Politecnico di Milano

Facoltà di Ingegneria Industriale

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Aerospaziali Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Aeronautica



Tesi di Laurea Magistrale

Sviluppo di tecniche per l'analisi peridinamica della frattura duttile in problemi termomeccanici fortemente accoppiati

Relatore:

Prof. Ing. Marco Morandini Correlatore:

> Tesi di Laurea Magistrale di: Fabio Biondani, matricola 841934

Anno accademico 2017-2018

Sommario

Questa tesi di laurea propone lo sviluppo di nuove tecniche basate sulla teoria peridinamica per l'analisi della frattura duttile e della frammentazione in problemi termomeccanici fortemente accoppiati.

La peridinamica è una formulazione della meccanica del continuo, alternativa a quella classica, basata sull'ipotesi che i punti dei corpi deformabili interagiscano tra loro attraverso forze non locali non dipendenti da derivate nello spazio. Ciò permette la definizione e l'insorgenza di cricche e fratture senza bisogno di trattare le derivate spaziali in corrispondenza di discontinuità e senza definire leggi empiriche di crescita delle cricche in funzione di parametri come lo stress intensity factor.

Viene dedicata particolare attenzione alla definizione teorica e all'implementazione numerica dei fenomeni di accoppiamento termomeccanico, che portano ad un ulteriore sviluppo della tecnica di integrazione nel tempo esplicita multirate.

Si descrive anche la procedura implementativa sviluppata che ha permesso una migliore gestione dei legami non locali nel calcolo parallelo.

Nel lavoro di tesi vengono studiati e sviluppati modelli elastici, elastoplastici, viscoelastici e di diffusione termica. I modelli trattati vengono analizzati numericamente per validarli e studiarne le caratteristiche di convergenza e stabilità.

Il problema della frattura duttile viene affrontato implementando un metodo energeticamente consistente, detto del micropotenziale critico.

La formulazione dei vari modelli è stata fatta in maniera tale da poter definire proprietà caratteristiche dei materiali in funzione della temperatura.

Le conoscenze acquisite e sviluppate sono state applicate a due casi studio. Il primo caso studio presenta l'analisi della frattura duttile di un provino di acciaio sottoposto ad alte velocità di deformazione; i risultati numerici ottenuti sono stati confrontati con dati sperimentali di temperatura e deformazione. Il secondo caso studio riporta l'analisi esplorativa del fenomeno di danneggiamento in un meteorite soggetto agli alti carichi termici e di pressione dovuti all'impatto con l'atmosfera.

Si riportano analisi sulle tempistiche di calcolo al variare della dimensioni del problema e sull'efficienza della scalatura multiprocessore del software usato.

Parole chiave: peridinamica; plasticità; frattura duttile; micropotenziale critico; accoppiamento termomeccanico; Peridigm; calcolo parallelo

Abstract

The development of new techniques based on peridynamics theory for the analysis of ductile fracture and fragmentation in strongly coupled thermomechanical problems is submitted in this thesis.

Peridynamics is a formulation of continuum mechanics based on the hypothesis that the points of the deformable bodies interact with each other through non-local forces that does not dependent on spatial derivatives. The definition and the onset of cracks and fractures is permitted without the need to treat the spatial derivatives near discontinuities and without defining empirical laws of crack growth in function of parameters, such as stress intensity factor.

Special attention is given to the theoretical definition and the numerical implementation of thermomechanical coupling phenomena, which lead to a further development of the explicit time integration multirate technique.

The developed implementation that allows better management of non-local bonds in parallel calculation has also been described.

Elastic, elastoplastic, viscoelastic and thermal diffusion models are studied and developed in the thesis work. These models are analyzed numerically to validate them and study their convergence and stability characteristics.

The problem of the ductile fracture is faced by implementing an energetically consistent method, called the critical micropotential model.

The formulation of the peridynamic models was made in such a way as to be able to define characteristic properties of the materials as a function of temperature.

The acquired and developed knowledge have been applied in two case studies. The first case study reports the analysis of the ductile fracture of a steel specimen subjected to high deformation rates; the numerical results obtained are compared with experimental temperature and deformation data. The second case study reports the analysis of the phenomenon of damage in a meteorite subject to high thermal and pressure loads due to the impact with the atmosphere.

Calculation timing of analyses with different numerical sizes, and a study on the efficiency of multiprocessor scaling of the software used are also reported.

Keywords: peridynamics; plasticity; ductile fracture; critical micropotenzial; thermomechanical coupling; Peridigm; parallel computing

El	enco	delle fi	gure	xii	
El	enco	delle ta	abelle	xvii	
Li	ist of Symbols xviii				
1	Intro	oduzior	ne	1	
	1.1	Strutt	ura della tesi	. 3	
	1.2	Softwa	are utilizzati e sviluppati	. 4	
2	Intro	oduzior	ne alla teoria Peridinamica	6	
	2.1	Equaz	zioni di bilancio	. 6	
		2.1.1	Equazioni di bilancio alla traslazione	. 6	
		2.1.2	Primo principio della termodinamica	. 8	
	2.2	Forma	alismo degli "Stati peridinamici"	. 10	
		2.2.1	Operazioni tra gli stati peridinamici	. 11	
		2.2.2	Definizione dei principali stati peridinamici	. 12	
		2.2.3	L'influence state	. 13	
	2.3	Il dan	neggiamento nella peridinamica	. 14	
	2.4	Classi	ficazioni legami costitutivi	. 15	
		2.4.1	Legame non-polare	. 15	
		2.4.2	Legame elastico	. 16	
		2.4.3	Legame ordinario	. 16	
		2.4.4	Bond-based e state-based	. 17	
		2.4.5	Correspondence	. 17	
	2.5	Teoria	a lineare per legami elastici	. 22	
	2.6	Signifi	icato e scelta del raggio dell'orizzonte	. 24	
	2.7	Accop	ppiamento termomeccanico nella peridinamica	. 26	
		2.7.1	Generazione di potenza termica dovuta ad inelasticità $\ .$.	. 26	
		2.7.2	Dilatazione indotta dalla temperatura	. 27	

		2.7.3	Influenza della deformazione sulla conduzione	29
3	Solu	izione	numerica del problema peridinamico	30
	3.1	Discre	etizzazione nello spazio	31
		3.1.1	Analisi di convergenza	33
	3.2	Integr	azione esplicita nel tempo del problema termomeccanico ac-	
		coppia	ato	34
		3.2.1	Metodo Velocity-Verlet	35
		3.2.2	Determinazione del time-step critico per il problema meccanico	36
		3.2.3	Determinazione del time-step critico per il problema di con-	
			duzione termica	38
		3.2.4	Integrazione multi-rate	39
		3.2.5	Integrazione esplicita del problema termomeccanico forte-	
			mente accoppiato in Peridigm	40
	3.3	Integr	azione nel tempo implicita	43
		3.3.1	Metodo di Newmark	44
	3.4	Integr	azione Quasi-Statica	45
	3.5	Condi	zioni al contorno	46
		3.5.1	C.c. essenziali cinematiche	47
		3.5.2	C.c. essenziali termiche	47
		3.5.3	Imposizione di carichi esterni	48
		3.5.4	Imposizione di flussi termici esterni	49
	3.6	Gestic	one dei <i>neighbors</i> in Peridigm	50
	3.7	Svilup	po procedura di gestione dei Bond Speculari in Peridigm	52
		3.7.1	Calcolo del micropotenziale	54
		3.7.2	Validazione	55
	3.8	Propr	ietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura \ldots .	58
		3.8.1	Implementazione	58
		3.8.2	Validazione	60
4	Ana	lisi dei	modelli elastici isotropi	63
	4.1	Model	llo PMB (Prototype Microelastic Brittle)	64
	4.2	Legan	ne elastico ordinario state-based (LPS)	65
	4.3	Mode	lli ordinari correttivi	66
		4.3.1	Fattore di correzione a taglio (SCF)	66
		4.3.2	Position Aware Linear Solid (PALS)	67
	4.4	Legan	ne elastico isotropo di tipo correspondence	69

		4.4.1 Soppressione dei modi di hourglass con il metodo di Littlewood	69
	4.5	Test monodimensionale della convergenza delle frequenze proprie di	
		un'asta	70
	4.6	Test della rigidezza di un'asta con Peridig m $\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	73
		$4.6.1 {\rm Confronto} \ {\rm tra} \ {\rm le} \ {\rm durate} \ {\rm delle} \ {\rm analisi} \ {\rm usando} \ {\rm modelli} \ {\rm diversi} \ .$	77
	4.7	Considerazioni sulla stabilità nel modello PALS $\ . \ . \ . \ . \ .$	78
	4.8	Test grandi deformazioni con Peridigm	81
	4.9	Integrazione del legame elastico isotropo nei modelli correspondence	
		con proprietà dipendenti dalla temperatura $\hdots\dots$	82
5	Svil	uppo di modelli elasto-viscoplastici	84
	5.1	Teoria della plasticità classica	84
		5.1.1 Incrudimento isotropo per il criterio di Von Mises e <i>Ritorno</i>	
		Radiale	86
		5.1.2 Generazione di potenza termica nei modelli di incrudimento	
		isotropo	88
	5.2	Studio degli approcci peridinamici alla elasto-plasticità	89
	5.3	Sviluppo di un modello di incrudimento isotropo per il criterio di	
		Von Mises e Radial Return per modelli peridinamici ordinari	92
		5.3.1 Generazione di potenza termica	94
		5.3.2 Sviluppo di un modello di incrudimento isotropo per il cri-	
		terio di Von Mises e $Radial\ Return$ per modelli peridinamici	
		PALS	95
	5.4	Sviluppo di modelli peridinamici elastoplastici basati sul modello di	
		Johnson-Cook	97
	5.5	Test quasistatico dei modelli di incrudimento isotropo in Peridigm	98
6	Ana	lisi dei modelli di diffusione termica	103
	6.1	Modelli bond-based	104
		6.1.1 Calcolo di κ_1 nel caso tridimensionale $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	105
	6.2	Modello state-based correspondence	106
		6.2.1 Sviluppo di un metodo di soppressione dei modi di hourglass	
		nel modello correspondence	107
	6.3	Test monodimensionale sul modello di Agwai	109
	6.4	Test tridimensionale in Peridigm del modello di Agwai $\ .\ .\ .$.	111
	6.5	Test della conduttività in un prisma con Peridigm	114

	6.6	Svilup condu	po di un fattore correttivo nel modello di Agwai e test della ttività	116
	6.7	Test n	nonodimensionale della soppressione dei modi di hourglass nel	
		model	lo correspondence	119
	6.8	Nota i	mplementativa dei modelli termomeccanici in Peridigm	120
7	Ana	lisi e in	nplementazione dei modelli viscoelastici	124
	7.1	Model	lo classico di viscoelasticità	125
		7.1.1	Standard Linear Solid monodimensionale	125
		7.1.2	Modello generalizzato monodimensionale	127
		7.1.3	Modello generalizzato tridimensionale isotropo per cinemati-	
			ca linearizzata	128
	7.2	Model	lo ordinario viscoelastico di Mitchell	130
	7.3	Model	lo correspondence viscoelastico	132
	7.4	Nota i	mplementativa	133
	7.5	Analis	i in frequenza del modello Standard Linear Solid	134
8	Ana	lisi e in	nplementazione dei modelli di danno	138
	8.1	Allung	gamento critico	141
	8.2	Micro	potenziale critico	143
		8.2.1	Applicazione del modello del micropotenziale critico per J-	
			integral critico dipendente dalla temperatura $\ . \ . \ . \ .$	145
	8.3	Proble	emi nei modelli correspondence	146
	8.4	Test d	el modello del micropotenziale critico	148
		8.4.1	Analisi esplicite di una piastra intagliata in tensione $\ . \ . \ .$	148
		8.4.2	Introduzione di viscosità numerica nell'integrazione esplicita	153
		8.4.3	Analisi della durata delle analisi	156
	8.5	Analis	i dell'influenza del raggio dell'orizzonte e del rapporto m sulla	
		frattu	ra	158
9	Арр	licazior	ne ai casi studio	161
	9.1	Test d	inamico di trazione con la barra di Hopkinson	161
		9.1.1	Descrizione e risultati dell'esperimento di Gilat e Seidt $\ . \ .$	161
		9.1.2	Modellazione dell'esperimento con Peridigm	164
		9.1.3	Risultati delle analisi	168
	9.2	Studic) della frammentazione di un meteorite entrante nell'atmosfera	180
		9.2.1	Carichi esterni agenti sul meteorite \hdots	180

9.2.2	Caratteristiche del materiale e modellazione	184
9.2.3	Discretizzazione del problema e condizioni al contorno $\ . \ . \ .$	185
9.2.4	Analisi con Peridigm	185
10 Conclusion 10.1 Svilup	i pi futuri 	196 198
Bibliografia		201

Elenco delle figure

3.1	Modello a 6 nodi per la validazione della gestione dei bond speculari.	
	Assegnazione di GIDs ai nodi e divisione del modello in 2 sottodo-	
	mini identificati da colori diversi e associati a diversi processori	55
3.2		61
3.3		62
4.1	Plot degli spostamenti su un periodo e dell'analisi in frequenza de-	
	gli spostamenti dell'estremità dell'asta per analisi peridinamiche e	
	classiche	74
4.2	Provino 10 mm x 2 mm x 1 mm con $\Delta x = 0.2$ mm	75
4.3	Modulo di Young misurato al variare del numero di elementi con	
	diversi legami costitutivi	76
4.4	Durata delle analisi esplicite di un provino in trazione usando il	
	modello elastico correspondence per diverse spaziature tra i nodi. $% \left({{{\bf{n}}_{{\rm{n}}}}} \right)$.	77
4.5	Rapporto tra le durate delle analisi esplicite di un provino in trazione	
	usando diversi modelli elastici in riferimento alle durate ottenute da	
	analisi con modello PMB	78
4.6	Curva $\sigma - \varepsilon$ ingegneristica per deformazioni elevate	81
4.7	Curva $\sigma-\varepsilon$ reale per deformazioni elevate	82
5.1	Curva sforzo-deformazioni ingegneristiche analisi quasistatica \ldots	100
5.2	Curva sforzo-deformazioni equivalenti analisi quasistatica	100
5.3	Deformazione plastica equivalente nell'analisi sul modello ordinario	
	al momento dello snervamento iniziale nella mezzeria del provino $\ .$	101
5.4	Deformazione plastica equivalente nell'analisi sul modello correspon-	
	dence al momento dello snervamento iniziale nella mezzeria del pro-	
	vino	102
5.5	Deformazione plastica equivalente nell'analisi sul modello PALS al	
	momento dello snervamento iniziale nella mezzeria del provino	102

6.1	Andamento nel tempo della temperatura nel punto centrale dell'a-	
	sta, e andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale,	
	per le analisi con metodo implicito eseguite con discretizzazioni al	
	variare del numero dei nodi	112
6.2	Provino 3d per il test della diffusione con il modello di Agwai. Le	
	zone rosse sono quelle in cui viene imposta la temperatura	113
6.3	Andamento nel tempo della temperatura nel punto centrale dell'a-	
	sta divisa in lunghezza in 100 nodi, per analisi monodimensionali	
	classica e peridinamica e tridimensionale peridinamica $\ . \ . \ .$	114
6.4	Provino per il test della conduttività con il modello di Agwai. Le	
	zone rosse sono quelle in cui viene imposta la temperatura	116
6.5	Rapporto tra la conduttività misurata e quella teorica al variare del	
	numero di nodi al lato di base, nelle analisi con modello di Agwai $% f(x)=f(x)$.	117
6.6	Rapporto tra la conduttività misurata e quella teorica al variare del	
	numero di nodi al lato di base, nelle analisi con modello di Agwai	
	con TCF	118
6.7	andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale per	
	analisi con il modello state-based con diversi coefficiente di hourglass	121
6.8	confronto diretto dell'andamento della temperatura nella lunghezza	
	all'istante finale per analisi con il modello state-based con diversi	
	coefficiente di hourglass	122
6.9	Schema implementativo dei modelli termomeccanici in Peridigm	123
7.1	Schema del modello visco elastico Standard Linear Solid $\ \ .\ .\ .$.	125
7.2	Schema del modello generalizzato viscoelastico monodimensionale .	127
7.3	Schema del modello visco elastico ordinario Standard Linear Solid $% \mathcal{S}_{\mathrm{s}}$.	130
7.4	Schema implementativo dei modelli viscoelastici (e viscoelastopla-	
	stici) in Peridigm \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	135
7.5	Diagramma di Bode del modulo di $H(s)$	136
7.6	Diagramma di Bode della fase di $H(s)$	137
8.1	Interpretazione geometrica dell'integrale del micropotenziale dei bond	
	passanti per una porzione infinitesima dS di superficie, equazione	
	8.12	142
8.2	Piastra rettangolare intagliata, usata nelle analisi esplicite	149

8.3	Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale critico appena dopo la frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)	152
8.4	Danno nell'analisi con modello ordinario e modello di danno del mi- cropotenziale critico dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)	152
8.5	Curve stress-strain ingegneristici delle analisi esplicite di una piastra intagliata, per modelli del micropotenziale critico smorzati e non smorzati	155
8.6	Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale critico con smorzamento $\eta = 1.01$ dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)	156
8.7	Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale criti- co con smorzamento $\eta = 1.1$ dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)	157
8.8	Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale criti- co con smorzamento $\eta = 3.0$ dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)	157
9.1	Dimensioni del provino usato nel test di trazione con la barra di Hopkinson	162
9.2	Struttura della barra di Hopkinson [48]	162
9.3	Curva sforzo ingegneristico nella strozzatura vs deformazione inge- gneristica nelle barre [25,56]	163
9.4	Rilevazioni termiche sul provino nel test di trazione della barra di Hopkinson [25,56]	163
9.5	Temperature superficiali e deformazioni lungo la linea centrale della strozzatura del provino nel test di trazione ad altà velocità [25,56]	164
9.6	Discretizzazione del volume del provino in cubetti nelle analisi a 8 processori	166
9.7	Divisione della mesh in 8 parti per l'analisi a 8 processori $\ldots \ldots$	167
9.8	Divisione della mesh in 64 parti per l'analisi a 64 processori \ldots	167

9.9	Divisione in blocchi nel provino: il blocco rosso è il blocco in cui è permesso il danneggiamento, il blocco verde è il blocco escluso dalla scrittura in output. Le zone esterne a 30 e -30 nell'asse x sono le zone in cui vengono applicati i vincoli cinematici e sono lunghe quanto l'orizzonte	169
9.10	Andamento della temperatura nel punto centrale della mesh consi- derando da 0 s a 30 μ s, per analisi a $N_{sync_{MH}} = 1$ e $N_{sync_{MH}} =$ 100	171
9.11	Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'istante iniziale del processo di frattura nell'analisi a 8 processori	173
9.12	Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'istante finale del processo di frattura nell'analisi a 8 processori	173
9.13	Confronto tra lo sforzo e la deformazione ingegneristiche ottenuti dall'esperimento e l'analisi con Peridigm	174
9.14	Confronto delle temperature superficiali lungo la linea centrale tra il risultato dell'analisi a 8 processori e quello dell'esperimento	176
9.15	Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'i- stante iniziale del processo di frattura, nell'analisi a 64 processori con $m = 5.05$	177
9.16	Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'i- stante finale del processo di frattura, nell'analisi a 64 processori con m = 5.05	178
9.17	Confronto delle temperature superficiali lungo la linea centrale tra il risultato dell'analisi a 64 processori con $m = 5.05$ e quello dell'e- sperimento	179
9.18	Distribuzione di pressione normale sulla superficie di un meteorite di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s . ad un'altitudine di 05 km , etternati de une simulazione fluide dinemice	101
9.19	Distribuzione di sforzi tangenziali sulla superficie di un meteorite di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s, ad un'altitudine di 95 km.	181
0.90	ottenuti da una simulazione fluidodinamica	182
9.20	rite di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s. ad un'altitudine	109
	di 95 km, ottenuti da una simulazione fiuldodinamica	183

Elenco delle figure

9.21	Sezione in mezzeria della mesh del meteorite. I nodi del meteorite	
	sono mostrati in rosso, quelli del dominio \mathcal{R}_c in blu. Orizzonte	
	$\delta = 1 \text{ mm}$ e rapporto $m = 3.05 \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	186
9.22	Distribuzione di temperatura nel piano di mezzeria del meteorite	
	dopo 10 secondi nell'analisi della diffusione termica (si mostrano	
	anche i punti del dominio \mathcal{R}_C)	188
9.23	Confronto tra la temperatura massima calcolata sul guscio aggiun-	
	tivo e sulla superficie del meteorite	189
9.24	Percentuale di calore sul totale fornito che rimane intrappolato nel	
	dominio aggiuntivo	190
9.25	Percentuale di calore sul totale fornito che rimane intrappolato nel	
	dominio aggiuntivo nell'analisi con spessore del dominio aggiuntivo	
	ridotto di 10 volte $\ldots \ldots \ldots$	191
9.26	Distribuzione di temperatura nel piano di mezzeria del meteorite do-	
	po 10 secondi nell'analisi con spessore del dominio aggiuntivo ridotto	
	di 10 volte (si mostrano anche i punti del dominio \mathcal{R}_C)	192
9.27	Distribuzione del danno locale nel meteorite dopo 1 secondo nell'a-	
	nalisi termomeccanica con orizzonte $\delta=1.0\;\mathrm{mm}$ (non si mostrano i	
	punti del dominio \mathcal{R}_C)	194
9.28	Distribuzione del danno locale nel meteorite dopo 1 secondi nell'a-	
	nalisi termomeccanica con orizzonte $\delta=0.5\;\mathrm{mm}$ (non si mostrano i	
	punti del dominio \mathcal{R}_C)	195

Elenco delle tabelle

 4.1 Errore integrale tra il movimento di estremità delle analisi esplicite classiche e peridinamiche dell'asta	56
 4.2 Moduli di Young ottenuti con integrazione esplicite su modello PALS e LPS, al variare di SF e Δx. Risultati in GPa	72
 4.3 Moduli di Young ottenuti con integrazione esplicite su modello PALS e LPS, al variare di SF e Δx. Risultati in GPa	79
 5.1 Costanti del modello di Johnson-Cook relativo ad alluminio 7075-T6, da [8]	80
6.1 Tempo a raggiunger e $50^\circ C$ nel punto centrale dell'asta per integra-	99
zioni implicite classiche e peridinamiche	111
6.2 Tempo in s a raggiungere 50°C nel punto centrale dell'asta per in- tegrazione del modello tridimensionale in Peridigm e dei modelli monodimensionali classico e peridinamico	113
8.1 Istanti a cui la piastra intagliata in tensione comincia a fratturarsi e a cui è completamente fratturata e tempo impiegato dalla linea di frattura per diffondersi	151
8.2 Istanti (in μ s) a cui la piastra intagliata in tensione è completamente fratturata e in cui comincia a fratturarsi nell'analisi con modello di	
micropotenziale critico con e senza smorzamento.	154
8.3 Durate delle analisi in secondi con diversi modelli di danno, rap- porti con le analisi del modello ordinario senza danno(ND-Ord), del modello ordinario con allungamento critico (AC-Ord) e del modello	
correspondence con allungamento critico (AC-Corr)	158

Elenco delle tabelle

8.4	Istanti (in μ s) in cui il provino si frattura usando il modello del	
	micropotenziale critico al variare di δ e m	159
8.5	Istanti (in $\mu {\rm s})$ in cui il provino si frattura usando il modello dell'al-	
	lungamento critico al variare di δ e m	160
9.1	Tempi, deformazioni e temperature misurati nell'esperimento all'i-	
	nizio della strizione e a rottura $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	164
9.2	Costanti meccaniche e termiche usate nell'analisi del provino	165
9.3	Errori relativi della temperatura nelle analisi con diffusione termica	
	rispetto all'analisi senza diffusione termica usando $N_{sync_{MK}}=1$ e	
	$N_{sync_{MK}} = 94$	170
9.4	Risultati dell'analisi di weak-scaling	179
9.5	Costanti meccaniche e termiche del basalto usate nell'analisi	184

Elenco dei simboli

•	dot product peridinamico
*	tensor product peridinamico
a	generica quantità scalare
a	generico vettore
Α	generico tensore del secondo ordine
A	generico tensore del quarto ordine
\underline{a}	generico stato peridinamico scalare
<u>a</u>	generico stato peridinamico vettoriale
A	generico stato peridinamico doppio
$(\cdot)^{(n)}$	quantità relativa al passo temporale di integrazione (n)
$(\cdot)^{(n+1)}$	quantità relativa al passo temporale di integrazione $(n+1)$
$(\cdot)^{trial}$	valore di tentativo in procedure iterative
$\langle \cdot \rangle$	dipendenza esplicita di uno stato peridinamico da un bond
	vector
$\left[\cdot\right]$	dipendenza esplicita di uno stato peridinamico da
	posizione e tempo
$(\cdot)'$	apice che indica una quantità relativa ad un punto
	dell'orizzonte
$(\cdot)_L$	quantità relativa all'interazione nella teoria locale
$(\cdot)_{NL}$	quantità relativa all'interazione nella teoria non locale
$(\cdot)_{PD}$	quantità relativa all'interazione nella teoria peridinamica
α	costante del modello LPS
α	tensore dei coefficienti di dilatazione termica
$\underline{\alpha}$	stato peridinamico dei coefficienti di dilatazione termica
α_0	somma delle costanti di rigidezza nel modello viscoelastico
	di Mitchell
α_b	costante di rigidezza nel ramo viscoso del modello
	viscoelastico di Mitchell
α_i	variabile interne del modello viscoelastico SLS

$lpha_V$	coefficiente di dilatazione termica volumetrico
β	parametro di Newmark
$oldsymbol{eta}$	tensore dei moduli termici
β_{TQ}	costante di Taylor-Quinney
γ	parametro di Newmark
γ_b	rapporto rigidezze del rami del modello viscoelastico SLS
γ_i	rapporto rigidezze del rami del modello viscoelastico
	generalizzato
$oldsymbol{\Gamma}_{hg}$	vettore hourglass
δ	raggio dell'orizzonte peridinamico
Δ	spessore del dominio aggiuntivo \mathcal{R}_c per le condizioni al
	contorno superficiali
ΔV	volumetto discreto
ϵ	energia interna per unità di volume
ε	generica deformazione in problemi monodimensionali
ε	tensore delle piccole deformazioni
$oldsymbol{arepsilon}_e$	parte elastica di $\boldsymbol{\varepsilon}$
ε_{eng}	deformazione ingegneristica
$oldsymbol{arepsilon}_p$	parte plastica di $\boldsymbol{\varepsilon}$
$\varepsilon_{p_{eff}}$	deformazione plastica efficace
ζ	secondo bond vector negli stati peridinamici doppi
η	coefficiente di smorzamento nelle prove dei modelli di
	danno
η	spostamento relativo di un bond $\pmb{\xi}$
η_b	smorzamento nel modello SLS
θ	campo scalare della temperatura
Θ	dilatazione volumetrica
$ heta_\infty$	temperatura del fluido nella convezione
$\Delta heta$	incremento di temperatura
$\underline{\theta}$	temperature state
$ heta^*$	temperatura omologa
$ heta_{melt}$	temperatura di fusione
$ heta_{ref}$	temperatura di riferimento
κ	costante di microconduttività
κ	vettore delle variabili interne
κ_0	microconduttività nel modello di Gerstle

κ_1	microconduttività nel modello di Agwai
κ_2	microconduttività nel modello di Bobaru
$\tilde{\kappa_1}$	microconduttività κ_1 corretta con TCF
λ	moltiplicatore di Lagrange
Λ	tensore della conducibilità termica
μ	coefficiente di frizione interna
ν	rapporto di Poisson
ξ	bond vector, spesso usato per indicare il generico bond
ρ	densità
$ ho_0$	densità nella configurazione indeformata
σ	generico sforzo in problemi monodimensionali
σ	tensore degli sforzi di Cauchy
<u></u>	influence state deviatorico del modello PALS
$\hat{\pmb{\sigma}}$	tensore degli sforzi di Cauchy non ruotato
σ_{eff}	sforzo efficace di Von Mises
σ_{eng}	sforzo ingegneristico
σ_H	sforzo idrostatico
$\pmb{\sigma}_{PD}$	tensore degli sforzi peridinamico
σ_v	sforzo viscoso
σ_y	funzione sforzo di snervamento
$ au_b$	tempo di rilassamento nel modello viscoelastico di Mitchell
$ au_i$	tempo di rilassamento viscoso
$ au_{j}$	moltiplicatori di Lagrange nel calcolo della funzione di
	influenza deviatorica PALS
ϕ	potenza termica per unità di area
ϕ	damage state
ϕ_{local}	danno locale
ψ	energia libera per unità di volume
Ψ	funzione di snervamento peridinamica
ω	funzione di influenza
ω_0	pulsazione dello zero
ω_P	pulsazione del polo
$\underline{\omega}$	influence state
a	campo vettoriale delle accelerazioni
$A,B,C,m,n,\dot{\varepsilon}_0$	parametri del modello di Johnson-Cook
A	generica area

\mathcal{B}	dominio del generico corpo deformabile
<u>B</u>	stato peridinamico vettoriale dei moduli termici
С	calore specifico
C	micromodulo
\mathbf{C}_0	tensore dei micromoduli
C_{hg}	coefficiente di hourglass
c_S	velocità onde secondarie nel solido
d	tensore ${\bf D}$ ruotato in avanti di ${\bf R}$
D	funzione di dissipazione
D	parte simmetrica di \mathbf{L}
\mathbb{D}	tensore di elasticità
\mathbf{d}_i	parte idrostatica di \mathbf{d}
\mathbf{d}_d	parte deviatorica di ${\bf d}$
$\tilde{\mathbf{d}}$	tensore ${\bf D}$ ruotato in avanti di $\tilde{{\bf R}}$
e_{abs}	energia termica assorbita in un passo di integrazione
	meccanico
\underline{e}	extension state
\underline{e}_i	parte isotropa di \underline{e}
\underline{e}_d	parte deviatorica di \underline{e}
\underline{e}_{db}	back-strain extension state
\underline{e}_{de}	parte elastica e deviatorica dello stato \underline{e}
\underline{e}_{dp}	parte plastica e deviatorica dello stato \underline{e}
\underline{e}_{mech}	parte meccanica di \underline{e}
E	modulo di Young
E_b	rigidezza ramo viscoso nel modello viscoelastico SLS
E_{∞}	rigidezza ramo elastico del modello viscoelastico SLS
E_0	somma delle rigidezze nel modello viscoelastico SLS
f_y	funzione di snervamento
f	scalar pairwise force density
f	pairwise force function
F_{reaz}	forza di reazione vincolare
\mathbf{F}	tensore gradiente di deformazione
$\mathbf{\underline{F}}$	pairwise force state
\mathbf{F}_{bond}	gradiente di deformazione del bond
f_{CS}	frequenza di diffusione delle onde secondarie tra i punti
f_P	frequenza del polo

f_0	frequenza dello zero
g	funzione potenziale di snervamento
G	modulo a taglio
G_b	modulo a taglio del ramo viscoso del modello viscoelastico
	tridimensionale
G_C	rateo di rilascio dell'energia di Griffith
G_{∞}	modulo a taglio del ramo elastico del modello viscoelastico
	tridimensionale
GID	identificativo nodo unico in analisi multi-processore
h	heat flow density
\underline{h}	heat flow state
\underline{h}_{hg}	heat flow state per soppressione dei modi di hourglass
н	shape tensor del modello correspondence
\mathcal{H}	dominio dell'orizzonte peridinamico in coordinate con
	origine in \mathbf{x}
\hbar	costante di convezione
$\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$	dominio sferico centrato in \mathbf{x} chiamato orizzonte
	peridinamico
J_2	secondo invariante del tensore degli sforzi
$J_{2_{(PD)}}$	secondo invariante del tensore degli sforzi peridinamico
J_C	valore critico del J-integral
k	conducibilità termica
K	bulk modulus
Κ	vettore dei parametri di incrudimento
$\underline{\mathbb{K}}$	stato peridinamico doppio modulo tangente
l	lunghezza asta
L	integrale della densità Lagrangiana termica
\mathbf{L}	gradiente di velocità
\mathcal{L}	densità Lagrangiana termica
\mathcal{L}	forza per unità di volume di riferimento dovuta
	all'interazionetra i punti del dominio ${\cal B}$
\mathcal{L}_m	spazio vettoriale di ordine m
l_1, l_2, l_3	dimensioni del provino
LID	identificativo nodo nel processore locale in analisi multi-
	processore

m	rapporto tra raggio dell'orizzonte e discretizzazione
	spaziale
m_w	weighted volume
$\underline{\mathbf{M}}$	direction state
$N_{sync_{(MT)}}$	numero di passi del problema meccanico per ogni passo
	del problema termico
$N_{sync_{(MH)}}$	numero di passi del problema meccanico per ogni passo di
~ /	integrazione della potenza generata
p	pressione peridinamica
p_{abs}	potenza termica assorbita a causa di inelasticità
$ar{p}_{abs}$	potenza termica media assorbita a causa di inelasticità
	durante in un passo di integrazione termico
p_{diss}	potenza dissipata a causa di inelasticità
Р	Primo tensore di Piola-Kirchhoff
q	pairwise heat flow density (thermal response function)
\mathbf{q}	campo vettoriale del flusso di calore
\underline{q}	pairwise heat flow state
q_i	variabili interne formulazione alternativa del modello
	viscoelastico SLS
Q	potenza termica per unità di volume scambiata con gli
	altri punti del dominio
r	potenza generata per unità di volume
\mathbf{R}	tensore di rotazione
$ ilde{\mathbf{R}}$	tensore di rotazione R all'istante \tilde{t}
\mathcal{R}_c	dominio fittizio per l'applicazione delle condizioni al
	contorno
s	allungamento, stretch
s	variabile di Laplace
<u>s</u>	stretch state
SCF	Shear/Surface Correction Factor
S	tensore degli sforzi deviatorici
\mathbf{s}_0	tensore degli sforzi deviatorico istantaneo nella viscoela-
	sticità
\mathbf{s}_b	tensore degli sforzi deviatorico del ramo viscoso
s_C	allungamento critico

$\hat{\mathbf{s}}$	tensore degli sforzi deviatorici non ruotato nel modello
	correspondence
$\hat{\mathbf{s}}_0$	tensore degli sforzi deviatorico istantaneo nella viscoela-
	sticità non ruotato nel modello correspondence
$\hat{\mathbf{s}}_b$	tensore degli sforzi deviatorico del ramo viscoso non
	ruotato nel modello correspondence
t	tempo
Δt_{heat}	passo di integrazione del riscaldamento
Δt_{mech}	passo di integrazione del problema meccanico
Δt_{ther}	passo di integrazione del problema termico
t	bond force density
\underline{t}	scalar force state
\underline{t}_i	scalar force state isotropo
\underline{t}_d	scalar force state deviatorico
$\mathbf{\underline{t}}_{hg}$	componente del force state per la soppressione dei modi
	di hourglass
$\underline{\mathbf{T}}$	force state vettoriale
$\underline{\mathbf{T}}_{\parallel}$	parte del force state parallela al deformation state
$\underline{\mathbf{T}}_{\perp}$	parte del force state perpendicolare al deformation state
TCF	Thermal Correction Factor
$\underline{\mathbf{U}}$	displacement state
u	campo vettoriale degli spostamenti di ${\bf x}$
ü	derivata seconda di ${\bf u}$ nel tempo (accelerazione)
ũ	campo degli spostamenti stabilizzato alla Wu-Ren
v	campo vettoriale delle velocità
V	volume generico
$V_{\mathcal{B}}$	volume del generico corpo deformabile
\underline{w}	micropotential state
$\underline{\tilde{w}}$	micropotential state adimensionalizzato
w_C	micropotenziale critico
W	energia di deformazione per unità di volume
W^0	energia di deformazione per unità di volume "iniziale" nel
	modello 3D viscoelastico
W_d	parte deviatorica dell'energia di deformazione
W_i	parte isotropa dell'energia di deformazione
Δx	discretizzazione spaziale caratteristica

Elenco delle tabelle

x	campo vettoriale delle posizioni in configurazione indefor-
	mata dei punti di un corpo deformabile
$\underline{\mathbf{X}}$	stato peridinamico posizioni relative
\underline{x}	stato peridinamico lunghezza del bond indeformata
У	campo vettoriale delle posizioni in configurazione defor-
	mata di \mathbf{x}
$\underline{\mathbf{Y}}$	deformation state
\underline{y}	stato peridinamico lunghezza del bond deformata
$\mathbf{y}^{\prime\star}$	posizione del vicino prevista da ${f F}$
<u>z</u>	microthermal potential state
Z	parte non uniforme del deformation state
Ζ	potenziale termico

1 Introduzione

Il risparmio del peso e la sicurezza nell'industria aerospaziale sono da sempre di cardinale importanza. A tal fine, le nuove metodologie di analisi strutturale contribuiscono positivamente al progresso in questa direzione.

Questa tesi di laurea propone lo sviluppo di nuove tecniche basate sulla teoria peridinamica per l'analisi della frattura duttile e della frammentazione in problemi termomeccanici fortemente accoppiati.

Negli anni sono state formulate diverse teorie e tecniche di modellazione numerica per l'analisi della meccanica della frattura. I modelli utilizzati in questo campo (e.g. CZM e XFEM) sono caratterizzati da diversi problemi e limitazioni, tra cui la necessità di sapere a priori il punto di partenza e la zona di frattura e l'uso di leggi costitutive che necessitano calibrazioni a seconda del problema specifico.

Uno dei problemi di fondo di tutti questi metodi è il fatto che si basano sulla meccanica del continuo di Cauchy, nella quale la definizione degli sforzi dipende da quantità derivate nello spazio, come il tensore delle deformazioni, che non sono definite nel caso in cui il campo presenti delle discontinuità dovute a fratture.

La peridinamica è una teoria della meccanica del continuo, alternativa a quella classica, basata sull'ipotesi che i punti dei corpi deformabili interagiscano tra loro attraverso forze non locali non dipendenti da derivate nello spazio.

La peridinamica consente di modellare la frattura senza conoscere in anticipo percorso e punto di partenza della linea di frattura. La crescita della frattura è meno sensibile alla direzione della mesh rispetto ai metodi basati sugli elementi finiti, e ciò la rende adatta a studiare il danneggiamento di strutture di geometria complessa dei quali non si conoscono a priori le modalità di rottura.

La necessità di tener conto di interazioni non locali nei problemi della frattura viene suggerita dalla fisica: le forze di coesione nei materiali sono frutto di interazioni a distanza tra molecole, ed è stato dimostrato che nei solidi l'influenza di queste interazioni si diffonde fino a distanze di ordini di grandezza maggiori della molecola più vicina [6]. Inoltre è noto che le caratteristiche di frattura nei materiali dipendono fortemente dalle inclusione di grani e imperfezioni, dalle loro dimensio-

1 Introduzione

ni e dalla loro densità; è quindi appurato che la formazione stessa della frattura è influenzata dalla grandezza, la distanza e l'interazione relativa tra le inclusioni.

Una prima formulazione molto limitata di questa teoria si deve a Silling [58]. Una revisione, ad opera di Silling stesso nel 2007 [62], ha consentito la riproduzione di materiali con legami costitutivi complessi ed ha favorito una sua maggior diffusione. La teoria e l'applicazione sono state successivamente espanse all'analisi di problemi con legami costitutivi non lineari, come legami elasto-plastici per materiali metallici [2], ma anche per calcestruzzi. In più di un articolo viene mostrata la corretta riproduzione dell'esperimento di Kalthoff-Winkler (e.g. [76]), e la riproduzione di complessi problemi di impatto, di ramificazione delle cricche e frammentazione [5].

Una grande attrattiva della formulazione peridinamica del continuo è anche la possibilità di formulare qualsiasi problema di diffusione retto da equazioni alle derivate parziali nello spazio, come ad esempio la diffusione del calore [1]. Ciò rende la peridinamica un campo di studi con molte possibilità di sviluppo e di applicazione.

L'accoppiamento termo-meccanico nella teoria peridinamica è di grande interesse attuale: risultati molto interessanti sono stati ottenuti da D'Antuono e Morandini [16] nella riproduzione della formazione del basalto colonnare dovuta a shock termico attraverso una formulazione peridinamica del problema termo-elastico con accoppiamento debole.

Questa tesi propone lo sviluppo di tecniche di analisi peridinamiche termomeccaniche fortemente accoppiate adatte a simulare meccanismi di frattura duttile e la generazione di potenza dovuta all'insorgenza di irreversibilità nel materiale. Le tecniche e le conoscenze sviluppate verranno implementate in programmi al fine di riprodurre fenomeni di frattura nei casi di studio attraverso un'integrazione esplicita nel tempo.

Vista l'iniziale estraneità dell'autore alla teoria, lo studio della peridinamica è stato perseguito in maniera graduale per l'intera durata della tesi. Lo studio delle tecniche e dei modelli esistenti è stato condotto in maniera critica volto ad analizzare le varie problematiche teoriche ed implementative attraverso lo svolgimento di prove numeriche e confronti con i risultati previsti da tecniche basate sulla meccanica del continuo classica.

1.1 Struttura della tesi

La struttura della tesi si compone di 10 capitoli, compreso quello corrente dedicato all'introduzione del lavoro svolto.

Il secondo capitolo presenta un'introduzione teorica alla peridinamica. Questo capitolo ricopre particolare importanza perchè contiene la maggior parte delle definizioni e dei formalismi usati nell'arco della tesi. L'ultima sezione del capitolo presenta i fondamenti teorici dell'accoppiamento termomeccanico forte nella peridinamica.

Il terzo capitolo presenta le tecniche esistenti di discretizzazione ed integrazione numerica del problema termomeccanico. In questo capitolo vengono anche mostrati lo sviluppo di una nuova tecnica di integrazione esplicita del problema termomeccanico accoppiato derivata da quella sviluppata da D'Antuono e Morandini, di procedure numeriche per la gestione delle interazioni non locali, e dell'implementazione nel software usato che consente di utilizzare proprietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura. Quest'ultimo sviluppo permette di analizzare fenomeni in cui le caratteristiche dei materiali non possono essere considerate costanti, come fenomeni di transizione allotropica o problemi di transizione da comportamento duttile a comportamento fragile (*Ductile To Brittle Transition*, DTBT). La gestione delle interazioni non locali ha richiesto l'implementazione di una sostanziale modifica al programma usato per permettere di trasferire le informazioni relative ai legami peridinamici tra i processori attraverso comunicazioni Gather-Scatter.

Nel quarto capitolo vengono mostrati i principali modelli elastici usati nella teoria peridinamica. Si riportano i risultati e le conclusioni tratte da semplici analisi di convergenza usando i vari modelli.

Nel quinto capitolo si mostra lo studio della teoria della plasticità classica e peridinamica, dei modelli peridinamici elastoplastici presenti in letteratura, dello sviluppo ed implementazione di modelli elastoplastici ad incrudimento isotropo e i risultati di semplici prove di trazione.

Il sesto mostra l'analisi dei modelli peridinamici di diffusione termica. Si riportano anche i risultati di semplici analisi convergenza dei risultati e lo sviluppo di un metodo di soppressione di modi di hourglass in un particolare modello peridinamico di diffusione termica.

Il settimo capitolo è dedicato all'analisi e all'implementazione di modelli peridinamici viscoelastici, basandosi principalmente sul modello di Mitchell [43]. Viene mostrata un'analisi in frequenza dell'azione dei modelli viscoelastici monodimen-

1 Introduzione

sionali, da cui si evince che la scelta del valore dei parametri viscoelastici determina la dissipazione delle sollecitazioni in un determinato range di frequenze.

L'ottavo capitolo è dedicato all'analisi dei modelli di danno presenti in letteratura e all'implementazione di un modello di danno basato sul *J-integral* per riprodurre la frattura duttile. Il modello implementato viene provato in semplici test su una piastra intagliata; si dimostra la necessità di introdurre un leggero smorzamento, tramite un modello viscoelastico, dell'energia delle onde elastiche provocate dalla frattura per impedire la diffusione non fisica del danno.

Il nono capitolo presenta l'analisi di due casi di studio. Il primo caso di studio mostra l'analisi termomeccanica fortemente accoppiata applicata alla rottura di un provino in tensione ad alto rateo di deformazione e il confronto dei risultati con dati sperimentali resi disponibili da Gilat e Seidt [56]; la ripetizione dell'analisi usando diverse discretizzazioni del problema mostra la difficoltà di riprodurre fenomeni di frattura con la peridinamica a causa della sensibilità dei risultati dalla lunghezza caratteristica della peridinamica. Il secondo caso di studio è un'analisi termomeccanica debolmente accoppiata di un meteorite basaltico entrante in atmosfera; questa analisi ha lo scopo di indagare preliminarmente la modalità con cui i meteoriti si rompono, ma diventa anche uno spunto per la riflessione sull'applicazione di carichi superficiali nella peridinamica.

L'ultimo capitolo è dedicato alle conclusioni che si sono dedotte dal lavoro di tesi e alla proposta di sviluppi futuri.

1.2 Software utilizzati e sviluppati

Attualmente sono disponibili pubblicamente pochi software dedicati alla soluzione di problemi tramite la teoria peridinamica; i più noti sono il pacchetto PERI di LAMMPS (che è un software di dinamica molecolare) e Peridigm [51], entrambi sviluppati ai Sandia National Laboratories.

In questa tesi verrà usato Peridigm per le seguenti ragioni:

- è basato sulla libreria Trilinos [28], che permette anche di svolgere analisi con più processori.
- lo sviluppo di modelli peridinamici in Peridigm è notevolmente più avanzato di quello nel pacchetto PERI.

- il software è stato precedentemente usato e sviluppato all'interno del Dipartimento di Scienze e Tecnologie Aerospaziali del Politecnico di Milano nello sviluppo della tesi di Laurea di D'Antuono [12].
- la versione di Peridigm modificata da D'Antuono consente già di poter condurre analisi termomeccaniche debolmente accoppiate.

Peridigm, che è scritto in C++, viene usato come base di partenza nella versione modificata da D'Antuono; durante il lavoro di tesi è stato gradualmente modificato implementando le tecniche di soluzione e i modelli peridinamici usati o sviluppati in questa tesi.

Sono stati sviluppati anche dei programmi di analisi peridinamica in linguaggio Python al fine di studiare semplici problemi monodimensionali meccanici e termici.

Il linguaggio Python è stato adoperato anche per leggere i risultati delle analisi in Peridigm e post-processarli. L'estrazione di dati processabili con Python dai file di output di tipo Exodus è stata compiuta usando uno script incluso in Trilinos chiamato *Blot*, che genera dei file ".csv".

Per poter visualizzare i risultati e fare ulteriori analisi di post-processing è stato usato il programma Paraview.

2 Introduzione alla teoria Peridinamica

Lo scopo di questo capitolo è quello di riportare la base teorica della peridinamica, riferita in particolare al problema termomeccanico, facendo riferimento alla letteratura esistente. Questo capitolo contiene la maggior parte delle definizioni e dei formalismi usati nell'arco della tesi. L'ultima sezione del capitolo presenta i fondamenti teorici dell'accoppiamento termomeccanico forte nella peridinamica.

2.1 Equazioni di bilancio

Con riferimento a [64] mostriamo in questo capitolo le equazioni di bilancio per la teoria peridinamica e le confrontiamo con le equazioni di bilancio per la teoria classica. Le equazioni mostrate in questa sezione sono relative ad una formulazione Lagrangiana, che è la formulazione al momento più usata nella peridinamica.

2.1.1 Equazioni di bilancio alla traslazione

Dato un corpo deformabile di dominio \mathcal{B} di volume $V_{\mathcal{B}}$, si definisce un campo vettoriale \mathbf{x} che indica la generica posizione di riferimento di un punto appartenente al corpo e il campo di spostamenti di questi punti $\mathbf{u}(\mathbf{x},t)$. Si definisce anche il campo delle posizioni in configurazione deformata $\mathbf{y}(\mathbf{x},t) = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x},t)$.

Per ogni \mathbf{x} che appartiene al dominio \mathcal{B} , valgono le seguenti equazioni di bilancio valida sia per le teorie locali che quelle non-locali:

$$\rho_0(\mathbf{x})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t) = \mathcal{L}\big[\mathbf{u}(\mathbf{x},t),t\big] + \mathbf{b}(\mathbf{x},t)$$
(2.1)

dove ρ_0 è la densità di riferimento, **b** la forza esterna per unità di volume di riferimento agente su **x**, e \mathcal{L} è la forza per unità di volume di riferimento dovuta all'interazione con gli altri punti del dominio. La differenza tra la teoria locale e non-locale risiede nella diversa definizione del termine \mathcal{L} :

2.1 Equazioni di bilancio

$$\mathcal{L}_{L}\left[\mathbf{u}(\mathbf{x},t),t\right] = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\mathbf{P}\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u}(\mathbf{x},t)\right]\right)$$
(2.2)

$$\mathcal{L}_{NL}[\mathbf{u}(\mathbf{x},t),t] = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f}(\mathbf{y},\mathbf{y}',\mathbf{x},\mathbf{x}',...) dV_{\mathbf{x}'}$$
(2.3)

dove \mathbf{P} è il primo tensore di Piola-Kirchhoff della teoria classica, e $\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$ e $\mathbf{y}' = \mathbf{y}(\mathbf{x}', t)$. \mathbf{f} è la cosidetta *pairwise force function*, e rappresenta la forza per unità di volume di riferimento al quadrato che scambiano due punti distanti uniti da un legame. Nella teoria peridinamica questi legami a distanza vengono chiamati *bonds*.

Si fa ancora notare che \mathcal{L} nella teoria locale dipende dalle derivate dello spostamento che non sono definite nel caso in cui esistano discontinuità nel campo degli spostamenti.

La teoria peridinamica è una teoria non-locale del continuo con le seguenti tre caratteristiche:

1. L'integrale in equazione 2.3 viene fatto sul solo dominio $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$, un dominio sferico (chiamato *orizzonte peridinamico*) centrato in \mathbf{x} , escluso \mathbf{x} stesso, il cui raggio δ è una proprietà caratteristica del materiale del corpo.

$$\mathcal{H}_{\mathbf{x}} = \{ \mathbf{x}' \in \mathcal{B} : 0 < |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \le \delta , \ \delta \in \mathbb{R} \}$$
(2.4)

$$\mathcal{L}_{PD}[\mathbf{u}(\mathbf{x},t,\ldots),t] = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})} \mathbf{f}(\mathbf{y},\mathbf{y}',\mathbf{x},\mathbf{x}',\ldots) dV_{\mathbf{x}'}$$
(2.5)

2. La pairwise force function gode di una particolare proprietà di simmetria, ciò vuol dire che:

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{y}', \mathbf{x}, \mathbf{x}', ...) = -\mathbf{f}(\mathbf{y}', \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{x}, ...)$$
(2.6)

Si definisce la *bond force density* \mathbf{t} in modo che la simmetria sia automaticamente soddisfatta:

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{y}', \mathbf{x}, \mathbf{x}', ...) = \mathbf{t}(\mathbf{y}, \mathbf{y}', \mathbf{x}, \mathbf{x}', ...) - \mathbf{t}(\mathbf{y}', \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{x}, ...)$$
(2.7)

La bond force density nella peridinamica è la quantità base che viene prodotta da un legame costitutivo. Essa può dipendere non solo dalla posizione e dallo spostamento, ma anche da altre variabili interne come ad esempio la temperatura dei punti legati e il danneggiamento del bond.

3. La pairwise force function è una funzione che può dipendere solo dalle quanti-

2 Introduzione alla teoria Peridinamica

tà relative ai punti che unisce (teoria bond-based), oppure anche dalle quantità relative a tutti i punti all'interno del dominio $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ (teoria state-based). Stessa cosa vale per la bond force density.

L'equazione di bilancio alla traslazione nella peridinamica è quindi:

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{y}} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} (\mathbf{t} - \mathbf{t}') dV_{\mathbf{x}'} + \mathbf{b} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B}$$
(2.8)

dove $\mathbf{t}' = \mathbf{t}(\mathbf{y}', \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{x}, ...).$

Per semplificare la notazione, da ora tutte le quantità riferite a \mathbf{x}' si indicano con l'apice $(\cdot)'$, quelle senza apice saranno riferite a \mathbf{x} . La dipendenza dal punto \mathbf{x} e dal tempo t viene quindi sottintesa, a meno che non sia utile enfatizzarla.

2.1.2 Primo principio della termodinamica

Il primo principio della termodinamica viene usato per ricavare le equazioni peridinamiche della diffusione termica.

Dato un corpo deformabile di dominio \mathcal{B} di volume $V_{\mathcal{B}}$, si definisce il campo scalare $\theta(\mathbf{x}, t)$ che indica la temperatura alla generica posizione di riferimento \mathbf{x} di un punto appartenente al corpo.

Per ogni \mathbf{x} che appartiene al dominio \mathcal{B} , vale la seguente equazione di bilancio valida sia per le teorie locali che quelle non-locali:

$$\dot{\epsilon}(\mathbf{x}, \theta(\mathbf{x}, t), t) = Q(\mathbf{x}, \theta(\mathbf{x}, t), t, ...) + r(\mathbf{x}, t) + p_{abs}(\mathbf{x}, t)$$
(2.9)

dove ϵ è l'energia interna per unità di volume, r la potenza per unità di volume generata o trasmessa dall'esterno nel corpo \mathcal{B} , p_{abs} è la potenza meccanica per unità di volume assorbita e Q è la potenza per unità di volume scambiata con gli altri punti del dominio. Si definisce $\epsilon = \rho_0 c \theta$ in cui c è il calore specifico.

Analogamente a quanto spiegato nella sezione precedente, la differenza principale tra l'approccio classico e quello peridinamico risiede nella diversa definizione del termine Q:

$$Q_{CL} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q} \qquad \mathbf{q} = det(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{F}^{-T}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta} \approx \boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta} \qquad (2.10)$$

$$Q_{PD} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} q(\mathbf{x}, \mathbf{x}', ...) dV_{\mathbf{x}'}$$
(2.11)

 Q_{CL} è la forma locale della legge di Fourier rispetto alla configurazione indeformata, il vettore **q** è il flusso di calore, e il tensore del secondo ordine **A** è il tensore conducibilità termica. \mathbf{F} è il tensore gradiente di deformazione. L'approssimazione è valida per piccoli spostamenti.

q è la pairwise heat flow density (o thermal response function), ha la dimensione di una potenza per unità di volume al quadrato e come la pairwise force function è antisimmetrica. Quindi è possibile definire la heat flow density h tale che:

$$q(\theta, \theta', \mathbf{x}, \mathbf{x}', ...) = h(\theta, \theta', \mathbf{x}, \mathbf{x}', ...) - h(\theta', \theta, \mathbf{x}', \mathbf{x}, ...) = h - h'$$
(2.12)

Analogamente alla pairwise force function, la pairwise heat flow density e la heat flow density sono funzioni che possono dipendere solo dalle quantità relative ai punti che uniscono (teoria bond-based), oppure anche dalle quantità relative a tutti i punti all'interno del dominio $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ (teoria state-based). Si fa notare che la heat flow density non è necessariamente una funzione lineare della differenza di temperatura $\theta(\mathbf{x}', t) - \theta(\mathbf{x}, t)$.

Si noti anche che la formulazione peridinamica consente di modellare la diffusione di calore anche in presenza di discontinuità, al contrario della legge di Fourier.

Il termine p_{abs} rappresenta la potenza specifica assorbita che può essere stata generata a causa di viscosità o plasticità interne al materiale, e nel caso della peridinamica si può dimostrare che la sua espressione è:

$$p_{abs} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} \mathbf{t} \cdot (\dot{\mathbf{y}}' - \dot{\mathbf{y}}) dV_{\mathbf{x}'}$$
(2.13)

Il primo principio della termodinamica per la peridinamica si può quindi riscrivere:

$$\frac{d(\rho_0 c\theta)}{dt} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} (h - h') dV_{\mathbf{x}'} + \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} \mathbf{t} \cdot (\dot{\mathbf{y}}' - \dot{\mathbf{y}}) dV_{\mathbf{x}'} + r \qquad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B}$$
(2.14)

Un altro modo per ottenere quest'ultima equazione è ricavarla dalle equazioni di Eulero-Lagrange, come mostrato da Agwai [1].

