárnému vytvoření tohoto dokumentu, zejména:

- vedoucímu diplomové práce prof. Ing. Milanu Jiráskovi, DrSc., za jeho rady, podněty, ochotu, trpělivost a přístup (nejen) při tvorbě práce;
- všem ostatním učitelům (zvláště pak doc. Ing. Janu Zemanovi, Ph.D.), kteří svým přístupem prohlubovali můj zájem o mechaniku a spřízněné vědní obory;
- svým rodičům, celé rodině a své přítelkyni za jejich všestrannou podporu, oporu a zázemí v průběhu celého mého studia;
- spolužákům, kolegům a přátelům;
- tvůrcům a vývojářům volně šiřitelného software $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$, $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$, $\text{B}_{\text{I}}\text{B}_{\text{T}}\text{E}_{\text{X}}$, Vim, Inkscape, Gnuplot, GNU Compiler Collection, Python, Linux kernel, Ubuntu, Oofem, Yade a dalších;
- doc. RNDr. Vítězslavu Vydrovi, CSc., za poskytnutí šablony pro psaní diplomové práce;
- serveru cml.fsv.cvut.cz za poskytnutí výpočetního výkonu.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektů GAČR 106/08/1508 a SGS10/020/OHK1/1T/11

OBSAH

Abstrakt	i
Zadání práce	iii
Seznam tabulek	viii
Seznam obrázků	ix
Značení	xi
1 Úvod	1
2 Teorie	3
2.1 Základy mechaniky kontinua	3
2.2 Základy termodynamiky	6
2.3 Základy mechaniky poškození	10
3 Analytické modely	13
3.1 Energetické teorie	14
3.1.1 KI model	15
3.1.2 Gradyho model	15
3.1.3 Modifikovaný Yewův – Taylorův model	15
3.1.4 Glennův – Chudnovského model	17
3.2 Nový model YTGC	17
3.3 Porovnání modelů	18
4 Numerické řešení	20
4.1 Popis řešené úlohy	20
4.2 Metoda konečných prvků	22
4.2.1 Slabé řešení	22
4.2.2 Prostorová diskretizace	23
4.2.3 Časová diskretizace	25
4.2.4 Algoritmizace	27
4.2.5 MKP a mechanika poškození	28
4.3 Prostorová korelace materiálových vlastností	29
4.3.1 Karhunenův – Loeveho rozklad	31
4.3.2 Numerická diskretizace	32
4.3.3 Analytické řešení	33

5	Počítačová implementace	40
5.1	Oofem	40
5.2	Yade	42
5.3	Fragment1d	42
5.3.1	Třída Vector	44
5.4	Porovnání jednotlivých programů	49
6	Výsledky	51
6.1	Vliv prostorové diskretizace	51
6.2	Vliv prostorové korelace	59
7	Závěr	65
	Literatura	66

SEZNAM TABULEK

3.1	Uvažované materiálové vlastnosti pro porovnání analytických modelů	18
5.1	Ukázkový vstupní soubor pro dynamickou fragmentaci v programu Oofem.	41
5.2	Ukázkový simulační skript pro dynamickou fragmentaci v programu Yade.	43
5.3	Ukázka zrychlení výpočtu při paralelním spuštění.	44
5.4	Implementace třídy Vector.	45
5.5	Vytvoření simulace.	46
5.6	Časový krok (s výpočtem disipované energie).	47
5.7	Generátor normálně rozdělených náhodných čísel Boxovou – Mullerovou metodou.	47
5.8	Implementace Karhunenova – Loeveho rozkladu.	48
5.9	Vstupní parametry simulace pro porovnání výsledků jednotlivých programů.	50
5.10	Porovnání časové náročnosti výpočtů jednotlivých programů	50
6.1	Uvažované materiálové vlastnosti pro numerické simulace.	51

SEZNAM OBRÁZKŮ

2.1	Uvažovaná funkce vývoje poškození a příslušný pracovní diagram.	12
3.1	Schématiké znázornění rozpínání prstence	13
3.2	Idealizace stavu fragmentu těsně po vytvoření.	14
3.3	Porovnání analytických modelů a numerických výsledků	19
4.1	Schématiké znázornění idealizace úlohy a počáteční a okrajové podmínky.	21
4.2	Prostorová diskretizace úlohy a lineární aproximační funkce.	24
4.3	Znázornění výsledné aproximace pole posunutí.	25
4.4	Předpokládané číslování uzlů a prvků.	28
4.5	Vlastní čísla pro prut délky $a = 0.5$ a různé korelační délky r	37
4.6	Vlastní funkce pro různé parametry	38
4.7	Ukázky realizací náhodného procesu pro různé korelační délky.	38
4.8	Konvergence aproximace kovarianční funkce ke skutečné hodnotě	39
5.1	Znázornění alokované paměti a přístupu k ní a ukázka ukazatelové aritmetiky.	44
5.2	Porovnání výsledků jednotlivých programů.	50
6.1	Konvergence počtu fragmentů pro různé způsoby perturbace materiálových vlastností	52
6.2	Konvergence disipované energie při „základní“ perturbaci různých veličin	52
6.3	Konvergence disipované energie pro ideální prut.	53
6.4	Konvergence disipované energie při nekorelované perturbaci A	54
6.5	Konvergence disipované energie při nekorelované perturbaci ε_0	54
6.6	Konvergence počtu fragmentů pro ideální prut.	55
6.7	Konvergence počtu fragmentů při zcela nekorelované perturbaci A	55
6.8	Konvergence počtu fragmentů při zcela nekorelované perturbaci ε_0	56
6.9	Rozdělení velikosti fragmentů pro různé rychlosti deformace.	57
6.10	Poměr fragmentů menších než daná velikost.	58
6.11	Rozdělení velikosti fragmentů pro různé perturbační metody.	58
6.12	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci A ($\dot{\varepsilon} = 10^4 \text{ s}^{-1}$).	59
6.13	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci A ($\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$).	60
6.14	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci A ($\dot{\varepsilon} = 10^5 \text{ s}^{-1}$).	60
6.15	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci A ($\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$).	61
6.16	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci A ($\dot{\varepsilon} = 10^6 \text{ s}^{-1}$).	61
6.17	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci ε_0 ($\dot{\varepsilon} = 10^4 \text{ s}^{-1}$).	62
6.18	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci ε_0 ($\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$).	62
6.19	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci ε_0 ($\dot{\varepsilon} = 10^5 \text{ s}^{-1}$).	63
6.20	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci ε_0 ($\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$).	63

6.21	Konvergence disipované energie při prostorové korelaci ε_0 ($\dot{\varepsilon} = 10^6 \text{ s}^{-1}$).	64
------	---	----

ZNAČENÍ

Operace

a	skalár
$ a $	absolutní hodnota a
\underline{a}, a_i	vektor (tenzor 1. řádu)
$\underline{\underline{A}}, A_{ij}$	tenzor 2. řádu
$\underline{\underline{\underline{A}}}, A_{ijkl}$	tenzor 4. řádu
$\ \underline{a}\ $	eukleidovská norma (délka) vektoru
$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{b}$	kontrakce tenzorů
$\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{B}}$	dvojitá kontrakce tenzorů
$\{a\}$	vektor (sloupcová matice)
$[A]$	matice
$[A]^T$	transponovaná matice
$[A]^{-1}$	inverzní matice
∇	operátor nabla (gradient nebo divergence)
da/db	derivace a podle b
$\partial a / \partial b$	parciální derivace a podle b
\dot{a}	$\partial a / \partial t$
\ddot{a}	$\partial^2 a / \partial t^2$
$\overset{t}{a}$	$a(t)$
$\overset{t+}{a}$	$a(t + \Delta t)$
a^e	příslušnost a ke konečnému prvku e
a_n	příslušnost a k uzlu n
$H(a)$	Heavisideova funkce
$E\langle a \rangle$	střední hodnota veličiny a
\bar{a}	střední hodnota veličiny a
\wedge	logická spojka a
\vee	logická spojka nebo

Symbols

A	průřezová plocha
B	označení obecného tělesa
\bar{b}	hustota vnějších objemových sil
$[B^e]$	geometrická matice prvku e
$C(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$	kovarianční funkce
$\underline{\underline{D}}_e$	tenzor pružné materiálové tuhosti
$\underline{\underline{D}}$	tenzor sečné materiálové tuhosti
d	hustota disipované energie
E	Youngův modul pružnosti
E_s	sečný modul
E_I	vnitřní energie
e_I	specifická vnitřní energie
\underline{F}	síla
$f_n(\underline{x})$	vlastní funkce kovariančního operátoru
G_f	lomová energie
h	intenzita zdroje tepla
K	kinetická energie
k	hustota kinetické energie
$[K^e], [K]$	matice tuhosti prvku e a globální matice tuhosti
k^e	tuhost prvku e
L	obvod prstence
L	délka modelované oblasti
l	délka fragmentu
M	osamělý moment
M	hmotnost
$[M^e], [M]$	matice hmotnosti prvku e a globální matice hmotnosti
m_n	hmotnost uzlu
\underline{n}	jednotkový vektor vnější normály
$[N^e]$	matice aproximačních funkcí prvku e
p	obecné označení materiálového bodu
P	výkon
\underline{q}	hustota tepelného toku
\underline{r}	rameno
R	poloměr rozpínaného prstence
$R(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$	korelační funkce
r	korelační délka
$\{r^e\}, \{r\}$	vektor uzlových hodnot aproximace pole posunutí na prvku e a globální vektor uzlových hodnot aproximace pole posunutí
S	povrch
S	entropie
s	specifická entropie
T	absolutní (termodynamická) teplota

t	čas
\bar{l}	hustota vnějších povrchových sil
\underline{u}, u	posunutí
δu	virtuální posunutí
\underline{v}, v	rychlost
v_r	radiální rychlost
V	objem
W	mechanická práce
W_e	energie pružné deformace
w_e	hustota energie pružné deformace
$\{w^e\}, \{w\}$	vektor uzlových hodnot testovacích funkcí na prvku e a globální vektor uzlových hodnot testovacích funkcí
w_f	rozevření fiktivní trhliny při porušení
\underline{x}	eulerovské (prostorové) souřadnice
\underline{X}	lagrangeovská (materiálové) souřadnice
$y(\underline{x}, \theta)$	náhodný proces
α	vnitřní proměnné
β_D	disipativní termodynamické síly sdružené s vnitřními proměnnými
β_Q	kvazikonzervativní termodynamické síly sdružené s vnitřními proměnnými
δ_{ij}	Kroneckerovo delta
$\underline{\varepsilon}, \varepsilon$	deformace
ε_0	maximální pružná deformace
ε_f	deformace, při které se již nepřenáší tahové napětí
ϕ, ϕ^*	disipační pseudo-potenciál a duální disipační pseudo-potenciál
$\varphi_i^{(k)}$	i -tá pořadnice aproximace k -tého vlastního tvaru
Γ	povrchová energie
γ	plošná hustota povrchové energie
$\bar{\gamma}$	„objemová“ hustota povrchové energie
κ	historicky maximální tahová deformace v daném bodě
λ_n	vlastní čísla kovariančního operátoru
μ	délková hmotnost
ω	parametr poškození
$\underline{\underline{\omega}}$	tenzor rotace
$\underline{\underline{\Omega}}$	parametr poškození
Ψ	Helmholtzova volná energie
ψ	specifická Helmholtzova volná energie
ρ	objemová hmotnost
σ	směrodatná odchylka
$\underline{\underline{\sigma}}, \sigma$	napětí
σ_0	napětí na mezi pevnosti při tahovém namáhání
$\underline{\underline{\sigma}}_Q$	kvazikonzervativní napětí
$\underline{\underline{\sigma}}_D$	disipační napětí
θ	náhodná proměnná
$\xi(\theta), \mu(\theta)$	náhodné veličiny

ÚVOD

Fragmentace (z latinského fragmentatio = rozdělení, rozčlenění) označuje proces dělení celku na menší části – fragmenty (překvapivě opět z latiny, fragmentum = část, zlomek, úlomek). V současném jazyce má slovo fragmentace mnoho významů, od fragmentace biologické (způsob rozmnožování organismů), ekologické (dělení krajiny lidskou činností, např. výstavbou silnic) a infromatické (nesouvislé uložení dat na médiu, např. pevném disku) přes fragmentaci víceméně fyzikální (štěpení atomového jádra na více nukleonů nebo štěpení molekul DNA) až po fragmentaci čistě mechanickou, kupříkladu tříštění talíře při dopadu na kuchyňskou podlahu.

Tento fyzikální fenomén, pro účely naší práce definován jako nelineární nevratný proces dělení tělesa na menší celky, můžeme najít v široké škále měřítek – od již zmíněného štěpení DNA [23] až po teorii velkého třesku a utváření galaxií [7]. Krom takovýchto extrémních případů se s fragmentací můžeme setkat i v mnoha oblastech každodenní lidské činnosti (drcení kmínu v hmoždíři, štípání dříví, mletí kávových zrn, snad již legendární jsou (ne)rozbitné skleničky z českého filmu Pelíšky¹), přímé průmyslové aplikace nevyjímaje (ražba tunelu pomocí výbušnin [48], vrtání [8], demoliční práce [45], těžební činnost [44]. . .).

Nehledě k výše zmíněným víceméně moderním příkladům, fragmentace doprovází člověka již od dob dávno minulých. Kupříkladu v jedné z nejstarších památek evropského písemnictví, Homérově Iliadě², se ve třetím zpěvu pokouší v souboji před trojskými hradbami spartský král Meneláos, syn Átreův, zabít svého nepřítele, trojského prince Parida:

*But fierce Atrides wav'd his sword and strook
Full on his casque: the crested helmet shook;
The brittle steel, unfaithful to his hand,
Broke short: the fragments glitter'd on the sand.*

Tento záměr je však překažen nečekaným rozpadem (fragmentací) jeho meče při kontaktu s Paridovou přílbou, který je posléze ze souboje a od jisté smrti zachráněn bohyní Afroditou.

Pokud uvažujeme (kvazi)statický průběh zatěžování, obvykle se v tělese vyvine nízký počet trhlin a těleso se tím pádem rozdělí na nízký počet částí. Typický příklad je jednoosá tahová zkouška prutového vzorku. Do určité úrovně zatížení vzrůstá přetvoření monotónně ve všech bodech, avšak po dosažení meze pevnosti se deformace začne lokalizovat do nejslabšího místa

¹Pelíšky; Jan Hřebejk, 1999.

²konkrétní citovaný úsek lépe než v českém překladu vyznívá v anglickém překladu A. Popea [23, 24]

a toto se začne porušovat (za současného odtěžování zbytku vzorku). V tělese vznikne pouze jediná makrotrhlina.

Pokud je ale zatěžování dynamické (kupříkladu jako v případě Meneláova meče), setrvačné síly mohou hrát v celém procesu rozpadu velice významnou roli. Porušující se oblasti jsou zdrojem šířících se odtěžujících elastických vln a jejich interakce („komunikace“) ovlivňuje další průběh celého děje. Situace se tak stává značně netriviální a při hledání vhodného modelového popisu je třeba věnovat zvláštní péči celé řadě faktorů.

Jedna z prvních systematických studií dynamické fragmentace byla na podnět armádních činitelů prováděna ve čtyřicátých letech dvacátého století Mottem [35]. Ten si k popisu vybral dutou válcovou skořepinu zatíženou určitým radiálním impulzem. V původním výzkumu (vzhledem k vojenské zakázce) válec představoval plášť bomby a zatížení odpovídalo detonaci nálože umístěné uvnitř. Výsledkem byla statistická teorie předpovídající počet a rozdělení velikosti (resp. hmotnosti) fragmentů na základě fenomenologických pozorování.

Krom rozvoje statistické teorie [17, 19] byla později vyvinuta energetická teorie fragmentace [19, 33, 49], jakož i teorie založená na termodynamických principech [41, 47]. V mnoha studiích byla analýza zaměřena na situaci radiálně zatížené válcové skořepiny (případně radiálně zatíženého prstence) [18, 32, 34, 51], neboť tento případ se může velice výhodně zjednodušit na jednorozměrnou úlohu [13, 21, 33].

Mimo výše zmíněných víceméně analytických studií bylo provedeno i mnoho studií numerických pomocí metody charakteristik [40] a metody konečných prvků [6, 12, 32] kombinované s kohezivními prvky [30, 34, 50]. I přes poměrně velké množství publikací na toto téma i dobu výzkumu neexistuje zatím pro fragmentaci jednotná univerzálně uznávaná teorie a i v oblasti numerických simulací setrvává mnoho otevřených otázek (například závislost na zvolené diskretizaci, uvažování prostorové korelace materiálových vlastností. . .). Na některé z nich se právě snaží odpovědět tato diplomová práce.

Její členění je následující: na začátku, v kapitole 2, jsou představeny základy mechaniky kontinua a termodynamiky. Dále se kapitola zabývá mechanikou poškození, jakožto zvoleným modelem pro fragmentaci křehkých materiálů. V kapitole 3 jsou teoretické poznatky z předchozí kapitoly použity při představení a odvození některých výše zmíněných analytických modelů a jejich porovnání s modely numerickými. Kapitola 4 je věnována odvození numerického řešení jednorozměrné úlohy (simulující rozpad radiálně zatíženého prstence) metodou konečných prvků s přihlédnutím k prostorové korelaci materiálových vlastností. Následující kapitola s číslem 5 popisuje počítačovou implementaci modelu a metod popsanych v kapitole 4 a porovnává výsledky i časové nároky některých dostupných výpočetních nástrojů s programem *Fragment1d*, nástrojem vyvinutým autorem v rámci tvorby diplomové práce. Konečně v kapitole 6 jsou představeny a zhodnoceny dosažené numerické výsledky, porovnány navzájem a také s výsledky jiných autorů.

Tato kapitola je věnována obecnému matematicko-fyzikálnímu popisu mechaniky kontinua [10, 14, 25] a nevratných (ireverzibilních) procesů [9, 26, 36] se zaměřením na mechaniku poškození jakožto zvolený model pro dynamickou fragmentaci křehkých materiálů [11–13, 22, 28, 29, 34, 48, 49].

Značení je následující: skalární veličiny jsou označeny prostými symboly, tenzorové veličiny jsou v kompaktním zápisu značeny podtržením (počet podtržení označuje řád příslušného tenzoru) a v zápisu složkovém pak dolními indexy. Ve složkovém zápisu je řád tenzoru dán počtem dolních indexů nabývajících hodnot 1, 2 nebo 3 podle vztahu ke kartézským souřadným osám x_1, x_2 nebo x_3 .

Při násobení tenzorů je použita obvyklá (někdy nazývána Einsteinova) konvence pro sčítání přes opakující se indexy, kupříkladu

$$a_i = b_{ijk}c_{jk} \quad \leftrightarrow \quad a_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 b_{ijk}c_{jk}, \quad (2.1)$$

kde i se mění od 1 do 3. Symbolem \cdot je označena kontrakce (úžení) tenzorů, např. $(\underline{a} \cdot \underline{b})_i = a_{ij}b_j$, $(\underline{c} \cdot \underline{d}) = c_id_i$, znakem $:$ dvojitá kontrakce, např. $(\underline{a} : \underline{b}) = a_{ij}b_{ij}$, a znakem \otimes vnější (tenzorový, dyadický) součin, např. $(\underline{a} \otimes \underline{b})_{ij} = a_ib_j$. Znak ∇ je operátor parciálních derivací podle prostorových souřadnic. Při použití v operaci vnějšího součinu (zkráceně značeno bez operátoru) se jedná o gradient, např. $(\nabla \otimes \underline{a})_{ij} \equiv (\nabla \underline{a})_{ij} = \nabla_i a_j = \partial a_j / \partial x_i$ nebo $(\nabla \underline{b})_i = \partial b / \partial x_i$. Při použití v operaci kontrakce se jedná o divergenci, např. $(\nabla \cdot \underline{a}) = \nabla_i a_i = \partial a_i / \partial x_i$ nebo $(\nabla \cdot \underline{b})_j = \nabla_i b_{ij} = \partial b_{ij} / \partial x_i$. Tečkou nad symbolem veličiny je označena její časová derivace ($\dot{a} = \partial a / \partial t$), dvojitou tečkou druhá derivace podle času ($\ddot{a} = \partial^2 a / \partial t^2$).

2.1 Základy mechaniky kontinua

V trojrozměrném eukleidovském prostoru uvažujeme v čase t spojitě těleso B zaujímající objem V a ohraničené povrchem S . V počátečním stavu v čase $t = 0$ má každý materiálový bod p svoji materiálovou (či lagrangeovskou nebo referenční) souřadnici \underline{X} . V jiném (např. deformovaném) stavu se náš bod p může dostat do jiné polohy s prostorovou (či eulerovskou) souřadnicí \underline{x} . Naším cílem bude vyšetřování časového vývoje polohy všech materiálových bodů, tedy funkce

$\underline{x} = \underline{x}(\underline{X}, t)$. Tento popis pohybu (sledující dráhu jednotlivých materiálových bodů po bodech prostorových) se nazývá lagrangeovský a je obvyklý v úlohách pevných těles [10, 14]. Inverzní popis pohybu $\underline{X} = \underline{X}(\underline{x}, t)$, nazývaný eulerovský, sleduje průchod materiálových bodů (resp. jejich rychlost) v jednotlivých bodech prostorových a je naopak obvyklý v úlohách mechaniky tekutin.

Za předpokladu, že oba souřadné systémy jsou kartézské, shodně orientované a se shodným počátkem O , platí v počátečním stavu $\underline{x}(\underline{X}, t=0) - \underline{X} = \underline{0}$. Definujeme vektor posunutí

$$\underline{u}(\underline{X}, t) = \underline{x}(\underline{X}, t) - \underline{X}. \quad (2.2)$$

V oboru malých deformací (který je uvažován v celé práci) můžeme malou změnu posunutí $d\underline{u}$ (rozdíl posunutí ve dvou infinitezimálně blízkých bodech) zapsat jako totální diferenciál

$$du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j, \quad d\underline{u} = (\nabla \underline{u})^T \cdot d\underline{x} = d\underline{x} \cdot \nabla \underline{u}, \quad (2.3)$$

kde gradient vektoru posunutí se může dále rozložit na symetrickou (S) a antisymetrickou (A) část

$$\nabla \underline{u} = \frac{1}{2} [\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T] + \frac{1}{2} [\nabla \underline{u} - (\nabla \underline{u})^T] = (\nabla \underline{u})^S + (\nabla \underline{u})^A = \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\omega}}. \quad (2.4)$$

$\underline{\underline{\omega}} = (\nabla \underline{u})^A$ je tenzor rotace a $\underline{\underline{\varepsilon}} = (\nabla \underline{u})^S$ je tenzor deformace.

Dále uvažujeme, že na těleso B působí vnější povrchové síly $\underline{\bar{t}}$ (nezaměňovat s veličinou čas t) a vnější objemové síly $\underline{\bar{b}}$, které jsou příčinou sil vnitřních. Pokud těleso v bodě p myšleně rozdělíme rovinou s normálou \underline{n} a jednu část odebereme, vliv odebrané části na část zůstávající (tak aby se stav ponechané části nezměnil) musí být nahrazen vektorem napětí $\underline{\bar{t}}^{(n)}$ (nyní myšlené vnější povrchovou silou). Pro libovolnou normálu můžeme zapsat

$$\underline{\bar{t}}^{(n)} = \underline{\bar{t}}^{(\underline{e}_1)} n_1 + \underline{\bar{t}}^{(\underline{e}_2)} n_2 + \underline{\bar{t}}^{(\underline{e}_3)} n_3 = \underline{\bar{t}}^{(\underline{e}_j)} n_j, \quad \underline{\bar{t}}_i^{(n)} = \underline{\bar{t}}_i^{(\underline{e}_j)} n_j. \quad (2.5)$$

Definujeme (Cauchyho) tenzor napětí $\underline{\underline{\sigma}}$ jako tenzor druhého řádu, jehož složka ij je číselně rovna j -té složce vnitřní síly působící na jednotkovou plochu kolmou na osu i . Matematicky

$$\sigma_{ij} = \underline{\bar{t}}_j^{(\underline{e}_i)} \rightarrow \underline{\bar{t}}_i^{(n)} = \underline{\bar{t}}_i^{(\underline{e}_j)} n_j = \sigma_{ji} n_j, \quad \underline{\bar{t}}^{(n)} = \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}. \quad (2.6)$$

V rámci mechaniky hmotných bodů uvažujme N hmotných bodů n s rychlostí $\underline{v}^n = \dot{\underline{u}}^n$ a na ně působící síly \underline{F}^n . Diferenciál mechanické práce všech sil dW , její celkový úhrn W a výkon všech sil P můžeme vyjádřit jako

$$dW = \sum_{n=1}^N \underline{F}^n \cdot d\underline{u}^n, \quad W = \sum_{n=1}^N \int_{\underline{u}^n} \underline{F}^n \cdot d\underline{u}^n, \quad P = \frac{dW}{dt} = \sum_{n=1}^N \underline{F}^n \cdot \frac{d\underline{u}^n}{dt} = \sum_{n=1}^N \underline{F}^n \cdot \dot{\underline{u}}^n \quad (2.7)$$

a kinetickou energii a její časovou změnu jako

$$K = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N m \|\underline{v}^n\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N m \underline{v}^n \cdot \underline{v}^n = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N m \dot{\underline{u}}^n \cdot \dot{\underline{u}}^n, \quad \dot{K} = \sum_{n=1}^N m \underline{v}^n \cdot \dot{\underline{v}}^n = \sum_{n=1}^N m \ddot{\underline{u}}^n \cdot \dot{\underline{u}}^n \quad (2.8)$$

Pro spojité prostředí je postup analogický, pouze součet přes všechny hmotné body se nahradí objemovým integrálem, hmotnost m hustotou ρ a síla \underline{F} taktéž svoji hustotou $\underline{\bar{b}}$ nebo $\underline{\bar{l}}$. Konkrétně pro objemové síly

$$dW_V = \int_V \underline{\bar{b}} \cdot d\underline{u} dV, \quad W_V = \int_V \int_{\underline{u}} \underline{\bar{b}} \cdot d\underline{u} dV, \quad P_V = \int_V \underline{\bar{b}} \cdot \underline{\dot{u}} dV, \quad (2.9)$$

pro povrchové síly

$$dW_S = \int_S \underline{\bar{l}} \cdot d\underline{u} dS, \quad W_S = \int_S \int_{\underline{u}} \underline{\bar{l}} \cdot d\underline{u} dS, \quad P_S = \int_S \underline{\bar{l}} \cdot \underline{\dot{u}} dS, \quad (2.10)$$

a pro kinetickou energii

$$K = \frac{1}{2} \int_V \rho \|\underline{\dot{u}}\|^2 dV = \frac{1}{2} \int_V \rho \underline{\dot{u}} \cdot \underline{\dot{u}} dV, \quad \dot{K} = \int_V \rho \underline{\ddot{u}} \cdot \underline{\dot{u}} dV. \quad (2.11)$$

Celkový výkon mechanických vnějších sil je tedy

$$P_{\text{ext}} = \int_V \underline{\bar{b}} \cdot \underline{\dot{u}} dV + \int_S \underline{\bar{l}} \cdot \underline{\dot{u}} dS. \quad (2.12)$$

Ze základních axiomů mechaniky kontinua, totiž zákona zachování hmotnosti M , hybnosti \underline{H} a momentu hybnosti \underline{N} [10, 14]

$$\frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{d\underline{H}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho \underline{\dot{u}} dV = \int_V \underline{\bar{b}} dV + \int_S \underline{\bar{l}} dS + \sum_n \underline{F}^n, \quad (2.14)$$

$$\frac{d\underline{N}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho (\underline{r} \times \underline{\dot{u}}) dV = \int_V (\underline{r} \times \underline{\bar{b}}) dV + \int_S (\underline{r} \times \underline{\bar{l}}) dS + \sum_n (\underline{r}^n \times \underline{F}^n) + \sum_n \underline{M}^n, \quad (2.15)$$

kde r značí rameno příslušné veličiny k pevně zvolenému bodu, znak \times vektorový součin a M^n osamělé momenty sil, plyne (popořadě) rovnice kontinuity

$$\dot{\rho} + \nabla \cdot (\rho \underline{\dot{u}}) = 0, \quad (2.16)$$

pohybová rovnice

$$\rho \underline{\ddot{u}} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\bar{b}} \quad (2.17)$$

a symetrie tenzoru napětí $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$. Rovnice (2.17) je spojitým zobecněním známého druhého Newtonova zákona $F = am$ nebo jinými slovy rovnováha všech sil včetně sil setrvačných. Pokud vynecháme dynamický člen $\rho \underline{\ddot{u}}$, bude výsledkem rovnice lokální statické rovnováhy $\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\bar{b}} = \underline{0}$.

