



شبیه‌سازی ایجاد و گسترش خرابی پوشش‌ها در ساختارهای شامل پوشش و بستر در اثر بار حرارتی با استفاده از روش المان گسسته

محمدامین قاسمی¹، سید رضا فلاحتگر^{2*}

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت

* رشت، صندوق پستی 3756، falahatgar@guilan.ac.ir

چکیده

استفاده از پوشش‌ها در صنایع مختلفی، به منظور بهبود خواص سطحی مواد مورد استفاده قرار می‌گیرند. یکی از مدهای خرابی متداول در این ساختارها، جدایش پوشش از بستر از ریشه ترک‌های کانالی شکل می‌باشد. در این مقاله، روش المان گسسته به منظور شبیه‌سازی فرآیند ایجاد و گسترش خرابی در اثر اختلاف ضرایب انبساط حرارتی بین پوشش و بستر، از ریشه یک ترک کانالی شکل، مورد استفاده قرار گرفت. رفتار پوشش و بستر به صورت ترد الاستیک، به طوری که سفتی بستر بیشتر از پوشش و ضریب انبساط حرارتی پوشش به مراتب بیشتر از بستر است، در نظر گرفته شد. همچنین خواص فصل مشترک به صورت میانگین هندسی از خواص بین پوشش و بستر می‌باشد. بارگذاری نیز به صورت کاهش دما به کل مجموعه اعمال شد. اثر پارامترهایی نظیر اختلاف ضرایب الاستیک بین پوشش و بستر و همچنین ضخامت پوشش مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با افزایش اختلاف سفتی بین پوشش و بستر و همچنین کاهش ضخامت پوشش، اختلاف دمای مورد نیاز برای ایجاد جدایش اولیه در فصل مشترک، افزایش پیدا کرد. از دیگر نتایجی که می‌توان به آن اشاره کرد، تغییر در الگوی گسترش خرابی اولیه ایجاد شده، به ازای تغییر در اختلاف سفتی بین پوشش و بستر بود به طوری که، در پوشش‌هایی که سفتی به مراتب کم‌تری نسبت به بستر دارند، گسترش آسیب در داخل پوشش اتفاق افتاد اما برای پوشش‌هایی که اختلاف سفتی آن‌ها با بستر کم‌تر است، گسترش آسیب تنها در فصل مشترک ادامه پیدا کرد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 29 بهمن 1396

پذیرش: 22 فروردین 1397

ارائه در سایت: 21 اردیبهشت 1397

کلید واژگان:

ساختارهای شامل پوشش و بستر

روش المان گسسته

جدایش

ایجاد و گسترش خرابی

Damage initiation and propagation simulation of coatings in coating/substrate structures under thermal loading using discrete element method

Mohammad Amin Ghasemi, Seyed Reza Falahatgar*

Faculty of Mechanical engineering, University of Guilan, Guilan, Rasht

* P.O.B. 3756, Rasht, Iran, falahatgar@guilan.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 18 February 2018
Accepted 11 April 2018
Available Online 11 May 2018

Keywords:

Coating/substrate structure
discrete element method
delamination at the interface
damage initiation and propagation
Nanofluid

ABSTRACT

Coatings are used in various industries in order to improve the surface properties of materials. Delamination of coatings from their substrate, at the root of channel cracks, is one of the common failure modes in these structures. In this paper, discrete element method is used in order to simulate the initiation and propagation of damages, caused by the mismatch between the thermal expansion coefficients of coating and substrate. Coating and substrate are considered to be brittle elastic in which, substrate is stiffer than the coating, but the thermal expansion coefficient of coating is considered to be much greater than substrate. The interface properties are also considered to be the geometric average between the coating and substrate. Temperature reduction is applied to the whole structure as loading. The effect of elastic mismatch and coating thickness was investigated. The results showed that, by increasing the elastic mismatch and decreasing the coating thickness, the temperature reduction, need to delamination initiation at the interface, increased. Also, changing in the damage propagation pattern was happened by changing in the elastic mismatch. In coatings with high elastic mismatch, damage propagation was happened inside them but by increasing the stiffness, damage propagation happened at the interface.

1- مقدمه

امروزه در صنایع بسیاری از پوشش‌ها و لایه‌های نازک به منظور بهبود خواص فیزیکی و شیمیایی سطح بستر (زیرلایه) استفاده می‌شود. از جمله آن‌ها می‌توان به صنایع الکترونیک و یا تولید پوشش‌های مقاوم در برابر حرارت، خوردگی و ... اشاره کرد. برای مثال، پوشش زیرکونیا به عنوان یک لایه مقاوم در برابر حرارت بر روی سوپراآلیاژها مورد استفاده قرار می‌گیرد. استفاده از لایه‌های سیلیکون نیتريد بر روی فلزات و پلیمرها در ریزپردازنده‌ها از دیگر

کاربردهای استفاده از پوشش‌ها در صنایع است. بسته به کاربرد این پوشش‌ها، ضخامت آن‌ها از چند صد نانومتر تا چند میلی‌متر متغیر است. مدهای خرابی مختلفی برای پوشش‌ها در این ساختارها وجود دارد. یکی از انواع متداول مدهای خرابی در پوشش‌ها، ترک‌های کانالی شکل ایجاد شده بر روی آن‌ها می‌باشد. این مود خرابی می‌تواند در اثر تنش‌های کششی پسماند که در حین فرآیند ساخت در آن‌ها به وجود می‌آیند، ایجاد شوند. عامل ایجاد این تنش‌های کششی، اختلاف ضریب انبساط حرارتی بین پوشش

شبیه‌سازی ایجاد و گسترش ترک بین‌لایه‌ای از دیگر کارهایی بود که توسط آن‌ها انجام شد [4]. فاکس و چای [5] نیز به شبیه‌سازی جدایش بین‌لایه‌ای از ریشه ترک کانالی شکل با استفاده از روش اجزای محدود پرداختند. همچنین تست خمش چهار نقطه‌ای برای نمونه شامل دو لایه شیشه که بر روی بستری از جنس پلی‌کربنات قرار داشت توسط آن‌ها انجام شد. آن‌ها به اختلاف در الگوی گسترش ترک بین‌لایه‌ای، بین دو نمونه که دارای خواص ماده کاملاً یکسان بودند اشاره کردند و آن را ناشی از خواص سطح متفاوت دانستند.

همچنین دسته دیگری از کارها نیز به شبیه‌سازی فرآیند جدایش بین پوشش و بستر در اثر بارهای خارجی وارد بر این مجموعه، نظیر نفوذ ناندندانه در پوشش که به منظور تعیین خواص مکانیکی پوشش و بستر انجام می‌شود، پرداختند که می‌توان به مراجع [6-8] اشاره کرد.

اما همان‌طور که اشاره شد، این کارها با استفاده از روش المان محدود که بر مبنای محیط پیوسته است، انجام شده‌اند. لذا با استفاده از این روش‌ها، نمی‌توان اثرات ریزساختارهای مواد و آسیب‌های جزئی که در حین گسترش ترک در ساختار ایجاد می‌شود را در آن مشاهده کرد. لذا برای رفع این مشکل از روش‌های دیگری مانند روش شبکه، که توضیح کاملی از این روش در مرجع [9] ارائه شده است، استفاده می‌شود. برای مثال از کارهایی که با استفاده از روش شبکه به شبیه‌سازی گسترش ترک در ساختارهای پوشش و بستر پرداخته‌اند، می‌توان به کار انجام‌شده توسط کروسی و برادلی [10] و همچنین ولینگا و همکاران [11] اشاره کرد.