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial (\nabla \dot{\theta}(\mathbf{x}, t))} = \frac{\partial L}{\partial \theta(\mathbf{x}, t)}$$
(2.15)

dove L è definita come:

$$L = \int_{\mathcal{B}} \mathcal{L}(\mathbf{x}) dV_{\mathbf{x}}$$
(2.16)

2 Introduzione alla teoria Peridinamica

dove \mathcal{L} è la densità Lagrangiana ed è definita come:

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + r(\mathbf{x})\theta(\mathbf{x}) \tag{2.17}$$

in cui Z è il potenziale termico ed è una funzione convessa delle differenze di temperatura dei punti nell'orizzonte di \mathbf{x} .

2.2 Formalismo degli "Stati peridinamici"

Gli "stati peridinamici" sono oggetti che servono a definire le varie quantità usate nell'ambito della teoria peridinamica.

Sono la base della riformulazione della teoria peridinamica *state-based* fatta nel 2007 ad opera di Silling [62]. Definito $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$ il dominio sferico di raggio δ centrato in \mathbf{x} escluso \mathbf{x} , uno *stato peridinamico* è una funzione definita in $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$ che dipende dal *bond vector* $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$ e viene indicato con lettere sottolineate, ad esempio $\underline{\mathbf{A}}$.

Si riporta di seguito la definizione data da Silling:

Definition. A state of order m is a function $\underline{\mathbf{A}}\langle\cdot\rangle$: $\mathcal{H} \to \mathcal{L}_m$.

dove \mathcal{L}_m è uno spazio tensoriale di un qualsiasi ordine m, e \mathcal{H} è il dominio di tutti i bond vector $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$ diversi da zero tale che \mathbf{x}' appartenga al dominio $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$.

$$\mathcal{H} = \{ \boldsymbol{\xi} \in (\mathbb{R}^3 \backslash \boldsymbol{0}) : (\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{x}) \in (\mathcal{H}_{\mathbf{x}} \cap \mathcal{B}) \}$$
(2.18)

Per indicare la dipendenza dal bond vector degli stati peridinamici vengono usate le parentesi angolari: $\underline{\mathbf{A}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$. Ogni bond vector $\boldsymbol{\xi}$ indica un legame tra un punto \mathbf{x} e un punto \mathbf{x}' , legame chiamato *bond*.

La dipendenza dello stato peridinamico dalla posizione \mathbf{x} e dal tempo t viene racchiusa dentro a parentesi quadre: $\underline{\mathbf{A}}[\mathbf{x}, t]$. Generalmente si usa sottintendere la dipendenza dalla posizione \mathbf{x} e dal tempo t, a meno che non sia utile enfatizzarla.

Gli stati peridinamici possono essere stati scalari, vettoriali o tensoriali. Se $\underline{\mathbf{A}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ è un vettore, allora lo stato $\underline{\mathbf{A}}$ è uno stato peridinamico vettoriale. In questa tesi gli stati vettoriali vengono scritti in grassetto, per distinguerli dagli stati scalari.

Esistono anche stati detti *doppi*, perchè dipendono contemporaneamente da due bond vector indipendenti, e si indicano con <u>A</u>. Gli stati doppi sono solitamente stati peridinamici tensoriali del secondo ordine, nel senso che <u>A</u> $\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta} \rangle$ è un tensore del secondo ordine.
2.2.1 Operazioni tra gli stati peridinamici

Sono definite anche operazioni tra gli stati peridinamici. Negli stati che dipendono da un unico bond vector le somme e i comuni prodotti scalari, vettoriali e tensoriali si riflettono direttamente in operazioni tra i valori assunti per i bond vector corrispondenti. Si riporta ad esempio il prodotto scalare tra due stati vettoriali, che definisce un nuovo stato scalare:

$$\underline{c}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = (\underline{\mathbf{a}}\cdot\underline{\mathbf{b}})\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \underline{\mathbf{a}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle\cdot\underline{\mathbf{b}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle$$
(2.19)

Un'operazione interessante tra stati peridinamici è un nuovo "dot product peridinamico" che è così definito rispettivamente per stati scalari e stati vettoriali:

$$\underline{a} \bullet \underline{b} = \int_{\mathcal{H}} (\underline{a} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \underline{b} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\boldsymbol{\xi}} \qquad \underline{\mathbf{a}} \bullet \underline{\mathbf{b}} = \int_{\mathcal{H}} (\underline{\mathbf{a}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \cdot \underline{\mathbf{b}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\boldsymbol{\xi}} \qquad (2.20)$$

Come si è visto, il dot product peridinamico tra due stati peridinamici che dipendono da un unico bond vector definisce degli scalari.

Il dot product peridinamico tra uno stato doppio e uno stato vettoriale porta alla formazione di un nuovo stato vettoriale:

$$(\underline{\mathbb{A}} \bullet \underline{\mathbf{b}}) \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \int_{\mathcal{H}} (\underline{\mathbb{A}} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta} \rangle \cdot \underline{\mathbf{b}} \langle \boldsymbol{\zeta} \rangle) dV_{\boldsymbol{\zeta}}$$
(2.21)

Un nuovo "tensor product peridinamico" è definito come segue:

$$\underline{\mathbf{a}} * \underline{\mathbf{b}} = \int_{\mathcal{H}} (\underline{\mathbf{a}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \otimes \underline{\mathbf{b}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\boldsymbol{\xi}}$$
(2.22)

I legami costitutivi vengono spesso costruiti da funzioni di stati peridinamici, che si possono indicare ad esempio come $\phi(\underline{a})$.

é utile definire anche la derivata di Frechet della generica funzione di uno stato peridinamico, di seguito vengono date le definizioni relative a funzioni di stati scalari e vettoriali:

$$\phi(\underline{A} + \underline{a}) = \phi(\underline{A}) + \nabla \phi(\underline{A} + \underline{a}) \bullet \underline{a} + o(||\underline{a}||)$$
(2.23)

$$\phi(\underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{a}}) = \phi(\underline{\mathbf{A}}) + \nabla\phi(\underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{a}}) \bullet \underline{\mathbf{a}} + o(||\underline{\mathbf{a}}||)$$
(2.24)

La derivata di Frechet di una funzione ϕ di uno stato o più stati peridinamici rispetto allo stato <u>A</u> può anche essere indicata come: $\phi_{\underline{A}} \circ \frac{\partial \phi}{\partial \underline{A}}$.

2.2.2 Definizione dei principali stati peridinamici

Nella peridinamica il legame costitutivo descrive una relazione con cui ottenere il force state $\underline{\mathbf{T}}$ tale che $\mathbf{t} = \underline{\mathbf{T}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ in funzione del deformation state $\underline{\mathbf{Y}} = \mathbf{y}' - \mathbf{y}$ e di altre quantità.

Il force state è definito dal legame costitutivo con una funzione del tipo:

$$\underline{\mathbf{T}} = \underline{\hat{\mathbf{T}}}(\underline{\mathbf{Y}}, ...) \tag{2.25}$$

Essendo $\underline{\mathbf{T}} \in \underline{\mathbf{Y}}$ energeticamente coniugati, il modo con cui si ottiene questa relazione è solitamente derivando un funzionale energetico come l'energia libera per unità di volume ψ rispetto al deformation state.

$$d\psi = \int_{\mathcal{H}} \left(\underline{\mathbf{T}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \cdot d\underline{\mathbf{Y}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \right) dV_{\boldsymbol{\xi}} = \underline{\mathbf{T}} \bullet d\underline{\mathbf{Y}} \quad \rightarrow \quad \underline{\mathbf{T}} = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\mathbf{Y}}} = \psi_{\underline{\mathbf{Y}}}$$
(2.26)

Altri stati peridinamici utili che verranno usati nella tesi sono $\underline{\mathbf{X}} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$, il pairwise force state $\underline{\mathbf{F}}$ (tale che $\mathbf{f} = \underline{\mathbf{F}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle$) lo zero-state $\underline{0}$ in cui $\underline{0} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 0$, l'analogo identity-state $\underline{1}$, e soprattutto il micropotential state (stato micropotenziale) \underline{w} .

Il *micropotential state* definisce l'energia di deformazione per unità di volume al quadrato accumulata in un bond tra i due punti $\mathbf{x} \in \mathbf{x}'$:

$$\underline{w}[\tilde{t}]\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \underline{w}'[\tilde{t}]\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle = \int_0^{\tilde{t}} (\underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle + \underline{\mathbf{T}}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle) \cdot \underline{\dot{\mathbf{Y}}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle dt \qquad (2.27)$$

Nel caso bond-based la definizione di micropotenziale è semplificata:

$$\underline{w}[\tilde{t}]\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \int_{0}^{\tilde{t}} \underline{\mathbf{F}}[t] \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}} dt \qquad (2.28)$$

in cui $\boldsymbol{\eta} = (\mathbf{y}' - \mathbf{x}') - (\mathbf{y} - \mathbf{x}) = (\mathbf{y}' - \mathbf{y}) - \boldsymbol{\xi}$ è lo spostamento relativo in un bond, ed $\boldsymbol{\dot{\eta}}$ è la sua derivata nel tempo.

Per le analisi di diffusione termica è utile definire l'heat flow state <u>h</u> tale che $h = \underline{h}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ [33, 40], il pairwise heat flow state <u>q</u> tale che $q = \underline{q}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$, e il temperature state $\underline{\theta} = \theta' - \theta$. L'heat flow state dipende dallo stesso temperature state e da altre variabili. I vari modelli termici peridinamici variano a seconda della definizione dell'heat flow state.

$$\underline{h} = \underline{\hat{h}}(\underline{\theta}, \dots) \tag{2.29}$$

Nella teoria peridinamica del problema termico il microthermal potential state z

2.2 Formalismo degli "Stati peridinamici"

è definito da:

$$Z(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{H}} \frac{1}{2} \left(\underline{z} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle + \underline{z}' \langle -\boldsymbol{\xi} \rangle \right) dV_{\boldsymbol{\xi}}$$
(2.30)

che nel caso bond-based si riduce a:

$$Z(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{H}} \underline{z} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle dV_{\boldsymbol{\xi}}$$
(2.31)

La thermal response function nella teoria bond-based è collegata al microthermal potential state [1].

$$\underline{q}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{\partial \underline{z} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle}{\partial \underline{\theta} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle} \tag{2.32}$$

Usando il formalismo degli stati peridinamici l'equazione di bilancio e il primo principio della termodinamica possono essere riscritti.

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{y}} = \int_{\mathcal{H}} (\underline{\mathbf{T}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle - \underline{\mathbf{T}}' \langle -\boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\boldsymbol{\xi}} + \mathbf{b} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B}$$
(2.33)

$$\frac{d(\rho_0 c\theta)}{dt} = \int_{\mathcal{H}} (\underline{h} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle - \underline{h}' \langle -\boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\boldsymbol{\xi}} + \underline{\mathbf{T}} \bullet \dot{\underline{\mathbf{Y}}} + r \qquad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B}$$
(2.34)

2.2.3 L'influence state

Uno degli aspetti più peculiari della peridinamica state-based è l'uso dell'*influence* state $\underline{\omega}$. Questo stato è associato ad una funzione di influenza che serve a pesare diversamente i valori in funzione del valore assoluto del bond vector $|\boldsymbol{\xi}|$.

L'influence state può avere diverse forme, per esempio può essere costante, triangolare, gaussiana o una generica polinomiale.

$$Costante \to \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1.0$$

$$Triangolare \to \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1.0 - \frac{|\boldsymbol{\xi}|}{\delta}$$

$$Gaussiana \to \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = e^{-|\boldsymbol{\xi}|^2}$$

$$Splinecubica \to \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 2\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{\delta}\right)^3 - 3\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{\delta}\right)^2 + 1 \qquad (2.35)$$

$$Quadratica \to \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \left(1.0 - \frac{|\boldsymbol{\xi}|}{\delta}\right)^2$$

$$Inversa \to \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{\delta}{|\boldsymbol{\xi}|}$$

Come si potrà vedere successivamente, solitamente la force density dipende linearmente dal vettore $\boldsymbol{\xi}$. Questa dipendenza non rispetta il comportamento delle

più conosciute forze di interazione a distanza che sono state osservate in natura (ad esempio le forze gravitazionali o le forze elettrostatiche). Una scelta accurata della funzione di influenza ω permette di esprimere le forze peridinamiche con la dipendenza dalla distanza che si desidera, anche per pesare maggiormente l'influenza dei nodi vicini rispetto a quelli lontani.

Nella pratica i modelli peridinamici vengono formulati per funzionare indipendentemente dalla scelta della funzione di influenza, e quest'ultima viene usata più come una funzione di pesatura dell'influenza dei nodi dentro all'orizzonte. Fa eccezione il grande lavoro fatto dal Madenci ed Oterkus nella scrittura del loro libro [40], in cui vengono ricavate formule e materiali costitutivi a partire da funzioni di influenza triangolari.

2.3 Il danneggiamento nella peridinamica

La peridinamica consente di modellare il danneggiamento direttamente nel legame costitutivo. La modellazione del danno consente di tagliare o danneggiare irreversibilmente un bond nel momento in cui vengono raggiunta una condizione di rottura, che può essere ad esempio il superamento di un allungamento critico o di un micropotenziale critico. Il taglio di un bond in pratica si può tradurre nell'azzeramento della force density e dell'heat flow density relative al bond, in modo che i punti legati dal bond non interagiscano più.

Questo spesso viene fatto introducendo uno stato peridinamico chiamato damage state ϕ che può assumere valori $\phi \langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ di 1 o 0 a seconda se il bond è stato tagliato o no. Il force state viene fatto dipendere dal damage state:

$$\underline{\mathbf{T}} = (\underline{1} - \phi)\underline{\mathbf{T}}_0 \tag{2.36}$$

dove $\underline{\mathbf{T}}_0$ è il force state senza considerare il danno.

In questa tesi verranno mostrati due meccanismi di rottura del bond:

- Allungamento critico (Critical Stretch): Si definisce lo stretch state $\underline{s} = \frac{|\underline{\mathbf{Y}}| |\underline{\mathbf{X}}|}{|\underline{\mathbf{X}}|}$. Nel momento in cui $\underline{s} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ supera il valore critico s_c si impone $\underline{\phi} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1$
- Micropotenziale critico (Critical Micropotential): Nel momento in cui il micropotenziale $\underline{w}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ supera il valore critico w_c si impone $\phi \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1$

Si definisce anche il danno locale di un punto ϕ_{local} , che in sostanza è una media pesata del danno dei bond del punto stesso:

$$\phi_{local} = \frac{\int_{\mathcal{H}} \underline{\phi} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle dV_{\boldsymbol{\xi}}}{V_{\mathcal{H}}}$$
(2.37)

Questa quantità è una stima della percentuale di bond recisi, utile a valutare quando si è vicini alla creazione di una superficie di frattura. Ci si può aspettare che quando il danno locale raggiunge circa 0.5 possa formarsi una cricca.

Un approfondimento sull'implementazione del danno in questa tesi viene mostrato nel capitolo 8.

2.4 Classificazioni legami costitutivi

In questa sezione vengono descritte le principali classificazioni dei legami costitutivi che saranno utili in questa tesi, come sono state descritte in [62,64].

2.4.1 Legame non-polare

Nel problema meccanico, l'ipotesi di continuo non-polare implica che la risultante della forza specifica fatta sul volumetto del generico \mathbf{x} dall'interazione con gli altri punti del corpo non genera momento su \mathbf{x} . Nella teoria classica questo si traduce nella simmetria del tensore di Cauchy.

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \tag{2.38}$$

Nella teoria peridinamica, invece, si traduce direttamente nella seguente condizione.

$$\int_{\mathcal{H}} \underline{\mathbf{Y}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \times \underline{\mathbf{T}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle dV_{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{0}$$
(2.39)

dove il simbolo \times indica il prodotto vettoriale.

Si fa notare che le due definizioni non coincidono, se non per $\delta \to 0$. Se si pensa per esempio allo stato di sforzo in una trave, risulta evidente che la modellazione della flessione usando un modello tridimensionale con un legame peridinamico non polare è possibile solamente se l'orizzonte è molto più piccolo delle dimensioni della sezione.

2.4.2 Legame elastico

Se la densità di energia libera ψ dipende solo dal deformation state, allora il legame è detto elastico. La densità di energia libera viene chiamata densità di energia di deformazione e viene indicata con $W = W(\underline{\mathbf{Y}})$. Dall'equazione 2.26 si può scrivere

$$\dot{W} = \underline{\mathbf{T}} \bullet \underline{\dot{\mathbf{Y}}} \qquad \underline{\mathbf{T}} = W_{\underline{\mathbf{Y}}}$$
(2.40)

2.4.3 Legame ordinario

Il vettore $\underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ può essere diviso in una parte collineare a $\underline{\mathbf{Y}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ ed una ortogonale.

$$\underline{\mathbf{T}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \underline{\mathbf{T}}_{\parallel}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle + \underline{\mathbf{T}}_{\perp}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle \tag{2.41}$$

Si definisce $\underline{\mathbf{M}}$ direction state come:

$$\underline{\mathbf{M}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{\underline{\mathbf{Y}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle}{|\underline{\mathbf{Y}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle|} \qquad \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathcal{H}$$
(2.42)

Allora la parte collineare di $\underline{\mathbf{T}}$ può essere espressa come:

$$\underline{\mathbf{T}}_{\parallel}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \left(\underline{\mathbf{T}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle \cdot \underline{\mathbf{M}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle\right)\underline{\mathbf{M}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle \tag{2.43}$$

Viene chiamato *ordinario* un legame costitutivo per cui:

$$\underline{\mathbf{T}} = \underline{\mathbf{T}}_{\parallel} \quad , \quad \underline{\mathbf{T}}_{\perp} = \underline{\mathbf{0}} \tag{2.44}$$

Dato che la direzione della force density in un legame ordinario è uguale alla direzione del bond deformato, è possibile definire uno *scalar force state* definito in questo modo:

$$\underline{t} = \underline{\mathbf{T}} \cdot \underline{\mathbf{M}} = \underline{\mathbf{T}}_{\parallel} \cdot \underline{\mathbf{M}} \qquad \qquad \underline{\mathbf{T}} = \underline{t} \, \underline{\mathbf{M}} \tag{2.45}$$

Si fa notare che i legami ordinari sono legami non-polari, infatti il braccio del force state di ogni bond rispetto ai nodi è nullo.

Per un legame ordinario è utile definire uno stato peridinamico scalare chiamato extension state \underline{e} che indica di quanto si è estesa la lunghezza di un bond rispetto alla configurazione di riferimento.

$$\underline{e} = \underline{y} - \underline{x} \qquad \underline{y} = |\underline{\mathbf{Y}}| \qquad \underline{x} = |\underline{\mathbf{X}}| \qquad (2.46)$$

Dall'equazione 2.26 si può dimostrare che lo scalar force state è ottenibile direttamente derivando il funzionale energetico rispetto all'extension state.

$$dW = \underline{\mathbf{T}} \bullet d\underline{\mathbf{Y}} = (\underline{\mathbf{M}} \underline{t}) \bullet d(\underline{\mathbf{M}} \underline{y}) = \underline{t} \bullet d\underline{y} = \underline{t} \bullet d\underline{e} \quad \rightarrow \quad \underline{t} = W_{\underline{e}} \tag{2.47}$$

I legami che non sono ordinari sono semplicemente chiamati non-ordinari.

2.4.4 Bond-based e state-based

La formulazione *bond-based* della peridinamica è stata la prima ad essere formulata in ordine cronologico da Silling nel 2000 [58], sebbene prima non fosse conosciuta con questo nome. Questa nominazione è stata fatta invece nel 2007, quando Silling ha riformulato la peridinamica rendendola più generale con l'introduzione della peridinamica *state-based*.

Si dice legame costitutivo bond-based qualsiasi legame in cui il force state di un bond dipende solo da quantità relative a quel bond, come ad esempio la posizione relativa $\underline{\mathbf{Y}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$:

$$\underline{\mathbf{T}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \underline{\mathbf{T}}(\underline{\mathbf{Y}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle,\boldsymbol{\xi}) \quad \forall\boldsymbol{\xi}\in\mathcal{H}$$
(2.48)

Questi legami sono molto semplici da applicare, e godono del vantaggio di richiedere meno calcoli per essere applicati (integrazione più veloce). Tuttavia in alcuni casi soffrono di importanti limitazioni. Per esempio il legame costitutivo elastico bond-based (Prototype Material Brittle) soffre della limitazione di poter essere applicabile solo a materiali con un rapporto di Poisson uguale a 0.25.

Si definiscono invece legami costitutivi *state-based* quei legami costitutivi in cui la force density non dipende solamente dalla deformazione del bond di pertinenza, ma può dipendere anche dalla deformazione degli altri bond.

Per il problema meccanico la teoria bond-based viene gradualmente abbandonata dalla letteratura, e non sarà usata nella presente tesi a causa delle forte limitazioni già dette. Per il problema della diffusione termica invece la teoria bond-based non ha per ora riscontrato problemi di modellazione, ciò l'ha resa vantaggiosa in confronto alla formulazione state-based della diffusione termica.

2.4.5 Correspondence

Vengono chiamati *correspondence* tutti quei legami costitutivi che si basano sulla riproduzione tramite la teoria peridinamica delle quantità tipiche della teoria del continuo classica. I legami costitutivi racchiusi in questa classe sono state-based

e non ordinari. Questa classe di legami è stata sviluppata da Silling in [64] e da Warren [71] ed è stata poi ripresa da molti altri articoli perchè consente di utilizzare con facilità i legami costitutivi della teoria classica nella peridinamica.

Secondo una definizione di Silling, un legame costitutivo peridinamico ha *corri*spondenza con un legame costitutivo classico se:

$$\underline{\mathbf{Y}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \mathbf{F}\boldsymbol{\xi} \qquad \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathcal{H}$$
(2.49)

dove \mathbf{F} è il gradiente di deformazione. Questa condizione corrisponde all'applicazione della definizione di gradiente di deformazione a tutto l'orizzonte senza tenere conto del fatto che i bond sono interazioni tra punti distanti tra loro, e non vettori infinitesimi come nella teoria classica. Risulta evidente che una corrispondenza è possibile solo se tutto il dominio presenta lo stesso stato di deformazione.

La stima peridinamica del gradiente di deformazione è:

$$\mathbf{F} \approx \tilde{\mathbf{F}} = \left(\underline{\omega}\mathbf{Y} \ast \underline{\mathbf{X}}\right)\mathbf{H}^{-1} = \left(\int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} (\underline{\omega}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \underline{\mathbf{Y}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \otimes \underline{\mathbf{X}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\mathbf{x}}\right)\mathbf{H}^{-1}$$
(2.50)

dove \mathbf{H} è un tensore simmetrico chiamato *shape tensor* ed è definito:

$$\mathbf{H} = \underline{\omega}\mathbf{X} * \underline{\mathbf{X}} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} (\underline{\omega}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \underline{\mathbf{X}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \otimes \underline{\mathbf{X}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\mathbf{x}}$$
(2.51)

Come mostrato da Warren in [71], essendo \mathbf{F} energeticamente coniugato con il Primo tensore di Piola-Kirchhoff \mathbf{P} , è possibile ottenere \mathbf{P} derivando il funzionale densità di energia di deformazione (nel caso elastico) rispetto a \mathbf{F} :

$$\mathbf{P}^T = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \tag{2.52}$$

Dall'equazione 2.26 e dall'applicazione della chain rule della derivazione si può ottenere

$$\underline{\mathbf{T}} = \frac{\partial W}{\partial \underline{\mathbf{Y}}} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \underline{\mathbf{Y}}} = \mathbf{P}^T \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \underline{\mathbf{Y}}} = \underline{\omega} \mathbf{P}^T \mathbf{H}^{-1} \underline{\mathbf{X}}$$
(2.53)

$$\mathbf{t} = \underline{\mathbf{T}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \mathbf{P}^T \mathbf{H}^{-1} \boldsymbol{\xi}$$
(2.54)

Seguendo questi passi, il legame costitutivo peridinamico $\underline{\mathbf{T}} = \underline{\hat{\mathbf{T}}}(\underline{\mathbf{Y}},...)$ è direttamente ottenibile da legami costitutivi classici.

- 1. usando $\underline{\mathbf{Y}}$ si calcola la stima di \mathbf{F} ;
- 2. si calcola **P** usando un algoritmo basato sulla teoria classica;

3. si calcola la force density \mathbf{t} usando l'equazione 2.54.

Guardando l'equazione 2.54 si potrebbe dire che i modelli correspondence siano il contrario dei modelli bond-based. Infatti, la force density in un bond dipende dal gradiente di deformazione approssimato che è frutto di una sorta di media su tutto l'orizzonte, e dipende solo in misura infinitesima dalla deformazione del bond stesso. Si vedrà in seguito che questa caratteristica determina l'insorgenza di modi di hourglass.

Questo tipo di modello ritorna alla formulazione locale che la peridinamica si proponeva di superare, consentendo però l'insorgenza di frattura in modo semplice a causa della mancanza di derivate spaziali.

Nonostante venga usato il legame costitutivo classico, non sarà possibile utilizzare un modello di danno classico per recidere i bond, perchè ciò provocherebbe la recisione di tutti i bond di un qualche punto i cui sforzi raggiungono il valore di rottura, lasciando il punto stesso libero di vagare svincolato dal corpo.

Algoritmo di Flanagan-Taylor

Al fine di integrare il tensore degli sforzi nel tempo, Warren ha seguito l'algoritmo di Flanagan-Taylor [18]. Questo algoritmo è stato usato nell'integrazione del tensore degli sforzi anche negli articoli in cui si usano modelli peridinamici correspondence seguenti a Warren, come ad esempio fatto da Amani [2], ed è implementato anche in Peridigm.

L'algoritmo di Flanagan-Taylor è una tecnica computazionale utile ad integrare il tensore degli sforzi per deformazioni finite in maniera robusta, pur in un approccio Lagrangiano.

L'integrazione degli sforzi richiede relazioni costitutive tra la derivata nel tempo di un tensore degli sforzi e la derivata nel tempo di un tensore delle deformazioni.

L'applicazione di questo legame costitutivo richiede che le derivate del tensore degli sforzi e di deformazioni soddisfino il principio di indifferenza dal sistema di riferimento. La coppia di tensori usata da Flanagan e Taylor che soddisfa questo principio è composta da:

- $\dot{\hat{\sigma}}$, che è la derivata del tensore di Cauchy non ruotato $\hat{\sigma} = \mathbf{R} \sigma \mathbf{R}^T$, in cui \mathbf{R} è il tensore di rotazione risultato dalla decomposizione ortogonale del gradiente di deformazione e σ è il tensore di Cauchy.
- $\mathbf{d} = \mathbf{R}^T \mathbf{D} \mathbf{R}$ dove \mathbf{D} è la parte simmetrica del gradiente di velocità $\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$.

In sostanza l'algoritmo effettua una procedura per ottenere **d**, applicare il legame costitutivo per calcolare $\dot{\sigma}$, ottenere $\hat{\sigma}$ integrando nel tempo, calcolare lo sforzo di Cauchy σ e calcolare il primo tensore di Piola-Kirchhoff $\mathbf{P} = det(\mathbf{F}) \sigma \mathbf{F}^{-T}$.

Nel caso di legame elastico, $\dot{\hat{\sigma}}$ è calcolato proporzionale a **d** tramite il tensore di elasticità \mathbb{D} .

$$\dot{\hat{\sigma}} = \mathbb{D} : \mathbf{d} \tag{2.55}$$

Nell'integrazione numerica viene ottenuto il tensore di Cauchy non ruotato con un approccio alle differenze finite:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n+1)} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n)} + \mathbb{D} : (\mathbf{d}\Delta t)$$
(2.56)

Per un legame isotropo, dividendo il tensore degli sforzi nelle parti idrostatica e deviatorica si ottiene:

$$\begin{cases} \hat{s}^{(n+1)} = \hat{s}^{(n)} + 2 G \mathbf{d}_{d} \Delta t \\ \hat{\sigma}_{H}^{(n+1)} = \hat{\sigma}_{H}^{(n)} + K tr(\mathbf{d}) \Delta t \\ \hat{\sigma}^{(n+1)} = \hat{s}^{(n+1)} + \mathbf{I} \hat{\sigma}_{H}^{(n+1)} \end{cases}$$
(2.57)

dove con \hat{s} si indica la parte deviatorica dello sforzo di Cauchy non ruotato, con $\hat{\sigma}_H$ si indica la parte idrostatica. \mathbf{d}_d è la parte deviatorica del tensore \mathbf{d} .

Modi di hourglass nei modelli correspondence

La bond force density nei legami correspondence dipende dal gradiente di deformazione. Tuttavia si può dimostrare che esistono infiniti possibili deformation state $\underline{\mathbf{Y}}$ da cui ottenere lo stesso gradiente di deformazione approssimato \mathbf{F} , e quindi lo stesso force state $\underline{\mathbf{T}}$. In pratica è possibile che il deformation state passi da uno stato $\underline{\mathbf{Y}}_1$ ad uno stato $\underline{\mathbf{Y}}_2 \neq \underline{\mathbf{Y}}_1$ senza variare le forze per unità di volume al quadrato che i punti si scambiano. Se si suppone ad esempio un force state nullo si può modificare il deformation state senza compiere compiere lavoro. Per questo i legami correspondence hanno dei modi di *hourglass* che possono condizionare i risultati delle analisi.

Dimostrazioni della presenza di modi di hourglass sono riportate in molti articoli [10,68,74]. Una dimostrazione interessante è quella proposta da Silling in [60] in cui dimostra che l'energia potenziale di un legame correspondence non è una funzione strettamente convessa. Sono state provate diverse soluzioni a questo problema, si elencano quelle più rilevanti trovate in letteratura:

- Littlewood in [35] ha proposto di aggiungere al force state di ogni bond un contributo di forza stabilizzante proporzionale allo scostamento della posizione attuale dei punti y' vicini a x dalla posizione prevista dal gradiente di deformazione in x e diretta come il bond. Questa è la soluzione implementata in Peridigm, e che quindi verrà usata in questa tesi. Questo approccio verrà trattato in dettaglio nella sezione 4.4.1.
- Silling in [60] ha proposto un modello correspondence stabilizzato in cui la densità di energia di deformazione è penalizzata con un termine quadratico nella *nonuniform part* del deformation state, definita come:

$$\underline{\mathbf{z}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \underline{\mathbf{Y}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle - \mathbf{F}\boldsymbol{\xi}$$
(2.58)

Viene dimostrato che la condizione di stabilità $d\underline{\mathbf{T}} \bullet d\underline{\mathbf{Y}} > 0$, equivalente alla condizione di convessità dell'energia di deformazione, è soddisfatta per questo modello correspondence, che quindi non ha modi di hourglass.

• Wu e Ren in [74] hanno proposto di riformulare il modello correspondence attraverso la definizione di un nuovo campo vettoriale chiamato spostamento stabilizzato definito come:

$$\tilde{\boldsymbol{u}}(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} \omega(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{x}') dV_{\mathbf{x}}$$
(2.59)

Usando questo campo vettoriale viene costruito il deformation state stabilizzato $\underline{\tilde{Y}}$ e viene calcolato il gradiente di deformazione stabilizzato usando l'equazione 2.50, ma con $\underline{\tilde{Y}}$.

• Breitzman in [10] propone di risolvere il problema dei modi di hourglass e dell'interpenetrazione definendo un tensore di deformazione a livello del bond (*bond-level deformation gradient*), definito come:

$$\mathbf{F}_{bond}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{F}(\mathbf{x}) - \left(\mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})\right) \otimes (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) + \frac{\mathbf{y}' - \mathbf{y}}{\mathbf{x}' - \mathbf{x}} \otimes (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (2.60)$$

Questa definizione soddisfa automaticamente la corrispondenza $(\mathbf{y}' - \mathbf{y} = \mathbf{F}_{bond} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x}))$. Il tensore $\mathbf{F}_{bond}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ha anche informazioni sulla deforma-

zione media nel piano normale al bond stesso e si può confrontare con $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ per vederne la deviazione dal valore medio.

Il force state di un bond viene calcolato derivando la densità di energia di deformazione rispetto al gradiente di deformazione del bond. Un'implicazione interessante di questo modello correspondence è la possibilità di applicare modelli di rottura della meccanica del continuo classica

2.5 Teoria lineare per legami elastici

La teoria peridinamica lineare riguarda i piccoli spostamenti. Nella peridinamica la nozione di campo di piccoli spostamenti è differente rispetto alla nozione nella teoria classica. Nella teoria classica la definizione di piccoli spostamenti è collegata al gradiente dello spostamento. Nella peridinamica viene chiamato campo di piccoli spostamenti il campo il cui limite superiore dello spostamento relativo tra i due nodi di tutti i bonds è molto più piccolo del raggio dell'orizzonte [64]:

Dato un campo di spostamenti $\mathbf{u}(\boldsymbol{x},t)$ sovrapposto ad un campo di posizioni deformato qualsiasi $\mathbf{y}_0(\boldsymbol{x})$, si dice che il campo $\mathbf{u}(\boldsymbol{x},t)$ è piccolo se:

$$\sup_{\boldsymbol{\xi}\in\mathcal{H}} \left| \underline{\mathbf{U}}[\boldsymbol{x},t] \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \right| \ll \delta \qquad \forall \mathbf{x}\in\mathcal{B}$$
(2.61)

dove $\underline{\mathbf{U}}[\boldsymbol{x},t]\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \mathbf{u}(\boldsymbol{x}',t) - \mathbf{u}(\boldsymbol{x},t)$ è lo stato spostamento (displacement state).

In questa sezione si mostra in breve la linearizzazione del generico legame costitutivo nella teoria generale state-based, riassumendo quanto mostrato in [59].

Si consideri un force state elastico $\underline{\mathbf{T}} = \underline{\mathbf{\hat{T}}}(\underline{\mathbf{Y}})$ definito da un generico legame costitutivo Frechet-differenziabile rispetto a $\underline{\mathbf{Y}}$. Si consideri inoltre una configurazione equilibrata corrispondente ad uno stato $\underline{\mathbf{Y}}_0$, ad un force state $\underline{\mathbf{T}}_0 = \underline{\mathbf{\hat{T}}}(\underline{\mathbf{Y}}_0)$ e a un set di forze per unità di volume esterne $\mathbf{b}_0(\mathbf{x})$, e si ipotizzi che il campo degli spostamenti rispetto questa configurazione sia piccolo. Allora è possibile approssimare il force state alla sua espansione di Taylor al primo ordine:

$$\underline{\mathbf{T}}[\mathbf{x},t] \approx \underline{\mathbf{T}}_0[\mathbf{x}] + \underline{\mathbf{T}}_{\mathbf{Y}}[\mathbf{x}](\underline{\mathbf{Y}}_0) \bullet \underline{\mathbf{U}}[\mathbf{x},t]$$
(2.62)

La derivata di Frechet del force state, valutata in $\underline{\mathbf{Y}}_0$ è detta stato-modulo (*modulus state*), ed è uno stato doppio di tensori del secondo ordine che si indica con $\underline{\mathbb{K}}$.

$$\underline{\mathbb{K}}[\mathbf{x}]\langle\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\zeta}\rangle = \underline{\mathbf{T}}(\underline{\mathbf{Y}})[\mathbf{x}]\big|_{\mathbf{Y}_{0}}\langle\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\zeta}\rangle$$
(2.63)

2.5 Teoria lineare per legami elastici

$$\underline{\mathbf{T}}[\mathbf{x},t] \approx \underline{\mathbf{T}}_0[\mathbf{x}] + \underline{\mathbb{K}}[\mathbf{x}](\underline{\mathbf{Y}}_0) \bullet \underline{\mathbf{U}}[\mathbf{x},t]$$
(2.64)

Come mostrato da Silling in [64], usando l'equazione 2.64 e l'equazione 2.26, è possibile definire la seguente densità di energia di deformazione linearizzata per un materiale elastico:

$$W(\underline{\mathbf{Y}}_{0} + \underline{\mathbf{U}}, \mathbf{x}) = W(\underline{\mathbf{Y}}_{0}, \mathbf{x}) + \underline{\mathbf{T}}_{0}[\mathbf{x}] \bullet \underline{\mathbf{U}} + \frac{1}{2}\underline{\mathbf{U}} \bullet \mathbb{K}[\mathbf{x}] \bullet \underline{\mathbf{U}}$$
(2.65)

Nel caso di legame elastico lo stato-modulo è la derivata seconda di Frechet della densità di energia di deformazione, e quindi è *self-adjoint*, ovvero gode della seguente proprietà:

$$\underline{\mathbb{K}} = \underline{\mathbb{K}}^{\dagger} \tag{2.66}$$

dove

$$\underline{\mathbb{K}}^{\dagger}\langle\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\zeta}\rangle = \underline{\mathbb{K}}^{T}\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\xi}\rangle \tag{2.67}$$

Riprendendo le equazioni di bilancio 2.33 e sostituendo le definizioni scritte precedentemente, si ottengono le equazioni di bilancio lineari riferite alla configurazione equilibrata:

$$\rho_{0}(\mathbf{x})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t) = \int_{\mathcal{H}} \left((\underline{\mathbb{K}}[\mathbf{x}] \bullet \underline{\mathbf{U}}[\mathbf{x},t]) \langle \boldsymbol{\xi} \rangle - (\underline{\mathbb{K}}[\mathbf{x}'] \bullet \underline{\mathbf{U}}[\mathbf{x}',t]) \langle -\boldsymbol{\xi} \rangle \right) dV_{\boldsymbol{\xi}} + \hat{\mathbf{b}}(\mathbf{x},t) \quad (2.68)$$

$$\operatorname{deve} \hat{\mathbf{b}}(\mathbf{x},t) = \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \quad \mathbf{b}_{\epsilon}(\mathbf{x})$$

dove $\mathbf{b}(\mathbf{x},t) = \mathbf{b}(\mathbf{x},t) - \mathbf{b}_0(\mathbf{x})$

Applicando la definizione di $\underline{\mathbf{U}}$ e l'equazione 2.21 e svolgendo i passaggi, si ottiene la seguente forma semplificata dell'equazione di bilancio alla traslazione:

$$\rho_0(\mathbf{x})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t) = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} \mathbf{C}_0(\mathbf{x},\mathbf{x}') \big(\mathbf{u}(\mathbf{x}',t) - \mathbf{u}(\mathbf{x},t) \big) dV_{\mathbf{x}'} + \hat{\mathbf{b}}(\mathbf{x},t)$$
(2.69)

dove il tensore \mathbf{C}_0 viene chiamato tensore dei micromoduli (*micromodulus tensor*).

Questa equazione mostra che è possibile esprimere l'incremento di forza, rispetto alla configurazione equilibrata, tra i punti del dominio come combinazione lineare degli spostamenti dei punti all'interno dell'orizzonte.

Nel caso di legami costitutivi omogenei elastici, grazie al fatto che il modulus state è self-adjoint, Silling dimostra che il tensore dei micromoduli gode della seguente proprietà di simmetria:

$$\mathbf{C}_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{C}_0^T(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \tag{2.70}$$

Nel caso in cui il legame sia anche lineare:

$$\mathbf{C}_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{C}_0^T(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \qquad \mathbf{C}_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{C}_0(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \qquad \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{B}$$
(2.71)

Esprimendo la dipendenza di $C_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ dal bond vector $(C_0(\boldsymbol{\xi}))$, la proprietà di simmetria 2.70 si può scrivere come:

$$\mathbf{C}_0(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{C}_0^T(-\boldsymbol{\xi}) \tag{2.72}$$

e le proprietà 2.71:

$$\mathbf{C}_0(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{C}_0^T(\boldsymbol{\xi}) \qquad \mathbf{C}_0(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{C}_0(-\boldsymbol{\xi})$$
(2.73)

In questa sezione si è parlato solo di materiali elastici, ma la teoria lineare può potenzialmente essere applicata anche a materiali inelastici. La linearizzazione di problemi con legami non elastici e dipendenti anche da altre quantità rispetto alla posizione (come ad esempio la velocità, la temperatura o altre variabili interne), richiede una linearizzazione ulteriore rispetto alle variabili aggiuntive.

Le equazioni di bilancio linearizzate e discretizzate dovranno essere risolte assieme ad altre equazioni linearizzate che descrivono l'"evoluzione" delle variabili aggiuntive. Per esempio, nel caso di legame costitutivo elastoplastico, l'equazione di evoluzione delle deformazioni plastiche è la *flow rule*.

2.6 Significato e scelta del raggio dell'orizzonte

Questa sezione riporta e rielabora le riflessioni fatte da Bobaru in [6] sul significato dell'orizzonte.

La teoria peridinamica presentata fin'ora è una teoria generale che converge alla teoria classica, ma che ha dei vantaggi nella modellazione della frattura. La nonlocalità è racchiusa dentro all'interazione di un punto con tutti i punti presenti all'interno dell'orizzonte.

L'interazione tra i vari punti non si riferisce necessariamente all'interazione fisica che esiste tra atomi o tra nano-strutture molecolari, quindi l'orizzonte non rappresenta la portata di queste interazioni.

L'orizzonte peridinamico assume significato fisico nell'applicazione della peridinamica alla meccanica della frattura, tanto da poter dire che l'orizzonte è una proprietà caratteristica del materiale. In problemi di frattura dinamici Ramulu et al. [54] nel 1983 hanno suggerito l'esistenza di interazioni non-locali. Il criterio con cui si ipotizza che le cricche crescano è collegata ad un parametro chiamato distanza caratteristica r_0 che dipende dallo stato di sforzo vicino all'estremità della cricca. Si assume che la cricca evolva quando r_0 supera la distanza critica r_C che è una proprietà del materiale che rappresenta la distanza media tra microvuoti dentro al materiale. La cricca evolve tramite un meccanismo di stabilità. Ramulu et al. hanno dimostrato che questa distanza vale tra 0.5 mm e 1.5 mm per i polimeri vetrosi testati.

L'orizzonte peridinamico può dunque essere visto come una "lunghezza di scala effettiva" collegata al comportamento a frattura del materiale.

Bobaru suggerisce le seguenti linee-guida per scegliere il giusto raggio dell'orizzonte:

- Per i casi in cui la meccanica del continuo funziona adeguatamente, più è piccolo l'orizzonte, più ci si avvicina ai risultati dati dalla teoria classica. Questo vale per esempio per analisi in cui non si considera il danneggiamento del materiale o nel caso di materiali in cui la microstruttura del materiale non influenza i risultati.
- Per i fenomeni in cui l'influenza delle scale di lunghezza è manifesta è necessario usare un orizzonte specifico. Ad esempio nei problemi di frattura dinamica l'orizzonte può essere collegato alla distanza critica r_C , oppure, in quei materiali in cui la microstruttura influenza il comportamento del materiale, (ad esempio le leghe metalliche) l'orizzonte può essere scelto in modo da coincidere con la distanza media tra le inclusioni. Altre possibilità sono quelle di calibrare l'orizzonte per riprodurre la dispersione dei fononi nel materiale.
- Per l'analisi di piastre il cui comportamento flessionale è importante, la dimensione dell'orizzonte deve essere presa sufficientemente piccola rispetto allo spessore della piastra.

Oltre a Bobaru, in molti altri articoli sono state fatte considerazioni sul significato fisico dell'orizzonte.

Un esempio rilevante per questa tesi lo si può trovare in [19]. Nell'analisi della frattura di materiali duttili Foster ha proposto di scegliere l'orizzonte sulla base delle dimensioni della *crack tip plastic zone* ($\approx 1 \text{ mm}$ in questo caso). Adoperando questa scelta, ha ottenuto risultati in ottimo accordo con dati sperimentali.

Altra cosa che ha influenza sulla definizione dell'orizzonte è il tipo di funzione di influenza adoperato nell'analisi. Per esempio una funzione triangolare presenta un grado di non-località minore rispetto ad una funzione di forma rettangolare, perchè l'interazione con i nodi più lontani nell'orizzonte ha entità minore. A causa di questa differenza nella non-località, l'orizzonte usato con la funzione rettangolare dovrà essere diverso da quello usato con funzione triangolare.

La scelta dell'orizzonte è una delle criticità principali della teoria peridinamica, perchè richiede una comprensione del meccanismo di rottura e dipende dal modello di danno peridinamico considerato.

Una formula deterministica a seconda dei casi e dei fenomeni considerati non è ancora stata individuata. La pratica suggerisce di fare considerazioni di tipo fisico per una stima iniziale della grandezza dell'orizzonte, e poi calibrare la stima per armonizzare i risultati numerici e i risultati sperimentali.

2.7 Accoppiamento termomeccanico nella peridinamica

La termomeccanica riguarda fenomeni in cui lo stato termico ha influenza non trascurabile sullo stato deformativo e viceversa. Quando le influenze reciproche non sono trascurabili si parla di problema termomeccanico fortemente accoppiato, quando una delle due è trascurabile (tipicamente lo è l'influenza dello stato deformativo sullo stato termico) si parla di problema debolmente accoppiato. Nei fenomeni in cui lo stato termico e lo stato deformativo si influenzano reciprocamente in maniera trascurabile, il problema termico e quello meccanico possono essere risolti separatamente in maniera disaccoppiata.

In questa sezione viene mostrato l'approccio peridinamico alle principali fonti di accoppiamento termomeccanico.

2.7.1 Generazione di potenza termica dovuta ad inelasticità

Nella formulazione peridinamica del primo principio della termodinamica (eq. 2.34) figura il termine $p_{abs} = \underline{\mathbf{T}} \bullet \underline{\dot{\mathbf{Y}}}$ che rappresenta la potenza termica assorbita dal sistema a seguito di deformazioni non conservative.

Come dimostrato da Silling e Lehoucq in [64], questo termine deve essere necessariamente maggiore o uguale a zero per non violare il secondo principio della termodinamica; p_{abs} è quindi un termine dissipativo che genera potenza termica.

Il corrispettivo di p_{abs} nella teoria classica è il prodotto interno $\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}$ tra primo tensore di Piola-Kirchhoff e la derivata del gradiente di deformazione.

L'origine della dissipazione può essere un comportamento del materiale di tipo viscoelastico o elastoplastico, e la sua espressione p_{abs} assume un'espressione diversa a seconda del modello.

2.7.2 Dilatazione indotta dalla temperatura

La dilatazione termica è il fenomeno fisico in cui l'aumento di temperatura in un corpo libero e non vincolato induce delle deformazioni di origine termica. La deformazione indotta può essere considerata lineare nella temperatura; nella teoria lineare classica della termoelasticità è quindi possibile scrivere la seguente relazione tra il tensore delle piccole deformazioni indotte e la temperatura:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\Delta\theta} = \boldsymbol{\alpha} \Delta \boldsymbol{\theta} \tag{2.74}$$

Dove α è un tensore di coefficienti detto tensore di espansione termica. Nel caso di materiali isotropi un cambiamento di temperatura genera una dilatazione volumetrica, il tensore α può essere espresso come:

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha_V \mathbf{I} \tag{2.75}$$

dove α_V è detto coefficiente di dilatazione termica volumetrica ed è maggiore di 1 nella maggioranza dei materiali.

Un approccio peridinamico a questo fenomeno è stato mostrato da Madenci e Oterkus in [40], e viene riportato in breve di seguito.

La densità di energia libera per un solido termoelastico nella teoria classica lineare può essere espressa come segue [49]:

$$\psi = \psi(\varepsilon_{ij}, \theta) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \mathbb{D}_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \alpha_{kl} \Delta \theta) - c\left(\theta + \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0}\right)$$

$$= \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \mathbb{D}_{ijkl} \varepsilon_{kl} - \varepsilon_{ij} \beta_{ij} \Delta \theta - c\left(\theta + \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0}\right)$$
(2.76)

Dove $\beta_{ij} = \mathbb{D}_{ijkl} \alpha_{kl}$ è detto tensore dei moduli termici.

Madenci ed Oterkus ridefiniscono in modo peridinamico, partendo dalla definizione data da Silling in equazione 2.65, l'energia libera termoelastica linearizzata rispetto ad una configurazione equilibrata $\underline{\mathbf{Y}}_0$, θ_0 come segue:

$$\psi(\underline{\mathbf{Y}}_{0} + \underline{\mathbf{U}}, \theta_{0} + \Delta\theta) = \psi_{0}(\underline{\mathbf{Y}}_{0}, \theta_{0}) + \underline{\mathbf{T}}_{0} \bullet \underline{\mathbf{U}} + \underline{\mathbf{U}} \bullet \underline{\mathbb{K}} \bullet \underline{\mathbf{U}} - \underline{\mathbf{B}} \bullet \underline{\mathbf{U}} \Delta\theta - c\left(\theta + \theta ln\frac{\theta}{\theta_{0}}\right)\right)$$
(2.77)

Dove <u>B</u> è lo stato vettoriale dei moduli termici (analogo a β), e $\Delta \theta$ è l'incremento di temperatura. Introducendo uno stato peridinamico scalare $\underline{\alpha}$ di coefficienti di espansione termica, <u>B</u> può essere definito come:

$$\underline{\mathbf{B}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \underline{\mathbb{K}}\langle\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\zeta}\rangle \bullet \left(\underline{\alpha}\langle\boldsymbol{\zeta}\rangle\boldsymbol{\zeta}\right) \tag{2.78}$$

dove $\underline{\alpha}\langle \boldsymbol{\zeta} \rangle \boldsymbol{\zeta}$ è in pratica l'estensione di un bond per incremento unitario di temperatura. Nel caso di modello di materiale isotropo $\underline{\alpha}\langle \boldsymbol{\zeta} \rangle$ è costante ed uguale ad α_V

Applicando a ψ l'equazione 2.26 si ottiene il force state linearizzato per un materiale termoelastico:

$$\underline{\mathbf{T}} = \underline{\mathbf{T}}_0 + \underline{\mathbb{K}} \bullet \underline{\mathbf{U}} - \underline{\mathbf{B}} \Delta \theta \tag{2.79}$$

Dilatazione termica nei modelli ordinari

Seguendo l'approccio di D'Antuono [12], si mostra come è stata inclusa in questa tesi la dilatazione termica nei modelli ordinari.

Come si può vedere dalle equazioni 2.79 e 2.78 un cambiamento di temperatura genera l'estensione dei bond.

Un modo semplice per includere questo fenomeno in un modello ordinario è quello di correggere l'extension state mostrato in equazione 2.46, sottraendolo per l'estensione termica del bond, trovando un extension state meccanico efficace e utilizzabile per calcolare il force state.

$$\underline{e}_{mech}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \underline{e} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle - \underline{\alpha} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \boldsymbol{\xi}$$
(2.80)

Dilatazione termica nei modelli correspondence

In questa sezione viene mostrato l'approccio usato in questa tesi per includere la dilatazione termica nei modelli correspondence.

Come visto nella sezione 2.4.5, i modelli correspondence si basano sulle definizioni della teoria classica. In particolare, in letteratura è molto usato l'algoritmo di Flanagan-Taylor per integrare gli sforzi; questo algoritmo viene usato anche in questa tesi, in quanto già implementato nella versione originale di Peridigm.

L'algoritmo usa l'equazione 2.56 per ottenere lo sforzo di Cauchy non ruotato, in cui si può considerare che $d\Delta t$ sia l'incremento di deformazione nel passo.

Quello che viene fatto in questa tesi per tener conto della dilatazione termica è correggere l'incremento della deformazione aggiungendogli un termine proporzio-

2.7 Accoppiamento termomeccanico nella peridinamica

nale al tensore α :

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n+1)} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n)} + \mathbb{D} : \left(\mathbf{d}\Delta t - \boldsymbol{\alpha} (\theta^{(n+1)} - \theta^{(n)}) \right)$$
(2.81)

2.7.3 Influenza della deformazione sulla conduzione

Come visto dall'equazione 2.82, il flusso termico nella teoria locale espresso con la legge di Fourier in formulazione Lagrangiana dipende dal gradiente di deformazione. Si riporta di seguito la legge di Fourier nella formulazione Lagrangiana:

$$\mathbf{q} = det(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}^{-T}\boldsymbol{\nabla}\theta \approx \mathbf{\Lambda}\boldsymbol{\nabla}\theta \tag{2.82}$$

Da ciò si deduce che la deformazione ha un'influenza sulla conduzione che rimane comunque trascurabile quando le deformazioni sono piccole e il tensore gradiente di deformazione può essere approssimato al tensore identità. L'effetto di questo accoppiamento diventa rilevante quando le deformazioni sono elevate.

In letteratura non sono stati mostrati modelli peridinamici di diffusione termica in grado di modellare questo comportamento, ma nella sezione 6.2 si mostra come includere l'effetto di questo accoppiamento in modelli correspondence di diffusione termica.

In questa sezione vengono mostrate le tecniche di soluzione del problema peridinamico termomeccanico, facendo riferimento alla letteratura, e sviluppando nuove soluzioni ai problemi presentati dall'integrazione di problemi termomeccanici fortemente accoppiati.

Come mostrato nell'introduzione, la peridinamica si basa su equazioni integrodifferenziali nel continuo. Al fine di essere risolte, queste equazioni devono essere discretizzate sia nel tempo che nello spazio.

Nella sezione 3.1 si parla della tecnica di discretizzazione spaziale comunemente usata, chiamata *particle-based mesh-free*, e dei tipi di analisi di convergenza numerica.

Gli schemi di integrazione nel tempo usati nella peridinamica con approccio *particle-based mesh-free* sono gli stessi usati nella teoria locale.

L'integrazione nel tempo mira a calcolare le quantità cinematiche relative al problema ad ogni istante di tempo in cui viene discretizzata l'analisi. Cominciando dal primo istante di tempo in cui è conosciuta la configurazione, le quantità cinematiche agli istanti successivi vengono calcolate in modo progressivo avanzando nel tempo.

Tipicamente si distinguono due grandi categorie: schemi espliciti, e schemi impliciti. Si riporta anche una categoria di schemi di integrazione che non è propriamente uno schema di integrazione nel tempo: l'integrazione quasi-statica calcola configurazioni di equilibrio statico in maniera iterativa con step di carico crescenti.

Nella sezione 3.2 si descrivono le tecniche di integrazione esplicita mostrate in letteratura e già presenti in Peridigm, con particolare riferimento alla definizione dei passi di integrazione critici e alla tecnica multi-rate per il problema termomeccanico debolmente accoppiato sviluppata da D'Antuono e Morandini [12, 16]. Questa tecnica è stata ripresa e modificata in questo lavoro di tesi al fine di essere usata per problemi termomeccanici fortemente accoppiati. Nella sezione 3.3 si parla delle tecniche di integrazione implicita, dei suoi vantaggi e svantaggi, e si descrive il metodo di Newmark che verrà usato nei prossimi capitoli.

L'integrazione quasi-statica è descritta nella sezione 3.4, con riferimento a quanto fatto da Littlewood in Peridigm.

La sezione 3.5 descrive il problema della definizione delle condizioni al contorno nella soluzione numerica del problema peridinamico termomeccanico, mostrando i rimedi adottati in letteratura che vengono usati poi in questa tesi.

Nella sezione 3.6 viene mostrato l'approccio già presente in Peridigm per la definizione dei bond e del collegamento con i nodi vicini, questo approccio è stato modificato in questa tesi per avere la possibilità di accedere nel programma alle posizioni in memoria relative alle quantità dei bond speculari, come si può vedere nella sezione 3.7.

L'ultima sezione (3.8) mostra l'approccio sviluppato in questa tesi al fine di implementare in Peridigm la possibilità di definire le proprietà dei materiali come dipendenti dalla temperatura, usando il pacchetto Run-Time Compiler.

3.1 Discretizzazione nello spazio

Le equazioni integro-differenziali possono essere discretizzate in vari modi nello spazio.