V následujícím textu využijeme Gaussovu – Greenovu větu (integrace per-partes ve více rozměrech), která říká

$$\int_S \underline{a} \cdot \underline{n} dS = \int_V \nabla \cdot \underline{a} dV, \quad (2.18)$$

$$\int_S \underline{n} \cdot \underline{b} \cdot \underline{a} dS = \int_V \nabla \cdot (\underline{b} \cdot \underline{a}) dV = \int_V (\nabla \cdot \underline{b}) \cdot \underline{a} dV + \int_V \underline{b} : (\nabla \underline{a}) dV$$

2.2 Základy termodynamiky

Krom výše zmíněných čistě mechanických záležitostí se může v tělese vyskytovat ještě zdroj tepla h (způsoben například odporem materiálu při průchodu elektrického proudu) a na jeho hranici hustota tepelného toku \underline{q} , které jsou příčinou tepelného výkonu

$$P_{\text{cal}} = \int_V \rho h \, dV - \int_S \underline{q} \cdot \underline{n} \, dS. \quad (2.19)$$

Znaménko mínus u druhého členu pravé strany rovnice vyjadřuje fakt, že pokud je tepelný tok orientován shodně s vnější normálou, teplo „vytéká“ ven a práce konaná na tělese je tedy záporná.

První termodynamický zákon

$$\dot{E}_I + \dot{K} = P_{\text{ext}} + P_{\text{cal}} \quad (2.20)$$

vyjadřuje, že časová změna celkové energie (součet vnitřní energie E_I a kinetické energie K) je rovna součtu tepelného výkonu a výkonu mechanických sil. Jinými slovy, energie se nemůže „jen tak ztratit“ a ani se „brát odkud“, rovnice (2.20) tedy vyjadřuje globální zákon zachování (bilanci) energie. Po použití rovnic (2.6), (2.17), (2.18) a příslušných úpravách

$$\int_S \underline{q} \cdot \underline{n} \, dS = \int_V \nabla \cdot \underline{q} \, dV, \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \int_S \underline{l} \cdot \underline{\dot{u}} \, dS &= \int_S \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\dot{u}} \, dS = \int_V \underline{\underline{\sigma}} : (\nabla \underline{\dot{u}}) \, dV + \int_V (\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}) \cdot \underline{\dot{u}} \, dV = \\ &= \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \, dV + \int_V (\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}) \cdot \underline{\dot{u}} \, dV, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} P_{\text{ext}} &= \int_V \underline{\underline{b}} \cdot \underline{\dot{u}} \, dV + \int_S \underline{l} \cdot \underline{\dot{u}} \, dS = \int_V (\underline{\underline{b}} + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}) \cdot \underline{\dot{u}} \, dV + \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \, dV = \\ &= \int_V \rho \underline{\underline{u}} \cdot \underline{\dot{u}} \, dV + \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \, dV = \dot{K} + P_{\text{int}}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

kde $\nabla \underline{\dot{u}}$ byl nahrazen pouze symetrickou částí $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}$ ¹, můžeme rovnici (2.20) přepsat do podoby (kde e_I je specifická vnitřní energie – vnitřní energie vztažená k jednotce hmotnosti)

$$\dot{E}_I = \int_V \rho \dot{e}_I \, dV = P_{\text{int}} + P_{\text{cal}} = \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \, dV + \int_V (\rho h - \nabla \cdot \underline{q}) \, dV \quad (2.24)$$

$$\int_V (\rho \dot{e}_I - \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho h + \nabla \cdot \underline{q}) \, dV = 0. \quad (2.25)$$

Tato globální rovnice musí být splněna pro libovolný objem V , proto výraz můžeme zapsat bez integrálu jako lokální energetickou bilanci (neboli lokální podobu prvního termodynamického zákona)

$$\rho \dot{e}_I = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} + \rho h - \nabla \cdot \underline{q}. \quad (2.26)$$

¹protože tenzor napětí $\underline{\underline{\sigma}}$ je symetrický a toto nahrazení nijak neovlivní výsledek. Tenzor rotace $\underline{\underline{\omega}}$ byl zanedbán.

Termodynamika dále zavádí fyzikální veličinu S zvanou entropie (nezaměňovat s povrchem). Entropie má několik možných výkladů, například míra vnitřní neuspořádanosti systému anebo míra schopnosti systému konat „užitečnou“ práci. Podle prvního termodynamického zákona je množství energie v uzavřeném systému konstantní, její „kvalita“ se ale může měnit. Jedeme-li na jízdním kole po rovině s určitou rychlostí, jsme schopni bez jakéhokoliv přičinění vyjet mírný kopec a přeměnit tak svoji kinetickou energii v potenciální. Pokud ale kopec následuje až za určitou vzdálenost, kinetická energie se třením v ložiscích (například – za teoretického předpokladu cyklistického výletu ve vzduchoprázdnu a s dokonalými pneumatikami a povrchem vozovky) přeměňuje na „neužitečnou“ energii vnitřní, náš bicykl zpomaluje a posléze zůstane stát pod kopcem. Množství energie je v obou případech shodné, kvalitativně se ale oba případy liší. Matematicky lze tento jev popsat pomocí druhého zákona termodynamického (Clausiovy – Duhemovy nerovnosti) [14, 26]

$$\dot{S} = \int_V \rho \dot{s} dV \geq \frac{P_{\text{cal}}}{T} = \int_V \frac{\rho h}{T} dV - \int_S \frac{\underline{q} \cdot \underline{n}}{T} dS, \quad (2.27)$$

který říká, že časová změna entropie je vždy větší nebo rovna tepelnému výkonu dělenému absolutní (termodynamickou) teplotou T . Aplikací Gaussovy – Greenovy věty (2.18) na druhý člen

$$\int_S \frac{\underline{q}}{T} \cdot \underline{n} dS = \int_V \nabla \cdot \left(\frac{\underline{q}}{T} \right) dV = \int_V \left(\frac{\nabla \cdot \underline{q}}{T} - \frac{\underline{q} \cdot \nabla T}{T^2} \right) dV \quad (2.28)$$

a jeho dosazením do původní rovnice můžeme globální zákon přepsat do podoby

$$\int_V \rho \dot{s} dV \geq \int_V \left(\frac{\rho h}{T} - \frac{\nabla \cdot \underline{q}}{T} + \frac{\underline{q} \cdot \nabla T}{T^2} \right) dV. \quad (2.29)$$

Rovnice musí opět platit pro libovolný objem, tudíž ji opět můžeme zapsat bez integrálu a obdržíme lokální podobu druhého termodynamického zákona

$$T\rho\dot{s} - \rho h + \nabla \cdot \underline{q} - \frac{\underline{q} \cdot \nabla T}{T} \geq 0, \quad (2.30)$$

kde s je specifická entropie – entropie vztažená k jednotce hmotnosti.

Dle definice v [14] je proces termodynamicky přípustný tehdy a jen tehdy, splňuje-li Clausiovu – Duhemovu nerovnost (2.30) lokálně ve všech bodech a je-li absolutní teplota T ve všech bodech nezáporná, a mechanicky přípustný (konzistentní), splňuje-li zákony zachování hmotnosti, hybnosti, momentu hybnosti (2.13)-(2.17) a energie (2.26).

Ve fyzice existuje několik tzv. termodynamických potenciálů (a jejich hustot). Jedním z nich je například vnitřní energie E_I a její specifická hodnota e_I . Dalším je například Gibbsova volná energie

$$G = E_I - \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{E}} - TS, \quad \rho g = \rho e_I - \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} - T\rho s \quad (2.31)$$

nebo Helmholtzova volná energie

$$\Psi = E - TS, \quad \psi = e_I - Ts. \quad (2.32)$$

Dosazením druhé jmenované do rovnic (2.26) a (2.30) můžeme tyto přepsat do tvaru

$$\rho\dot{\psi} + \rho\dot{T}s + \rho T\dot{s} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} + \rho h - \nabla \cdot \underline{q} \rightarrow \rho T\dot{s} - \rho h + \nabla \cdot \underline{q} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho(\dot{\psi} + \dot{T}s), \quad (2.33)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho (\dot{\psi} + \dot{T}s) - \frac{\underline{q} \cdot \nabla T}{T} \geq 0. \quad (2.34)$$

Předpokládejme nyní děj čistě mechanický, tzn. izotermický (kdy teplota je v čase i prostoru konstantní, $\dot{T} = 0$, $\nabla T = \underline{0}$, $\underline{q} = \underline{0}$) a bez vnitřních zdrojů tepla ($h = 0$). Zavedením nové veličiny hustoty rychlosti disipace energie (dále jen zkráceně disipace) $\dot{d} = T\dot{s}$ můžeme rovnice (2.33) a (2.34), tedy první a druhý termodynamický zákon, přepsat jako

$$\rho\dot{\psi} + \dot{d} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \quad \rightarrow \quad \dot{d} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho\dot{\psi}, \quad (2.35)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho\dot{\psi} \geq 0. \quad \rightarrow \quad \dot{d} \geq 0, \quad (2.36)$$

kde poslední výraz je tzv. disipační nerovnost [26]. Rovnítko platí pro vratné procesy (kdy $\dot{d} = 0$ a k disipaci tím pádem nedochází), ostrá nerovnost pak pro procesy nevratné ($\dot{d} > 0$ a část energie se nevratně disipuje - mění se na jiný „neužitečný“ druh).

Hustota volné energie je obecně (pro izotermický děj) funkcí deformace $\underline{\underline{\varepsilon}}$ a vnitřních proměnných α , což může být soubor skalárů a tenzorů různých řádů, proto označen tučně:

$$\psi = \psi(\underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha) \quad \rightarrow \quad \dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} + \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \bullet \dot{\alpha}. \quad (2.37)$$

Symbol \bullet značí operaci skalárního součinu (operaci násobení, jejímž výsledkem je skalár) příslušnou konkrétní podobě vnitřních proměnných (prostý součin pro skaláry, kontrakci pro vektory a dvojitou kontrakci pro tenzory druhého řádu), neboť konkrétní volba vnitřních proměnných (poškození, plastická deformace apod.) závisí na použitém konstitutivním zákoně. Dosažením (2.37) do (2.36) dostaneme

$$\dot{d}(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}, \dot{\alpha}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha) = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \bullet \dot{\alpha} \geq 0. \quad (2.38)$$

Označme kvazikonzervativní napětí (část napětí nezávislá na rychlosti deformace $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}$)

$$\underline{\underline{\sigma}}_Q(\underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha) = \rho \frac{\partial \psi(\underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha)}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} \quad (2.39)$$

a kvazikonzervativní termodynamické síly sdružené s vnitřními proměnnými (zkráceně termodynamické síly)

$$\beta_Q(\underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha) = \rho \frac{\partial \psi(\underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha)}{\partial \alpha} \quad (2.40)$$

a zapišme

$$\dot{d} = (\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_Q) : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \beta_Q \bullet \dot{\alpha}. \quad (2.41)$$

Dále předpokládejme existenci disipačního pseudo-potenciálu $\phi(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}, \dot{\alpha}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \alpha)$ a pomocí něho zapsaný výraz pro disipaci:

$$\dot{d} = \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} + \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\alpha}} \bullet \dot{\alpha} = \underline{\underline{\sigma}}_D : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} + \beta_D \bullet \dot{\alpha}, \quad (2.42)$$

kde

$$\underline{\underline{\sigma}}_D(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) = \frac{\phi(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}} \quad (2.43)$$

je disipační napětí a

$$\underline{\underline{\beta}}_D(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) = \frac{\partial \phi(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\dot{\underline{\alpha}}}} \quad (2.44)$$

jsou disipativní termodynamické síly sdružené s vnitřními proměnnými. Zřejmě pokud je disipační pseudo-potenciál konvexní a nabývá minima v $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}} = \underline{\underline{0}}$, $\underline{\dot{\underline{\alpha}}} = \underline{\underline{0}}$, je nerovnost $\dot{d} \geq 0$ (a tudíž i splnění druhého termodynamického zákona a podmínky termodynamické přípustnosti) vždy zaručena.

Porovnáním rovnic (2.41) a (2.42) můžeme zapsat

$$\left(\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_Q - \underline{\underline{\sigma}}_D \right) : \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}} = 0 \quad (2.45)$$

$$(\underline{\underline{\beta}}_Q + \underline{\underline{\beta}}_D) \bullet \underline{\dot{\underline{\alpha}}} = 0 \quad (2.46)$$

a vyjádřit obecnou formu konstitutivního (materiálového) zákona

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) = \underline{\underline{\sigma}}_Q(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) + \underline{\underline{\sigma}}_D(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}) = \rho \frac{\partial \psi(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} + \frac{\phi(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}} \quad (2.47)$$

a obecnou (implicitní) podobu funkce vývoje vnitřních proměnných

$$(\underline{\underline{\beta}}_Q(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) + \underline{\underline{\beta}}_D(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})) \bullet \underline{\dot{\underline{\alpha}}} = \left(\rho \frac{\partial \psi(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\alpha}} + \frac{\partial \phi(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\dot{\underline{\alpha}}}} \right) \bullet \underline{\dot{\underline{\alpha}}} = 0. \quad (2.48)$$

Explicitní vyjádření lze získat Legendrovou transformací převádějící disipační pseudo-potenciál ϕ na duální disipační pseudo-potenciál ϕ^*

$$\phi^*(\underline{\underline{\sigma}}_D, \underline{\underline{\beta}}_D, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) = \max_{\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}} \left[\underline{\underline{\sigma}}_D : \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}} + \underline{\underline{\beta}}_D \bullet \underline{\dot{\underline{\alpha}}} - \phi(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) \right] \quad (2.49)$$

a „duálně“ k rovnici (2.44) zapsat

$$\underline{\dot{\underline{\alpha}}} = \frac{\partial \phi^*(\underline{\underline{\sigma}}_D, \underline{\underline{\beta}}_D, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha})}{\partial \underline{\underline{\beta}}_D}. \quad (2.50)$$

Analogicky k (2.49) můžeme zapsat inverzní vztah mezi oběma disipačními pseudo-potenciály

$$\phi(\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}, \underline{\dot{\underline{\alpha}}}, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) = \max_{\underline{\underline{\sigma}}_D, \underline{\underline{\beta}}_D} \left[\underline{\underline{\sigma}}_D : \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}} + \underline{\underline{\beta}}_D \bullet \underline{\dot{\underline{\alpha}}} - \phi^*(\underline{\underline{\sigma}}_D, \underline{\underline{\beta}}_D, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\alpha}) \right]. \quad (2.51)$$

Za předpokladu ideálně lineárně pružného materiálu ($\phi = 0 \rightarrow \underline{\underline{\sigma}}_D = \underline{\underline{0}}$) se symetrickým tenzorem materiálové tuhosti $\underline{\underline{D}}_e$ je Helmholtzova volná energie ψ rovna energii pružné deformace (a Gibbsova volná energie rovna záporné hodnotě doplňkové energie):

$$\psi = w_e = \frac{1}{2\rho} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{D}}_e : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad \rightarrow \quad \underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} = \rho \frac{\partial \left(\frac{1}{2\rho} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{D}}_e : \underline{\underline{\varepsilon}} \right)}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} = \underline{\underline{D}}_e : \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad (2.52)$$

což je zápis zobecněného Hookeova zákona odvozený ze základních termodynamických principů a kvadratické formy potenciální energie pružné deformace.

2.3 Základy mechaniky poškození

Mechanika poškození je konstitutivní teorie popisující vývoj poškození (ztrátu integrity) materiálu v důsledku tvorby a rozvoje mikrotrhlin, mikrodutin a podobných vad. Oblasti s těmito mikroměřítkovými změnami se na makroskopickém měřítku projevují jako místa se sníženou materiálovou tuhostí. Tato snížená (sečná) tuhost D_{ijkl} je v rámci mechaniky poškození modelována jako součin původní (elastické) tuhosti D_{ijkl}^e s jistým parametrem Ω vztaheným k poškození v daném bodě

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}_e - \Omega \circ \underline{\underline{D}}_e, \quad (2.53)$$

kde Ω , parametr poškození, je obecně tenzorová veličina a \circ k ní příslušná operace násobení, jejíž výsledkem je tenzor čtvrtého řádu.

V obecném případě tento parametr poškození (beroucí v potaz anizotropii poškozené oblasti) může být až tenzor osmého řádu, praktičtější a častější je však užití tenzorů nižších řádů (čtvrtého, druhého, případně množiny vektorů). Mluvíme pak o anizotropním modelu poškození.

Pokud je Ω skalárního charakteru, mluvíme naopak o izotropním modelu poškození, ve své základní podobě se dvěma nezávislými parametry poškození příslušející dvěma nezávislým elastickým konstantám. Nejjednodušší model poškození (dále použit v celé práci) je izotropní model poškození s jediným parametrem poškození $\omega \in \langle 1; 0 \rangle$. Navíc budeme uvažovat pouze jednorozměrný případ, výraz (2.53) proto můžeme přepsat jako

$$E_s = (1 - \omega) E, \quad (2.54)$$

kde E je Youngův modul pružnosti a E_s takzvaný sečný modul pružnosti.

Tento popis je vhodný pro monotónní tahové zatěžování, kde vlivem rozpínání materiálu předpokládáme tvorbu a rozvoj trhlin a poškození. Pokud ale zatížení přejde do tlaku, očekáváme naopak zavření trhlin a tuhost v tlaku obdobnou tuhosti původní (alespoň do určité míry zatížení). Tento jev zavedeme deaktivaci poškození v tlakové oblasti namáhání, která je v jednorozměrném případě (na rozdíl od víceosého namáhání) velmi jasně definovatelná:

$$E_s = (1 - \omega H(\varepsilon)) E, \quad (2.55)$$

kde $H(*)$ je Heavisideova funkce

$$H(*) = \begin{cases} 0 & \text{pro } * \leq 0 \\ 1 & \text{pro } * > 0 \end{cases} \quad (2.56)$$

V základní podobě budeme poškození modelovat jako nezávislé na rychlosti deformace, takže materiálový zákon (2.47) a disipaci (2.42) můžeme přepsat do tvaru

$$\sigma_D(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}) = 0 \quad \rightarrow \quad \sigma = \sigma_Q(\varepsilon, \alpha) = \rho \frac{\partial \psi(\varepsilon, \alpha)}{\partial \varepsilon}. \quad (2.57)$$

$$\dot{d} = \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\alpha}} \cdot \dot{\alpha} \geq 0 \quad (2.58)$$

Předpokládáme $\alpha = \{\omega\}$ a

$$\rho \psi = \frac{1}{2} (1 - \omega H(\varepsilon)) E \varepsilon^2, \quad \sigma = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} = (1 - \omega H(\omega)) E \varepsilon, \quad (2.59)$$

$$\beta_Q = \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} = \frac{\partial \psi}{\partial \omega} = \begin{cases} 0 & \text{pro } \varepsilon \leq 0 \\ -\frac{1}{2}E\varepsilon^2 & \text{pro } \varepsilon > 0 \end{cases} \quad (2.60)$$

$$\phi = \dot{\omega} \frac{1}{2}E\tilde{g}^2(\omega), \quad \beta_D = \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\alpha}} = \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\omega}} = \frac{1}{2}E\tilde{g}^2(\omega), \quad (2.61)$$

Z rovnice (2.48)

$$(\beta_Q + \beta_D) \dot{\omega} = \left(-\frac{1}{2}E\varepsilon^2 + \frac{1}{2}E\tilde{g}^2(\omega) \right) \dot{\omega} = 0 \quad (2.62)$$

plyne, že $\dot{\omega}$ může být nenulová pouze tehdy, je-li hodnota závorky rovna nule, to jest

$$-\frac{1}{2}E\varepsilon^2 + \frac{1}{2}E\tilde{g}^2(\omega) = 0 \rightarrow \frac{1}{2}E\varepsilon^2 = \frac{1}{2}E\tilde{g}^2(\omega) \rightarrow \varepsilon^2 = \tilde{g}^2(\omega) \rightarrow \varepsilon = \tilde{g}(\omega) \quad (2.63)$$

je-li hodnota deformace ε rovna funkci $\tilde{g}(\omega)$ v daném bodě. Za normálních podmínek by se muselo uvažovat $\sqrt{\varepsilon} = |\varepsilon|$, díky rovnici (2.60) ale stačí uvažovat jen kladnou (tahovou) část přetvoření ε . Dle rovnice (2.58) musí být přírůstek $\dot{\omega}$ vždy nezáporný:

$$\dot{d} = \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\alpha}} \cdot \dot{\alpha} = \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\omega}} \dot{\omega} = \frac{1}{2} \underbrace{E\tilde{g}^2(\omega)}_{\geq 0} \dot{\omega} \geq 0 \rightarrow \dot{\omega} \geq 0 \quad (2.64)$$

Definujeme zatěžovací funkci poškození $\tilde{f}(\varepsilon, \omega) = \varepsilon - \tilde{g}(\omega)$ a funkci $f(\varepsilon, \omega) = g(\varepsilon) - \omega$ (za předpokladu, že $g(\varepsilon)$ je inverzní funkcí $\tilde{g}(\omega)$). Spojením rovnic (2.62), (2.63) a (2.64) můžeme zapsat (podobně jako pro plasticitu, viz např. [26]) soustavu „poškozovacích“ rovnic

$$\dot{\omega} \geq 0, \quad f \leq 0, \quad f\dot{\omega} = 0. \quad (2.65)$$

Funkce vývoje poškození může nabývat mnoha tvarů (viz např. [27]), obvykle je ale vztažena ke konstitutivnímu chování konkrétního modelovaného materiálu. V našem případě budeme uvažovat $\omega(t) = \max_{\tau \leq t} [g(\varepsilon(\tau))] = g(\max_{\tau \leq t} [\varepsilon(\tau)]) = g(\kappa(\tau))$, kde $\kappa = \max_{\tau \leq t} [\varepsilon(\tau)]$. Funkce $g(\kappa)$ konkrétně:

$$\omega = g(\kappa) = \begin{cases} 0 & \text{pro } \kappa \leq \varepsilon_0 \\ 1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_f - \varepsilon_0} \frac{\varepsilon_f - \kappa}{\kappa} & \text{pro } \varepsilon_0 < \kappa < \varepsilon_f \\ 1 & \text{pro } \kappa \geq \varepsilon_f \end{cases}, \quad (2.66)$$

$$\frac{dg(\kappa)}{d\kappa} = \begin{cases} 0 & \text{pro } \kappa \leq \varepsilon_0 \vee \kappa \geq \varepsilon_f \\ \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_f}{(\varepsilon_f - \varepsilon_0) \kappa^2} & \text{pro } \varepsilon_0 < \kappa < \varepsilon_f \end{cases}. \quad (2.67)$$

To odpovídá bilineárnímu pracovnímu diagramu, tedy pružnému přetváření až do hodnoty deformace ε_0 (maximální pružné deformaci) a lineárnímu změkčení až do hodnoty deformace ε_f („rozpadové“ deformace, kdy se v tahu již nepřenáší žádné napětí), viz obr.2.1. κ je dle definice s časem neklesající, tím pádem zvolená funkce $g(\kappa)$ taktéž, což implikuje splnění rovnice (2.64) a splnění podmínky nezáporné disipace a termodynamické přípustnosti.

Pokud v rovnici (2.64) nahradíme časovou derivaci přírůstkem

$$\dot{d} \rightarrow dd, \quad \dot{\omega} \rightarrow d\omega = d(g(\kappa)) = \frac{dg(\kappa)}{d\kappa} d\kappa, \quad (2.68)$$

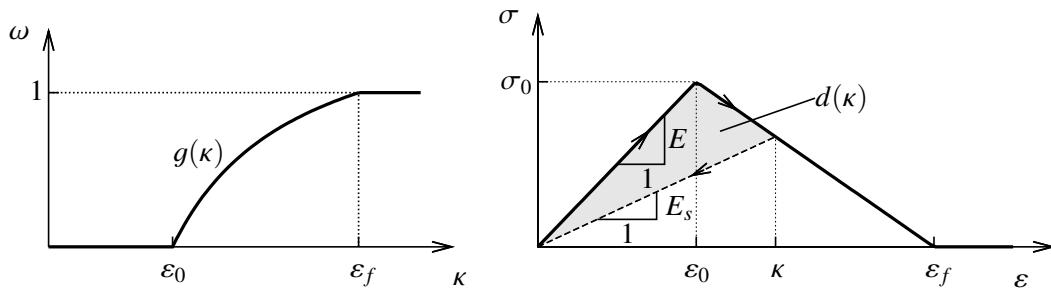
můžeme za pomoci rovnice (2.67) vyjádřit přírůstek disipované energie

$$dd = \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\omega}} d\omega = \frac{1}{2} E \kappa^2 \frac{dg(\kappa)}{d\kappa} d\kappa = \begin{cases} 0 & \text{pro } \kappa < \varepsilon_0 \vee \kappa > \varepsilon_f \\ \frac{1}{2} E \kappa^2 \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_f}{(\varepsilon_f - \varepsilon_0) \kappa^2} d\kappa = \frac{1}{2} E \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_f}{(\varepsilon_f - \varepsilon_0)} d\kappa & \text{pro } \varepsilon_0 < \kappa < \varepsilon_f \end{cases} \quad (2.69)$$

a disipaci v závislosti na proměnné κ

$$d(\kappa) = \int_0^\kappa \frac{1}{2} E \kappa^2 \frac{dg(\kappa)}{d\kappa} d\kappa = \begin{cases} 0 & \text{pro } \kappa \leq \varepsilon_0 \\ \frac{1}{2} E \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_f}{(\varepsilon_f - \varepsilon_0)} (\kappa - \varepsilon_0) & \text{pro } \varepsilon_0 < \kappa < \varepsilon_f \\ \frac{1}{2} E \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_f}{(\varepsilon_f - \varepsilon_0)} (\varepsilon_f - \varepsilon_0) = \frac{1}{2} E \varepsilon_0 \varepsilon_f & \text{pro } \kappa \geq \varepsilon_f \end{cases} \quad (2.70)$$

Poslední z výrazů je hustota celkové disipované energie a dle očekávání odpovídá ploše pod křivkou pracovního diagramu.