در این مقاله، روش المان گسسته برای شبیه‌سازی ایجاد و گسترش آسیب در ساختارهای شامل پوشش و بستر مورد استفاده قرار گرفته است. این روش، نخستین بار توسط کاندال و استراک [12] برای بررسی رفتار مواد دارای ساختار ناپیوسته (خاصیت دانه‌ای²)، ارائه شد. در این روش، ساختار ماده به وسیله مجموعه‌ای از دیسک‌ها و گوی‌ها، که با یکدیگر بر هم کنش دارند، توصیف می‌شود. در واقع، توده ماده در مقیاس ماکرو، با کنار هم قرار گرفتن مجموعه‌ای از ذرات در مقیاس میکرو، توصیف می‌شود. در ادامه با اعمال مدل‌هایی برای اتصال ذرات، شبیه‌سازی پدیده‌های پیچیده‌ای مانند رشد ترک امکان‌پذیر شد [13]. با توجه به ویژگی‌هایی که به آن‌ها اشاره شد، این روش در تحلیل‌های بسیاری به منظور شبیه‌سازی آسیب‌های جزئی در ساختارهای مختلف مورد استفاده قرار گرفت. کوسانو و همکاران [14] از این روش برای بررسی و پیش‌بینی خرابی در ساختار بتن تحت بار ضربه‌ای پرداختند. ویتل و همکاران [15,16] به بررسی گسترش ترک عرضی در لایه 90 درجه از یک کامپوزیت متعامد متقارن، با روش المان گسسته پرداختند. در این مقاله‌ها، ذرات بیانگر سطح مقطع الیاف بودند که به‌وسیله فنرهایی که بیانگر فاز زمینه بین آن‌ها است، به یکدیگر متصل شدند. یانگ و همکاران با استفاده از روش المان گسسته به شبیه‌سازی گسترش ترک عرضی در یک لایه کامپوزیت 90 درجه [17] و همچنین جدایش بین‌لایه‌ای [18] در یک لمینیت کامپوزیتی پرداختند. آن‌ها در کار خود از مدل تماس نرم‌شونده³ که مشابه المان‌های ناحیه چسبنده در روش المان محدود است، استفاده کردند. ختاب و همکاران [19,20] با استفاده از روش المان‌های گسسته به‌صورت دو بعدی به بررسی خواص مکانیکی الیاف کربن بافته شده در بستر ماتریس پلیمری پرداختند. آندره و همکاران [21] به ارائه مدل تماس تیر چسبنده⁴

و بستر است. در واقع، از آنجایی که فرآیند ایجاد پوشش‌ها معمولاً در دماهای بالا اتفاق می‌افتد، پس از سرد کردن ساختار، اگر ضریب انبساط حرارتی لایه از بستر آن بیشتر باشد، تنش‌های کششی پسماند در پوشش ایجاد می‌گردد. ترک کانالی شکل از یک نقص کوچک در سطح لایه شروع شده و به تدریج در لایه گسترش می‌یابد. این حالت معمولاً برای لایه‌های از جنس فلز یا پلیمر که بر روی بستری از جنس سرامیک لایه‌نشانی می‌شوند، اتفاق می‌افتد [1]. شماتیکی از یک ترک کانالی شکل در ساختار شامل پوشش و بستر در "شکل 1" نشان داده شده است.

از طرف دیگر، بسته به اختلاف ضرایب الاستیک پوشش و بستر و همچنین پایین بودن چقرمگی فصل مشترک بین آن‌ها، امکان جدایش پوشش از بستر از ریشه ترک کانالی شکل وجود دارد. این حالت نیز به صورت شماتیکی در "شکل 2" نشان داده شده است.

در زمینه شبیه‌سازی جدایش بین پوشش و بستر کارهای بسیاری صورت گرفته است. در اکثر این کارها، از روش المان محدود به‌صورت دوبعدی و یا سه‌بعدی برای شبیه‌سازی استفاده شده است. همچنین در بسیاری از آن‌ها، قوانین مکانیک شکست کلاسیک (برای مثال، مکانیک شکست الاستیک خطی) برای بررسی گسترش ترک بین‌لایه‌ای، در حالی که ترک به‌صورت پیش‌فرض در ساختار وجود دارد، استفاده می‌شود. برای مثال می‌توان به مقاله یه و همکاران [2] اشاره کرد که با در نظر گرفتن رفتار الاستیک خطی برای لایه و بستر و بر مبنای مکانیک شکست الاستیک خطی، نرخ آزادسازی انرژی ترک بین لایه‌ای را محاسبه کردند. می و همکاران [3] نیز با استفاده از روش اجزای محدود با در نظر گرفتن حالت کرنش صفحه‌ای و بر مبنای مکانیک شکست الاستیک خطی به شبیه‌سازی ترک بین‌لایه‌ای از ریشه ترک کانالی شکل پرداختند. همچنین استفاده از المان‌های ناحیه چسبنده¹ برای

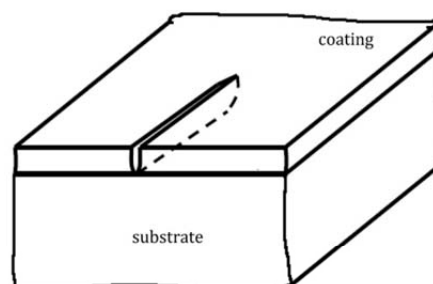


Fig. 1 Schematic of a channeling crack on a coating

شکل 1 شماتیکی از یک ترک کانالی شکل ایجاد شده بر روی پوشش

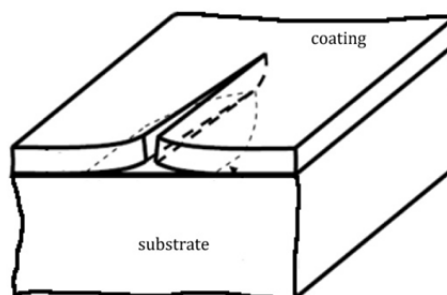


Fig. 2 Schematic of delamination from the root of a channeling crack

شکل 2 شماتیکی از جدایش پوشش از بستر از ریشه یک ترک کانالی شکل

² Granular Material

³ Contact softening model

⁴ Cohesive beam

¹ Cohesive zone

تک تک ذرات تشکیل دهنده است که در تماس با ذرات دیگر قرار دارد و طی آن، حرکت هر ذره مدل سازی می شود. در ابتدا این روش به عنوان یک ابزار برای شبیه سازی رفتار مکانیکی مواد دارای خاصیت دانه ای بر مبنای بر هم کنش بین ذرات ارائه شد. در ادامه با اعمال مدل هایی برای اتصال ذرات، شبیه سازی پدیده های پیچیده ای مانند رشد ترک امکان پذیر شد. به عنوان مثال با تعریف اتصال بین المان ها، یک مجموعه از ذرات را می توان به صورت یک ماده جامد دانه ای در مقیاس ماکرو، مانند بتن، در نظر گرفت. در واقع، در این روش، گسترش ترک و خرابی به واسطه شکست اتصال بین ذرات ناشی از بارگذاری اتفاق می افتد. این روش به دلیل قابلیت بالا برای توصیف رفتار موضعی برای مدل سازی میکرو مکانیکی مواد، به خصوص در مسائلی که مواد دارای میکروساختار پیچیده و ناپیوستگی در ساختار خود هستند، مورد استفاده قرار گرفته است.

در حالت کلی می توان گفت که شبیه سازی به روش المان گسسته طی سه مرحله انجام می گیرد. در مرحله اول، بررسی می شود که دو ذره یا المان با یکدیگر در تماس هستند یا خیر. مرحله دوم شامل محاسبه نیروهای عکس العمل بین ذراتی است که با یکدیگر در تماس هستند و مرحله سوم شامل انتگرال گیری عددی می باشد. نیروهای عکس العمل بین ذرات بر مبنای رابطه نیرو-جابجایی که برای تماس بین آن دو تعریف شده است، تعیین می گردد. با محاسبه نیروهای وارد بر هر ذره، با استفاده از معادلات حرکت، شتاب ذره محاسبه می شود. سپس با انتگرال گیری زمانی به صورت صریح و بر مبنای روش تفاضل های مرکزی، موقعیت جدید هر ذره به دست می آید. این فرآیند بارها و بارها تا زمانی که قید مورد نظر برای توقف محاسبات اتمام گردد، ادامه پیدا می کند.

2-1- فرمول بندی روش المان گسسته

در روش المان گسسته، فرض می شود که یک ماده جامد می تواند به وسیله مجموعه ای از ذرات صلب توصیف شود، که با یکدیگر در تماس هستند و در جهت عمودی و برشی برهم کنش دارند. ذرات می توانند دارای اشکال مختلفی باشند که در این جا به صورت استوانه هایی با مقطع دایروی فرض می شوند.

مطابق "شکل 3" برای هر ذره i که دارای جرم m و ممان اینرسی I است، اگر F_i برآیند نیروها و T_i برآیند گشتاورهای وارد بر ذره باشند، آن گاه ذره جابجایی به اندازه u_i و سرعت زاویه ای ω_i خواهد داشت. رابطه (1) حرکت های انتقالی و دورانی ذره را توصیف می کند.

$$\begin{aligned} m_i \ddot{u}_i &= F_i \\ I_i \ddot{\omega}_i &= T_i \end{aligned} \quad (1)$$

برآیند نیروها و گشتاورهای وارد بر ذره شامل، نیروها و گشتاورهای خارجی وارد بر ذره نام F^{ext} و T^{ext} ، نیروهای تماسی بین ذرات مجاور (F^{cont}) و نیروها و ممان های میرایی هستند (رابطه (2)) [27].