Si potrebbe anche nel caso della peridinamica applicare una formulazione agli elementi finiti (o un'altro tipo di soluzione in forma debole), ma questa andrebbe a rendere meno efficace la modellazione del danneggiamento di un materiale, dato che l'insorgere di una superficie di frattura in un punto arbitrario del dominio richiederebbe un rimeshamento degli elementi (o una ridefinizione delle funzioni di forma) come nel caso dell'uso degli elementi finiti nella meccanica classica.

In questa tesi verrà quindi utilizzato un approccio *particle-based mesh-free* suggerito da Silling in [61] e applicato in tutti i casi di analisi numerica di modelli peridinamici visti. Sfruttando la non-località del problema peridinamico il dominio viene diviso in punti di collocazione materiali, detti *nodi*.

Ai nodi vengono associati il volume e le quantità locali dell'intorno, in pratica si assume che le varie quantità locali (come ad esempio una misura di sforzo) nel volumetto associato ad un punto materiale siano costanti nello spazio del volumetto.

La soluzione del problema peridinamico viene ottenuta integrando tante equazioni di bilancio alla traslazione, come l'equazione 2.33, quante sono le coordinate libere dei nodi in cui è diviso il dominio.

Il dominio in questo approccio è trattato come una nuvola di punti che interagiscono tra loro con forze a lungo raggio, in questo la peridinamica assomiglia alla dinamica molecolare.

Tutti gli integrali in \mathcal{H} devono essere discretizzati, e diventano una sommatoria pesata sui volumetti della pairwise force density agente sul nodo a cui è riferita l'equazione.

Considerando l'equazione relativa al nodo in posizione \mathbf{x}_k la sommatoria includerà tutti quegli altri nodi del dominio contenuti all'interno dell'orizzonte associato al nodo \mathbf{x}_k . Questi nodi vengono chiamati *neighbors* (*vicini*).

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{y}}_k = \sum_{i | \mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left((\mathbf{t}(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_i, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) - \mathbf{t}(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_k, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k)) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) + \mathbf{b}_k$$
(3.1)

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{y}}_k = \mathcal{L}_{PD_k} + \mathbf{b}_k \tag{3.2}$$

dove si indica col pedice k qualsiasi quantità relativa al nodo di posizione \mathbf{x}_k .

1

Nel caso di soluzione del problema termico usando la peridinamica sarà necessario discretizzare anche l'equazione del primo principio della termodinamica 2.34 allo stesso modo:

$$\frac{d(\rho_0 c\theta)_k}{dt} = \sum_{i | \mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left(q(\theta_k, \theta_i, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) + \sum_{i | \mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left(\mathbf{t}(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_i, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) \cdot (\dot{\mathbf{y}}_i - \dot{\mathbf{y}}_k) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) + r_k$$
(3.3)

$$\rho_0 c \frac{d\theta_k}{dt} = Q_{PD_k} + p_{abs_k} + r_k \tag{3.4}$$

I vantaggi di questo approccio sono la facilità di implementazione, l'efficienza computazionale e la possibilità di far sviluppare cricche naturalmente.

Una delle criticità della soluzione delle equazioni della peridinamica è la discretizzazione dell'integrale in \mathcal{H} . Al fine di effettuare un calcolo esatto dell'integrale nell'orizzonte di \mathbf{x} è necessario calcolare l'esatta porzione del volume associato ai vicini che interseca il volume di $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$. Questa problematica non verrà trattata in questa tesi, ma esistono numerosi articoli in letteratura che parlano di metodi per calcolare o stimare questi volumi [37, 50, 57, 61].

Il raggio dell'orizzonte δ è solitamente un multiplo della dimensione caratteristica

 Δx dei volumetti in cui è diviso il dominio. Si definisce la quantità *m* come il rapporto tra $\delta \in \Delta x$.

$$m = \frac{\delta}{\Delta x} \tag{3.5}$$

3.1.1 Analisi di convergenza

Per avere risultati validi, la teoria peridinamica del continuo deve convergere alla teoria classica al tendere a zero del raggio dell'orizzonte . La convergenza analitica della teoria peridinamica alla teoria classica è stata dimostrata da Silling e Lehoucq in [63], in cui si dimostra che un tensore degli sforzi approssimato ottenibile dalla teoria peridinamica converge al primo tensore di Piola-Kirchhoff, e in cui si dimostra che la forza di interazione per unità di volume \mathcal{L}_{PD} tende alla divergenza di \mathbf{P} della teoria classica. Si riporta di seguito la definizione di *tensore degli sforzi peridinamico*:

$$\boldsymbol{\sigma}_{PD} = \underline{\mathbf{T}} * \underline{\mathbf{X}} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} (\underline{\mathbf{T}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \otimes \underline{\mathbf{X}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\mathbf{x}}$$
(3.6)

Per quanto riguarda le analisi numeriche, in peridinamica sono stati formulati 3 diversi tipi di analisi di convergenza [7]:

- δ -convergence: ad m fissato, viene gradualmente ridotto δ (e quindi Δx). La soluzione deve tendere alla soluzione ottenuta con la teoria classica.
- *m-convergence*: fissato δ viene gradualmente aumentato *m* (e ridotto Δx di conseguenza). Aumentare *m* consente di ottenere una soluzione maggiormente influenzata dalla non-località.
- δm -convergence: δ si riduce gradualmente e intanto m viene aumentato.

In molti articoli si mostra che i risultati di convergenza migliori vengono ottenuti per m = 3 o m = 4, ad esempio [3, 26, 61]. Altri motivi per cui la scelta di m = 3è ragionevole sono:

- Valori di *m* inferiori potrebbero causare una dipendenza della direzione di coalescenza di cricche dalla disposizione dei nodi nella discretizzazione
- Aumentare *m* non è economico computazionalmente: aumentando *m* aumenta considerevolmente il numero dei vicini dei nodi e quindi il numero di calcoli da fare.

• Breitenfeld [9] ha mostrato per diverse funzioni di influenza che all'aumentare del rapporto *m* nei modelli correspondence, l'errore relativo dello sforzo in prossimità di una cricca cresce.

Per questo motivo nella presente tesi verranno effettuate solamente analisi di δ convergence, il valore di m è sempre posto uguale a 3, se non indicato diversamente.

Si possono trovare in letteratura delle analisi di convergenza fatte su diversi tipi di funzione di influenza, al fine di capire quale funzione di influenza porti ai migliori risultati di convergenza. Si cita ad esempio il lavoro di Queiruga [53], che facendo delle prove per diverse funzioni di forma, e diversi modelli peridinamici elastici in problemi bidimensionali è giunto alle seguenti conclusioni:

- Tra le funzioni di forma costante, inversa, triangolare, quadratica e cubica, la funzione di forma con le migliori caratteristiche di convergenza è quella *cubica*.
- Non tutti i modelli peridinamici elastici convergono alla soluzione in un campo di deformazione costante (questa problematica verrà trattata in dettaglio nel capitolo 4).

Osservando i risultati di δ -convergence ottenuti da Queiruga per diversi rapporti m, si nota anche che la convergenza migliore nei legami costitutivi ordinari si ha per rapporti compresi tra 2.5 e 3.5, confermando la bontà della scelta di m = 3 per questa tesi.

I risultati del legame costitutivo correspondence sono inquinati dalla instabilità del modello, di cui si è parlato in sezione 2.4.5. Infatti al crescere del rapporto m, che esprime il grado di non località del problema, l'instabilità diventa più forte e la convergenza peggiore. Queiruga comunque propone un approccio per correggere l'instabilità uguale all'approccio proposto da Wu-Ren [74], e lo applica ad una piastra bidimensionale intagliata.

Si riporta che sono stati fatti anche studi di convergenza sulle procedure usate per determinare le porzioni dei volumi ai bordi dell'orizzonte, nel calcolo degli integrali in \mathcal{H} . Un esempio di questi studi è il lavoro di Seleson [57].

3.2 Integrazione esplicita nel tempo del problema termomeccanico accoppiato

Nei metodi espliciti le quantità incognite sono espresse con equazioni esplicite facilmente risolvibili, per questo ogni passo di integrazione con i metodi espliciti è

3.2 Integrazione esplicita nel tempo del problema termomeccanico accoppiato

poco costoso computazionalmente.

I metodi espliciti sono condizionatamente stabili, il *time step* nelle integrazioni esplicite è limitato da un valore critico massimo oltre al quale l'integrazione mostrerà instabilità numerica. L'impossibilità di scegliere il time-step che si desidera è il grosso limite degli schemi espliciti.

Nonostante ciò, i metodi espliciti hanno il vantaggio di non dover per forza assemblare e memorizzare le matrici di massa e rigidezza, come nel caso dei metodi impliciti. Per questa ragione analisi con metodi espliciti richiedono molta meno memoria RAM rispetto ad analisi con metodi impliciti con lo stesso numero di gradi di libertà. In particolare l'integrazione esplicita in Peridigm viene fatta tenendo in memoria solo le quantità relative al passo (n) ed (n + 1), scrivendo ad ogni passo le quantità nel file di output.

I metodi espliciti inoltre non richiedono la fattorizzazione di matrici quadrate grandi quanti sono i gradi di libertà nell'integrazione di un passo, quindi il singolo passo è meno costoso computazionalmente.

In questa tesi vengono usati i metodi Velocity-Verlet per il problema meccanico (e un altro approccio semplice alle differenze finite), e il metodo di Eulero Esplicito per il problema termico, ma è possibile anche usare altri metodi espliciti più complessi.

In questa sezione viene anche mostrata la tecnica multi-rate usata nella tesi nell'integrazione esplicita del problema termomeccanico accoppiato derivata dalla tecnica sviluppata per il problema termomeccanico debolmente accoppiato da D'Antuono e Morandini [12, 16].

3.2.1 Metodo Velocity-Verlet

Il metodo Velocity-Verlet è un metodo esplicito che si basa sulla definizione di una velocità a metà del time-step. Le forze interne, e quindi le accelerazioni, nei nodi della discretizzazione mesh-free si calcolano utilizzando gli spostamenti all'istante precedente, e le velocità calcolate a metà del time-step.

La procedura nell'integrazione dal passo n (istante t) al passo n + 1 (istante $t + \Delta t$) viene riportata di seguito:

- 1. calcolo della velocità intermedia in ogni punto del dominio punto k: $\mathbf{v}_k^{(n+\frac{1}{2})} = \mathbf{v}_k^{(n)} + \frac{1}{2} \mathbf{a}_k^{(n)} \Delta t$
- 2. applicazione delle condizioni al contorno essenziali sulla velocità.
- 3. calcolo della posizione al nuovo istante: $\mathbf{y}_k^{(n+1)} = \mathbf{y}_k^{(n)} + \mathbf{v}_k^{(n+\frac{1}{2})} \Delta t$

- 4. applicazione delle condizioni al contorno essenziali sulla posizione.
- 5. calcolo dell'integrale discretizzato delle force density tra i nodi, con un modello meccanico qualsiasi, ottenendo la forza per unità di volume scambiata \mathbf{L}_{PD_k} nel punto k all'instante (n + 1), usando le velocità dei punti integrate nei punti precedenti all'istante $(n + \frac{1}{2})$ e le posizioni all'istante (n + 1).
- 6. calcolo delle accelerazioni al nuovo istante $\mathbf{a}_k^{(n+1)}$ dall'equazione 3.1
- 7. calcolo della velocità al nuovo istante: $\mathbf{v}_k^{(n+1)} = \mathbf{v}_k^{(n+\frac{1}{2})} + \frac{1}{2}\mathbf{a}_k^{(n+1)}\Delta t$

Il metodo Velocity-Verlet è il metodo implementato in Peridigm nelle integrazioni esplicite nel tempo [51].

3.2.2 Determinazione del time-step critico per il problema meccanico

Viene riportato il metodo sviluppato da Silling e Askari [61] per determinare il time-step critico per il problema meccanico.

Il metodo si basa su un'analisi di stabilità alla von Neumann della soluzione dell'equazione di bilancio della peridinamica.

Si consideri l'equazione di bilancio linearizzata illustrata nell'equazione 2.69, venga omogeneizzata, la si applichi al caso monodimensionale e la si discretizzi in particelle in modo che $x_k = k\Delta x$.

$$\rho_0 \ddot{u}_k = S \sum_{i|x_i \in \mathcal{H}_{x_k}} C(x_i, x_k) \big(u_i - u_k \big) \Delta x \tag{3.7}$$

dove \mathcal{H}_{x_k} è il dominio di tutti i nodi per cui vale $|x_i - x_k| \leq \delta$ e $x_i \neq x_k$, e $C(x_i, x_k)$ è il tensore dei micromoduli, ridotto ad uno scalare, per un materiale elastico.

Per l'approssimazione numerica dell'accelerazione al passo temporale n, si applichi uno schema alle differenze finite centrate:

$$\ddot{u}_k^{(n)} = \frac{1}{\Delta t^2} (u_k^{(n+1)} - 2u_k^{(n)} + u_k^{(n-1)})$$
(3.8)

Si supponga che l'equazione omogenea 3.7 abbia soluzione generale armonica:

$$u_k^{(n)} = \zeta_k^{(n)} e^{\Omega k \sqrt{-1}}$$
(3.9)

con Ω numero reale positivo e ζ numero complesso.

3.2 Integrazione esplicita nel tempo del problema termomeccanico accoppiato

Affinché la soluzione non cresca in maniera incontrollata deve essere soddisfatta la seguente condizione necessaria:

$$|\zeta_k| \le 1 \qquad \forall \Omega \tag{3.10}$$

Sostituendo la soluzione 3.9 nell'equazione 3.7 e definendo q = i - k, e $C_q = C(x_i, x_k)$ si ottiene:

$$\frac{\rho}{\Delta t^2}(\zeta - 2 + \zeta^{-1}) = S \sum_{q|x_i \in \mathcal{H}_{x_k}} C_q (e^{\Omega q \sqrt{-1}} - 1) \Delta x \tag{3.11}$$

Imponendo la condizione necessaria 3.10, e usando le proprietà di simmetria del tensore dei micromoduli 2.73 si ottiene la seguente condizione su Δt :

$$\Delta t \le \sqrt{2\frac{\rho}{M_{\Omega}}} \tag{3.12}$$

dove $M_{\Omega} = \sum_{q|0 < x_i - x_k < \delta} C_q(\cos(\Omega q) - 1)\Delta xS$

Maggiorando il termine armonico in M_{Ω} si ottiene il valore massimo che può avere Δt :

$$\Delta t \le \sqrt{2 \frac{\rho}{\sum\limits_{q|x_i \in \mathcal{H}_{x_k}} C_q(\cos(\Omega q) - 1)\Delta xS}}$$
(3.13)

Nel caso tridimensionale la condizione sul time-step si può scrivere come:

$$\Delta t \le \sqrt{2 \frac{\rho}{\sum\limits_{i|\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}}} C_i \Delta V_i}} \tag{3.14}$$

dove C_i è una norma matriciale del tensore dei micromoduli \mathbf{C}_0 .

Come scritto da Littlewood in [5] al capitolo 5 si usa imporre che C_i sia uguale al micromodulo del legame costitutivo PMB riportato in equazione 4.7

La condizione nell'equazione 3.14 fornisce una stima accettabile del time-step massimo anche per altri legami costitutivi, come dimostrato in [38]. Si raccomanda però di usare time-step anche più piccoli, usando un fattore di sicurezza.

Altri modi di calcolare il time-step critico sono stati analizzati da Littlewood, si cita per esempio l'uso del metodo delle potenze inverso (o quello di Lanczos) per ottenere l'autovalore più piccolo del sistema linearizzato e l'approccio di Courant-Friedrich-Lewy (CFL).

Il metodo delle potenze inverse richiede però la linearizzazione del problema, ed un'analisi agli autovalori sul problema linearizzato. La linearizzazione e la conseguente analisi possono essere dispendiose se il problema è di grande dimensioni.

L'approccio CFL è sicuramente il metodo più semplice:

$$\Delta t_{CRIT} = \frac{h}{c} \quad , \quad c = \sqrt{\frac{K}{\rho}} \tag{3.15}$$

dove c è la velocità delle onde di compressione nel materiale. Se h è posta uguale alla spaziatura tra i nodi, si ottiene una stima molto conservativa, questo perchè la velocità di diffusione delle onde in un modello peridinamico dipende anche dalla grandezza dell'orizzonte. Se invece h venisse posta uguale all'orizzonte si otterrebbe una stima non conservativa.

3.2.3 Determinazione del time-step critico per il problema di conduzione termica

Viene riportato brevemente il metodo sviluppato da Agwai [1] per determinare il time-step critico per il problema meccanico.

Analogamente al metodo mostrato per il problema meccanico, questo metodo si basa su un'analisi di stabilità alla von Neumann della soluzione dell'equazione del bilancio energetico.

Nell'ipotesi di legame costitutivo termico bond-based lineare rispetto alla differenza di temperatura, l'equazione 3.3 può essere riscritta:

$$\frac{d(\rho_0 c\theta)_k}{dt} = \sum_{i|\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left(\kappa(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) \left(\theta_i - \theta_k \right) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) + \sum_{i|\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left(\mathbf{t}(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_i, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) \cdot (\dot{\mathbf{y}}_i - \dot{\mathbf{y}}_k) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) + r_k$$
(3.16)

dove κ è costante detta microconduttività.

Si applichi l'equazione 3.16 al caso monodimensionale ed omogeneo.

$$\frac{d(\rho_0 c\theta)_k}{dt} = S \sum_{i|x_i \in \mathcal{H}_{x_k}} \kappa(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) \big(\theta_i - \theta_k\big) \Delta x \tag{3.17}$$

Si suppone che l'equazione omogenea abbia soluzione generale armonica della forma:

$$\theta_k^{(n)} = \zeta_k^{(n)} e^{\Omega k \sqrt{-1}} \tag{3.18}$$

con Ω numero reale positivo e ζ numero complesso.

3.2 Integrazione esplicita nel tempo del problema termomeccanico accoppiato

In breve, ed analogamente a quanto fatto nella sezione 3.2.2, usando un approccio alle differenze finite ed usando il fatto che le funzioni armoniche sono limitate, si ottiene che la condizione sul time-step per far sì che la soluzione generale non diverga deve essere:

$$\Delta t \le \frac{\rho c_V}{\sum\limits_{i|\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}}} \kappa_i \Delta V_i} \tag{3.19}$$

Come mostrato da D'Antuono [12], si può confrontare la microconduttività κ con la microconduttività del modello termico peridinamico di Agwai in equazione 6.3 e ottenere la seguente formula per calcolare il time step critico:

$$\Delta t \le \frac{\rho c_V}{\sum\limits_{i|\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}}} \frac{\kappa_1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|} \Delta V_i}$$
(3.20)

Il valore di κ_1 dipende dalla dimensionalità del problema e può essere trovato nelle equazioni 6.4, 6.5 e 6.6.

3.2.4 Integrazione multi-rate

Le scale temporali del problema meccanico e del problema di conduzione termica sono molto diverse tra loro. Infatti la velocità di propagazione degli sforzi nel materiale è molto più veloce rispetto alla velocità di diffusione termica.

A prova di questo si può vedere che i time step critici meccanici e termici differiscono di almeno 5 ordini di grandezza per la maggior parte dei materiali, dunque l'integrazione del problema di diffusione termica usando il passo di integrazione del problema meccanico porterebbe a errori di troncamento rilevanti nella soluzione del problema di conduzione termica

Un approccio consigliato in casi di problemi multifisici molto diversi tra loro è l'integrazione *multi-rate*.

La tecnica di integrazione multi-rate consiste nell'adozione di passi di integrazione temporale diversi per i due problemi. Le due integrazioni sono sincronizzate con una cadenza regolare: ogni Δn numero di passi del problema con minore scala temporale (quindi più veloce) viene integrato anche il problema con scala temporale maggiore (più lento). Questo riduce l'errore di troncamento, oltre a far risparmiare tempo di calcolo.

Il passo di integrazione del problema lento (conduzione) Δt_{cond} viene scelto come primo sottomultiplo della durata totale dell'analisi che rispetta il vincolo della stabilità condizionata. Il passo di integrazione del problema veloce (meccanico)

 Δt_{mech} viene scelto come primo sottomultiplo del passo Δt_{cond} che rispetta il vincolo della stabilità condizionata. Si definisce con $N_{sync_{(MK)}}$ il numero di passi del problema meccanico per ogni passo del problema di conduzione termica.

Questa tecnica porta i seguenti vantaggi a confronto con una tecnica *monolitica*, che usa lo stesso passo di integrazione per i due problemi:

- In un passo d'integrazione del problema con minor velocità di propagazione l'incremento della soluzione è molto piccolo, anche prossimo all'epsilon macchina. Quindi la soluzione sarà influenzata fortemente da errori di troncamento. Integrare il problema più lento usando un passo di integrazione maggiore permette di superare questo problema.
- Visto che il problema con velocità di propagazione minore viene integrato meno volte, una tecnica multi-rate porta dei vantaggi in termini di costo computazionale.

L'utilizzo di questo approccio nella peridinamica si deve al lavoro di D'Antuono e Morandini [12, 16], dove si è implementata la tecnica multi-rate per la formulazione peridinamica del problema termomeccanico debolmente accoppiato. L'implementazione in Peridigm di questa tecnica è stata sviluppata dallo stesso D'Antuono.

3.2.5 Integrazione esplicita del problema termomeccanico fortemente accoppiato in Peridigm

Come anticipato, la versione di Peridigm ricevuta all'inizio del lavoro di tesi è la versione frutto del lavoro di tesi di D'Antuono [12].

D'Antuono ha modificato il programma per renderlo adatto all'integrazione di problemi termomeccanici debolmente accoppiati usando la tecnica di integrazione multirate descritta nella sezione precendente. L'accoppiamento debole è dovuto alla generazione di deformazioni termiche a causa della variazione di temperatura.

La procedura adottata in questa tesi viene leggermente modificata al fine di consentire un ulteriore accoppiamento tra problema meccanico e termico, dovuto alla generazione di energia termica a causa di fenomeni viscosi e plastici.

La generazione di potenza termica può essere un fenomeno molto lento rispetto alla diffusione degli sforzi oppure di velocità paragonabile, essendo dipendente dalle velocità di carico della struttura nel problema in questione.

3.2 Integrazione esplicita nel tempo del problema termomeccanico accoppiato

Viene quindi definito un ulteriore passo di integrazione per l'integrazione della potenza termica generata, chiamato Δt_{heat} , multiplo del passo in integrazione meccanico Δt_{mech} tramite il fattore $N_{sync_{(MH)}}$.

A causa dell'uso di time step differenti nell'integrazione della potenza generata e nel problema meccanico, l'inclusione del termine dovuto alla potenza termica per unità di volume assorbita p_{abs_k} (equazione 3.2) nell'integrazione multi-rate non è banale. Infatti è necessario integrare il termine p_{abs_k} generato durante i passi di integrazione meccanica, accumulandolo in un termine di energia (calore) per unità di volume assorbita e_{abs_k} .

Nel passo di integrazione della potenza termica generata si calcola la potenza media generata $\bar{p}_{abs_k} = e_{abs_k}/\Delta t_{heat}$ e si azzera e_{abs_k} per consentirne un nuovo accumulo.

Di seguito viene mostrata la procedura adottata:

- Per n da 0 al numero di passi del problema meccanico
 - 1. Passi da 1 a 4 del metodo Velocity-Verlet in sezione 3.2.1
 - 2. Se $n/N_{sync_{(MK)}}$ è intero, allora si integra un passo del problema termico diffusivo:
 - a) Calcolo dell'integrale discretizzato delle thermal response function, con un modello termico qualsiasi, ottenendo la potenza per unità di volume scambiata Q_{PD_k} in ogni punto del dominio punto k all'instante (n + 1), usando le quantità cinematiche e termiche al passo (n).
 - b) Integrazione con Eulero esplicito della temperatura all'instante (n + 1) in ogni punto del dominio punto k dell'equazione del primo principio della termodinamica:

$$\theta_k^{(n+1)} = \theta_k^{(n)} + \frac{\Delta t_{cond}}{\rho_0 c} (Q_{PD_k}^{(n)} + r_k)$$
(3.21)

- 3. Se $n/N_{sync_{(MH)}}$ è intero, allora si integra la potenza assorbita:
 - a) Calcolo della potenza per unità di volume assorbita media nel passo di integrazione della potenza termica generata nei punti k:

$$\bar{p}_{abs_k}^{(n)} = \frac{e_{abs_k}^{(n)}}{\Delta t_{heat}} \tag{3.22}$$

b) Integrazione con Eulero esplicito della temperatura all'instante (n + 1) in ogni punto del dominio punto k dell'equazione del primo principio della termodinamica:

$$\theta_k^{(n+1)} = \theta_k^{(*)} + \bar{p}_{abs_k}^{(n)} \tag{3.23}$$

dove $\theta_k^{(*)}$ può essere la temperatura al passo precedente (n) o la temperatura uscita dall'integrazione del problema termico diffusivo.

- c) Azzeramento di $e_{abs_k}^{(n)}$.
- 4. Se $n/N_{sync_{(MK)}}$ è intero o $n/N_{sync_{(MH)}}$ è intero, si applicano le condizioni al contorno essenziali sulla temperatura.
- 5. Passo 5 del metodo Velocity-Verlet in sezione 3.2.1 (usando le temperature al passo $\theta_k^{(n+1)}$, se integrate) e calcolo della potenza termica per unità di volume assorbita nel passo di integrazione meccanico $p_{abs_k}^{(n+1)}$.
- 6. Integrazione dell'energia per unità di volume termica assorbita:

$$e_{abs_k}^{(n+1)} = e_{abs_k}^{(n)} + p_{abs_k}^{(n+1)} \Delta t_{mech}$$
(3.24)

7. Passi da 6 a 7 del metodo Velocity-Verlet in sezione 3.2.1

Si fa notare che nell'integrazione con il metodo di Eulero in avanti nel punto 2.*b* della procedura viene usata l'energia accumulata al passo (n), mentre le forze interne nel metodo Velocity-Verlet sono state calcolate usando le temperature (n + 1).

Nei metodi espliciti accoppiati non è possibile pervenire alla soluzione al nuovo istante per tutti i problemi accoppiati nello stesso momento, è stato quindi necessario effettuare una scelta su quale problema risolvere prima dell'altro. È stato deciso di calcolare l'incremento di temperatura usando l'energia per unità di volume assorbita all'istante (n) perchè la potenza per unità di volume assorbita tra un passo di integrazione meccanico e il successivo non cambia di molto. Inoltre l'accoppiamento termomeccanico dovuto alla dilatazione termica nei modelli correspondence calcola l'incremento dello sforzo facendo la differenza tra le temperature all'istante (n+1) e (n). Se si integrasse prima il problema meccanico, la differenza di temperatura tra i passi sarebbe sempre nulla, e quindi si perderebbe quel tipo di accoppiamento (si ricorda che le quantità degli istanti precedenti ad (n) non sono più disponibili in memoria).

3.3 Integrazione nel tempo implicita

Nei metodi impliciti ogni passo di integrazione richiede la soluzione di un sistema di equazioni le cui incognite sono racchiuse in equazioni implicite non necessariamente lineari che possono richiedere una soluzione iterativa.

Il grande vantaggio dell'integrazione implicita è l'incondizionata stabilità, che fornisce la possibilità di usare time-step molto più elevati di quelli utilizzabili nell'integrazione esplicita. Nonostante il costo della fattorizzazione, che è necessario rifare alcune volte nel corso dell'integrazione nel caso di problemi non lineari, l'integrazione implicita consente di integrare nel tempo più velocemente la maggior parte dei problemi. Per questa ragione l'integrazione implicita è di grande interesse nella peridinamica.

Tuutavia, in caso di deformazioni elevate o problemi di frattura, si riscontra che l'integrazione del singolo passo potrebbe non convergere. Ciò rende complesso trattare i problemi di frattura con uno schema di integrazione implicito. La soluzione a questo problema può essere quella di abbassare il passo di integrazione, vanificando però il tempo risparmiato.

La soluzione di equazioni implicite richiede la linearizzazione del problema e la costruzione delle matrici di massa e di rigidezza del sistema. Per risolvere le equazioni implicite è necessaria la fattorizzazione di matrici derivate dalla matrice di massa del sistema.

La fattorizzazione è un'operazione computazionalmente dispendiosa, il cui costo è proporzionale alla banda della matrice (e nella soluzione numerica della peridinamica la banda è molto più grande che nella soluzione con gli elementi finiti), quindi il passo d'integrazione nei metodi impliciti è molto costoso.

La costruzione delle matrici è un'operazione che richiede una gran quantità di memoria. Per questo le analisi con integrazione implicita richiedono una maggior memoria rispetto alle analisi con integrazione esplicita, a parità di dimensioni del modello.

In questa tesi l'integrazione implicita è stata implementata in codici Python per la soluzione di problemi peridinamici lineari mono-dimensionali.

I metodi usati sono il metodo di Newmark per il problema meccanico, e il metodo di Eulero implicito per il problema termico.

Non è stato implementata alcuna formulazione accoppiata con metodi impliciti, ma sicuramente questo è uno degli sviluppi futuri da considerare, visti i lunghi tem-

pi di integrazione a causa della forte differenza tra le scale temporali del problema di conduzione termica e del problema meccanico (vedi sezione 3.2.4).

3.3.1 Metodo di Newmark

Il metodo di Newmark (o Newmark-Beta) è un metodo di integrazione numerica sviluppato da Newmark [47] per risolvere problemi di dinamica strutturale.

Il metodo calcola la soluzione (posizione e velocità) all'istante successivo dal seguente sistema di equazioni:

$$\begin{cases} \{\mathbf{u}^{(n+1)}\} = \{\mathbf{u}^{(n)}\} + \{\dot{\mathbf{u}}^{(n)}\}\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t^2 [(1-2\beta)\{\ddot{\mathbf{u}}^{(n)}\} + 2\beta\{\ddot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\}] \\ \{\dot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\} = \{\dot{\mathbf{u}}^{(n)}\} + \Delta t [(1-\gamma)\{\ddot{\mathbf{u}}^{(n)}\} + \gamma\{\dot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\}] \end{cases}$$
(3.25)

dove $\gamma \in \beta$ sono parametri, { $\mathbf{u}^{(n+1)}$ } e { $\mathbf{u}^{(n)}$ } i vettori dello spostamento al nuovo e al vecchio istante.

In questo sistema viene sostituito il vettore dell'accelerazione al nuovo istante $\{\ddot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\}$ con l'equazione di bilancio del problema strutturale al nuovo istante (n+1) esplicitata rispetto all'accelerazione.

Dopo la sostituzione si ottengono delle equazioni implicite non lineari nelle incognite che sono $\{\mathbf{u}^{(n+1)}\}$ e $\{\dot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\}$. La soluzione di queste equazioni si può trovare usando il metodo iterativo di Newton-Raphson.

La soluzione con il metodo di Newton-Raphson richiede la linearizzazione delle equazioni rispetto alle incognite. È quindi necessario linearizzare le equazioni di bilancio, creando le matrici di massa, rigidezza e smorzamento in modo da poter esprimere il vettore $\{\ddot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\}$ come una combinazione lineare del vettore delle incognite.

Si fa notare che nel caso di assenza di smorzamento, le equazioni possono essere risolte separatamente, trovando prima $\{\mathbf{u}^{(n+1)}\}$ risolvendo il sistema non-lineare della prima riga di equazioni in 3.25, e poi calcolando direttamente $\{\dot{\mathbf{u}}^{(n+1)}\}$ dalla seconda riga di equazioni.

La scelta dei valori dei parametri è vincolata da considerazioni di stabilità. Una possibilità suggerita da Newmark è quella di scegliere $\beta = 1/4$ e $\gamma = 1/2$. Si fa notare che scegliendo $\beta, \gamma = 0$ il metodo di Newmark degenera in un metodo puramente esplicito.

In questa tesi il metodo di Newmark viene usato solo per analisi lineari e senza smorzamento in codici sviluppati in Python per la soluzione di problemi peridinamici monodimensionali. Le equazioni da risolvere nel metodo di Newmark diventano lineari nelle incognite, quindi non è necessaria una linearizzazione e l'applicazione del metodo di Newton-Raphson per risolverle.

3.4 Integrazione Quasi-Statica

Le analisi quasi-statiche sono adatte alla simulazione di problemi in cui gli effetti dinamici sono trascurabili.

In questa tesi verranno fatte analisi quasi-statiche di provini in Peridigm, si descrive quindi la procedura usata dal programma per effettuare questo tipo di analisi, come viene spiegata dall'autore del programma Littlewood in [36].

Un'analisi quasi-statica consiste in una serie di passi, in cui viene incrementato il carico. In questi passi il contributo dell'accelerazione viene trascurato.

Si riporta l'equazione di bilancio peridinamica discretizzata da risolvere nelle analisi quasi-statiche.

$$\sum_{i|\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left((\mathbf{t}(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_i, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) - \mathbf{t}(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_k, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k)) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) + \mathbf{b}_k = \mathbf{0}$$
(3.26)

La soluzione del problema viene trovata con il metodo iterativo di Newton. Il metodo di Newton richiede la linearizzazione del problema in prossimità della soluzione guess, e la costruzione della matrice di rigidezza tangente (*tangent stiffness matrix*).

In Peridigm la linearizzazione viene fatta soltanto rispetto allo spostamento. Ciò non impedisce di risolvere anche problemi con legami costitutivi non elastici, come mostrato nella sezione in cui vengono testati i legami costitutivi elasto-plastici che si sono sviluppati in Peridigm.

La matrice di rigidezza tangente in Peridigm viene calcolata attraverso un approccio numerico alle differenze finite, e non tramite l'approccio analitico alla linearizzazione per legami elastici descritto in sezione 2.5. Una linearizzazione analitica più rigorosa richiederebbe il calcolo analitico della derivata totale dello spostamento, o l'inclusione delle variabili interne plastiche nel sistema linearizzato da risolvere con il metodo di Newton. L'approccio analitico alla differenziazione è più veloce e accurato rispetto ad un approccio alle differenze finite, e quindi è normalmente preferibile.

L'approccio alle differenze finite in Peridigm viene fatto tramite un doppio loop sui nodi e sui vicini. Nel ciclo più interno viene perturbata la posizione del vicino e calcolate le forze ottenute a causa della perturbazione che vengono usate per

costruire la matrice di rigidezza tangente. Si noti che in un provino snervato una perturbazione "in avanti" genera un ulteriore evoluzione delle variabili interne del modello plastico, nel calcolo della matrice di rigidezza tangente è quindi incluso l'effetto dello snervamento.

Si segnala che Peridigm include già delle routine di differenziazione automatica per alcuni legami costitutivi basate sul pacchetto Sacado di Trilinos [28], ma non sono implementate nel metodo quasi-statico.

L'analisi quasi-statica condivide alcuni dei problemi dell'analisi implicita, infatti se l'incremento di carico da un passo al successivo è troppo grande il processo iterativo potrebbe non trovare soluzione.

3.5 Condizioni al contorno

A causa dell'interazione tramite forze volumetriche a lungo raggio tra i vari punti, e a causa della conseguente assenza di forze di interazione di superficie, l'applicazione delle condizioni al contorno su una superficie nella soluzione di problemi peridinamici non è banale e non può essere fatta direttamente.

Nella discretizzazione mesh-less il dominio viene diviso in tanti volumetti le cui quantità sono associate ai punti materiali che stanno al centro dei volumetti stessi. Per applicare le condizioni al contorno su una superficie S, è necessario aggiungere un dominio \mathcal{R}_c fittizio posizionato sulla superficie S con spessore uniforme indicato con Δ . Questo dominio ha le stesse caratteristiche elastiche del corpo principale e viene discretizzato allo stesso modo. Le condizioni al contorno vengono applicate direttamente ai nodi del dominio aggiuntivo.

Tuttavia applicare le condizioni al contorno superficiali in questa maniera può provocare fenomeni non fisici (come rotture inaspettate) in prossimità dei vincoli stessi. Questi fenomeni si attenuano allontanandosi dalle superfici vincolate, quindi possono essere accettabili in quelle analisi in cui i fenomeni oggetti di studio avvengono lontano dai vincoli, ma possono rappresentare un problema rilevante per lo studio di fenomeni che avvengono proprio in prossimità delle superfici vincolate.

Lo spessore Δ viene posto normalmente uguale o maggiore al raggio dell'orizzonte δ . Questa scelta è infatti coerente con la natura non locale del problema peridinamico: se le forze di interazione non locali interagiscono fino a distanze δ è naturale imporre che lo spessore del dominio vincolato sia grande almeno quanto il raggio δ .
Come si mostrerà in seguito, la pratica ha tuttavia suggerito che in alcuni casi sia sufficiente e preferibile applicare le condizioni al contorno su domini ben più piccoli sia per non aggiungere troppa massa al modello, sia per contenere l'aumento di incognite dovuto al dominio aggiuntivo; ciò è valido soprattutto se il fenomeno che si vuole studiare è lontano dalle superfici vincolate.

3.5.1 C.c. essenziali cinematiche

Le condizioni al contorno cinematiche sulla superficie del corpo sono delle condizioni al contorno di Dirichlet per il problema meccanico classico.

Nella peridinamica, le condizioni al contorno essenziali cinematiche vengono imposte ai nodi del dominio aggiuntivo, come mostrato da Silling in [58].

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_c, t) = \bar{\mathbf{u}}(t) \qquad \forall \mathbf{x}_c \in \mathcal{R}_c \tag{3.27}$$

Per applicare al meglio queste condizioni al contorno, lo spessore Δ di \mathcal{R}_c deve essere almeno grande quando l'orizzonte δ , come suggerito ad esempio da Macek e Silling [39].

L'imposizione dello spostamento nei nodi in \mathcal{R}_c non riesce comunque ad assegnare perfettamente lo spostamento voluto sulla superficie. Questo può essere visto calcolando gli spostamenti sulla superficie tramite un'interpolazione degli spostamenti dei nodi vicini, che possono assumere valori diversi a seconda del carico a cui è sottoposta la struttura.

Inoltre la presenza di una zona vincolata provoca nelle vicinanze di \mathcal{R}_c delle deformazioni non fisiche, questo perchè la posizione dei nodi vincolati va ad influire sulle quantità non locali degli altri nodi in prossimità della superficie di vincolo. Nei problemi di analisi della frattura, questo fenomeno può determinare l'insorgenza di fratture non previste nella zona prossima alla superficie vincolata. Questo problema viene normalmente risolto imponendo che la zona vicino al vincolo non possa fratturarsi, formando una *No-Fail Zone* [40].

3.5.2 C.c. essenziali termiche

Le condizioni al contorno essenziali termiche consistono nell'imposizione della temperatura nei nodi in prossimità della superficie vincolata.

Come osservato da Bobaru e Duangpanya [3,4] le condizioni al contorno di Dirichlet nel problema termico possono essere imposte anche sui soli punti materiali al bordo del dominio, perchè la soluzione lontano dalla superficie di vincolo risulta

3 Soluzione numerica del problema peridinamico

la stessa sia nel caso di dominio aggiuntivo fittizio spesso δ che nel caso in cui la temperatura venga imposta ai soli punti adiacenti al bordo; questo ovviamente è valido se ai fini dell'analisi non è importante la temperatura vicino alla superficie vincolata.

In questa tesi queste condizioni al contorno verranno comunque imposte su un dominio aggiuntivo spesso δ , analogamente al caso cinematico, come suggerito da Madenci ed Oterkus in [40].

3.5.3 Imposizione di carichi esterni

Carichi volumetrici

I carichi esterni volumetrici sono facilmente applicabili nella formulazione discretizzata della peridinamica. Infatti nell'equazione di bilancio 3.1 i carichi volumetrici possono essere imposti tramite \mathbf{b}_k .

Carichi su una superficie

I carichi esterni agenti sulla superficie del corpo sono delle condizioni al contorno di Neumann per il problema meccanico classico (infatti possono essere legati alla derivata spaziale dello spostamento).

Nella soluzione numerica con approccio mesh-free della peridinamica i carichi su una superficie vengono imposti sui nodi del dominio fittizio \mathcal{R}_c . La pratica usata nella maggior parte degli articoli, e suggerita da [40], è quella di porre lo spessore Δ di questo dominio uguale alla spaziatura tra i nodi. I carichi imposti sui nodi appartenenti a \mathcal{R}_c vengono poi ridistribuiti ai nodi del corpo attraverso i bond. Non è dunque necessario imporre i carichi superficiali su uno strato spesso δ , al contrario del caso di spostamenti imposti.

I nodi del dominio \mathcal{R}_c trasmettono poi i carichi ai nodi in prossimità della superficie attraverso le forze non locali.

Il dominio aggiuntivo, per quanto sottile, aggiunge massa inesistente al modello. Per questo motivo un approccio alternativo è quello di imporre i carichi ai nodi direttamente vicini al bordo senza l'uso di un dominio fittizio.

L'unico modo per imporre i carichi è tramite una forza volumetrica da inserire nelle equazioni di bilancio discretizzate 3.1. Per questo motivo i carichi superficiali devono essere convertiti a carichi volumetrici. Di fatto i carichi superficiali vengono trattati come carichi volumetrici che agiscono su un volume di spessore molto piccolo. Dato un carico di forza per unità di area \mathbf{p}_{ext} sui punti di una superficie S, il carico volumetrico da applicare nel problema peridinamico \mathbf{b} , agente sui punti del dominio \mathcal{R}_c con base S e spessore Δ , si calcola come:

$$\mathbf{b}(\mathbf{x}_v, t) = \mathbf{p}_{ext}(\mathbf{x}_s, t) / \Delta \qquad \forall \mathbf{x}_v \in \mathcal{R}_c$$
(3.28)

in cui \mathbf{x}_s è il punto della superficie S più vicino a \mathbf{x}_v .

3.5.4 Imposizione di flussi termici esterni

Flusso termico volumetrico

L'imposizione di un flusso termico volumetrico viene applicato nell'equazione di bilancio 3.3 tramite r_k .

Flusso termico su una superficie

Analogamente a come vengono imposti i carichi superficiali, il flusso termico su una superficie S viene imposto, sotto forma di flusso termico volumetrico, in un dominio fittizio \mathcal{R}_c con base S e spessore Δ . La potenza termica per unità di volume imposta nel dominio \mathcal{R}_c si calcola come segue:

$$r(\mathbf{x}_v, t) = Q(\mathbf{x}_s, t) / \Delta \qquad \forall \mathbf{x}_v \in \mathcal{R}_c$$

$$(3.29)$$

dove $Q(\mathbf{x}_s, t) = -\mathbf{q}(\mathbf{x}_s, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}_s, t)$ è il flusso termico entrante nella superficie.

Lo spessore Δ può essere posto uguale alla spaziatura tra i nodi Δx o uguale al raggio dell'orizzonte δ .

Flusso termico convettivo

La convezione è un caso particolare di flusso termico imposto su una superficie dovuta al contatto della superficie con un fluido e dipendente dalla temperatura stessa del corpo. Nella teoria locale il flusso termico imposto è uguale a:

$$Q(\mathbf{x}_s, t) = \hbar(\theta(\mathbf{x}_s, t) - \theta_\infty) \tag{3.30}$$

dove \hbar è una costante convettiva che dipende dal fluido. Dall'equazione 3.29 nella peridinamica la potenza termica per unità di volume imposta nel dominio \mathcal{R}_c è:

$$r(\mathbf{x}_v, t) = \hbar \frac{\theta(\mathbf{x}_s, t) - \theta_\infty}{\Delta} \qquad \forall \mathbf{x}_v \in \mathcal{R}_c$$
(3.31)

3 Soluzione numerica del problema peridinamico

3.6 Gestione dei neighbors in Peridigm

Come già anticipato nell'equazione 3.1, le bond force density si ottengono dall'interazioni con i nodi vicini, e per questa ragione il software di peridinamica deve essere in grado di rendere disponibili le quantità relative ai nodi vicini durante i calcoli.

All'inizio dell'analisi Peridigm, nella versione in cui è stato fornito, avvia una procedura di ricerca dei vicini basata sul pacchetto Zoltan.

Ogni nodo nell'analisi ha un identificativo unico per tutta l'analisi, cioè un id globale chiamato *GID*, e un identificativo locale relativo al processore di pertinenza, chiamato *LID*.

Per semplicità viene prima spiegata la procedura nelle analisi su singolo processore (in cui gli identificativi LID e GID si equivalgono). Si attua un for-loop sui nodi che per ogni nodo trova i vicini (e i loro identificativi LID) ed aggiunge alla fine di un vettore chiamato NeighborhoodList il numero dei vicini e gli identificativi. Nello stesso momento inserisce in un vettore lungo tanto quanti sono i nodi, chiamato NeighborhoodPtr, la posizione nel vettore NeighborhoodList dei dati relativi al nodo in esame.

- 1. NeighborhoodPtr = $zeros(num_nodi)$
- 2. NeighborhoodList = empty
- 3. for LID_i dei nodi
 - a) NeighborhoodPtr $[LID_i] = \text{length}(\text{NeighborhoodList})$
 - b) Zoltan trova i vicini: numNeighbors, vettore di LID
 - c) Filtraggio dei bond nel caso in cui si volessero imporre superfici di discontinuità in fase antecedente all'analisi: nuovi numNeighbors, vettore di *LID*
 - d) append numNeighbors a NeighborhoodList
 - e) for LID_k dei neighbors
 - i. append LID_k a NeighborhoodList

Nel calcolo delle forze relativo ad un nodo i, si è in grado, semplicemente accedendo all'*LID* del vicino k dalla NeighborhoodList, di applicare la force density t_{ik} sia sul nodo i che sul nodo k (ma con il segno -, come si può vedere dall'equazione 3.1). Nel caso di analisi *multiprocessore* il discorso si complica. Infatti può capitare che un nodo i facente parte del dominio di analisi relativo ad un certo processore, abbia un vicino k facente parte del dominio di un altro processore.

Dunque è necessario che i processori comunichino tra loro per scambiarsi le informazioni relative ai nodi di interfaccia (nodi ghost).

Per gestire questo problema, Peridigm si affida al pacchetto *Epetra* di *Trilinos* [28].

Tramite Epetra è possibile costruire una mappa vettoriale chiamata *Epetra_Map* su cui costruire tutti i vettori *Epetra_Vector* che verranno usati nell'analisi.

Le posizioni in questa mappa corrispondono al LID, la mappa inoltre si annota il GID corrispondente alla posizione. Per ogni processore quindi si creano mappe Epetra diverse.

La mappa relativa ai soli nodi facente parte del dominio di un processore è chiamata in Peridigm *OwnedPointMap*.

Durante la ricerca dei vicini, i processori si scambiano le informazioni delle posizioni di tutti i nodi (*Gather-Scatter*), in modo che ogni processore possa effettuare le ricerche.

Nel momento in cui viene trovato un vicino che non fa parte del dominio del processore che sta effettuando la ricerca, viene assegnato a questo nodo vicino, detto *ghost*, un nuovo *LID* per questo processore (diverso dall'*LID* del processore di provenienza), e il suo *LID* viene aggiunto nella NeighborhoodList di questo processore.

Una volta ultimata la ricerca, Peridigm crea una nuova mappa chiamata OverlapPointMap in cui sono inclusi tutti i nodi del dominio più i nodi (ghost), anche in questo caso le posizioni nella mappa sono identificate dal LID.

Costruisce anche una mappa Epetra chiamata *OwnedBondMap* che è la mappa base di un vettore che è lungo quanti sono i nodi propri del dominio del processore e i cui elementi sono vettori lunghi quanti sono i vicini dei nodi nelle posizioni corrispondenti. I vettori che si basano sulla OwnedBondMap vengono chiamati *vettori-bond*.

Grazie a queste mappe, ora è possibile accedere ai dati dei vicini interprocessori ed assegnare la force density a nodi di altri processori, con la seguente procedura:

1. Gather-Scatter sui vettori OverlapPointMap delle quantità cinematiche usando Epetra_Import

- 3 Soluzione numerica del problema peridinamico
 - 2. Calcolo delle forze agenti sui nodi (o dei flussi di calore), come sommatoria delle force density.
 - 3. Gather-Scatter per sommare le forze provenienti da altri processori usando *Epetra_Export*

Peridigm non tiene in memoria le force density calcolate tra due nodi, infatti non serve farlo perchè vengono immediatamente sommate al vettore delle forze agenti sui nodi. Salvare in memoria le force density vorrebbe dire salvare un vettore lungo 3 volte il numero totale dei bonds, ovvero un grande dispendio di memoria.

Si fa presente che, per i nodi appartenenti al dominio proprio del processore, i vettori-bond presentano **due valori relativi allo stesso bond**. Per esempio se due nodi $i \in k$ sono vicini tra loro, è presente sia la posizione relativa al bond ik che va da i in k sia quella relativa allo stesso bond ki. Questo perchè normalmente le quantità calcolate dal nodo i che influenzano il nodo k non hanno gli stessi valori delle quantità che compiono il cammino *speculare* da k a i.

3.7 Sviluppo procedura di gestione dei Bond Speculari in Peridigm

In questa tesi vengono usate delle quantità relative ai bond tra i nodi, come il micropotenziale definito in 2.27, che hanno bisogno di essere tenute in memoria. Il micropotenziale infatti serve nell'applicazione del modello di danno del micropotenziale critico.

Per come è fatta la struttura delle mappe dei bond di Peridigm (OwnedBond-Map), è facile assegnare il valore relativo all'interazione che un nodo i sviluppa sul nodo vicino k nella posizione relativa al bond ik di un vettore bond, identificando la giusta posizione semplicemente usando la NeighborhoodList.

Nel calcolo del micropotenziale però, è necessario accedere e scrivere anche nella posizione nel vettore *Bond* del bond *speculare* al bond *ik*, ovvero la posizione del valore relativo all'interazione che il nodo *k* effettua sul nodo *i*. Questo perchè nella definizione di micropotenziale è incluso il termine $\mathbf{T}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle$, ovvero la force density che il nodo vicino effettua sul nodo originale, come mostrato in equazione 2.27 e ripetuto di seguito:

$$\underline{w}[\tilde{t}]\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \underline{w}'[\tilde{t}]\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle = \int_0^{\tilde{t}} (\underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle + [\underline{\mathbf{T}}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle]) \cdot \dot{\underline{\mathbf{Y}}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle dt$$
(3.32)

Peridigm è stato dunque modificato al fine di riuscire agevolmente ad assegnare valori dal bond ik al bond speculare ki, anche nelle analisi multiprocessore.

La procedura implementata per la gestione dei bond speculari si articola in 3 parti, si consiglia di leggere i passaggi seguendo contemporaneamente l'esempio della sezione 3.7.2:

• **Prima parte**: Definizione di una *OverlapBondMap*, la mappa base di un vettore che è lungo quanti sono i nodi propri più i nodi *ghost* del dominio del processore e fatto di vettori lunghi quanti sono i vicini dei nodi nelle posizioni corrispondenti.

Procedura:

- Definizione di un vettore chiamato numNeigh basato sulla OwnedPoint-Map i cui valori sono i numeri di vicini dei nodi
- 2. Definizione di un vettore chiamato *numNeighOverlap* basato sulla *Over-lapPointMap*
- 3. Importazione dei numeri dei vicini in numNeighOverlap usando Epetra_Import (Gather-Scatter)
- 4. Definizione della OverlapBondMap
- Seconda parte: Definizione di una NeighborhoodList di GID che comprenda anche i vicini dei nodi *ghost* (*NeighborsGIDoverlap*).

Procedura:

- 1. Conversione della NeighborhoodList in un vettore chiamato NeighborsGID basato sulla OwnedBondMap con i GID dei vicini
- 2. Definizione di un vettore chiamato NeighborsGIDoverlap basato sulla OverlapBondMap
- 3. Importazione dei GID dei vicini dei nodi propri e i nodi ghost in *NeighborsGIDoverlap* usando Epetra Import (Gather-Scatter)
- **Terza parte**: Ricerca posizione dei bond speculari nella *OverlapBondMap* usando NeighborsGIDoverlap, e salvataggio della posizione in un vettorebond chiamato *SpecularBonds*.

Procedura:

1. for-loop sui nodi LID_i propri del processore

- 3 Soluzione numerica del problema peridinamico
 - a) Ottengo GID_i (GID corrispondente a LID_i), $firstpoint_i$ (la posizione del primo elemento nel vettore Neighbors GID overlap relativo ai vicini di LID_i), e size_i (numero di vicini di LID_i)
 - b) for-loop sui vicini j di LID_i
 - i. Ottengo GID_j da $Neighbors GID overlap[firstpoint_i+j]$, il LID_j corrispondente a GID_j , $firstpoint_j$ (la posizione del primo elemento del vettore Neighbors GID overlap relativo ai vicini di LID_j), e $size_j$ (numero di vicini di LID_j)
 - ii. for-loop sui vicini k di LID_j
 - A. Ottengo GID_k da $Neighbors GID overlap[first point_j + k]$
 - B. Se GID_k è uguale a GID_i , assegna alla posizione $[firstpoint_i + j]$ del vettore SpecularBonds il valore $[firstpoint_j + k]$ e blocca il for-loop k
 - iii. Fine loop k
 - c) Fine loop j
 - 2. Fine loop i

3.7.1 Calcolo del micropotenziale

Il vettore *SpecularBonds* ottenuto viene usato per calcolare il micropotenziale durante l'integrazione. Si mostra di seguito la procedura adottata per il calcolo del micropotenziale nel singolo passo di integrazione.

- 1. Controllare se il micropotenziale nei bond all'istante precedente ha superato il valore critico
- 2. Azzerare il vettore micropotenziale all'istante corrente (per calcolarne inizialmente l'incremento).
- 3. Gather-Scatter con Epetra_Import per ottenere il micropotenziale all'istante precedente nel vettore BondOverlap.
- 4. Calcolo dell'incremento del micropotenziale relativo allo force state del bond *ik*:

$$\Delta \underline{w}_{ik} = \underline{\mathbf{T}}_{ik} \cdot d\underline{\mathbf{Y}}_{ik} \tag{3.33}$$



- Figura 3.1: Modello a 6 nodi per la validazione della gestione dei bond speculari. Assegnazione di GIDs ai nodi e divisione del modello in 2 sottodomini identificati da colori diversi e associati a diversi processori.
 - 5. Somma dell'incremento calcolato al micropotenziale del bond *ik*. Uso del vettore *SpecularBonds* per indicizzare la posizione nel vettore micropotenziale del bond speculare *ki* nel nuovo istante, e sommargli l'incremento calcolato.

$$\underline{w}_{ik} = \underline{w}_{ik} + \Delta \underline{w}_{ik} \tag{3.34}$$

$$\underline{w}_{ki} = \underline{w}[SpecularBonds[ik]] = \underline{w}_{ki} + \Delta \underline{w}_{ik}$$
(3.35)

- 6. Gather-Scatter con Epetra_Export per inviare il valore calcolato da sommare al micropotenziale nel nuovo istante negli altri processori.
- 7. Somma del micropotenziale dell'istante precedente con l'incremento calcolato nell'istante corrente. Si ottiene il micropotenziale totale all'istante corrente.

3.7.2 Validazione

Viene riportata l'applicazione della procedura appena illustrata ad un esempio semplice.

Questa sezione ha la duplice utilità di validare il modello e di mostrare un esempio facile da capire e riprodurre.

Si consideri un modello composto da 6 nodi distanti 1 m disposti in 2 file da 3. Al fine di effettuare un'analisi con 2 processori il modello viene diviso in 2 parti, come si può vedere in figura 3.1. L'orizzonte viene impostato pari a 1.1 m, in modo che i vicini di un nodo siano solo i nodi adiacenti in direzione orizzontale e verticale.

3 Soluzione numerica del problema peridinamico

GID	LID, proc. 0	LID, proc. 1
0	non assegn.	0
1	3*	1
2	0	3^{\star}
3	4^{\star}	2
4	1	4^{\star}
5	2	non assegn.

Tabella 3.1: Assegnazione dei LID per il processore 0 e 1. Con * si indicano i nodi ghost del relativo processore.

Ogni processore assegna i LIDs ai nodi propri e poi avvia la ricerca dei vicini, assegnando i LIDs dei nodi ghost, costruendo il vettore NeighborhoodPtr e NeighborhoodList.