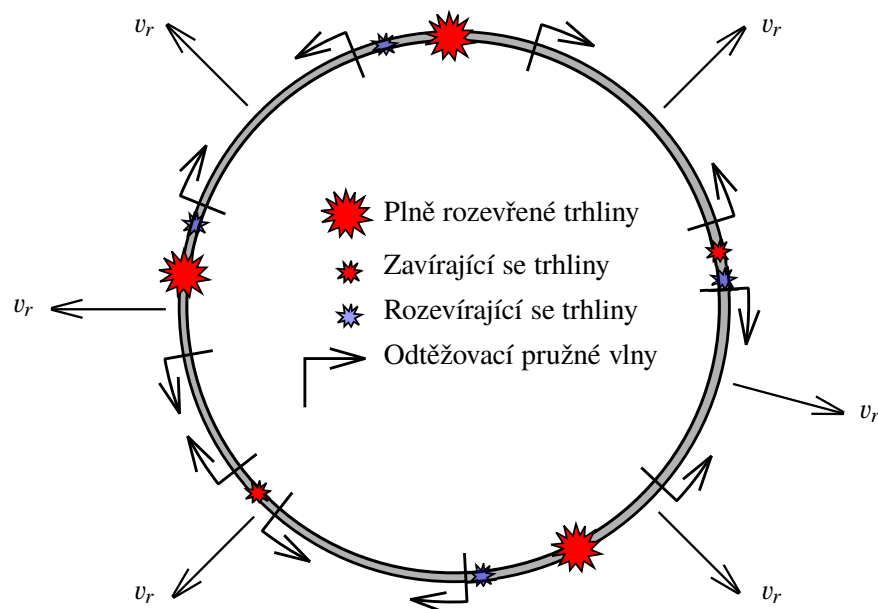


Obrázek 2.1: Uvažovaná funkce vývoje poškození a příslušný pracovní diagram.

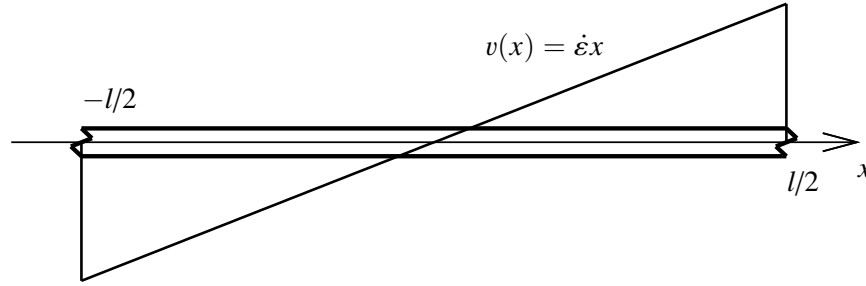
ANALYTICKÉ MODELY

V době, kdy se dynamická fragmentace začala systematicky zkoumat, nebyly ještě moderní numerické metody (např. metoda konečných prvků) rozvinuté. Jako první se tedy k popisu tohoto jevu využívalo různých analytických přístupů, od pouhého shrnutí pozorovaných experimentů přes různé fenomenologické přístupy až po sofistikované teorie založené na energetické bilanci či termodynamických principech. Několik takovýchto metod je stručně odvozeno, shrnuto a porovnáno v této kapitole.

Všechny modely jsou odvozeny pro jednorozměrnou idealizaci rozpínání prstence s poloměrem R (obvodem $L = 2\pi R$) a průřezovou plochou A vyrobeného z materiálu o hustotě ρ , Youngově modulu E , lomové energii G_f a maximálním tahovým napětím σ_0 . Budeme předpokládat, že materiál vykazuje (kvazi)křehké chování při porušování v módu I (při tahovém rozevírání trhlin). Prstencem je vystaven radiální rychlosti v_r a tedy rychlosti deformace $\dot{\epsilon} = v_r/R$. Celý proces je ilustrován na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Schématické znázornění rozpínání prstence dle [34].



Obrázek 3.2: Idealizace stavu fragmentu těsně po vytvoření.

3.1 Energetické teorie

Energetické teorie, jak už název napovídá, jsou založeny na principu bilance či minimalizace energie. Každý z následujících přístupů uvažuje či zanedbává různé druhy energie, všechny mají ale společný základ a společné předpoklady. Uvažujme jednorozměrný prut (idealizaci rozpínaného prstence) s délkou L , průřezovou plochou A , materiálovou tuhostí E a lomovou energií G_f s předepsanou rovnoměrnou rychlostí deformace $\dot{\varepsilon}$. Až do dosažení meze pevnosti se celý prut chová lineárně pružně. Za předpokladu modelování křehkých materiálů idealizují všechny popsané teorie tvorbu trhliny (a tedy i samotné vytvoření fragmentu) jako proces odehrávající se po krátkou dobu a rozložení rychlosti po délce fragmentu tím pádem není ovlivněno a je řízeno rychlostí deformace ($v = \dot{\varepsilon}x$), viz obrázek 3.2. Rychlost je vztažena ke středu nově vytvořeného fragmentu prozatím neznámé délky l .

Než přistoupíme k popisu jednotlivých modelů, vypíšeme pro přehlednost vzorce pro celkové hodnoty jednotlivých druhů energie (označeny velkými písmeny) a jejich průměrné hustoty po délce fragmentu (malými písmeny). Konkrétně pro kinetickou energii vzhledem ke středu prvku

$$K \int_V \frac{1}{2} \rho v^2 dV = \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{2} A \rho \dot{\varepsilon}^2 x^2 dx = \frac{1}{24} A \rho \dot{\varepsilon}^2 l^3,$$

$$k = \frac{K}{V} = \frac{K}{Al} = \frac{1}{24} \rho \dot{\varepsilon}^2 l^2, \quad (3.1)$$

potenciální energii pružné deformace

$$W_e = \int_V \frac{1}{2} E \varepsilon^2 = Al \frac{1}{2} E \dot{\varepsilon}^2 t^2 = Al \frac{1}{2} \frac{\sigma_0^2}{E},$$

$$w_e = \frac{1}{2} E \dot{\varepsilon}^2 t^2 = \frac{1}{2} \frac{\sigma_0^2}{E} \quad (3.2)$$

(σ_0 je napětí na mezi pevnosti) a povrchovou energií nově vytvořeného fragmentu (na dvě čela, každé o ploše A)

$$\Gamma = 2A\gamma = AG_f, \quad \bar{\gamma} = \frac{\Gamma}{V} = \frac{\Gamma}{Al} = \frac{G_f}{l}, \quad (3.3)$$

kde γ je hustota povrchové energie nově vytvořené trhliny a $\bar{\gamma}$ „objemová“ hustota povrchové energie (celková povrchová energie dělená objemem fragmentu). Pro další možná formální zjednodušení zapišme ještě vztah mezi lomovou energií G_f a lomovou houževnatostí K_{IC} pro mód I

(tahové rozevírání trhlin)

$$K_{IC}^2 = EG_f \quad (3.4)$$

a vztah mezi rychlostí pružných vln (Rayleighovou rychlostí) c , hustotou ρ a tuhostí E

$$\rho c^2 = E. \quad (3.5)$$

3.1.1 $K\Gamma$ model (bilance kinetické K a povrchové energie Γ)

Tato teorie předpokládá, že kinetická energie K je mnohem větší než potenciální energie pružné deformace W_e a tudíž je možno druhou jmenovanou ve výpočtu zanedbat [33]. Předpokládá se tedy, že veškerá kinetická energie fragmentu se spotřebuje na jeho vytvoření (všechna kinetická energie K se transformuje na povrchovou energii Γ , odtud označení). Jednoduše porovnáním rovnic (3.1) a (3.3)

$$K = \Gamma \quad \rightarrow \quad \frac{1}{24}A\rho\dot{\epsilon}^2 l^3 = AG_f \quad (3.6)$$

vyjádříme průměrnou velikost fragmentu

$$l_{\text{avg}} = \sqrt[3]{24} \left(\frac{G_f}{\rho\dot{\epsilon}^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.7)$$

Z předpokladu zanedbatelné potenciální energie vůči energii kinetické plyne použitelnost této metody pouze pro vyšší rychlosti deformace (viz obrázek 3.3).

3.1.2 Gradyho model

Gradyho model (viz např. [20, 33, 50]) opět předpokládá, že příspěvek kinetické energie k vytváření nového fragmentu je řádově vyšší, než je příspěvek energie pružné deformace a dále s ní nepočítá. Na rozdíl od rovnováhy v předchozím případě Grady odvodil průměrnou velikost fragmentů z podmínky minimalizace celkové energie (princiálně podobné Yewově odvození, viz kapitolu 3.1.3):

$$\min_l [k + \bar{\gamma}] \quad \rightarrow \quad \frac{\partial (k + \bar{\gamma})}{\partial l} = \frac{\partial \left(\frac{1}{24}\rho\dot{\epsilon}^2 l^2 + \frac{G_f}{l} \right)}{\partial l} = \frac{1}{12}\rho\dot{\epsilon}^2 l - \frac{G_f}{l^2} = 0. \quad (3.8)$$

Z toho obdržíme výraz pro průměrnou velikost fragmentu

$$l_{\text{avg}} \sqrt[3]{12} \left(\frac{G_f}{\rho\dot{\epsilon}^2} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.9)$$

který se od $K\Gamma$ modelu liší $\sqrt[3]{2}$ krát, tzn. přibližně 1,26 krát.

3.1.3 Modifikovaný Yewův – Taylorův model

Prvním vlastním přínosem autora práce k analytickým fragmentačním modelům je tzv. modifikovaný Yew – Taylorův model. Oproti předešlým teoriím vychází z poněkud odlišných předpokladů. Nejprve předpokládá, že k začátku tvorby trhlin (dosažení meze pevnosti materiálu)

dojde po zanedbatelně krátké době vůči celé době fragmentačního procesu. Dalším předpokladem je, že (jak je ukázáno v [19]) doba fragmentace t_c (čas potřebný k vytvoření trhliny) je rovna podílu poloviční délky fragmentu a rychlosti šíření elastických vln

$$t_c = \frac{l}{2c}. \quad (3.10)$$

Společně s předpokladem, že trhliny se plně otevřou až po čase t_c , zapíšeme (s využitím rovnice (3.5)) výraz pro hustotu potenciální energie pružné deformace a hustotu energie kinetické:

$$w_e = \frac{1}{2}E\dot{\varepsilon}^2 t_c^2 = \frac{1}{2}E\dot{\varepsilon}^2 \frac{l^2}{4c^2} = \frac{1}{8}\rho\dot{\varepsilon}^2 l^2, \quad k = \frac{1}{24}\rho\dot{\varepsilon}^2 l^2. \quad (3.11)$$

V původním článku [47], zabývající se obecným trojrozměrným případem, uvažují autoři kinetickou energii zanedbatelnou vzhledem k energii potenciální. Pro speciální jednorozměrný případ (viz rovnici (3.11)) je ale kinetická energie pouze $3\times$ menší, proto byla autorem práce navržena „modifikovaná“ metoda, která započítává i vliv kinetické energie. Předkládaný model má opět dvě varianty – rovnovážnou a minimalizační.

Rovnovážná varianta (pracovně nazvaná Y-T(eq)) jednoduše porovná energii pružné deformace, kinetickou energii a energii povrchovou

$$w_e + k = \bar{\gamma} \rightarrow \frac{1}{8}\rho\dot{\varepsilon}^2 l^2 + \frac{1}{24}\rho\dot{\varepsilon}^2 l^2 = \frac{G_f}{l} \quad (3.12)$$

$$l_{\text{avg}} = \sqrt[3]{6} \left(\frac{G_f}{\rho\dot{\varepsilon}^2} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.13)$$

Tento výraz se od původního Gradyho modelu liší $\sqrt[3]{2}$ krát, tedy přibližně 1,26 krát.

Pro minimalizační verzi zvolili autoři v původním článku Gibbsův termodynamický potenciál (2.31). Zároveň je v [47] ale ukázáno, že pro běžné materiály je člen rovnice obsahující entropii zanedbatelný, výpočet se tedy v konečném důsledku (při původním zanedbání kinetické energie) redukuje na minimalizaci součtu potenciální energie pružné deformace a energie povrchové (srovnej s 3.1.2). V modifikované verzi (pracovně nazvané Y-T(min)) postupujeme obdobně, pouze do minimalizačního procesu zahrneme i člen kinetické energie:

$$\min_l (w_e + k + \bar{\gamma}) \rightarrow \frac{\partial (w_e + k + \bar{\gamma})}{\partial l} = \frac{\partial \left(\frac{1}{8}\rho\dot{\varepsilon}^2 l^2 + \frac{1}{24}\rho\dot{\varepsilon}^2 l^2 + \frac{G_f}{l} \right)}{\partial l} = \frac{1}{3}\rho\dot{\varepsilon}^2 l - \frac{G_f}{l^2} = 0 \quad (3.14)$$

$$l_{\text{avg}} = \sqrt[3]{3} \left(\frac{G_f}{\rho\dot{\varepsilon}^2} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.15)$$

Od Gradyho modelu se tento model odlišuje $\sqrt[3]{4}$ krát, tedy asi 1,59 krát. Jak ale ukazuje graf na obrázku 3.3, pro znázorněný materiál jsou předpovídané hodnoty bližší numerickým výpočtům (obzvláště pro oblast vysoké rychlosti deformace).

3.1.4 Glennův – Chudnovského model

Výsledkem všech předchozích modelů jsou funkce $l_{\text{avg}} = k\dot{\epsilon}^{-2/3}$, kde k je pro všechny modely určeno materiálovými vlastnostmi a liší se pouze o konstantu danou příslušnými předpoklady. Zároveň je z obrázku 3.3 vidět, že pro nízké hodnoty rychlosti deformace tyto metody nevykazují dobrou shodu s numerickými simulacemi.

Další představovaný model autorů Glenna a Chudnovského (pracovně označen G-C, viz např. [16] nebo [33]) uvažuje, stejně jako modifikovaný Yewův – Taylorův model, všechny složky energie. Stav fragmentu těsně po jeho vytvoření je předpokládán podle obrázku 3.2 a hodnota energie pružné deformace je uvažována v okamžiku fragmentace a tedy spočtena z hodnoty napětí rovné pevnosti σ_0 . Opět se porovnává kinetická energie a energie pružné deformace s energií povrchovou:

$$k + w_e = \bar{\gamma} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{24}\rho\dot{\epsilon}^2 l^2 + \frac{1}{2}\frac{\sigma_0^2}{E} - \frac{G_f}{l} = 0$$

$$l^3 + \alpha l - 2\beta = 0, \quad \alpha = \frac{12\sigma_0^2}{\rho E \dot{\epsilon}^2}, \quad \beta = \frac{12G_f}{\rho \dot{\epsilon}^2}. \quad (3.16)$$

Řešením této rovnice je výraz (viz např. [46])

$$l = 2\sqrt{\frac{\alpha}{3}} \sinh\left(\frac{\phi}{3}\right), \quad \text{kde } \phi = \sinh^{-1}\left[\beta\left(\frac{3}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}}\right]. \quad (3.17)$$

Jak je vidět z grafů na obrázku 3.3, dosud jako jediný z prezentovaných modelů se liší od ostatních pro případ nižších rychlostí deformace. Zatímco ostatní modely v této oblasti grafu nadhodnocují průměrnou velikost fragmentů, Glennův – Chudnovského model průměrnou velikost fragmentů naopak podhodnocuje. Možným vylepšením by mohlo být uvažování závislosti meze pevnost materiálu nebo lomové energie na rychlosti deformace (jak je naznačeno v [16]).

3.2 Nový model YTGC

Posledním popsáním analytickým modelem je autorem práce navržený model, kombinující výše zmíněné modely Glenna a Chudnovského a modifikovaný model Yewa a Taylora (odtud zkrácené pojmenování „YTGC“). Jeho předpoklady jsou následující: pro dobu vzniku fragmentu platí Gradyho předpoklad $t_c = l/2c$, avšak tento čas je uvažován velmi krátký, takže se napětí ve vzorku nemění (nebo jen zanedbatelně) a má hodnotu σ_0 , tedy napětí na mezi pevnosti. Přírůstek potenciální energie a energie povrchové za dobu t_c je při uvažování těchto podmínek

$$\Delta w_e = \sigma_0 \dot{\epsilon} t_c = \sigma_0 \dot{\epsilon} \frac{1}{2c} l, \quad \Delta \bar{\gamma} = \frac{G_f}{l} \quad (3.18)$$

Porovnáním obou energií (tedy uvažováním, že pouze přírůstek energie pružné deformace je transformován na energii povrchovou)

$$\Delta w_e = \Delta \bar{\gamma} \quad \rightarrow \quad \sigma_0 \dot{\epsilon} \frac{1}{2c} l = \frac{G_f}{l} \quad \rightarrow \quad l_{\text{avg}} = \sqrt{\frac{2G_f c}{\sigma_0 \dot{\epsilon}}} \quad (3.19)$$

nebo minimalizací součtu obou energií

$$\min_l (\Delta w_e + \Delta \bar{\gamma}) \rightarrow \frac{\partial (\Delta w_e + \Delta \bar{\gamma})}{\partial l} = \frac{\partial \left(\sigma_0 \dot{\epsilon} \frac{1}{2c} l + \frac{G_f}{l} \right)}{\partial l} = \frac{\sigma_0 \dot{\epsilon}}{2c} - \frac{G_f}{l^2} = 0 \quad (3.20)$$

$$l_{\text{avg}} = \sqrt{\frac{2G_f c}{\sigma_0 \dot{\epsilon}}} \quad (3.21)$$

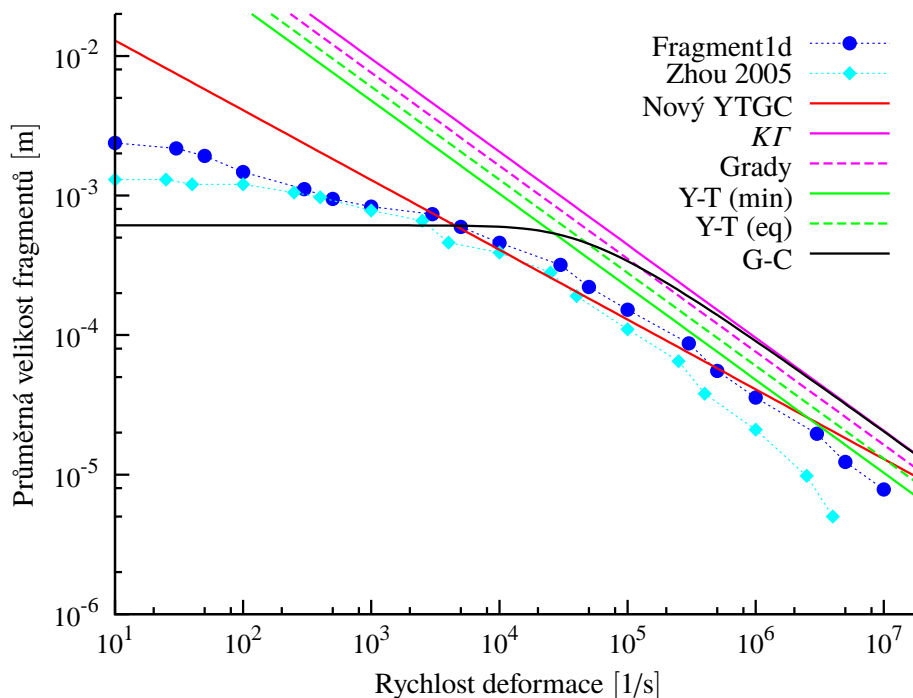
dostaneme shodný výsledek. Jak je patrné v grafu na obrázku 3.3, ve střední oblasti grafu má s numerickými výsledky pro daný materiál nejlepší shodu.

3.3 Porovnání modelů

Pro porovnání je uvažován keramický materiál, jehož materiálové vlastnosti dle [50] jsou znázorněny v tabulce 3.3. Z grafu je patrné, že modely KI , Gradyho, Y-T(eq) a Y-T(min) dávají velice podobné výsledky (alespoň co se tvaru grafu týče). Jejich shoda s numerickými výsledky (získanými v průběhu tvorby práce i přebranými z odborné literatury) se dle pořadí, v jakém zde byly vyjmenovány, zlepšuje a pro vysoké hodnoty rychlosti deformace ($\dot{\epsilon} > 10^5 \text{ s}^{-1}$) vystihují trend vývoje průměrné velikosti fragmentů poměrně rozumně, pro levou oblast grafu jsou ale výsledky nadhodnoceny. Použitelnost těchto modelů je tedy omezena jen na vyšší hodnoty rychlosti deformace. Model G-C se od ostatních modelů odlišuje pro nižší hodnoty rychlosti deformace (tam kde ostatní modely výsledky nadhodnocují), průměrná velikost fragmentů je ale naopak podhodnocena. Pro hodnoty rychlosti deformace 10^3 s^{-1} až 10^7 s^{-1} vykazuje autorem práce navržený nový model YTGC nejlepší shodu s numerickými výsledky, pro vyšší hodnoty se ale zdá lepší použít (také autorem práce navržený) model Y-T(min). Viz graf na obrázku 3.3.

Tabulka 3.1: Uvažované materiálové vlastnosti pro porovnání analytických modelů dle [50].

Parametr	Označení	Hodnota
Youngův modul	E	275 GPa
Objemová hmotnost	ρ	2750 kgm^{-3}
Lomová energie	G_f	100 Nm^{-1}
Mezní napětí	σ_0	300 MPa



Obrázek 3.3: Porovnání analytických modelů a numerických výsledků:

- Fragment1d – naše numerické výsledky
- Nový YTGC – Nový model YTGC
- Zhou 2005 – numerické výsledky dle [50]
- $K\Gamma$ – $K\Gamma$ model (bilance kinetické a povrchové energie)
- Grady – Gradyho model
- Y-T(min) – modifikovaný Yewův – Taylorův model (minimalizační verze)
- Y-T(eq) – modifikovaný Yewův – Taylorův model (rovnovážná verze)
- G-C – Glennův – Chudnovského model.

NUMERICKÉ ŘEŠENÍ

Analytické modely předpovídají hůře či lépe průměrnou velikost fragmentů, ale na některé další otázky fragmentačního procesu (rozdělení velikosti fragmentů, disipovaná energie apod.) buď nedokáží vůbec odpovědět, anebo je k uspokojivé předpovědi potřeba velký počet experimentálních měření. Numerické metody naopak při vhodném nastavení a užívání umožňují detailní studium fyzikálního pozadí dynamické fragmentace a sledování vlivu různých faktorů na její průběh a výsledky.

V rámci diplomové práce byla numericky řešena úloha dynamické fragmentace prstence vystaveného vysokým hodnotám radiální rychlosti (popsaná v kapitole 3). Tato kapitola se věnuje popisu samotné úlohy (modelové idealizaci, okrajovým a počátečním podmínkám atp.) a odvození numerického řešení pomocí metody konečných prvků (MKP). Ve druhé části je poté vysvětleno zavedení prostorové korelace materiálových vlastností pomocí Karhunenova – Loveho rozkladu, pro který je ukázáno obecné numerické řešení (použitelné na obecnou oblast s obecnou kovarianční funkcí) a dále analytické řešení pro speciální jednorozměrný případ s exponenciální kovarianční funkcí.

4.1 Popis řešené úlohy

Numericky řešená úloha v této práci simuluje fragmentaci kruhového prstence (resp. válcové skořepiny) dle [18, 32, 34, 51] a je modelována jako jednorozměrný prut [13, 21, 33], matematicky interval $L: x \in \langle -a; a \rangle$ s hranicí $S: x = \{-a, a\}$ (modelovaná oblast tedy představuje z prstence vyjmutou část délky L). Jednorozměrností máme na mysli nezávislost veličin na prostorových souřadnicích y a z a také to, že nebudeme ve výpočtech pracovat se složkami tenzorů příslušejícím těmto souřadnicím, takže

$$\begin{aligned} \underline{u}(x, y, z, t) &\rightarrow u_x(x, t) \equiv u(x, t), & \underline{\underline{\varepsilon}}(x, y, z, t) &\rightarrow \varepsilon_{xx}(x, t) \equiv \varepsilon(x, t), \\ & & \underline{\underline{\sigma}}(x, y, z, t) &\rightarrow \sigma_{xx}(x, t) \equiv \sigma(x, t), \end{aligned} \tag{4.1}$$

$$\int_{y(x)} \int_{z(x)} \sigma(x, t) \, dx \, dz = \int_{A(x)} \sigma(x, t) \, dA = A(x) \sigma(x, t) = N(x, t).$$

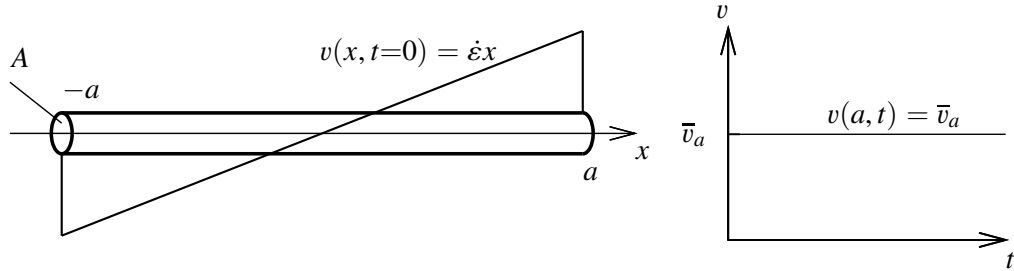
Modelovaný prut je po celou dobu simulace makroskopicky vystaven předepsané rovnoměrné rychlosti deformace $\bar{\varepsilon}$. Rychlost $v = \dot{u}$ v bodě x a v čase $t = 0$ je určena počáteční podmínkou

$$v(x, t=0) = \bar{\varepsilon}x. \quad (4.2)$$

Aby byla předepsaná rychlost deformace makroskopicky zachována, poloha (posun u) krajních bodů (se souřadnicemi a a $-a$) je řízena okrajovými podmínkami

$$\begin{aligned} u(a, t) &= \bar{u}(a, t) = t\bar{\varepsilon}L/2, \\ u(-a, t) &= \bar{u}(-a, t) = -t\bar{\varepsilon}L/2, \end{aligned} \quad (4.3)$$

a tedy $S = S_u$, kde S_u je část hranice s předepsanými posuny, viz obr. 4.1.



Obrázek 4.1: Schématické znázornění idealizace úlohy a počáteční a okrajové podmínky.

Celá úloha je řízena soustavou geometrických (kinematických) rovnic (2.4)

$$\varepsilon(x, t) = \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}, \quad (4.4)$$

konstitutivních či materiálových rovnic (2.59)

$$\sigma(x, t) = E_s(x, t)\varepsilon(x, t),$$

$$N(x, t) = \int_{A(x)} \sigma(x, t) dA = A(x)\sigma(x, t) = E_s(x, t)A(x)\varepsilon(x, t), \quad (4.5)$$

a rovnovážných rovnic (za předpokladu absence objemových sil) (2.17)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma(x, t)}{\partial x} - \rho(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = 0 &\rightarrow \int_{A(x)} \frac{\partial \sigma(x, t)}{\partial x} dA - \int_{A(x)} \rho(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} dA = 0 \\ \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} - \mu(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = 0, \end{aligned} \quad (4.6)$$

kde $E_s(x, t) = [1 - \omega(x, t)H(\varepsilon(x, t))]E$ je sečný modul pružnosti, ε je relativní deformace, A průřezová plocha, σ napětí, N normálová síla, ρ hustota, μ délková hmotnost (hmotnost na jednotku délky), ω poškozování a $H(*)$ Heavisideova funkce.