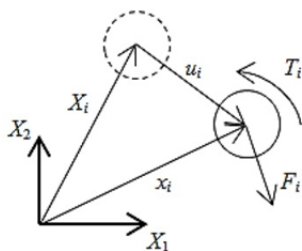


Fig. 3 motion of discrete element (i)

شکل 3 حرکت المان گسسته نام

برای اتصال المان های گسسته پرداختند. ماهو و همکاران نیز با استفاده از این مدل به شبیه سازی فرآیند گسترش آسیب در یک کامپوزیت الیافی با در نظر گرفتن یک المان واحد شامل یک فیبر تک جهته همراه با رزین اطراف آن پرداختند [22]. همچنین شبیه سازی گسترش ترک عرضی و جدا شدن الیاف و ماتریس در یک المان واحد و همچنین جدا شدن لایه ها از یکدیگر، با اصلاح مدل تیر چسبیده و با در نظر گرفتن خواص مدل تماس نرم شونده، توسط لی و همکاران [23] انجام شد.

همچنین از جمله کارهایی که اثر حرارت را در تحلیل های به روش المان گسسته مورد استفاده قرار دادند، می توان به کارهای انجام شده در مراجع اشاره کرد [24-26]. آندره و همکاران [24] ایجاد و گسترش ترک در یک ماده دارای میکروساختار دوفازی که در اثر اختلاف ضریب انبساط حرارتی هر یک از فازها در اثر تغییر دما به وجود می آید را شبیه سازی کردند و همچنین، روجک [25]، فرآیند برش سنگ را با استفاده از روش المان گسسته با در نظر گرفتن حرارت تولید شده در اثر اصطکاک ابزار با سنگ، شبیه سازی کرد.

در این مقاله به شبیه سازی فرآیند ایجاد آسیب اولیه و نحوه گسترش آن از ریشه یک ترک کانالی شکل، به طوری که عمق آن به فصل مشترک بین پوشش و بستر رسیده است، در اثر بار حرارتی، با استفاده از روش المان گسسته، پرداخته شد. همان طور که اشاره شد، اکثر کارهایی که در زمینه گسترش آسیب در این ساختارها صورت گرفته، بر مبنای محیط پیوسته و روش المان محدود می باشد. اما مزیت اصلی روش المان گسسته در شبیه سازی فرآیند شکست در میکروساختار ماده است. در واقع، در روش المان گسسته، ذرات (مقیاس میکرو) در کنار یکدیگر قرار گرفته، به طوری که یک توده ماده را تشکیل می دهند که دارای رفتار ماکروسکوپی خاص خود است. این رفتار ماکروسکوپی توده ماده از برهم کنش ذرات در مقیاس میکرو و رابطه ساختاری که در تماس و یا اتصال بین ذرات حاکم است، به دست می آید. در واقع، ورودی مسئله در روش المان گسسته، بر خلاف روش های پیوسته، میکرو پارامترها هستند. از طرفی، با توجه به ماهیت گسسته ای که این روش برای توده ماده در نظر می گیرد، بسیاری از پیچیدگی هایی که در روش های پیوسته برای شبیه سازی ترک وجود دارد، مانند حالت تکینی¹ که در نوک ترک به وجود می آید، وجود ندارد [17, 18, 22]. لذا در این مقاله، با توجه به ویژگی هایی که به آن ها اشاره شد، روش المان گسسته به عنوان یک روش کاربردی به منظور بررسی آسیب های جزئی ایجاد شده در اثر کاهش دما، استفاده شده است. برای این منظور، رفتار پوشش و بستر به صورت ترد الاستیک ایزوتروپیک در نظر گرفته شد به طوری که سفتی بستر نسبت به پوشش بیشتر و ضریب انبساط حرارتی آن نسبت به پوشش کمتر است. لذا با کاهش دما، تنش کششی در پوشش ایجاد می شود. خواص فصل مشترک نیز به صورت میانگین هندسی از خواص پوشش و بستر در نظر گرفته شد. بررسی پارامتریک به منظور در نظر گرفتن اثر اختلاف ضرایب الاستیک پوشش و بستر، اختلاف ضریب انبساط حرارتی و همچنین ضخامت پوشش بر ایجاد آسیب اولیه و نحوه گسترش آن، انجام شد.

2-2 روش المان گسسته

همان طور که اشاره شد، روش المان گسسته نخستین بار توسط کاندال و استراک [12] برای توصیف رفتار مکانیکی مجموعه ای از دیسک ها و گوی ها ارائه شد. ایده کلی این روش بر مبنای استفاده از حل عددی صریح برای

¹ Singularity

بردار نیروی تماسی بین دو ذره، به دو مؤلفه عمودی و برشی (نسبت به صفحه تماس)، مطابق رابطه (7)، تجزیه می گردد [13].

$$F_i^{\text{cont}} = F_n^{\text{cont}} n_i + F_t^{\text{cont}} t_i \quad (7)$$

که در این رابطه، F_n^{cont} بیانگر نیروی عمودی (عمود بر صفحه تماس) و F_t^{cont} نیروی برشی است. n_i و t_i نیز بردار یکه عمودی و مماسی صفحه تماس هستند. نیروی عمودی از رابطه (8) به دست می آید [13].

$$F_n = K_n U_n \quad (8)$$

در این رابطه، U_n جابجایی دو ذره در راستای خط تماس و K_n سفتی تماس عمودی می باشد. نیروی برشی نیز به صورت نمودی محاسبه می شود. در واقع در هر بازه زمانی انتگرال گیری، جابجایی نسبی برشی بین دو ذره، ΔU_s ، باعث می شود که نمود نیروی برشی به اندازه ΔF_s به وجود آید. لذا نیروی برشی کل، مجموع این نمودهای نیروی برشی در هر بازه زمانی است (رابطه (9)) [13].

$$F_s = \sum K_t \Delta U_s \quad (9)$$

به طوری که K_t سفتی برشی اتصال است.

2- شبیه سازی رفتار جامد الاستیک

در این حالت، تماس بین ذرات از نوع اتصال یا پیوند است. در این روش، معیار خرابی برای اتصالات تعریف می شود. سپس در هر مرحله زمانی، معیار تخریب در نظر گرفته شده برای هر اتصال لحاظ می شود. در صورت صدق کردن اتصال در معیار تعریف شده، اتصال شکسته می شود و پس از آن، تماس بین آن ها از نوع اصطکاکی خواهد بود. این دو نوع تماس (تماس پیوند و اصطکاکی) در "شکل 5" نشان داده شده است.

در واقع، برای تماس از نوع اتصال یا پیوندی، فنر عمودی هم در کشش و هم در فشار عمل می کند اما برای تماس از نوع اصطکاکی، فنر عمودی تنها در فشار عمل می کند. در رابطه با فنر برشی نیز اگر تماس از نوع اصطکاکی باشد، نیروی برشی بین دو ذره به وسیله قانون اصطکاک کلمب کنترل می شود. یعنی پس از رسیدن نیروی برشی به مقدار مشخصی، بین دو ذره لغزش اتفاق می افتد. نمودارهای نیرو بر حسب جابجایی برای فنرهای عمودی و برشی در اتصال از نوع پیوندی در "شکل 6" نشان داده شده است.