Nella tabella 3.1 vengono mostrati i LIDs assegnati dai due processori ai nodi del modello; è importante ricordare che i LID indicano la posizione delle quantità corrispondenti al GID nelle Epetra_Map. I vettori NeighborhoodPtr e NeighborhoodList e le mappe OwnedPointMap eper i processori sono:

NeighborhoodPtr Processore 0: 0, 3, 7.

NeighborhoodList Processore 0: $\underline{2}$, 2, 3, $\underline{3}$, 2, 3, 4, $\underline{2}$, 0, 1.

NeighborhoodPtr Processore 1: 0, 3, 7.

NeighborhoodList Processore 1: $\underline{2}$, 1, 2, $\underline{3}$, 0, 3, 4, $\underline{2}$, 0, 4.

I numeri sottolineati indicano il numero di vicini del nodo proprio del processore.

Viene svolta la procedura sviluppata per la gestione dei bond speculari a mano per ricavare i risultati aspettati per questo modello semplice.

Prima parte

- numNeigh processore 0: 2, 3, 2.
- numNeigh processore 1: 2, 3, 2.
- numNeighOverlap processore 0: 2, 3, 2, 3, 2.
- numNeighOverlap processore 1: 2, 3, 2, 2, 3.
- OverlapBondMap processore 0: 0(0), 0(1) / 1(0), 1(1), 1(2) / 2(0), 2(1) / 3(0), 3(1) / 4(0), 4(1), 4(2)
- OverlapBondMap processore 0: 0(0), 0(1) / 1(0), 1(1), 1(2) / 2(0), 2(1) / 3(0), 3(1), 3(2) / 4(0), 4(1)

Il primo numero indica il LID, mentre il numero tra parentesi indica la posizione del vettore del LID. La barra obliqua divide le posizioni nella mappa relative a nodi diversi.

Seconda parte

- NeighborsGID processore 0: 5, 4 / 5, 1, 3 / 2, 4.
- NeighborsGID processore 1: 1, 3 / 0, 2, 4 / 0, 4.
- NeighborsGIDoverlap processore 0: 5, 4 / 5, 1, 3 / 2, 4 / 0, 2, 4 / 1, 3.
- NeighborsGIDoverlap processore 1: 1, 3 / 0, 2, 4 / 0, 4 / 2, 4 / 5, 1, 3.

Terza Parte

- SpecularBonds processore 0: 5, 8 / 6, 9, 11 / 0, 2.
- SpecularBonds processore 1: 2, 5 / 0, 8, 10 / 1, 11.

Viene sviluppato un modello di materiale fittizio in cui si somma al vettorebond "micropotenziale" nelle posizioni del bond e del bond speculare, il valore corrispondente contenuto nel vettore SpecularBonds.

Partendo con un vettore-bond micropotenziale nullo, il micropotenziale deve assumere i seguenti valori dopo l'integrazione di un passo:

- Micropotenziale processore 0: 5, 16 / 8, 19, 22 / 5, 8.
- Micropotenziale processore 1: 2, 6 / 2, 16, 19 / 6, 22.

Le analisi vanno ripetute per più time-steps per controllare che il micropotenziale da un passo all'altro venga sommato correttamente. Dopo n passi il micropotenziale deve assumere i seguenti valori:

- Micropotenziale processore 0: 5n, 16n / 8n, 19n, 22n / 5n, 8n.
- Micropotenziale processore 1: 2n, 6n / 2n, 16n, 19n / 6n, 22n.

Nella validazione del modello è stato impostato il codice per fargli stampare tutte le quantità che vengono ricavate durante le tre parti della procedura e fargli stampare il micropotenziale dopo i passi di integrazione. Le quantità calcolate a mano in questa sezione sono state confermate dall'analisi in Peridigm.

Altre prove sono state fatte con modelli più grandi:

- 3 Soluzione numerica del problema peridinamico
 - Si è imposto che il micropotenziale (per il bond e per il bond speculare) fosse aumentato di 1 solo se la posizione dei nodi originali del bond fosse contenuta all'interno di zone delimitate. Le analisi devono mostrare che il micropotenziale viene aumentato sia nelle zone delimitate che leggermente al di fuori (con una distanza massima pari all'orizzonte) grazie al fatto che i bond possono avere origine da nodi dentro alla zona e puntare a nodi fuori alla zona. Le analisi sono state ripetute per zone di dimensioni variabili, ed hanno dato i risultati aspettati.
 - Sono stati rifatti i test includendo il danno, al fine di vedere se una possibile rottura dei bond provochi qualche errore nel pointer associato ai vettori-bond.

3.8 Proprietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura

Le proprietà caratteristiche dei materiali possono essere considerate costanti solo in limitati range di temperature.

Se nel range di temperature tipico dell'analisi è presente anche la transizione da una forma allotropica del materiale ad un altra, le proprietà caratteristiche variano sensibilmente, e non possono essere considerate costanti. Lo stesso vale per materiali in condizioni prossime alla temperatura di fusione. Modellare l'aumento del calore specifico in corrispondenza della temperatura di fusione permette di modellare in modo semplice la fusione del materiale.

In questa sezione si mostra come viene implementata in Peridigm la dipendenza dalla temperatura delle proprietà dei materiali.

3.8.1 Implementazione

Peridigm richiede file di input formattati in XML, capaci di utilizzare le *Parame*terLists del pacchetto *Teuchos* di *Trilinos* [28].

L'inserimento delle proprietà dei materiali nel file di input viene fatto nella lista dei materiali come mostrato nella lista 3.1, in cui *Property1* e *Property2* sono delle proprietà caratteristiche di esempio e normalmente sono più di 2 (nel caso del materiale elastico sarebbero *Density*, *Bulk Modulus* e *Shear Modulus*). A *Property1* e *Property2* sono stati dati valori casuali come esempio.

Listing 3.1: Definizione delle proprietà dei materiali nella versione iniziale di Peridigm

3.8 Proprietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura

```
1 < ParameterList name="Materials">
      <ParameterList name="Material 1">
2
          <!-- Parametri del materiale Material 1 -->
3
          <Parameter name="Material Model" type="string" value="
4
              Model"/>
          <Parameter name="Property1" type="double" value="10.0"/>
\mathbf{5}
          <Parameter name="Property2" type="double" value="1.0e-5"/>
6
      </ ParameterList>
7
      <ParameterList name="Material N">
8
          <!-- Parametri del materiale Material N -->
9
      </ParameterList>
10
11 </ ParameterList>
```

Lo scopo dell'implementazione è creare la possibilità di inserire proprietà dipendenti dalla temperatura tramite l'inserimento di una funzione della temperatura nel parametro *value* delle proprietà del materiale, come ad esempio mostrato nella lista 3.2.

Listing 3.2:	Definizione	delle proprietà	dei materiali p	per proprietà	dipendenti dall	a
	temperatur	a (temperatura	definita eccezi	ionalmente co	on il simbolo T)

```
1 <ParameterList name="Materials">
      <ParameterList name="Material 1">
2
          <!--- Parametri del materiale Material 1 --->
3
          <Parameter name="Material Model" type="string" value="
4
              Model " />
          <Parameter name="Property1" type="string" value="(T
5
              >=100.0)*20.0 + (100>T)*45.0"/>
          <Parameter name="Property2" type="string" value="10.0*T +
6
              pow(T,2) " >
      </ParameterList>
7
      <ParameterList name="Material N">
8
          <!--- Parametri del materiale Material N --->
9
      </ ParameterList>
10
11 </ ParameterList>
```

Nell'esecuzione di Peridigm le proprietà vengono lette e salvate negli oggetti di classe *Material* in modo da poterle usare durante l'analisi. Gli oggetti *Material* si riferiscono ai materiali elencati nel file di input.

Al fine di leggere le stringhe con la proprietà funzione della temperatura in input, e poter calcolare il valore della proprietà durante lo svolgimento dell'analisi in Peridigm sostituendo il valore della temperatura nella stringa, viene usato il pacchetto *RTC-function* (Run-Time Compiler) incluso in *Trilinos*.

3 Soluzione numerica del problema peridinamico

Durante l'inizializzazione dell'oggetto *Material*, la stringa riferita ad una data proprietà ricevuta in input diventa il corpo di un oggetto di classe $PG_RuntimeCompiler::Function$. Nello svolgimento dell'analisi, la temperatura viene data in ingresso all'oggetto $PG_RuntimeCompiler::Function$ della proprietà, l'oggetto RTC viene eseguito, e viene estratto il valore calcolato, che è la proprietà del materiale alla temperatura data.

Il calcolo del valore della proprietà caratteristica avviene solitamente all'interno della funzione per calcolare la force density (o l'heat flow density). Tuttavia il calore specifico non è incluso all'interno di quella funzione. Nelle analisi con integrazione esplicita il calore specifico viene aggiornato con la nuova temperatura all'interno del ciclo principale di integrazione nel tempo.

3.8.2 Validazione

Viene effettuato un test molto semplice per verificare l'implementazione delle proprietà caratteristiche come funzioni della temperatura.

Si mostra in figura 3.2a la curva del calore specifico in funzione della temperatura in un tipico acciaio al carbonio riportata in [17], la cui espressione analitica è:

$$c = \begin{cases} 425 + 7.33 \times 10^{-1}\theta - 1.69 \times 10^{-3}\theta^2 + 2.22 \times 10^{-6}\theta^3 & 20^{\circ}\mathrm{C} \le \theta < 600^{\circ}\mathrm{C} \\ 666 + \frac{13002}{738 - \theta} & 600^{\circ}\mathrm{C} \le \theta < 735^{\circ}\mathrm{C} \\ 545 + \frac{17820}{\theta - 731} & 735^{\circ}\mathrm{C} \le \theta < 900^{\circ}\mathrm{C} \\ 650 & 900^{\circ}\mathrm{C} \le \theta < 1200^{\circ}\mathrm{C} \end{cases}$$
(3.36)

Si può notare la presenza di un picco in corrispondenza della temperatura di 735°C che corrisponde alla transizione allotropica del ferro dalla forma α (ferrite) alla forma γ (austenite).

Partendo da una temperatura di 20°C, si integra analiticamente l'equazione 3.36 al fine di ottenere la quantità di calore per unità di massa da fornire per ottenere una data temperatura. In figura 3.2b viene riportata la curva ottenuta da questa integrazione. La quantità di calore per unità di massa da fornire all'acciaio per portarlo dalla temperatura di 20°C a 1200°C è pari a:

$$q_{(20^{\circ}C \to 1200^{\circ}C)} = 827063.84 \frac{J}{kg}$$
(3.37)

Viene costruita una piccola mesh di solo 8 nodi, al cui materiale viene assegnato il calore specifico in equazione 3.36, come spiegato nella sezione 3.8.1, e densità

3.8 Proprietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura



(a) Calore specifico in funzione della temperatura per un generico acciaio al carbonio



(b) Temperatura ottenuta a seguito della fornitura di calore per unità di massa partendo da $20^{\circ}C$



massica pari a 1 kg/m^3 .

Si imposta l'analisi in Peridigm, in cui viene fornita ovunque una potenza per unità di volume pari a 1 J/m^3 . Essendo la densità unitaria, in questa analisi si possono identificare con tempo e calore per unità di massa formito ai punti della mesh.

Viene imposta una temperatura iniziale di 20°C in tutti i nodi, e l'analisi viene fatta durare 827063.84 s. Ciò corrisponde a fornire il calore per unità di massa necessario a raggiungere la temperatura di 1200°C.

Estraendo i risultati dell'analisi in un punto qualsiasi ci si aspetta che l'andamento della temperatura nel tempo coincida con l'andamento della temperatura in funzione del calore per unità di massa fornito mostrato in 3.2b. Derivando il tempo (calore fornito) rispetto alla temperatura usando uno schema alla differenze finite ci si aspetta di ottenere i valori di calore specifico in funzione della temperature mostrati in figura 3.2a.

Nelle figure 3.3 si mostrano i risultati ottenuti dall'analisi. Si può notare che i risultati si sovrappongono perfettamente con le curve inserite.

3 Soluzione numerica del problema peridinamico



(a) Calore specifico misurato dall'analisi in Peridigm in funzione della temperatura



(b) Temperatura ottenuta in funzione del tempo in Peridigm

Figura 3.3

In questo capitolo vengono analizzati i principali modelli elastici isotropi sviluppati in letteratura per la peridinamica.

Ognuna delle prime quattro sezioni presenta la spiegazione di un modello. Si anticipa che il modello ordinario spiegato nella seconda sezione non è in grado di riprodurre il comportamento atteso nei test tridimensionali con campo di deformazione costante neanche a convergenza [45]. Per questa ragione, nella terza sezione viene descritta una procedura per vincolare il campo di deformazione nel modello ordinario a comportarsi in maniera conforme a ciò che viene predetto dalla meccanica del continuo classica [42].

Nella quinta sezione, è stato implementato in Python il modello elastico ordinario per un test monodimensionale. Usando il modello implementato viene studiata la δ -convergenza delle frequenze proprie di un'asta deformabile assialmente. Questo modello è stato implementato all'inizio della tesi con il solo fine di familiarizzare con la teoria peridinamica.

Nella sesta sezione si prova a capire se i modelli peridinamici elastici isotropi sono in grado di riprodurre le caratteristiche di rigidezza di un'asta discretizzata in tre dimensioni. Si mostra il confronto tra i risultati di analisi peridinamiche con i diversi tipi di modelli in questione e i risultati attesi dalla teoria classica. Le analisi vengono fatte in Peridigm, tutti i modelli usati sono già implementati nella versione di Peridigm ricevuta non modificata. Viene mostrato anche un confronto tra le durate delle analisi per i vari modelli trattati.

La settima sezione riporta delle considerazioni sul modello PALS già implementato in Peridigm e descritto in sezione 4.3.2. Questo modello corregge il modello ordinario per le analisi tridimensionali, ma introduce grossi problemi di instabilità.

L'ottava sezione riporta la prova di trazione su un'asta in cui si impongono grandi spostamenti agli estremi. Ciò viene fatto per mostrare il diverso comportamento dei modelli peridinamici presentati quando le deformazioni sono grandi.

Nell'ultima sezione viene riportata l'integrazione del legame elastico isotropo nei modelli correspondence con proprietà dipendenti dalla temperatura.

4.1 Modello PMB (Prototype Microelastic Brittle)

Il modello PMB [61] è un modello di materiale elastico bond-based, ed è il modello più semplice definito nella peridinamica.

L'interazione tra 2 nodi avviene attraverso una pairwise force density f che dipende linearmente dall'allungamento del bond (bond stretch), attraverso una costante di proporzionalità C detta micromodulus. La pairwise force density è allineata al bond stesso, quindi il modello PMB è ordinario.

$$s = \frac{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}| - |\boldsymbol{\xi}|}{|\boldsymbol{\xi}|} \tag{4.1}$$

$$f = C s$$
 $\mathbf{f} = \frac{\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}|} f$ (4.2)

dove η è lo spostamento relativo tra i due nodi connessi dal bond.

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u}' - \mathbf{u} \tag{4.3}$$

Sostituendo tutto nell'equazione 4.2 si ottiene:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C \frac{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}| - |\boldsymbol{\xi}|}{|\boldsymbol{\xi}|} \frac{\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}|}$$
(4.4)

La nomenclatura *microelastic* sta a significare che la *pairwise force density* è ottenibile direttamente dalla derivazione del micropotenziale di un bond rispetto alla variazione dello spostamento relativo η .

$$\mathbf{f} = \frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{4.5}$$

Integrando questa relazione, si ottiene che il micropotenziale per un modello PMB vale:

$$w = \frac{1}{2}Cs^2|\boldsymbol{\xi}| \qquad \qquad W = \int_{\mathcal{H}} w dV_{\boldsymbol{\xi}}$$
(4.6)

confrontando l'energia di deformazione con la teoria classica si ottiene il valore del micromodulus C nel modello PMB per il problema tridimensionale.

$$C = \frac{18K}{\pi\delta^4} \qquad w = \frac{1}{2} \frac{18K}{\pi\delta^4} s^2 |\boldsymbol{\xi}| \qquad f = \frac{18K}{\pi\delta^4} s \tag{4.7}$$

Come già anticipato, i modelli bond-based hanno numerose limitazioni, per questo motivo non saranno usati nelle analisi svolte in questa tesi.

4.2 Legame elastico ordinario state-based (LPS)

Questo modello ordinario, state-based e isotropo è stato introdotto da Silling [62]. Viene anche chiamato modello LPS (linear peridynamic solid).

Si definiscono di seguito delle quantià usate in questo legame. Usando l'extension state è possibile ottenere una quantità che indica la deformazione volumetrica a piccole deformazioni chiamata dilatation Θ .

$$\Theta = \frac{3}{m_w}(\underline{\omega}\underline{e}) \bullet \underline{x} \qquad \qquad m_w = (\underline{\omega}\underline{x}) \bullet \underline{x} \qquad (4.8)$$

dove m_w è detto weighted volume, il numero 3 al numeratore dipende dalla dimensionalità del problema, nel caso monodimensionale il 3 viene sostituito con 1.

Avendo determinato la dilatation, è possibile calcolare gli stati della parte isotropa e deviatorica dell'extension state, che vengono chiamati *isotropic extension* state \underline{e}_i e deviatoric extension state \underline{e}_d .

$$\underline{e}_i = \frac{1}{3} \Theta \underline{x} \qquad \underline{e}_d = \underline{e} - \underline{e}_i \tag{4.9}$$

L'ipotesi alla base di questo legame costitutivo è la divisione dell'energia di deformazione in due funzioni quadratiche che rappresentano l'energia di deformazione dovuta a deformazioni isotrope e quella dovuta a deformazioni deviatoriche, in analogia con il modello classico:

$$W = \frac{1}{2}K\Theta^2 + \frac{1}{2}\alpha(\underline{\omega}\underline{e}_d) \bullet \underline{e}_d = W_i + W_d \tag{4.10}$$

dove K è il bulk modulus, mentre α è un altra costante del materiale collegata al modulo a taglio.

Come mostrato nell'equazione 2.47 derivando l'energia di deformazione per lo stato \underline{e} si ottiene lo scalar force state; nel caso di questo legame costitutivo si può dimostrare che lo scalar force state vale:

$$\underline{t} = \underline{\omega} \frac{3K\Theta}{m_w} \underline{x} + \alpha \underline{\omega} \underline{e}_d = \underline{t}_i + \underline{t}_d \tag{4.11}$$

dove $\underline{t}_i \in \underline{t}_d$ sono la parte isotropa e deviatorica dello scalar force state.

Si può dimostrare che le due parti del scalar force state si possono ottenere

derivando le specifiche energie di deformazione:

$$\underline{t}_{i} = \frac{\partial W_{i}}{\underline{e}_{i}} = \frac{3\underline{\omega}\underline{x}}{m_{w}}\frac{\partial W_{i}}{\theta} = \underline{\omega}\frac{3K\Theta}{m_{w}}\underline{x} \qquad \qquad \underline{t}_{d} = \frac{\partial W_{d}}{\underline{e}_{d}} = \alpha\underline{\omega}\underline{e}_{d}$$
(4.12)

Il valore della costante α viene determinato confrontando l'energia specifica di deformazione deviatorica nella teoria classica e in quella peridinamica. Si è trovato che vale:

$$\alpha = \frac{15G}{m_w} \tag{4.13}$$

Anche Madenci ed Oterkus [40] hanno sviluppato un modello ordinario con gli stessi punti di partenza di Silling, arrivando ad un risultato molto simile in cui non appare più la funzione di influenza in quanto sostituita da una funzione triangolare. Essendo un approccio molto simile e meno generale di quello presentato, non sono riportati qui i passaggi.

4.3 Modelli ordinari correttivi

Come anticipato, il modello ordinario non converge alla soluzione attesa anche nei problemi più semplici. Mitchell in [45] ha individuato le seguenti cause a questo problema:

- Effetti di superficie;
- Definizione di dilatazione poco chiara vicino alla superficie;
- Errori di discretizzazione.

Sono state proposte diverse soluzioni, presentiamo di seguito due delle soluzioni presentate da Mitchell.

4.3.1 Fattore di correzione a taglio (SCF)

Nel calcolo della costante α l'energia specifica di deformazione deviatorica è stata calcolata rispetto a un dominio \mathcal{H} sferico. É evidente che per un nodo vicino alla superficie il valore teorico di α deve essere diverso da quello di un nodo il cui orizzonte sta tutto dentro al corpo, altrimenti l'energia specifica di deformazione deviatorica $W_d = \frac{1}{2}\alpha(\underline{\omega}e_d) \bullet \underline{e}_d$ nei nodi vicino alla superficie verrebbe sottostimata.

Diventa necessario introdurre un fattore di correzione a taglio dipendente dalla posizione di riferimento chiamato Shear Correction Factor (SCF). L'SCF viene

moltiplicato al valore di α del modello LPS per ottenere un nuovo valore che usato al posto di α in analisi con sollecitazioni a taglio è in grado di calcolare correttamente l'energia specifica di deformazione deviatorica.

Per calcolare questo valore si confronta l'energia deviatorica specifica di deformazione della teoria classica con quello della teoria peridinamica, ma questa volta il dot product peridinamico verrà fatto su un integrale che dipende dalla posizione del nodo di riferimento. Il dominio su cui viene fatto l'integrale non sarà necessariamente sferico, infatti nel caso di nodi vicino alla superficie sarà circa una sfera troncata.

Da questo calcolo si ottiene un nuovo α diverso dal valore ottenuto per il modello LPS, che è funzione del nodo di riferimento rispetto a cui è stata calcolata l'energia specifica di deformazione. SCF è quindi il rapporto tra α ottenuto e quello del modello LPS.

$$\alpha(\mathbf{x}) = SCF(\mathbf{x}) \cdot \alpha_{LPS} \tag{4.14}$$

4.3.2 Position Aware Linear Solid (PALS)

Il modello PALS è stato introdotto da Mitchell in [42]. Questo modello è una rivisitazione del modello LPS ed introduce due diverse funzioni di influenza calibrate al fine di vincolare la deformazione nel modello.

Questi vincoli, ed i moltiplicatori di Lagrange associati, costringono la dilatation e il deviatoric extension state a riprodurre delle deformazioni predeterminate chiamate *matching deformations*.

Nel modello PALS l'energia specifica di deformazione è definita come:

$$W(\Theta, \underline{e}_d) = \frac{K\Theta^2}{2} + G(\underline{\sigma}\underline{e}_d) \bullet \underline{e}_d \tag{4.15}$$

dove $\underline{\sigma}$ è la funzione di influenza deviatorica e la dilatazione Θ è definita come $\Theta = (\underline{\omega}x) \bullet \underline{e}$, con ω che è la funzione di influenza isotropa.

Ad ogni punto **x** sono associate diversi valori delle funzioni di influenza $\underline{\omega} \in \underline{\sigma}$.

Sia $\underline{\omega}$ che $\underline{\sigma}$ fanno riferimento a funzioni di influenza base $\underline{\omega}_0$ e $\underline{\sigma}_0$ che possono essere costanti, gaussiane o avere altre forme. Inoltre entrambe richiedono di essere normalizzate per un valore costante, in modo da rendere non necessario l'uso del weighted volume m_w .

Dato un insieme di gradienti di deformazioni chiamate *matching deformations*, le due funzioni di influenza sono la miglior approssimazione delle funzioni di influenza

base che assicurino che la dilatazione e il comportamento deviatorico del modello peridinamico siano riprodotti esattamente.

Trovare $\underline{\omega} \in \underline{\sigma}$ si traduce nella minimizzazione di un funzionale, vincolato con k moltiplicatori di Lagrange associati alle matching deformations, e si riduce alla fine alla soluzione di un sistema lineare $k \times k$.

Si riporta ad esempio il funzionale usato per trovare i moltiplicatori di Lagrange delle funzioni $\underline{\omega}$:

$$I(\underline{\omega},\lambda_1,...,\lambda_k) = \frac{1}{2}(\underline{\omega}-\underline{\omega}_0) \bullet (\underline{\omega}-\underline{\omega}_0) - \sum_{j=1}^k \lambda_j (\underline{\omega}\underline{x} \bullet \underline{e}_j - tr(\mathbf{H}_j))$$
(4.16)

dove \underline{e}_i è un *extension state* definito come

$$\underline{e}_k \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{H}_j \boldsymbol{\xi}}{|\boldsymbol{\xi}|} \tag{4.17}$$

Imporre che il funzionale I sia stazionario è richiedere $\delta I = 0$ e quindi:

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda_j} = 0 \to (\underline{\omega}\underline{x}) \bullet \underline{e}_j = tr(\mathbf{H}_j)$$
(4.18)

Ciò equivale a imporre che $\underline{\omega}$ riproduca esattamente la dilatazione data dalle matching deformations.

Importe $\delta I = 0$ equivale anche ad importe

$$\underline{\omega} = \underline{\omega}_0 + \sum_{j=1}^k \lambda_j \underline{x} \underline{e}_j \tag{4.19}$$

Le k equazioni 4.18 si possono quindi scrivere come:

$$tr(\mathbf{H}_j) = (\underline{\omega}_0 \underline{x}) \bullet \underline{e}_j + \sum_{n=1}^k \lambda_n(\underline{x}\underline{e}_n) \bullet (\underline{x}\underline{e}_j)$$
(4.20)

da cui è possibile assemblare un sistema lineare per trovare i moltiplicatori di Lagrange λ_n . Una volta ottenuti i λ_n è possibile ottenere $\underline{\omega}$ dall'equazione 4.19.

Per trovare $\underline{\sigma}$ invece viene minimizzato un funzionale che vincola $\underline{\sigma}$, con dei nuovi moltiplicatori di Lagrange τ_j , a riprodurre esattamente l'energia di deformazione deviatorica che verrebbe causata dalle matching deformations. Una volta trovati i τ_j viene trovato $\underline{\sigma}$ in modo analogo a quanto fatto con $\underline{\omega}$.

Il calcolo dei moltiplicatori di Lagrange per ogni punto può essere oneroso se

ripetuto ad ogni passo di integrazione, per questo motivo il calcolo dei moltiplicatori di Lagrange viene fatto solo all'inizio dell'analisi, di modo che vengano salvati ed usati durante l'analisi.

Certe volte però non è possibile usare gli stessi moltiplicatori di Lagrange, infatti nel momento in cui il solido si danneggia i moltiplicatori di Lagrange devono essere ricalcolati.

Attraverso la derivazione dell'energia specifica W rispetto all'*extension state* si ottiene lo scalar force state del modello PALS:

$$\underline{t} = \left(K\theta - \frac{2G}{3}(\underline{\sigma}\underline{x}) \bullet \underline{e}_d\right)\underline{\omega}\underline{x} + 2G\underline{\sigma}\underline{e}_d \tag{4.21}$$

4.4 Legame elastico isotropo di tipo correspondence

Come visto nella sezione 2.4.5 i modelli correspondence sfruttano modelli della teoria classica per ottenere quelli peridinamici. L'integrazione del tensore degli sforzi nel tempo viene fatta usando l'algoritmo di Flanagan-Taylor.

Il modello elastico, esistente in Peridigm, calcola la derivata nel tempo del tensore di Cauchy non ruotato con la relazione costitutiva:

$$\dot{\hat{\sigma}} = K d_i \mathbf{I} + 2G \mathbf{d_d} \tag{4.22}$$

in cui K è il *bulk modulus*, G è il modulo di taglio e $d_i = 1/3tr(\mathbf{d})$ e $\mathbf{d}_{\mathbf{d}} = \mathbf{d} - d_i \mathbf{I}$ sono rispettivamente la parte idrostatica e deviatorica di \mathbf{d} .

In un integrazione esplicita si calcola il tensore degli sforzi di Cauchy non ruotato al nuovo passo:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n+1)} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n)} + \dot{\boldsymbol{\sigma}} \Delta t \tag{4.23}$$

Ruotandolo si ottiene il tensore di Cauchy, e da questo si ottiene il primo tensore di Piola-Kirchhoff con cui ottenere la force density utilizzando l'equazione 2.54.

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{R}^T \quad \rightarrow \quad \mathbf{P} = det(\mathbf{F})\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T}$$
(4.24)

4.4.1 Soppressione dei modi di hourglass con il metodo di Littlewood

Come mostrato nella sezione 2.4.5, i modelli correspondence soffrono della presenza di modi di hourglass che possono condizionare la riuscita delle analisi. Sono state provate diverse soluzioni a questo problema (si elencano le più rilevanti in sezione

2.4.5), ma si è deciso di adottare l'approccio di Littlewood [35], in quanto già implementato nella versione di Peridigm usata.

La force density del modello correspondence con soppressione dei modi di hourglass è la somma della force density del modello correspondence standard e la force density stabilizzante \mathbf{t}_{hq} .

Si definiscono la posizione prevista $\mathbf{y}^{\prime\star}$ e il vettore hourglass Γ_{hq}

$$\mathbf{y}^{\prime\star} = \mathbf{y} + \mathbf{F}(\mathbf{x})\boldsymbol{\xi} \qquad \boldsymbol{\Gamma}_{hg} = \mathbf{y}^{\prime\star} - \mathbf{y}^{\prime}$$

$$(4.25)$$

Il vettore hourglass si annulla nel caso in cui la posizione del punto \mathbf{x}' è esattamente dove dovrebbe essere secondo il tensore gradiente di deformazione. Ciò dovrebbe essere sempre vero nel caso di campo di deformazioni costante nell'intorno del punto \mathbf{x} .

La force density stabilizzante è un contributo proporzionale al vettore hourglass di un bond. La sua struttura deriva dalla struttura della pairwise force density del modello PMB. Si riporta di seguito anche la pairwise force density del modello PMB per un confronto più diretto con \mathbf{t}_{hg} .

$$\mathbf{f}_{PMB}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C \frac{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}| - |\boldsymbol{\xi}|}{|\boldsymbol{\xi}|} \frac{\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}|}$$
(4.26)

$$\mathbf{t}_{hg}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C_{hg} C \frac{\Gamma_{hg} \cdot (\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta})}{|\boldsymbol{\xi}|} \frac{\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}|}$$
(4.27)

 C_{hg} è il coefficiente di hourglass, il suo valore indica l'intensità dell'azione stabilizzante e può essere scelto arbitrariamente (un valore di 0.02 mostra buoni risultati). C è il micromodulo del modello PMB, il cui valore è espresso in equazione 4.7.

4.5 Test monodimensionale della convergenza delle frequenze proprie di un'asta

Il test consiste nell'integrazione numerica delle vibrazioni assiali di un'asta con deformazione assiale iniziale imposta, mediante un codice sviluppato in Python.

Le integrazioni numeriche, sia esplicite che implicite, sono state effettuate sia con un modello peridinamico *particle-based* monodimensionale che con un metodo agli spostamenti. I risultati sono quindi stati confrontati tra loro sia nel tempo che nelle frequenze, confrontandoli anche con le frequenze teoriche del comportamento assiale di un'asta.

4.5 Test monodimensionale della convergenza delle frequenze proprie di un'asta

Il modello peridinamico usato è il modello LPS, che per il problema monodimensionale assiale presenta una force density molto più semplice, trascurando il termine deviatorico:

$$\underline{t} = \underline{\omega} \frac{E\Theta}{m_w} \underline{x} \tag{4.28}$$

in cui E è il modulo di Young.

La semplicità di un approccio monodimensionale sta anche nel fatto che l'estensione coincide con lo spostamento u, e quindi si può scrivere la dilatazione Θ come combinazione lineare degli spostamenti.

$$e = |Y| - |X| = Y - X = u \tag{4.29}$$

$$\Theta_i = \sum_{k|abs(\xi) \le \delta} \left(\frac{1}{m_{w_i}} \omega(\xi_k) \xi_k u_k\right) \tag{4.30}$$

dove i pedici indicano l'identificativo del nodo, e $\xi_k = x_k - x_i$. Di conseguenza anche la force density è esprimibile come combinazione lineare degli spostamenti.

Questa linearità intrinseca rende semplice costruire una matrice di rigidezza che leghi un vettore delle forze agenti sui nodi con un vettore degli spostamenti.

$$\{t\} = [\mathbf{K}]\{u\} \tag{4.31}$$

Dato che le forze di volume agenti sui nodi sono nulle, le equazioni peridinamiche da risolvere diventano:

$$[diag(\rho A)]\{\ddot{u}\} + [\mathbf{K}]\{u\} = \{0\}$$
(4.32)

$$\{\ddot{u}\} + [\hat{\mathbf{K}}]\{u\} = \{0\}$$
 $[\hat{\mathbf{K}}] = \frac{1}{\rho A}[\mathbf{K}]$ (4.33)

Si possono usare gli stessi metodi di integrazione usati nell'integrazione del modello della teoria classica.

L'integrazione esplicita viene fatta con un semplice approccio alle differenza finite:

$$\frac{1}{\Delta T^2} (\{u^{(n+1)}\} - 2\{u^{(n)}\} + \{u^{(n-1)}\}) + [\hat{\mathbf{K}}]\{u^{(n)}\} = \{0\}$$
(4.34)

$$\{u^{(n+1)}\} = (\Delta T^2[\hat{\mathbf{K}}] + 2\mathbf{I})\{u^{(n)}\} - \{u^{(n-1)}\}$$
(4.35)

Il passo di integrazione esplicito è stato calcolato con l'approccio CFL descritto in sezione 3.2.2.

L'integrazione implicita viene fatta con un metodo di Newmark (vedi sezione

numero nodi	errore integrale percentuale
10	59.2%
50	14.2%
100	7.6%
200	3.8%
500	1.5%
1000	0.7%

 Tabella 4.1: Errore integrale tra il movimento di estremità delle analisi esplicite classiche e peridinamiche dell'asta

3.3.1), in cui si sostituiscono le derivate seconde nel tempo con l'equazione 4.33 e si impone $\beta = 1/4$ e $\gamma = 1/2$. La fattorizzazione delle matrici è fatta con la decomposizione PLU. Le matrici ottenute dalla decomposizione sono salvate e riutilizzate ad ogni passo, essendo il problema lineare.

Le condizioni al contorno di incastro vengono imposte azzerando le righe associate all'equazione di equilibrio del nodo da vincolare, e ponendo un 1 in corrispondenza della diagonale. Ciò equivale ad aggiungere un equazione di vincolo che impone $u_k = 0$. Nel caso nell'analisi peridinamica questo viene fatto per le prime 3 righe (essendo il rapporto m = 3), dato che la peridinamica richiede un vincolo esteso almeno tanto quanto è esteso l'orizzonte.

L'asta analizzata è lunga l = 1 m, ha sezione $A = 0.01 \text{ m}^2$, modulo di Young E = 200 GPa e densità massica $\rho = 7800 \text{ kg/m}^3$.

Si integra il problema per discretizzazioni sempre più fitte fino a convergenza dell'errore integrale tra il movimento dell'estremità dell'asta nella teoria classica e quello della teoria peridinamica. Questa procedura per l'analisi peridinamica è in pratica uno studio di δ -convergence, m viene tenuto costante uguale a 3, Δx viene gradualmente ridotto e così δ .

Si nota dalla tabella 4.1 che con questo legame costitutivo peridinamico sono necessari un gran numero di nodi per convergere al risultato previsto dalla teoria classica, aumentando di molto i tempi di calcolo.

Le figure 4.1 mostrano l'andamento nel tempo dello spostamento di estremità e l'analisi in frequenza di questo andamento per discretizzazioni con 10, 50, 100 e 1000 elementi. Le frequenze teoriche nelle immagini delle analisi in frequenza sono state calcolate con la formula:

$$f_n = \frac{2n-1}{4}\sqrt{\frac{E}{\rho l^2}}$$
 $f_1 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{E}{\rho l^2}} = 1265.92 \text{Hz}$ (4.36)

Per avere una discretizzazione di frequenze più fitta, le analisi sono state fatte su un tempo 16 volte più lungo del singolo periodo $T_1 = 1/f_1 = 7.899e - 4$ s della frequenza teorica più bassa. Per far sì che i contenuti in frequenza a frequenza più alte siano visibili, sono stati amplificati.

Si nota nella figura 4.1 che la soluzione peridinamica esplicita mostra delle vibrazioni inaspettate ad alta frequenza con frequenza sempre più alta ed ampiezza sempre più bassa al crescere del grado di discretizzazione. Nella soluzione peridinamica implicita queste vibrazioni sono invece più smorzate, grazie al fatto che gli schemi di integrazione implicita smorzano automaticamente le frequenze più alte.

4.6 Test della rigidezza di un'asta con Peridigm

Si mostrano i risultati di analisi fatte su un provino tridimensionale in Peridigm con diversi legami costitutivi elastici e diversi numeri di elementi.

Il provino analizzato è un'asta lunga $l_2 = 10 \text{ mm}$, con sezione rettangolare $l_1 \times l_3$ con $l_1 = 2 \text{ mm}$ e $l_3 = 1 \text{ mm}$. I valori delle caratteristiche elastiche sono modulo di Young E = 100e9 Pa e rapporto di Poisson $\nu = 0.33$.

Il provino è discretizzato in tanti cubetti il cui lato Δx è un sottomultiplo di l_3 . In tutte le analisi il raggio dell'orizzonte è posto pari a $\delta = 3.05\Delta x$

L'asta è vincolata in entrambi gli estremi, ad uno degli estremi è imposto uno spostamento pari all'1% di l_2 nella direzione della lunghezza dell'asta per generare una deformazione assiale.

I vincoli sono stati applicati in una zona estesa 2 volte l'orizzonte δ .

Nella figura 4.2 viene mostrato un provino con 5 elementi in spessore, con un immagine ottenuta con Paraview.

Vengono effettuate sia analisi quasi-statiche, in modo da trovare il risultato all'equilibrio nella configurazione deformata, sia analisi esplicite in cui lo spostamento è imposto gradualmente nel tempo.

Come risultato si chiede all'analisi di restituire la reazione vincolare F_{reaz} in direzione assiale, e gli spostamenti assiali di due punti vicini al centro della sezione posti in posizione assiale pari a $0.5l_2 + \delta \in 0.5l_2 - \delta$.

Il modulo di Young è calcolato come rapporto tra lo sforzo assiale ingegneristico σ_{eng} e la deformazione assiale ingegneristica ε_{eng} calcolata rispetto alla differenza di spostamento dei due punti presi in considerazione.

$$\sigma_{eng} = F_{reaz}/(l_1 \cdot l_3)$$
 , $\varepsilon_{eng} = \Delta u/2\delta$, $E = \sigma_{eng}/\varepsilon_{eng}$ (4.37)



(a) Spostamento dell'estremità nelle analisi a 10 nodi



(c) Spostamento dell'estremità nelle analisi a 50 nodi



(b) Analisi in frequenza delle analisi a $10~{\rm nodi}$



(d) Analisi in frequenza delle analisi a 50 nodi

Clas_espl

PD espl analytical

Clas_esp

PD espl analytical



0.010

0.005

-0.005

-0.010

analisi a 1000 nodi

n, m 0.000

9621 14432 19242 24053 f, Hz (e) Spostamento dell'estremità nelle (f) Analisi in frequenza delle analisi a analisi a 100 nodi 100 nodi

10

8

J∗|(J)d| 6

2

0

0

4811



9621 14432 19242 24053 f, Hz 4811 (h) Analisi in frequenza delle analisi a 1000 nodi

Figura 4.1: Plot degli spostamenti su un periodo e dell'analisi in frequenza de-74gli spostamenti dell'estremità dell'asta per analisi peridinamiche e classiche



Figura 4.2: Provino $10 \text{ mm x } 2 \text{ mm x } 1 \text{ mm con } \Delta x = 0.2 \text{ mm}$

I test sono stati fatti sui seguenti legami costitutivi:

- Correspondence elastico
- Elastico lineare ordinario state-based (LPS)
- LPS con Shear Correction Factor (SCF)
- PALS

Le analisi con modello correspondence sono state effettuate con un coefficiente di hourglass pari a 0.02.

Per ognuno di questi modelli sono state fatte diverse analisi in cui Δx è stato ottenuto dalla divisione di l_3 in 1, 2, 4, 5, 8, 10 elementi.

Nella figura 4.3 vengono mostrati i risultati delle misurazioni del modulo di Young per analisi quasistatiche.

Si può vedere che i legami costitutivi Correspondence e PALS riescono a calcolare con un errore basso il modulo di Young. Come mostrato anche da Mitchell in [45] modelli LPS e LPS con SCF hanno un comportamento che richiede un alto numero di elementi per convergere, e per giunta convergono a valori di E inferiori a quelli attesi.

Altre analisi sul modello correspondence sono state fatte da Breitenfeld in [9], dove ha mostrato che questo modello è in grado di riprodurre a convergenza la soluzione analitica della flessione di una trave, anche se la convergenza è molto lenta.



Figura 4.3: Modulo di Young misurato al variare del numero di elementi con diversi legami costitutivi



Figura 4.4: Durata delle analisi esplicite di un provino in trazione usando il modello elastico correspondence per diverse spaziature tra i nodi.

4.6.1 Confronto tra le durate delle analisi usando modelli diversi

In questa sezione viene presentata un'analisi sui tempi necessari ai vari modelli elastici per completare le stesse analisi esplicite descritte nella sezione precedente.

In figura 4.4 si riporta la durata della analisi fatte con il modello correspondence per diverse dimensioni della spaziatura Δx e pari rapporto m. Su questi punti viene applicata una regressione polinomiale di terzo grado sull'inverso dei valori, ottenendo la curva tratteggiata. Guardando per esempio la durata ottenuta con la spaziatura $\Delta x = 0.5$ e la spaziatura $\Delta x = 0.25$ si può stimare che dimezzando la spaziatura (e quindi aumentando di 8 volte il numero dei nodi), la durata di un'analisi esplicita aumenta di circa 15 volte (grazie al fatto che anche il passo di integrazione critico diminuisce).

In figura 4.5 viene riportato il rapporto delle durate delle analisi esplicite del provino usando diversi modelli con la durata di riferimento della durata di analisi con il modello PMB. Si può vedere che all'aumentare del numero dei nodi i rapporti crescono, grazie al fatto che aumentano i bonds e che il tempo di preparazione dell'analisi diventa meno rilevante rispetto al tempo proprio dell'analisi.

Come previsto, il modello PMB è il modello la cui integrazione è più veloce. Approssimativamente si può dire che il modello LPS ci mette 2 volte il tempo del



Figura 4.5: Rapporto tra le durate delle analisi esplicite di un provino in trazione usando diversi modelli elastici in riferimento alle durate ottenute da analisi con modello PMB.

PMB, mentre il modello correspondence ci mette solo 3 volte più tempo nonostante il gran numero di operazioni necessarie a stimare il gradiente di deformazione. Sembra che il modello correspondence quindi abbia un costo computazionale di solo il 50% maggiore rispetto al modello LPS. Il modello PALS ci mette addirittura anche oltre 8 volte di più, nonostante nell'implementazione in Peridigm non venga ripetuto il processo di ottimizzazione delle funzioni di influenza caratteristico del modello PALS.

4.7 Considerazioni sulla stabilità nel modello PALS

Il modello PALS fornito in Peridigm corregge in modo molto efficace il modello ordinario state-based, ma purtroppo sono stati riscontrati problemi inaspettati di stabilità del modello. In questa sezione verrà mostrato che nell'integrazione esplicita del modello PALS può capitare che si verifichino instabilità non previste che provocano una divergenza numerica fino all'*overflow*.

Viene mostrato in qualche caso che queste instabilità possono essere risolte diminuendo notevolmente il time-step dell'analisi, posto normalmente uguale a metà

4.7	Consid	lerazioni	sulla	stabilità	nel	modello	PALS
-----	--------	-----------	-------	-----------	-----	---------	------

SF	Δx , mm	PALS MMGS	LPS MMGS	Δx , cm	PALS CGS	LPS CGS
0.5	1.0	overflow	137.4	0.1	99.66	136.8
0.4	1.0	overflow	137.45	0.1	99.54	136.75
0.3	1.0	overflow	137.40	0.1	99.52	136.30
0.2	1.0	-666.12	137.55	0.1	99.43	136.29
0.1	1.0	84.03	137.38	0.1	99.33	136.29
0.5	0.75	94.09	115.54	0.075	100.79	115.59
0.4	0.75	94.51	115.58	0.075	100.50	115.46
0.3	0.75	94.46	115.73	0.075	100.44	115.46
0.2	0.75	94.39	115.78	0.075	100.46	115.91
0.1	1.5	overflow	200.12	0.15	99.42	200.31
0.02	1.5	overflow	200.31	0.15	99.27	200.35
0.005	1.5	1.6e5	200.31	0.15	99.28	200.33
0.001	1.5	2.6e5	200.31	0.15	99.28	200.33

Tabella 4.2: Moduli di Young ottenuti con integrazione esplicite su modello PALS e LPS, al variare di SF e Δx . Risultati in GPa

del valore critico identificato con la formula 3.14. In altri casi non si riesce ad effettuare l'analisi neanche a time-step molto inferiori rispetto al valore critico.

Il provino è lo stesso di prima, sono solo state aumentate le dimensioni: $l_1 = 6 \text{ mm}, l_2 = 30 \text{ mm}, l_3 = 6 \text{ mm}.$

L'analisi è di tipo esplicito, e viene imposta una deformazione che cresce linearmente fino a raggiungere l'1% al tempo finale dell'analisi che vale 0.0005 s.

Il provino è stato analizzato con diversi Δx di discretizzazione, e con diversi time steps. Il time step viene cambiato agendo sul *Safety Factor SF*, ovvero il rapporto tra il time-step utilizzato ed il time step critico per l'integrazione esplicita calcolato nella formula 3.14.

Analogamente alla sezione precedente viene calcolato il modulo di Young del materiale.

Le analisi sono ripetute sia con un sistema di misura basato su millimetri, grammi e secondi (che è indicato come MMGS) che su un sistema CGS. Sono inoltre ripetute sia sul modello peridinamico PALS che su quello LPS.

Nella tabella 4.2 vengono mostrati i risultati di queste analisi.

Vengono poi fatte analisi su un altro provino le cui dimensioni sono 10 volte maggiori di quelle precedenti, questa volta le analisi vengono fatte solo basandosi sul sistema di misura CGS.

Nella tabella 4.3 vengono mostrati i risultati di queste analisi.

SF	Δx , cm	PALS CGS	LPS CGS
0.5	1.5	overflow	102.76
0.2	1.5	-55.58	103.72
0.1	1.5	61.9	103.45
0.5	1.0	overflow	102.76
0.2	1.0	-55.58	103.72
0.1	1.0	61.9	103.45
0.5	0.5	86.13	97.09
0.2	0.5	85.84	96.79
0.1	0.5	85.67	96.78

Tabella 4.3: Moduli di Young ottenuti con integrazione esplicite su modello PALS e LPS, al variare di SF e Δx . Risultati in GPa

Dai risultati in tabella 4.2 si evince come il modello LPS dia circa gli stessi risultati in entrambi i sistemi di misura, mentre il modello PALS fallisce le analisi in modo imprevisto col sistema MMGS quando la discretizzazione è più ampia.

La tabella 4.3 mostra che cambiando modello ed aumentando la discretizzazione nel sistema CGS si creano gli stessi problemi visti nella tabella precedente. Sembra che questi fenomeni di instabilità numerica avvengano quando Δx si avvicina ad 1.0.

La causa di questo problema è sconosciuta, si suppone che l'ottimizzazione fatta dal modello PALS sulle funzioni di influenza renda meno robusto il modello e lo renda più sensibile a fenomeni di instabilità. Un'altra possibile causa è la presenza di errori, non trovati dal sottoscritto, nella parte di codice dedicata al modello PALS, anche se l'autore ha riferito in una corrispondenza via mail che il codice è corretto.

La preoccupante discrepanza di risultati tra i sistemi di riferimento può essere dovuta al fatto che la funzione di influenza $\underline{\sigma}$ usata nel modello PALS ha unità di misura.

A causa di questo grande problema il modello PALS verrà usato solo come confronto nello sviluppo del modello, si eviterà invece di usarlo per le analisi di frammentazione, in quanto molto suscettibile a comportamenti instabili.

Per completare le analisi nei test di sezione 4.6 è stato necessario diminuire il safety factor a 0.2.

4.8 Test grandi deformazioni con Peridigm



Figura 4.6: Curva $\sigma - \varepsilon$ ingegneristica per deformazioni elevate

4.8 Test grandi deformazioni con Peridigm

Si mostrano i risultati di un test fatto sullo stesso provino della sezione precedente con $\Delta x = 0.2$, in cui però sono stati calcolati sforzi e deformazioni ingegneristici per 50 spostamenti imposti al vincolo equispaziati da 0 a l_2 .

Si vuole mostrare che grazie all'algoritmo di Flanagan-Taylor il provino con modello correspondence è in grado di riprodurre meglio il comportamento ad elevate deformazioni in virtù del fatto che il modello LPS è un modello lineare applicato ad una formulazione Lagrangiana.

In figura 4.6 viene mostrato l'andamento dello sforzo assiale ingegneristico in funzione della deformazione assiale ingegneristica per modelli di legame costitutivo LPS, PALS e correspondence. Si nota che per i legami ordinari LPS e PALS, che sono strettamente lineari, la rigidezza non diminuisce ad alte deformazioni ingegneristiche, mentre per il legame costitutivo correspondence al rigidezza diminuisce a causa della strizione causata dal rapporto di Poisson, come ci si aspettava.

In figura 4.7 viene mostrato l'andamento dello sforzo di Von Mises in funzione della deformazione equivalente per modelli di legame costitutivo LPS, PALS e correspondence.



Figura 4.7: Curva $\sigma - \varepsilon$ reale per deformazioni elevate

4.9 Integrazione del legame elastico isotropo nei modelli correspondence con proprietà dipendenti dalla temperatura

L'integrazione degli sforzi nel legame correspondence (con l'algoritmo di Flanagan-Taylor, vedi 2.4.5) è fatta partendo con un approccio alle differenze finite al fine di ottenere lo sforzo di Cauchy non ruotato al nuovo istante partendo da quello dell'istante precedente, come mostrato in equazione 2.56.

Come visto nella sezione 3.8, nel lavoro di questa tesi è stata implementata la possibilità di assegnare proprietà caratteristiche dei materiali dipendenti dalla temperatura in Peridigm.

Al variare della temperatura, le proprietà elastiche del corpo variano.

$$\mathbb{D} = \mathbb{D}(\theta) \tag{4.38}$$

Per il legame elastico isotropo le proprietà che variano sono il modulo di bulk $K = K(\theta)$ e il modulo a taglio $G = G(\theta)$. A deformazione fissata, la variazione di temperatura provoca una variazione degli sforzi all'interno del corpo.

Per questo motivo in questa tesi viene applicata una parziale modifica all'inte-
4.9 Integrazione del legame elastico isotropo nei modelli correspondence con proprietà dipendenti dalla temperatura

grazione degli sforzi:

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}(\tilde{t}) = \frac{d}{dt}(\mathbb{D}:\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\tilde{t})) \tag{4.39}$$

dove $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\tilde{t})$ è l'integrale del tensore $\tilde{\mathbf{d}}$ (ovvero la parte simmetrica del tensore gradiente di velocità ruotata con il tensore di rotazione $\tilde{\mathbf{R}}$ al tempo \tilde{t}) nel tempo:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \int_0^{\tilde{t}} \tilde{\mathbf{d}} dt \tag{4.40}$$

Si tenga presente che $\tilde{\mathbf{d}}(\tilde{t}) = \mathbf{d}(\tilde{t})$, ma $\tilde{\mathbf{d}}(t \neq \tilde{t}) \neq \mathbf{d}(t \neq \tilde{t})$. Applicando un approccio alle differenze finite all equazione 4.39

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n+1)} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n)} + \mathbb{D}^{(n)} : (\mathbf{d}\Delta t) + \Delta \mathbb{D} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(n)} + \Delta \mathbb{D} : (\mathbf{d}\Delta t)$$
(4.41)

dove $\mathbb{D}^{(n)} = \mathbb{D}(\theta^{(n)}), \mathbb{D}^{(n+1)} = \mathbb{D}(\theta^{(n+1)}) \in \Delta \mathbb{D} = \mathbb{D}^{(n+1)} - \mathbb{D}^{(n)}$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n+1)} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n)} + \mathbb{D}^{(n+1)} : (\mathbf{d}\Delta t) + \Delta \mathbb{D} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(n)}$$
(4.42)

Sfruttando la proprietà dell'isotropia, si ottiene:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n+1)} = \mathbb{D}^{(n+1)} : (\mathbb{D}^{(n)^{-1}} : \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(n)}) + \mathbb{D}^{(n+1)} : (\mathbf{d}\Delta t)$$
(4.43)

Dividendo il tensore degli sforzi nella parte deviatorica e idrostatica:

$$\begin{cases} \hat{s}^{(n+1)} = \frac{G^{(n+1)}}{G^{(n)}} \hat{s}^{(n)} + 2 G^{(n+1)} \mathbf{d}_{dev} \Delta t \\ \hat{\sigma}_{H}^{(n+1)} = \frac{K^{(n+1)}}{K^{(n)}} \hat{\sigma}_{H}^{(n)} + K^{(n+1)} tr(\mathbf{d}) \Delta t \end{cases}$$
(4.44)

Ottenendo equazioni molto simili alle equazioni 2.57.

5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici

In questo capitolo viene mostrato l'approccio peridinamico alla plasticizzazione dei materiali.

Nella prima sezione viene fatto un breve riassunto della teoria della plasticità classica, con riferimento ad Ottosen [49].

Nella seconda sezione vengono mostrati gli approcci peridinamici sviluppati in letteratura, facendo distinzione tra i modelli ordinari e quelli correspondence.

Nella terza sezione si presenta lo sviluppo di un nuovo approccio peridinamico ordinario state-based per incrudimento isotropo che porta a risolvere le stesse equazioni risolutive della teoria della plasticità classica.

Nella quarta sezione si riporta l'applicazione degli approcci studiati e sviluppati per lo sviluppo di modelli peridinamici elasto-viscoplastici basati sul modello di Johnson-Cook.

Nella quinta sezione vengono implementati in Peridigm i modelli sviluppati e testati in un test quasi-statico su un'asta.

5.1 Teoria della plasticità classica

La teoria della plasticità è lo studio del comportamento non-lineare dei materiali che causa deformazioni residue plastiche quando il materiale viene scaricato.

Si può assumere che la maggior parte dei materiali strutturali abbiano un comportamento elastico-lineare per piccole deformazioni, e che mostrino un comportamento plastico non-lineare ad alte sollecitazioni.

Il tensore delle piccole deformazioni ε può essere definito come la somma di un tensore delle deformazioni elastiche ed uno di quelle plastiche.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p \tag{5.1}$$

Comunemente si definisce una funzione f_y del tensore degli sforzi di Cauchy che assume valore minore di 0 quando il materiale si comporta in maniera elasticolineare. Quando invece $f_y = 0$ il materiale si plasticizza generando deformazioni irreversibili. La funzione f_y , detta *yielding function* (funzione di snervamento), non può essere maggiore di 0, questo perchè quando il materiale si plasticizza genera deformazioni plastiche e modifica anche la stessa funzione f_y , in modo che il valore di f_y rimanga 0. La funzione f_y viene modificata tramite la plasticizzazione a causa della variazione di alcuni parametri interni alla funzione di snervamento, chiamati parametri di incrudimento **K** (hardening parameters).

$$f_y(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{K}) \le 0 \tag{5.2}$$

Il vettore dei parametri **K** dipende da un set di variabili interne κ , sia **K** che κ variano solo quando il materiale si comporta plasticamente.

Nello spazio tridimensionale definito dagli sforzi principali di σ la condizione di ammissibilità plastica espressa nell'equazione 5.2 definisce un dominio, chiamato dominio elastico, racchiuso all'interno di una superficie, detta *superficie di snervamento*. Quando il materiale si snerva, cioè quando $f_y = 0$, i parametri di incrudimento della funzione cambiano e la superficie di snervamento si deforma.