Spojením výše popsaných rovnic dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(E_s(x, t) A(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) - \mu(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = 0. \quad (4.7)$$

Pole posunutí $u(x, t)$ splňující tuto rovnici ve všech bodech a časech a navíc splňující okrajové podmínky (4.3) nazveme *silným* řešením. V rovnici (4.7) si povšimneme druhé derivace pole posunutí podle prostorových souřadnic.

4.2 Metoda konečných prvků

Metoda konečných prvků je matematický nástroj pro přibližné řešení (soustav) parciálních diferenciálních rovnic. Kompletní teorii této metody se zabývá například [4, 5], zde je ukázáno pouze jednoduché odvození pro jednorozměrnou úlohu použitou v další analýze.

4.2.1 Slabé řešení

Pokud je rovnice (4.7) rovna nule ve všech bodech a časech, musí být rovna nule i po přenásobení libovolnou (testovací, váhovou) funkcí $\delta u(x, t)$ a po integraci přes celou oblast L :

$$\int_L \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(E_s A(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) - \mu(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \right) \delta u(x, t) dx = 0. \quad (4.8)$$

Nyní silné řešení „oslabíme“, tzn. že nepožadujeme striktní splnění rovnice (4.7), ale požadujeme splnění rovnice (4.8) pro všechny funkce $\delta u(x, t)$. Po integraci per-partes prvního členu levé strany

$$\begin{aligned} & \int_L \frac{\partial}{\partial x} \left(E_s(x, t) A(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) \delta u(x, t) dx = \\ & = E_s(x, t) A(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \delta u(x, t) \Big|_S - \int_L E_s(x, t) A(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \delta u(x, t)}{\partial x} dx \end{aligned} \quad (4.9)$$

a zavedení předpokladu, že funkce $\delta u(x, t)$ je virtuální posunutí (variace skutečného posunutí) a tedy nulová na části hranice S_u , kde je posun předepsán (na celé hranici v našem konkrétním příkladě), můžeme rovnici (4.8) přepsat do tvaru

$$\int_L \frac{\partial \delta u(x, t)}{\partial x} E_s(x, t) A(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} dx + \int_L \delta u(x, t) \mu(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} dx = 0, \quad (4.10)$$

což může být chápáno jako zápis pro rovnost mezi virtuální prací setrvačných sil a virtuální prací vnitřních sil (prací skutečných sil na virtuálních posunutích) a tedy princip virtuálních posunutí (PVP). Pole posunutí $u(x, t)$ splňující rovnici (4.10) pro všechny funkce $\delta u(x, t)$ (kde $\delta u(x, t)|_S = 0$) a splňující podmínku $u(x, t)|_S = \bar{u}(x, t)|_S$ nazveme *slabým* řešením. Povšimněme si pouze první derivace pole posunutí podle prostorových souřadnic.

Tato forma rovnice dovoluje flexibilní numerické řešení. Jedna z nejpoužívanějších numerických metod je metoda konečných prvků, která aproximuje funkci řešení i testovací funkce ve speciálním tvaru na jednotlivých prvcích, tj. diskretních podoblastech původního problému. Pokud je řešený problém časově závislý, může se diskretizovat celá časoprostorová oblast, anebo je prostorová a časová diskretizace provedena nezávisle. V této práci je použit druhý přístup.

4.2.2 Prostorová diskretizace

Oblast L rozdělíme na konečně prvkovou síť (viz obr. 4.2) a řešení a testovací funkce na jednotlivých prvcích budeme aproximovat ve tvaru

$$u^e(x, t) \approx [N^e](x)\{r^e\}(t), \quad \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \approx \frac{\partial [N^e](x)}{\partial x}\{r^e\}(t) = [B^e](x)\{r^e\}(t), \quad (4.11)$$

$$\delta u^e(x, t) \approx [N^e](x)\{\delta u^e\}(t), \quad \frac{\partial \delta u(x, t)}{\partial x} \approx \frac{\partial [N^e](x)}{\partial x}\{\delta u^e\}(t) = [B^e](x)\{\delta u^e\}(t), \quad (4.12)$$

kde index e značí příslušnost k určitému prvku, $[N^e]$ je matice aproximačních funkcí prvku e , $[B^e]$ matice derivací aproximačních funkcí (geometrická matice), $\{r^e\}$ vektor uzlových hodnot aproximace funkce $u(x, t)$ na prvku e a $\{\delta u^e\}$ vektor uzlových hodnot aproximace testovací funkce $\delta u(x, t)$ na prvku e .

Dosazením této aproximace do rovnice (4.10) můžeme psát

$$\sum_e \left[\int_{L^e} ([B^e](x)\{\delta u^e\}(t))^T E_s(x, t) A(x) [B^e](x)\{r^e\}(t) dx + \int_{L^e} ([N^e](x)\{\delta u^e\}(t))^T \mu(x) [N^e](x)\{\ddot{r}^e\}(t) dx \right] = 0, \quad (4.13)$$

$$\sum_e \{\delta u^e\}^T(t) \left[\int_{L^e} [B^e]^T(x) E_e(x, t) A(x) [B^e](x) dx \{r^e\}(t) + \int_{L^e} [N^e]^T(x) \mu(x) [N^e](x) dx \frac{\partial^2 \{r^e\}(t)}{\partial t^2} \right] = 0, \quad (4.14)$$

$$\sum_e \{\delta u^e\}(t) ([K^e](t)\{r^e\}(t) + [M^e]\{\ddot{r}^e\}(t)) = 0, \quad (4.15)$$

$$\{\delta u\}(t) ([K](t)\{r\}(t) + [M]\{\ddot{r}\}(t)) = 0, \quad (4.16)$$

kde L^e je oblast prvku e a $[K^e]$ a $[M^e]$ jsou matice tuhosti a matice hmotnosti prvku e . Poslední výraz je zapsán po sumaci přes všechny prvky v globální podobě. Vektory a matice $\{\delta u\}$, $\{r\}$, $[K]$, $[M]$ jsou globální vektor uzlových hodnot aproximací testovacích funkcí a pole posunutí, globální matice tuhosti a globální matice hmotnosti. Rovnice (4.16) musí být splněna pro libovolný testovací vektor $\{\delta u\}(t)$, musí tedy platit

$$[K](t)\{r\}(t) + [M]\{\ddot{r}\}(t) = \{0\}. \quad (4.17)$$

Na jednotlivých prvcích budeme uvažovat lineární aproximaci pole posunutí, tzn. že každý prvek e bude mít dva uzly se souřadnicemi x_1^e a x_2^e a aproximační funkce budou mít tvar

$$[N^e](x) = [N_1(x), N_2(x)] = \left[\frac{x_2^e - x}{l^e}, \frac{x - x_1^e}{l^e} \right], \quad l^e = x_2 - x_1 \quad (4.18)$$

$$[B^e] = \frac{\partial [N^e](x)}{\partial x} = \left[\frac{\partial N_1(x)}{\partial x}, \frac{\partial N_2(x)}{\partial x} \right] = \left[-\frac{1}{l^e}, \frac{1}{l^e} \right]. \quad (4.19)$$

Materiálové vlastnosti a vnitřní proměnné budeme na prvku aproximovat konstantní hodnotou rovnou hodnotě dané veličiny uprostřed prvku (pro jednorozměrnou úlohu a lineární aproximaci prostředek prvku odpovídá integračnímu bodu), tedy

$$E_s^e(x, t) \approx E_s^e \left(\frac{x_2^e + x_1^e}{2}, t \right) \equiv E_s^e(t), \quad A^e(x) \approx A^e \left(\frac{x_2^e + x_1^e}{2} \right) \equiv A^e$$

$$\mu^e(x) \approx \mu^e \left(\frac{x_2^e + x_1^e}{2} \right) \equiv \mu^e, \quad \omega^e(x, t) \approx \omega^e \left(\frac{x_2^e + x_1^e}{2}, t \right) \equiv \omega^e(t) \quad (4.20)$$

Dle rovnice (4.14) vyjádříme matici tuhosti jednotlivých prvků (kde $k^e(t) \equiv k_{12}^e(t)$)

$$[K^e](t) = \int_{x_1^e}^{x_2^e} [B^e]^T(x) E_s^e(t) A^e [B^e](x) dx = E_s^e(t) A^e \int_{x_1^e}^{x_2^e} \begin{bmatrix} -\frac{1}{l^e} \\ \frac{1}{l^e} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{l^e} & \frac{1}{l^e} \end{bmatrix} dx =$$

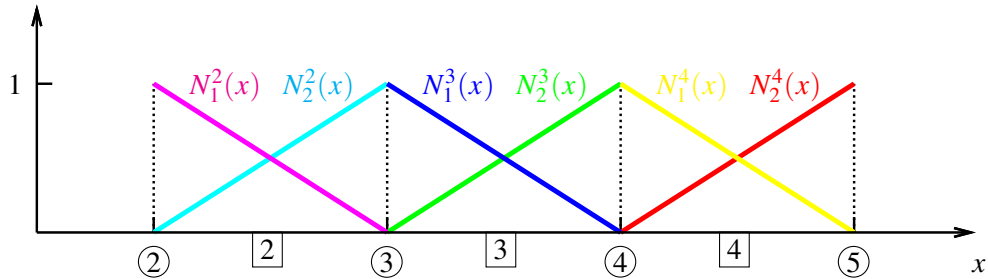
$$= E_s^e(t) A^e \begin{bmatrix} \frac{1}{l^e} & -\frac{1}{l^e} \\ -\frac{1}{l^e} & \frac{1}{l^e} \end{bmatrix} \int_{x_1^e}^{x_2^e} dx = \frac{E_s^e(t) A^e}{l^e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = k^e(t) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

a matici hmotnosti jednotlivých prvků

$$[M^e] = \int_{x_1^e}^{x_2^e} [N^e]^T(x) \mu^e [N^e](x) dx = \mu^e \int_{x_1^e}^{x_2^e} \begin{bmatrix} \frac{x_2^e - x}{l^e} \\ \frac{x - x_1^e}{l^e} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{x_2^e - x}{l^e} & \frac{x - x_1^e}{l^e} \end{bmatrix} dx =$$

$$= \mu^e \int_{x_1^e}^{x_2^e} \begin{bmatrix} \frac{(x_2^e - x)^2}{l^e} & \frac{(x - x_1^e)(x_2^e - x)}{l^e} \\ \frac{(x - x_1^e)(x_2^e - x)}{l^e} & \frac{(x - x_1^e)^2}{l^e} \end{bmatrix} dx = \frac{\mu^e l^e}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Takto definovaná matice hmotnosti se nazývá *konzistentní*.



Obrázek 4.2: Prostorová diskretizace úlohy a lineární aproximační funkce.

$$= \dot{a} + \Delta t \dot{a} + \Delta t^2 \left(\beta \ddot{a} + \left(\frac{1}{2} - \beta \right) \ddot{a} \right) - \Delta t^2 \beta \left(\ddot{a}^{t+} - \ddot{a} \right) + O(\Delta t^3). \quad (4.26)$$

Po využití rovnice (4.25) na poslední dva členy

$$-\Delta t^2 \beta \left(\ddot{a}^{t+} - \ddot{a} \right) + O(\Delta t^3) = \underbrace{\Delta t^2 \beta \Delta t \dot{\ddot{a}}}_{O(\Delta t^3)} + \underbrace{\Delta t^2 \beta O(\Delta t^2)}_{O(\Delta t^4)} + O(\Delta t^3) \quad (4.27)$$

a zanedbání členů, kde se vyskytuje Δt ve třetí a vyšší mocnině, můžeme psát

$$\dot{a}^{t+} \approx \dot{a} + \Delta t \dot{a} + \Delta t^2 \left(\beta \ddot{a} + \left(\frac{1}{2} - \beta \right) \ddot{a} \right). \quad (4.28)$$

Pro vyjádření první derivace funkce a je postup analogický, pouze zanedbáváme již členy, kde je Δt ve druhé a vyšší mocnině:

$$\ddot{a}^{t+} = \ddot{a} + \Delta t \ddot{a} + O(\Delta t^2), \quad (4.29)$$

$$\ddot{a}^{t+} = \ddot{a} + \Delta t \ddot{a} + O(\Delta t^2) \quad \rightarrow \quad \ddot{a}^{t+} - \ddot{a} = \Delta t \ddot{a} + O(\Delta t^2), \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \dot{a}^{t+} &= \dot{a} + \Delta t \dot{a} + \Delta t \gamma \ddot{a} + \Delta t \gamma \ddot{a} - \Delta t \gamma \ddot{a}^{t+} - \Delta t \gamma \ddot{a} + O(\Delta t^2) = \\ &= \dot{a} + \Delta t \left(\gamma \ddot{a} + (1 - \gamma) \ddot{a} \right) - \Delta t \gamma \left(\ddot{a}^{t+} - \ddot{a} \right) + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$-\Delta t \gamma \left(\ddot{a}^{t+} - \ddot{a} \right) + O(\Delta t^2) = \underbrace{\Delta t \gamma \Delta t \dot{\ddot{a}}}_{O(\Delta t^2)} + \underbrace{\Delta t \gamma O(\Delta t^2)}_{O(\Delta t^3)} + O(\Delta t^2), \quad (4.32)$$

$$\dot{a}^{t+} \approx \dot{a} + \Delta t \left(\gamma \ddot{a} + (1 - \gamma) \ddot{a} \right), \quad (4.33)$$

kde γ je opět reálný parametr.

Oba parametry β i γ je možno různě kombinovat a získat tak mnoho způsobů numerické integrace. Pro naše účely zvolíme $\beta = 0$ a $\gamma = 1/2$:

$$\dot{a}^{t+} \approx \dot{a} + \dot{a} \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{a} \Delta t^2, \quad (4.34)$$

$$\ddot{a}^{t+} \approx \ddot{a} + \frac{1}{2} \Delta t \left(\dot{\ddot{a}} + \ddot{a} \right), \quad (4.35)$$

což je explicitní vyjádření funkce a (hodnota v čase $t+$ je vyjádřena výhradně z hodnot v čase t). Aplikováno na naši MKP rovnici (4.17):

$$\{r\}^{t+} = \{r\} + \{\dot{r}\} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \{\ddot{r}\}, \quad (4.36)$$



Obrázek 4.4: Předpokládané číslování uzlů a prvků.

Použitím rovnice (4.5)

$$\sigma^e = E_s^e \varepsilon^e = \frac{E_s^e}{l^e} (r_2^e - r_1^e), \quad E_s^e = (1 - \omega^e H(\varepsilon^e)) E^e, \quad \sigma^i = \frac{E_s^i}{l^i} (r_j - r_i), \quad (4.43)$$

$$N^e = A^e \sigma^e = \frac{E_s^e A^e}{l^e} (r_2^e - r_1^e), \quad N^i = \frac{E_s^i A^i}{l^i} (r_j - r_i) = k^i (r_j - r_i). \quad (4.44)$$

Dle rovnic (4.23), (4.41) a (4.44) můžeme napsat

$$\begin{aligned} \ddot{r}_k &= -\frac{1}{[M]_{kk}} \sum_a [K]_{ka} r_a = -\frac{1}{m_k} ([K]_{kj} r_j + [K]_{kk} r_k + [K]_{kl} r_l) = \\ &= -\frac{1}{m_k} (-k_{jk} r_j + (k_{jk} + k_{kl}) r_k - k_{kl} r_l) = -\frac{1}{m_k} (-k^j r_j + (k^j + k^k) r_k - k^k r_l) = \\ &= \frac{1}{m_k} (k^k (r_l - r_k) - k^j (r_k - r_j)) = \frac{1}{m_k} (N^k - N^j) = \frac{1}{m_k} (\bar{A}^k \sigma^k - \bar{A}^j \sigma^j) \end{aligned} \quad (4.45)$$

Soustava těchto rovnic a rovnic (4.36) a (4.38) společně s konstitutivními vztahy (4.51) a (4.52) je velice snadno řešitelná a vhodná k počítačové implementaci, viz kapitolu 5.

4.2.5 MKP a mechanika poškození

Nyní jediné, co zbývá dořešit, je konkrétní podoba funkce vývoje poškození $g(\kappa)$, resp. (jak se ukáže vzápětí) hodnota parametru ε_f . Pro materiál budeme uvažovat tři nezávislé materiálové konstanty: Youngův modul pružnosti E , tahovou pevnost $\sigma_0 = E\varepsilon_0$ (případně ekvivalentně mezní pružné přetvoření ε_0) a lomovou energii G_f (množství disipované energie vztahované k jednotce plochy nově vytvořené trhliny při porušení vzorku), případně ekvivalentně Irwinovu charakteristickou délku

$$l_l = \frac{EG_f}{\sigma_0^2} = \frac{1}{2\varepsilon_0} \frac{2G_f}{\sigma_0} \frac{E\varepsilon_0}{E\varepsilon_0} = \frac{w_f}{2\varepsilon_0} \quad (4.46)$$

kde $w_f = 2G_f/\sigma_0$ symbolizuje rozevření fiktivní trhliny při porušení.

V MKP výpočtu s lineární aproximací uvažujeme poškození ω (symbolizující přítomnost trhlín) konstantní (tedy jaksi „rozetřené“) po celém prvku. Přístup je dle toho nazýván modelem s rozetřenými trhlínami. Taktéž hustota disipované energie d (přímo závislé na hodnotě poškození) bude po prvku konstantní a celková disipovaná energie D_f při úplném porušení prvku (2.70)

$$D_f^e = d_f^e l^e A^e = \frac{1}{2} \sigma_0^e \varepsilon_f^e l^e A^e. \quad (4.47)$$

V materiálu úplnou disipací („zmizením“) prvku e fiktivně vznikne trhlina o ploše A^e , materiál má tedy lomovou energii

$$G_f^e = \frac{D_f^e}{A^e} = \frac{1}{2} \sigma_0^e \varepsilon_f^e l^e. \quad (4.48)$$

Jediný zatím nedefinovaný parametr ve výrazu (4.48) je ε_f^e :

$$\varepsilon_f^e = \frac{2G_f^e}{\sigma_0^e l^e} = \frac{w_f^e}{l^e}, \quad (4.49)$$

Aby řešení nebylo nestabilní, nesmí docházet ke „snapbacku“ (sestupná větev pracovního diagramu se po dosažení tahové pevnosti nesmí vracet zpět k nule „doleva“ nýbrž pokračovat „doprava“), tzn. $\varepsilon_f > \varepsilon_0$ a tedy největší přípustná velikost prvku je omezena výrazem

$$e_f = \frac{w_f^e}{l^e} > \varepsilon_0 \rightarrow l_{\max}^e = \frac{w_f^e}{\varepsilon_0}. \quad (4.50)$$

Z rovnic (4.49) a (2.66) plyne

$$\omega^e = g^e \left(\kappa^e \right) = \begin{cases} 0 & \text{pro } \kappa^e \leq \varepsilon_0^e \\ 1 - \frac{\varepsilon_0^e}{\varepsilon_f^e - \varepsilon_0^e} \frac{\varepsilon_f^e - \kappa^e}{\kappa^e} & \text{pro } \varepsilon_0^e < \kappa^e < \varepsilon_f^e \\ 1 & \text{pro } \kappa^e \geq \varepsilon_f^e \end{cases}, \quad \kappa^e = \max_{\tau < t} \left(\varepsilon^\tau \right) \quad (4.51)$$

$$E_s^e = \left(1 - \omega^e H \left(\varepsilon^e \right) \right) E^e \quad (4.52)$$

4.3 Prostorová korelace materiálových vlastností

V mnoha úlohách je možné v modelu uvažovat materiál či těleso, jejichž vlastnosti jsou shodné ve všech bodech prostoru. Řešení některých úloh se tím ale stává nestabilním (například statická tahová zkouška prutového vzorku s poškozením) a někdy i fyzikálně nesmyslným. Je proto vhodné (popřípadě i nutné) materiálové vlastnosti alespoň drobně perturbovat. Nejjednodušší možností je tyto vlastnosti zvolit ve všech uvažovaných bodech (v MKP se jedná o uzly nebo prvky) zcela náhodně. Obvykle odpadne nesnáž s nestabilitou úlohy, fyzikální adekvátnost je ale stále diskutabilní, obzvláště při vyšší hustotě sítě numerického řešení, kdy má materiál bod od bodu zcela rozdílné (nekorelované) vlastnosti.

Jednou z možností je uvažovat prostorovou korelaci vlastností popsanou například v [15]. V tělese B s objemem V uvažujme skalární vlastnost y . V dokonalém případě má tato vlastnost stejnou hodnotu ve všech bodech prostoru, tedy $y(\underline{x}) = y_0$. Pokud ale uvažujeme stochasticitu (náhodnost) veličiny y , vyjádříme ji jako závislou (kromě prostorových souřadnic) také na náhodné proměnné θ , tedy $y = y(\underline{x}, \theta)$. Takovou funkci nazveme náhodným procesem. V nejobecnějším případě je možno náhodný proces vyjádřit jako součet nekonečně mnoha součinů

$$y = y(\underline{x}, \theta) = \sum_{i=1}^{\infty} g_i(\underline{x}) \mu_i(\theta) \quad (4.53)$$

obecných deterministických funkcí $g_i(\underline{x})$ a vzájemně ortogonálních obecných náhodných veličin $\mu_i(\theta)$, pro podrobnosti viz [15]. Ortogonalita náhodné veličiny znamená

$$E\langle\mu_i(\theta)\mu_j(\theta)\rangle = 0 \text{ pro } i \neq j. \quad (4.54)$$

$E\langle*\rangle$ značí střední hodnotu veličiny *. Náhodný proces $y(\underline{x}, \theta)$ má střední hodnotu

$$\bar{y}(\underline{x}) = E\langle y(\underline{x}, \theta) \rangle = E\left\langle \sum_{i=1}^{\infty} g_i(\underline{x})\mu_i(\theta) \right\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} E\langle g_i(\underline{x})\mu_i(\theta) \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} g_i(\underline{x})E\langle\mu_i(\theta)\rangle \quad (4.55)$$

a kovarianční funkci

$$\begin{aligned} C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) &= E\langle (y(\underline{x}_1, \theta) - E\langle y(\underline{x}_1, \theta) \rangle) (y(\underline{x}_2, \theta) - E\langle y(\underline{x}_2, \theta) \rangle) \rangle = \\ &= E\langle y(\underline{x}_1, \theta) y(\underline{x}_2, \theta) \rangle - E\langle y(\underline{x}_1, \theta) \rangle E\langle y(\underline{x}_2, \theta) \rangle = \\ &= E\left\langle \left(\sum_{i=1}^{\infty} g_i(\underline{x}_1) \mu_i(\theta) \right) \left(\sum_{j=1}^{\infty} g_j(\underline{x}_2) \mu_j(\theta) \right) \right\rangle - \bar{y}(\underline{x}_1) \bar{y}(\underline{x}_2) = \\ &= E\left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} g_i(\underline{x}_1) \mu_i(\theta) g_j(\underline{x}_2) \mu_j(\theta) \right\rangle - \bar{y}(\underline{x}_1) \bar{y}(\underline{x}_2) = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} g_i(\underline{x}_1) g_j(\underline{x}_2) E\langle\mu_i(\theta) \mu_j(\theta)\rangle - \bar{y}(\underline{x}_1) \bar{y}(\underline{x}_2), \end{aligned} \quad (4.56)$$

kteřou za použití rovnice (4.54) můžeme ještě zjednodušit na

$$C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \sum_{i=1}^{\infty} g_i(\underline{x}_1) g_i(\underline{x}_2) E\langle\mu_i^2(\theta)\rangle - \bar{y}(\underline{x}_1) \bar{y}(\underline{x}_2). \quad (4.57)$$

Z definice je kovarianční funkce omezená, symetrická a pozitivně definitní [15]. Tím pádem pro ni existuje spektrální rozklad

$$C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n f_n(\underline{x}_1) f_n(\underline{x}_2), \quad (4.58)$$

kde λ_n a $f_n(\underline{x})$ jsou vlastní čísla a vlastní funkce integrálního kovariančního operátoru, tzn. řešení integrální rovnice

$$\int_V C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) f_n(\underline{x}) d\underline{x}_1 = \lambda_n f_n(\underline{x}_2). \quad (4.59)$$

Díky symetrii a pozitivní definitnosti kovarianční funkce jsou její vlastní funkce vzájemně ortogonální. Dále budeme uvažovat pouze funkce normované tak, že

$$\int_V f_n(\underline{x}) f_m(\underline{x}) d\underline{x} = \delta_{mn}, \quad (4.60)$$

kde δ_{mn} je Kroneckerovo delta.

4.3.1 Karhunenův – Loeveho rozklad

Karhunenův – Loeveho (KL) rozklad uvažuje náhodný proces rozložený dle (4.53) a deterministické funkce $g_i(x)$ definuje ve speciálním tvaru

$$g_i(x) = \sqrt{\lambda_i} f_i(x), \quad (4.61)$$

kde λ_i a $f_i(x)$ jsou vlastní čísla a vlastní funkce kovariančního operátoru dle rovnic (4.58) a (4.59) a normované dle rovnice (4.60). Celý proces $y(\underline{x}, \theta)$ je pak vyjádřen vztahem

$$y(\underline{x}, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} f_n(\underline{x}) \mu_n(\theta). \quad (4.62)$$

KL rozklad se někdy též nazývá rozklad podle vlastních čísel a vektorů.

Pro zjednodušení rozdělíme proces $y(\underline{x}, \theta) = \bar{y}(\underline{x}) + \alpha(\underline{x}, \theta)$ na součet jeho střední hodnoty $\bar{y}(\underline{x})$ a jiného náhodného procesu $\alpha(\underline{x}, \theta)$ s nulovou střední hodnotou, kovarianční funkcí $C(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$ shodnou s původním procesem $y(\underline{x}, \theta)$ a tedy KL rozkladem

$$\alpha(\underline{x}, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} f_n(\underline{x}) \xi_n(\theta). \quad (4.63)$$

kde λ_n a $f_n(\underline{x})$ byly diskutovány dříve a jediné co zbývá určit jsou charakteristiky $\xi_n(\theta)$, opět vzájemně ortogonálních náhodných proměnných (obecně různých od původních náhodných proměnných $\mu(\theta)$ z rovnice (4.62)). Dle předpokladu nulové střední hodnoty procesu $\alpha(\underline{x}, \theta)$ a rovnic (4.55) a (4.63) můžeme psát

$$\begin{aligned} E\langle \alpha(\underline{x}, \theta) \rangle &= E\left\langle \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} f_n(\underline{x}) \xi_n(\theta) \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} f_n(\underline{x}) E\langle \xi_n(\theta) \rangle = 0 \quad \rightarrow \\ &\rightarrow E\langle \xi_n(\theta) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (4.64)$$

Po vynásobení rovnice (4.63) výrazem $\alpha(\underline{x}_2, \theta)$, zprůměrováním obou stran (průměrováním je myšlena operace, jejímž výsledkem je střední hodnota) a použitím rovnice (4.56) dostaneme

$$C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = E\langle \alpha(\underline{x}_1, \theta) \alpha(\underline{x}_2, \theta) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} E\langle \xi_n(\theta) \xi_m(\theta) \rangle \sqrt{\lambda_n \lambda_m} f_n(\underline{x}_1) f_m(\underline{x}_2). \quad (4.65)$$

Dále po vynásobení této rovnice funkcí $f_k(\underline{x}_2)$, integrací přes V (podle \underline{x}_2), využití rovnic (4.59) a (4.60)

$$\int_V C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) f_k(\underline{x}_2) d\underline{x}_2 = \lambda_k f_k(\underline{x}_1) = \sum_{n=1}^{\infty} E\langle \xi_n(\theta) \xi_k(\theta) \rangle \sqrt{\lambda_n \lambda_k} f_n(\underline{x}_1), \quad (4.66)$$

opětovně násobením $f_l(\underline{x}_1)$, integrací přes V (podle \underline{x}_1) a využití rovnice (4.60)

$$\lambda_k \int_V f_k(\underline{x}_1) f_l(\underline{x}_1) d\underline{x}_1 = \sum_{n=0}^{\infty} E\langle \xi_n(\theta) \xi_k(\theta) \rangle \sqrt{\lambda_n \lambda_k} \delta_{nl}, \quad (4.67)$$

použití rovnice (4.60) ještě jednou

$$\lambda_k \delta_{kl} = \sqrt{\lambda_k \lambda_l} E \langle \xi_k(\theta) \xi_l(\theta) \rangle \quad (4.68)$$

se konečně dostaneme k výsledku

$$E \langle \xi_k(\theta) \xi_l(\theta) \rangle = \delta_{kl}. \quad (4.69)$$

To znamená, že náhodný proces $y(\underline{x}, \theta)$ lze rozložit do tvaru

$$y(\underline{x}, \theta) = \bar{y}(\underline{x}) + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_n} \xi_n(\theta) f_n(\underline{x}), \quad (4.70)$$

kde náhodné veličiny $\xi_n(\theta)$ jsou vzájemně ortogonální s nulovou střední hodnotou (4.64) a jednotkovým rozptylem (4.69).