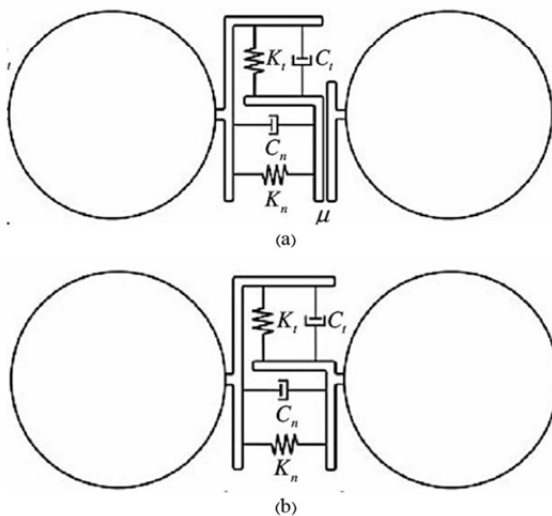


Fig. 5 (a) frictional and (b) bonded contacts [28]

شکل 5 (a) تماس اصطکاکی و (b) پیوندی [28]

$$F_i = F_i^{\text{ext}} + \sum_{j=1}^{N_c} F_{ij}^{\text{cont}} + F_i^{\text{damp}} \quad (2)$$

$$T_i = T_i^{\text{ext}} + \sum_{j=1}^{N_c} S_{ij}^c \times F_{ij}^{\text{cont}} + T_i^{\text{damp}}$$

در این رابطه، N_c تعداد تماس هایی است که ذره i ام با ذرات مجاور خود دارد و S_{ij}^c نیز برداری است که مرکز ذره i ام را به نقطه تماس آن با المان j ام متصل می کند (شکل 4).

همان طور که اشاره شد، انتگرال گیری از معادلات حرکت در زمان به روش تفاضل های مرکزی انجام می شود. لذا برای حرکت انتقالی در بازه زمانی Δt ، مطابق رابطه (3)، داریم [27]:

$$\ddot{u}_i^n = \frac{F_i}{m_i}$$

$$\dot{u}_i^{n+\frac{1}{2}} = \dot{u}_i^{n-\frac{1}{2}} + \ddot{u}_i^n \Delta t$$

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} + \dot{u}_i^{n+\frac{1}{2}} \Delta t \quad (3)$$

همچنین برای مؤلفه های دورانی نیز، نمود دوران مطابق رابطه (4)، در نظر گرفته می شود [27].

$$\dot{\omega}_i^n = \frac{T_i}{I_i}$$

$$\omega_i^{n+\frac{1}{2}} = \omega_i^{n-\frac{1}{2}} + \dot{\omega}_i^n \Delta t$$

$$\Delta \theta_i = \omega_i^{n+\frac{1}{2}} \Delta t \quad (4)$$

در این رابطه، $\Delta \theta$ نمود دوران ذره می باشد. اگرچه از نظر محاسباتی در یک بازه زمانی، انتگرال گیری به صورت صریح در زمان بسیار سریع (بهینه) عمل می کند، اما از معایب این روش، شرط پایداری عددی است، به طوری که باعث به وجود آمدن قیدی در آن می شود. در واقع بازه زمانی باید از مقدار بحرانی Δt_{cr} کم تر باشد تا حل پایدار گردد. برای پایداری، لازم است که نمود زمانی انتگرال گیری در رابطه (5) صدق کند [28].

$$\Delta t_{cr} < \frac{2}{\omega_{\max}} \quad (5)$$

که در این رابطه، $\omega_{\max}$ بزرگترین فرکانس طبیعی سیستم است. لذا برای به دست آوردن نمود زمانی پایدار، نیاز است تا $\omega_{\max}$ برای سیستم ذرات تعیین شود. در بسیاری از منابع، بازه زمانی بحرانی در روش DEM¹ به صورت رابطه (6) تخمین زده می شود [28].

$$\Delta t_{cr} = \gamma \frac{2}{\sqrt{\frac{K_{\max}}{M_{\min}}}} \quad (6)$$

در این رابطه، $K_{\max}$ بزرگترین سفتی تماس بین ذرات و $M_{\min}$ جرم کوچکترین ذره است. پارامتر γ نیز به منظور در نظر گرفتن اثرات میرایی در رابطه اضافه شده است. تجربه نشان می دهد که این پارامتر می تواند مقداری نزدیک به 0.1 داشته باشد.

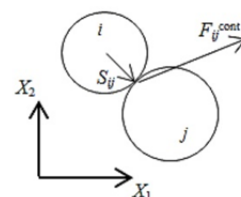


Fig. 4 contact force between two discrete elements

شکل 4 نیروی تماسی بین دو المان مجزا

¹ Discrete element method

$$K_n = \frac{E}{\sqrt{3}(1-\nu)(1-2\nu)}$$

$$K_t = \frac{(1-4\nu)E}{\sqrt{3}(1-\nu)(1-2\nu)} \quad (10)$$

3-2- اثر حرارت در روش المان گسسته

اثر حرارت در روش المان گسسته، با تعریف ضریب انبساط حرارتی برای ذرات تشکیل دهنده جسم جامد، صورت می‌گیرد. لذا تغییر دما باعث تغییر در اندازه (شعاع) ذرات تشکیل دهنده جسم می‌شود. در نتیجه، با تغییر دما به اندازه ΔT ، اندازه شعاع هر یک از ذرات مطابق رابطه (11) تغییر می‌کند.

$$r_i = r_i^0 (1 + \alpha_i \Delta T) \quad (11)$$

در این رابطه، شعاع ذره در هر لحظه و r_i^0 شعاع اولیه ذره است. α_i نیز ضریب انبساط حرارتی می‌باشد. این تغییر در اندازه شعاع، باعث تغییر در فاصله عمودی بین هر دو ذره که با یکدیگر در تماس هستند، مطابق رابطه (12)، می‌شود.

$$U_n = \|x_i - x_j\| - r_i - r_j - g_0 \quad (12)$$

در این رابطه، r_i و r_j شعاع ذرات در هر لحظه، x_i و x_j موقعیت ذرات و g_0 فاصله اولیه بین دو ذره است. این تغییر در فاصله عمودی بین دو ذره، باعث به‌وجود آمدن نیروی تماس عمودی بین دو ذره، مطابق رابطه (8)، می‌شود. به‌وجود آمدن این نیروهای داخلی باعث نزدیک شدن و یا فاصله گرفتن ذرات از یکدیگر شده و در نتیجه تغییر شکل کلی ساختار شبیه‌سازی می‌شود.

4-2- معیار تخریب اتصال‌ها

همان‌طور که اشاره شد، در روش المان گسسته، رفتار ماده در مقیاس ماکرو، از برهم‌کنش ذرات در مقیاس میکرو، شبیه‌سازی می‌شود. لذا می‌توان با تعریف معیار خرابی و شکست برای اتصال بین ذرات، پدیده‌هایی مانند گسترش ترک و آسیب را شبیه‌سازی کرد. به واسطه بارگذاری، اتصال بین ذرات تحت نیروهای عمودی و برشی قرار می‌گیرند. لذا در این مقاله، معیار شکست یک اتصال، رسیدن نیروی آن به بیشترین مقدار ممکن (مقاومت اتصال)، در نظر گرفته شد. مقاومت یک اتصال، به عنوان یک میکروپارامتر ورودی، تابعی از مقاومت نهایی ماده در مقیاس ماکرو است.

در این مقاله، با توجه به در نظر گرفتن آرایش شش‌ضلعی برای ذرات، هر دو مقدار مقاومت در اتصالات عمودی و برشی را بر حسب مقاومت کششی ماده (بر حسب واحد تنش) مطابق رابطه (13) تعریف می‌شود. بر این اساس، هنگامی که تنش در ماده، در مقیاس ماکرو، به مقدار مقاومت کششی خود برسد، نیروهای تماس (اتصالات) عمودی و برشی، در مقیاس میکرو، برابر با مقادیر بحرانی تعریف شده توسط رابطه (13) خواهند بود. لذا نیروهای اتصال نمی‌توانند از مقادیر تعریف شده زیر، بیشتر باشند [28].

$$F_n^{cr} = \frac{r\sigma_{ult}}{2(1-\nu^*)} \left(\sqrt{3} - \frac{\nu^*}{\sqrt{3}} \right)$$

$$F_s^{cr} = \frac{r\sigma_{ult}}{2(1-\nu^*)} (1 - 3\nu^*)$$

$$\nu^* = \frac{\nu}{1-\nu} \quad (13)$$

بر این اساس، شکست هنگامی اتفاق می‌افتد که اندازه نیروی تماس، بزرگ‌تر از مقدار مقاومت تعریف شده توسط رابطه (13) باشد.