La definizione della superficie di snervamento non è sufficiente a capire come si evolvono il tensore delle deformazioni plastiche e le variabili interne, è necessario quindi definire una potenziale g con le stesse dipendenze della funzione di snervamento f_y .

$$g(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{K}) \tag{5.3}$$

Le funzioni che definiscono l'evoluzione di ε_p e κ sono dette rispettivamente legge di flusso (flow rule) e leggi di evoluzione (evolution laws), si può dimostrare con un approccio termodinamico che hanno la seguente forma:

$$\dot{\varepsilon}_p = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \sigma} \qquad \dot{\kappa} = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial K}$$

$$(5.4)$$

dove λ è un moltiplicatore di Lagrange.

La scelta della funzione g dipende dal materiale, in genere per materiali metallici è corretto scegliere $g = f_y$ (plasticità associata), mentre per materiali come rocce o terreni è più corretto scegliere $g \neq f_y$ (plasticità nonassociata).

La legge di flusso nella *plasticità associata* è stata dimostrata da Drucker [15] con un approccio energetico. Partendo dall'ipotesi che il lavoro compiuto in un ciclo di

5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici

carico che parte e arriva alla stessa condizione di stress e che genera deformazioni plastiche è positivo, Drucker dimostra che la superficie di snervamento è convessa e che l'incremento di deformazione plastica deve essere normale alla superficie di snervamento, la cui direzione è definita dalla derivata di f_y rispetto a σ :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda} \frac{\partial f_y}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \tag{5.5}$$

dove λ è un coefficiente di proporzionalità.

L'integrazione della legge di flusso e delle leggi di evoluzione è necessaria nel caso in cui in un passo di integrazione venga calcolato uno sforzo fuori dal dominio elastico. Il sistema da risolvere è un sistema di equazioni differenziali vincolato:

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \\ \dot{\boldsymbol{\kappa}} = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{K}} \\ f_y(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{K}) = 0 \end{cases}$$
(5.6)

Queste equazioni vengono risolte con un metodo di Eulero implicito ad un passo in modo da importe automaticamente il vincolo $f_y = 0$ e trovare λ . Una volta trovato λ , sono state sviluppate varie strategie di ritorno alla nuova superficie di snervamento.

5.1.1 Incrudimento isotropo per il criterio di Von Mises e *Ritorno Radiale*

Con incrudimento isotropo si intende che il comportamento plastico di un materiale modifica la superficie di snervamento solamente amplificandola, senza cambiarne la forma e il punto di origine.

Questa procedura viene riportata perchè viene utile quando si formula in questa tesi un modello ordinario peridinamico di incrudimento isotropo basato sul criterio di Von Mises.

Nel caso di criterio di Von Mises la superficie di snervamento è definita da:

$$f_y = \sigma_{eff} - \sigma_y(\boldsymbol{\kappa}) = 0 \qquad \qquad \sigma_{eff} = \sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}s_{ij}} \qquad (5.7)$$

dove σ_{eff} è lo sforzo efficace di Von Mises, s_{ij} è una componente del tensore deviatorico degli sforzi, e σ_y è la funzione dello sforzo di snervamento.

5.1 Teoria della plasticità classica

Oppure, esplicitando il secondo invariante del tensore degli sforzi J_2 :

$$\sigma_{eff} = \sqrt{3 J_2} \qquad J_2 = \frac{1}{2} s_{ij} s_{ij}$$
(5.8)

Derivando f_y per il tensore degli sforzi si ottiene una legge di flusso per il criterio di Von Mises:

$$\frac{\partial f_y}{\partial \sigma_{ij}} = \frac{3s_{ij}}{2\sigma_{eff}} \quad \to \quad \dot{\varepsilon}_{ij_p} = \frac{3s_{ij}}{2\sigma_{eff}}\dot{\lambda} \tag{5.9}$$

Si assume che la funzione $\sigma_y(\kappa)$ dipenda dalla deformazione plastica efficace ε_p , quest'ultima è quindi una variabile interna. La derivata nel tempo della deformazione plastica efficace si definisce come:

$$\dot{\varepsilon}_p = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\varepsilon}_{p_{ij}} \dot{\varepsilon}_{p_{ij}} \tag{5.10}$$

ed applicando questa definizione alla legge di flusso di equazione 5.9 si ottiene la legge di evoluzione della variabile interna ε_p .

$$\dot{\varepsilon}_p = \dot{\lambda} \tag{5.11}$$

Considerando 2 stati di sforzo cronologicamente consecutivi (1) e (2) si possono definire le componenti di un tensore di sforzo, secondo un legame lineare, come:

$$\sigma_{ij}^{(1)} = \mathbb{D}_{ijkl}(\varepsilon_{kl}^{(1)} - \varepsilon_{p_{kl}}^{(1)}) \tag{5.12}$$

$$\sigma_{ij}^{(2)} = \mathbb{D}_{ijkl}(\varepsilon_{kl}^{(2)} - \varepsilon_{p_{kl}}^{(2)}) \tag{5.13}$$

dove \mathbb{D}_{ijkl} sono le componenti del tensore di rigidezza elastica.

La loro differenza porta a scrivere:

$$\sigma_{ij}^{(2)} - \sigma_{ij}^{(1)} = \Delta \sigma_{ij} = \mathbb{D}_{ijkl} (\Delta \varepsilon_{kl} - \Delta \varepsilon_{p_{kl}})$$
(5.14)

oppure definendo il *trial stress* σ_{ij}^{trial} , cioè lo sforzo tentativo per vedere se l'integrazione dal passo (1) al (2) ha portato a uno sforzo dentro al dominio elastico, ed usando la flow rule in equazione 5.9

$$\sigma_{ij}^{trial} = \sigma_{ij}^{(1)} + \mathbb{D}_{ijkl}\Delta\varepsilon_{kl} \qquad \qquad \sigma_{ij}^{(2)} = \sigma_{ij}^{trial} - \mathbb{D}_{ijkl}\frac{3s_{kl}}{2\sigma_{eff}}\Delta\lambda \qquad (5.15)$$

5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici

Applicando il legame costitutivo isotropo si ottiene:

$$\sigma_{ij}^{(2)} = \sigma_{ij}^{trial} - 3G \frac{s_{ij}}{\sigma_{eff}} \Delta \lambda \tag{5.16}$$

Applicando il metodo di Eulero implicito per risolvere il problema l'equazione risolutiva diventa:

$$\sigma_{ij}^{(2)} = \sigma_{ij}^{trial} - 3G \frac{s_{ij}^{(2)}}{\sigma_{eff}^{(2)}} \Delta \lambda$$
(5.17)

Essendo lo sforzo idrostatico σ_H definito come la parte idrostatica del tensore σ , si può vedere che la parte idrostatica del tensore σ^{trial} si conserva.

$$\sigma_{H}^{(2)} = \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}) = \frac{1}{3} tr\left(\sigma_{ij}^{trial} - 3G \frac{s_{ij}^{(2)}}{\sigma_{eff}^{(2)}} \Delta \lambda\right) = \frac{1}{3} tr(\sigma_{ij}^{trial}) = \sigma_{H}^{trial}$$
(5.18)

Usando l'equazione 5.18, l'equazione 5.17 si può riscrivere come:

$$s_{ij}^{(2)} = \frac{s_{ij}^{trial}}{1 + 3G\frac{\Delta\lambda}{\sigma_{eff}^{(2)}}}$$
(5.19)

L'equazione 5.19 è l'equazione del ritorno radiale che mostra come definire la parte deviatorica del tensore degli sforzi una volta ottenuto l'incremento $\Delta \lambda$.

Usando la definizione dello sforzo efficace sull'equazione 5.19 si ottiene l'equazione da risolvere per ottenere $\Delta \lambda$.

$$\sigma_{eff}^{(2)} = \frac{\sigma_{eff}^{trial}}{1 + 3G\frac{\Delta\lambda}{\sigma_{eff}^{(2)}}}$$
(5.20)

$$f_y(\Delta\lambda) = \sigma_{eff}^{(2)} - \sigma_{eff}^{trial} + 3G\Delta\lambda = 0$$
(5.21)

Si osserva che $\sigma_{eff}^{(2)}$ dipende dalla variabile interna $\varepsilon_p^{(2)} = \varepsilon_p^{(1)} + \Delta \lambda$. Usare un metodo di Newton-Raphson per risolvere l'equazione 5.21 richiede il calcolo della derivata dello sforzo efficace rispetto al moltiplicatore λ .

5.1.2 Generazione di potenza termica nei modelli di incrudimento isotropo

Come mostrato nella sezione 2.7.1, i comportamenti inelastici dei materiali dissipano potenza a un rateo non negativo. Come è noto, nella teoria classica la potenza dissipata per unità di volume nella plasticizzazione di modelli di incrudimento isotropo può essere posta uguale a:

$$p_{diss} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{p_{ij}} = \sigma_{eff} \dot{\varepsilon}_p \tag{5.22}$$

Nonostante si conosca l'espressione della potenza specifica dissipata, l'evidenza sperimentale mostra che non tutta la potenza dissipata si trasforma in potenza termica, come spiegato da Taylor e Quinney nel 1934 [67]. La potenza termica assorbita p_{abs} è inferiore, rispetto a quella che ci si aspetterebbe, di un valore, che solitamente si aggira attorno al 10%, che dipende da diversi fattori tra cui la deformazione plastica e la diffusione di dislocazioni.

L'approccio comune usato, al fine di tener conto di questo fenomeno fisico, è la correzione della potenza termica assorbita con una costante β_{TQ} detta constante di Taylor e Quinney.

$$p_{abs} = \beta_{TQ} p_{diss} \tag{5.23}$$

Generalmente viene dato a β_{TQ} un valore costante [52]. Tuttavia esistono in letteratura altri modelli più complessi che considerano la costante β_{TQ} come una funzione della deformazione plastica efficace. Si cita per esempio il modello di Zehnder [75], in cui β_{TQ} è una funzione del modulo plastico, che a sua volta è una funzione della deformazione plastica.

5.2 Studio degli approcci peridinamici alla elasto-plasticità

Nella letteratura è possibile trovare numerosi approcci alla plasticità nella peridinamica, che differiscono principalmente per il tipo di legame costitutivo peridinamico a cui sono applicati.

Nel caso dei modelli correspondence l'applicazione della plasticità è immediata e uguale all'approccio classico, in quanto i modelli correspondence ricostruiscono le quantità della teoria classica partendo da una base peridinamica.

Si cita per esempio il lavoro di Foster [21] e di Amani [2], in cui il tensore di Cauchy per un materiale elasto-viscoplastico ad incrudimento isotropo viene calcolato usando una procedura basata sulla teoria classica.

Nel caso dei modelli ordinari è stata ridefinita la teoria della plasticità in modo peridinamico, con equazioni con forma simile a quelle classiche.

5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici

Silling in [62] ha posato le basi teoriche generali per la definizione di modelli peridinamici ordinari elasto-plastici caratterizzati da incompressibilità plastica, come succede in molti metalli, e in generale in quei metalli su cui è applicabile il criterio di Von Mises.

Ha definito una superficie di snervamento nello spazio degli scalar force state peridinamici deviatorici \underline{t}_d (che è una superficie ∞ -dimensionale), ed una legge di flusso peridinamica:

$$\underline{\dot{e}}_{dp} = \dot{\lambda} \nabla^d \Psi(\underline{t}_d) \tag{5.24}$$

dove \underline{e}_{dp} è la parte plastica della parte deviatorica dell'extension state, λ è il moltiplicatore di Lagrange, Ψ è una funzione del force state deviatorico (collegata alla funzione di snervamento), e l'operatore ∇^d indica la derivata di Frechet rispetto allo scalar force state deviatorico.

La funzione di snervamento peridinamica nel modello ordinario è definita come:

$$f_y(\underline{t}_d) = \Psi(\underline{t}_d) - \Psi_0 \ge 0 \tag{5.25}$$

dove Ψ_0 è una costante che corrisponde al limite di snervamento.

Il moltiplicatore di Lagrange λ nel caso in cui $f_y = 0$, può essere ottenuto dalla relazione di consistenza alla Kuhn-Tucker, come meglio mostrato da Mitchell. in [44]:

$$\lambda \dot{f}_y(\underline{t}_d) = 0 \tag{5.26}$$

$$\lambda = \frac{\nabla^d \Psi \bullet \underline{\omega} \dot{e}_d}{\nabla^d \Psi \bullet \underline{\omega} \nabla^d \Psi}$$
(5.27)

Si può vedere che l'equazione della legge di flusso peridinamica (5.24) e l'equazione della legge di flusso classica (5.5) hanno forma molto simile. Si fa notare un'analogia con la teoria classica nella divisione dell'extension state deviatorico in una parte elastica ed una plastica:

$$\underline{e} = \underline{e}_i + \underline{e}_d = (\underline{e}_i + \underline{e}_{de}) + \underline{e}_{dp} \qquad \qquad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p \tag{5.28}$$

Partendo da questo approccio, Mitchell in [44] ha sviluppato un approccio per modelli ordinari con plasticità perfetta, ne ha mostrato la consistenza con il secondo principio della termodinamica ed ha linearizzato il modello per facilitare la soluzione del problema con schema implicito. L'approccio di Mitchell usa nella funzione di snervamento il secondo invariante del tensore degli sforzi deviatorico $J_{2(OPD)}$ per modelli peridinamici ordinari definito da Mitchell come il dot product

5.2 Studio degli approcci peridinamici alla elasto-plasticità

peridinamico dello scalar force state deviatorico \underline{t}_d .

$$\Psi = J_{2_{(OPD)}} = \frac{\underline{t}_d \bullet \underline{t}_d}{2} \tag{5.29}$$

Questo approccio toglie generalità alla formulazione peridinamica perchè necessita l'imposizione del tipo di funzione di influenza (rettangolare nel suo caso) al fine di poter calcolare la derivata di Frechet di Ψ e quindi il moltiplicatore di Lagrange λ .

Madenci e Oterkus in [41] hanno sviluppato un legame costitutivo ordinario elastoplastico basato su una funzione di snervamento con incrudimento lineare. Come tutti i lavori di questo gruppo di ricerca, i risultati sono condizionati dalla scelta di una funzione di influenza triangolare, e risultano anch'essi meno generali.

Lammi e Vogler [70] hanno sviluppato un modello di plasticità non associato, per materiali ordinari, per modellare calcestruzzi. Il modello di plasticità che presentano è un modello sensibile alla pressione idrostatica nel materiale, e poggia sulle stessi basi presentate da Silling. La funzione Ψ dipende dalla pressione idrostatica:

$$\Psi = \frac{\underline{t}_d \bullet \underline{t}_d}{2} - \mu p \tag{5.30}$$

dove μ è una costante di frizione interna, e p è la pressione peridinamica, che è l'opposto del prodotto tra il bulk modulus e la dilatazione Θ

$$p = -K\Theta \tag{5.31}$$

A causa della presenza della pressione peridinamica p nell'equazione della legge di flusso è immediato vedere (dall'equazione 5.24) che l'extension state plastico sviluppa anche una componente isotropa, quindi l'extension state plastico non è solo deviatorico.

$$\underline{e} = \underline{e}_e + \underline{e}_p = (\underline{e}_{ie} + \underline{e}_{de}) + (\underline{e}_{ip} + \underline{e}_{dp}) = (\underline{e}_{ie} + \underline{e}_{ip}) + (\underline{e}_{de} + \underline{e}_{dp}) = \underline{e}_i + \underline{e}_p \quad (5.32)$$

Come nel modello di Mitchell, la particolare definizione fatta dell'invariante J_2 rende difficile calcolare la derivata di Frechet di f_y e g. Per questo motivo anche questo approccio toglie generalità alla formulazione peridinamica, perchè necessita l'imposizione del tipo di funzione di influenza.

La scelta di modelli elastoplastici presenti in Peridigm è limitata. Al momento dell'inizio di questa tesi erano presenti solo 3 modelli funzionanti: i modelli correspondence per elasto plasticità perfetta e con incrudimento lineare, e il modello ordinario di Mitchell con plasticità perfetta.

5.3 Sviluppo di un modello di incrudimento isotropo per il criterio di Von Mises e *Radial Return* per modelli peridinamici ordinari

Come mostrato nella sezione precedente, i modelli elastoplastici sviluppati limitano la generalità della peridinamica. Infatti è stato necessario imporre una funzione di influenza al fine di poter integrare la legge di flusso.

In questa sezione si mostra lo sviluppo di un nuovo approccio peridinamico analogo a quello classico mostrato in 5.1.1.

Si dimostra che questo approccio, non solo mantiene la generalità della peridinamica prescindendo dal tipo di funzione di influenza, ma porta anche a definire la stessa equazione risolutiva ottenuta nell'approccio classico. Il motivo di questo è che non viene definito l'invariante $J_{2(OPD)}$ come è stato fatto nel modello ordinario elastoplastico di Mitchell, perchè, come si mostrerà di seguito, è inesatto.

L'approccio usato ottiene lo sforzo efficace di Von Mises σ_{eff} , dall'energia specifica di deformazione deviatorica peridinamica, e dimostra che il secondo invariante $J_{2_{(OPD)}}$ nei modelli peridinamici ordinari deve essere definito in modo diverso da quanto intuitivamente definito da Mitchell che si è ispirato alla definizione del J_2 della teoria classica.

La densità di energia di deformazione deviatorica nei legami ordinari è:

$$W_d = \frac{\alpha}{2} (\underline{\omega} \underline{e}_{de}) \bullet \underline{e}_{de} \tag{5.33}$$

dove con $\underline{e}_{de} = \underline{e}_d - \underline{e}_{dp}$ si intende la parte deviatorica elastica dell'extension state.

Viene definita la stessa *funzione di snervamento* usata nell'approccio classico:

$$f_y = \sigma_{eff} - \sigma_y(\boldsymbol{\kappa}) = 0 \tag{5.34}$$

dove il vettore κ è un vettore di variabili interne, soggette a leggi di evoluzione. Il vettore κ governa l'incrudimento del materiale.

Derivando W_d per \underline{e}_{de} si ottiene lo scalar force state deviatorico $\underline{t}_d = \alpha \underline{\omega} (\underline{e}_d - \underline{e}_{dp})$, ed usando questa definizione si può ottenere l'espressione di W_d in funzione dello scalar force state deviatorico:

$$W_d = \frac{1}{2} \underline{t}_d \bullet \left(\frac{\underline{t}_d}{\alpha \underline{\omega}}\right) \tag{5.35}$$

Essendo lo sforzo efficace secondo Von Mises $\sigma_{eff} = \sqrt{6G \cdot W_d}$, si può riscrivere

5.3 Sviluppo di un modello di incrudimento isotropo per il criterio di Von Mises e Radial Return per modelli peridinamici ordinari

la funzione di snervamento in funzione dello scalar force state deviatorico:

$$\sigma_{eff} = \sqrt{6G \cdot W_d} = \sqrt{3G\underline{t}_d \bullet \left(\frac{\underline{t}_d}{\alpha \underline{\omega}}\right)} = \sqrt{\frac{m_w}{5}}\underline{t}_d \bullet \frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}}} \tag{5.36}$$

$$f_y = \sqrt{\frac{m_w}{5}} \underline{t}_d \bullet \frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}} - \sigma_y(\boldsymbol{\kappa}) = 0$$
(5.37)

Confrontando l'equazione 5.36 con la definizione di σ_{eff} e J_2 nella teoria classica (equazione 5.8)è possibile definire un invariante secondo per modelli ordinari, diverso da quello definito da Mitchell in equazione 5.29:

$$\sigma_{eff} = \sqrt{\frac{m_w}{5}\underline{t}_d \bullet \frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}}} = \sqrt{3 J_{2_{(OPD)}}} \quad \rightarrow \quad J_{2_{(OPD)}} = \frac{m_w}{15}\underline{t}_d \bullet \frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}} \tag{5.38}$$

Per poter usare la legge di flusso peridinamica, viene fatta la derivata di f_y rispetto allo stato force state deviatorico \underline{t}_d .

$$\frac{\partial f_y}{\partial \underline{t}_d} = 2\frac{m_w}{5}\frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}}\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\frac{m_w}{5}\underline{t}_d} \bullet \frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}}}} = \frac{m_w}{5\sigma_{eff}}\frac{\underline{t}_d}{\underline{\omega}}}$$
(5.39)

Si ottiene quindi la seguente legge di flusso:

$$\Delta \underline{e}_{dp} = \frac{m_w}{5} \frac{\underline{t}_d}{\sigma_{eff} \underline{\omega}} \Delta \lambda \tag{5.40}$$

Si fa notare che l'incrudimento con il criterio di Von Mises genera solo un $\Delta \underline{e}_{dp}$, e non cambia la dilatazione Θ , nè cambia lo scalar force state isotropico. Inoltre si fa notare la sola condizione sull'influence state è che sia diversa da zero in tutti i bond. Ma se esiste un bond in cui l'influence function è nulla, allora quel bond non esiste, essendo nullo il force state.

Si mostra di seguito la procedura per ottenere l'equazione non lineare da risolvere per trovare $\Delta \lambda$ e integrare l'extension state plastico.

Si considerino 2 scalar force state deviatorici cronologicamente consecutivi (1) e (2):

$$\underline{t}_d^{(1)} = \alpha \underline{\omega} (\underline{e}_d^{(1)} - \underline{e}_{dp}^{(1)}) \tag{5.41}$$

$$\underline{t}_d^{(2)} = \alpha \underline{\omega} (\underline{e}_d^{(2)} - \underline{e}_{dp}^{(2)}) \tag{5.42}$$

Facendo la differenza tra gli scalar force state deviatorici si può scrivere:

$$\underline{t}_{d}^{(2)} - \underline{t}_{d}^{(1)} = \alpha \underline{\omega} \Delta \underline{e}_{d} - \alpha \underline{\omega} \Delta \underline{e}_{dp}$$
(5.43)

5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici

Definendo il *trial* scalar force state deviatorico \underline{t}_d^{trial} , e usando la legge di flusso ricavata precedentemente:

$$\underline{t}_{d}^{trial} = \underline{t}_{d}^{(1)} + \alpha \underline{\omega} \Delta \underline{e}_{d} \qquad \qquad \underline{t}_{d}^{(2)} = \underline{t}_{d}^{trial} - \alpha \frac{m_{w}}{5} \frac{\underline{t}_{d}}{\sigma_{eff}} \Delta \lambda \qquad (5.44)$$

Usando la definizione di α (vedi equazione 4.13) si ottiene l'equazione da cui risolvere il problema.

$$\underline{t}_{d}^{(2)} = \underline{t}_{d}^{trial} - 3G \frac{\underline{t}_{d}}{\sigma_{eff}} \Delta \lambda$$
(5.45)

Applicando il metodo di Eulero implicito per risolvere il problema l'equazione risolutiva diventa:

$$\underline{t}_{d}^{(2)} = \underline{t}_{d}^{trial} - 3G \frac{\underline{t}_{d}^{(2)}}{\sigma_{eff}^{(2)}} \Delta \lambda$$
(5.46)

Usando la definizione di sforzo efficace in equazione 5.36, si ottiene l'equazione da risolvere per ottenere $\Delta\lambda$.

$$\sigma_{eff}^{(2)} = \frac{\sigma_{eff}^{trial}}{1 + 3G\frac{\Delta\lambda}{\sigma_{eff}^{(2)}}}$$
(5.47)

$$\sigma_{eff}^{(2)} - \sigma_{eff}^{trial} + 3G\Delta\lambda = 0 \tag{5.48}$$

Si fa notare che questa è uguale all'equazione risolutiva usata nella teoria classica (vedi 5.21). La teoria della plasticità nella peridinamica porta quindi alle stesse equazioni risolutive della teoria della plasticità classica nel caso di incrudimento isotropo con il criterio di Von Mises.

L'equazione 5.46 esprime l'equazione del ritorno elastico per l'approccio peridinamico con legame costitutivo ordinario state-based.

5.3.1 Generazione di potenza termica

In questa sezione viene dimostrato che, come ci si può aspettare, la potenza dissipata nel modello peridinamico elasto-plastico con incrudimento isotropo è uguale a quella dell'equazione 5.22.

Come mostrato da Mitchell in [44], il rispetto del secondo principio della termodinamica implica che:

$$p_{diss} = -\frac{\partial W}{\partial \underline{e}_{dp}} \bullet \underline{\dot{e}}_{dp} \ge 0 \tag{5.49}$$

5.3 Sviluppo di un modello di incrudimento isotropo per il criterio di Von Mises e Radial Return per modelli peridinamici ordinari

Usando l'equazione 5.40, e calcolando la derivata di Frechet di W rispetto a \underline{e}_{dp} si ottiene:

$$p_{diss} = -(-\underline{t}_d) \bullet \frac{m_w}{5} \frac{\underline{t}_d}{\sigma_{eff}\underline{\omega}} \dot{\lambda}$$
(5.50)

Sostituendo l'equazione 5.36, e l'equazione 5.11 si dimostra la tesi:

$$p_{diss} = \sigma_{eff} \dot{\varepsilon}_p \tag{5.51}$$

Come già mostrato nella sezione 5.1.1, al fine di ottenere la potenza termica sviluppata a causa della plasticizzazione è oppurtuno moltiplicare la potenza dissipata per la constante di Taylor e Quinney β_{TQ} , a cui viene comunemente dato il valore di 0.9.

5.3.2 Sviluppo di un modello di incrudimento isotropo per il criterio di Von Mises e *Radial Return* per modelli peridinamici PALS

In questa sezione si mostra lo sviluppo di un nuovo approccio peridinamico analogo a quello classico mostrato in 5.1.1 per un legame costitutivo PALS.

Come mostrato nella sezione 4.3.2, un modello PALS corregge il modello ordinario LPS togliendone la sensibilità agli effetti di superficie.

Come per il modello elastoplastico sviluppato nella sezione precendente, si dimostra che questo approccio porta a definire la stessa equazione risolutiva ottenuta nell'approccio classico e nel modello ordinario.

Viene usata la stessa funzione di snervamento usata nell'approccio classico:

$$f_y = \sigma_{eff} - \sigma_y(\boldsymbol{\kappa}) = 0 \tag{5.52}$$

Anche nel modello PALS la definizione di σ_{eff} si basa sulla definizione dell'energia specifica di deformazione deviatorica:

$$W_d = G(\underline{\sigma e}_{de}) \bullet \underline{e}_{de} \tag{5.53}$$

dove con $\underline{e}_{de} = \underline{e}_d - \underline{e}_{dp}$ si intende la parte deviatorica elastica dell'extension state. Derivando W_d per \underline{e}_{de} si ottiene lo scalar force state deviatorico $\underline{t}_d = 2G\underline{\sigma}(\underline{e}_d - \underline{e}_{dp})$, ed usando questa definizione si può ottenere l'espressione di W_d in funzione dello scalar force state deviatorico:

$$W_d = \frac{1}{4G} \underline{t}_d \bullet \left(\frac{\underline{t}_d}{\underline{\sigma}}\right) \tag{5.54}$$

95

5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici

Ed essendo lo sforzo efficace secondo Von Mises $\sigma_{eff} = \sqrt{6G \cdot W_d}$, si può riscrivere la funzione di snervamento in funzione dello scalar force state deviatorico:

$$\sigma_{eff} = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{t}_d \bullet \left(\frac{\underline{t}_d}{\underline{\sigma}}\right)} \tag{5.55}$$

$$f_y = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{t}_d \bullet \left(\frac{\underline{t}_d}{\underline{\sigma}}\right)} - \sigma_y(\boldsymbol{\kappa}) = 0$$
(5.56)

Per poter usare la legge di flusso peridinamica, si deriva f_y per lo stato \underline{t}_d .

$$\frac{\partial f_y}{\partial \underline{t}_d} = 2\frac{3}{2}\frac{\underline{t}_d}{\underline{\sigma}}\frac{1}{2}\frac{1}{sqrt_2^3\underline{t}_d \bullet \frac{\underline{t}_d}{\sigma}} = \frac{3}{2\sigma_{eff}}\frac{\underline{t}_d}{\underline{\sigma}}$$
(5.57)

$$\Delta \underline{e}_{dp} = \frac{3}{2\sigma_{eff}} \frac{\underline{t}_d}{\underline{\sigma}} \Delta \lambda \tag{5.58}$$

Considerando 2 scalar force state deviatorici cronologicamente consecutivi (1) e (2):

$$\underline{t}_{d}^{(1)} = 2G\underline{\sigma}(\underline{e}_{d}^{(1)} - \underline{e}_{dp}^{(1)}) \tag{5.59}$$

$$\underline{t}_d^{(2)} = 2G\underline{\sigma}(\underline{e}_d^{(2)} - \underline{e}_{dp}^{(2)}) \tag{5.60}$$

Facendo la differenza tra gli scalar force state deviatorici si può scrivere:

$$\underline{t}_{d}^{(2)} - \underline{t}_{d}^{(1)} = 2G\underline{\sigma}\Delta\underline{e}_{d} - 2G\underline{\sigma}\Delta\underline{e}_{dp}$$

$$(5.61)$$

Definendo il *trial* scalar force state deviatorico \underline{t}_d^{trial} , e usando la legge di flusso ricavata precedentemente:

$$\underline{t}_{d}^{trial} = \underline{t}_{d}^{(1)} + 2G\underline{\sigma}\Delta\underline{e}_{d} \qquad \qquad \underline{t}_{d}^{(2)} = \underline{t}_{d}^{trial} - 2G\frac{3}{2\sigma_{eff}}\frac{\underline{t}_{d}}{\underline{\sigma}}\Delta\lambda \qquad (5.62)$$

Si ottiene quindi la stessa equazione ottenuta con il modello ordinario, che porta alle medesime conclusioni (eq 5.45) scritte precedentemente.

$$\underline{t}_{d}^{(2)} = \underline{t}_{d}^{trial} - 3G \frac{\underline{t}_{d}}{\sigma_{eff}} \Delta \lambda$$
(5.63)

5.4 Sviluppo di modelli peridinamici elastoplastici basati sul modello di Johnson-Cook

Nelle sezioni precedenti si è visto che l'integrazione nei legami costitutivi elastoplastici con l'approccio della plasticità classica e con gli approcci peridinamici ordinari sviluppati richiedono la soluzione della stessa equazione non-lineare (5.21) per il rispetto della funzione di snervamento.

In questa sezione viene mostrata la procedura per risolvere l'equazione 5.21 usando la funzione sforzo di snervamento σ_y fornita dal modello di Johnson-Cook.

Il modello di Johnson-Cook [29] è un modello elastoviscoplastico di incrudimento isotropo basato sul criterio di Von Mises, a cui è possibile applicare la teoria sviluppata. Questo modello permette di esprimere lo sforzo di snervamento usando una funzione della deformazione plastica equivalente, della sua derivata nel tempo e della temperatura. Si può vedere che in letteratura il modello è stato estensivamente applicato in analisi di fenomeni con alta velocità di deformazione plastica, come ad esempio problemi di impatto su bersagli metallici.

Secondo il modello di Johnson Cook la funzione dello sforzo di snervamento σ_y è:

$$\sigma_y = \left(A + B\varepsilon_p^n\right) \left(1 + C \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)\right) \left(1 - {\theta^*}^m\right)$$
(5.64)

dove A, B, C, m, n sono costanti del materiale determinate empiricamente, θ^* è la temperature omologa, ε_p è la deformazione plastica efficace e $\dot{\varepsilon}_0$ è il rateo di deformazione di riferimento. La costante A è lo sforzo di snervamento quasi-statico alla temperatura di riferimento, le costanti B, ed n sono relative all'incrudimento del materiale, C è relativa al comportamento viscoplastico e m relativa alla dipendenza dalla temperatura. La temperatura omologa θ^* è definita come:

$$\theta^* = \frac{\theta - \theta_{ref}}{\theta_{melt} - \theta_{ref}} \tag{5.65}$$

dove θ è la temperatura locale, θ_{ref} è la temperatura di riferimento e θ_{melt} è la temperatura di fusione del materiale.

La funzione dello sforzo di snervamento del modello di Johnson-Cook è stata implementata in 3 tipi di modelli peridinamici elastoplastici in Peridigm:

• Modello ordinario di Johnson-Cook: Applicazione del modello di Johnson-Cook al modello descritto in sezione 5.3

- Modello PALS di Johnson-Cook: Applicazione del modello di Johnson-Cook al modello descritto in sezione 5.3.2
- Modello correspondence di Johnson-Cook: Viene applicata la procedura di integrazione del tensore degli sforzi mostrata nella sezione 5.1.1 sul tensore di Cauchy non ruotato all'interno dell'algoritmo di Flanagan-Taylor. Lo sforzo di Cauchy ruotato, il tensore di Piola-Kirchhoff e il force density state vengono ottenuti come spiegato nella sezione 2.4.5.

Per risolvere l'equazione $f_y = 0$ (vedi 5.21) usando il metodo di Newton-Raphson è necessario derivarla per $\Delta\lambda$, ottenendo:

$$f_{y_{/\Delta\lambda}} = \sigma_{y_{/\Delta\lambda}}^{(2)} + 3G \tag{5.66}$$

$$\sigma_{y/\Delta\lambda}^{(2)} = \left(\left(nB\varepsilon_p^{(2)^{n-1}}\varepsilon_{p/\Delta\lambda}^{(2)} \right) \left(1 + C\ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_p^{(2)}}{\dot{\varepsilon}_0}\right) \right) + \left(A + B\varepsilon_p^{(2)^n} \right) C\frac{\dot{\varepsilon}_{p/\Delta\lambda}^{(2)}}{\dot{\varepsilon}_p^{(2)}} \right) \left(1 - \theta^{*^m} \right)$$
(5.67)

dove, avendo applicato un'integrazione con il metodo di Eulero implicito:

$$\varepsilon_p^{(2)} = \varepsilon_p^{(1)} + \Delta\lambda \qquad \qquad \varepsilon_{p/\Delta\lambda}^{(2)} = 1$$
(5.68)

$$\dot{\varepsilon}_p = \frac{\Delta\lambda}{\Delta t} = \dot{\lambda} \qquad \dot{\varepsilon}_{p/\Delta\lambda}^{(2)} = \frac{1}{\Delta t}$$
(5.69)

Si fa notare che al tendere di $\dot{\varepsilon}_p^{(2)}$ a zero la funzione di snervamento e la derivata rispetto a $\Delta\lambda$ diventano singolari a causa del logaritmo e della derivata del logaritmo. Per questa ragione, se $\dot{\varepsilon}_p^{(2)}$ è minore o uguale a zero nella procedura iterativa, il logaritmo e la derivata del logaritmo vengono calcolati per un valore di $\dot{\varepsilon}_p^{(2)}$ fittizio molto piccolo. In questa tesi si è posto il valore fittizio uguale a un millesimo di $\dot{\varepsilon}_0$ senza riscontrare problemi di convergenza del metodo di Newton-Raphson.

Nel caso in cui il metodo di Newton-Raphson non converga è sempre possibile utilizzare un metodo della bisezione.

5.5 Test quasistatico dei modelli di incrudimento isotropo in Peridigm

Si mostrano i risultati di analisi quasistatiche fatte su un provino tridimensionale in Peridigm con diversi legami costitutivi elasto-plastici. Il provino analizzato è un'asta lunga $l_2 = 10 \text{ mm}$, con sezione rettangolare $l_1 \times l_3$ con $l_1 = 2 \text{ mm}$ e $l_3 = 1 \text{ mm}$. Il modello elasto-plastico è posto solo in un tratto centrale esteso $0.5l_2$ del provino, in modo da localizzare lo snervamento al centro. Il resto del provino è un modello elastico.

Il modello elasto-plastico è basato sul modello di Johnson-Cook presentato in sezione 5.4. Essendo un'analisi quasistatica vengono imposte solo le quantità A B ed n. La costante C, relativa al comportamento viscoplastico, e m, l'esponente sulla temperatura omologa, non servono in questa analisi. Sono stati presi i valori delle costanti del materiale da [8] per alluminio 7075-T6, vengono mostrati in tabella 5.1.

costante	valore	
ρ	$2810~{ m kg/m^3}$	
E	$71.7~\mathrm{GPa}$	
ν	0.33	
A	$546 \mathrm{MPa}$	
B	$678 \mathrm{MPa}$	
n	0.71	
C	0.024	
m	1.56	
$\dot{arepsilon}_0$	1.0	
$ heta_{ref}$	$20^{\circ}\mathrm{C}$	
$ heta_{melt}$	$477^{\circ}\mathrm{C}$	

Tabella 5.1: Costanti del modello di Johnson-Cook relativo ad alluminio 7075-T6,
da [8]

Il provino è discretizzato in tanti cubetti di lato $\Delta x = c/4$. In tutte le analisi l'orizzonte è posto pari a $\delta = 3.05\Delta x$, e quindi m = 3.05.

L'asta è vincolata in entrambi gli estremi, ad uno degli estremi è imposto uno spostamento crescente in 200 passi da 0% fino all'5% di l_2 nella direzione della lunghezza dell'asta per generare una deformazione assiale.

Vengono riportati le seguenti curve risultate dalle analisi:

- Curva sforzo ingegneristico deformazione ingegneristica (curva 5.1)
- Curva sforzo equivalente deformazione equivalente (curva 5.2)

Lo sforzo e la deformazione ingegneristici sono stati valutati in un punto prossimo al centro della sezione di mezzeria del provino.



Figura 5.1: Curva sforzo-deformazioni ingegneristiche analisi quasistatica



Figura 5.2: Curva sforzo-deformazioni equivalenti analisi quasistatica



5.5 Test quasistatico dei modelli di incrudimento isotropo in Peridigm

Figura 5.3: Deformazione plastica equivalente nell'analisi sul modello ordinario al momento dello snervamento iniziale nella mezzeria del provino

La prima cosa che si nota in tutte e tre le figure è che l'analisi con il modello PALS non viene completata. Questo perchè quando il materiale snerva si manifesta un fenomeno di instabilità simile a quello descritto nella sezione 4.7.

Nella figura 5.2 si nota invece che tutti e 3 i modelli riproducono (almeno inizialmente) lo snervamento, in quanto la curva sforzo-deformazione ottenuta dalle analisi coincide con la curva definita dal modello indicata con *ref.*

La figura 5.1 mostra invece che lo snervamento iniziale nei modelli correspondence e PALS avviene per uno sforzo ingegneristico prossimo al valore teorico uguale alla costante A. Nel modello ordinario sembra invece che lo snervamento avvenga a sforzi ingegneristici più elevati, oltre al fatto già appurato che la rigidezza assiale non viene riprodotta correttamente. Come si può vedere in figura 5.3 visualizzando i risultati con il software Paraview, lo snervamento sembra avvenire globalmente a valori maggiori perchè non avviene uniformemente nella sezione ma si generano deformazioni plastiche a partire dagli spigoli, questo perchè nel modello ordinario lo sforzo tende a concentrarsi proprio sugli spigoli. Al contrario nella figura 5.4 si può vedere che nel modello correspondence lo snervamento avviene in maniera uniforme nella sezione. Nonostante l'analisi sul modello PALS fosse riuscita a centrare correttamente il punto dello snervamento, si vede sorprendentemente che lo snervamento non è avvenuto in maniera uniforme nella sezione. 5 Sviluppo di modelli elasto-viscoplastici



Figura 5.4: Deformazione plastica equivalente nell'analisi sul modello correspondence al momento dello snervamento iniziale nella mezzeria del provino



Figura 5.5: Deformazione plastica equivalente nell'analisi sul modello PALS al momento dello snervamento iniziale nella mezzeria del provino

6 Analisi dei modelli di diffusione termica

In questo capitolo vengono analizzati i modelli per la diffusione termica sviluppati per la peridinamica. Le prime due sezioni presentano la spiegazione dei modelli di diffusione termica bond-based e state-based correspondence. In particolare nella seconda sezione viene mostrata l'esistenza di modi di hourglass anche nel modello correspondence termico, e ne viene proposta una soluzione.

Nella terza sezione viene implementato il modello bond-based descritto per analisi monodimensionali. Vengono fatte analisi di diffusione termica su un'asta, e i risultati vengono confrontati con i risultati di analisi basate sulla teoria classica. La quarta sezione ripete lo stesso test fatto nella terza sezione sul modello bond-based, ma usando un'asta tridimensionale con il modello già implementato in Peridigm.

La quinta sezione analizza la capacità del modello bond-based tridimensionale in Peridigm di riprodurre il fenomeno della conducibilità a regime, con attenzione all'analisi di possibili fenomeni di superficie. La sesta sezione propone una soluzione ai fenomeni di superficie, e mostra i risultati dei test comparativi.

Nella settima sezione viene implementato il modello di soppressione dei modi di hourglass nel modello correspondence per analisi monodimensionali, e ne viene mostrata l'efficacia.

L'applicazione della peridinamica alla soluzione del problema di diffusione termica è uno sviluppo naturale della peridinamica, vista la semplicità con cui è possibile applicare la teoria peridinamica alla soluzione di qualunque problema differenziale anche in presenza di discontinuità.

L'interesse per un approccio non locale alla conduzione del calore viene inoltre dal fatto che la trasmissione del calore si basa su fenomeni non locali, come ad esempio il trasferimento di calore attraverso la diffusione di elettroni e fononi.

Sperimentalmente, il fenomeno della conduzione del calore si manifesta solitamente nel passaggio di una potenza termica proporzionale al gradiente della temperatura puntuale (legge di Fourier). Al contrario per scale microscopiche, per temperature molto basse o per alti gradienti di temperatura, è necessario considerare la natura non locale della trasmissione del calore per creare un modello appropriato [40].

6.1 Modelli bond-based

Sono stati sviluppati in letteratura diversi modelli bond-based per modellare la conduzione termica di materiali isotropi.

I modelli bond-based hanno una maggior efficienza computazionale rispetto a quelli state-based, in quanto richiedono un minor numero di conti. I modelli bondbased nella soluzione del problema termico non hanno le stesse limitazioni che hanno i modelli bond-based nel problema meccanico, quindi possono essere usati in modo efficiente a scapito dei modelli state-based.

In letteratura si sono trovati tre diversi modelli che differiscono tra loro per la definizione della pairwise heat flow density.

• Modello di Gerstle [24]

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \kappa_0 \big(\theta(\mathbf{x}') - \theta(\mathbf{x}) \big) \qquad \underline{q} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \kappa_0 \underline{\theta} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \tag{6.1}$$

• Modello di Bobaru [4]

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \kappa_2 \frac{\theta(\mathbf{x}') - \theta(\mathbf{x})}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^2} \qquad \underline{q} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \kappa_2 \frac{\underline{\theta} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle}{|\boldsymbol{\xi}|^2} \tag{6.2}$$

• Modello di Agwai [1]

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \kappa_1 \frac{\theta(\mathbf{x}') - \theta(\mathbf{x})}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|} \qquad \underline{q} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \kappa_1 \frac{\underline{\theta} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle}{|\boldsymbol{\xi}|} \tag{6.3}$$

Le costanti κ_0 , κ_1 , κ_2 sono dette microconduttività e si possono collegare direttamente alla conduttività di un materiale isotropo.

Si è dimostrato che le soluzioni di analisi fatte con tutti i modelli bond-based descritti precedentemente convergono alla soluzione ottenuta con la teoria classica all'aumentare del numero di nodi (*m*-convergence). Un'analisi di convergenza monodimensionale al variare del rapporto m (δm -convergence) ha dimostrato che le migliori caratteristiche di convergenza si hanno per un raggio dell'orizzonte pari a 3 o 4 volte la discretizzazione spaziale Δx [3]. Dato che tutti e 3 i modelli convergono alla teoria classica, la scelta su quale modello usare nelle analisi è stata fatta sulla base di quale di questi metodi fosse già stato implementato nella versione di Peridigm usata, e cercando per quale di questi modelli fosse disponibile il valore della microconduttività per le diverse dimensionalità del problema (1D, 2D o 3D).

Il modello usato nelle analisi è dunque il modello di Agwai, essendo già stato implementato in Peridigm da D'Antuono [12] ed essendo state calcolate le microconduttività da Madenci ed Oterkus [40] a seconda della dimensionalità del problema.

La microconduttività per il modello di Agwai è stata trovata ipotizzando un campo di temperature θ lineare e confrontando il potenziale termico Z dato dalla teoria classica, con quello dato dalla teoria peridinamica.

$$\kappa_1^{(1D)} = \frac{2k}{A\delta^2} \tag{6.4}$$

dove A è la sezione del problema 1D,

$$\kappa_1^{(2D)} = \frac{6k}{\pi s \delta^3} \tag{6.5}$$

dove s è lo spessore.

$$\kappa_1^{(3D)} = \frac{6k}{\pi\delta^4} \tag{6.6}$$

6.1.1 Calcolo di κ_1 nel caso tridimensionale

Si riporta come esempio la dimostrazione di come è stato ottenuto $\kappa_1^{(3D)}$ da Madenci e Oterkus.

Si definisca un campo di temperatura lineare $\theta(\mathbf{x}) = x + y + z$, e si consideri il punto all'origine del sistema di riferimento. Il temperature state per questo punto vale $\underline{\theta}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = x' + y' + z'$, dove x', y', z' sono le coordinate del punto \mathbf{x}' .

Usando l'equazione 2.32 si ottiene il potenziale microtermico per il modello di Agwai:

$$\underline{z}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \kappa_1^{(3D)} \frac{(x'+y'+z')^2}{2|\boldsymbol{\xi}|}$$
(6.7)

Si calcola il potenziale termico con l'equazione 2.31:

$$Z(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\kappa_1^{(3D)} \int_{\mathcal{H}} \frac{(x'+y'+z')^2}{2|\boldsymbol{\xi}|} dV_{\boldsymbol{\xi}}$$
(6.8)

105

6 Analisi dei modelli di diffusione termica

Integrando analiticamente sul dominio sferico \mathcal{H} si ottiene il seguente valore del potenziale termico:

$$Z(\mathbf{x},t) = \kappa_1^{(3D)} \frac{\pi \delta^4}{4} \tag{6.9}$$

Il potenziale termico nella teoria classica è dato da:

$$Z(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\nabla\theta \cdot k\nabla\theta \tag{6.10}$$

Il gradiente della temperatura in questo caso è uguale al tensore identità, dunque $Z({\bf x},t)=k\;3/2$

Dal confronto del potenziale termico per la teoria peridinamica e la teoria classica si ottiene il valore di $\kappa_1^{(3D)}$ mostrato nell'equazione 6.6.

Si fa notare che l'integrale sarebbe potuto essere notevolmente semplificato se ci si fosse messi in un nuovo sistema di riferimento tale per cui la temperatura varia linearmente soltanto lungo un asse, e rimane costante lungo gli altri. Si fa anche notare che supporre un campo lineare di temperature potrebbe essere limitativo.

6.2 Modello state-based correspondence

Visto che i modelli bond-based hanno una maggior efficienza computazionale rispetto a quelli state-based, e che funzionano senza problemi, potrebbe sembrare insensato sviluppare dei modelli state-based nella formulazione peridinamica della conduzione termica.

Tuttavia i modelli bond-based mostrati possono essere usati solo per riprodurre la conduzione in materiali isotropi, ovvero quei materiali per cui è possibile ridurre il tensore di conducibilità termica ad uno scalare, e corpi soggetti a piccole deformazioni.

Un modello state-based correspondence può invece essere sviluppato al fine di poter riprodurre la conduzione del calore per leggi più complicate, per esempio per riprodurre la conduzione per materiali anisotropi e corpi soggetti a deformazioni finite. Un esempio di applicazione di questo modello è mostrato da Liao in [33], in cui il modello correspondence viene applicato nella conduzione termica nei *Functionally Gradient Materials* (FGM)

Analogamente alla teoria correspondence della peridinamica per il problema meccanico, è possibile stimare il gradiente della temperatura.

$$\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta} = \frac{1}{m_w} (\underline{\omega}\boldsymbol{\theta}) * \underline{\mathbf{X}} = \frac{1}{m_w} \int_{\mathcal{H}} \underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \underline{\boldsymbol{\theta}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \underline{\mathbf{X}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle dV_{\boldsymbol{\xi}}$$
(6.11)

dove m_w è il weighted volume mostrato in equazione 4.8.

Una volta calcolato il gradiente della temperatura è possibile calcolare il flusso di calore con la legge di Fourier per la formulazione Lagrangiana classica mostrata in 2.82 e che riportiamo di seguito:

$$\mathbf{q}(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta}) = det(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{F}^{-T}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta}$$
(6.12)

In cui il tensore \mathbf{F} è il tensore gradiente di deformazione. Si fa notare che il tensore \mathbf{F} fornisce un termine di accoppiamento tra problema meccanico e problema termico, come anticipato nella sezione 2.7.3.

Tramite la comparazione della definizione generale del potenziale termico nella teoria classica e in quella peridinamica, Agwai [1] ha dimostrato che è possibile calcolare i valori dell'heat flow state \underline{h} attraverso la seguente formula:

$$\underline{h} = \frac{1}{m_w} \underline{\omega} \mathbf{q} \cdot \underline{\mathbf{X}} \tag{6.13}$$

$$\underline{h}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \frac{1}{m_w}\underline{\omega}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle\mathbf{q}\cdot\underline{\mathbf{X}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle \tag{6.14}$$

Riassumendo, il calcolo di \underline{h} nel modello state-based correspondence si compone delle seguenti fasi:

- 1. usando $\underline{\theta}$ calcolo la stima di $\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta}$
- 2. calcolo ${\bf q}$ usando la legge di Fourier per la formulazione Lagrangiana
- 3. calcolo l'heat flow scalar state \underline{h} us ando l'equazione 6.13

6.2.1 Sviluppo di un metodo di soppressione dei modi di hourglass nel modello correspondence

Analogamente al gradiente di deformazione nei modelli correspondence della peridinamica del problema meccanico, anche il gradiente di temperatura approssimato è soggetto a modi di hourglass.

Infatti l'heat flow state nei modelli termici correspondence dipende dal gradiente della temperatura approssimato secondo l'equazione 6.11, e il campo di temperatura all'interno dell'orizzonte di un nodo può assumere infinite combinazioni senza cambiare il valore del gradiente della temperatura.

6 Analisi dei modelli di diffusione termica

Ciò è dimostrabile estendendo l'approccio mostrato da Breitzman in [10], relativo al gradiente degli spostamenti, al gradiente delle temperature (l'approccio può potenzialmente essere esteso a qualsiasi gradiente); si mostra di seguito come.

Si consideri un problema monodimensionale, la stima del gradiente della temperatura può essere scritta come:

$$D_{NL}\theta(x) = \frac{3}{2\delta^2} \int_{x-\delta}^{x+\delta} (\theta(\tilde{x}) - \theta(x))(\tilde{x} - x)d\tilde{x}$$
(6.15)

dove con $D_{NL}(\dot{)}$ si intende l'approssimazione non locale della derivata rispetto ad x.

Si consideri l'espansione di Taylor $\theta(\tilde{x}) - \theta(x) = \frac{d\theta}{dx}(\tilde{x} - x) + \frac{1}{2}\frac{d^2\theta}{dx^2}(\tilde{x} - x)^2 + \frac{1}{3}\frac{d^3\theta}{dx^3}(\tilde{x} - x)^3 + \dots$, allora $D_{NL}\theta(x)$ diventa:

$$D_{NL}\theta(x) = \frac{d\theta}{dx} + 0 \frac{d^2\theta}{dx^2} + \frac{3}{5}\delta^2 \frac{d^3\theta}{dx^3} + \dots$$
(6.16)

Si noti che le derivate pari svaniscono per simmetria; si può quindi dire che tutti i campi di temperatura con le stesse derivate dispari producono lo stesso $D_{NL}\theta(x)$. Si è dimostrato quindi che esistono infiniti campi di temperatura, che si distinguono solo per il valore delle derivate pari, che producono lo stesso valore della stima del gradiente di temperatura.

In modo simile a quanto viene fatto nei modelli correspondence del problema meccanico, si aggiunge all'heat flow state una funzione con lo scopo di sopprimere i modi di hourglass.

$$\underline{h}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle = \frac{1}{m_w}\underline{\omega}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle\mathbf{q}\cdot\underline{\mathbf{X}}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle + \underline{h}_{hg}\langle\boldsymbol{\xi}\rangle \tag{6.17}$$

In questa sezione si propone una funzione h_{hg} applicabile a materiali isotropi e ispirata al metodo di Littlewood per sopprimere i modi di hourglass nel modello elastico isotropo correspondence (vedi sezione 4.4.1). La force density stabilizzante $\mathbf{t}_{hg}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ proposta da Littlewood è molto simile alla pairwise force density del modello PMB.

In maniera analoga si propone una funzione h_{hg} molto simile alla thermal response function del modello di Agwai:

$$\underline{q}\langle\underline{\boldsymbol{\xi}}\rangle = \kappa_1 \frac{\underline{\theta}\langle\underline{\boldsymbol{\xi}}\rangle}{|\boldsymbol{\xi}|} \tag{6.18}$$

6.3 Test monodimensionale sul modello di Agwai

$$\underline{h}_{hg}\langle \underline{\boldsymbol{\xi}} \rangle = C_{hg} \kappa_1 \frac{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\boldsymbol{\xi}} - \underline{\boldsymbol{\theta}} \langle \underline{\boldsymbol{\xi}} \rangle}{|\boldsymbol{\xi}|}$$
(6.19)

 h_{hg} si annulla quando $\nabla \theta \cdot \boldsymbol{\xi} = \underline{\theta} \langle \underline{\boldsymbol{\xi}} \rangle$, ovvero quando la temperatura del punto indicato dal bond è esattamente quella prevista dal gradiente di temperatura del punto di riferimento (che è uguale alla temperatura che ci dovrebbe essere in presenza di un campo di temperature con gradiente costante nell'intorno del punto di riferimento). C_{hg} è un coefficiente arbitrario che indica l'intensità dell'azione stabilizzante.

6.3 Test monodimensionale sul modello di Agwai

Il test consiste nell'integrazione numerica di un problema di conduzione termica in un'asta con temperatura iniziale uguale a $0^{\circ}C$ e con temperatura imposta agli estremi uguale a $100^{\circ}C$. Le integrazioni numeriche sono state svolte sia usando il metodo di Eulero esplicito che quello implicito usando codici sviluppati in Python.

Non sono previsti accoppiamenti termo-meccanici e generazioni di calore interne, inoltre si ritengono costanti le proprietà caretteristiche del materiale. Le equazioni da risolvere quindi sono:

$$\rho_0 c \frac{d\theta}{dt} = Q_{PD} \tag{6.20}$$

Il test è stato fatto su un modello peridinamico bond-based di Agwai mesh-free monodimensionale.

$$Q_{PD}(\mathbf{x}_k) = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} q(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) dV_{\mathbf{x}_i} = \sum_{i | \mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left(q(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right)$$
(6.21)

dove:

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \kappa_1 \frac{\theta(\mathbf{x}') - \theta(\mathbf{x})}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|}$$
(6.22)

La semplicità del modello bond-based permette di definire l'integrale della thermal response function come combinazione lineare delle temperature dei nodi vicini:

$$Q_{PD}(\mathbf{x}_k) = \sum_{i | \mathbf{x}_i \in \mathcal{H}_{\mathbf{x}_k}} \left(\kappa_1 \frac{\theta(\mathbf{x}_k) - \theta(\mathbf{x}_i)}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i|} \Delta V_{\mathbf{x}_i} \right) = \sum_{i | \mathbf{x}_i \in \{\mathcal{H}_{\mathbf{x}_k} \cup \mathbf{x}_k\}} a_i \theta(\mathbf{x}_i) = \{\mathbf{a}\}_k \{\boldsymbol{\theta}\}$$
(6.23)

Raggruppando le equazioni di tutti i nodi \mathbf{x} in cui è stato discretizzato il problema

6 Analisi dei modelli di diffusione termica

è possibile scrivere il problema in forma matriciale.

$$\{\dot{\boldsymbol{\theta}}\} = \frac{1}{\rho_0 c} [\mathbf{a}] \{\boldsymbol{\theta}\}$$
(6.24)

in cui $[\mathbf{a}]$ è la matrice dei coefficienti ricavata da Q_{PD} .