4.3.2 Numerická diskretizace

Analytické řešení problému popsaného v předchozích odstavcích je možné jen pro speciální podobu oblasti B a speciální tvar kovarianční funkce $C(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$. Pro obecný případ je proto nutné řešení aproximovat numericky. V případě MKP je možné pro aproximaci vlastních funkcí kovariančního operátoru využít interpolačních funkcí

$$f_k(\underline{x}) \approx \sum_{i=1}^P N_i(\underline{x}) \varphi_i^{(k)}, \quad (4.71)$$

kde index i značí příslušnost k určitému uzlu, P počet uvažovaných uzlů použité diskretizace, $f_k(\underline{x})$ k -tou vlastní funkcí, $N_i(\underline{x})$ interpolační funkci (resp. funkce) příslušnou uzlu i a $\varphi_i^{(k)}$ uzlovou hodnotu k -té vlastní funkce v uzlu i .

Dosazením této aproximace do rovnice (4.59) definujeme chybu ϵ_P (plynoucí z omezení součtu nekonečné řady P -tým členem) jako rozdíl mezi levou a pravou stranou rovnice (4.59):

$$\epsilon_P(\underline{x}_1) = \sum_{i=1}^P \varphi_i^{(k)} \left[\int_V C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) N_i(\underline{x}_2) d\underline{x}_2 - \lambda_k N_i(\underline{x}_1) \right]. \quad (4.72)$$

Chybu ϵ_P budeme požadovat ortogonální k aproximačním funkcím

$$\int_V \epsilon_P(\underline{x}) N_j(\underline{x}) d\underline{x} = 0, \quad j = 1, \dots, P. \quad (4.73)$$

Dosazením (4.72) do (4.73) obdržíme

$$\sum_{i=1}^P \varphi_i^{(k)} \left(\int_V \left(\int_V C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) N_i(\underline{x}_2) d\underline{x}_2 \right) N_j(\underline{x}_1) d\underline{x}_1 - \lambda_k \int_V N_i(\underline{x}) N_j(\underline{x}) d\underline{x} \right) = 0. \quad (4.74)$$

Definicemi

$$[C]_{ij} = \int_V \left(\int_V C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) N_i(\underline{x}_2) d\underline{x}_2 \right) N_j(\underline{x}_1) d\underline{x}_1, \quad (4.75)$$

$$[B]_{ij} = \int_V N_i(\underline{x}) N_j(\underline{x}) d\underline{x} \quad (4.76)$$

$$[\Phi]_{ik} = \varphi_i^{(k)} \quad (4.77)$$

a

$$[\Lambda]_{lk} = \lambda_l \delta_{lk} \quad (4.78)$$

můžeme rovnici 4.74) přepsat do maticové podoby

$$[C][\Phi] = [\Lambda][B][\Phi] \quad (4.79)$$

a vyřešit vlastní čísla λ_k a vlastní funkce (vektory) $\varphi_i^{(k)}$ standardními metodami lineární algebry. Funkci $y(\underline{x}, \theta)$ lze tedy vyjádřit v diskretních bodech i (se souřadnicemi \underline{x}_i) dle rovnice (4.70) jako

$$y(\underline{x}_i, \theta) \approx \bar{y}(\underline{x}_i) + \sum_{n=1}^P \sqrt{\lambda_n} \xi_n(\theta) \varphi_i^{(n)}, \quad (4.80)$$

kde ξ_n jsou dány rovnicemi (4.64) a (4.69).

4.3.3 Analytické řešení

Pomocí numerické aproximace popsané v předchozí kapitole je principiálně možné přibližně vyřešit náhodný proces na libovolné oblasti s libovolnou kovarianční funkcí. Pro náš případ, kdy je mnohdy použito i několik stovek tisíc uzlů, ale tato metoda nemusí být nejvhodnější, neboť řešení vlastních čísel a vektorů matic rozměru několik stovek tisíc na několik stovek tisíc by bylo výpočetně neúnosně náročné nebo i nemožné.

Jedním z možných řešení je vyčíslení požadované náhodné funkce pouze v několika málo bodech nezávislých na konečně prvkové síti a mezi nimi (například lineárně) interpolovat.

Pokud je ale pro náš případ známo analytické řešení vlastních čísel a funkcí kovariančního operátoru a implementace tohoto řešení je časově únosná, můžeme použít následující přístup.

Uvažujme jednorozměrnou oblast o délce $L = 2a$ na intervalu $x \in \langle -a; a \rangle$ a náhodný proces $y(x, \theta)$. Kovarianční funkci budeme předpokládat ve speciálním, avšak ne neobvyklém [4, 15, 42], exponenciálním tvaru

$$C(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \sigma^2 R(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \sigma^2 e^{-\|\underline{x}_1 - \underline{x}_2\|/r}, \quad (4.81)$$

kde $R(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$ je korelační funkce, σ je směrodatná odchylka procesu a r je takzvaná korelační délka. Čím více jsou body vzdálené, tím menší je jejich korelace, tzn. pravděpodobnost, že v nich bude mít náhodná funkce stejnou či podobnou hodnotu. Naopak body velmi blízké mají velkou pravděpodobnost podobné hodnoty. Co ale znamená „velmi blízké“ právě určuje korelační délka r , rozměrově kvantifující vzájemnou prostorovou korelaci. Pro náš jednorozměrný případ má kovarianční funkce tvar

$$C(x_1, x_2) = \sigma^2 e^{-|x_1 - x_2|/r}. \quad (4.82)$$

Dle rovnice (4.59) definujeme vlastní čísla λ a vlastní funkce $f(x)$ kovariančního operátoru $C(x_1, x_2)$ jako řešení rovnice

$$\int_{-a}^{+a} \sigma^2 e^{-c|x_1 - x_2|} f_n(x_2) dx_2 = \lambda_n f_n(x_1), \quad (4.83)$$

kde pro zjednodušení $c = 1/r$. Tuto rovnici můžeme přepsat do tvaru

$$\int_{-a}^{x_1} \sigma^2 e^{-c(x_1-x_2)} f_n(x_2) dx_2 + \int_{x_1}^a \sigma^2 e^{c(x_1-x_2)} f_n(x_2) dx_2 = \lambda_n f_n(x_1) =$$

$$\sigma^2 e^{-cx_1} \int_{-a}^{x_1} e^{cx_2} f(x_2) dx_2 + \sigma^2 e^{cx_1} \int_{x_1}^a e^{-cx_2} f(x_2) dx_2. \quad (4.84)$$

Pro zopakování zapíšeme základní vztahy pro derivování integrálů (kde $(*)' = d*/dx_1$):

$$\int_{-a}^{x_1} h(x_2) dx_2 = H(x_1) - H(-a), \quad \left(\int_{-a}^{x_1} h(x_2) dx_2 \right)' = (H(x_1) - H(-a))' = h(x_1)$$

$$\int_{x_1}^a h(x_2) dx_2 = H(a) - H(x_1), \quad \left(\int_{x_1}^a h(x_2) dx_2 \right)' = (H(a) - H(x_1))' = -h(x_1) \quad (4.85)$$

$$\left(g(x_1) \int_{-a}^{x_1} h(x_2) dx_2 \right)' = g(x_1)' \int_{-a}^{x_1} h(x_2) dx_2 + g(x_1)h(x_1)$$

$$\left(g(x_1) \int_{x_1}^a h(x_2) dx_2 \right)' = g(x_1)' \int_{x_1}^a h(x_2) dx_2 - g(x_1)h(x_1)C \quad (4.86)$$

S pomocí rovnic (4.85) a (4.86) spočteme první derivaci rovnice (4.84) podle x_1

$$\lambda f'(x_1) = -c\sigma^2 e^{-cx_1} \int_{-a}^{x_1} e^{cx_2} f(x_2) dx_2 + \sigma^2 e^{-cx_1} e^{cx_1} f(x_1) +$$

$$+ c\sigma^2 e^{cx_1} \int_{x_1}^a e^{-cx_2} f(x_2) dx_2 - c\sigma^2 e^{cx_1} e^{-cx_1} f(x_1) = \quad (4.87)$$

$$= -c\sigma^2 e^{-cx_1} \int_{-a}^{x_1} e^{cx_2} f(x_2) dx_2 + c\sigma^2 e^{cx_1} \int_{x_1}^a e^{-cx_2} f(x_2) dx_2$$

a druhou derivaci rovnice (4.84) podle x_1

$$\lambda f''(x_1) = c^2 \sigma^2 e^{-cx_1} \int_{-a}^{x_1} e^{cx_2} f(x_2) dx_2 - c\sigma^2 e^{-cx_1} e^{cx_1} f(x_1) +$$

$$+ c\sigma^2 e^{cx_1} \int_{x_1}^a e^{-cx_2} f(x_2) dx_2 - c\sigma^2 e^{cx_1} e^{-cx_1} f(x_1) \quad (4.88)$$

Porovnáním s původní rovnicí (4.84) můžeme její druhou derivaci zapsat jako

$$\lambda f''(x) = (-2c\sigma^2 + c^2)f(x). \quad (4.89)$$

S využitím označení

$$\omega^2 = \frac{2c\sigma^2 - c^2\lambda}{\lambda} \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{2c\sigma^2}{\omega^2 + c^2} \quad (4.90)$$

přepíšeme rovnici (4.89) na

$$f''(x) + \omega^2 f(x) = 0, \quad -a \leq x \leq +a, \quad (4.91)$$

jejíž řešení je

$$f(x) = C_1 \cos(\omega x) + C_2 \sin(\omega x). \quad (4.92)$$

Rovnici (4.87) vyčíslíme v krajních bodech

$$\lambda f'(a) = -c\sigma^2 e^{-ca} \int_{-a}^a e^{cx_2} f(x_2) dx_2 = -c\lambda f(a), \quad (4.93)$$

$$\lambda f'(-a) = c\sigma^2 e^{c(-a)} \int_{-a}^a e^{-cx_2} f(x_2) dx_2 = c\lambda f(-a), \quad (4.94)$$

což dohromady tvoří okrajové podmínky problému:

$$\begin{aligned} cf(a) + f'(a) &= 0, \\ cf(-a) - f'(-a) &= 0. \end{aligned} \quad (4.95)$$

Dosazením rovnice (4.92) do těchto okrajových podmínek dostaneme soustavu rovnic

$$\begin{aligned} C_1(c - \omega \tan(\omega a) + C_2(\omega + c \tan(\omega a))) &= C_1 z(\omega) + C_2 z^*(\omega) = 0 \\ C_1(c - \omega \tan(\omega a) - C_2(\omega + c \tan(\omega a))) &= C_1 z(\omega) - C_2 z^*(\omega) = 0, \end{aligned} \quad (4.96)$$

jež má netriviální řešení pouze pokud

$$z(\omega) = c - \omega \tan(\omega a) = 0 \quad (4.97)$$

∨

$$z^*(\omega) = \omega + c \tan(\omega a) = 0. \quad (4.98)$$

Symbolem ω_n označme řešení rovnice $z(\omega) = 0$ a symbolem ω_n^* řešení rovnice $z^*(\omega) = 0$. Obecně potom platí

$$z(\omega_n^*) \neq 0, \quad z^*(\omega) \neq 0. \quad (4.99)$$

Z rovnic (4.99) a (4.96) a podmínky nenulovosti vlastní funkce (4.92) plyne:

$$\begin{aligned} \text{pokud } \omega = \omega_n &\rightarrow z(\omega_n) = 0 \wedge z^*(\omega_n) \neq 0 \rightarrow C_1 \neq 0 \wedge C_2 = 0 \\ \text{pokud } \omega = \omega_n^* &\rightarrow z(\omega_n^*) \neq 0 \wedge z^*(\omega_n^*) = 0 \rightarrow C_1 = 0 \wedge C_2 \neq 0 \end{aligned} \quad (4.100)$$

Dosazením těchto výsledků do rovnice (4.92) obdržíme tvar vlastních funkcí:

$$f_n(x) = C_1 \cos(\omega_n x), \quad f_n^* = C_2 \sin(\omega_n^* x). \quad (4.101)$$

ω_n a ω_n^* jakožto řešení rovnic (4.96) mohou být obecně z oboru reálných čísel. Dokonce díky sudosti funkce $z(\omega)$, tzn. $z(-\omega) = z(\omega)$, platí, že je-li ω_n řešením $z(\omega) = 0$, pak i $-\omega_n$ je řešením $z(\omega) = 0$. Obdobně díky lichosti funkce $z^*(\omega)$, tzn. $z^*(-\omega) = -z^*(\omega)$, platí, že je-li ω_n^* řešením $z^*(\omega) = 0$, pak i $-\omega_n^*$ je řešením $z^*(\omega) = 0$. Dle rovnice (4.90) je ale vlastní číslo λ shodné pro každou takovou dvojici, stačí tedy uvažovat $\omega \geq 0$.

Jedním z řešení rovnice $z^*(\omega) = 0$ je také $\omega_0^* = 0$, to ale vede na nepřipustnou vlastní funkci $f_0^*(x) = C_0 0 = 0$, proto budeme uvažovat pouze $\omega > 0$. Výsledné vlastní funkce potom budou mít tvar

$$f_n(x) = \frac{\cos(\omega_n x)}{\sqrt{a + \frac{\sin(2\omega_n a)}{2\omega_n}}} \left(C_1 = \frac{1}{\sqrt{a + \frac{\sin(2\omega_n a)}{2\omega_n}}} \right) \quad (4.102)$$

a

$$f_n^*(x) = \frac{\sin(\omega_n^* x)}{\sqrt{a - \frac{\sin(2\omega_n^* a)}{2\omega_n^*}}} \quad \left(C_2 = \frac{1}{\sqrt{a - \frac{\sin(2\omega_n^* a)}{2\omega_n^*}}} \right), \quad (4.103)$$

kde integrační konstanty C_1 a C_2 normují vlastní funkce tak, aby splňovaly rovnici (4.60), tedy

$$\int_{-a}^{+a} f_n^2(x) dx = 1, \quad \int_{-a}^{+a} f_n^{*2}(x) dx = 1. \quad (4.104)$$

Díky povaze funkce tangens a tvaru funkcí $z(\omega)$ a $z^*(\omega)$ je v každém intervalu

$$\left(-\frac{\pi}{2} + k\pi; \frac{\pi}{2} + k\pi \right), \quad k=0, 1, 2, \dots \quad (4.105)$$

právě jedno řešení $z(\omega) = 0$ a právě jedno řešení $z^*(\omega) = 0$, která označíme $\omega_{(2k+1)}$ a ω_{2k}^* , a dále také platí

$$\omega_{2k}^* < \omega_{2k+1}. \quad (4.106)$$

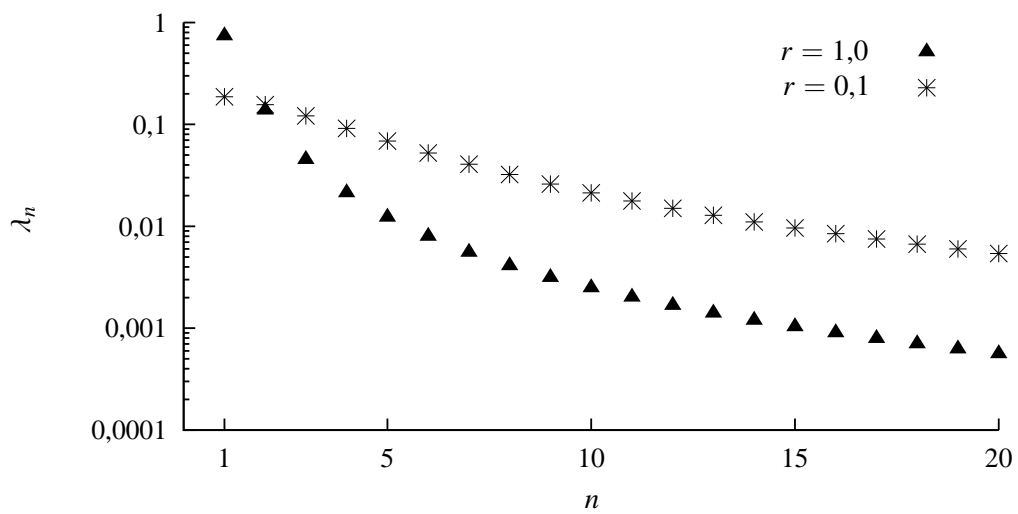
Vznikne tak monotónně vzrůstající posloupnost pro ω a dle (4.90) monotónně klesající posloupnost vlastních čísel

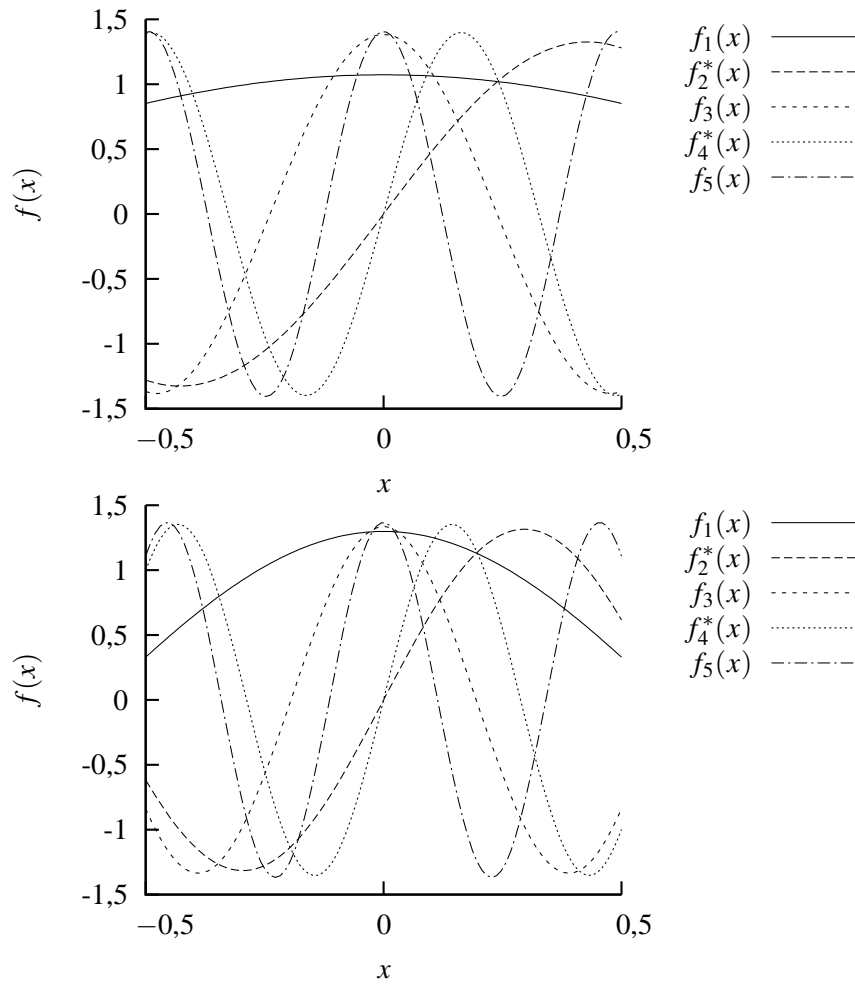
$$\lambda_n = \frac{2c\sigma^2}{\omega_n^2 + c^2}, \quad \lambda_n^* = \frac{2c\sigma^2}{\omega_n^{*2} + c^2}. \quad (4.107)$$

Pro řešení rovnic $z(\omega) = 0$ a $z^*(\omega) = 0$ je možné použít iterativních numerických metod, například Newtonovu metodu anebo (díky omezení možné polohy každého řešení na omezený interval délky π) metodu půlení intervalů (viz. tabulku 5.8).

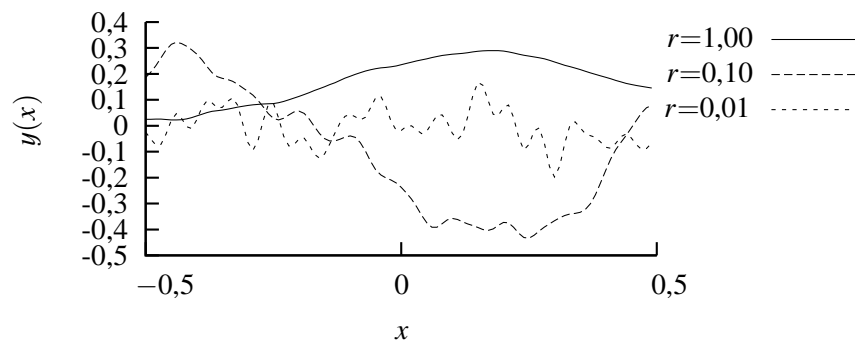
Čím vyšší je číslo vlastního tvaru n , tím je hodnota vlastních čísel λ nižší a také „vlnová délka“ vlastních funkcí $2\pi/\omega$ kratší („frekvence“ $\omega/2\pi$ nižší), viz obr. 4.5 a 4.6. Jinými slovy můžeme říci, že (dle přirozeného předpokladu) vlastní tvary s kratší a kratší vlnovou délkou jsou více a více potlačovány a tudíž materiálové vlastnosti se nemění „bod od bodu“, nýbrž spojitě. Dále čím nižší je korelační délka r , tím pomalejší je pokles vlastních čísel a pomalejší potlačování vlastních funkcí s kratší vlnovou délkou a výsledný proces je potom „divočejší“. Pro názornost viz obr. 4.7.

Pro praktické výpočty samozřejmě nepracujeme s nekonečným součtem, ale uvažujeme jen určitý počet dominantních vlastních tvarů (v souladu s výše popsáním předpokladem většího potlačování vlastních tvarů pro vyšší n). Konvergence aproximované kovarianční funkce ke kovarianční funkci skutečné (dle rovnice (4.58)) pro rostoucí uvažovaný počet vlastních tvarů je znázorněna na obrázku 4.8.

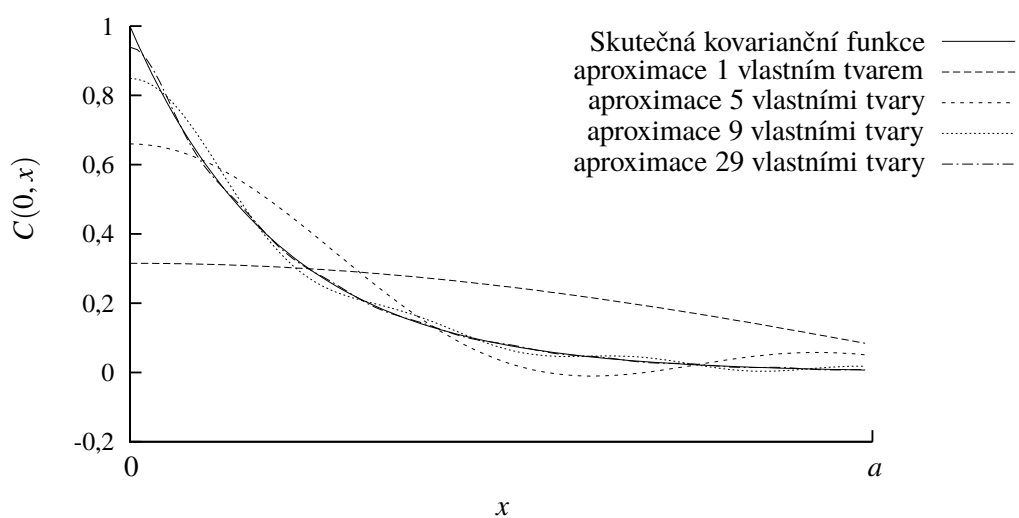
Obrázek 4.5: Vlastní čísla pro prut délky $a = 0.5$ a různé korelační délky r .



Obrázek 4.6: Vlastní funkce pro parametry $a = 0,5$ a korelační délku $r = 1,0$ (nahore) a $r = 0,1$ (dole).



Obrázek 4.7: Ukázky realizací náhodného procesu pro různé korelační délky.



Obrázek 4.8: Konvergence aproximace kovarianční funkce (rovnice (4.58)) ke skutečné hodnotě (rovnice(4.84)).

POČÍTAČOVÁ IMPLEMENTACE

Numerický model popsaný v kapitole 4 je v současné době implementován (mimo jiné) ve třech různých programech – Oofem, Yade a Fragment1d. V této kapitole je stručně pojednáno o prvních dvou (včetně ukázky vstupních souborů), většina je však věnována autorem práce implementovanému programu Fragment1d. V závěru kapitoly jsou všechny tři metody porovnány jak z hlediska výsledků (které se prakticky neliší, viz obrázek 5.2), tak z hlediska časových nároků výpočtu (které se již liší značně a ze kterých vychází Fragment1d jako nejvýhodnější volba, viz tabulku 5.10).

5.1 Oofem

Oofem [37, 38] je „volně šiřitelný program pro řešení multifyzikálních problémů metodou konečných prvků s objektově orientovanou architekturou pro řešení úloh mechaniky pevné fáze, transportních jevů a mechaniky tekutin“ [1] a je vyvíjen na katedře mechaniky Fakulty stavební ČVUT pod vedením prof. Dr. Ing. Bořka Patzáka. Pro simulace byl použit způsob výpočtu `NlDEIDynamic` (přímá explicitní nelineární integrace pohybových rovnic metodou centrálních diferencí s uvažováním soustředěné diagonální matice hmotnosti), prvky `Truss1d` (jednorozměrné prvky přenášející tah/tlak s lineární aproximací pole posunutí) a materiálový model `idm1` (model s izotropním poškozením). Parametr `d 2750.` definuje objemovou hmotnost materiálu, `E 275e9` Youngův modul pružnosti, `damlaw 1` funkci vývoje poškození odpovídající bilineárnímu pracovnímu diagramu, `e0 1.e-3` mezní pružnou deformaci a `wf 1.e-6` rozevření fiktivní trhliny při porušení. Způsob výpočtu, materiálový model i vstupní materiálové parametry tedy v podstatě odpovídají odvozené úloze v kapitole 4 a také implementaci programu Fragment1d, viz dále.