5-2- اعتبارسنجی

به منظور اعتبارسنجی، دو مثال که دارای حل تحلیلی هستند و در مقاله کیم

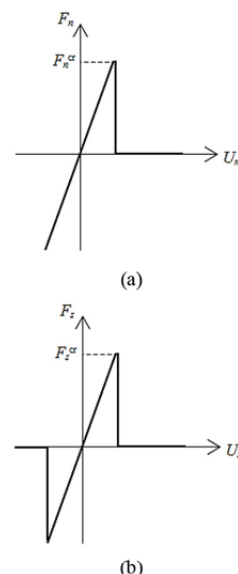


Fig. 6 Force-Displacement law for brittle elastic material behavior in (a) normal and (b) tangential directions

شکل 6 رابطه نیرو-جابجایی برای ماده دارای رفتار ترد الاستیک در (a) جهت عمودی و (b) مماسی

با معلوم بودن خواص تماس‌ها (سفتی و مقاومت تماس)، می‌توان رفتار ماده را با روش المان گسسته شبیه‌سازی کرد. در واقع، پارامترهای ورودی روش المان گسسته، خواص میکرومکانیکی تماس‌ها هستند. بسیاری از این خواص، از نتایج آزمایشگاهی قابل حصول نیست. لذا در بسیاری از تحلیل‌ها به روش المان گسسته، قبل از شبیه‌سازی، کالیبره کردن پارامترهای ورودی، به منظور مقایسه رفتار ماکرو ماده شبیه‌سازی شده با نتایج آزمایشگاهی انجام می‌شود. اما در مواردی نیز می‌توان با استفاده از آرایش ذرات به‌صورت منظم، از کالیبره کردن صرف‌نظر کرد. آرایش‌های منظمی که به صورت متداول در حالت دو بعدی در روش المان گسسته مورد استفاده قرار می‌گیرد، آرایش مربعی و شش‌ضلعی هستند. در واقع، در این حالت، فرض می‌شود که ذرات به صورت اولیه در کل جسم با آرایش منظم تعریف شده، چیده می‌شوند، لذا می‌توان المان واحدی را از آن انتخاب و در نظر گرفت. سپس این المان واحد با یک المان واحد از جسم پیوسته معادل‌سازی می‌شود و سفتی فنرهای کششی و برشی براساس آن محاسبه می‌شوند. در این مقاله نیز، آرایش ذرات به‌صورت شش‌ضلعی در نظر گرفته شدند. این آرایش ذرات در "شکل 7" نشان داده شده است.

در این حالت، برای شبیه‌سازی رفتار الاستیک خطی یک ماده ایزوتروپیک، ثابت‌های اتصال ذرات (سفتی فنرهای عمودی و برشی) برحسب ثابت‌های الاستیک ماده (مدول الاستیک و ضریب پواسون) برای حالت کرنش صفحه‌ای مطابق رابطه (10) تعریف می‌شود [28].

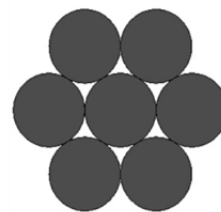


Fig. 7 hexagonal packing arrangement

شکل 7 آرایش شش‌ضلعی ذرات

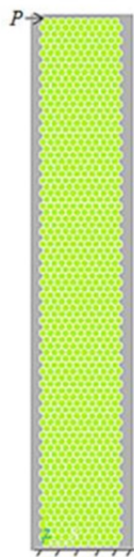


Fig. 9 DEM model of cantilever beam

شکل 9 مدل المان گسسته از تیر یک‌سر گیردار

گسسته بر مبنای حل دینامیکی صریح برای تک‌تک ذراتی است که یک هندسه را تشکیل می‌دهند، لذا عاملی مانند تفاوت در آرایش ذرات هم می‌تواند باعث متفاوت شدن جواب نسبت به حالت دیگر شود. اما این اختلاف، همان‌طور که از نتایج جدول مشخص است، از پاسخ حالت تحلیلی استاتیکی، چندان زیاد نیست.

اما همان‌طور که اشاره شد، با توجه به ماهیت گسسته این روش، نمی‌توان به طور مستقیم، پارامترهایی را که در روش‌های پیوسته برای مسائل مکانیک شکست مورد استفاده قرار می‌گیرد (نظیر ضریب شدت تنش و یا نرخ آزادسازی انرژی) به عنوان خروجی برای مقایسه استفاده کرد. در واقع، خروجی این روش، نحوه گسترش آسیب در میکروساختار توده ماده است. پارامتری که بیشتر به صورت کیفی قابل مشاهده است. برای این منظور اعتبارسنجی حل گر المان گسسته برای پیش‌بینی مسیر گسترش ترک و آسیب، با پیش‌بینی مسیر گسترش ترک در یک صفحه که در "شکل 10" نشان داده شده است، انجام و نتیجه آن با کار انجام شده توسط گیر و همکاران [30] که بر مبنای XFEM می‌باشد، مقایسه شد. همان‌طور که در شکل مشخص است، اگر موقعیت ترک اولیه به لبه بالایی صفحه نزدیک‌تر باشد، جهت گسترش ترک بر مبنای XFEM متماثل به سمت بالای صفحه است و بالعکس. این حالت، در حل حاصل از المان گسسته نیز مشاهده می‌شود.

3- نتایج و بحث

روش المان گسسته در این مقاله به منظور شبیه‌سازی ایجاد و گسترش آسیب از ریشه یک ترک کانالی شکل، در اثر تغییرات دمایی مورد استفاده قرار گرفته است. "شکل 11"، هندسه مسئله و شرایط مرزی را نشان می‌دهد. در واقع، فرض می‌شود که مشابه "شکل 1"، یک ترک در داخل پوشش ایجاد و گسترش پیدا کرده، به طوری که طول آن به مراتب بزرگتر از ضخامت پوشش است. عمق ترک نیز به فصل مشترک پوشش و بستر رسیده است. از طرفی، با توجه به این که ترک‌های بسیاری از این نوع می‌تواند در سطح پوشش ایجاد شود، لذا در این مقاله، فاصله بین دو ترک متوالی، به عنوان المانی که در کل ساختار تکرار می‌شود، در نظر گرفته شد. همچنین، در

[29] نیز به آن‌ها اشاره شده، آورده می‌شود. مسئله اول، جابجایی عمودی یک بلوک تحت فشار یکنواخت با در نظر گرفتن حالت کرنش صفحه‌ای و مسئله دوم، تغییر شکل تیر یک‌سر گیردار، با در نظر گرفتن حالت تنش صفحه‌ای است.

2-5-1- مثال اول: بلوک تحت فشار یکنواخت

یک بلوک با ابعاد این مسئله به صورت $17.3 \times 16 \text{ m}^2$ می‌باشد به طوری که شعاع هر ذره 5.0 m است، مطابق "شکل 8"، در نظر گرفته شد. بار یکنواخت فشاری به اندازه $\sigma_y = 1 \times 10^{-3} \text{ (N/m}^2\text{)}$ بر دیواره بالایی مجموعه ذرات اعمال می‌شود. بنابر حل الاستیسیته، مقدار مدول الاستیک و ضریب پواسون بر حسب مقدار تغییر شکل مجموعه به صورت رابطه (14) به دست می‌آید.

$$E = \sigma_y (1 - \nu^2) \frac{H}{\delta_y} \quad (14)$$

$$\nu = \frac{\frac{H}{\delta_y} - \frac{W}{\delta_x}}{\frac{H}{\delta_y} + \frac{W}{\delta_x}}$$

در این رابطه، H و W ابعاد مسئله و δ_y و δ_x مقدار جابجایی گوشه بالایی (مطابق شکل 8) است. جدول 1 نتایج دو حل را نشان می‌دهد. در این جدول، به ازای مقادیر مختلف سفتی فنرهای اتصال دو ذره، مقادیر δ_y و δ_x حاصل از حل المان گسسته به دست آمد. با جایگذاری این مقادیر در رابطه (14)، مقدار مدول الاستیک و ضریب پواسون ناشی از حل المان گسسته به دست آمد. این نتایج، با مقادیر E و ν حاصل از معادله (10)، که به ازای K_n و K_t حاصل می‌شود، مقایسه شد. نتایج حاصل، همخوانی مناسبی را بین این دو حالت نشان می‌دهد.