Questo è un semplice sistema di equazioni differenziali lineari del primo ordine. L'integrazione esplicita viene fatta con un semplice metodo di Eulero esplicito.

$$\frac{1}{\Delta T}(\{\boldsymbol{\theta}^{(n+1)}\} - \{\boldsymbol{\theta}^{(n)}\}) = \frac{1}{\rho_0 c}[\mathbf{a}]\{\boldsymbol{\theta}^{(n)}\}$$
(6.25)

$$\{\boldsymbol{\theta}^{(n+1)}\} = \left(\frac{\Delta T}{\rho_0 c}[\mathbf{a}] + [\mathbf{I}]\right)\{\boldsymbol{\theta}^{(n)}\}$$
(6.26)

L'integrazione implicita viene fatta con un semplice metodo di Eulero implicito.

$$\frac{1}{\Delta T}(\{\boldsymbol{\theta}^{(n+1)}\} - \{\boldsymbol{\theta}^{(n)}\}) = \frac{1}{\rho_0 c}[\mathbf{a}]\{\boldsymbol{\theta}^{(n+1)}\}$$
(6.27)

$$\left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta T}{\rho_0 c} [\mathbf{a}] \right) \{ \boldsymbol{\theta}^{(n+1)} \} = \{ \boldsymbol{\theta}^{(n)} \}$$
(6.28)

La fattorizzazione delle matrici è fatta con la decomposizione PLU. Le matrici ottenute dalla decomposizione sono salvate e riutilizzate ad ogni passo, essendo il problema lineare.

Le condizioni al contorno di imposizione della temperatura vengono imposte azzerando le righe associate all'equazione di equilibrio del nodo da vincolare e ponendo un 1 in corrispondenza della diagonale. Ciò equivale ad aggiungere un'equazione di vincolo che impone $\theta_k^{(n+1)} = \theta_k^{(n)}$. Basta quindi imporre la temperatura voluta nei nodi in cui la temperatura è fissata fin dall'inizio. Nelle analisi peridinamiche di questo caso questa imposizione viene fatta per le prime 3 righe e per le ultime 3.

L'asta analizzata è lunga l = 0.1 m, ha sezione $A = 0.0001 \text{ m}^2$, densità $\rho = 7800 \text{ kg/m}^3$, calore specifico c = 502.08 J/(kg K) e conducibilità termica k = 50 W/(m K). Il tempo finale delle integrazioni è 500 secondi con un passo di integrazione temporale di 10 secondi nelle integrazioni implicite, e un passo stabile per le integrazioni esplicite. Il raggio dell'orizzonte δ è stato fissato pari a 3 volte la spaziatura Δx .

Le analisi vengono ripetute per diverse discretizzazioni spaziali sempre più fitte fino al raggiungimento della convergenza alla teoria classica (δ -convergence). La

numero nodi	tempo classica	tempo peridinamica	errore
10	$78.505~\mathrm{s}$	$101.517~{\rm s}$	29.314%
50	$78.635\mathrm{s}$	$83.665~\mathrm{s}$	6.396%
100	$78.639\mathrm{s}$	$81.136 \mathrm{~s}$	3.175%
200	$78.640\mathrm{s}$	$79.843~\mathrm{s}$	1.530%
500	$78.640\mathrm{s}$	$79.124~\mathrm{s}$	0.616%
1000	$78.640 \mathrm{\ s}$	$78.883\mathrm{s}$	0.309%

6.4 Test tridimensionale in Peridigm del modello di Agwai

Tabella 6.1: Tempo a raggiungere $50^{\circ}C$ nel punto centrale dell'asta per
integrazioni implicite classiche e peridinamiche

convergenza viene analizzata valutando l'errore relativo del risultato peridinamico rispetto al risultato della teoria classica sul tempo necessario al punto centrale dell'asta a raggiungere la temperatura di 50°C. Vengono riportati in tabella 6.1 i soli risultati relativi all'integrazione implicita, in quanto molto più veloce e stabile.

Si può vedere dalla tabella 6.1 che la teoria classica raggiunge la convergenza al valore 78.640 s anche con un basso numero di nodi, mentre la convergenza del problema peridinamico è molto più lenta.

Nelle figure 6.1 viene riportato l'andamento nel tempo della temperatura nel punto centrale dell'asta, e l'andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale, per le analisi con metodo implicito eseguite con discretizzazioni con 10, 100 e 1000 nodi. La convergenza all'aumentare del numero di nodi è evidente anche dalle figure, si nota inoltre che la peridinamica bond-based modella la diffusione termica come più lenta rispetto alla teoria classica.

6.4 Test tridimensionale in Peridigm del modello di Agwai

Il test effettuato nella sezione precedente viene ripetuto con un modello tridimensionale analizzato in Peridigm. I risultati che si ottengono vengono confrontati con i risultati dell'analisi monodimensionale.

Si costruisce un provino prismatico a base quadrata con lati di 0.01 m (area 0.0001 m^2) e lunghezza l = 1 m. Il provino viene diviso in cubetti di lato 0.001 m, in modo che la lunghezza del prisma sia divisa in 100.

Analogamente ai test della sezione precedente si impostano densità $\rho = 7800 \text{ kg/m}^3$, calore specifico c = 502.08 J/kg e conducibilità termica k = 50 W/(m K). Viene im-





(e) tempo-temperatura punto centrale delle analisi a 1000 nodi

(f) posizione-temperatura istante finale delle analisi a 1000 nodi

Figura 6.1: Andamento nel tempo della temperatura nel punto centrale dell'asta, e andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale, per le analisi con metodo implicito eseguite con discretizzazioni al variare del numero dei nodi.



6.4 Test tridimensionale in Peridigm del modello di Agwai

Figura 6.2: Provino 3d per il test della diffusione con il modello di Agwai. Le zone rosse sono quelle in cui viene imposta la temperatura.

Modello	tempo a 50°C	errore
1D classico	78.639 s	-
1D peridinamico	81.136 s	3.175%
3D Peridigm	88.789 s	12.907%

Tabella 6.2: Tempo in s a raggiungere 50°C nel punto centrale dell'asta per integrazione del modello tridimensionale in Peridigm e dei modelli monodimensionali classico e peridinamico

posta una temperatura di 100°C agli estremi e una temperatura iniziale del prisma parti a 0°C. La temperatura agli estremi è imposta in zone 3 volte il lato del cubo.

Nella figura 6.2 viene mostrato il provino costruito.

L'integrazione viene fatta con il metodo di Eulero esplicito già integrato in Peridigm, il passo temporale scelto viene posto uguale alla metà di quello critico calcolato con il metodo della sezione 3.2.3.

Nella figura 6.3 viene mostrato l'andamento nel tempo della temperatura nel punto centrale dell'asta per l'analisi tridimensionale fatta con Peridigm e per le analisi monodimensionali peridinamica e classica con lunghezza divisa in 100 nodi.

Nella tabella 6.2, viene mostrato il confronto tra i valori del tempo necessario al punto centrale a raggiungere 50°C.

Si nota che la differenza con la teoria classica nell'analisi con Peridigm è ancora più marcata che nelle analisi monodimensionali. Infatti il provino sembra meno conduttivo rispetto al risultato della teoria classica. 6 Analisi dei modelli di diffusione termica



Figura 6.3: Andamento nel tempo della temperatura nel punto centrale dell'asta divisa in lunghezza in 100 nodi, per analisi monodimensionali classica e peridinamica e tridimensionale peridinamica

Si ipotizza che questo sia dovuto ad effetti di superficie simili agli effetti mostrati nella sezione 4.6 per il modello elastico. Il motivo di questo è che le costanti della microconduttività sono state calcolate per un intorno sferico, ma per i punti in prossimità della superficie questa ipotesi non è valida.

6.5 Test della conduttività in un prisma con Peridigm

Nella sezione precedente si è supposto che la differenza nei risultati della simulazione della diffusione tra il modello classico e il modello tridimensionale in Peridigm fosse dovuta ad effetti di superficie.

Gli effetti di superficie devono, teoricamente, tendere a sparire con l'infittimento della discretizzazione. In questa sezione verrà calcolata la conduttività da test effettuati con Peridigm con modelli con infittimento crescente, e confrontata con la conduttività di input.

Viene costruito un prisma a base quadrata con lati di 0.01 m (area 0.0001 m²) e lunghezza l = 0.03 m. Si impostano densità massica $\rho = 7800 \text{ kg/m}^3$, calore specifico c = 502.08 J/kg e conducibilità termica k = 50 W/(m K). A un estremo del prisma si impone una temperatura costante di $T_1 = 0^{\circ}$ C, all'altro estremo si impone una temperatura costante di $T_2 = 100^{\circ}$ C.

Il tempo di analisi impostato è tale da fare esaurire tutti i transitori.

Usando la legge di Fourier per il caso monodimensionale stazionario, come questo, si ottiene che la potenza termica per unità di area Φ che va da un estremo all'altro è uguale a:

$$\Phi = k \frac{T_2 - T_1}{l} \tag{6.29}$$

Per calcolare la conduttività viene misurata la potenza termica per unità di area che da un estremo fluisce all'altro estremo nell'analisi peridinamica a transitori esauriti e confrontata con la potenza termica per unità di area del caso classico.

Usando il teorema di Gauss nel caso scalare, si può dire che la potenza termica passante per la superficie di base del prisma, posta fuori dalla zona in cui la temperatura è vincolata di dominio \mathcal{R}_c , è uguale all'integrale della potenza termica specifica entrante sul volume della zona vincolata.

La potenza termica trasmessa da un estremo all'altro viene quindi calcolata facendo la sommatoria pesata per i volumetti della potenza termica specifica nei nodi appartenenti al dominio \mathcal{R}_c . Dividendo questo valore per l'area della sezione del prisma si ottiene Φ , e dall'equazione 6.29 si ottiene la stima della conduttività k.

Verrà misurata la conduttività per analisi con il lato di base discretizzato con numero di nodi crescente da 3 a 21.

Nella figura 6.4 viene mostrato il provino usato in questa sezione per una discretizzazione del lato di base in 21 nodi.

La figura 6.6 mostra il rapporto tra conducibilità termica misurata e conducibilità termica teorica per infittimento crescente della mesh.

Come si può vedere la conducibilità misurata tende alla conducibilità teorica all'infittirsi della mesh, ma per arrivare a temperatura si richiederebbe un infittimento della mesh proibitivo.

In un'analisi di δ -convergence si può dire quindi che i risultati dati dal modello bond-based termico tendono a quelli che si possono ottenere usando la teoria classica al tendere a zero del raggio dell'orizzonte.

Al fine di riprodurre al meglio il fenomeno della diffusione, è dunque necessario sviluppare un nuovo modello, o utilizzare un modello correspondence come quello mostrato in sezione 6.2.

6 Analisi dei modelli di diffusione termica



Figura 6.4: Provino per il test della conduttività con il modello di Agwai. Le zone rosse sono quelle in cui viene imposta la temperatura.

6.6 Sviluppo di un fattore correttivo nel modello di Agwai e test della conduttività

In questa sezione si propone di correggere la microconduttività calcolata da Madenci e Oterkus con un fattore correttivo che preveda la discretizzazione dell'integrale, e il fatto che il dominio sferico può essere troncato dalla superficie. Questo viene fatto al fine di migliorare le caratteristiche di convergenza del modello di Agwai testato nella sezione precendente.

Riprendendo il metodo per calcolare $\kappa_1^{(3D)}$ teorico di sezione 6.1.1, si discretizza l'integrale in equazione 6.8:

$$Z(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\tilde{\kappa}_1^{(3D)} \sum_i |\mathbf{x}_i \in \mathcal{H}\frac{(x_i' + y_i' + z_i')^2}{2|\boldsymbol{\xi}_i|} dV_{\boldsymbol{\xi}_i}$$
(6.30)

Uguagliando il potenziale termico nel caso teorico e nel caso discretizzato si ottiene una relazione tra $\kappa_1^{(3D)}$ del caso teorico e $\tilde{\kappa}_1^{(3D)}$ del caso discretizzato:

$$\tilde{\kappa}_{1}^{(3D)} = \frac{\pi \delta^{4}}{4\sum_{i} |\mathbf{x}_{i} \in \mathcal{H}\frac{(x_{i}'+y_{i}'+z_{i}')^{2}}{2|\boldsymbol{\xi}_{i}|} dV_{\boldsymbol{\xi}_{i}}} \kappa_{1}^{(3D)} = TCF\kappa_{1}^{(3D)}$$
(6.31)

6.6 Sviluppo di un fattore correttivo nel modello di Agwai e test della conduttività



Figura 6.5: Rapporto tra la conduttività misurata e quella teorica al variare del numero di nodi al lato di base, nelle analisi con modello di Agwai

6 Analisi dei modelli di diffusione termica



Figura 6.6: Rapporto tra la conduttività misurata e quella teorica al variare del numero di nodi al lato di base, nelle analisi con modello di Agwai con TCF

dove TCF è chiamato fattore di correzione termico (Thermal Correction Factor).

Il fattore di correzione termico ha valore diverso a seconda della posizione, in particolare risulterà elevato per i nodi vicini alla superficie, in cui la sommatoria viene troncata dall'assenza di nodi. Nella simulazione si usa dunque $\tilde{\kappa}_1^{(3D)} = TCF\kappa_1^{(3D)}$ al posto del valoe teorico usato nella sezione precendente.

Si nota che a causa dell'aumento della microconduttività si potrebbero riscontrare problemi di instabilità numerica. Potrebbe essere necessario usare un fattore di sicurezza sul time-step per evitare tale possibilità.

Una volta implementato il fattore di correzione termico in Peridigm, vengono avviate le analisi fatte nella sezione precedente.

La figura 6.6 mostra il rapporto tra conducibilità termica misurata per il modello di Agwai base e con fattore di correzione per infittimento crescente della mesh.

Dalla figura si può notare che la convergenza "viene dall'alto", il provino si comporta come se fosse più conduttivo di quanto atteso.
6.7 Test monodimensionale della soppressione dei modi di hourglass nel modello correspondence

Nonostante i valori di conduttività misurati con il fattore di correzione siano più vicini al valore atteso, la convergenza non è più veloce rispetto alle analisi senza fattore di correzione, e sembra tendere asintoticamente ad un valore errato. Inoltre si è riscontrata un'instabilità numerica nel test in cui il lato di base era stato discretizzato in 3 nodi.

Si ribadisce dunque la necessità di sviluppare nuovi modelli peridinamici di diffusione, o implementare un modello correspondence come quello mostrato in sezione 6.2. L'implementazione del modello correspondence non è stata fatta in Peridigm per mancanza di tempo, ma si prevede che il modello correspondence di diffusione sappia riprodurre adeguatamente la conduttività, analogamente a quanto visto nei modelli elastici correspondence in sezione 4.6.

6.7 Test monodimensionale della soppressione dei modi di hourglass nel modello correspondence

In questa sezione viene mostrato il fenomeno dei modi di hourglass nel modello termico state-based, e viene dimostrata l'efficacia del metodo di controllo dei modi di hourglass proposto nella sezione 6.2.1 attraverso l'implementazione di un problema monodimensionale in Python.

Il gradiente della temperatura può essere scritto come combinazione lineare delle temperature dei nodi vicini, data la linearità della sua definizione. Questa proprietà si estende anche allo stesso heat flow state usando l'equazione 6.13.

Anche la parte di heat flow state dovuta alla soppressione dei modi di hourglass è esprimibile come combinazione lineare delle temperature dei nodi vicini.

Dunque l'integrazione esplicita ed implicita del problema termico state-based è fatta usando le equazioni 6.26 e 6.28, in cui la matrice $[\mathbf{a}]$ è definita diversamente.

Le analisi vengono fatte sulla stessa asta della sezione 6.3, con le stesse condizioni al contorno e la stessa durata ed intervallo temporale. L'asta è discretizzata in 500 nodi.

Si mostra in figura 6.7a l'andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale per un'analisi con il modello state-based senza controllo dei modi di hourglass.

Si vede benissimo che la soluzione peridinamica soffre di vibrazioni nello spazio dovute ai modi di hourglass del gradiente della temperatura.

In figura 6.7b si mostra l'andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale per un'analisi con il modello state-based usando un coefficiente di hourglass

di 0.01. Si nota che sono presenti forti vibrazioni, ma si sono ridotte rispetto a quelle in figura 6.7a.

In figura 6.7c è stato usato un coefficiente di hourglass di 0.1. Si nota che le vibrazioni sono ancora presenti, ma si sono ridotte notevolmente rispetto a quelle in figura 6.7a. Le vibrazioni sono ancora estese su tutto il dominio spaziale.

Aumentando ancor di più il coefficiente di hourglass a 1.0 le vibrazioni spariscono nella parte centrale dell'asta rimanendo solo ai bordi in cui il gradiente di temperatura è più alto (6.7d).

Aumentando il coefficiente di hourglass fino a 100.0, si arriva ad un risultato in cui le vibrazioni non sono percebili dal grafico (6.7e), neanche nelle zone ad altro gradiente di temperatura.

Se viene aumentato ulteriormente fino a 10000.0, si nota che, anche se le vibrazioni non sono più presenti, la soluzione comincia a scostarsi dai casi con coefficienti minori. Il contributo di heat flow dovuto alla soppressione dei modi di hourglass crea un disturbo non fisico sul risultato finale.

In figura 6.8 viene riportato il confronto diretto di tutti gli andamenti nello spazio per coefficienti di hourglass crescenti. Da questa figura si può meglio apprezzare il miglioramento ottenuto all'aumentare di C_{hg} , e l'errore causato per C_{hg} eccessivi.

Si è dimostrato quindi che il metodo di soppressione dei modi hourglass nel problema termico proposto in sezione 6.2.1 funziona, a patto di scegliere il giusto coefficiente di hourglass.

6.8 Nota implementativa dei modelli termomeccanici in Peridigm

Peridigm è stato modificato per gestire i modelli termomeccanici con più versatilità.

I modelli di materiali termomeccanici sono stati costruiti con delle nuove classi che derivano da una classe termica che fornisce il modello con cui viene calcolato l' heat flow state e da una classe meccanica qualsiasi che fornisce il modello meccanico con cui viene calcolato il force state.

Come accade per le classi dei modelli meccanici, le classi dei modelli termici derivano da una classe base termica in cui sono dichiarate le funzioni virtuali.

La classe del modello termomeccanico sfrutta le funzioni definite nelle classi dei modelli termico e meccanico da cui deriva, che possono essere qualsiasi (per esempio elastico o elasto-plastico oppure bond-based o state-based)



6.8 Nota implementativa dei modelli termomeccanici in Peridigm

Figura 6.7: andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale per analisi con il modello state-based con diversi coefficiente di hourglass

6 Analisi dei modelli di diffusione termica



Figura 6.8: confronto diretto dell'andamento della temperatura nella lunghezza all'istante finale per analisi con il modello state-based con diversi coefficiente di hourglass

6.8 Nota implementativa dei modelli termomeccanici in Peridigm



Figura 6.9: Schema implementativo dei modelli termomeccanici in Peridigm

In figura 6.9 viene mostrato lo schema di derivazione delle classi dei modelli di materiali e delle funzioni interne *computeHeatFlow*, *computeForceState* (e *computeCauchyStress* se correspondence) per calcolare il force state e l'heat flow state peridinamici nella classe termomeccanica.

Con questo schema, sono stati sviluppati diversi modelli termomeccanici, ad esempio uno sul modello meccanico elastoplastico correspondence di Johnson-Cook e sul modello di diffusione termica bond-based.

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici

In questo capitolo viene mostrato l'approccio peridinamico alla viscoelasticità dei materiali.

In letteratura la formulazione di un modello completo peridinamico state-based viscoelastico si deve a Mitchell [43]. Il modello sviluppato è un modello statebased ordinario che si basa sulla struttura dello Standard Linear Solid, ovvero un modello monodimensionale classico di viscoelasticità che verrà spiegato nella prossima sezione. Weckner in [72] ha presentato un altro modello di tipo bondbased con forze peridinamiche di smorzamento proporzionali alla velocità relativa tra i punti. L'ha applicato solo allo studio della risposta viscoelastica di una barra monodimensionale infinita dimostrando che la risposta del modello peridinamico da lui sviluppato converge alla risposta del modello classico.

Lo sviluppo di un modello viscoelastico correspondence non è stato individuato in letteratura. Tuttavia la semplicità nel correlare modelli della teoria classica con modelli peridinamici correspondence rende immediata l'implementazione di una classe di modelli viscoelastici correspondence. Questa implementazione verrà mostrata in questo capitolo.

Nella prima sezione viene fatto un breve riassunto dell'approccio alla viscoelasticità nella teoria classica, con riferimento a Simo e Hughes [65]. Si tratteranno prima i modelli viscoelastici unidimensionali e successivamente si mostrerà l'estensione ai legami costitutivi isotropi tridimensionali.

Nella seconda sezione verrà mostrato l'approccio usato da Mitchell per lo sviluppo del modello state-based ordinario viscoelastico.

Nella terza sezione si riporta lo sviluppo di un modello peridinamico correspondence viscoelastico basato sull'approccio descritto da Simo e Hughes.

Nella quarta sezione vengono mostrate le note implementative usate al fine di includere la viscosità anche in modelli elastoplastici.

Nella quinta sezione si analizza la risposta in frequenza del modello viscoelastico standard, al fine di comprenderne l'azione smorzante.

7.1 Modello classico di viscoelasticità



Figura 7.1: Schema del modello viscoelastico Standard Linear Solid

7.1 Modello classico di viscoelasticità

In questa sezione viene riproposto l'approccio mostrato da Simo e Hughes [65] nella descrizione dei modelli di legami costitutivi viscoelastici applicati al problema monodimensionale e tridimensionale (per piccoli spostamenti), e al problema dell'integrazione nel tempo del modello.

7.1.1 Standard Linear Solid monodimensionale

Il modello monodimensionale più semplice, in grado di riprodurre i due fenomeni principali della viscoelasticità (*creep* e *relaxation*), viene chiamato *Standard Linear Solid.* La sua struttura è mostrata in figura 7.1. Questa struttura è composta da una molla, di rigidezza E_{∞} , in parallelo con un elemento di Maxwell, ovvero una struttura composta da una molla, di rigidezza E_b , e uno smorzatore lineare (*dashpot*) con coefficiente di smorzamento η , messi in serie. Le costanti E_{∞} ed η devono essere maggiori di zero.

Si definiscono con ε e σ la deformazione e lo sforzo totali ai capi della struttura. Si definisce con α la deformazione ai capi del dashpot (deformazione viscosa). Lo sforzo totale può dunque essere espresso come:

$$\sigma = \sigma_{\infty} + \sigma_v = E_{\infty}\varepsilon + \sigma_v \tag{7.1}$$

In cui σ_{∞} è lo sforzo nel ramo puramente elastico e σ_v è lo sforzo nel ramo dell'elemento viscoso.

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici

Lo sforzo σ_v è lo stesso in entrambi gli elementi del ramo viscoso, e dunque può essere espresso nei due modi che seguono:

$$\sigma_v = E_b(\varepsilon - \alpha) = \eta \dot{\alpha} \tag{7.2}$$

Ciò permette di scrivere una legge di evoluzione della deformazione viscosa, che in questo schema si comporta come una variabile interna.

$$\dot{\alpha} + \frac{1}{\tau}\alpha = \frac{1}{\tau}\varepsilon\tag{7.3}$$

in cui τ , chiamato tempo di rilassamento (*relaxation time*), è definito:

$$\tau = \frac{\eta}{E_b} \tag{7.4}$$

Si può assumere che la deformazione viscosa tende a zero al tendere a meno infinito del tempo. La legge di evoluzione deve sottostare alla seguente condizione iniziale asintotica:

$$\lim_{t \to -\infty} \alpha(t) = 0 \tag{7.5}$$

L'equazione del legame costitutivo può essere scritta come:

$$\sigma = E_0 \varepsilon - E_b \alpha \tag{7.6}$$

in E_0 è la somma di E_{∞} ed E_b , e viene chiamato modulo iniziale (*Initial modulus*).

Si può notare che quando E_b è infinito, il modello Standard Linear Solid degenera in un modello di Kelvin-Voigt, in cui una molla è messa in parallelo con uno smorzatore. Questo modello è in grado di riprodurre il fenomeno del creep, ma non è in grado di riprodurre realisticamente il fenomeno del rilassamento.

Quando invece E_{∞} è nullo, il modello Standard Linear Solid degenera nel modello di Maxwell, composto da un molla messa in serie ad uno smorzatore. Questo modello non è in grado di riprodurre il fenomeno del creep, in quanto una deformazione imposta costante tende a tempo infinito a generare uno sforzo nullo. Il modello di Maxwell è labile a frequenze nulle.

Il modello SLS può essere visto come un modello di Maxwell messo in parallelo ad una molla elastica.



Figura 7.2: Schema del modello generalizzato viscoelastico monodimensionale

7.1.2 Modello generalizzato monodimensionale

Il modello generalizzato è un modello più complesso di legame costitutivo viscoelastico la cui struttura è composta da una molla di modulo E_{∞} e tanti elementi di Maxwell in parallelo tra loro. Lo schema è mostrato in figura 7.2.

In analogia con il modello Standard Linear Solid, il legame costitutivo può essere espresso come:

$$\sigma = E_0 \varepsilon - \sum_i \left(E_i \alpha_i \right) \tag{7.7}$$

dove E_i è la rigidezza della molla nel generico elemento di Maxwell, e α_i la deformazione viscosa in quell'elemento. E_0 è il modulo iniziale, somma di tutte le rigidezze nella struttura.

L'evoluzione delle variabili interne (deformazioni viscose) α_i è descritta dalle seguenti leggi di evoluzione:

$$\begin{cases} \dot{\alpha}_i + \frac{1}{\tau_i} \alpha_i = \frac{1}{\tau_i} \varepsilon\\ \lim_{t \to -\infty} \alpha_i(t) = 0 \end{cases}$$
(7.8)

in cui il generico τ_i è definito come $\frac{\eta_i}{E_i}$

Si può ottenere questo legame costitutivo anche tramite la derivazione della funzione energia libera ψ rispetto alla deformazione ε , in cui ψ è definita come

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici

l'energia elastica contenuta in tutte le molle:

$$\psi(\varepsilon, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2} E_{\infty} \varepsilon^2 + \sum_i \frac{1}{2} E_i (\varepsilon - \alpha_i)^2 \qquad \sigma(\varepsilon, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{\partial \psi(\varepsilon, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \varepsilon} \qquad (7.9)$$

La funzione di dissipazione è ottenibile tramite la derivazione di ψ rispetto alle variabili interne α_i (dette *back-strain*):

$$D(\varepsilon, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) = -\sum_{i} \frac{\partial \psi(\varepsilon, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_{i}} \dot{\alpha}_{i} = \sum_{i} \sigma_{v_{i}} \dot{\alpha}_{i} = \sum_{i} \eta_{i} \dot{\alpha_{i}}^{2}$$
(7.10)

Essendo una somma di quadrati la funzione di dissipazione non è mai negativa; il principio termodinamico di Clausius è dunque rispettato.

Formulazione alternativa

Si mostra anche una formulazione alternativa del legame costitutivo in cui le variabili interne α_i sono sostituite da altre variabili interne q_i definite come:

$$q_i = E_i \alpha_i \tag{7.11}$$

Il legame costitutivo viscoelastico generalizzato diventa:

$$\sigma = \frac{\partial W^0}{\partial \varepsilon} - \sum_i q_i \tag{7.12}$$

in cui $W^0 = \frac{1}{2}E_0\varepsilon^2$.

in cui le leggi di evoluzione sono definite come segue:

$$\begin{cases} \dot{q}_i + \frac{1}{\tau_i} q_i = \frac{\gamma_i}{\tau_i} \frac{\partial W^0}{\partial \varepsilon} \\ \lim_{t \to -\infty} q_i(t) = 0 \end{cases}$$
(7.13)

dove γ_i è il rapporto tra E_i ed E_0 e τ_i è il tempo di rilassamento relativo al ramo viscoso i.

7.1.3 Modello generalizzato tridimensionale isotropo per cinematica linearizzata

Il modello viscoelastico isotropo mostrato da Simo e Hughes applica la viscosità solo alla parte deviatorica della deformazione. Questo perchè i materiali polime-

rici a cui vengono solitamente applicati i modelli viscoelastici hanno una viscosità volumetrica trascurabile.

La viscosità volumetrica è comunque applicabile usando un semplice modello monodimensionale applicato allo sforzo idrostatico ed alla deformazione volumetrica.

Si definisce con ε il tensore delle piccole deformazioni, e con ε_d la sua parte deviatorica:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_d \tag{7.14}$$

La densità di energia elastica iniziale W^0 è definita come la densità di energia elastica nell'ipotesi di variabili interne nulle. Essa è divisibile nelle parti isotrope e deviatoriche:

$$W^0 = W^0_d(\varepsilon_d) + W^0_h(tr(\varepsilon)) \tag{7.15}$$

Analogamente all'equazione 7.12 della formulazione alternativa del modello generalizzato, il tensore degli sforzi σ viene determinato da:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial W^0}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} - \sum_i \boldsymbol{q}_i = \boldsymbol{\sigma}_0 - \sum_i \boldsymbol{q}_i \tag{7.16}$$

dove σ_0 è il tensore degli sforzi ottenuto nell'ipotesi che le variabili interne non si evolvano (*trial stress*), e dove q_i sono tensori del secondo ordine che fungono da variabili interne.

L'evoluzione delle variabili interne viene determinata tramite leggi analoghe alle equazioni 7.17:

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{q}}_{i} + \frac{1}{\tau_{i}} \boldsymbol{q}_{i} = \frac{\gamma_{i}}{\tau_{i}} \frac{\partial W_{d}^{0}}{\partial \varepsilon_{d}} = \frac{\gamma_{i}}{\tau_{i}} \boldsymbol{s}_{0} \\ \lim_{t \to -\infty} \boldsymbol{q}_{i}(t) = 0 \end{cases}$$
(7.17)

dove s_0 è lo sforzo deviatorico "iniziale".

Usando la condizione al contorno all'infinito, si ottiene la soluzione della legge di evoluzione con un integrale di convoluzione:

$$\boldsymbol{q}_{i}(t) = \frac{\gamma_{i}}{\tau_{i}} \int_{-\infty}^{t} e^{-\frac{t-s}{\tau_{i}}} \boldsymbol{s}_{0} ds$$
(7.18)

L'integrazione applicata alla soluzione numerica porta a definire i tensori delle variabili interne q_i nel nuovo istante $t^{(n+1)}$ in funzione delle variabili interne a $t^{(n)}$:

$$\boldsymbol{q}_{i}^{(n+1)} = \gamma_{i} \boldsymbol{s}_{0}^{(n)} (1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{i}}}) + \boldsymbol{q}_{i}^{(n)} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{i}}} + \beta_{i} \gamma_{i} (\boldsymbol{s}_{0}^{(n+1)} - \boldsymbol{s}_{0}^{(n)})$$
(7.19)

129

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici



Figura 7.3: Schema del modello viscoelastico ordinario Standard Linear Solid

dove $\beta_i = 1 - \frac{\tau_i}{\Delta t} (1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_i}})$, τ_i è il tempo di rilassamento relativo al ramo viscoso i, e γ_i è il rapporto tra il modulo a taglio dello stesso ramo e il modulo a taglio del ramo elastico del modello generalizzato.

Si fa notare che in questo modello le variabili interne sono tensori e la forzante dell'equazione di evoluzione è relativa solo al comportamento deviatorico del materiale.

7.2 Modello ordinario viscoelastico di Mitchell

Il modello viscoelastico state-based ordinario sviluppato da Mitchell [43] deriva direttamente dal modello Linear Peridynamic Solid descritto in sezione 4.2. Come lo stesso LPS si basa sulla divisione dell'extension state \underline{e} nelle parti isotropa \underline{e}_i e deviatorica \underline{e}_d , e sulla divisione della densità di energia di deformazione e dello scalar force state nella parte volumetrica e nella parte deviatorica.

A differenza del modello LPS, la risposta della parte deviatorica dello scalar force state non è direttamente proporzionale all'extension state deviatorico. Scalar force state ed extension state deviatorici sono collegati tra loro tramite un modello di viscoelasticità SLS monodimensionale, come quello descritto nella sezione 7.1.1.

Nella figura 7.3 si mostra lo schema alla base del modello di Mitchell. L'extension state deviatorico è ulteriormente diviso nel *back extension state* \underline{e}_{db} , relativo all'estensione al capo dello smorzatore di modulo η_b . Si definisce la densità di energia elastica deviatorica immagazzinata come:

$$W_d = \frac{1}{2}\alpha_{\infty}(\underline{\omega}\underline{e}_d) \bullet \underline{e}_d + \frac{1}{2}\alpha_b(\underline{\omega}(\underline{e}_d - \underline{e}_{db})) \bullet (\underline{e}_d - \underline{e}_{db})$$
(7.20)

La densità di energia elastica isotropa rimane invece la stessa del modello LPS, essendo il modello di viscoelasticità applicato solo al comportamento deviatorico. La derivata di W_d rispetto all'extension state deviatorico fornisce lo scalar force state deviatorico:

$$\frac{\partial W_d}{\partial \underline{e}_d} = \underline{t}_d = \alpha_0 \underline{\omega} \underline{e}_d - \alpha_b \underline{\omega} \underline{e}_{db} \tag{7.21}$$

dove $\alpha_0 = \alpha_\infty + \alpha$.

Mitchell sceglie di imporre che α_0 sia uguale al valore di α usato nel modello LPS. Questa scelta equivale ad imporre che il modulo elastico durante una deformazione quasi istantanea sia esattamente uguale al modulo elastico statico usato nel modello elastico, ma che sia minore per una deformazione lenta. Per questo motivo in questa tesi viene imposto che α_{∞} nel modello di Mitchell sia lo stesso α del modello LPS, mentre viene imposto che α_b sia una frazione di α_{∞} .

$$\alpha_{\infty} = \frac{15G}{m_w} \qquad \alpha_b = \gamma_b \alpha_{\infty} \qquad G_b = \gamma_b G \tag{7.22}$$

La legge di evoluzione viene ottenuta dalla duplice forma dell'espressione della parte dello scalar force state deviatorico dovuta al ramo viscoso dello schema:

$$\underline{t}_{db} = \eta_b \underline{\dot{e}}_{db} = \alpha_b (\underline{e}_d - \underline{e}_{db}) \tag{7.23}$$

$$\underline{\dot{e}}_{db} + \frac{1}{\tau_b} \underline{e}_{db} = \frac{1}{\tau_b} \underline{e}_d \tag{7.24}$$

dove $\tau_b = \eta_b/\alpha_b$. Il back extension state \underline{e}_{db} è quindi la variabile interna del modello di Mitchell, e come negli altri modelli viscoelastici presentati deve rispettare la seguente condizione al contorno:

$$\lim_{t \to -\infty} \underline{e}_{db}(t) = \underline{0} \tag{7.25}$$

Usando la condizione al contorno, si ottiene la soluzione della legge di evoluzione con un integrale di convoluzione:

$$\underline{e}_{db}(t) = \frac{1}{\tau_b} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{t-s}{\tau_b}} \underline{e}_d(s) ds$$
(7.26)

131

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici

L'integrazione applicata alla soluzione numerica porta a definire il back extension state nel nuovo istante $t^{(n+1)}$ in funzione degli extension state a $t^{(n)}$:

$$\underline{e}_{db}^{(n+1)} = \underline{e}_d^{(n)} (1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_b}}) + \underline{e}_{db}^{(n)} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_b}} + \beta_b \Delta \underline{e}_d$$
(7.27)

dove $\beta_b = 1 - \frac{\tau}{\Delta t} (1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau}})$

Ottenuto il back extension strain si ottiene lo scalar force state deviatorico dall'equazione 7.21 applicata all'istante $t^{(n+1)}$.

Si fa notare che questo modello è facilmente estendibile ad un modello di viscoelasticità generalizzato come quello della sezione 7.1.2. Ciò richiederebbe però una maggior spesa di memoria nell'analisi a causa della necessità di memorizzare passo dopo passo più back extension state associati alle diverse molle.

Il modello descritto in questa sezione è già presente in Peridigm, ma è stato modificato al fine di consentire future analisi con danno e al fine di poter essere usato anche affiancato a legami elastoplastici, come mostrato in sezione 7.4

Mitchell ha implementato successivamente anche un modello simile al modello PALS della sezione 4.3.2, per modellare materiali viscoelastici [37], ma in questa tesi non verrà presa in considerazione.

7.3 Modello correspondence viscoelastico

In questa sezione si mostra come è stato sviluppato ed implementato un modello peridinamico viscoelastico di tipo correspondence in questo lavoro di tesi.

Il modello descritto deriva dalla degenerazione del modello generalizzato tridimensionale nel modello Standard Linear Solid, quindi il modello contiene un solo tensore di variabili interne q. L'estensione dell'implementazione al caso generalizzato è immediata, ma in questa tesi non è necessaria.

Nei legami costitutivi correspondence si integra il tensore degli sforzi di Piola-Kirchhoff usando l'algoritmo di Flanagan-Taylor. In questa tecnica di integrazione degli sforzi per deformazioni finite, si trasforma il tensore di Piola-Kirchhoff e il gradiente di deformazione in tensori per cui vale il principio di indifferenza del sistema di riferimento, in modo da poter applicare il legame costitutivo senza problemi.

Lo stesso principio viene usato per calcolare gli sforzi del modello viscoelastico.

Si definisce il tensore degli sforzi di Cauchy deviatorico non ruotato iniziale \hat{s}_0 come la somma del tensore degli sforzi di Cauchy deviatorico non ruotato puramente elastico \hat{s} e di quello relativo al ramo viscoso \hat{s}_b dello schema del Standard Linear Solid. Lo sforzo \hat{s}_b si somma allo sforzo elastico nel caso in cui le variabili interne viscoelastiche siano nulle. Imponerre che le proprietà elastiche della molla del ramo viscoso siano proporzionali a quelle del ramo elastico tramite una costante $\gamma_b = G_b/G_\infty$ (G_∞ e G_b sono il modulo a taglio statico e il modulo a taglio della molla nel ramo viscoso), implica che il tensore \hat{s}_b sia proporzionale al tensore \hat{s} e quindi che:

$$\hat{\mathbf{s}}_0 = \hat{\mathbf{s}}(1+\gamma_b) \tag{7.28}$$

Una volta integrato lo sforzo elastico con l'algoritmo di Flanagan-Taylor, è immediato ottenere il tensore degli sforzi di Cauchy non ruotato iniziale $\hat{\sigma}_0$ dell'equazione 7.16.

$$\hat{\sigma}_{0}^{(n+1)} = \hat{\sigma}^{(n+1)} + \hat{s}_{b}^{(n+1)} = \hat{\sigma}^{(n+1)} + \gamma_{b}\hat{s}^{(n+1)}$$
(7.29)

Avendo ottenuto \hat{s}_0 , le variabili interne q vengono ottenute al nuovo istante integrando la legge di evoluzione con l'equazione 7.19. Infine, lo sforzo di Cauchy non ruotato totale al nuovo istante è ottenuto con l'equazione 7.16.

In seguito, lo sforzo di Cauchy ruotato, il tensore di Piola-Kirchhoff e il force density state vengono ottenuti come spiegato nella sezione 2.4.5.

7.4 Nota implementativa

Il modello viscoelastico correspondence è stato implementato in Peridigm seguendo la teoria spiegata, il modello ordinario (che era già implementato nel programma) è stato modificato al fine di renderlo più versatile.

Nella pratica si è sfruttata l'architettura della struttura in parallelo del modello viscoso. Questo è stato fatto generando una classe base di materiale viscoso, da cui derivano le due classi che simulano il ramo viscoso dello schema di figura 7.1 secondo la formulazione ordinaria e correspondence. Dalle classi "*Material*" in Peridigm si costruiscono oggetti in cui sono memorizzate le caratteristiche del materiale, e da cui calcolare il force state dalla funzione interna *computeForceState*.

Per ottenere i modelli viscoelastici descritti precedentemente, sono state costruite delle ulteriori classi viscoelastiche che derivano dalle nuove classi viscose di base e dalle classi elastiche o elasto-plastiche già esistenti (o già implementate).

In queste nuove classi viscoelastiche lo sforzo (o il force state) viene calcolato prima per il modello elastico e poi per il ramo del modello di Maxwell del modello viscoso.

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici

Questa architettura permette anche di accoppiare la viscoelasticità a qualsiasi altro modello peridinamico, sia esso elastico, elastoplastico o termoelastoplastico.

In caso in cui la viscoelasticità venga accoppiata con un modello inelastico, è necessario far sì che la deformazione ai capi del ramo di Maxwell sia solo la porzione di deformazione elastica.

In figura 7.4 viene mostrato lo schema di derivazione delle classi dei modelli di materiali e delle funzioni interne *computeForceState* (e *computeCauchyStress* se correspondence) per calcolare il force state peridinamico.

7.5 Analisi in frequenza del modello Standard Linear Solid

In questa sezione si analizza la risposta in frequenza del modello SLS monodimensionale alla deformazione, applicando l'approccio di analisi in frequenza mostrato da Christensen in [11].

$$\sigma(s) = H(s)\varepsilon(s) \tag{7.30}$$

Le equazioni nel dominio del tempo che governano la dinamica del SLS sono state ricavate nella sezione 7.1.1, si riportano di seguito nel dominio del tempo e in quello della frequenza.

$$\begin{cases} E_{\infty}\varepsilon + E(\varepsilon - \alpha) = \sigma \\ \eta \dot{\alpha} = E(\varepsilon - \alpha) \end{cases} \qquad \begin{cases} E_{\infty}\varepsilon + E(\varepsilon - \alpha) = \sigma \\ \eta \alpha s = E(\varepsilon - \alpha) \end{cases}$$
(7.31)

Esplicitando α e sostituendolo nella prima equazione si ottiene la seguente trasformazione di trasferimento in forma canonica:

$$H(s) = E_{\infty} \frac{1 + \frac{s}{\omega_0}}{1 + \frac{s}{\omega_P}}$$
(7.32)

dove:

$$\omega_P = \frac{1}{\tau_b} \qquad \qquad \omega_0 = \frac{1}{\tau_b(1+\gamma_b)} \qquad \qquad \tau_b = \frac{\eta_b}{E_b} \qquad \gamma_b = \frac{E_b}{E_\infty} \qquad (7.33)$$

e sono rispettivamente le pulsazioni del polo e dello zero della funzione di trasferimento. Il guadagno della funzione di trasferimento è uguale a E_{∞} .

Essendo $E_b > 0$, la pulsazione del polo è sempre maggiore della pulsazione dello



Figura 7.4: Schema implementativo dei modelli viscoelastici (e viscoelastoplastici) in Peridigm

7 Analisi e implementazione dei modelli viscoelastici



Figura 7.5: Diagramma di Bode del modulo di H(s)

zero, come dimostrato di seguito:

$$\omega_0 = \frac{E_\infty}{\tau(E_\infty + E_b)} = \frac{E_\infty}{(E_\infty + E_b)} \omega_P \tag{7.34}$$

$$E_b > 0 \rightarrow \frac{E_{\infty}}{(E_{\infty} + E_b)} < 1 \rightarrow \omega_P > \omega_0$$
 (7.35)

Nelle figure 7.5 e 7.6 si riporta l'ampiezza e la fase della funzione di trasferimento H in funzione della frequenza f. Queste figure sono state ottenute per $E_{\infty} = 1$, $E_b = 1$ e $\tau_b = 1$.

Dai diagrammi di Bode si ottengono le seguenti conclusioni:

- $f \ll f_P$: La risposta è proporzionale a E_{∞} . La fase è nulla quindi la risposta non presenta nessun ritardo/anticipo ed effetto viscoso.
- $f \gg f_0$: La risposta è proporzionale a $E_0 = E_{\infty} + E_b$. La fase è nulla quindi la risposta non presenta nessun ritardo/anticipo ed effetto viscoso.
- f nell'ordine di grandezza di $f_P e f_0$: L'ampiezza della risposta cresce da E_{∞} ad E_0 . La fase della risposta non è nulla, ed è massima tra f_P ed f_0 . Essendo la risposta fasata rispetto all'ingresso, la risposta avrà un effetto viscoso.



Figura 7.6: Diagramma di Bode della fase di H(s)

Si fa notare quindi che si avrà un effetto viscoso solo in risposta a quegli ingressi di frequenza con ordine di grandezza prossimo alle frequenze del polo e dello zero.

Anche se non è di interesse per questa tesi, si fa notare che un modello generalizzato di ordine n permetterebbe di avere una risposta in frequenza regolabile con la risposta in frequenza del materiale viscoelastico da modellare. La funzione di trasferimento potrà essere regolata modificando le 2n pulsazioni dei poli e degli zeri. Christensen suggerisce un processo sperimentale per determinare il profilo della risposta viscoelastica di un materiale, analizzando il modulo e la fase della risposta al variare della frequenza.

I modelli di danno forniscono il meccanismo con cui nella peridinamica vengono danneggiati i bonds. I bonds nella peridinamica sono i legami tra i diversi punti, attraverso i quali vengono scambiate forze e potenze termiche per unità di volume.

Solitamente il danneggiamento dei bond è irreversibile, e non può essere riparato. L'unico modo in cui sarebbe possibile ristabilire dei bond danneggiati sarebbe attraverso la simulazione dell'auto-riparazione del corpo in cui è avvenuta la rottura, cosa che può avvenire per esempio nella simulazione di tessuti ossei viventi o in materiali auto-riparanti. Un altro modo in cui è possibile ristabilire un'interazione tra due nodi è attraverso un modello di contatto che instaura forze tra diversi corpi che si avvicinano.

Seguendo quanto scritto da Silling e Lehoucq in [64], il danno dei bond può essere incluso in uno stato peridinamico chiamato *Damage state* ϕ , e la densità di energia di un nodo può essere vista come dipendente dal damage state. Il damage state quindi è parte del legame costitutivo del modello di materiale.

$$W = W(\underline{\mathbf{Y}}, \phi) \tag{8.1}$$

A seconda del tipo di legame costitutivo, sono stati sviluppati diversi approcci al danneggiamento dei bonds. Le forze scambiate nei bond dipendono dal danno, e solitamente si assume che quando il danno in un bond raggiunge il valore unitario, la forza (o la potenza termica) scambiata dal bond è nulla. Questo meccanismo è chiamato da Silling *Strong Damage Dependence*.

$$\phi(\boldsymbol{\xi}) = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \underline{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{0}$$

$$(8.2)$$

Alternativamente è possibile formulare una legge di evoluzione del danno, esprimibile con la seguente forma, in cui il danno è inteso come uno scalare che assume qualsiasi valore tra $0~{\rm ed}$ 1:

$$\dot{\underline{\phi}} = \dot{\underline{\phi}}(\underline{\mathbf{Y}}, ...) \tag{8.3}$$

In entrambi i casi il il force state viene diminuiti di un fattore pari al complementare del damage state.

$$\underline{\mathbf{T}} = (\underline{1} - \underline{\phi})\underline{\mathbf{T}}_0 \tag{8.4}$$

Il damage state viene usato anche nella ridefinizione delle altre quantità locali; come esempio si riportano di seguito le ri-definizioni di dilatazione nel modello ordinario e shape tensor nel modello correspondence, ma questa assunzione vale anche per altre quantità come il weighted volume o il gradiente di deformazione.

$$\Theta = \frac{3}{m_w} \left((\underline{1} - \underline{\phi}) \underline{\omega} \underline{e} \right) \bullet \underline{x} \qquad \mathbf{K} = \left((\underline{1} - \underline{\phi}) \underline{\omega} \mathbf{X} \right) * \mathbf{X} \tag{8.5}$$

Il danno locale ϕ_{local} è una misura della severità del danno in un punto, e può essere definito con l'equazione 2.37 che media il danno dei bond, o con altre definizioni di danno locale derivate ad esempio da leggi di evoluzione dalla teoria classica. In alcuni casi la force density viene diminuita di un fattore pari al complementare del danno locale.

$$\underline{\mathbf{T}} = (1 - \phi_{local})(\underline{1} - \underline{\phi})\underline{\mathbf{T}}_0 \quad \rightarrow \quad \underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = (1 - \phi_{local})(1 - \underline{\phi}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle)\underline{\mathbf{T}}_0\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \tag{8.6}$$

Esempi di questi approcci si possono vedere negli articoli di Amani [2] e di Wu [74] in cui viene usato un legame costitutivo con danno locale ottenuto tramite una legge di evoluzione basata sulla teoria classica.

In linea con quasi tutti gli articoli trovati in letteratura, in questa tesi vengono fatte le seguenti ipotesi sul modello di danno:

- Strong Damage Dependence
- Il damage state può assumere solo valori nulli o unitari, quindi il bond può essere intatto o reciso.

Sono reperibili in letteratura molti modelli di danneggiamento, ma il modello di questo tipo più conosciuto ed usato è il modello di allungamento critico (*Critical Stretch*), applicabile alla modellazione di materiali fragili, che verrà spiegato nella prossima sezione.

Un modello più generico, proposto da Warren [71] si basa sulla definizione del tensore di deformazione di Lagrange in un nodo, ed il calcolo della deformazione

equivalente. La rottura dei bond viene imposta quando la deformazione equivalente media tra 2 punti supera un valore di deformazione equivalente critico.

Un interessante modello con base energetica che consente la riproduzione della frattura per materiali duttili è un modello che si basa sul J-integral per trovare il micropotenziale critico a cui rompere un bond. Questo modello è stato sviluppato da Foster in [20] e nella sua tesi di dottorato [19], e verrà mostrato nella sezione 8.2.

Un metodo alternativo per la frattura di materiali duttili è mostrato in [37], ed è basato sul Tearing Parameter Model sviluppato da Wellman in [73].

Breitenfeld, nella sua tesi di dottorato [9], ha introdotto un modello basato sulla CZM (*Cohesive Zone Modeling*).

Il lavoro di Breitenfeld è molto interessante anche nel mostrare che modelli correspondence sono in grado di riprodurre molto bene lo stress intensity factor vicino alle estremità di cricche e le concentrazioni di sforzo in prossimità di intagli. Breitenfeld è stato anche in grado di riprodurre la propagazione quasistatica di cricche di modo I, II e misto concludendo che la peridinamica è in grado di riprodurne il percorso, ma che la propagazione può essere dipendente dall'allineamento della griglia.

Tupek [69] ha sviluppato un approccio per i modelli correspondence in cui il danno locale viene ottenuto tramite l'integrazione di una legge di evoluzione uguale a quella della teoria classica. Il danno di tutti bond collegati ad un nodo viene impostato uguale ad 1 quando il danno locale in un nodo supera un valore critico. Il nodo che ha superato il valore critico di danno viene quindi totalmente staccato dagli altri nodi.

Sono stati usati anche approcci alternativi alla definizione del damage state, si cita per esempio l'articolo di Lipton [34] in cui viene usato un modello bond-based con legame costitutivo non convesso, in modo da generare un legame instabile che provochi l'insorgenza naturale di fratture senza l'uso del damage state. La force density in questo modello è una funzione crescente dell'allungamento del bond fino ad un valore critico, dopo diventa decrescente asintotica a zero.

In questo capitolo viene trattato l'approccio al danneggiamento in generale, con riguardo soprattutto al modello del micropotenziale critico, e alle difficoltà implementative.

La prima sezione illustra il modello di danno dell'allungamento critico, che è già implementato nella versione base di Peridigm. Nella seconda sezione si mostra il modello di micropotenziale critico proposto da Foster, e si spiega come è stato implementato in Peridigm in questo lavoro di tesi.

La terza elenca le difficoltà implementative dell'inclusione del danno in modelli correspondence, e mostra le soluzioni adottate in letteratura, e quella adottata nel lavoro di tesi.

La quarta sezione presenta le prove fatte con il modello di micropotenziale critico che è stato implementato. Le prove mostrano delle difficoltà di modellazione, e ne propongono una soluzione.

Nell'ultima sezione viene riportato uno studio sui risultati di analisi compiute al variare del raggio dell'orizzonte δ e del rapporto m.

8.1 Allungamento critico

Questo modello è stato prima sviluppato da Silling [61] e poi riformulato anche da Madenci ed Oterkus [40].

Si definisce lo *stretch state* (stato peridinamico dell'allungamento):

$$\underline{s} = \frac{|\underline{\mathbf{Y}}| - |\underline{\mathbf{X}}|}{|\underline{\mathbf{X}}|} \tag{8.7}$$

Si impone la rottura del bond quando il suo allungamento supera un valore critico. Una volta che il bond è rotto, non verrà ripristinato neanche se l'allungamento ritorna sotto al valore critico.

$$\underline{s}(\tilde{t})\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \ge s_C \Rightarrow \phi(t \ge \tilde{t})\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1$$
(8.8)

Si fa notare che con questa formulazione si ha rottura solo quando il bond si allunga, ma non quando si accorcia.

Il valore di allungamento critico può essere collegato direttamente all'energy release rate di Griffith G_C .

Silling nel 2005 [61] dimostrò che per un materiale PMB l'allungamento critico vale:

$$s_C = \sqrt{\frac{5G_C}{9K\delta}} \tag{8.9}$$

Mentre Madenci ed Oterkus dimostrarono in [40] che, per il modello elastico ordinario state-based sviluppato da loro, l'allungamento critico per il problema 2D



Figura 8.1: Interpretazione geometrica dell'integrale del micropotenziale dei bond passanti per una porzione infinitesima dS di superficie, equazione 8.12

e 3D vale:

$$s_{C_{2D}} = \sqrt{\frac{G_C}{\left(\frac{6}{\pi}G + \frac{16}{9\pi^2}(K - 2G)\right)\delta}}$$
(8.10)

$$s_{C_{3D}} = \sqrt{\frac{G_C}{\left(3G + \left(\frac{3}{4}\right)^4 \left(K - \frac{5}{3}G\right)\right)\delta}}$$
(8.11)

Le dimostrazioni vengono fatte integrando il micropotenziale di tutti i bond passanti per una porzione infinitesima di una superficie usando il seguente integrale quadruplo:

$$G_C = \int_0^\delta \int_0^{2\pi} \int_z^\delta \int_0^{\cos^{-1}\frac{z}{\xi}} (\underline{w}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle(s_C)) \xi^2 \sin(\phi) d\phi d\xi d\theta dz$$
(8.12)

Il significato delle varie quantità indicate nell'integrale sono visibili in figura 8.1.

Si suppone che l'energia utilizzata per la creazione di una superficie di frattura infinitesima sia l'energia liberata dalla rottura dei bond che attraversano la stessa

superficie.

In questo integrale è stato sostituito il valore di micropotenziale del modello corrispondente, e successivamente è stata fatta l'integrazione che porta alla definizione dell'allungamento critico.

Il modello di allungamento critico è ammissibile per i materiali elasto-fragili, infatti i vari modi di dimostrare la dipendenza di s_C da G_C sono stati fatti utilizzando materiali elastico-lineari.

Si fa notare che nella formula per determinare lo stretch critico appare il raggio dell'orizzonte δ , e che lo stretch critico aumenta al diminuire il raggio δ . Con questo modello è ancora più evidente che l'orizzonte deve essere considerato una proprietà caratteristica del materiale.

Il valore di s_C è stato calcolato su un integrale nel continuo, e non discretizzato come nel caso numerico. Breitenfeld [9] ha dimostrato che integrando numericamente l'integrale di equazione 8.12 usando un s_C ottenuto analiticamente, si ottiene un valore numerico che può essere maggiore di G_C anche dell'11.4% nel caso in cui il rapporto m sia uguale a 2 (l'errore tende a zero all'aumentare di m), mentre la forza di trazione necessaria a creare la superficie di frattura può variare anche del 30.4%.

8.2 Micropotenziale critico

Foster [20] ha sviluppato un modello di danno che può essere usato per riprodurre anche la frattura di materiali non lineari e duttili.

Questo modello si basa sulla definizione del J-integral come energia di deformazione accumulata in una superficie.