Tabulka 5.1: Ukázkový vstupní soubor fragOofem.in pro dynamickou fragmentaci v programu Oofem.

```

fragOofem.out
Example input file for dynamic fragmentation in Oofem
NlDEIDynamic nsteps 100 dumpcoef 0.0 deltaT 1.000000e-06 nmodules 0
domain ldTruss
OutputManager tstep_all element_all
ndofman 11 nelem 10 ncrosssect 10 nmat 1 nbc 2 nic 11 nltf 2
Node 1 coords 3 -2.500000e-02 0. 0. ic 1 1
Node 2 coords 3 -2.000000e-02 0. 0. ic 1 2
Node 3 coords 3 -1.500000e-02 0. 0. ic 1 3
Node 4 coords 3 -1.000000e-02 0. 0. ic 1 4
Node 5 coords 3 -5.000000e-03 0. 0. ic 1 5
Node 6 coords 3 0.000000e+00 0. 0. ic 1 6
Node 7 coords 3 5.000000e-03 0. 0. ic 1 7
Node 8 coords 3 1.000000e-02 0. 0. ic 1 8
Node 9 coords 3 1.500000e-02 0. 0. ic 1 9
Node 10 coords 3 2.000000e-02 0. 0. ic 1 10
Node 11 coords 3 2.500000e-02 0. 0. ic 1 11
Trussld 1 nodes 2 1 2 mat 1 crossSect 1
Trussld 2 nodes 2 2 3 mat 1 crossSect 2
Trussld 3 nodes 2 3 4 mat 1 crossSect 3
Trussld 4 nodes 2 4 5 mat 1 crossSect 4
Trussld 5 nodes 2 5 6 mat 1 crossSect 5
Trussld 6 nodes 2 6 7 mat 1 crossSect 6
Trussld 7 nodes 2 7 8 mat 1 crossSect 7
Trussld 8 nodes 2 8 9 mat 1 crossSect 8
Trussld 9 nodes 2 9 10 mat 1 crossSect 9
Trussld 10 nodes 2 10 11 mat 1 crossSect 10
SimpleCS 1 area 9.899272e-01
SimpleCS 2 area 9.975046e-01
SimpleCS 3 area 9.794905e-01
SimpleCS 4 area 9.917894e-01
SimpleCS 5 area 1.001783e+00
SimpleCS 6 area 9.910027e-01
SimpleCS 7 area 1.012007e+00
SimpleCS 8 area 9.986016e-01
SimpleCS 9 area 9.968323e-01
SimpleCS 10 area 9.923334e-01
idml 1 d 2750. E 275e9 n 0.3 talpha 0. equivstraintype 0 damlaw 1 e0 1.e-3 wf 1.e-6
BoundaryCondition 1 loadTimeFunction 2 d -250.
BoundaryCondition 2 loadTimeFunction 2 d 250.
InitialCondition 1 conditions 1 v -2.500000e-02
InitialCondition 2 conditions 1 v -2.045455e-02
InitialCondition 3 conditions 1 v -1.590909e-02
InitialCondition 4 conditions 1 v -1.136364e-02
InitialCondition 5 conditions 1 v -6.818182e-03
InitialCondition 6 conditions 1 v -2.272727e-03
InitialCondition 7 conditions 1 v 2.272727e-03
InitialCondition 8 conditions 1 v 6.818182e-03
InitialCondition 9 conditions 1 v 1.136364e-02
InitialCondition 10 conditions 1 v 1.590909e-02
InitialCondition 11 conditions 1 v 2.045455e-02
ConstantFunction 1 f(t) 1.0
PiecewiseLinFunction 2 nPoints 3 t 3 0. 1.e-8 100000. f(t) 3 0. 0. 100000.
###BEGIN_CHECK###
#TIME
#NODE number 100 dof 1 unknown d
#NODE number 101 dof 1 unknown d
#ELEMENT number 50 gp 1 record 0 keyword strains component 1
#ELEMENT number 50 gp 1 record 1 keyword stresses component 1
###END_CHECK###

```

5.2 Yade

Yade (zkratka z „Yet Another Dynamic Engine“) je „rozšiřitelný otevřený nástroj pro diskrétní numerické modely, zaměřený na metodu diskrétních prvků¹“ [3]. Vývoj začal na univerzitě v Grenoblu, nyní má však vývojáře na mnoha místech zeměkoule, převážně z akademické sféry. V posledních několika letech je de facto hlavním vývojářem Mgr. Ing. Václav Šmilauer, PhD. [43]. Výpočetní (opět objektově orientovaná) část Yade je napsána v C++, umožňující nezávislou implementaci nových algoritmů, materiálových modelů, tvarů částic (diskrétních prvků), rozhraní s jiným software apod. Pro uživatelské rozhraní se využívá dynamického jazyka Python.

V současné době se Yade využívá k nejrůznějším simulacím, např. v mechanice zemin, mechanice hornin, při modelování sněhu, měsíčního povrchu, při modelování sruženého problému proudění vody v zeminách a vlivu tohoto proudění na mechanickou odezvu apod.

Pro účely této práce byl úpravou částicového modelu pro beton `CpmMat` [43] vytvořen model pro poškození `DmgMat` s funkcí vývoje poškození odpovídající bilineárnímu pracovnímu diagramu.

5.3 Fragment1d

Oba předchozí programy byly k dispozici již na začátku tvorby práce, avšak jejich výpočetní nároky byly shledány jako neúnosné pro zvolenou aplikaci (kdy je často potřeba simulace s několika stovkami tisíc prvků a současně s několika stovkami tisíc časových kroků). Proto byl v rámci práce autorem vytvořen efektivní jednoúčelový numerický nástroj, pracovním názvem *Fragment1d*. Hlavní motivací a cílem tvorby programu byla co nejmenší časová náročnost výpočtů. Za takovýchto podmínek je nezbytné sáhnout k některým nízkoúrovňovým technikám, jako je přístup k operační paměti apod. Jako kompromis mezi touto „nízkoúrovňovostí“ a srozumitelností (a vůbec rozumnou proveditelností) byl pro implementaci zvolen jazyk C++.

Pro snížení výpočetního času byla využita veškerá možná zjednodušení plynoucí z uspořádání dané úlohy a možností jazyka C++. Jednou z hlavních výhod řešené úlohy je diagonalita matice hmotnosti konstrukce. Důsledkem je, že v rámci jednoho časového kroku jsou výpočty na jednom prvku nezávislé na všech ostatních prvcích a výpočty na každém uzlu též nezávislé na všech ostatních uzlech (tzn. neřeší se žádná soustava rovnic jako v případě řešení statické rovnováhy).

Z hlediska jednoúčelovosti tvořeného programu nebyla uvažována možnost ani potřeba rozšiřitelnosti programu pro jiné účely (na rozdíl od programů *Oofem* a *Yade*, jejichž jednou z hlavních předností je právě snadná rozšiřitelnost), proto byla snaha o co nejjednodušší způsob uchovávání proměnných (jako je posunutí nebo rychlost uzlů, poškození prvků atp.) v operační paměti. Opět v kontrastu z výše zmíněnými programy, které obvykle jednotlivé vlastnosti prvků a uzlů uchovávají v *objektu* daného typu (např. uzlu, prvku nebo částice), v našem případě (s přihlédnutím k výhodné algoritmizaci dané úlohy, viz. 4.2.4) je možné jednotlivé veličiny ukládat přímo do jednotlivých „vektorů“. Máme-li například vektor posunů, můžeme posun k -tého uzlu získat jako k -tý prvek vektoru posunutí (na rozdíl od j -té proměnné k -tého uzlu v případě uchovávání jednotlivých posunutí v objektu uzlu). Po několika numerických pokusech byl jako nejvýhodnější nástroj pro tento účel shledán `std::vector` (viz dále).

¹discrete element method, DEM

Tabulka 5.2: Ukázkový simulační skript `fragYade.py` pro dynamickou fragmentaci v programu Yade.

```
# fragYade.py, python script for dynamic fragmentation in Yade
# simulation input parameters
l = 5e-2 # length of simulated bar
A = 1. # cross section area of the specimen
sr = 1e5 # prescribed strain rate
E = 275e9 # Young's modulus
eps0 = 1e-3 # limit elastic strain
wf = 1e-6 # crack opening
rho = 2750 # bulk density of material
nP = 101 # number of particles
nS = 500 # number of time steps
rad = .5*l/(nP-1) # particle radius

from yade import *
from numpy import random

# define material
O.materials.append(DmgMat(young=E, eps0=eps0, wf=wf, density=1.5*A*rho, G_over_E=1.))
O.bodies.append([ # create particles
    utils.sphere((-1*0.5+x/float(nP-1)*1,0.,0.),rad) for x in xrange(nP)])
# block rotation and displacement of particles in transversal direction
for b in O.bodies: b.state.blockedDOFs='yzXYZ'
# prescribe velocity for boundary particles
O.bodies[0].state.blockedDOFs=O.bodies[-1].state.blockedDOFs='xyzXYZ'
for b in O.bodies:
    b.state.vel[0]=sr*b.state.pos[0] # initial condition
O.dt=0.4*rad/sqrt(E/rho) # set time step
res=open('disEn.out','w') # file for saving results
res.write('# time step disEn\n')
O.engines=[ # actual simulation setup
    ForceResetter(),
    InsertionSortCollider([Bo1_Sphere_Aabb()]),
    InteractionLoop(
        [Ig2_Sphere_Sphere_Dem3DofGeom()],
        [Ip2_DmgMat_DmgMat_DmgPhys(cohesiveThresholdIter=-1)],
        [Law2_Dem3DofGeom_DmgPhys_Dmg()]),
    PyRunner(command='computeDisEn()', iterPeriod=1),
    NewtonIntegrator()
]
def computeDisEn(): # function to compute dissipated energy
    disEn=0.
    for i in O.interactions:
        if i.phys.kappaD>eps0:
            ef=i.phys.epsf
            l=i.geom.refLength
            k=min(ef, i.phys.kappaD)
            disEn+=A*1*.5*ef*eps0*E*(1-(ef-k)/(ef-eps0))
    res.write('%e %d %e\n'%(O.time,O.iter,disEn))
for i in xrange(nP-1): utils.createInteraction(i,i+1) # create interactions
for i in O.interactions: i.phys.E=random.normal(i.phys.E, .01*i.phys.E)
O.engines=[ # engines again (to take new interaction stiffness kn into account)
    ForceResetter(),
    InsertionSortCollider([Bo1_Sphere_Aabb()]),
    InteractionLoop(
        [Ig2_Sphere_Sphere_Dem3DofGeom()],
        [Ip2_DmgMat_DmgMat_DmgPhys(cohesiveThresholdIter=-1)],
        [Law2_Dem3DofGeom_DmgPhys_Dmg()]),
    PyRunner(command='computeDisEn()', iterPeriod=1),
    NewtonIntegrator()
]
O.run(nS); O.wait() # run
res.close()
```


Tabulka 5.4: Implementace třídy Vector.

```
class Vector {
private:
    double *begin; //pointer to the first Vector element
    int numberOfElements;
public:
    Vector() {}

    Vector(int n) {
        numberOfElements = n;
        begin = (double*) malloc(sizeof(double)*numberOfElements);
        if (begin==NULL) {
            printf("ERROR: Could not allocate requested block of memory\n");
            exit(1);
        }
    }

    Vector(int n, double initValue) {
        numberOfElements = n;
        begin = (double*) malloc(sizeof(double)*numberOfElements);
        if (begin==NULL) {
            printf("ERROR: Could not allocate requested block of memory\n");
            exit(1);
        }
        for (int i=0; i<numberOfElements; i++) {
            *(begin + i) = double(initValue);
        }
    }

    ~Vector() {}

    // access through integer indices (numbering from 0)
    double&
    at(int i) {
        if (i < 0 || i >= numberOfElements) {
            printf("ERROR: index exceed Vector dimension\n");
            exit(1);
        }
        return *(begin + i);
    }

    const double&
    at(int i) const {
        if (i < 0 || i >= numberOfElements) {
            printf("ERROR: index exceed Vector dimension\n");
            exit(1);
        }
        return *(begin + i);
    }

    double&
    operator[](int i) { return *(begin + i); }

    const double&
    operator[](int i) const { return *(begin + i); }

    int
    capacity() { return numberOfElements; }
};
```

Tabulka 5.5: Vytvoření simulace.

```

Vector coord(nNodes), dspl(nNodes,0.), vel(nNodes), accel(nNodes,0.), mass(nNodes);
Vector sig(nElems,0.), kappa(nElems,0.), omega(nElems,0.), eps0(nElems), \
    area(nElems), len(nElems), epsf(nNodes);

// set coords and initial velocities
double dx = barLen/nElems, x = -barLen/2+dx;
coord[0] = -barLen/2;
vel[0] = -sr*barLen/2;
for (int i=1; i<nNodes-1; i++) {
    coord[i] = x + randNormal(0., dx*lenDev, -dx*.4, dx*.4);
    vel[i] = coord[i]*sr;
    x += dx;
}
coord[nNodes-1] = barLen/2;
vel[nNodes-1] = sr*barLen/2;
if (exportCoords || lenDev!=0.) { COORDS_EXPORTER }

// set eps0
if (eps0dev == 0.) { for (int i=0; i<nElems; i++) { eps0[i] = eps0_; } }
else {
    if (eps0CL == 0.) {
        for (int i=0; i<nElems; i++) { eps0[i] = randNormal(eps0_, eps0_*areaDev, 0.); }
    }
    else { klDecompose(eps0, 1000, barLen/2, eps0CL, eps0_, eps0_*eps0dev); }
}
if (exportEps0 || eps0dev!=0.) { EPS0_EXPORTER }

// set area
if (areaDev == 0.) { for (i=0; i<nElems; i++) { area[i] = ar; } }
else {
    if (areaCL == 0.) {
        for (int i=0; i<nElems; i++) {
            area[i] = randNormal(ar, ar*areaDev, 0.);
        }
    }
    else { klDecompose(area, 1000, barLen*.5, areaCL, ar, ar*areaDev); }
}
if (exportArea || areaDev!=0.) { AREA_EXPORTER }

// set length and epsf
for (int i=0; i<nElems; i++) {
    double l = coord[i+1] - coord[i];
    if (l<minLen) { minLen = l; }
    len[i] = l;
    epsf[i] = wf/l;
}

// set mass
for (int i=1; nNodes-1; i++) {
    mass[i] = .5*density*(len[i-1]*area[i-1] + len[i]*area[i]);
}

// set nSteps (according to chosen stop condition)
if (tStop) { nSteps = (int)(tStop/dt); }
else if (epsStop) { nSteps = (int)(epsStop/sr/dt); }

```

Tabulka 5.6: Časový krok (s výpočtem disipované energie).

```

// update positions of nodes
PRAGMA_OMP_PARALLEL_FOR(
    for (int i=1; i<nNodes-1; i++) { dspl[i] += dt*(vel[i] + .5*dt*accel[i]); }
)
dspl[0] = -macroStrain*barLen/2;
dspl[nNodes-1] = macroStrain*barLen/2;

// step for elements
double disEn=0.;
PRAGMA_OMP_PARALLEL_FOR(
    for (i=0; i<nElems; i++) {
        double e = (dspl[i+1] - dspl[i]) / len[i];
        double& o = omega[i];
        double& k = kappa[i];
        const double& ef = epsf[i];
        const double& e0 = eps0[i];
        if (e > k) { k = (e>ef)? ef:e; }
        // simple linear softening material law
        if (k > e0) { o = (ef/k)*(k-e0) / (ef-e0); }
        sig[i] = (e > 0)? (1-o)*young*e : young*e;
        if (k > e0) { disEn += area[i]*len[i]*.5*ef*e0*young*(1- (ef-k)/(ef-e0)); }
    }
)

// remaining step for nodes
PRAGMA_OMP_PARALLEL_FOR(
    for (int i=1; i<nNodes-1; i++) {
        double f = area[i]*sig[i] - area[i-1]*sig[i-1];
        const double& m = mass[i];
        vel[i] += .5*dt*(accel[i] + f/m);
        accel[i] = f/m;
        energy1
    }
)

```

Tabulka 5.7: Generátor normálně rozdělených náhodných čísel Boxovou – Mullerovou metodou [39].

```

// function generating normally distributed random numbers using Box-Muller method
double
randNormal (double mean, double stddev, double min=-1e200, double max=1e200) {
    double r, u, v, c, ret;
    do {
        do {
            u = 2*(double)rand() / (double)RAND_MAX-1;
            v = 2*(double)rand() / (double)RAND_MAX-1;
            r = u*u + v*v;
        } while (r==0. || r>1.);
        c = sqrt(-2*log(r)/r);
        ret = mean + u*c*stddev;
    } while (ret <= min || ret >= max);
    return ret;
}

```

Tabulka 5.8: Implementace Karhunenova – Loeveho rozkladu dle kapitoly 4.3.3.

```

#define PI 3.1415926535897932384626433832795028841968
/* -usage:
   Vector vector; klDecompose(vector, N, a, b, mean, sigma); */

// solve omega from transcendental equations by interval halving
void
solveOmeGas1(Vector& omegas1, double a, double c) {
    for (int i=0; i<omegas1.capacity(); i++) {
        double l=PI*(i-.5)/a, r=PI*(i+.5)/a, o;
        for (int j=0; j<10000; j++) {
            o = (r+l)*.5;
            if (c-o*tan(o*a) < 0) { r=o; }
            else { l=o; }
        }
        omegas1[i]=o;
    }
}

void
solveOmeGas2(Vector& omegas2, double a, double c) {
    for (int i=0; i<omegas2.capacity(); i++) {
        double l=PI*(i+.5)/a, r=PI*(i+1.5)/a, o;
        for (int j=0; j<10000; j++) {
            o = (r+l)*.5;
            if (o+c*tan(o*a) < 0) { l=o; }
            else { r=o; }
        }
        omegas2[i]=o;
    }
}

// actual Karhunen-Loeve decomposition (filling Vector answer by random field
// with mean 'mean', standard dev. 'sigma and 'b' correlation length,
// using 2*N first KL eigenvectors.
void
klDecompose(Vector& answer, int N, double a, double b, double mean, double sigma) {
    double c=1/b, temp, x, size=answer.capacity();
    Vector omegas1(N), omegas2(N), sqrtLambdas1(N), sqrtLambdas2(N),
    Vector coeff1(N), coeff2(N), r1(N), r2(N);
    // evaluation of constants
    // evaluate omegas
    solveOmeGas1(omegas1,a,c); solveOmeGas2(omegas2,a,c);
    for (int i=0; i<N; i++) {
        const double& o1=omegas1[i]; const double& o2=omegas2[i];
        // eigenvalues
        sqrtLambdas1[i] = sigma*sqrt(2*c/(o1*o1+c*c));
        sqrtLambdas2[i] = sigma*sqrt(2*c/(o2*o2+c*c));
        // integration coefficients of sines and cosines
        coeff1[i] = 1/sqrt(a+sin(2*a*o1)*.5/o1);
        coeff2[i] = 1/sqrt(a+sin(2*a*o2)*.5/o2);
        // random coefficients
        r1[i] = randNormal(0.,1.); r2[i] = randNormal(0.,1.);
    }
    // filling Vector answer
    for (int i=0; i<size; i++) {
        temp=mean; x = a*(-1+2*i/size);
        for (int j=0; j<N; j++) {
            temp += r1[j]*sqrtLambdas1[j]*coeff1[j]*cos(omegas1[j]*x) \
                + r2[j]*sqrtLambdas2[j]*coeff2[j]*sin(omegas2[j]*x);
        }
        answer[i] = temp;
    }
}

```

5.4 Porovnání jednotlivých programů

Všechny tři popsané programy byly testovány na počítači s 2GB operační pamětí, procesorem Intel® Core™ Duo T2225 (1,73 GHz) a operačním systémem Linux Ubuntu 10.10 (Maverick Meerkat).

V případě Oofemu byla pro porovnání programů použita svn verze 744 instalovaná sekvencí příkazů

```
autoconf
./configure OOFEM_TARGET="oofem"
make OOFEM_TARGET="oofem"
```

Samotný výpočet je pak spuštěn pomocí `oofem -f fragOofem.in`.

V případě Yade byla použita verze b2r2642 instalovaná příkazem

```
scons optimize=1 version=trunk linkStrategy=monolithic ...
```

Výpočet se spouští příkazem

```
yade-trunk fragYade.py
```

Fragment1d byl překládán pomocí GCC (GNU Compiler Collection) s možností `-O3` (znamenající co možná největší optimalizaci výsledného spustitelného souboru). Za cenu několikanásobně delší doby překladu (v případě ne příliš objemného zdrojového kódu se ale i tak jedná o pouhé desetiný až jednotky sekund) byla výsledná doba výpočtu přibližně $2\times$ kratší, než v případě bez optimalizace.

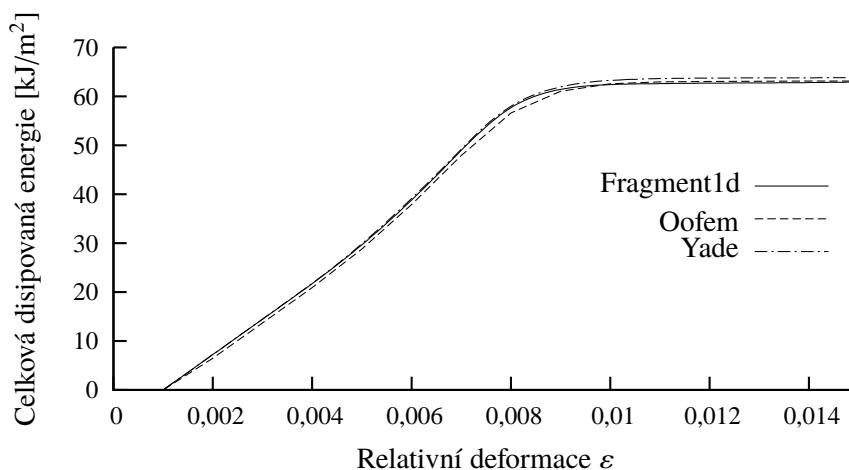
Pro porovnání výsledků těchto programů byla zvolena úloha s parametry znázorněnými v tabulce 5.9. Samotné porovnání výsledků (celková disipovaná energie v závislosti na makroskopické relativní deformaci) je ukázáno v grafu na obrázku 5.2. Protože je uvažována jednotková plocha modelovaného prutu, je výsledná disipovaná energie vztažena k této jednotkové ploše (a proto je Jm^{-2} jednotkou svislé osy grafu 5.2). Je vidět, že výsledky všech programů jsou velice podobné, drobně se však liší. To je dáno způsobem výpočtu a drobnými rozdíly v jednotlivých programech.

Například v Oofemu se nezavádí obnova tuhosti poškozených prvků v tlaku, kdežto v Yade a ve Fragmentu1d ano. Průřezové plochy (a tím pádem tuhosti) jednotlivých prvků jsou různé a hmotnosti jednotlivých uzlů jsou též různé (ve Fragmentu1d a v Oofemu), sobě si odpovídající uzly a prvky jsou ale do obou programů zavedeny shodnými hodnotami. V Yade mají naopak všechny částice (ekvivalent uzlu v MKP) stejnou hmotnost a jediné, co je perturbováno, je tuhost vazeb (ekvivalent konečných prvků MKP).

Obecně jsou ale výsledky velmi podobné, což už ale neplatí o časových nárocích jednotlivých programů. Simulaci s 10000 prvky a 50000 časovými kroky byla ve Fragmentu1d přibližně $35\times$ rychlejší než v Yade a přibližně $80\times$ rychlejší než v Oofemu (viz tabulku 5.10). Z těchto výsledků je patrné, že účel implementace Fragmentu1d, totiž snížení časové náročnosti výpočtů, byl splněn.

Tabulka 5.9: Vstupní parametry simulace pro porovnání výsledků jednotlivých programů.

Parametr	Hodnota
Délka prutu	0,05 m
Průřezová plocha	1
Rychlost deformace	$5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$
Youngův modul pružnosti	275 GPa
Mezní pružná deformace	$1 \cdot 10^{-3}$
Rozevření trhlin	$1 \cdot 10^{-6} \text{ m}$
Objemová hmotnost	2750 kgm^{-3}
Počet prvků	1000



Obrázek 5.2: Porovnání výsledků jednotlivých programů.

Tabulka 5.10: Porovnání časové náročnosti výpočtů jednotlivých programů pro 10000 prvků a 50000 časových kroků.

Program	Oofem	Yade	Fragment1d
Absolutní výpočetní čas	01h:20m:50s	00h:34m:15s	00h:00m:59s
Relativní čas	82,2	34,8	1,0

VÝSLEDKY

Výsledky numerických výpočtů, jejich vzájemné porovnání a diskuse jsou náplní této kapitoly. Pro veškeré simulace byly použity materiálové parametry z tabulky 6.1 (materiál je tedy podobný jako pro porovnání analytických modelů). Délka časového kroku se volila jako pětina kritické hodnoty:

$$\Delta t = \frac{1}{5} \frac{\min(l)}{\sqrt{\frac{E}{\rho}}}, \quad (6.1)$$

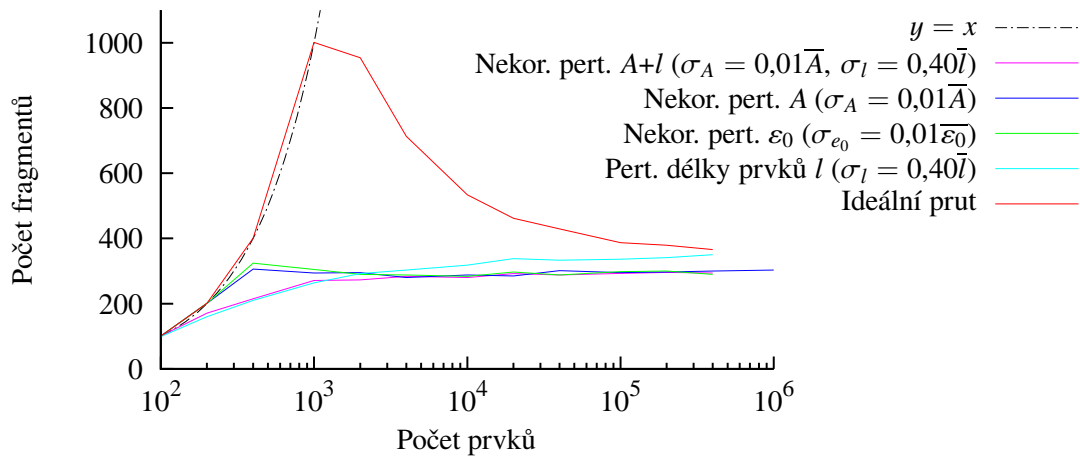
kde $\min(l)$ značí délku nejmenšího prvku v simulaci.

Tabulka 6.1: Uvažované materiálové vlastnosti pro numerické simulace.