2-5-2- مثال دوم: تیر یک‌سر گیردار

تغییر شکل تیر یک‌سر گیردار با در نظر گرفتن حالت تنش صفحه‌ای تحت بار عرضی $P = 1 \times 10^{-4} \text{ (N)}$ بوده و عرض تیر 5.5 mm و ارتفاع آن 34.6 mm است. شعاع ذرات نیز 0.25 mm در نظر گرفته شد (شکل 9). از حل تحلیلی، مقدار خم‌شدگی تیر مطابق رابطه (15) است.

$$\delta = \frac{PL^3}{3EI} \quad (15)$$

جدول 2 مقدار تغییر شکل حاصل از حل DEM در انتهای آزاد تیر را با نتایج حاصل از رابطه (15)، به ازای مقادیر مختلف K_n و K_t (و در نتیجه، مدول الاستیک و ضریب پواسون ناشی از آن) نشان می‌دهد. در این حالت نیز همخوانی مناسبی بین نتایج DEM و حل تحلیلی (رابطه (15)) مشاهده می‌شود. البته باید به این نکته اشاره کرد که، از آنجایی که روش المان

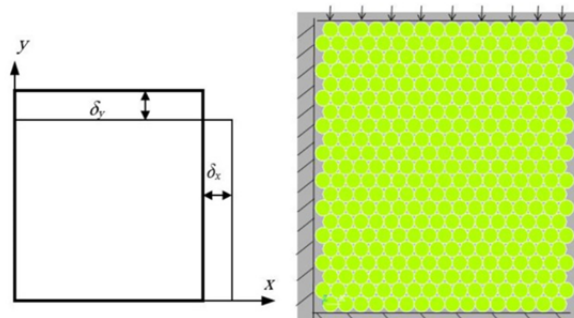


Fig. 8 DEM model of block under uniform compression

شکل 8 مدل المان گسسته از بلوک تحت فشار یکنواخت

جدول 1 مقایسه نتایج DEM و حل تحلیلی برای بلوک تحت بار فشاری

Table 1 comparison of results between DEM and analytical solution for block under uniform pressure

$K_n(N/mm)$	$K_t(N/mm)$	$\delta_x(m)$ (DEM)	$\delta_y(m)$ (DEM)	$E(N/m^2)$ (Eq-10)	ν (Eq-10)	$E(N/m^2)$ (Eq-14)	ν (Eq-14)
1	1	1.09e-5	-0.01	1.732	0	1.732	1.18e-3
1	0.5	0.0014	-0.0116	1.461	0.125	1.473	0.115
1	0.001	0.0044	-0.015	1.083	0.25	1.087	0.24

جدول 2 مقایسه نتایج DEM و حل تحلیلی برای تیر یک‌سر گیردار

Table 2 comparison of results from DEM and analytical solution for cantilever beam

$K_n(N/mm)$	$K_t(N/mm)$	$E(N/mm^2)$	ν	$\delta \times 10^{-2} (mm)$ (DEM)	$\delta \times 10^{-2} (mm)$ (Eq-15)	Error(%)
5	5	8.66	0	1.109	1.054	5.23
5	2.5	7.423	0.143	1.31	1.23	6.74
5	0.005	5.777	0.333	1.67	1.58	5.65

نتایجی که ارائه می‌شوند، به دلیل تأکید بر روی آسیب‌های ایجاد شده در پوشش و یا فصل مشترک، تنها قسمت بالایی ساختار نشان داده شده است (قسمتی از بستر در شکل‌ها نشان داده شده است).

رفتار پوشش و بستر به صورت ترد الاستیک ایزوتروپیک در نظر گرفته شد، به‌طوری‌که سفتی بستر بیشتر از پوشش است. خواص فصل مشترک نیز به صورت میانگین هندسی از خواص پوشش و بستر در نظر گرفته شد. لذا برای مثال سفتی عمودی اتصالی که یک ذره از بستر را به یک ذره از پوشش متصل می‌کند، به صورت رابطه (16) تعریف می‌شود.

$$K_n^t = \sqrt{K_n^s K_n^c} \quad (16)$$

به‌طوری‌که K_n^s سفتی عمودی اتصال برای ذرات بستر و K_n^c سفتی عمودی اتصال برای ذرات پوشش هستند. این رویه برای سایر پارامترهای ورودی برای فصل مشترک تکرار شد. این نوع میانگین گرفتن باعث می‌شود که اثر پارامترهایی که مقدار آن‌ها بسیار زیاد است، کاهش یابد. برای مثال، این کار توسط حداد و همکاران [31] برای بیان خواص فصل مشترک بین فاز زمینه و فاز تقویت‌کننده در یک کامپوزیت ذره‌ای مورد استفاده قرار گرفت و نتایج آن مورد قبول بود.

اثر اختلاف ضرایب الاستیک و همچنین ضخامت پوشش بر آغاز و گسترش آسیب مورد بررسی قرار گرفت. همچنین تغییر شکل ایجاد شده در مقطع پوشش در اثر تغییر دما بررسی شد. به منظور بررسی اثر اختلاف ضرایب الاستیک، پارامترهای بی‌بعد داندور¹ مطابق رابطه (17)، برای حالت کرنش صفحه‌ای، تعریف می‌شوند. در واقع، داندور نشان داد که برای یک جسم مرکب از دو ماده الاستیک ایزوتروپیک، برای بررسی اثر مواد، به جای سه پارامتر، می‌توان از دو پارامتر بی‌بعد استفاده کرد [32,3].

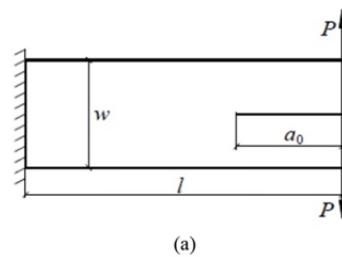
$$a = \frac{\bar{E}_c - \bar{E}_s}{\bar{E}_c + \bar{E}_s} \quad (17)$$

$$b = \frac{G_c(1 - 2\nu_s) - G_s(1 - 2\nu_c)}{2G_c(1 - \nu_s) + 2G_s(1 - \nu_c)}$$

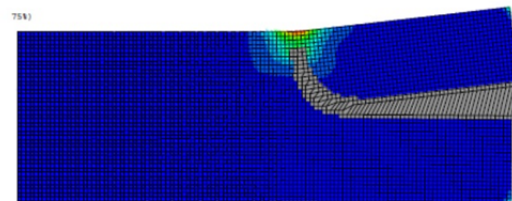
در این رابطه، زیرنویس c بیانگر پوشش و زیرنویس s بیانگر بستر است. G نیز مدول برشی می‌باشد. همچنین $\bar{E}$ مدول کرنش صفحه‌ای است و مطابق رابطه (18) تعریف می‌شود.

$$\bar{E} = \frac{E}{1 - \nu^2} \quad (18)$$

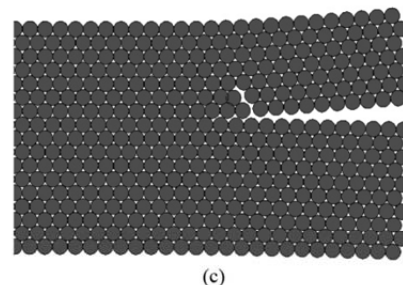
همچنین در بسیاری از مقالات به تأثیر بیشتر پارامتر a نسبت به پارامتر b اشاره شده است. لذا پارامتر b ثابت در نظر گرفته می‌شود و به بررسی نقش پارامتر a برای بررسی تأثیر اختلاف ضرایب الاستیک پرداخته می‌شود. این



(a)



(b)



(c)

Fig. 10 (a) Cantilever beam with crack tended slightly to the upper edge [30] (b) XFEM result of crack propagation [30] (c) DEM result
شکل 10 (a) تیر یک‌سر گیردار دارای ترک متمایل به لبه بالایی (b) نتیجه گسترش ترک حاصل از XFEM [30] (c) نتیجه حاصل از DEM

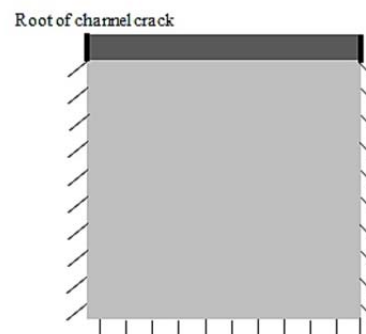


Fig. 11 Geometry and boundary conditions of the problem

شکل 11 هندسه و شرایط مرزی مسئله

¹ Dundur's parameters

و بستر، اختلاف دمای مورد نیاز برای آغاز جدایش، کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، هر چه اختلاف ضرایب انبساط حرارتی بیشتر باشد، جدایش اولیه زودتر اتفاق می‌افتد. علت این اتفاق نیز، افزایش تنش حرارتی در پوشش و در نتیجه، تنش‌های ایجاد شده در فصل مشترک بین آن‌ها است. در واقع، با افزایش اختلاف ضرایب انبساط حرارتی بین پوشش و بستر، اختلاف کرنش حرارتی بین آن‌ها افزایش می‌یابد و باعث افزایش تنش در فصل مشترک می‌شود.