Il valore del J-integral porta alla definizione di un micropotenziale critico a cui rompere il bond.

$$\underline{w}(\tilde{t})\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \ge w_C \Rightarrow \phi(t \ge \tilde{t})\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1 \tag{8.13}$$

Analogamente a quanto fatto per trovare l'allungamento critico nell'equazione 8.12, per ottenere il valore del micropotenziale critico viene integrato il micropotenziale di tutti i bond passanti per una superficie infinitesima usando il seguente integrale quadruplo ponendolo uguale al J-integral critico J_C :

$$J_{C} = \int_{0}^{\delta} \int_{0}^{2\pi} \int_{z}^{\delta} \int_{0}^{\cos^{-1}\frac{z}{\xi}} (w_{C})\xi^{2} \sin(\phi) d\phi d\xi d\theta dz$$
(8.14)

143

Imponendo che il micropotenziale raggiunga ovunque il valore critico w_C per ottenere la superficie di frattura, Foster dimostra che il valore di w_C è:

$$w_C = \frac{4J_C}{\pi\delta^4} \tag{8.15}$$

Questo modello di danno è stato implementato in Peridigm in questo lavoro di tesi.

Nella definizione di micropotenziale è incluso il termine $\underline{\mathbf{T}}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle$, ovvero la force density che il nodo vicino effettua sul nodo originale, come mostrato in equazione 2.27 e ripetuto di seguito:

$$\underline{w}[\tilde{t}]\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \underline{w}'[\tilde{t}]\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle = \int_0^{\tilde{t}} (\underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle + \boxed{\underline{\mathbf{T}}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle}) \cdot \dot{\underline{\mathbf{Y}}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle dt$$
(8.16)

Peridigm è stato dunque modificato al fine di riuscire agevolmente ad assegnare valori dal bond ik al bond speculare ki, anche nelle analisi multiprocessore.

Al fine di calcolarlo correttamente nelle analisi multiprocessore, lo stato micropotenziale è stato calcolato usando la procedura descritta nella sezione 3.7.1, che si basa sulla gestione dei bond speculari sviluppata descritta in sezione 3.7.

Si ribadisce nuovamente che l'orizzonte δ è una proprietà caratteristica del materiale, in quanto esprime il grado di non località interno al materiale, e variare il valore dell'orizzonte produce risultati molto diversi.

Infatti, pur essendo il modello del micropotenziale critico energeticamente consistente, si può dimostrare che al diminuire del raggio dell'orizzonte (a parità di tutti gli altri paramentri), in analisi in cui il micropotenziale è monotono crescente nel tempo, la rottura dei bond viene ritardata.

Questo può essere visto facendo un'analisi della dipendenza del micropotenziale e del micropotenziale critico da δ . Il valore di micropotenziale critico è proporzionale a δ^{-4} .

$$w_c \propto \delta^{-4} \tag{8.17}$$

Il micropotenziale, per una funzione di influenza costante, è invece proporzionale a δ^{-3} , come viene dimostrato di seguito nel caso di legami correspondence (ma lo stesso si può dimostrare per gli altri tipi di legame trattati).

$$\mathbf{H} = \int_{\mathcal{H}_{\mathbf{x}}} (\underline{\omega} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \underline{\mathbf{X}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \otimes \underline{\mathbf{X}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle) dV_{\mathbf{x}} \propto \delta^5$$
(8.18)

$$\underline{\mathbf{T}} = \underline{\omega} \mathbf{P}^T \mathbf{H}^{-1} \underline{\mathbf{X}} \propto \delta^{-5} \delta = \delta^{-4}$$
(8.19)

8.2 Micropotenziale critico

$$\underline{w}[\tilde{t}]\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \int_{0}^{\tilde{t}} (\underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle + \underline{\mathbf{T}}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle) \cdot \dot{\underline{\mathbf{Y}}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle dt \propto \delta^{-4} \delta = \delta^{-3}$$
(8.20)

Modelli simili a quello sviluppato da Foster sono stati presentati da Dipasquale in [13] e da Madenci e Oterkus in [41]. Questi metodi tengono conto della discretizzazione dell'integrale del micropotenziale e da questo ottengono un valore di micropotenziale critico corretto. Il valore di micropotenziale critico mostrato in questa sezione è infatti soggetto ad errori nelle analisi numeriche dovuti al fatto che l'integrale non è continuo ma discretizzato.

Dipasquale mostra anche che i metodi basati sul micropotenziale sono in grado di riprodurre abbastanza bene la formazione di fratture mixed-mode, ma non di riprodurle esattamente. Inoltre nota che la frattura nei criteri basati sul micropotenziale è meno sensibile al rapporto m rispetto al criterio dell'allungamento critico.

8.2.1 Applicazione del modello del micropotenziale critico per J-integral critico dipendente dalla temperatura

Le caratteristiche della frattura dipendono fortemente dalla temperatura. Per molti materiali metallici è anche possibile definire una temperatura sotto alla quale il materiale diventa fragile da duttile (*Ductile-To-Brittle Transition* DTBT). Un esempio celebre è il cedimento strutturale che ebbero molte Liberty ships durante la Seconda Guerra Mondiale che fu dovuto proprio all'infragilimento dell'acciaio a basse temperature. Questo infragilimento fu la causa della progressione di cricche in corrispondenza delle saldature nello scafo che portarono a rotture catastrofiche.

Al fine di poter riprodurre questo comportamento, il criterio del micropotenziale critico è stato modificato per poter essere usato anche in analisi in cui la temperatura varia.

Essendo il J-integral critico temperatura-dipendente, anche il micropotenziale critico sarà temperatura-dipendente allo stesso modo:

$$w_C(\theta) = \frac{4J_C(\theta)}{\pi\delta^4} \tag{8.21}$$

Si propone di considerare che un incremento del micropotenziale generi un danneggiamento nel bond pari al rapporto tra l'incremento e il micropotenziale critico alla temperatura. Questo danneggiamento viene chiamato stato peridinamico del micropotenziale adimensionalizzato $\underline{\tilde{w}}$.

Finchè il micropotenziale adimensionalizzato rimane sotto il valore unitario, si considera il bond intatto, e il force state non viene intaccato. Oltre al valore unitario il bond viene reciso e il force state azzerato.

$$\underline{\tilde{w}}(\tilde{t})\langle \boldsymbol{\xi} \rangle \ge 1 \Rightarrow \phi(t \ge \tilde{t})\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = 1 \tag{8.22}$$

Lo stato del micropotenziale adimensionalizzato $\underline{\tilde{w}}$ viene definito come segue:

$$\underline{\tilde{w}}[\tilde{t}]\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \underline{\tilde{w}}'[\tilde{t}]\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle = \int_0^{\tilde{t}} \left(\frac{\underline{\mathbf{T}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle}{w_C(\boldsymbol{\theta}(t))} + \frac{\underline{\mathbf{T}}'\langle -\boldsymbol{\xi} \rangle}{w_C(\boldsymbol{\theta}'(t))} \right) \cdot \underline{\dot{\mathbf{Y}}}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle dt$$
(8.23)

Nell'implementazione pratica che è stata fatta in Peridigm viene usato un approccio equivalente a quello mostrato. La procedura del calcolo del micropotenziale mostrata in sezione 3.7.1 è stata rivista: l'incremento di micropotenziale viene moltiplicato ad ogni passo per il rapporto tra il J-integral critico ad una temperatura di riferimento e il J-integral critico a temperatura attuale. Il micropotenziale totale così ottenuto può quindi essere confrontato con il valore critico del micropotenziale a temperatura di riferimento.

8.3 Problemi nei modelli correspondence

Il danneggiamento nei metodi non locali a particelle avviene in maniera naturale, ma presenta problemi di frammentazione con nodi che si separano completamente dal resto del corpo e tendenze all'interpenetrazione dei nodi nel corpo. Inoltre la superficie di frattura non viene esattamente identificata, ma si identifica una zona in cui avviene la frattura. Questa zona può essere anche spessa come l'orizzonte stesso.

Questi fenomeni non fisici colpiscono negativamente tutti i modelli state-based, ma assumono un'importanza più rilevante nei modelli correspondence.

- Singolarità nei tensori: Il calcolo dello shape tensor e del gradiente di deformazione in un nodo che ha perso troppi bond a causa del danno può portare alla singolarità (o al malcondizionamento) dei due tensori. Come si può vedere dalle equazioni 2.50 e 2.54, la singolarità dello shape tensor porta alla generazione di bond force densities che tendono all'infinito.
- Interpenetrazione: Il problema dell'interpenetrazione può generare un gradiente di deformazione con determinante negativo, e causare l'instabilità del

materiale (vedi definizione del primo tensore di Piola-Kirchhoff in equazione 4.24). Per ovviare a questo problema sono state trovate le seguenti soluzioni in letteratura:

– Ren [55] e Lai [31] hanno proposto di usare una viscosità artificiale alla Monaghan. Il problema dell'interpenetrazione è un problema comune a molti metodi a particelle, come nella *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) [46]. Per evitare l'insorgenza di questo fenomeno, è stato proposto di introdurre una forza viscosa di valore assoluto Π^{AB} fittizia proporzionale al quadrato della velocità con cui si avvicinano i 2 punti $A \in B$ e diretta come l'opposto del vettore congiungente i nodi.

$$\Pi^{AB} = \begin{cases} \frac{-\bar{c}\varphi + \varphi^2}{\bar{\rho}} &, \quad \Delta \dot{\mathbf{y}} \cdot \Delta \mathbf{x} < 0\\ 0 &, \quad \Delta \dot{\mathbf{y}} \cdot \Delta \mathbf{x} \ge 0 \end{cases}$$
(8.24)

dove \bar{c} è la velocità del suono media nel mezzo, $\bar{\rho}$ la densità massica media, e φ è definita come:

$$\varphi = \frac{\delta \,\Delta \dot{\mathbf{y}} \cdot \Delta \mathbf{x}}{|\Delta \mathbf{x}|^2 + (0.1\delta)^2} \tag{8.25}$$

dove δ in SPH è la *smoothing distance*, l'equivalente del raggio dell'orizzonte nella peridinamica.

– Tupek in [68] riformula il modello correspondence sviluppando quello che ha chiamato *extended constitutive correspondence*. Il modello si basa sulla definizione del *peridynamic stress tensor* costruito sulla definizione di uno stato dello strain del bond $\underline{\varepsilon}_{(m)}$ derivata dalle misure di deformazione di Seth-Hill:

$$\underline{\varepsilon}_{(m)}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{1}{2m} (\underline{c} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle^m - 1) \qquad \underline{c} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{\underline{\mathbf{Y}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle \cdot \underline{\mathbf{Y}} \langle \boldsymbol{\xi} \rangle}{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}}$$
(8.26)

dove m è una costante minore di 0, in modo che lo strain $\underline{\varepsilon}_{(m)}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$ tenda a $-\infty$ al tendere a zero del deformation state $\underline{Y}\langle \boldsymbol{\xi} \rangle$. In questa maniera si impone la non interpenetrazione a livello di bonds.

La misura dello strain del bond viene poi usata per costruire un tensore di deformazione peridinamico (*peridynamic strain tensor*) con cui si formula l'approccio correspondence. Tupek dimostra che il peridynamic strain tensor per deformazioni infinitesime corrisponde al tensore delle piccole deformazioni, e dimostra anche la corrispondenza del legame costitutivo per deformazioni volumetriche logaritmiche. Il force state ottenuto mostra anche che il legame costitutivo di Tupek è ordinario.

– Anche Breitzman in [10] si è preoccupato del problema dell'interpenetrazione nella definizione del bond-level deformation gradient (vedi sezione 2.4.5). Infatti nell'equazione 2.60 viene mostrato che \mathbf{F}_{bond} diventa singolare quando c'è interpenetrazione $\mathbf{y}' = \mathbf{y}$, e quindi la force density sarà tale da impedire che i punti $\mathbf{x} \in \mathbf{x}'$ si sovrappongano.

La soluzione adottata nel nostro caso è stata quella di imporre che il danno in tutti i bonds sia uguale ad 1 nel nodo il cui shape tensor o gradiente di deformazione diventasse singolare o il cui gradiente di deformazione avesse determinante minore di zero. Questa è una soluzione senza base fisica e che porta alla perdita di qualche particella, ma è semplice da applicare. Il suo unico scopo è consentire che l'analisi venga completata.

8.4 Test del modello del micropotenziale critico

Il modello di micropotenziale critico di Foster è stato implementato in Peridigm nel lavoro di questa tesi, attraverso la gestione dei bond speculari mostrata in sezione 3.7.

8.4.1 Analisi esplicite di una piastra intagliata in tensione

In questa sezione si testa il modello del micropotenziale critico applicato alla frattura elasto-fragile di una piastra intagliata.

Lo scopo di questa prova non è quello di validare il modello, ma è quello di mostrare e commentare i risultati qualitativi della frattura con il modello del micropotenziale critico in analisi con integrazione esplicita.

Il test viene effettuato per tutte le combinazione dei 2 modelli di danno presentati (allungamento critico, micropotenziale critico), con le due tipologie principali di materiale elastico (state-based ordinario e correspondence).

Il provino è una piastra rettangolare spessa $l_3 = 1$ mm con lati lunghi $l_2 = 10$ mm e $l_1 = 10$ mm. Un intaglio è fatto a metà di uno dei lati lunghi l_2 ed è lungo metà del lato di l_1 , come mostrato in figura 8.2.

Le caratteristiche meccaniche della piastra sono quelle del nitruro di silicio (Si_3N_4) , un materiale ceramico le cui caratteristiche sono facilmente reperibili.



Figura 8.2: Piastra rettangolare intagliata, usata nelle analisi esplicite

- modulo di Young: E = 310 GPa
- rapporto di Poisson: $\nu = 0.29$
- tasso di rilascio di energia (Griffith): $G_C = 109.94 \text{ J/m}^2$

Si ricorda che il valore critico del J-integral è uguale a G_C nel caso di frattura elastofragile.

La discretizzazione e l'orizzonte sono stati scelti arbitrariamente. Non ha senso dunque comparare i risultati con dati sperimentali, essendo l'orizzonte una proprietà caratteristica del materiale che ne pregiudica il comportamento a frattura; questa sezione si propone quindi solo di presentare risultati qualitativi.

- $\delta = 0.75 \text{ mm}$
- m = 3.05
- $\Delta x = \delta/m$

Le analisi con modelli correspondence sono state effettuate con un coefficiente di hourglass pari a 0.02.

La piastra è stata vincolata cinematicamente lungo i lati lunghi l_1 , nelle analisi viene imposto uno spostamento lineare nel tempo ai lati vincolati, tendendo la piastra fino ad una deformazione assoluta di 0.0008.

Il tempo finale nell'analisi è 500 μ s.

La discretizzazione temporale è stata fatta prendendo un fattore di sicurezza di 0.5 rispetto alla discretizzazione stabile nelle integrazioni esplicite, che richiederebbe che $\Delta t \leq 0.0334 \ \mu$ s.

In prossimità dei vincoli cinematici si è imposta una *no-fail zone*, per evitare fenomeni di danneggiamento non previsti (vedi sezione 3.5.1).

Nella tabella 8.1 sono riportati gli istanti a cui i provini con modelli diversi si fratturano completamente in corrispondenza dell'intaglio e il tempo che la cricca ha impiegato per diffondersi. Gli istanti rilevati hanno poche cifre significative perchè nelle analisi si sono salvati le quantità di output solo ogni 50 iterazioni, e perchè non è facile identificare l'istante esatto dell'inizio della frattura non esistendo superfici definite nella peridinamica meshless.

modello elastico	modello di danno	inizio frattura, μs	fine frattura, μs	tempo diffusione, μs
ordinario	allungamento	179	197	18
ordinario	micropotenziale	157	167	10
correspondence	allungamento	102	122	20
correspondence	micropotenziale	152	156	4

Tabella 8.1: Istanti a cui la piastra intagliata in tensione comincia a fratturarsie a cui è completamente fratturata e tempo impiegato dalla linea difrattura per diffondersi

Non si può non notare che tutti gli istanti sono differenti, ma non molto distanti tra loro. Il motivo è il fatto che non è stato scelto un orizzonte il cui valore abbia significato fisico, e che la stessa dimensione dell'orizzonte caratteristica dei materiali può anche dipendere dal tipo di modello peridinamico usato.

Si nota anche che la diffusione della linea di frattura ha velocità diverse a seconda del modello usato: per modelli di danno del micropotenziale, la diffusione è più veloce (soprattutto per il modello correspondence).

Si riferisce che le analisi fatte con il modello del micropotenziale critico vengono svolte in un tempo di circa 2 volte più elevato delle analisi con il modello dell'allungamento critico. La ragione di questo inconveniente è l'impiego dei bond speculari per calcolare il micropotenziale, che si basa sulla procedura descritta nella sezione 3.7.

Il comportamento dopo la frattura mostra una problematica sostanziale: nelle analisi con modello basati sul micropotenziale critico il danno continua a diffondersi anche dopo la frattura del provino.

Nella figura 8.3 viene mostrata la diffusione del danno appena dopo la frattura nell'analisi con modello ordinario e correspondence con danno basati sul micropotenziale. Nella figura 8.4 viene mostrata la stessa cosa, ma dopo 250 microsecondi dopo la frattura. Gli spostamenti in queste figure sono stati aumentati di 100 volte per poter essere più apprezzabili.

Si nota che il danno ha continuato a diffondersi anche se la rottura era già avvenuta, soprattutto nel modello correspondence con micropotenziale.

Nel caso di modello correspondence con danno micropotenziale, la diffusione del danno ha portato alla frammentazione graduale del provino. Questo comportamento non fisico può anche generare eccezioni aritmetiche.

Nella prossima sezione si presenta una possibile soluzione di questo problema.



Figura 8.3: Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale critico appena dopo la frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)



Figura 8.4: Danno nell'analisi con modello ordinario e modello di danno del micropotenziale critico dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)

8.4.2 Introduzione di viscosità numerica nell'integrazione esplicita

Per risolvere il problema della diffusione non fisica del danno, si è ipotizzato che la diffusione del danno sia dovuta alla riflessione delle onde che si propagano nel materiale e alle interferenze che generano incontrandosi. Queste inferferenze generano un aumento del micropotenziale, che invece dovrebbe diminuire dopo la frattura

Per bloccare questo fenomeno si sostituisce il modello elastico con un modello viscoelastico di quelli presentati nelle sezioni 7.2 e 7.3.

Dalla sezione 7.5 si è visto che la scelta dei parametri del modello viscoelastico permette di decidere quali frequenze di deformazione vengono smorzate.

Si prova quindi a smorzare l'intorno della frequenza con cui le onde nel materiale si propagano da un punto all'altro.

Si fa notare che i modelli di elastoviscosità sviluppati smorzano soltanto le deformazioni deviatoriche, a taglio. Quindi calibrare il modello sullo smorzamento delle onde, implica lo smorzamento delle onde secondarie (S-waves), ma non delle onde compressive primarie (P-waves).

La velocità delle onde secondarie teoriche nei solidi isotropi si ottiene con la seguente formula:

$$c_S = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \tag{8.27}$$

dove G è il modulo a taglio e ρ è la densità del materiale.

La frequenza con cui le onde secondarie teoriche si diffondono da un punto all'altro adiacenti nella discretizzazione si ottiene semplicemente:

$$f_{c_S} = \frac{c_S}{\Delta x} \tag{8.28}$$

Si decide quindi di imporre le frequenze del polo e dello zero dello standard linear solid come segue:

$$f_P = \eta f_{c_S} \qquad f_0 = f_{c_S} / \eta$$
 (8.29)

La velocità di diffusione delle perturbazioni nei modelli peridinamici non è esattamente uguale a quella teorica, ma dipende anche dall'orizzonte [26,58]. Tuttavia l'azione smorzante nel modello SLS viene fatta non solo per le frequenze esatte del polo e dello zero, ma anche per tutte le frequenze di circa lo stesso ordine di grandezza, come si può vedere nella figura 7.6. Per questo lo smorzamento di frequenze nell'intorno della frequenza f_{cs} consente di smorzare le frequenze della diffusione di perturbazioni nel modello peridinamico.

modello elastico	η	inizio frattura, $\mu {\rm s}$	fine frattura, $\mu {\rm s}$	tempo diffusione, μs
ordinario	NO	157	167	10
ordinario	1.01	160	171	11
ordinario	1.1	164	177	13
ordinario	3.0	180	215	35
correspondence	NO	152	156	4
correspondence	1.01	153	157	4
correspondence	1.1	153	157	4
correspondence	3.0	156	170	14

Tabella 8.2: Istanti (in μ s) a cui la piastra intagliata in tensione è completamente fratturata e in cui comincia a fratturarsi nell'analisi con modello di micropotenziale critico con e senza smorzamento.

Maggiore la differenza di frequenza tra il polo e lo zero, maggiore sarà la fase dello smorzamento delle frequenze di interesse. Per analizzare diversi gradi di smorzamento si fanno le analisi imponendo diversi valori del coefficiente di smorzamento η :

- 1. $\eta = 1.01$
- 2. $\eta = 1.1$
- 3. $\eta = 3.0$

Una volta imposte le frequenze, si ottengono il tempo di rilassamento τ_b e il rapporto tra le rigidezze γ_b usando le equazioni 7.33.

Come si vede dalle figure 7.5 e 7.6, l'ampiezza della risposta per frequenze molto più basse di quelle dello zero sarà ancora proporzionale al modulo a taglio iniziale e non è sfasata, quindi il provino non fratturato non viene irrigidito.

Con queste considerazioni vengono rifatte le analisi della sezione precedente per il modello di danno del micropotenziale critico.

Nella tabella 8.2 si riporta il confronto tra gli istanti a cui i provini cominciano a fratturarsi e gli istanti a cui si fratturano completamente nelle analisi dei modelli con e senza smorzamento.

Si nota che più è alto il coefficiente di smorzamento η maggiore è l'effetto dello smorzamento sui tempi di rottura.

In figura 8.5 si riportano le curve sforzo-deformazione ingegneristici. Lo sforzo ingegneristico è stato calcolato rispetto dalla reazione vincolare alle estremità vin-


Figura 8.5: Curve stress-strain ingegneristici delle analisi esplicite di una piastra intagliata, per modelli del micropotenziale critico smorzati e non smorzati

colate della piastra, mentre la deformazione ingegneristica è stata calcolata rispetto 2 punti distanti quanto è grande l'orizzonte dall'apice dell'intaglio.

Si nota che in questo caso l'introduzione di smorzamento non ha un'influenza visibile sui valori di sforzo ingegneristico almeno fino a rottura, ma si è notato in altri casi di studio in cui non era chiaro a priori dove potesse iniziare a rompersi il provino (vedi sezione 9.2) che non includere smorzamento possa provocare l'insorgenza di fratture inaspettate.

Dopo la rottura, le curve con diversi coefficienti di smorzamento η divergono visibilmente.

In questa figura si nota anche che la rigidezza della piastra nelle analisi con modelli senza smorzamento è diversa a seconda dell'uso di un modello ordinario o di un modello correspondence. Questa differenza è dovuta all'incapacità del modello ordinario di riprodurre correttamente la rigidezza dei materiali, come mostrato nella sezione 4.6. Inoltre, al contrario del modello ordinario, il modello correspondence è in grado di riprodurre correttamente le concentrazioni di sforzo attorno ad intagli, come dimostrato da Breitenfeld [9].

Nelle figure 8.6 viene mostrata la diffusione del danno dopo 250 microsecondi dopo la frattura sia nel modello ordinario che quello correspondence con $\eta = 1.01$.

8 Analisi e implementazione dei modelli di danno



Figura 8.6: Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale critico con smorzamento $\eta = 1.01$ dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)

Nelle figure 8.7 e 8.8 viene mostrata la stessa cosa ma con $\eta = 1.1$ e $\eta = 3.0$. Gli spostamenti in queste figure sono stati aumentati di 100 volte.

Come si vede dalle figure, l'azione di smorzamento ha avuto effetto. Non si riscontrano più problemi di diffusione nel danno come nell'analisi con micropotenziale critico senza smorzamento. Si nota inoltre che all'aumentare del coefficiente di smorzamento η la superficie di frattura diventa più netta, soprattutto per il modello correspondence.

La scelta del coefficiente η deve essere un compromesso tra l'effetto smorzante sulla diffusione del danno e l'effetto sul tempo a rottura.

Il duplice effetto dell'azione di smorzamento sul comportamento a frattura dimostra che le proprietà viscoelastiche dei materiali sono determinanti al fine dell'analisi del fenomeno della frattura.

Nelle figure 8.8, in cui la superficie di frattura è molto netta, si vede che le superfici di frattura nelle analisi con modello ordinario e modello correspondence hanno forma diversa. La ragione di questo è ancora da stabilire.

8.4.3 Analisi della durata delle analisi

In tabella 8.3 viene mostrato il confronto delle durate delle analisi delle due sezioni precedenti con i due diversi modelli di danno e con lo smorzamento e di analisi rifatte senza modello di danno.

Si nota che il modello di danno del micropotenziale critico è molto più costoso computazionalmente rispetto al modello dell'allungamento critico, e la necessità



Figura 8.7: Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale critico con smorzamento $\eta = 1.1$ dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)



Figura 8.8: Danno nelle analisi con modello di danno del micropotenziale critico con smorzamento $\eta = 3.0$ dopo 250 microsecondi dalla frattura completa (spostamenti aumentati di 100 volte)

8	Analisi	e	imp.	lemen	tazione	dei	modelli	di	danno
---	---------	---	------	-------	---------	-----	---------	----	-------

	Ordinario	Correspondence
no danno	$438 \mathrm{~s}$	$671\mathrm{s}$
relativo a ND-Ord	1.0	1.53
allungamento critico	$544~{ m s}$	$720 \mathrm{~s}$
relativo a ND-Ord	1.24	1.64
relativo a AC-Ord	1.0	1.32
relativo a AC-Corr	-	1.0
micropotenziale critico	$1022 \mathrm{~s}$	$1164 \mathrm{~s}$
relativo a ND-Ord	2.33	2.66
relativo a AC-Ord	1.88	2.14
relativo a AC-Corr	-	1.62
micropot. cr. con viscosità	$1223~{ m s}$	$1277~\mathrm{s}$
relativo a ND-Ord	2.79	2.92
relativo a AC-Ord	2.25	2.35
relativo a AC-Corr	-	1.77

Tabella 8.3: Durate delle analisi in secondi con diversi modelli di danno, rapporti con le analisi del modello ordinario senza danno(ND-Ord), del modello ordinario con allungamento critico (AC-Ord) e del modello correspondence con allungamento critico (AC-Corr)

di aggiungere uno smorzamento accentua ancora di più questa differenza. Si può considerare che usare il modello del micropotenziale critico in Peridigm costi circa il doppio rispetto al modello dell'allungamento critico. L'introduzione del modello di danno non ha portato ad enormi penalità in termini di tempo, al contrario di quello che sarebbe successo in analisi della diffusione del danno con modelli ad elementi finiti, che possono richiedere una rimeshatura in prossimità nella frattura.

8.5 Analisi dell'influenza del raggio dell'orizzonte e del rapporto m sulla frattura

La teoria ha mostrato che sia il modello dell'allungamento critico che quello del micropotenziale critico sono dipendenti dal raggio dell'orizzonte δ , questo è dovuto al fatto che il raggio δ nella peridinamica viene considerato una proprietà caratteristica e che quindi è corretto che le caratteristiche della frattura dipendano da δ . In particolare si è dimostrato con un'analisi dimensionale che, a carico crescente, diminuire l'orizzonte ritarda il momento della rottura dei bond per entrambi i modelli.

8.5 Analisi dell'influenza del raggio dell'orizzonte e del rapporto m sulla frattura

Come mostrato da Silling in [61], analisi dinamiche della propagazione della frattura con diversa discretizzazione, ma stesso orizzonte e allungamento critico, danno risultati molto vicini nei tempi.

Teoricamente non si dovrebbe riscontrare dipendenza dal rapporto m, ma la teoria non tiene conto della discretizzazione; infatti, come già anticipato, Breitenfeld [9] ha mostrato che il valore di G_C effettivo calcolato numericamente, usando l'allungamento critico teorico, può cambiare anche di molto a causa della discretizzazione.

In questa sezione viene fatto un semplice test per indagare sulla dipendenza della frattura dal raggio dell'orizzonte e dal rapporto m.

Il test viene fatto su un provino di dimensioni 1 mm x 1 mm x 5 mm posto in trazione e mira a studiare le caratteristiche di convergenza della rottura in uno stato di deformazione uniforme. Mantenere uno stato di deformazione uniforme serve solo ad escludere dalla prova possibili concentrazioni di sforzo che potrebbero alterare i risultati dello studio.

Il provino è vincolato alle estremità e viene tirato per 100 μ s fino alla deformazione ingegneristica di 0.002. Le caratteristiche del materiale usato sono le stesse usate nella sezione 8.2. Il test viene ripetuto sia al variare di δ , sia al variare del rapporto m, usando un modello elastico correspondence. Viene usato sia il modello dell'allungamento critico sia quello del micropotenziale critico. Per evitare rotture a causa degli effetti di bordo vicino ai vincoli, si impone una *no-fail zone* nella zona vicina ai vincoli estesa per 1 mm.

Nelle tabelle 8.4 e 8.5 si mostrano gli istanti di frattura per le analisi effettuate rispettivamente con il modello di allungamento critico e micropotenziale critico.

$\delta \setminus m$	2.05	2.55	3.05	3.55	4.05	media	err. max
0.25	44.8	56.4	42.3	43.2	40.0	45.3	24.4%
0.30	41.3	51.5	40.4	39.5	37.0	41.9	22.9%
0.38	36.9	46.3	35.8	35.5	33.8	37.6	23.1%
0.61	29.0	36.9	28.9	29.1	26.9	30.2	22.2%

Tabella 8.4: Istanti (in μ s) in cui il provino si frattura usando il modello del micropotenziale critico al variare di $\delta \in m$.

Si nota che per entrambi i modelli, a pari m, l'istante della frattura avviene prima per orizzonti più alti; questo risultato è in accordo con la teoria spiegata nelle sezioni precedenti.

8 Analisi e implementazione dei modelli di danno

$\delta \setminus m$	2.05	2.55	3.05	3.55	4.05	media	err. max
0.25	49.5	47.4	43.9	44.2	39.1	44.8	-12.7%
0.30	42.7	39.5	38.5	43.2	37.2	40.2	-7.5%
0.38	40.0	38.4	34.7	34.4	34.6	36.2	10.5%
0.61	31.4	34.7	28.6	30.4	27.4	30.5	13.8%

Tabella 8.5: Istanti (in μ s) in cui il provino si frattura usando il modello dell'allungamento critico al variare di $\delta \in m$.

Tuttavia si nota che, a pari δ , l'istante della frattura varia molto con m, con valori che si discostano dalla media dei risultati a pari δ anche del 24.4% nel caso del modello del micropotenziale critico. L'andamento con cui varia l'istante della frattura in funzione di m non è ben definito, tuttavia si può notare che quando m = 2.55 si ha di norma il maggior scostamento dal valore medio, e che per m crescenti si hanno tendenzialmente l'istante della frattura diminuisce.

Per risolvere il problema della variabilità dei risultati con m, può essere necessario calcolare numericamente l'energia rilasciata dal taglio di tutti i bond che passano per una certa superficie di frattura come fatto da Dipasquale [13] o Madenci [41], ma anche questo sistema può presentare dei problemi. Infatti questo sistema può funzionare se la superficie di frattura è allineata con la mesh e posizionata esattamente tra le interfacce dei volumi dei nodi, ma la superficie di frattura non è necessariamente allineata con la mesh, e dunque l'energia di Griffith che ne risulta numericamente avrebbe caratteristiche anisotrope, facendo dipendere la superficie di frattura dalla mesh.

Attualmente l'unico modo di diminuire sicuramente l'errore dovuto alla discretizzazione degli integrali di equazioni 8.12 e 8.14 è quello di aumentare il rapporto m. Tuttavia aumentare m fa crescere di molto l'onere computazionale. Un altro modo sarebbe quello di utilizzare delle funzioni di influenza non rettangolari di modo che i nodi più lontani, il cui volume è tagliato dall'orizzonte, peserebbero meno nell'integrale.

9.1 Test dinamico di trazione con la barra di Hopkinson

In questa sezione si vogliono riprodurre i risultati del test di trazione ad altà velocità con la barra di Hopkinson svolto da Gilat e Seidt riportato in [25] e [56] usando i metodi di analisi peridinamica sviluppati in questa tesi. I risultati comprendono misure degli interi campi (*Full-Field Measurements*) di temperatura e di deformazione usando telecamere ad alta velocità. Le temperature sono state ottenute con telecamere sensibili agli infrarossi, mentre le deformazioni sono state ottenute usando tecniche di *Digital Image Correlation (DIC*).

La riproduzione di questo esperimento in Peridigm permette di mostrare la validità del lavoro fatto nel modellare l'accoppiamento termomeccanico e la plasticità con la peridinamica; in particolare si vuole mostrare la validità del modello di generazione di potenza termica a seguito della plasticizzazione.

Si approfitta di questo case study per fare un semplice test sulla scalatura delle prestazioni all'aumentare del numero di core, nello specifico verranno effettuate analisi a 8 core e a 64 core sulla stessa macchina analizzando i tempi impiegando una tecnica di *weak-scaling*.

L'analisi a 8 core viene ripetuta anche al fine di vedere quanto tempo fa risparmiare la tecnica multirate, e se i risultati sono differenti per problemi di troncamento numerico. Si ripetono le analisi anche trascurando la diffusione termica per capire quanto sia rilevante il fenomeno della diffusione in questo problema.

9.1.1 Descrizione e risultati dell'esperimento di Gilat e Seidt

Il provino su cui è stato fatto l'esperimento ha le dimensioni mostrate nella figura 9.1, ed è fatto di acciaio 316L. La strozzatura è lunga 12mm, larga 3.77mm e spessa 1.85 mm ed è il punto focale dell'analisi, poichè lo snervamento e la conseguente rottura avvengono in questo punto del provino. Tutte le misure dei campi di temperatura e deformazione sono state effettuate in prossimità della strozzatura.



Figura 9.1: Dimensioni del provino usato nel test di trazione con la barra di Hopkinson



Figura 9.2: Struttura della barra di Hopkinson [48]

Come si può vedere dal lavoro di Nicholas [48], in cui si mostra lo sviluppo e l'applicazione di una barra di Hopkinson per test di trazione e da cui è stata estratta la figura 9.2, la struttura di una barra di Hopkinson prevede due barre in lega di titanio, una fissa ed una mobile, tra cui viene posto il provino. La barra mobile viene mossa tramite un meccanismo (a pressione, oppure magnetico) al fine di ottenere il voluto rateo di deformazione in prossimità delle estremità del provino.

L'esperimento di Gilat e Seidt è stato condotto al fine di ottenere un rateo di deformazione nominale di 3000 s^{-1} rispetto alle barre di titanio.

Sulle due barre sono presenti degli estensimetri, da cui si ricava la forza a cui è sottoposto il provino, e da cui si ricava la curva sforzo ingegneristico nella strozzatura vs deformazioni ingegneristici sulle barre, che viene riportata in figura 9.3.

Nella figura 9.4 si riportano i risultati ottenuti tramite le riprese con le telecamere sensibili agli infrarossi.

Le tecniche di DIC usate da Gilat e Seidt hanno permesso di ricavare dalle immagini la deformazione e la temperatura lungo la linea centrale della strozzatura in funzione del tempo, i risultati sono mostrati nelle figure 9.5. Non è spiegato a cosa si riferisce precisamente l'origine dell'asse *Position*, si interpretano questi assi facendo coincidere il centro della strozzatura in *Position* = 7.5 mm.

Il rateo di deformazione nominale del test svolto da Gilat e Seidt è di 3000 s^{-1} rispetto alle barre di titanio, ma integrando i risultati della figura 9.5 si è visto che questo corrisponde ad un rateo medio di 1119 s^{-1} ai capi della strozzatura.



Figura 9.3: Curva sforzo ingegneristico nella strozzatura vs deformazione ingegneristica nelle barre [25, 56]



Figura 9.4: Rilevazioni termiche sul provino nel test di trazione della barra di Hopkinson [25,56]



Figura 9.5: Temperature superficiali e deformazioni lungo la linea centrale della strozzatura del provino nel test di trazione ad altà velocità [25,56]

Istante in cui comincia la strizione	$145 \mu { m s}$
Tempo da inizio strizione a rottura	$52 \mu { m s}$
Deformazione locale quando comincia la strizione	0.3
Deformazione locale a rottura	0.7
Temperatura massima quando comincia la strizione	$88 ^{\circ}\mathrm{C}$
Temperatura massima a rottura	$375^{\circ}\mathrm{C}$

Tabella 9.1: Tempi, deformazioni e temperature misurati nell'esperimentoall'inizio della strizione e a rottura

Si segnala una piccola incongruenza nella figura 9.5: dopo $44.1\,\mu$ s la deformazione assiale è anche maggiore del 7% in molti punti, e lo snervamento è già avvenuto provocando sicuramente un incremento di temperatura. Nella figura di destra la curva indicata da 44.1 μ s rappresenta una condizione in cui non si è avuta dissipazione termica, si suppone quindi che la vera curva di temperatura ottenuta a 44.1 μ s sia quella indicata con 77.4 μ s.

In tabella 9.1 vengono riportati istanti, la deformazione e la temperatura misurate all'inizio della strizione e a rottura.

9.1.2 Modellazione dell'esperimento con Peridigm

Nell'analisi non viene modellata l'intera barra di Hopkinson, ma si modella solo il provino mostrato in figura 9.1 vincolando la parte destra a terra, ed imponendo una velocità data alla parte sinistra del provino in modo da avere un rateo di deformazione ai capi della strozzatura pari a 1192 s^{-1} , come misurato dalla figura 9.5. I vincoli vengono applicati come descritto nella sezione 3.5.

$\begin{array}{cccc} \mathrm{modulo\ di\ Young} & E & 193\ \mathrm{GPa} \\ \mathrm{coefficiente\ di\ Poisson} & \nu & 0.3 \\ \mathrm{densit}^{\lambda} & \rho & 7900\ \mathrm{kg/m^3} \\ \mathrm{costante\ di\ Johnson\ Cook} & A & 310.8\ \mathrm{MPa} \\ \mathrm{costante\ di\ Johnson\ Cook} & B & 881.38\ \mathrm{MPa} \\ \mathrm{costante\ di\ Johnson\ Cook} & n & 0.178 \\ \mathrm{costante\ di\ Johnson\ Cook} & n & 0.178 \\ \mathrm{costante\ di\ Johnson\ Cook} & m & 1.25 \\ \mathrm{rateo\ di\ riferimento} & \dot{\varepsilon}_0 & 1000\ \mathrm{s^{-1}} \\ \mathrm{temperatura\ di\ riferimento} & \theta_{ref} & 20\ ^{\circ}\mathrm{C} \\ \mathrm{temperatura\ di\ riferimento} & \theta_{melt} & 1387\ ^{\circ}\mathrm{C} \\ \mathrm{calore\ specifico} & c & 500\ \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg\ K}} \\ \mathrm{conducibilit\ a\ termica} & k & 16.2\ \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m\ K}} \\ \mathrm{coefficiente\ di\ dilatazione\ volumetrico} & \alpha_V & 15.9\ 10^{-6}\ \mathrm{K}^{-1} \\ \mathrm{energia\ di\ Griffith} & G_C & 179288.86\ \mathrm{Pa\ m} \end{array}$			
$\begin{array}{ccc} \operatorname{coefficiente} \operatorname{di} \operatorname{Poisson} & \nu & 0.3 \\ \operatorname{densita} & \rho & 7900 \mathrm{kg/m^3} \\ \operatorname{costante} \operatorname{di} \operatorname{Johnson} \operatorname{Cook} & A & 310.8 \mathrm{MPa} \\ \operatorname{costante} \operatorname{di} \operatorname{Johnson} \operatorname{Cook} & B & 881.38 \mathrm{MPa} \\ \operatorname{costante} \operatorname{di} \operatorname{Johnson} \operatorname{Cook} & n & 0.178 \\ \operatorname{costante} \operatorname{di} \operatorname{Johnson} \operatorname{Cook} & C & 0.19 \\ \operatorname{costante} \operatorname{di} \operatorname{Johnson} \operatorname{Cook} & m & 1.25 \\ \operatorname{rateo} \operatorname{di} \operatorname{riferimento} & \varepsilon_0 & 1000 \mathrm{s^{-1}} \\ \operatorname{temperatura} \operatorname{di} \operatorname{riferimento} & \theta_{ref} & 20 ^\circ \mathrm{C} \\ \operatorname{temperatura} \operatorname{di} \operatorname{fusione} & \theta_{melt} & 1387 ^\circ \mathrm{C} \\ \operatorname{calore} \operatorname{specifico} & c & 500 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg} \mathrm{K}} \\ \operatorname{conducibilita} \operatorname{termica} & k & 16.2 \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m}} \\ \operatorname{coefficiente} \operatorname{di} \operatorname{dilatazione} \operatorname{volumetrico} & \alpha_V & 15.9 10^{-6} \mathrm{K}^{-1} \\ \operatorname{energia} \operatorname{di} \operatorname{Griffith} & G_C & 179288.86 \mathrm{Pa} \mathrm{m} \end{array}$	modulo di Young	E	$193\mathrm{GPa}$
$\begin{array}{cccc} \mathrm{densit} & \rho & 7900 \ \mathrm{kg/m^3} \\ \mathrm{costante} \ \mathrm{di} \ \mathrm{Johnson} \ \mathrm{Cook} & A & 310.8 \ \mathrm{MPa} \\ \mathrm{costante} \ \mathrm{di} \ \mathrm{Johnson} \ \mathrm{Cook} & B & 881.38 \ \mathrm{MPa} \\ \mathrm{costante} \ \mathrm{di} \ \mathrm{Johnson} \ \mathrm{Cook} & n & 0.178 \\ \mathrm{costante} \ \mathrm{di} \ \mathrm{Johnson} \ \mathrm{Cook} & C & 0.19 \\ \mathrm{costante} \ \mathrm{di} \ \mathrm{Johnson} \ \mathrm{Cook} & m & 1.25 \\ \mathrm{rateo} \ \mathrm{di} \ \mathrm{riferimento} & \dot{\varepsilon}_0 & 1000 \ \mathrm{s^{-1}} \\ \mathrm{temperatura} \ \mathrm{di} \ \mathrm{riferimento} & \theta_{ref} & 20 \ ^{\circ}\mathrm{C} \\ \mathrm{temperatura} \ \mathrm{di} \ \mathrm{riseone} & \theta_{melt} & 1387 \ ^{\circ}\mathrm{C} \\ \mathrm{calore} \ \mathrm{specifico} & c & 500 \ \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg} \ \mathrm{K}} \\ \mathrm{coefficiente} \ \mathrm{di} \ \mathrm{dilatazione} \ \mathrm{volumetrico} & \alpha_V & 15.9 \ 10^{-6} \ \mathrm{K^{-1}} \\ \mathrm{energia} \ \mathrm{di} \ \mathrm{Griffith} & G_C & 179288.86 \ \mathrm{Pa} \ \mathrm{metrico} \\ \end{array}$	coefficiente di Poisson	ν	0.3
costante di Johnson CookA310.8 MPacostante di Johnson CookB881.38 MPacostante di Johnson Cookn0.178costante di Johnson CookC0.19costante di Johnson Cookm1.25rateo di riferimento $\dot{\varepsilon}_0$ 1000 s^{-1}temperatura di riferimento θ_{ref} 20 °Ctemperatura di fusione θ_{melt} 1387 °Ccalore specificoc500 $\frac{J}{kg K}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V 15.9 10^{-6} K^{-1}energia di Griffith G_C 179288.86 Pa m	densità	ho	$7900~{ m kg/m^3}$
costante di Johnson CookB881.38 MPacostante di Johnson Cookn0.178costante di Johnson CookC0.19costante di Johnson Cookm1.25rateo di riferimento $\dot{\varepsilon}_0$ 1000 s^{-1}temperatura di riferimento θ_{ref} 20 °Ctemperatura di fusione θ_{melt} 1387 °Ccalore specificoc500 $\frac{J}{kg K}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V 15.9 10 ⁻⁶ K^{-1}energia di Griffith G_C 179288.86 Pa m	costante di Johnson Cook	A	$310.8 \mathrm{MPa}$
costante di Johnson Cook n 0.178 costante di Johnson Cook C 0.19 costante di Johnson Cook m 1.25 rateo di riferimento $\dot{\varepsilon}_0$ $1000 \mathrm{s}^{-1}$ temperatura di riferimento θ_{ref} $20 ^\circ\mathrm{C}$ temperatura di fusione θ_{melt} $1387 ^\circ\mathrm{C}$ calore specifico c $500 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg K}}$ conducibilità termica k $16.2 \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m K}}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 10^{-6} \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C $179288.86 \mathrm{Pa m}$	costante di Johnson Cook	B	$881.38 \mathrm{MPa}$
costante di Johnson Cook C 0.19 costante di Johnson Cook m 1.25 rateo di riferimento $\dot{\varepsilon}_0$ $1000 \mathrm{s}^{-1}$ temperatura di riferimento θ_{ref} $20 ^\circ \mathrm{C}$ temperatura di fusione θ_{melt} $1387 ^\circ \mathrm{C}$ calore specifico c $500 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg K}}$ conducibilità termica k $16.2 \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m K}}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 10^{-6} \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C $179288.86 \mathrm{Pa m}$	costante di Johnson Cook	n	0.178
costante di Johnson Cook m 1.25 rateo di riferimento $\dot{\varepsilon}_0$ $1000 \mathrm{s}^{-1}$ temperatura di riferimento θ_{ref} $20 ^\circ\mathrm{C}$ temperatura di fusione θ_{melt} $1387 ^\circ\mathrm{C}$ calore specifico c $500 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg K}}$ conducibilità termica k $16.2 \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m K}}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 10^{-6} \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C $179288.86 \mathrm{Pa m}$	costante di Johnson Cook	C	0.19
rateo di riferimento $\dot{\varepsilon}_0$ $1000 \mathrm{s}^{-1}$ temperatura di riferimento θ_{ref} $20 ^\circ \mathrm{C}$ temperatura di fusione θ_{melt} $1387 ^\circ \mathrm{C}$ calore specifico c $500 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg K}}$ conducibilità termica k $16.2 \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m K}}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 10^{-6} \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C $179288.86 \mathrm{Pa m}$	costante di Johnson Cook	m	1.25
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	rateo di riferimento	$\dot{arepsilon}_0$	$1000 \ {\rm s}^{-1}$
temperatura di fusione θ_{melt} 1387 °Ccalore specifico c $500 \frac{J}{kg K}$ conducibilità termica k $16.2 \frac{W}{m K}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 \ 10^{-6} \ \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C 179288.86 Pa m	temperatura di riferimento	θ_{ref}	$20 \ ^{\circ}\mathrm{C}$
calore specificoc $500 \frac{J}{kg K}$ conducibilità termicak $16.2 \frac{W}{m K}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 \ 10^{-6} \ \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C $179288.86 \ \mathrm{Pam}$	temperatura di fusione	θ_{melt}	$1387 \ ^{\circ}\mathrm{C}$
conducibilità termicak $16.2 \frac{W}{m K}$ coefficiente di dilatazione volumetrico α_V $15.9 \ 10^{-6} \ \mathrm{K}^{-1}$ energia di Griffith G_C $179288.86 \ \mathrm{Pam}$	calore specifico	c	$500 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg K}}$
coefficiente di dilatazione volumetrico α_V 15.9 10^{-6} K ⁻¹ energia di Griffith G_C 179288.86 Pa m	conducibilità termica	k	$16.2 \frac{W}{m K}$
energia di Griffith G_C 179288.86 Pa m	coefficiente di dilatazione volumetrico	α_V	$15.9 \ 10^{-6} \ \mathrm{K}^{-1}$
	energia di Griffith	G_C	179288.86 Pa m

9.1 Test dinamico di trazione con la barra di Hopkinson

Tabella 9.2: Costanti meccaniche e termiche usate nell'analisi del provino

Il comportamento meccanico dell'acciaio 316L viene modellato con il modello correspondence elasto-viscoplastico basato sul modello di incrudimento di Johnson-Cook. Il danno dei bond è stato modellato con il modello del micropotenziale critico, mentre la diffusione termica viene modellata con il modello di diffusione termica bond-based di Agwai. L'accoppiamento termomeccanico forte è fornito sia tramite espansione termica volumetrica che tramite la generazione di potenza termica dovuta alla plasticizzazione.

I parametri usati sono ricavati da [30] e vengono riportati in tabella 9.2 assieme ai moduli elastici, la densità e le caratteristiche termiche di calore specifico, conduttività e coefficiente di espansione volumetrica. L'acciaio 316L usato nell'esperimento potrebbe però avere caratteristiche leggermente diverse, a causa del fatto che anche acciai con lo stesso nome presentano leggere differenze in composizione e caratteristiche a seconda del produttore; questa problematica causerà sicuramente almeno uno scostamento del risultato quantitativo dell'analisi da quello sperimentale, ma si spera di ottenere risultati confrontabili.

In tutte le analisi si è assunto il rapporto m pari a 3.05 (se non indicato diversamente), per l'analisi a 8 processori l'orizzonte δ è imposto uguale 1 mm, mentre per quella a 64 processori l'orizzonte è uguale a 0.5 mm. Dimezzando l'orizzonte ci si aspettano 8 volte più nodi, quindi, aumentando simultaneamente il numero di processori di 8 volte, si opera un *weak-scaling* con un approccio δ -convergence.

Le dimensioni dell'orizzonte sono state scelte intuitivamente allineandosi a quan-



Figura 9.6: Discretizzazione del volume del provino in cubetti nelle analisi a 8 processori

to fatto da Foster in [19], in cui l'orizzonte era stato posto uguale alla dimensione della *crack tip plastic zone* che era di circa 1 mm.

Il volume del provino è stato discretizzato in sotto-domini quasi cubici facendo in modo che i lati siano prossimi a $\Delta x = \delta/m$. In prossimità delle estremità della strozzatura sono presenti dei raccordi, quindi i cubetti in prossimità del bordo del raccordo devono essere tagliati; ciò viene fatto correggendo il volume e la posizione del nodo di questi sottodomini, usando semplici formule dalla geometria cilindrica.

In figura 9.6 viene mostrata la discretizzazione del dominio in prossimità della strozzatura nelle analisi a 8 processori.

Nelle analisi multicore, la mesh del provino deve essere divisa in più parti a monte dell'analisi, affinchè ognuna di esse venga analizzata da un processore diverso. In figura 9.7 viene mostrata la divisione della mesh in 8 parti per l'analisi a 8 processori, e in figura 9.8 viene mostrata la divisione della mesh in 64 parti diverse per l'analisi a 64 processori. La divisione è stata effettuata con l'utilità *decomp* fornita da Trilinos.

L'analisi viene fatta durare 250 $\mu {\rm s},$ al fine di riprodurre tutti i risultati mostrati in figura 9.5.

Divisione in blocchi

Al fine di applicare una No-Fail Zone in corrispondenza dei vincoli, e per risparmiare tempo in calcoli (conoscendo a priori dove avverrà la rottura), si è deciso





Figura 9.7: Divisione della mesh in 8 parti per l'analisi a 8 processori



Figura 9.8: Divisione della mesh in 64 parti per l'analisi a 64 processori

di dividere il volume in blocchi: al blocco in prossimità della strozzatura viene associato un modello di danno, mentre agli altri blocchi non sarà concesso di fratturarsi, risparmiando così i tempi necessari a valutare l'insorgenza del danno dove si sa che tanto non sorgerà.

Le dimensioni del provino sono molto più grandi dell'orizzonte, dunque il dominio viene discretizzato in un gran numero di nodi (71256 per l'analisi a 8 proc. e 543984 per l'analisi a 64 proc.). A causa del gran numero di nodi il file di output richiederebbe una grande quantità di spazio sul disco, riducibile a valori accettabili solo diminuendo sensibilmente la cadenza con cui vengono scritti i dati dei vari passi di integrazione.

Per evitare questa riduzione di cadenza, il programma è stato modificato al fine di poter escludere dalla scrittura nel file di output le zone poco interessanti dell'analisi. In pratica le zone lontane dalla strozzatura vengono incluse in un blocco le cui quantità vengono escluse dalla scrittura con la nuova indicazione *Cutoff Block* nella sezione del file di input dedicata alle opzioni dell'output.

In questo modo le quantità scritte nel file di output sono solo quelle relative ai nodi prossimi alla strozzatura (8832 nodi per analisi a 8 proc. e 66624 nodi per analisi a 64 proc.) diminuendo la dimensione del file di output di più di 8 volte in questo caso specifico.

Sarebbe giusto obiettare che si sarebbe potuta applicare una diversa concentrazione di nodi a seconda della zona del provino, ottenendo un risparmio sia in tempi di calcolo che in spazio di archiviazione, tuttavia dopo il lavoro di questa tesi non si dispone della conoscenza necessaria per applicare tecniche di infittimento della mesh o addirittura tecniche di accoppiamento con gli elementi finiti come quelle sviluppate da Littlewood in [37].

In figura 9.9 si mostra la divisione in blocchi attuata sul provino.

9.1.3 Risultati delle analisi

Analisi dell'influenza della diffusione termica

Si è calcolato che il passo di integrazione critico del problema termico (usando le formule ricavate in sezione 3.2.3), è pari a 21 ms nell'analisi ad 8 processori con orizzonte 1 mm, quindi le scale dei tempi per la diffusione termica sono molto maggiori della durata stessa dell'analisi (250 μ s), e teoricamente la diffusione termica non dovrebbe avere un ruolo rilevante in questa analisi.



Figura 9.9: Divisione in blocchi nel provino: il blocco rosso è il blocco in cui è permesso il danneggiamento, il blocco verde è il blocco escluso dalla scrittura in output. Le zone esterne a 30 e -30 nell'asse x sono le zone in cui vengono applicati i vincoli cinematici e sono lunghe quanto l'orizzonte

Tuttavia sono state effettuate delle breve analisi a 8 core (con durata di soli $30 \mu s$, inferiore ai 250 μs preventivati, ma con stesse velocità di deformazione) al fine di analizzare se la diffusione termica avesse un ruolo importante in questo problema.

Si sono ripetute le analisi sia considerando la diffusione termica (applicando prima $N_{sync_{MK}} = 1$ e poi $N_{sync_{MK}} = 94$), sia non considerando la diffusione termica. Per tutte le analisi è stato mantenuto lo stesso $N_{sync_{MH}} = 1$.

Sono stati calcolati diversi tipi di errori relativi dai risultati delle due analisi con diffusione termica relativamente all'analisi senza diffusione termica:

- ϵ_1 : errore relativo della temperatura dopo $30\,\mu$ s nel punto centrale della mesh ($30\,\mu$ s è un istante di sincronizzazione dei passi meccanici e termici)
- ϵ_2 : errore relativo integrale della temperatura dopo 30 μ s lungo la linea centrale della strozzatura
- ϵ_3 : errore relativo integrale della temperatura nel punto centrale della mesh considerando nel range di tempo da 0 s a 30 μ s (30 μ s è un istante di sincronizzazione termica dei passi meccanici e termici)

Gli errori misurati sono molto bassi, si può considerare che i risultati non siano cambiati a seguito dell'inclusione della diffusione termica. Si ipotizza che l'errore relativo nell'analisi con $N_{sync_{MK}} = 94$ sia maggiore perchè il passo di integrazione

	$N_{sync_{MK}} = 1$	$N_{sync_{MK}} = 94$
ϵ_1	-2.76e - 6	-5.09e - 5
ϵ_2	-3.94e - 8	-2.17e - 5
ϵ_3	-7.48e - 7	-2.47e - 5

Tabella 9.3: Errori relativi della temperatura nelle analisi con diffusione termica rispetto all'analisi senza diffusione termica usando $N_{sync_{MK}} = 1$ e $N_{sync_{MK}} = 94$

meccanico è stato leggermente cambiato nell'analisi al fine di poter ottenere un passo meccanico stabile sottomultiplo del passo termico.

Il tempo che il calcolatore ha impiegato a finire le varie analisi non è cambiato sensibilmente, questo perchè il tempo di calcolo di un passo di integrazione nel modello correspondence, unito alla procedura iterativa per il calcolo dell'incremento di deformazione plastica è molto più oneroso rispetto al calcolo di un passo di integrazione nel modello di diffusione termica bond-based.