Parametr	Označení	Hodnota
Délka vzorku	L	0,05 m
Youngův modul	E	275 GPa
Objemová hmotnost	ρ	2750 kgm^{-3}
Rozevření trhliny	w_f	$1 \cdot 10^{-6} \text{ m}$
Mezní pružná deformace	ε_0	0,001

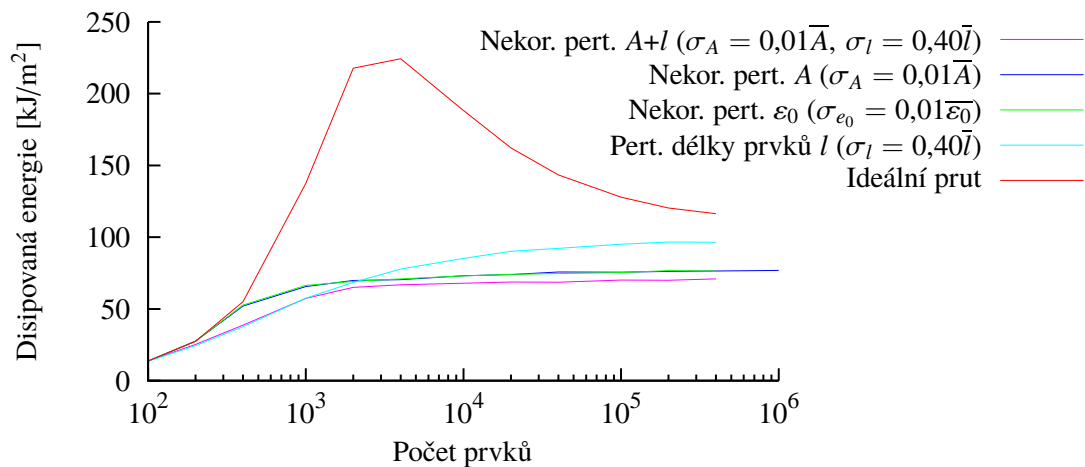
6.1 Vliv prostorové diskretizace

V důsledku uspořádání simulace (předepsaný posun uzlů dle okrajových podmínek 4.3) je nezbytné, aby se vzorek alespoň někde porušil, tzn. aby v některém prvku nastalo úplné porušení (stav, kdy hodnota parametru poškození je rovna 1,0). Při statické zkoušce, jak jsme se již zmiňovali v úvodu práce, vznikne pouze jediná trhlina. V dynamickém případě vznikne (obvykle) trhlín více. Každý konečný prvek představuje jednu lokalitu možného vzniku trhliny. Máme-li v simulaci málo prvků, může se stát, že se poruší všechny. Zvětšíme-li počet prvků a výsledný počet porušených prvků bude větší, je zřejmé, že předchozí diskretizace nebyla dostatečná. Počet prvků tedy dále zvětšujeme, ale při určité hodnotě očekáváme ustálení počtu fragmentů (a tedy konvergenci úlohy).



Obrázek 6.1: Konvergence počtu fragmentů pro různé způsoby perturbace materiálových vlastností ($\dot{\varepsilon} = 1 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$).

Výše popsaný jev je pro hodnotu rychlosti deformace $\dot{\varepsilon} = 1 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$ možno vidět v grafu na obrázku 6.1. V případě ideálního prutu se porušují všechny prvky, a až pro počet prvků větší než 1000 začne vlivem numerického zaokrouhlování počet fragmentů (roven počtu plně porušených prvků + 1) klesat. Konvergence je tedy nemonotónní, a to vlivem nestability úlohy při ideálních materiálových vlastnostech. Ve skutečnosti se začne deformace lokalizovat do nejslabších míst, která ale v simulaci nejdříve musí existovat. Proto je třeba materiálové vlastnosti (více či méně) pozměnit neboli perturbovat.



Obrázek 6.2: Konvergence disipované energie při „základní“ perturbaci různých veličin ($\dot{\varepsilon} = 1 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$).

Výsledky pro různé „základní“ (nekorelované) způsoby perturbace můžeme vzájemně porovnat. Jak je vidět z grafu 6.1, různorodá velikost prvků (čímž má každý prvek – dle zvoleného materiálového modelu – jiný pracovní diagram) má tedy příznivý vliv na konvergenci počtu fragmentů. Z dosavadního průběhu se zdá, že obě metody konvergují ke stejné hodnotě (což splňuje naše očekávání, že při pouhé změně diskretizace by úloha měla konvergovat ke stejné

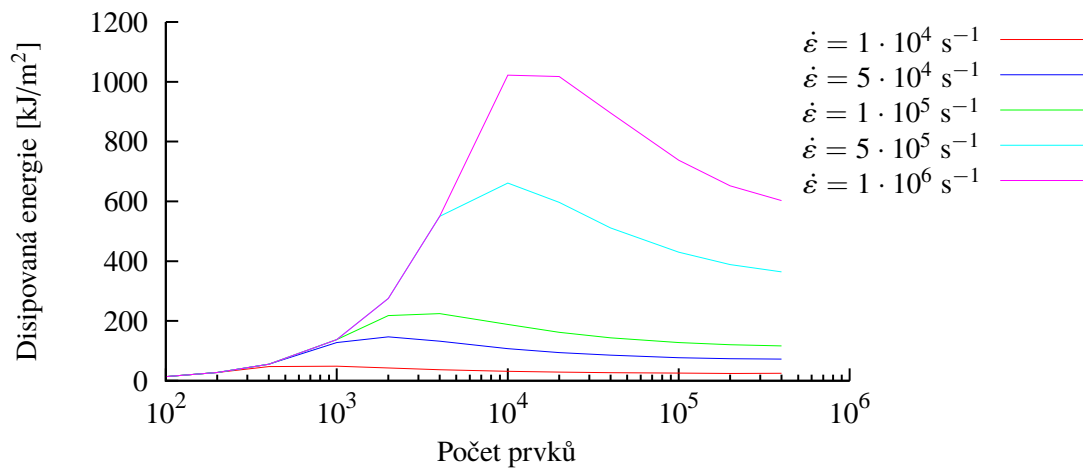
hodnotě). Rozdíl je ale v (ne)monotónnosti.

Pokud budeme měnit materiálové (nebo geometrické) vlastnosti vzorku samotného (například průřezovou plochu A nebo mezní pružnou deformaci ε_0), změníme tím i fyzikální podstatu úlohy (z nestabilní na stabilní). Konvergenci ke stejné hodnotě jako u původní metody tak obecně nemůžeme předpokládat (čehož důkazem je i graf 6.1). Příznivě ale vypadá fakt, že všechny metody perturbace konvergují prakticky stejně k prakticky stejné hodnotě. Jako nejvýhodnější se jeví samotná perturbace průřezové plochy A nebo mezní pružné deformace ε_0 .

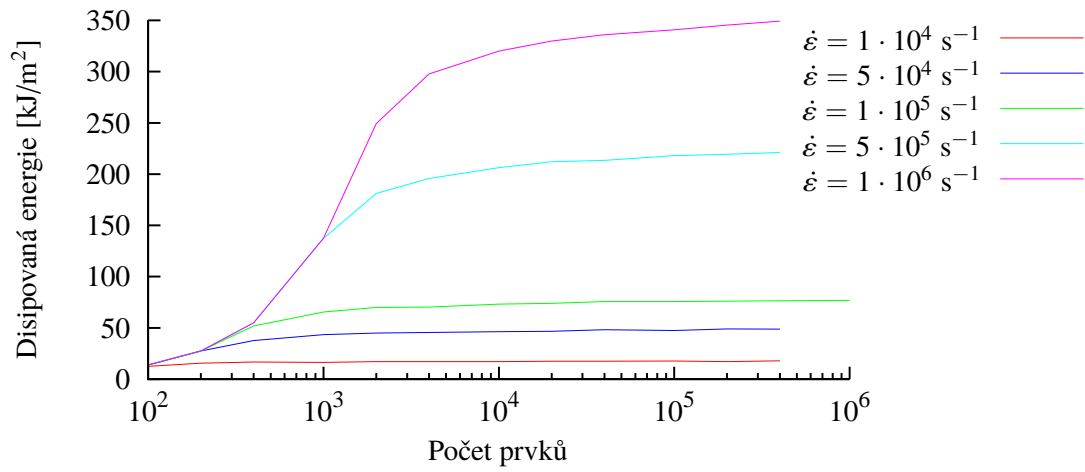
Tímto předpokladem bychom měli vyřešenu otázku počtu fragmentů, jak se ale ukazuje, větší péči je třeba věnovat disipované energii. Ta totiž dle grafu 6.2 konverguje až při řádově větším počtu prvků než počet fragmentů. Změna průřezové plochy A nebo mezní pružné deformace ε_0 vykazuje prakticky stejné chování. Zajímavým faktem zůstává, že při perturbaci průřezové plochy i velikosti prvků je hodnota disipované energie nižší (ačkoliv počet fragmentů je pro oba případy shodný).

Nutno podotknout, že jiným autorům ([34]), používajícím metodu kohezivních prvků (jinak však stejný materiálový model i parametry), vycházela disipovaná energie nemonotónně konvergující i pro perturbaci mezního napětí σ_0 (ekvivalentní perturbaci mezní pružné deformace ε_0) se směrodatnou odchylkou $\sigma_{\sigma_0} = 0,01\bar{\sigma}_0$, tedy pro úplně stejnou perturbační techniku, pro kterou jsou sestrojeny grafy 6.2 a 6.5. Z tohoto ohledu se metoda konečných prvků kombinovaná s mechanikou poškození jeví jako vhodnější varianta.

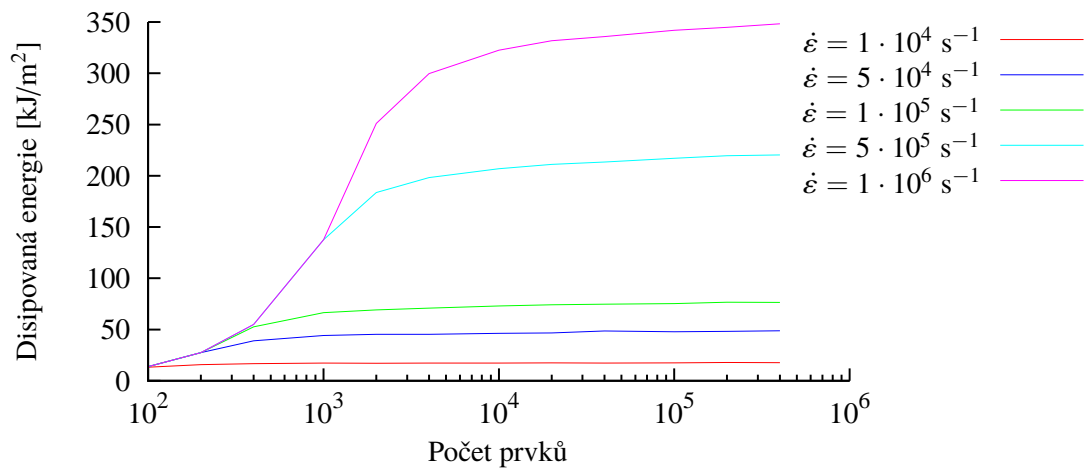
Pro ukázkou následují grafy různých výsledků jednotlivých „základních“ perturbačních metod pro různé rychlosti deformace.



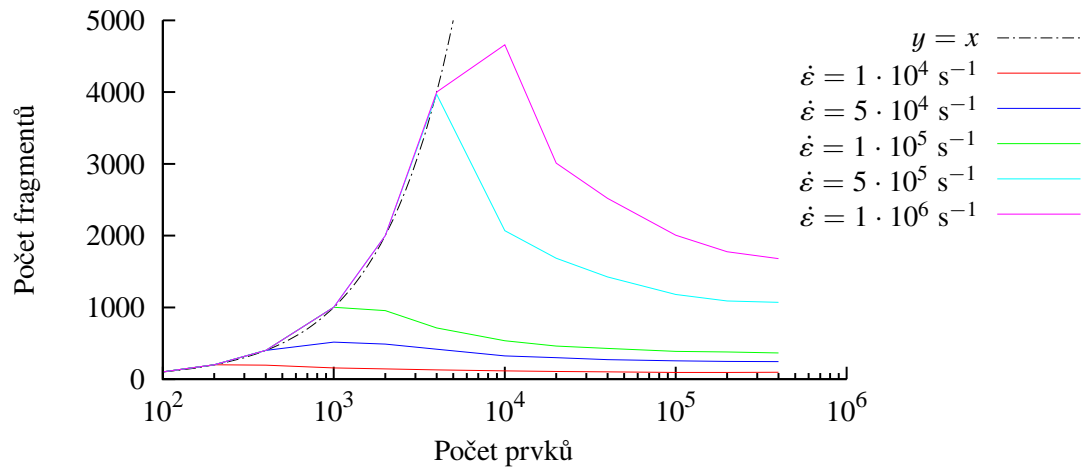
Obrázek 6.3: Konvergence disipované energie pro ideální prut (se všemi materiálovými parametry neměnnými po délce prutu).



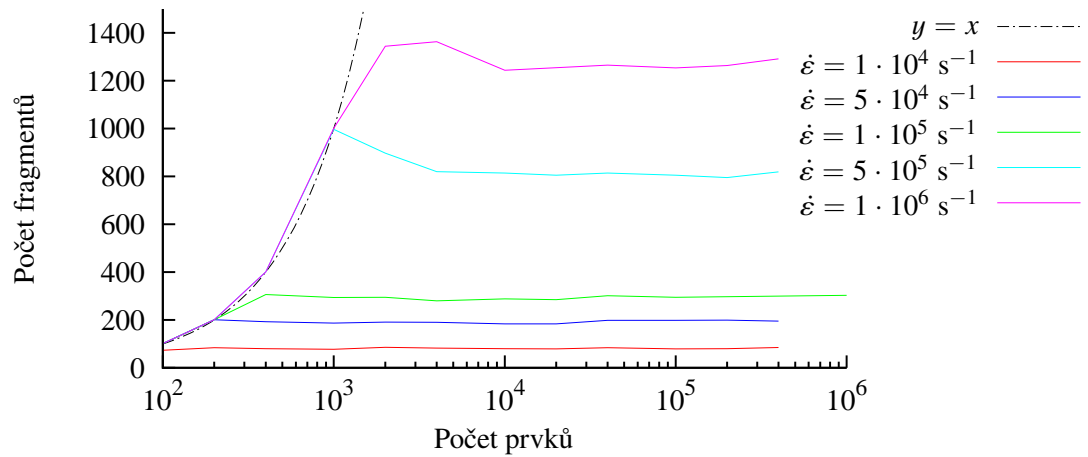
Obrázek 6.4: Konvergence disipované energie při nekorelované perturbaci průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%.



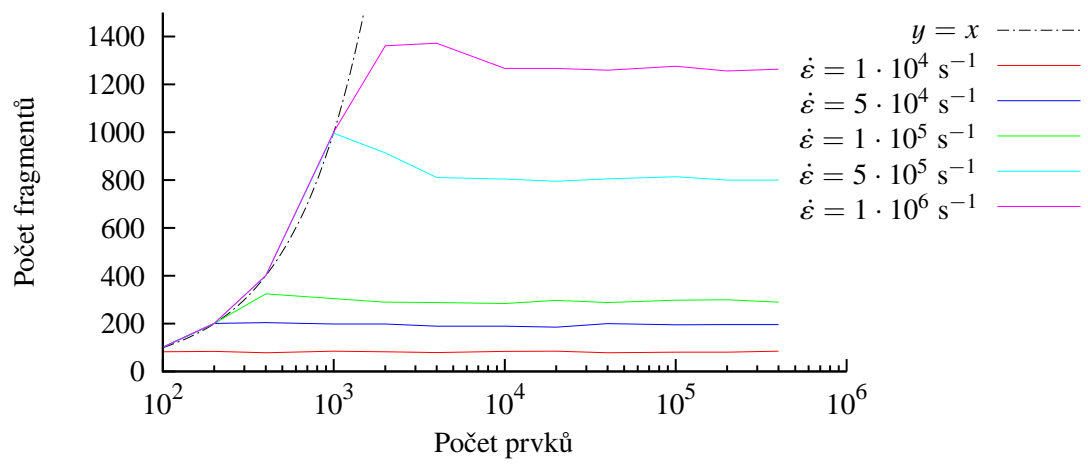
Obrázek 6.5: Konvergence disipované energie při nekorelované perturbaci mezní pružné deformace ϵ_0 se směrodatnou odchylkou 1%.



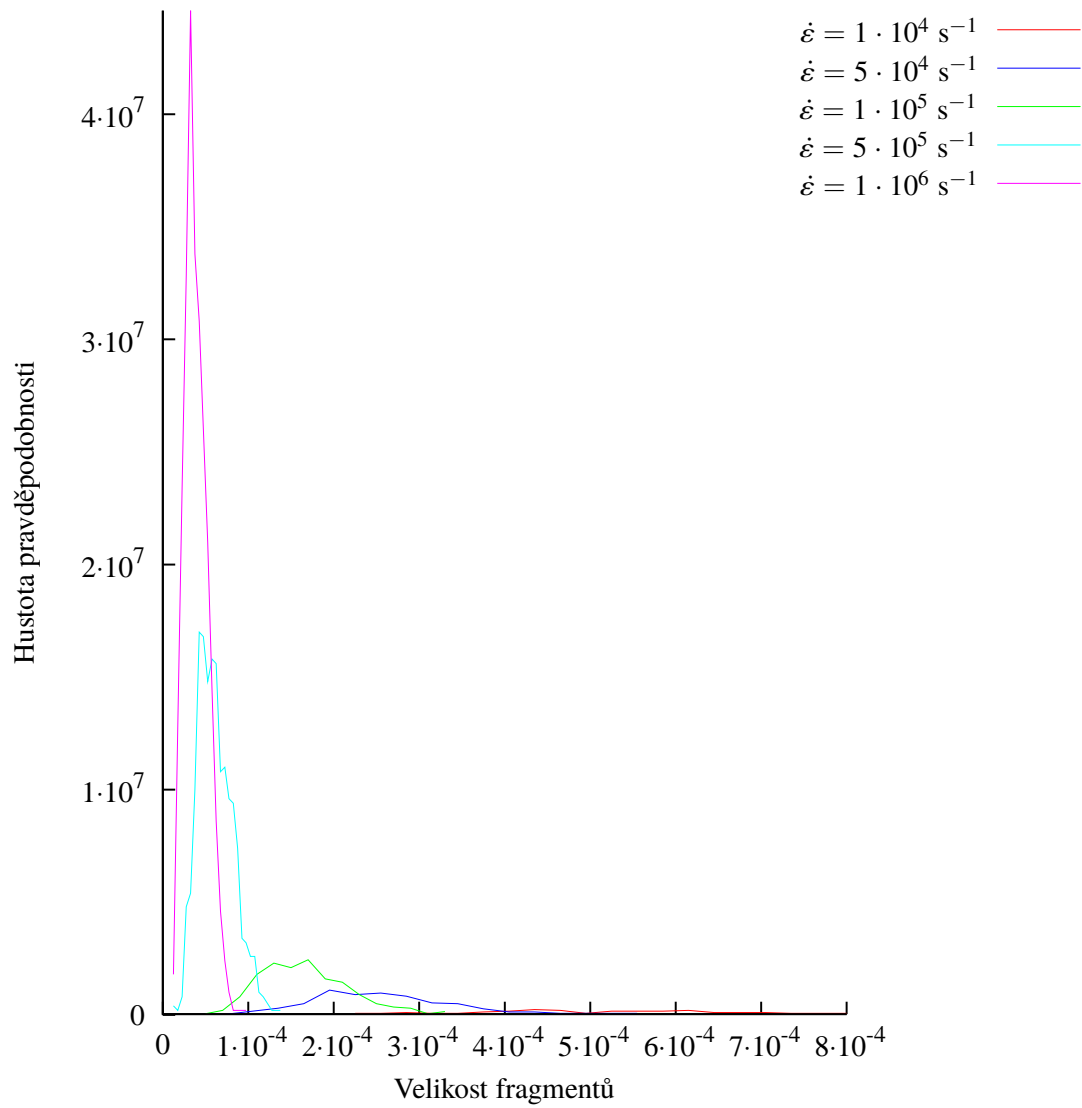
Obrázek 6.6: Konvergence počtu fragmentů pro ideální prut (se všemi materiálovými parametry neměnnými po délce prutu).



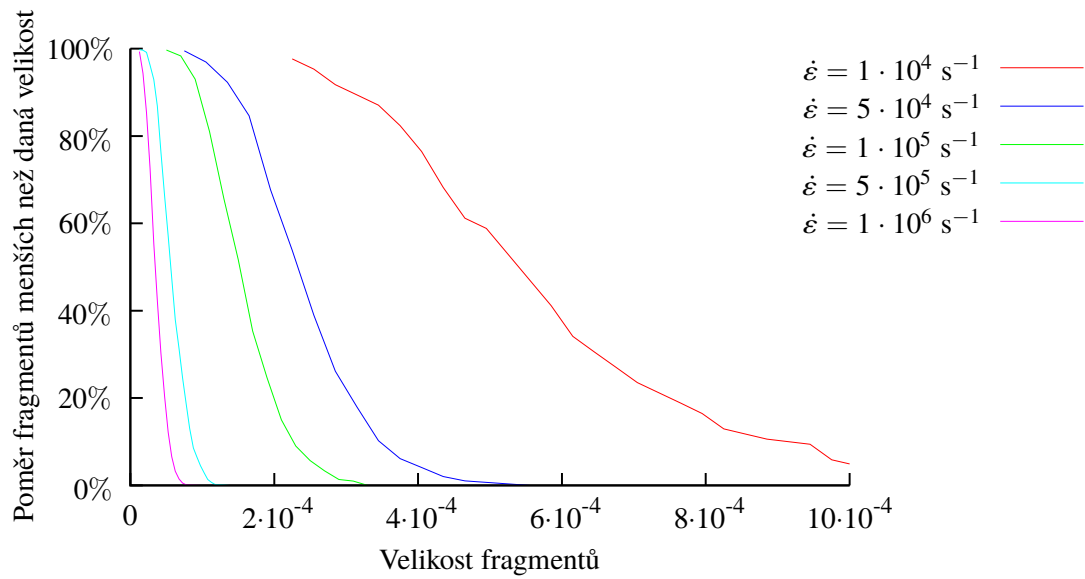
Obrázek 6.7: Konvergence počtu fragmentů při zcela nekorelované perturbaci průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%.



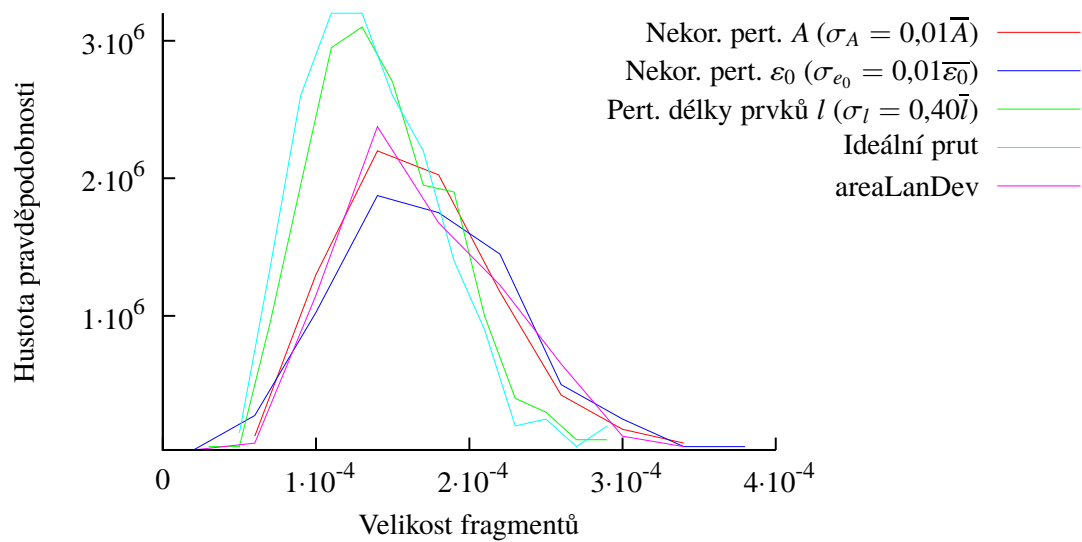
Obrázek 6.8: Konvergence počtu fragmentů při zcela nekorelované perturbaci mezí pružné deformace ε_0 se směrodatnou odchylkou 1%.



Obrázek 6.9: Rozdělení velikosti fragmentů pro různé rychlosti deformace při zcela nekorelované perturbaci průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%.



Obrázek 6.10: Poměr fragmentů menších než daná velikost při zcela nekorelované perturbaci průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%.



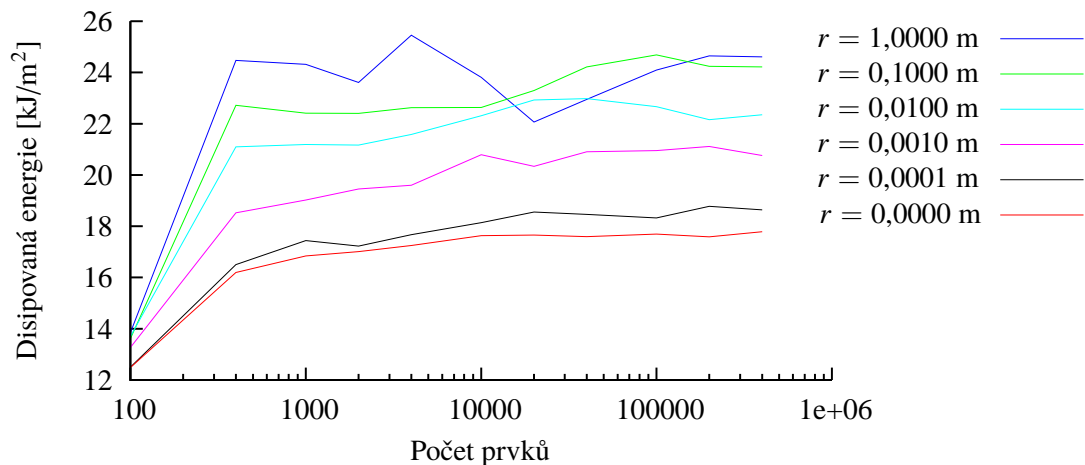
Obrázek 6.11: Rozdělení velikosti fragmentů pro různé perturbační metody.

6.2 Vliv prostorové korelace

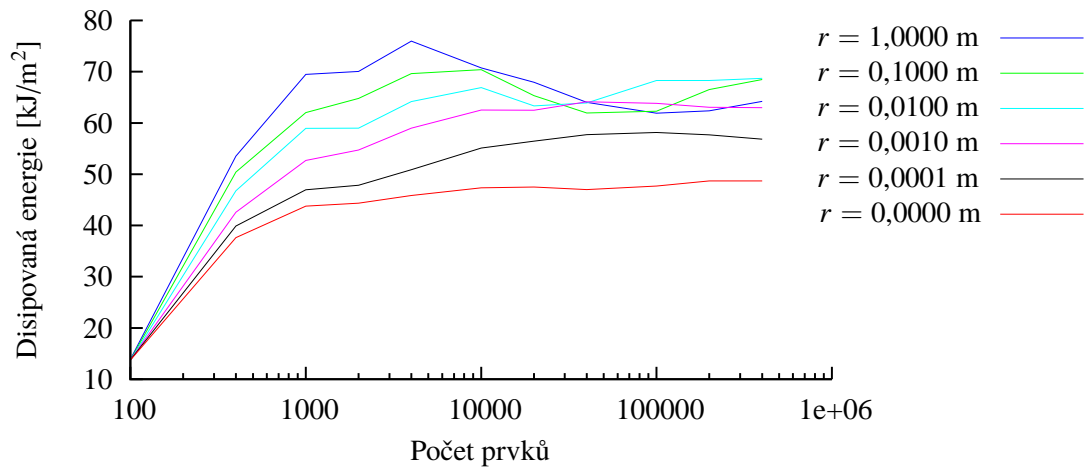
Dosavadní zobrazené výsledky jsou získány při náhodné (nekorelované) volbě materiálových parametrů v jednotlivých prvcích. Jak jsme již ale v průběhu práce ukázali, pro parametry je možné používat fyzikálně výstižnější (zvláště pro větší rozptyl dané veličiny) prostorovou korelaci.