"شکل 14"، قسمتی از مقطع تغییر شکل یافته از ساختار شامل پوشش و بستر را به ازای سه مقدار مختلف از a نشان می‌دهد که در همگی آن‌ها، به اندازه 200 واحد، کاهش دما اعمال شد. زاویه λ که در شکل نشان داده شده است، به منظور تعیین میزان تغییر شکل و انحنای ایجاد شده در ساختار، در اثر تغییر دما و جدا شدن پوشش از بستر، در نظر گرفته شد. "شکل 15"، نمودار تغییرات این زاویه را به ازای $h/H=0.1$ و $h/H=0.2$ و مقادیر مختلف a نشان می‌دهد که نسبت به بیشترین مقدار، نرمال شده است. همان‌طور که از نمودار مشخص است، با افزایش اختلاف سفتی پوشش نسبت به بستر، انحنای ایجاد شده کاهش می‌یابد. همچنین، مشاهده می‌شود که مقدار این زاویه، با افزایش ضخامت پوشش کاهش پیدا کرده است. اگرچه با افزایش ضخامت پوشش، طول ناحیه جدایش نیز افزایش پیدا می‌کند اما به دلیل افزایش ضخامت، مقاومت آن در برابر انحنای افزایش پیدا کرده است. همچنین با کاهش اختلاف ضرایب الاستیک پوشش و بستر، اختلاف بین انحناهای ایجاد شده، افزایش پیدا می‌کند. به عنوان مقایسه، قسمتی از مقطع ساختاری که دارای ضریب اختلاف سفتی $a = -0.3$ است، به ازای دو نسبت ضخامت $h/H=0.1$ و $h/H=0.2$ در "شکل 16" نشان داده شده است.

همچنین، مسئله دیگری که مورد بررسی قرار گرفت، نحوه گسترش آسیب اولیه ایجاد شده در فصل مشترک پوشش و بستر در اثر کاهش دمای ایجاد شده است. برای این منظور، ضخامت پوشش، ثابت و همچنین، از آنجایی که گسترش آسیب در فصل مشترک و یا داخل ساختار پوشش مد نظر بود، بستر به صورت صلب در نظر گرفته شد (به آسیب احتمالی ایجاد شده در ساختار بستر در این مقاله پرداخته نمی‌شود). اما سفتی اتصالات فصل مشترک، نسبت به حالت رفتار الاستیک برای بستر ثابت نگه داشته شد. در همه این حالت‌ها، کاهش دما به اندازه 400 واحد صورت پذیرفت. "شکل‌های 17، 18 و 19"، نحوه گسترش آسیب اولیه ایجاد شده را برای سه

پارامتر، بسته به اختلاف مدول کرنش صفحه‌ای پوشش و بستر در محدوده $-1 < a < 1$ متغیر است. برای حالتی که بستر دارای سفتی بیشتر نسبت به پوشش باشد (فرض این مقاله)، این پارامتر در محدوده منفی قرار می‌گیرد. $a = -1$ به معنای بستر صلب است که با کم‌تر شدن اختلاف سفتی پوشش و بستر، این عدد به صفر نزدیک می‌شود. همچنین، لازم به ذکر است که $\rho_c/\rho_s=0.5$ ، نسبت چگالی پوشش و بستر است که در بررسی‌ها ثابت در نظر گرفته شد. همچنین برای پوشش، بستر و فصل مشترک بین آن‌ها، $\sigma_{ult}=E/1000$ در نظر گرفته شد.

همچنین لازم به ذکر است که در نتایجی که ارائه می‌شوند، به منظور کاهش اثر تعداد و ابعاد ذرات در نتایج حاصل، تعداد آن‌ها در حدود 10000 در نظر گرفته شد.

بررسی‌ها نشان داد که تقریباً در تمامی حالت‌ها، آسیب اولیه در فصل مشترک به وقوع پیوست. در واقع می‌توان گفت که در ابتدا، جدایش بین پوشش و بستر اتفاق افتاده است. "شکل 12" اثر اختلاف ضرایب الاستیک بین پوشش و بستر را در اختلاف دمای مورد نیاز برای آغاز جدایش، نشان می‌دهد. منظور از اختلاف دما، کاهش دما نسبت به یک دمای مرجع است. از آنجایی که معمولاً پوشش‌دهی در دمایی بالاتر از دمای محیط اتفاق می‌افتد، دمای مرجع بالاتر از دمای محیط در نظر گرفته شد به طوری که جدایش در اثر سرد کردن نمونه‌ها از ریشه ترک کانالی شکل ایجاد شده، شبیه‌سازی می‌شود. همان‌طور که از نمودار مشخص است، با کاهش اختلاف سفتی بین پوشش و بستر، اختلاف دمای آغاز جدایش، کاهش می‌یابد. به عبارتی، هر چه اختلاف سفتی بستر نسبت به پوشش بیشتر باشد، احتمال جدایش کم‌تر است. همچنین از آنجایی که این نمودار برای دو مقدار مختلف از ضخامت پوشش به دست آمده است، می‌توان به افزایش اختلاف دمای مورد نیاز برای آغاز جدایش، با کاهش ضخامت در آن (به ازای یک مقدار ثابت a) اشاره کرد. برای مثال، در حالت $h/H=0.05$ ضخامت پوشش و H ضخامت بستر است، به ازای $a < -0.85$ ، جدایش اتفاق نیفتاد. در واقع، می‌توان گفت که به ازای ضخامت‌های کم‌تر از یک مقدار خاص، جدایش در این ساختار اتفاق نمی‌افتد. "شکل 13"، اثر اختلاف ضرایب انبساط حرارتی بین پوشش و بستر را در اختلاف دمای مورد نیاز برای آغاز جدایش نشان می‌دهد. در این حالت، نسبت ضخامت پوشش و بستر $h/H=0.1$ و $a = -0.32$ در نظر گرفته شد. همان‌طور که از نمودار مشخص است، با افزایش اختلاف ضرایب انبساط حرارتی پوشش

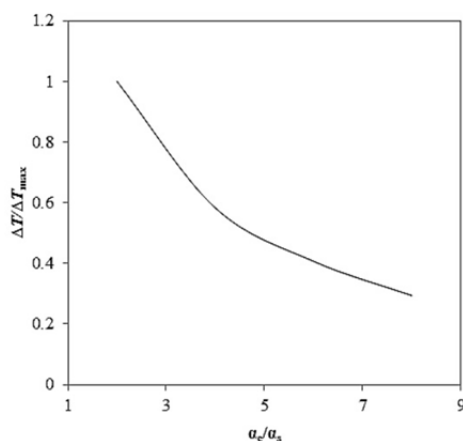


Fig. 13 Coefficient of thermal expansion mismatch effect on ΔT of delamination initiation

شکل 13 اثر اختلاف ضرایب انبساط حرارتی بر اختلاف دمای آغاز جدایش

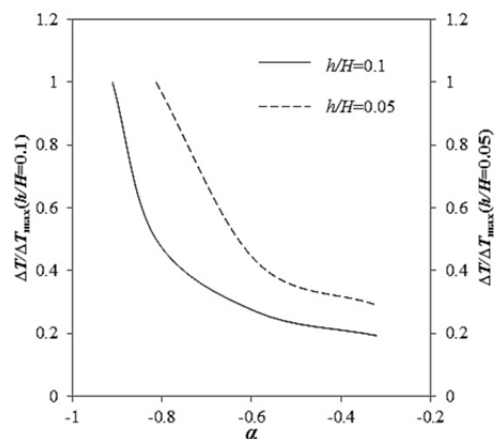


Fig. 12 Elastic mismatch effect on ΔT of delamination initiation

شکل 12 اثر اختلاف ضرایب الاستیک بر اختلاف دمای آغاز جدایش

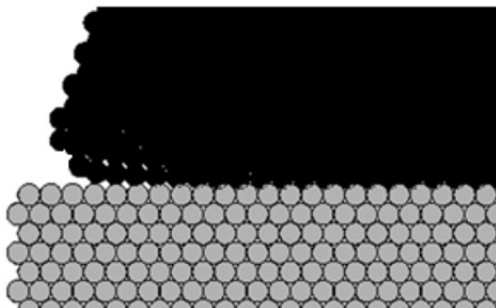


Fig. 17 damage growth simulation with elastic mismatch of $a=-0.3$
 شکل 17 شبیه‌سازی گسترش آسیب با اختلاف ضرایب الاستیک $a=-0.3$