Come si può vedere le analisi confermano l'ipotesi che la diffusione termica non abbia un ruolo rilevante in questa analisi, di conseguenza nelle prossime analisi la diffusione termica non viene inclusa.

Analisi del passo di integrazione della potenza termica generata

L'analisi a 8 core con orizzonte 1 mm viene ripetuta anche per vedere quanto tempo fa risparmiare la tecnica multirate relativamente al passo di integrazione della potenza termica generata, e per vedere se la generazione di potenza termica sia un fenomeno lento rispetto al problema meccanico, nel senso che le deformazioni termiche dovute alla plasticizzazione e la temperatura variano lentamente rispetto alla variazione delle deformazioni meccaniche.

Si sono ripetute le analisi applicando prima $N_{sync_{MH}} = 1$ e poi $N_{sync_{MH}} = 100$.

Come nel caso precedente non si hanno avuto sensibili variazioni nel tempo impiegato nell'analisi nei due casi.

Gli errori ϵ_1 e ϵ_2 definiti precedentemente, nell'analisi con $N_{sync_{MH}} = 100$ rispetto all'analisi con $N_{sync_{MH}} = 1$, assumono ancora valori irrilevanti ($\epsilon_1 = 5.29e - 5$ e $\epsilon_2 = 5.45e - 5$). Lo stesso non si può dire dell'errore ϵ_3 , perchè il diverso passo di integrazione della potenza termica generata fa sì che l'andamento della temperatura relativamente al punto centrale della mesh nella simulazione con $N_{sync_{MH}} = 100$ sia caratterizzato da una forma a gradini, come si può vedere nella figura 9.10.



Figura 9.10: Andamento della temperatura nel punto centrale della mes
h considerando da 0 s a 30 $\mu {\rm s},$ per analisi
a $N_{sync_{MH}}=1$ e $N_{sync_{MH}}=100$

La figura mostra anche che in questo range di tempi i salti di temperatura possono essere anche più grandi di $\Delta \theta = 1$ °C, provocando aumenti istantanei di sforzo volumetrico che si può stimare che siano di circa $\Delta \sigma_H = K \alpha_V \Delta \theta = 2.5$ MPa. Per istanti più prossimi alla rottura del provino gli incrementi possono essere anche molto maggiori, generando delle forti onde di propagazione degli sforzi non fisiche.

Dunque, visto che integrare la potenza termica generata ad ogni istante non provoca una penalità sensibile in termini di tempo impiegato nell'analisi e in termini di errori ϵ_1 e ϵ_2 , si è deciso di impostare per le prossime analisi $N_{sync_{MH}} = 1$.

Analisi dell'esperimento usando 8 processori

In questa sezione vengono riportati i risultati della simulazione dell'esperimento ottenuti da un'analisi ad 8 processori con orizzonte pari a 1 mm.

L'analisi ha richiesto 7065 secondi (1.96 ore) per essere completata, ed ha richiesto 9432 passi di integrazione (impiegando 0.75 secondi in media per ogni passo).

L'analisi ha riprodotto il fenomeno della strizione, anche se in maniera poco apprezzabile, come si mostra in figura 9.11. Si ritiene che questa mancanza sia dovuta al fatto che la strozzatura sia divisa in un numero insufficiente di nodi.

Tuttavia gli istanti iniziali e finali del processo di frattura avvengono ad istanti simili a quelli previsti dall'esperimento (istante iniziale a 129 μ s invece che 145 μ s, istante finale a 188 μ s invece che 197 μ s).

Si ritiene quindi che il valore assegnato al raggio dell'orizzonte δ sia abbastanza vicino a quello caratteristico del materiale usato.

L'analisi è stata impostata in modo che restituisse tra le variabili in uscita lo sforzo equivalente di Von Mises e la deformazione plastica equivalente. Nell'ipotesi di sforzo uniassiale nella strozzatura è possibile stimare la deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura con la seguente formula ricavata usando le definizioni di sforzo equivalente e deformazione plastica equivalente (equazioni 5.7 e 5.10):

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\sigma_{eff}}{E} + \frac{3}{2(1+\nu)}\varepsilon_p \tag{9.1}$$

In figura 9.11 si riporta la stima del campo di deformazione assiale nella strozzatura all'istante iniziale della strizione; come si può vedere il valore di deformazione assiale massimo all'istante iniziale della frattura (0.35) è comparabile con quello misurato nell'esperimento (0.3) riportato in tabella 9.1. Anche all'istante finale del-



Figura 9.11: Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'istante iniziale del processo di frattura nell'analisi a 8 processori



Figura 9.12: Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'istante finale del processo di frattura nell'analisi a 8 processori

la frattura invece si ottiene un valore comparabile di deformazione assiale rispetto a quello misurato nell'esperimento, come si può vedere in figura 9.12.

Al fine di stimare la curva sforzo-deformazione ingegneristici ottenuta nell'esperimento tramite gli estensimetri, nell'analisi viene misurata la reazione vincolare complessiva ai due estremi del provino, e, dividendola per l'area della sezione della strozzatura, si ottiene uno sforzo ingegneristico nella strozzatura. La deformazione ingegneristica nelle barre viene ottenuta moltiplicando il vettore dei tempi con il rateo di deformazione 3000 s^{-1} . Il confronto tra la curva sperimentale e quella ottenuta nell'analisi (fino all'inizio del processo di rottura) viene riportata in figura 9.13.

Si nota che la curva ottenuta dall'analisi è oscillante; questo succede perchè la misura sperimentale è applicata in punti delle barre a sufficiente distanza dal provino da attenuare per diffusione le oscillazioni, mentre l'analisi ricava le forze all'estremità del provino. Per questa ragione si effettua una regressione parabolica sulla curva oscillante, ottenendo una stima della curva confrontabile con quella



Figura 9.13: Confronto tra lo sforzo e la deformazione ingegneristiche ottenuti dall'esperimento e l'analisi con Peridigm

sperimentale.

Come si può vedere, la regressione dello sforzo ingegneristico nella strozzatura si attesta a valori leggermente inferiori a quelli dell'esperimento; si sospetta che questo sia dovuto anche ad una leggera differenza tra le caratteristiche dell'acciaio usato nell'esperimento e quello usato nella simulazione, e ci si aspetta quindi che nell'analisi peridinamica l'energia dissipata per la plasticizzazione sia minore rispetto a quella dell'esperimento.

Il confronto tra le temperature nella linea media sperimentali e calcolate è riportato in figura 9.14. Si nota che, per gli istanti $44 \,\mu$ s, 77 μ s e 110 μ s, la temperatura calcolata al centro ha valori leggermente inferiori, ma confrontabili, rispetto ai risultati sperimentali. Questo è diretta conseguenza della discrepanza tra le curve sforzi-deformazioni ingegneristiche sperimentale e numerica. Il valore massimo negli istanti 144 μ s e 177 μ s è invece maggiore rispetto a quello sperimentale per il fatto che il processo di rottura, che genera una strizione e aumenta il carico sulla parte centrale facendola riscaldare ulteriormente, nell'analisi numerica ha cominciato a svilupparsi circa 16 μ s prima rispetto all'analisi sperimentale.

Si nota però che la distribuzione di temperature sperimentale ha ovunque una forma più larga rispetto a quella numerica. Il processo di snervamento e rottura del provino in questa analisi numerica risulta quindi più localizzato.

Analisi dell'esperimento usando 64 processori

In questa sezione vengono riportati i risultati della simulazione dell'esperimento ottenuti da un'analisi ad 64 processori con orizzonte pari a 0.5 mm.

L'analisi ha richiesto 26730 secondi (7.42 ore) per essere completata, ed ha richiesto 19065 passi di integrazione (impiegando 1.40 secondi in media per ogni passo).

Inaspettatamente alla fine dell'analisi $(250\mu s)$ il provino non si è rotto, si sospetta che questo sia successo a causa del valore dell'orizzonte più piccolo rispetto a quello usato nell'analisi a 8 processori, nella quale il momento della strizione si era rivelato vicino al risultato sperimentale.

Ci si attendeva un risultato diverso tra le due analisi, in quanto il raggio dell'orizzonte peridinamico δ viene considerato come una proprietà caratteristica del materiale (vedi sezione 2.6), esprimendo il grado di non località delle interazioni interne al materiale dovuto ad esempio alla scala di lunghezza dell'influenza dei grani e delle inclusioni.



Figura 9.14: Confronto delle temperature superficiali lungo la linea centrale tra il risultato dell'analisi a 8 processori e quello dell'esperimento



Figura 9.15: Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'istante iniziale del processo di frattura, nell'analisi a 64 processori con m = 5.05

Di conseguenza si è provato a fare un'analisi con la stessa discretizzazione, ma con orizzonte pari a 0.83 mm (e quindi m = 5.05). Il raggio dell'orizzonte è stato posto minore di 1.0 mm perchè nell'analisi ad 8 processori il momento della strizione era leggermente troppo presto, e in questa analisi si vuole ritardare la strizione diminuendo δ (come visto dalla sezione 8.5.

Tuttavia aumentare l'orizzonte aumenta enormemente il tempo dell'analisi, infatti l'analisi ha impiegato 17.6 ore per essere completata, ovvero 2.37 volte di più rispetto all'analisi con un orizzonte pari a 0.5 mm.

Gli istanti della strizione e della frattura finale sono stati ritardati di troppo rispetto agli istanti trovati sperimentalmente (strizione a $181 \,\mu$ s, invece che $145 \,\mu$ s, e rottura a 240 μ s invece che a 197 μ s).

In figura 9.15 si riporta la stima del campo di deformazione assiale nella strozzatura all'istante iniziale della strizione; come si può vedere il valore di deformazione assiale massimo all'istante iniziale della frattura (0.45) è maggiore sia di quello misurato nell'esperimento che di quello misurato nell'analisi con $\delta = 1$ mm. Anche all'istante finale della frattura si ottiene un valore di deformazione assiale maggiore rispetto a quello misurato nell'esperimento, come si può vedere in figura 9.16. Questi risultati sono dovuti al fatto che la strizione e la rottura sono ritardate rispetto al risultato sperimentale.

Anche il confronto delle temperature è influenzato dal fatto che la rottura sia ritardata, infatti non mostra il picco atteso dai risultati sperimentali a 177μ s, come si vede in figura 9.17. Da questa figura si vede ancora che le temperature ottenute



Figura 9.16: Stima del campo di deformazione assiale ε_{xx} nella strozzatura all'istante finale del processo di frattura, nell'analisi a 64 processori con m = 5.05

prima del processo di frattura sono più basse rispetto a quelle ottenute dall'esperimento, sempre a causa del fatto che la curva sforzi-deformazioni ingegneristiche sia più in basso nel caso numerico che in quello sperimentale.

Questo caso studio ha dimostrato che la sensibilità del processo di danneggiamento dal raggio dell'orizzonte δ rende difficile riprodurre fenomeni di frattura duttile con la peridinamica.

Risultati dello weak-scaling

Nel fare le due analisi a 8 processori e a 64 processori è stata anche fatta un'analisi sulle capacità di weak-scaling del programma in un approccio di δ -convergence (essendo stato mantenuto circa uguale il numero di nodi per processore).

Per poter confrontare i tempi di calcolo impiegati nelle due analisi le durate totali vengono adimensionalizzata per il numero di passi di integrazione, e il numero di nodi per processore (che ha valori simili per entrambe le analisi), ottenendo una durata caratteristica τ_{an} , che indica quanto tempo è mediamente servito in ogni analisi per completare i calcoli relativi ad un nodo nel compiere un passo di integrazione.

Dividendo il valore di τ_{an} ottenuto per l'analisi a 8 processori per quello ottenuto dall'analisi ad 64 processori, si ottiene un valore di efficienza relativa che dice quanto un processore nell'analisi a 64 processori sia apparentemente meno efficiente di un processore nell'analisi ad 8 processori in questo software.

In tabella 9.4 vengono riportati i risultati di questi calcoli.



Figura 9.17: Confronto delle temperature superficiali lungo la linea centrale tra il risultato dell'analisi a 64 processori con m = 5.05 e quello dell'esperimento

$ au_{an,8}$	$84.1\mu{\rm s}$
$ au_{an,64}$	$164.1~\mu {\rm s}$
efficienza relativa	51.3%

Tabella 9.4: Risultati dell'analisi di weak-scaling

Si nota che, nell'analisi a 64 processori, i processori sono stati mediamente il 48.7% meno efficienti rispetto all'analisi ad 8 processori; questa perdita di efficienza è dovuta alla necessità di avere molte più comunicazioni tra i diversi processori attraverso processi di gather-scatter.

Un valore così basso di efficienza relativa è dovuto al fatto che nella peridinamica la quantità di dati che deve essere trasmessa da processore a processore è molto elevata a causa della non-località del problema, e dell'alto numero di nodi ghosted per processore.

Inoltre nell'analisi a 64 processori, i 4 processori in prossimità della strozzatura hanno dovuto fare molti più conti rispetto agli altri a causa del fatto che la plasticizzazione (che richiede un processo iterativo) fosse concentrata solo in quella zona, facendo da collo di bottiglia per l'analisi. Nelle 4 zone centrali dell'analisi a 64 processori la percentuale di nodi in cui occorre la plasticizzazione è molto più elevata che nelle 4 zone centrali dell'analisi ad 8 processori, come si può vedere dalle figure 9.7 e 9.8. Quindi nell'analisi a 64 processori la percentuale di tempo in cui solo i rimanenti processori sono in attesa è più elevata.

9.2 Studio della frammentazione di un meteorite entrante nell'atmosfera

In questa sezione si mostra uno studio semplificato del rientro in atmosfera di un meteorite roccioso sferico di diametro 1 cm usando la teoria peridinamica.

Lo scopo di questa sezione è riportare uno studio qualitativo fatto per vedere se nel meteorite insorgano fratture interne (dovute a deformazioni termiche) prima della fusione dello stesso.

9.2.1 Carichi esterni agenti sul meteorite

Tramite una simulazione fluidodinamica, sono stati gentilmente forniti dal Professor A. Frezzotti e dal dottorando Bariselli (entrambi del Dipartimento di Scienze e Tecnologie Aerospaziali del Politecnico di Milano) dati di flusso di calore e sforzi normali e tangenziali agenti sulla superficie del corpo [22].

I risultati forniti corrispondono alla simulazione di un corpo di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s. ad un'altitudine di 95 km. Contrariamente ai normali fenomeni convettivi, il flusso di calore entrante in questi fenomeni dipende molto

9.2 Studio della frammentazione di un meteorite entrante nell'atmosfera



Figura 9.18: Distribuzione di pressione normale sulla superficie di un meteorite di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s. ad un'altitudine di 95 km, ottenuti da una simulazione fluidodinamica

poco dalla temperatura del corpo, quindi si assumerà che il flusso di calore entrante rimanga costante al variare della temperatura esterna del meteorite.

La simulazione fluidodinamica da cui sono stati ottenuti i dati sfrutta la geometria cilindrica del problema, e considera il corpo privo di rotazione propria. Questa assunzione è giustificata dalla brevità del fenomeno in esame: essendo il fenomeno breve la rotazione del corpo sarebbe molto piccola anche se fosse presente una certa velocità di rotazione.

I dati forniscono la pressione, lo sforzo tangenziale e il flusso di energia in 25 punti posti sulla superficie ad angoli definiti rispetto alla direzione del moto del meteorite. Dovendo usare un gran numero di punti nella simulazione con Peridigm, si è assunto che un'interpolazione cubica fosse sufficiente per determinare sforzi e flussi di energia per valori angolari qualsiasi; l'interpolazione ha tenuto conto anche della simmetria del problema. Nelle figure 9.18, 9.19 e 9.20 vengono mostrati i dati della simulazione fluidodinamica e l'interpolazione svolta.



Figura 9.19: Distribuzione di sforzi tangenziali sulla superficie di un meteorite di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s. ad un'altitudine di 95 km, ottenuti da una simulazione fluidodinamica



Figura 9.20: Distribuzione di flusso termico entrante nella superficie di un meteorite di 1 cm di diametro, alla velocità di 72 km/s. ad un'altitudine di 95 km, ottenuti da una simulazione fluidodinamica

modulo di Young	E	$70\mathrm{GPa}$
coefficiente di Poisson	ν	0.25
densità	ρ	$3000~{ m kg/m^3}$
calore specifico	c	$1000 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg K}}$
conducibilità termica	k	$1.6736 \frac{W}{m K}$
coefficiente di dilatazione volumetrico	$lpha_V$	$5.4 \ 10^{-6} \ \mathrm{K}^{-1}$
energia di Griffith	G_C	$53.57\mathrm{Pam}$

Tabella 9.5: Costanti meccaniche e termiche del basalto usate nell'analisi

9.2.2 Caratteristiche del materiale e modellazione

Si assume che il meteorite sia interamente composto da roccia basaltica.

La roccia basaltica può essere considerata un materiale elasto-fragile; viene quindi modellata con un legame costitutivo correspondence elastico con un criterio di danneggiamento di allungamento critico; questo modello è ideale per riprodurre materiali rocciosi fragili che sono caratterizzati da resistenze molto maggiori in compressione rispetto alla trazione dato che si ha rottura di un bond solo quando questo si allunga oltre ad un certo valore, ma non quando si accorcia.

Per descrivere la diffusione termica viene invece usato il modello bond-based di Agwai descritto in sezione 6.1.

Un meteorite entrante in atmosfera subisce variazioni di temperature molto elevate, passando da una temperatura di pochi Kelvin alla temperatura di vaporizzazione. Le proprietà caratteristiche del basalto in questo range di temperature variano anche del 50% [27], quindi questo caso di studio può essere una buona occasione per sfruttare la possibilità di impostare le proprietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura.

L'intenzione era quindi quella di impostare dapprima la simulazione usando proprietà caratteristiche costanti, e poi rifare la simulazione usando le proprietà caratteristiche dipendenti dalla temperatura disponibili in [27]; purtroppo però non è rimasto tempo a disposizione per ripetere l'analisi con proprietà dipendenti dalla temperatura.

In tabella 9.5 vengono riportate le costanti meccaniche e termiche usate nella simulazione.

9.2.3 Discretizzazione del problema e condizioni al contorno

Il corpo ha forma sferica, ed è vincolato superficialmente tramite l'imposizione dei carichi di pressione e flussi termici la cui entità è stata mostrata in sezione 9.2.1.

Il corpo è stato discretizzato in nodi associati al volume di cubi di lato costante Δx , il volume e la posizione dei nodi associati ai cubi in prossimità della superficie esterna sono stati corretti al fine di tener conto del fatto che il cubo viene tagliato dalla superficie esterna. Questo tipo di discretizzazione consente un notevole risparmio di nodi in confronto ad una discretizzazione strutturata della sfera, in quanto consente di dividere la sfera in volumi quasi uguali.

Le condizioni al contorno sono state applicate tramite l'inclusione di un dominio aggiuntivo \mathcal{R}_c spesso Δx . I nodi relativi al corpo del meteorite sono stati ricoperti da un "guscio" di altri nodi facenti parte del dominio \mathcal{R}_c .

Il volume e l'area superficiale di ogni nodo posto sulla superficie sono stati calcolati usando la geometria sferica, e le condizioni al contorno mostrate in sezione 9.2.1 sono state applicate singolarmente ad nodo superficiale usando le equazioni 3.28 e 3.29.

In figura 9.21 viene mostrata la sezione in mezzeria della mesh dei nodi della sfera del meteorite, distinguendo i nodi del meteorite da quelli del dominio \mathcal{R}_c . Questa mesh è relativa ad una spaziatura di 0.328 mm, dovuta all'imposizione dell'orizzonte di 1 mm e di un rapporto m = 3.05.

Le modalità di frattura in prossimità della superficie possono essere influenzate dalla presenza del guscio \mathcal{R}_c , che aggiunge inerzia termica e rigidezza superficiale. Inoltre applicare i flussi termici sui nodi di questo dominio implica che questi nodi siano ad una temperatura maggiore rispetto a quelli interni, e, se si usano le stesse caratteristiche del materiale interno, ciò provoca un'espansione del guscio che si distacca prematuramente, oltre a generare un accoppiamento non richiesto nella zona di vincolo.

L'intrusività di questo dominio aggiuntivo può essere ridotta tramite alcuni accorgimenti:

- Tutti i bond tra i nodi del guscio vengono recisi
- Si impone che il coefficiente di espansione termica sul guscio sia nullo

9.2.4 Analisi con Peridigm

Data la complessità del problema viene in primis fatta un'analisi del problema della sola diffusione termica senza danno, e solo dopo viene fatta un'analisi termo-



Figura 9.21: Sezione in mezzeria della mesh del meteorite. I nodi del meteorite sono mostrati in rosso, quelli del dominio \mathcal{R}_c in blu. Orizzonte $\delta = 1 \text{ mm}$ e rapporto m = 3.05

9.2 Studio della frammentazione di un meteorite entrante nell'atmosfera

meccanica con accoppiamento debole con danno. Ciò consente di analizzare delle problematiche di modellazione con più facilità, come ad esempio le condizioni al contorno superficiali.

Analisi della diffusione termica e delle condizioni al contorno superficiali

Peridigm è stato modificato al fine di poter condurre analisi della sola diffusione termica.

Questa analisi ha lo scopo di testare la correttezza della definizione delle condizioni al contorno, e l'intrusività della presenza del dominio aggiuntivo per l'applicazione del flusso termico superficiale.

In questa analisi si integra il problema termico per 10 secondi a partire da una temperatura iniziale di 30 °C. Si è impostato un orizzonte di raggio 0.5 mm, che, usando un rapporto m = 3.05, corrisponde ad una mesh composta da 145592 nodi. Visto che questa analisi non coinvolge problemi di frattura, e visto che il modello bond-based termico converge alla teoria classica quando l'orizzonte tende a zero (come mostrato in sezione 6.5), questa analisi otterrà risultati più affidabili quanto più è piccolo il raggio dell'orizzonte.

I risultati dell'analisi riportati in figura 9.22 mostrano che dopo soli 10 secondi, in questo problema di sola diffusione termica, la temperatura sulla superficie del meteorite ha superato i 1100 °C, quella sul guscio i 1200 °C e il calore si è diffuso fino al centro del meteorite portandolo a temperature di diverse centinaia di gradi. Si nota tuttavia che la temperatura dei nodi sul guscio aggiuntivo è molto più alta della temperatura interna al meteorite.

Nella figura 9.23 viene riportato il confronto tra la temperatura massima calcolata nell'analisi sul guscio aggiuntivo e sulla superficie del meteorite nel tempo.

Come si può vedere la temperatura massima sul guscio è maggiore anche di 100°C rispetto alla temperatura massima sulla superficie del meteorite; questo fa intendere che parte del calore inserito nell'analisi tramite le condizioni al contorno superficiali rimanga imprigionato nei nodi del dominio aggiuntivo \mathcal{R}_c , e che quindi questo modo di introdurre flusso termico introduca degli errori nell'analisi. Tuttavia si può pensare che, dato il piccolo spessore del dominio aggiuntivo, l'errore introdotto sia molto piccolo e diminuisca al tendere a zero dello spessore del guscio.

In figura 9.24 si mostra la percentuale di calore sul totale fornito al meteorite, in funzione del tempo, che rimane intrappolata nel dominio aggiuntivo \mathcal{R}_c . Si può notare che la porzione di calore intrappolato è una fetta non trascurabile del calore



Figura 9.22: Distribuzione di temperatura nel piano di mezzeria del meteorite dopo 10 secondi nell'analisi della diffusione termica (si mostrano anche i punti del dominio \mathcal{R}_C)

totale fornito, e tende a ridursi con l'avanzare del tempo. Ciò fa intendere che il calore viene passato al meteorite con un leggero ritardo temporale dovuto al passaggio attraverso il guscio. Risulta evidente che questo modo di introdurre calore attraverso superfici sia intrusivo e che possa portare l'analisi a risultati sbagliati.

Al fine di diminuire l'influenza di questo problema, l'analisi viene rifatta diminuendo lo spessore del dominio aggiuntivo di 10 volte, così da diminuire l'inerzia termica del guscio aggiuntivo e favorire il passaggio di calore al meteorite. Si può vedere dall'equazione 3.20 che un simile approccio non fa aumentare il passo di integrazione critico, e quindi non aumenta i tempi di calcolo.

In figura 9.25 si mostra la percentuale di calore sul totale fornito al meteorite, in funzione del tempo, che rimane intrappolata nel dominio aggiuntivo \mathcal{R}_c nell'analisi con spessore del dominio aggiuntivo ridotto di 10 volte. Facendo un confronto con la figura 9.24, si può notare che la porzione di calore intrappolato sia diminuita notevolmente, attestandosi ovunque sotto al 10%.

In figura 9.26 si mostra la distribuzione di temperatura nel piano di mezzeria del meteorite dopo 10 secondi nell'analisi con spessore del dominio aggiuntivo ridotto di 10 volte. Confrontando la figura 9.26 con la figura 9.22, si può vedere



Figura 9.23: Confronto tra la temperatura massima calcolata sul guscio aggiuntivo e sulla superficie del meteorite.



Figura 9.24: Percentuale di calore sul totale fornito che rimane intrappolato nel dominio aggiuntivo


Figura 9.25: Percentuale di calore sul totale fornito che rimane intrappolato nel dominio aggiuntivo nell'analisi con spessore del dominio aggiuntivo ridotto di 10 volte

 $9 \, Applicazione ai casi studio$



Figura 9.26: Distribuzione di temperatura nel piano di mezzeria del meteorite dopo 10 secondi nell'analisi con spessore del dominio aggiuntivo ridotto di 10 volte (si mostrano anche i punti del dominio \mathcal{R}_C)

che la temperatura sul guscio aggiuntivo è aumentata oltre a 2700 °C. Visto che nell'ultima analisi il guscio ha un volume 10 volte inferiore, risulta evidente che il calore intrappolato nell'analisi con spessore ridotto è minore rispetto all'analisi si con spessore normale. Si riporta inoltre che, nell'analisi con spessore ridotto, la temperatura massima nel meteorite è aumentata oltre a 1200 ° (a fronte dei 1100 ° dell'analisi con spessore normale), confermando che il corpo del meteorite ha ricevuto più calore dalla superficie.

Analisi termomeccanica con accoppiamento debole

In questa sezione viene riportata l'analisi termomeccanica debolmente accoppiata della diffusione del danneggiamento nel meteorite.

Si è impostato un orizzonte di raggio 1.0 mm, che, usando un rapporto m = 3.05, corrisponde ad una mesh composta da 21488 nodi. La scelta di questo orizzonte è dovuta sia al fatto che la dimensione media dei grani cristallini nel basalto ha dimensioni comparabili, sia all'ottenimento di risultati senza utilizzare quantità eccessive di tempi di calcolo.

Nell'analisi della diffusione termica l'incremento di temperatura massima dopo solo 2 secondi è maggiore di 400 °C (vedi figura 9.23). Si ritiene che questo incremento sia sufficiente a generare abbastanza espansione termica da indurre la rottura, quindi si vuole fare un'analisi termomeccanica del meteorite entrante nell'atmosfera che duri 2 secondi (nel tempo simulazione).

Dato che il passo di integrazione critico del problema meccanico è nell'ordine di grandezza dei centesimi o decimi di microsecondo, sarebbero richiesti svariati milioni di passi di integrazione per poter ottenere il risultato cercato. Per questa ragione si è deciso di aumentare di 1000 volte la conducibilità del materiale e la potenza termica entrante, mentre la durata dell'analisi viene ridotta a soli 2 millisecondi.

Questo provvedimento avvicina le velocità di diffusione caratteristiche dei problemi meccanici e termici, che tuttavia rimangono ancora ben distinte. Questa distinzione permette di ipotizzare che i risultati che si ottengono dall'analisi che dura 2 millisecondi con conducibilità aumentata siano quasi uguali ai risultati dell'ipotetica analisi che dura 2 secondi con conducibilità non modificata.

Al fine di evitare diffusione non fisica del danno, viene aggiunta della viscosità numerica usando l'approccio descritto nella sezione 8.4.2; si impone che il coefficiente η valga 3.0.

9 Applicazione ai casi studio



Figura 9.27: Distribuzione del danno locale nel meteorite dopo 1 secondo nell'analisi termomeccanica con orizzonte $\delta = 1.0 \text{ mm}$ (non si mostrano i punti del dominio \mathcal{R}_C)

Dai risultati dell'analisi si evincono delle interessanti informazioni sul modo di fratturarsi del meteorite.

Dalle figure della sezione precedente si può notare come la parte anteriore del meteorite si scaldi molto di più rispetto alla parte posteriore; ciò provoca un'espansione volumetrica della parte anteriore in prossimità della superficie, che dunque tende a sollevarsi in avanti distaccandosi dal resto del meteorite.

A conferma di ciò si riporta in figura 9.27 la distribuzione del danno locale nel meteorite dopo 1 ms (equivalente ad 1 s). Si nota la formazione di una superficie di frattura dietro la superficie anteriore; si genera un fenomeno di spallazione che porta infine all'ablazione della superficie. La dimensione della zona distaccata ha circa la dimensione del raggio dell'orizzonte peridinamico.

Si nota tuttavia che la distanza dello spessore della zona distaccata è simile al raggio stesso dell'orizzonte. Questo può implicare che la generazione della superficie di frattura sia dovuta alla presenza della zona vincolata oppure che l'orizzonte è

9.2 Studio della frammentazione di un meteorite entrante nell'atmosfera



Figura 9.28: Distribuzione del danno locale nel meteorite dopo 1 secondi nell'analisi termomeccanica con orizzonte $\delta = 0.5 \text{ mm}$ (non si mostrano i punti del dominio \mathcal{R}_C)

troppo grande per apprezzare correttamente il fenomeno e che quindi le conclusioni di questa analisi termomeccanica non possono essere ritenute affidabili, almeno nello spessore della zona fratturata.

Per vedere se la posizione della superficie di frattura è indipendente da δ , l'analisi viene rifatta impostando il valore dell'orizzonte a $\delta = 0.5$ mm (ma con stesso m = 3.05, usando quindi la stessa mesh della sezione precedente).

In figura 9.28 si riporta la distribuzione del danno locale nel meteorite dopo 1 ms (equivalente ad 1 s). Si nota che in questo caso la superficie di frattura si è formata ad una distanza dalla superficie esterna minore del caso precedente, questa distanza corrisponde circa con il raggio δ attuamente usato.

Questo conferma che la formazione della frattura dipende dal raggio δ usato per queste analisi, e che quindi la generazione della superficie di frattura potrebbe essere dovuta alla presenza della zona vincolata oppure che l'orizzonte è troppo grande per apprezzare correttamente il fenomeno.

10 Conclusioni

L'obiettivo del lavoro di questa tesi di laurea era lo studio della teoria peridinamica e lo sviluppo di tecniche e modelli di analisi della frattura duttile in problemi termodinamici fortemente accoppiati.

Dopo aver analizzato e sviluppato, qualora ce ne fosse bisogno, tecniche di integrazione esplicita e i modelli peridinamici adatti, il lavoro di tesi è stato concluso con l'analisi di un caso studio e il confronto dei risultati con analisi sperimentali in cui è stato misurato il campo di temperature e di deformazione superficiale.

Viene riportato anche un caso studio che analizza il modo con cui un meteorite entrante in atmosfera inizia il suo processo di ablazione.

Di seguito si riportano le principali conclusioni che si traggono dal lavoro di tesi svolto.

Il caso di studio della barra di Hopkinson non ha solo mostrato che è possibile riprodurre problemi di analisi della frattura in problemi termomeccanici fortemente accoppiati con la teoria peridinamica, ma ha mostrato anche che il processo di rottura nelle analisi peridinamiche è molto sensibile al raggio dell'orizzonte usato. Diminuire il raggio da 1 mm a 0.5 mm con un approccio di δ-convergence ha portato alla strizione in due istanti diversi e lontani tra loro, e un conseguente tentativo di far combaciare l'istante iniziale della strizione tra analisi numerica e esperimento aumentando, l'orizzonte da 0.5 mm a 0.83 mm, non ha permesso comunque di avvicinarsi ai risultati dell'esperimento.

Come già anticipato una differenza tra gli istanti di strizione nelle varie analisi era attesa, in quanto il raggio dell'orizzonte peridinamico δ viene considerato come una proprietà caratteristica del problema in esame (vedi sezioni 2.6 e 8.5), esprimendo il grado di non località delle interazioni interne al materiale, dovuto ad esempio alla scala di lunghezza dell'influenza dei grani e delle inclusioni.

Tuttavia l'elevata sensibilità a questo parametro sembra indicare una significativa problematica nell'analisi peridinamica della frattura: non esistono al momento modi di poter valutare il preciso valore di δ , ma può essere solo stimato dalla struttura microscopica del materiale o dal tipo di problema affrontato.

Inoltre i modelli di danno, così come sono stati implementati in questa tesi, sono anche sensibili al rapporto m, come visto nella sezione 8.5.

Ciò implica che, con i metodi usati in questa tesi, la modellazione di fenomeni di frattura dinamica può fornire dei risultati affidabili solo tramite una dispendiosa calibrazione.

- Nella sezione 8.4.2 sono stati usati dei modelli viscoelastici al fine di impedire la diffusione non fisica del danno tra i nodi del modello discretizzato. Si è notato inoltre che la velocità di diffusione della cricca e l'inizio stesso del processo di frattura sono sensibili all'entità dello smorzamento che viene incluso nell'analisi. Da questo se ne deduce che la caratterizzazione del comportamento a frattura nei materiali fragili non può prescindere dalla definizione e quantificazione dei corretti meccanismi viscosi presenti nei materiali, che diventano rilevanti in fenomeni di frattura.
- Nella sezione 6.2.1 si è mostrato che anche il modello di diffusione termica di tipo correspondence soffre di problemi di stabilità e presenta dei modi di hourglass. Si può concludere che, come la dimostrazione della presenza di meccanismi di hourglass nel modello meccanico correspondence è stata estesa al modello correspondence di diffusione termica, si può dimostrare che qualsiasi fenomeno diffusivo che venga modellato con un modello peridinamico di tipo correspondence soffre di problemi di instabilità, che può essere controllata applicando la stessa soluzione presentata nella sezione 6.2.1.
- Nella sezione 9.1.3 è stata presentata un'analisi delle caratteristiche di scalatura delle performance del software all'aumentare dei processori. L'analisi è stata fatta cercando di mantenere concettualmente lo stesso numero di calcoli per ogni processore, quindi con un approccio di δ -convergence, per vedere quanto ogni singolo processore perde d'efficienza al crescere del numero di processori impiegati nell'analisi.

Tuttavia l'analisi di un fenomeno fisico dovrebbe essere fatta con un approccio ad *m*-convergence, dato che l'orizzonte deve essere considerato una proprietà caratteristica del problema. Questo approccio però fa aumentare il rapporto

10 Conclusioni

m con la diminuizione di Δx , aumentando il numero di vicini di ogni nodo e di conseguenza il numero di calcoli da fare per ogni nodo.

Questa condizione rappresenta un grosso limite computazionale: anche se il software scalasse perfettamente in un approccio di weak-scaling a δ -convergence, il tempo di calcolo al diminuire di Δx a δ costante non può essere considerato costante aumentando il numero dei processori sulla base del numero dei nodi.

10.1 Sviluppi futuri

Il lavoro di tesi ha mostrato la potenzialità che la teoria peridinamica ha nell'affrontare i problemi di danneggiamento e frattura, anche accoppiando fenomeni fisici molto diversi tra loro. Tuttavia la ricerca in questo campo è ancora agli inizi, di seguito si propongono dei possibili sviluppi futuri.

- Sviluppo di tecniche per la stima del raggio dell'orizzonte corretto: come anticipato, la determinazione del giusto valore dell'orizzonte sembra essere un problema significativo per la peridinamica, anche alla luce della sensibilità della soluzione rispetto a questo parametro. Senza metodi per determinare il giusto δ , l'analisi peridinamica della frattura sembra richiedere opportune calibrazioni per fornire risultati affidabili.
- Sviluppo di modelli di danno indipendenti dal rapporto m e dalla mesh: come mostrato nella sezione 8.5, i risultati ottenuti con i modelli principali usati nella peridinamica, così come sono stati inizialmente sviluppati, sono dipendenti dal rapporto m con un andamento non definito. Assieme allo sviluppo di tecniche per la stima di δ , risolvere il problema della dipendenza dei modelli di danno dalla mesh permetterà di ottenere un metodo che non necessita di calibrare il valore di δ per ottenere i risultati voluti.
- Sviluppo di tecniche di integrazione implicita del problema peridinamico termomeccanico fortemente accoppiato, e implementazione in Peridigm: lo sviluppo di queste tecniche può consentire di analizzare una più gran varietà di fenomeni rispetto a quelli analizzati in questa tesi. L'integrazione esplicita nel tempo permette di analizzare solo fenomeni di durata breve; per la ridotta dimensione del passo di integrazione critico nel problema meccanico l'analisi di fenomeni di durata superiore al secondo è quasi impossibile perchè richiederebbe decine di milioni di passi di integrazione.

 Accoppiamento peridinamica-FEM e/o rilassamento della mesh: nella modellazione del problema della barra di Hopkinson nella sezione 9.1 è stato necessario modellare l'intero provino con lo stessa spaziatura tra i nodi, nonostante si sapesse a priori dove la sollecitazione fosse più alta e dove sarebbe poi avvenuta la frattura.

Applicare una diversa concentrazione di nodi in tutto il dominio del provino avrebbe consentito l'integrazione del problema in maniera più veloce, risparmiando tempo di calcolo grazie alla presenza di meno nodi, e soprattutto meno bonds. Purtroppo in questa tesi però non sono state studiate o sviluppate simili tecniche di rilassamento della mesh che consentissero questo risparmio, ma l'argomento è sicuramente di interesse nella comunità scientifica, come mostra il lavoro di Bobaru [7] e Dipasquale [14].

Uno sviluppo alternativo può essere lo studio di tecniche di accoppiamento tra peridinamica ed elementi finiti, che promette risparmi ulteriori grazie al fatto che non fa uso di bonds; su questo fronte la comunità peridinamica è già molto attiva, si segnalano per esempio i lavori di Littlewood [37] e Galvanetto et al. [23].

• Studio delle condizioni al contorno superficiali in problemi non locali: i risultati della sezione 9.2 hanno mostrato che, nei problemi peridinamici termomeccanici, il modo con cui le condizioni al contorno superficiali vengono definite ha una grande influenza sulla soluzione. Si è dimostrato che semplicemente variando il volume dei nodi facenti parte del dominio aggiuntivo \mathcal{R}_c , è possibile aumentare le capacità di trasmissione del calore dai nodi del dominio aggiuntivo ai nodi del dominio proprio del corpo.

Vista la grande influenza che l'applicazione delle condizione al contorno può avere sui risultati, si ritiene che un'indagine più approfondita sulle modalità di imporre le condizioni al contorno superficiali in problemi non locali sarebbe molto utile per il progresso della ricerca nel campo della peridinamica.

• Analisi peridinamica di fenomeni di transizione in funzione della temperatura: in questa tesi è stato riportato anche lo sviluppo di tecniche per la gestione di proprietà caratteristiche dei materiali in funzione della temperatura, ma queste tecniche non sono state usate. In futuro può valere la pena di fare analisi della frattura in fenomeni in cui la dipendenza delle proprietà dalla temperatura sono rilevanti. Esempi interessanti possono essere lo

10 Conclusioni

studio del comportamento fragile degli acciai a basse temperature, lo studio della frattura e della DTBT (*Ductile To Brittle Transition*) in scudi termici di tungsteno o berillio applicati all'interno di reattori a fusione nucleare [32,66] o lo studio di altri fenomeni che subiscono sollecitazioni termiche tali per cui la temperatura raggiunga valori prossimi a quelli di fusione o di trasformazione allotropica.

- [1] AGWAI, A. A Peridynamic Approach For Coupled Fields. PhD thesis, 2011.
- [2] AMANI, J., OTERKUS, E., AREIAS, P., ZI, G., NGUYEN-THOI, T., AND RABCZUK, T. A non-ordinary state-based peridynamics formulation for thermoplastic fracture. *International Journal of Impact Engineering* 87 (Jan. 2016), 83–94.
- BOBARU, F., AND DUANGPANYA, M. The peridynamic formulation for transient heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer 53*, 19 (Sept. 2010), 4047–4059.
- [4] BOBARU, F., AND DUANGPANYA, M. A peridynamic formulation for transient heat conduction in bodies with evolving discontinuities. *Journal of Computational Physics 231*, 7 (Apr. 2012), 2764–2785.
- [5] BOBARU, F., FOSTER, J. T., GEUBELLE, P. H., AND SILLING, S. A. Handbook of Peridynamic Modeling. Taylor & Francis, Dec. 2015.
- [6] BOBARU, F., AND HU, W. The Meaning, Selection, and Use of the Peridynamic Horizon and its Relation to Crack Branching in Brittle Materials. *International Journal of Fracture 176*, 2 (Aug. 2012), 215–222.
- [7] BOBARU, F., YANG, M., ALVES, L. F., SILLING, S. A., ASKARI, E., AND XU, J. Convergence, adaptive refinement, and scaling in 1d peridynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 77, 6 (Feb. 2009), 852–877.
- [8] BRAR, N. S., JOSHI, V. S., AND HARRIS, B. W. Constitutive Model Constants for Al7075-T651 and Al7075-T6. In *Proceedings of the 16th APS Topical Conference on Shock Compression of Condensed Matter* (Dec. 2009), American Physical Society.
- BREITENFELD, M. Quasi-static non-ordinary state-based peridynamics for the modeling of 3D fracture. PhD thesis, 2014.

- [10] BREITZMAN, T., AND DAYAL, K. Bond-level deformation gradients and energy averaging in peridynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 110 (Jan. 2018), 192–204.
- [11] CHRISTENSEN, R. M. Theory of Viscoelasticity: Second Edition. Courier Corporation, Apr. 2013.
- [12] D'ANTUONO, P. Formulazione peridinamica del problema termo-meccanico. Master's thesis, 2016.
- [13] DIPASQUALE, D., SAREGO, G., ZACCARIOTTO, M., AND GALVANETTO, U. A discussion on failure criteria for ordinary state-based peridynamics. *Engineering Fracture Mechanics 186* (Dec. 2017), 378–398.
- [14] DIPASQUALE, D., ZACCARIOTTO, M., AND GALVANETTO, U. Crack propagation with adaptive grid refinement in 2d peridynamics. *International Journal of Fracture 190*, 1 (Nov 2014), 1–22.
- [15] DRUCKER, D. C. A more fundamental approach to plastic stress-strain relations. In Proceedings of the 1st US National Congress of Applied Mechanics (1951), ASME, pp. 487–491.
- [16] D'ANTUONO, P., AND MORANDINI, M. Thermal shock response via weakly coupled peridynamic thermo-mechanics. *International Journal of Solids and Structures 129* (Dec. 2017), 74–89.
- [17] EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDISATION. EN 1993-1-2: Eurocode 3: Design of steel structures - Part 1-2: General rules - Structural fire design. CEN, Brussels, 1993.
- [18] FLANAGAN, D. P., AND TAYLOR, L. M. An accurate numerical algorithm for stress integration with finite rotations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 62, 3 (June 1987), 305–320.
- [19] FOSTER, J. T. Dynamic Crack Initiation Toughness: Experiments and Peridynamic Modeling. Tech. Rep. SAND2009-7217, Sandia National Laboratories, Oct. 2009.
- [20] FOSTER, J. T., SILLING, S. A., AND CHEN, W. An energy based failure criterion for use with peridynamic states. *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 9, 6 (Dec. 2011), 675–687.

- [21] FOSTER, J. T., SILLING, S. A., AND CHEN, W. W. Viscoplasticity using peridynamics. International Journal for Numerical Methods in Engineering 81, 10 (Mar. 2010), 1242–1258.
- [22] FREZZOTTI, A., AND BARISELLI, F. personal communication.
- [23] GALVANETTO, U., MUDRIC, T., SHOJAEI, A., AND ZACCARIOTTO, M. An effective way to couple fem meshes and peridynamics grids for the solution of static equilibrium problems. *Mechanics Research Communications* 76 (2016), 41 – 47.
- [24] GERSTLE, W., READ, D. T., SILLING, S., TEWARY, V. K., AND LEHOUCQ,
 R. Peridynamic Simulation of Electromigration. *Cmc-Computers Materials* & Continua 8 (Jan. 2008).
- [25] GILAT, A., KUOKKALA, V.-T., SEIDT, J. D., AND SMITH, J. L. Full-Field Measurement of Strain and Temperature in Quasi-Static and Dynamic Tensile Tests on Stainless Steel 316l. *Proceedia Engineering 207* (Jan. 2017), 1994–1999.
- [26] HA, Y. D., AND BOBARU, F. Studies of dynamic crack propagation and crack branching with peridynamics. *International Journal of Fracture 162*, 1-2 (Mar. 2010), 229–244.
- [27] HARTLIEB, P., TOIFL, M., KUCHAR, F., MEISELS, R., AND ANTRETTER, T. Thermo-physical properties of selected hard rocks and their relation to microwave-assisted comminution. *Minerals Engineering 91* (May 2016), 34–41.
- [28] HEROUX, M. A., BARTLETT, R. A., HOWLE, V. E., HOEKSTRA, R. J., HU, J. J., KOLDA, T. G., LEHOUCQ, R. B., LONG, K. R., PAWLOWSKI, R. P., PHIPPS, E. T., SALINGER, A. G., THORNQUIST, H. K., TUMINARO, R. S., WILLENBRING, J. M., WILLIAMS, A., AND STANLEY, K. S. An Overview of the Trilinos Project. ACM Trans. Math. Softw. 31, 3 (Sept. 2005), 397–423.
- [29] JOHNSON, G. R., AND COOK, W. H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures. *Engineering Fracture Mechanics* 21, 1 (Jan. 1985), 31–48.
- [30] KARKALOS, N. E., AND MARKOPOULOS, A. P. Determination of Johnson-Cook material model parameters by an optimization approach using the fireworks algorithm. *Procedia Manufacturing* 22 (Jan. 2018), 107–113.

- [31] LAI, X., REN, B., FAN, H., LI, S., WU, C., REGUEIRO, R. A., AND LIU, L. Peridynamics simulations of geomaterial fragmentation by impulse loads: Peridynamics simulations of geomaterial fragmentation by impulse loads. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 39, 12 (Aug. 2015), 1304–1330.
- [32] LI, M., WERNER, E., AND YOU, J.-H. Cracking behavior of tungsten armor under ELM-like thermal shock loads: A computational study. *Nuclear Materials and Energy 2* (Mar. 2015), 1–11.
- [33] LIAO, Y., LIU, L., LIU, Q., LAI, X., ASSEFA, M., AND LIU, J. Peridynamic simulation of transient heat conduction problems in functionally gradient materials with cracks. *Journal of Thermal Stresses* 40, 12 (Dec. 2017), 1484–1501.
- [34] LIPTON, R., SILLING, S., AND LEHOUCQ, R. Complex fracture nucleation and evolution with nonlocal elastodynamics. Tech. Rep. SAND2016-0393J, Sandia National Laboratories, Jan. 2016.
- [35] LITTLEWOOD, D. J. A Nonlocal Approach to Modeling Crack Nucleation in AA 7075-T651. In Volume 8: Mechanics of Solids, Structures and Fluids; Vibration, Acoustics and Wave Propagation (Denver, Colorado, USA, 2011), ASME, pp. 567–576.
- [36] LITTLEWOOD, D. J. Roadmap for Peridynamic Software Implementation. Tech. Rep. SAND2015-9013, Sandia National Laboratories, Oct. 2015.
- [37] LITTLEWOOD, D. J., SILLING, S. A., MITCHELL, J. A., SELESON, P. D., BOND, S. D., PARKS, M. L., TURNER, D. Z., BURNETT, D. J., OSTIEN, J., AND GUNZBURGER, M. Strong Local-Nonlocal Coupling for Integrated Fracture Modeling. Tech. Rep. SAND2015-7998, Sandia National Laboratories, Sept. 2015.
- [38] LITTLEWOOD, D. J., THOMAS, J. D., AND SHELTON, T. Estimation of the Critical Time Step for Peridynamic Models. Tech. Rep. SAND2013-4692C, Sandia National Laboratories, June 2013.
- [39] MACEK, R. W., AND SILLING, S. A. Peridynamics via Finite Element Analysis. *Finite Elem. Anal. Des.* 43, 15 (Nov. 2007), 1169–1178.

- [40] MADENCI, E., AND OTERKUS, E. Peridynamic Theory and Its Applications. Springer Science & Business Media, Oct. 2013.
- [41] MADENCI, E., AND OTERKUS, S. Ordinary state-based peridynamics for plastic deformation according to von Mises yield criteria with isotropic hardening. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids 86* (Jan. 2016), 192–219.
- [42] MITCHELL, J., SILLING, S., AND LITTLEWOOD, D. A position-aware linear solid constitutive model for peridynamics. *Journal of Mechanics of Materials* and Structures 10, 5 (Nov. 2015), 539–557.
- [43] MITCHELL, J. A. A non-local, ordinary-state-based viscoelasticity model for peridynamics. Tech. Rep. SAND2011-8064, Sandia National Laboratories, Oct. 2011.
- [44] MITCHELL, J. A. A Nonlocal, Ordinary, State-Based Plasticity Model for Peridynamics. Tech. Rep. SAND2011-3166, Sandia National Laboratories, May 2011.
- [45] MITCHELL, J. A. On the 'Dsf' and the 'Dreaded Surface Effect'. Tech. Rep. SAND2013-1927C, Sandia National Laboratories, Mar. 2013.
- [46] MONAGHAN, J. J. On the problem of penetration in particle methods. Journal of Computational Physics 82, 1 (May 1989), 1–15.
- [47] NEWMARK, N. M. A Method of Computation for Structural Dynamics. Journal of the Engineering Mechanics Division 85, 3 (1959), 67–94.
- [48] NICHOLAS, T. Tensile testing of materials at high rates of strain. Experimental Mechanics 21, 5 (May 1981), 177–185.
- [49] OTTOSEN, N. S., AND RISTINMAA, M. The Mechanics of Constitutive Modeling. Elsevier, Sept. 2005.
- [50] PARKS, M. L., LEHOUCQ, R. B., PLIMPTON, S. J., AND SILLING, S. A. Implementing peridynamics within a molecular dynamics code. *Computer Physics Communications* 179, 11 (Dec. 2008), 777–783.
- [51] PARKS, M. L., LITTLEWOOD, D. J., MITCHELL, J. A., AND SILLING, S. A. Peridigm users' guide. V1.0.0. Tech. Rep. SAND2012-7800, 1055619, Sandia National Laboratories, Sept. 2012.

- [52] PEREZ-CASTELLANOS, J.-L., AND RUSINEK, A. Temperature increase associated with plastic deformation under dynamic compression: application to aluminium alloy AL 6082. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics Vol.* 50 nr 2 (2012), 377–398.
- [53] QUEIRUGA, A. F., AND MORIDIS, G. Numerical experiments on the convergence properties of state-based peridynamic laws and influence functions in two-dimensional problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 322* (Aug. 2017), 97–122.
- [54] RAMULU, M., KOBAYASHI, A. S., KANG, B. S. J., AND BARKER, D. B. Further studies on dynamic crack branching. *Experimental Mechanics 23*, 4 (Dec. 1983), 431–437.
- [55] REN, B., FAN, H., BERGEL, G. L., REGUEIRO, R. A., LAI, X., AND LI, S. A peridynamics–SPH coupling approach to simulate soil fragmentation induced by shock waves. *Computational Mechanics* 55, 2 (Feb. 2015), 287–302.
- [56] SEIDT, J., KUOKKALA, V.-T., SMITH, J., AND GILAT, A. Synchronous Full-Field Strain and Temperature Measurement in Tensile Tests at Low, Intermediate and High Strain Rates. *Experimental Mechanics* 57, 2 (Feb. 2017), 219–229.
- [57] SELESON, P., AND LITTLEWOOD, D. J. Convergence studies in meshfree peridynamic simulations. *Computers & Mathematics with Applications 71*, 11 (June 2016), 2432–2448.
- [58] SILLING, S. A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces. *Journal of Mechanics Physics of Solids* 48 (Jan. 2000), 175–209.
- [59] SILLING, S. A. Linearized Theory of Peridynamic States. Journal of Elasticity 99, 1 (Mar. 2010), 85–111.
- [60] SILLING, S. A. Stability of peridynamic correspondence material models and their particle discretizations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 322* (Aug. 2017), 42–57.
- [61] SILLING, S. A., AND ASKARI, E. A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics. *Computers & Structures 83*, 17 (June 2005), 1526–1535.

- [62] SILLING, S. A., EPTON, M., WECKNER, O., XU, J., AND ASKARI, E. Peridynamic States and Constitutive Modeling. *Journal of Elasticity* 88, 2 (Aug. 2007), 151–184.
- [63] SILLING, S. A., AND LEHOUCQ, R. B. Convergence of Peridynamics to Classical Elasticity Theory. *Journal of Elasticity* 93, 1 (Oct. 2008), 13.
- [64] SILLING, S. A., AND LEHOUCQ, R. B. Peridynamic Theory of Solid Mechanics. In Advances in Applied Mechanics, H. A. a. E. v. d. Giessen, Ed., vol. 44 of Advances in Applied Mechanics. Elsevier, 2010, pp. 73–168.
- [65] SIMO, J. C., AND HUGHES, T. J. R. Computational Inelasticity. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer-Verlag, New York, 1998.
- [66] SINCLAIR, G., TRIPATHI, J. K., DIWAKAR, P. K., WIRTZ, M., LINKE, J., AND HASSANEIN, A. Structural evolution of tungsten surface exposed to sequential low-energy helium ion irradiation and transient heat loading. *Nuclear Materials and Energy 12* (Aug. 2017), 405–411.
- [67] TAYLOR, G. I., AND QUINNEY, H. The latent energy remaining in a metal after cold working. Proc. R. Soc. Lond. A 143, 849 (Jan. 1934), 307–326.
- [68] TUPEK, M. R., AND RADOVITZKY, R. An extended constitutive correspondence formulation of peridynamics based on nonlinear bond-strain measures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids 65* (Apr. 2014), 82–92.
- [69] TUPEK, M. R., RIMOLI, J. J., AND RADOVITZKY, R. An approach for incorporating classical continuum damage models in state-based peridynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 263* (Aug. 2013), 20–26.
- [70] VOGLER, T., AND LAMMI, C. J. A Nonlocal Peridynamic Plasticity Model for the Dynamic Flow and Fracture of Concrete. Tech. Rep. SAND2014-18257, 1159446, Sandia National Laboratories, Oct. 2014.
- [71] WARREN, T. L., SILLING, S. A., ASKARI, A., WECKNER, O., EPTON, M. A., AND XU, J. A non-ordinary state-based peridynamic method to model solid material deformation and fracture. *International Journal of Solids and Structures* 46, 5 (Mar. 2009), 1186–1195.

- [72] WECKNER, O., AND NIK MOHAMED, N. A. Viscoelastic material models in peridynamics. *Applied Mathematics and Computation 219*, 11 (Feb. 2013), 6039–6043.
- [73] WELLMAN, G. W. A simple approach to modeling ductile failure. Tech. Rep. SAND2012-1343, 1049479, Sandia National Laboratories, June 2012.
- [74] WU, C. T., AND REN, B. A stabilized non-ordinary state-based peridynamics for the nonlocal ductile material failure analysis in metal machining process. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 291* (July 2015), 197–215.
- [75] ZEHNDER, A. T. A model for the heating due to plastic work. Mechanics Research Communications 18, 1 (Jan. 1991), 23–28.
- [76] ZHOU, X., WANG, Y., AND QIAN, Q. Numerical simulation of crack curving and branching in brittle materials under dynamic loads using the extended non-ordinary state-based peridynamics. *European Journal of Mechanics* A/Solids 60 (Nov. 2016), 277–299.