Extrémní hodnoty odpovídají těm dosud použitým – nulová korelační délka je ekvivalentní zcela náhodnému přiřazení vlastností jednotlivým uzlům, naopak velice dlouhá korelační délka r (například několikanásobně delší, než je modelovaný prut) odpovídá ideálnímu prutu, kdy se materiálové vlastnosti nemění. Přesněji bychom měli říci, že pro nekonečnou korelační délku se materiálové vlastnosti nemění, ale i pro konečnou dostatečně velikou délku se vlastnosti mění jen minimálně a ve výsledku se prut chová téměř jako ideální.

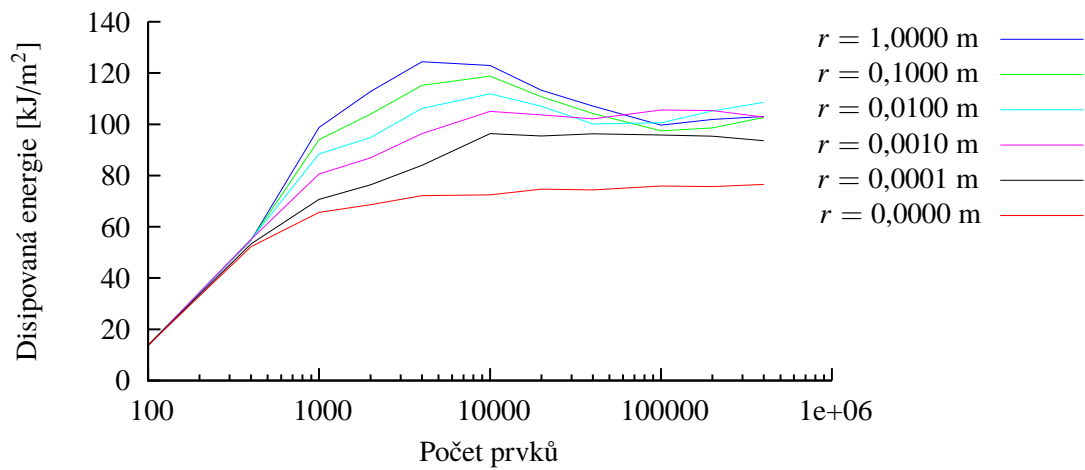
Mezi těmito dvěma extrémy leží reálné rozložení materiálových vlastností. Jak je vidět ze všech následujících grafů, mezilehlé hodnoty tvoří (víceméně) monotónní posloupnost. Dle očekávání se tedy simulace s velmi nízkou korelační délkou blíží případu nekorelovanému a simulace s velmi dlouhou korelační délkou případu ideálnímu. Výsledky simulací s mezilehlými hodnotami leží téměř vždy „někde mezi“.



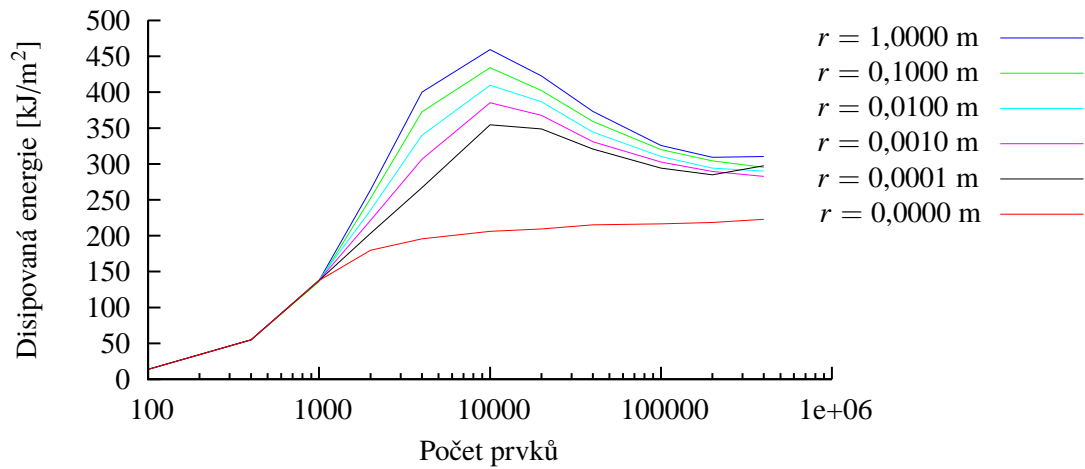
Obrázek 6.12: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\epsilon} = 10^4 \text{ s}^{-1}$.



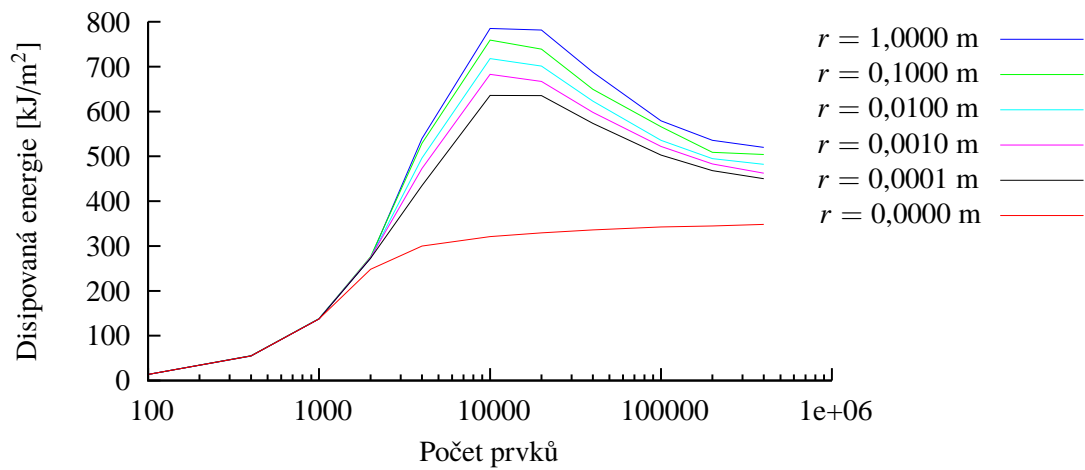
Obrázek 6.13: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$.



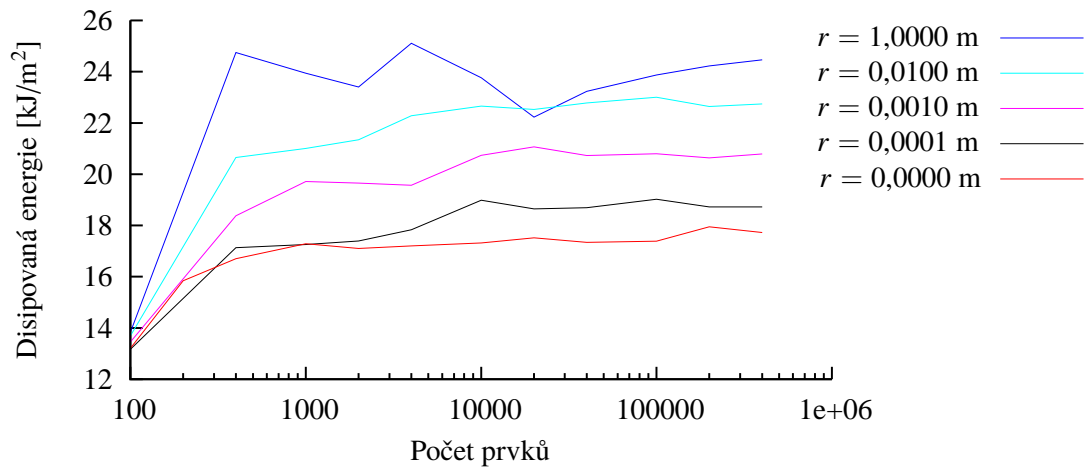
Obrázek 6.14: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 10^5 \text{ s}^{-1}$.



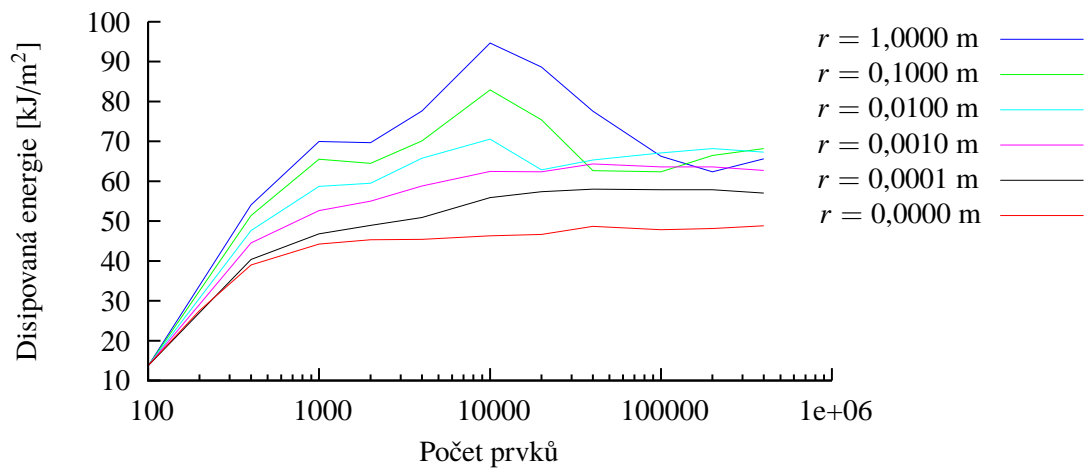
Obrázek 6.15: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$.



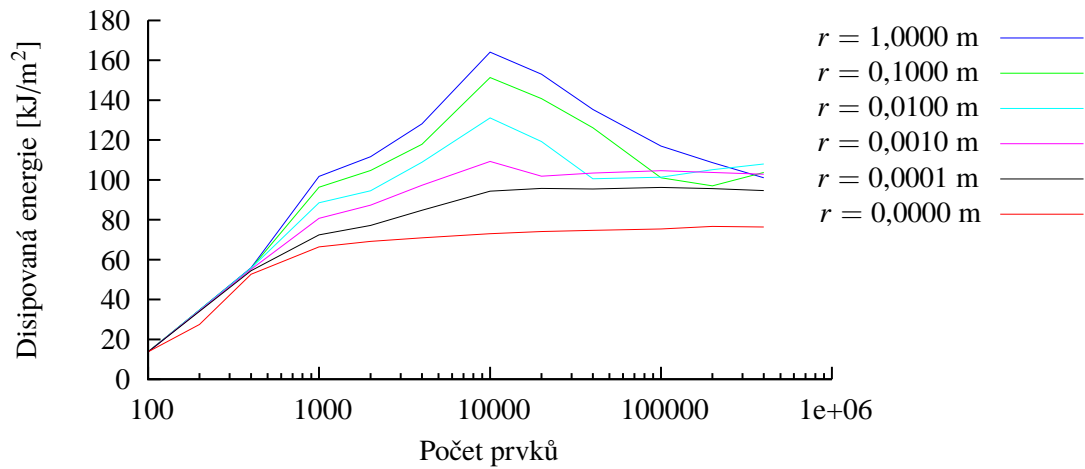
Obrázek 6.16: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace průřezové plochy A se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 10^6 \text{ s}^{-1}$.



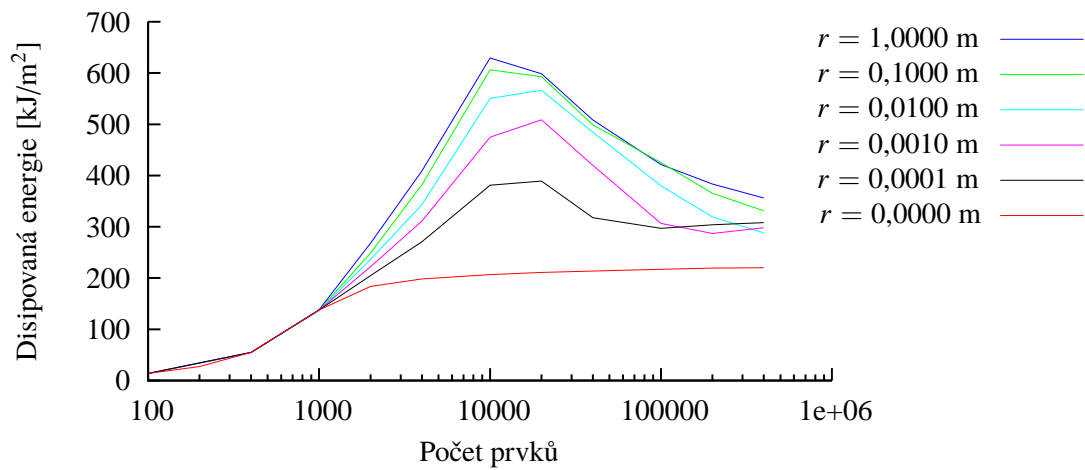
Obrázek 6.17: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace mezní pružné deformace ε_0 se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 10^4 \text{ s}^{-1}$.



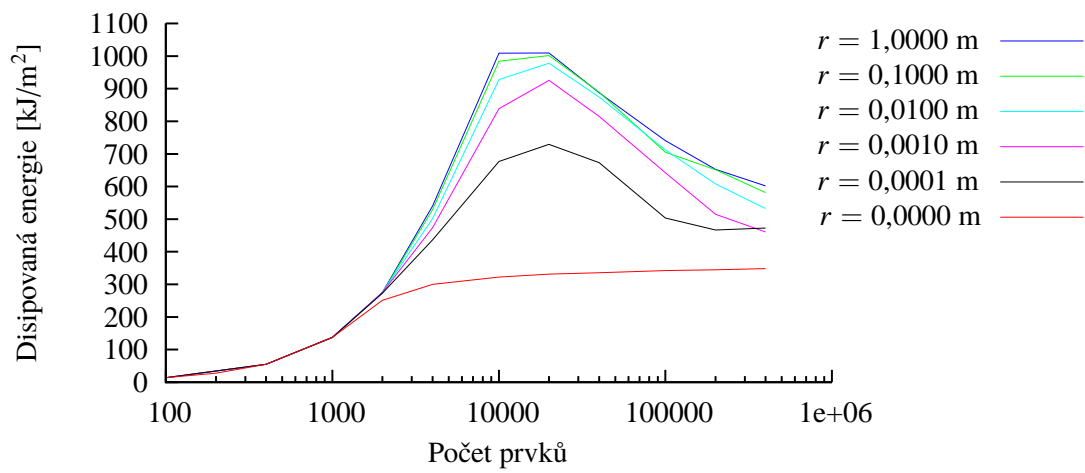
Obrázek 6.18: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace mezní pružné deformace ε_0 se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$.



Obrázek 6.19: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace mezní pružné deformace ε_0 se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 10^5 \text{ s}^{-1}$.



Obrázek 6.20: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace mezní pružné deformace ε_0 se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$.



Obrázek 6.21: Konvergence disipované energie při uvažování prostorové korelace mezní pružné deformace ε_0 se směrodatnou odchylkou 1%. Rychlost deformace $\dot{\varepsilon} = 10^6 \text{ s}^{-1}$.

ZÁVĚR

Tématem předkládané diplomové práce byla analýza dynamické fragmentace materiálů při vysokých hodnotách rychlosti deformace se zaměřením na konkrétní případ rozpínaného prstence (resp. rozpínané válcové skořepiny). Hlavní dosažené výsledky mohou být shrnuty následovně:

- V kapitole 3 byly navrženy tři nové analytické modely (pojmenované Y-T(eq), Y-T(min) a YTGC) pro předpověď průměrné velikosti fragmentů v závislosti na rychlosti deformace. V porovnání s ostatními modely z dostupné literatury vykazují lepší shodu s numerickými experimenty (první dva pro vysoké rychlosti deformace, poslední jmenovaný pro vysoké a střední rychlosti deformace).
- Byl vytvořen jednoúčelový efektivní nástroj *Fragment1d* pro numerické řešení dynamické fragmentace rozpínaného prstence. Jeho výsledky byly verifikovány porovnáním s výsledky jiných dostupných programů (konkrétně konečně prvkového programu Oofem a diskrétně prvkového programu Yade). Zatímco ve výsledcích samotných jsou rozdíly zanedbatelné, v časových nárocích výpočtu jsou rozdíly značné a doba výpočtu v programu *Fragment1d* je přibližně $35\times$ menší než doba výpočtu v *Yade* a přibližně $80\times$ menší než doba výpočtu v *Oofemu*.
- Použití metody konečných prvků a mechaniky poškození vykazuje monotónní konvergenci celkové disipované energie při 1% náhodné perturbaci mezní pružné deformace u jednotlivých prvků (na rozdíl od [34], kde pro tutéž perturbační metodu a při použití metody kohezivních prvků je výsledkem nemonotónní konvergence).
- Uvažování prostorové korelace materiálových vlastností (alespoň dle dosavadních numerických výsledků) má za následek, že výsledky takovéto simulace leží mezi výsledky dvou korelačních extrémů – ideálního prutu (s extrémní korelační délkou ∞) a prutu s nekorelovanou perturbací materiálových parametrů (ekvivalentní extrémní nulové korelační délce).

Jako možnosti další práce na tomto tématu se nabízí například hlubší studium vlivu prostorové korelace, studium vlivu většího rozptylu materiálových vlastností, verifikace navržených analytických modelů i pro jiné materiály, rozšíření analýzy na vícerozměrné problémy atp.

LITERATURA

- [1] Dostupné z: <http://www.oofem.org>.
- [2] Dostupné z: <http://openmp.org>.
- [3] Dostupné z: <http://yade-dem.org>.
- [4] BITTNAR, Z. – ŠEJNOHA, J. *Numerické metody mechaniky 1*. Praha : Vydavatelství ČVUT, 1992. ISBN 80-01-00855-x.
- [5] BITTNAR, Z. – ŠEJNOHA, J. *Numerické metody mechaniky 2*. Praha : Vydavatelství ČVUT, 1992. ISBN 80-01-00901-7.
- [6] BRAJER, X. – HILD, F. – ROUX, S. On the dynamic fragmentation of glass: a meso-damage model. *International Journal of Fracture*. 2010, 163, s. 121–131.
- [7] BROWN, W. L. – KRAPP, R. R. – GRADY, D. E. Fragmentation of the universe. *Astrophysics and Space Science*. 1983, 94, s. 401–412.
- [8] CARPINTERI, A. – PUGNO, N. A fractal comminution approach to evaluate the drilling energy dissipation. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 2002, 26, s. 449–513.
- [9] CLAYTON, J. D. A model for deformation and fragmentation in crushable brittle solids. *International Journal of Impact Engineering*. 2008, 35, s. 269–289.
- [10] ČERNÝ, R. Transport processes in materials I. Pomůcka k předmětu TPM1 (Transportní procesy v materiálech I).
- [11] DENOUAL, C. – HILD, F. A damage model for the dynamic fragmentation of brittle solids. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2000, 183, s. 247–258.
- [12] DENOUAL, C. – HILD, F. Dynamic fragmentation of brittle solids: a multi-scale model. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 2002, 21, s. 105–120.
- [13] DRUGAN, W. J. Dynamic fragmentation of brittle materials: analytical mechanics-based models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2001, 49, s. 1181–1208.
- [14] ERINGEN, A. C. *Mechanics of continua, 2nd edition*. Huntington, New, York : Robert E. Krieger Publishing Company, 1980. ISBN 0-88275-663-X.
- [15] GHANEM, R. G. – SPANOS, P. D. *Stochastic finite elements: a spectral approach*. Mineloa, New York, USA : Dover Publications, Inc., 2003. ISBN 0-486-42818-4.

- [16] GOMMERSTADT, B. Y. – CHUDNOVSKY, A. Modeling of dynamic fragmentation in brittle solids. *Strength, Fracture and Complexity*. 2005, 3, s. 117–126.
- [17] GRADY, D. E. Fragment size distributions from the dynamic fragmentation of brittle solids. *International Journal of Impact Engineering*. 2008, 35, s. 1557–1562.
- [18] GRADY, D. E. – BENSON, D. A. Fragmentation of metal rings by electromagnetic loading. *Experimental Mechanics*. 1983, 4, s. 393–400.
- [19] GRADY, D. E. – OLSEN, M. L. A statistics and energy based theory of dynamic fragmentation. *International Journal of Impact Engineering*. 2003, 29, s. 293–306.
- [20] GRADY, D. E. – WINFREE, N. A. Impact fragmentation of high-velocity compact projectiles on thin plates: a physical and statistical characterization of fragment debris. *International Journal of Impact Engineering*. 2001, 26, s. 249–262.
- [21] HIGLEY, M. – BELMONT, A. Fragment distributions for brittle rods with patterned breaking probabilities. *Physica A*. 2008, 387, s. 6897–6912.
- [22] HILD, F. et al. On the probabilistic–deterministic transition involved in a fragmentation process of brittle materials. *Computers and Structures*. 2003, 81, s. 1241–1253.
- [23] HOLIAN, B. L. – GRADY, D. E. Fragmentation by molecular dynamics: The microscopic "big bang". *Physical review letters*. 1988, 60, s. 1355–1358.
- [24] HOMÉR. *The Iliad* [online]. prosinec 2010. Anglický překlad: A. Pope. Dostupné z: <http://www.gutenberg.org/ebooks/6130>.
- [25] JIRÁSEK, M. Basic concepts and equations of solid mechanics. *Revue Européenne de génie civil*. 2007, 11, s. 879–892.
- [26] JIRÁSEK, M. – BAŽANT, Z. P. *Inelastic analysis of structures*. Chichester, England : John Wiley & Sons, Ltd., 2002. ISBN 0–471–98716–6.
- [27] LEMAITRE, J. – DESMORAT, R. *Engineering damage mechanics: Ductile, creep, fatigue and brittle failures*. Berlín : Springer–Verlag, 2005. ISBN 978–3–540–21503–5.
- [28] LEVY, S. – MOLINARI, J. F. Dynamic fragmentation of ceramics, signature of defects and scaling of fragment sizes. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2010, 58, s. 12–26.
- [29] LEVY, S. et al. Dynamic fragmentation of a ring: Predictable fragment mass distributions. *Physical Review -series e-*. 2010, 82.
- [30] MAITI, S. – RANGASWAMY, K. – GEUBELLE, P. H. Mesoscale analysis of dynamic fragmentation of ceramics under tension. *Acta Materialia*. 2005, 53, s. 823–834.
- [31] MERTA, M. Newmarkova metoda pro numerické řešení počátečních problémů 2. řádu, 2009. Bakalářská práce, VŠB – Technická univerzita Ostrava, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Katedra aplikované matematiky.
- [32] MEULBROEK, J. P. et al. CTH simulations of an expanding ring to study fragmentation. *International Journal of Impact Engineering*. 2008, 35, s. 1661–1665.
- [33] MILLER, O. – FREUND, L. B. – NEEDLEMAN, A. Modeling and simulation of dynamic fragmentation. *International Journal of Fracture*. 1999, 96, s. 101–125.

- [34] MOLINARI, J. et al. The cohesive element approach to dynamic fragmentation: The question of energy convergence. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2006, 69, s. 484–503.
- [35] MOTT, N. F. Fragmentation of shell cases. *Proceedings of the Royal Society of London Series A - Mathematical and Physical Sciences*. 1947, 189, s. 300–308.
- [36] NGUYEN, G. D. *A thermodynamic approach to constitutive modelling of concrete using damage mechanics and plasticity theory*. PhD thesis, University of Oxford, 2005.
- [37] PATZÁK, B. – BITTNAR, Z. Design of object oriented finite element code. *Advances in Engineering Software*. 2001, 32, s. 759–767.
- [38] PATZÁK, B. – RYPL, D. – BITTNAR, Z. Parallel explicit finite element dynamics with nonlocal constitutive models. *Computers and Structures*. 2001, 79, s. 2287–2297.
- [39] SCHINZATO, T. *Box Muller method* [online]. leden 2007. Dostupné z: <http://www.sp.dis.titech.ac.jp/~schinzato/boxmuller.pdf>.
- [40] SHENOY, V. B. – K.-S., K. Disorder effects in dynamic fragmentation of brittle materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2003, 51, s. 2023–2035.
- [41] SMALLEY, L. L. – WOOSLEY, J. K. Application of steady state maximum entropy methods to high kinetic energy impacts on ceramics targets. *International Journal of Impact Engineering*. 1999, 24, s. 869–882.
- [42] SUCHOMEL, R. – MAŠÍN, D. Analýza stability svahu pomocí random finite element method. In *Proc. 35th Conf. Zakládání Staveb*, s. 103–108, Brno, 5.–6. 11. 2007. Akademické nakladatelství CERM.
- [43] ŠMILAUER, V. *Cohesive Particle Model using the Discrete Element Method on the Yade Platform*. PhD thesis, České vysoké učení technické v Praze, Fakulta stavební & Université Grenoble I – Joseph Fourier, École doctorale I-MEP2, 2010. Dostupné z: <http://beta.arcig.cz/~eudoxos/smilauer2010-phd-thesis.pdf>.
- [44] THIRUMALAI, K. – DEMOU, S. G. Effect of reduced pressure on thermal–expansion behavior of rock and its significance to thermal fragmentation. *Journal of Applied Physics*. 1970, 41, s. 5147–5151.
- [45] WANG, M. et al. Prediction of fragment size and ejection distance of masonry wall under blast using homogenized masonry material properties. *International Journal of Impact Engineering*. 2009, 36, s. 808–820.
- [46] WEISSTEIN, E. W. *Cubic Formula* [online]. prosinec 2010. From MathWorld–A Wolfram Web Resource. Dostupné z: <http://mathworld.wolfram.com/CubicFormula.html>.
- [47] YEW, C. H. – TAYLOR, P. A. A thermodynamic theory of dynamic fragmentation. *International Journal of Impact Engineering*. 1994, 15, s. 385–394.
- [48] ZHANG, Y.-Q. – HAO, H. – LU, Y. Anisotropic dynamic damage and fragmentation of rock materials under explosive loading. *International Journal of Engineering Science*. 2003, 41, s. 917–929.
- [49] ZHANG, Y.-Q. – LU, Y. – HAO, H. Analysis of fragment size and ejection velocity at high strain rate. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2004, 46, s. 27–34.

-
- [50] ZHOU, F. – MOLINARI, J. F. – RAMESH, K. T. A cohesive model based fragmentation analysis: effects of strain rate and initial defects distribution. *International Journal of Solids and Structures*. 2005, 42, s. 5181–5207.
- [51] ZHOU, F. – MOLINARI, J. F. – RAMESH, K. T. Analysis of the brittle fragmentation of an expanding ring. *Computational Materials Science*. 2006, 37, s. 74–85.