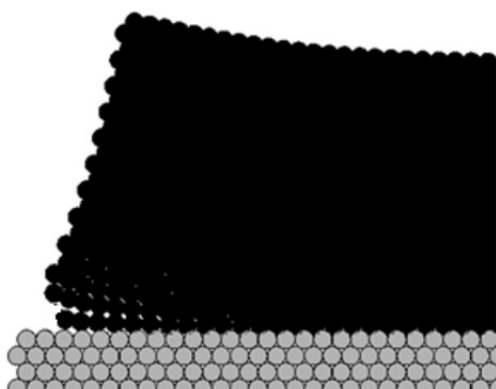


Fig. 18 damage growth simulation with elastic mismatch of $a=-0.6$
 شکل 18 شبیه‌سازی گسترش آسیب با اختلاف ضرایب الاستیک $a=-0.6$

فصل مشترک بین آن‌ها اتفاق افتاده و مقدار گسترش آن نیز، بیشتر از حالت‌های دیگر است. با افزایش اختلاف سفتی، مقدار گسترش ترک در فصل مشترک، کاهش می‌یابد. اما نکته دیگری که باید با آن اشاره کرد، گسترش آسیب ایجاد شده به داخل ساختار پوشش، با افزایش اختلاف سفتی بین پوشش و فصل مشترک است. برای مثال، به ازای سفتی اتصال فصل مشترک برابر با حالت $a=-0.8$ ، پس از آسیب اولیه ایجاد شده در فصل مشترک، گسترش آن بلافاصله در داخل پوشش اتفاق افتاده که این به دلیل سفتی بسیار کمتر پوشش است. اما برای $a=-0.3$ ، به دلیل افزایش سفتی پوشش، گسترش آسیب، به‌طور کامل در فصل مشترک اتفاق افتاده است.

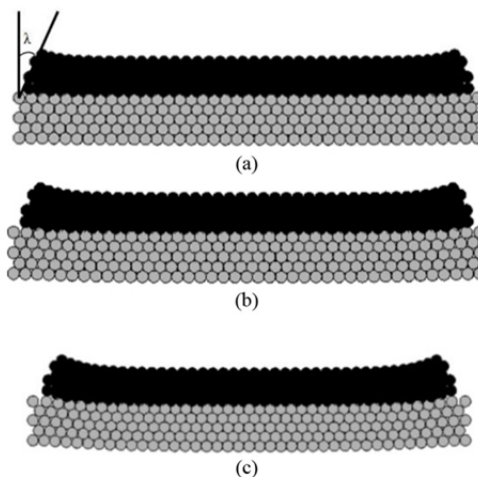


Fig. 14 curvature of the structure induced by temperature reduction in (a) $a=-0.83$ (b) $a=-0.6$ and (c) $a=-0.3$

شکل 14 تغییر انحنا در ساختار، ناشی از کاهش دما به ازای (a) $a=-0.83$ (b) $a=-0.6$ (c) و $a=-0.3$

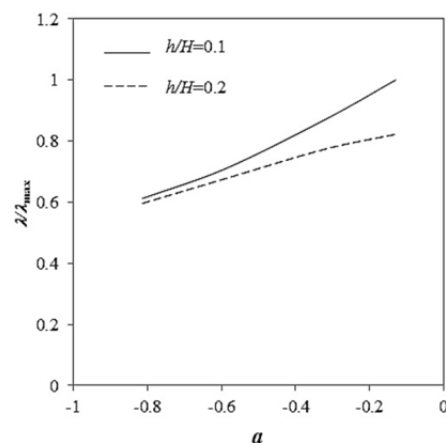


Fig. 15 The effect of elastic mismatch and coating thickness on curve angle

شکل 15 اثر اختلاف ضرایب الاستیک و ضخامت پوشش بر زاویه انحنا ایجاد شده

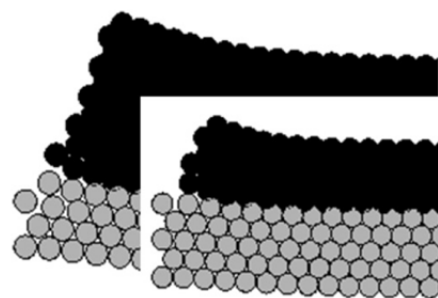


Fig. 16 comparison of the curve angle for $a=-0.3$. $h/H=0.1$ and $h/H=0.2$

شکل 16 مقایسه بین زاویه انحنا برای $a=-0.3$ به ازای $h/H=0.1$ و $h/H=0.2$

مقدار مختلف از نسبت سفتی نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل‌ها مشخص است، با کاهش اختلاف سفتی پوشش و فصل مشترک، گسترش ترک در

- [7] A. Abdul-Baqi, E. Van der Giessen, Indentation-induced interface delamination of a strong film on a ductile substrate, *Thin solid films*, Vol. 381, No. 1, pp. 143-154, 2001.
- [8] W. Li, T. Siegmund, An analysis of the indentation test to determine the interface toughness in a weakly bonded thin film coating – substrate system, *Acta Materialia*, Vol. 52, No. 10, pp. 2989-2999, 2004.
- [9] M. Ostoj-Starzewski, Lattice models in micromechanics, *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 55, No. 1, pp. 35-60, 2002.
- [10] K. M. Crosby, R. M. Bradley, Simulations of tensile fracture in thin films bonded to solid substrates, *Philosophical Magazine B*, Vol. 76, No. 1, pp. 91-105, 1997.
- [11] W. Vellinga, M. Van den Bosch, M. Geers, Interaction between cracking, delamination and buckling in brittle elastic thin films, *International Journal of Fracture*, Vol. 154, No. 1-2, pp. 195-209, 2008.
- [12] P. A. Cundall, O. D. L. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, Vol. 29, No. 1, pp. 47-65, 1979.
- [13] D. O. Potyondy, P. A. Cundall, A bonded-particle model for rock, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Vol. 41, No. 8, pp. 1329-1364, 2004.
- [14] N. Kusano, T. Aoyagi, J. Aizawa, H. Ueno, H. Morikawa, N. Kobayashi, Impulsive local damage analyses of concrete structure by the distinct element method, *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 138, No. 1, pp. 105-110, 1992.
- [15] F. K. Wittel, F. Kun, B.-H. Kröplin, H. J. Herrmann, A study of transverse ply cracking using a discrete element method, *Computational Materials Science*, Vol. 28, No. 3-4, pp. 608-619, 2003.
- [16] F. K. Wittel, J. Schulte-Fischedick, F. Kun, B.-H. Kröplin, M. Frieß, Discrete element simulation of transverse cracking during the pyrolysis of carbon fibre reinforced plastics to carbon/carbon composites, *Computational Materials Science*, Vol. 28, No. 1, pp. 1-15, 2003.
- [17] D. Yang, Y. Sheng, J. Ye, Y. Tan, Dynamic simulation of crack initiation and propagation in cross-ply laminates by DEM, *Composites Science and Technology*, Vol. 71, No. 11, pp. 1410-1418, 2011.
- [18] D. Yang, J. Ye, Y. Tan, Y. Sheng, Modeling progressive delamination of laminated composites by discrete element method, *Computational Materials Science*, Vol. 50, No. 3, pp. 858-864, 2011.
- [19] A. Khattab, M. J. Khattak, I. M. Fadhil, Micromechanical discrete element modeling of fiber reinforced polymer composites, *Polymer Composites*, Vol. 32, No. 10, pp. 1532-1540, 2011.
- [20] M. J. Khattak, A. Khattab, Modeling tensile response of fiber-reinforced polymer composites using discrete element method, *Polymer Composites*, Vol. 34, No. 6, pp. 877-886, 2013.
- [21] D. André, I. Iordanoff, J.-L. Charles, J. Néauport, Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 213-216, pp. 113-125, 2012.
- [22] L. Maheo, F. Dau, D. André, J. L. Charles, I. Iordanoff, A promising way to model cracks in composite using Discrete Element Method, *Composites Part B: Engineering*, Vol. 71, pp. 193-202, 2015.
- [23] B. D. Le, F. Dau, J. L. Charles, I. Iordanoff, Modeling damages and cracks growth in composite with a 3D discrete element method, *Composites Part B: Engineering*, Vol. 91, pp. 615-630, 2016.
- [24] D. André, B. Levraut, N. Tessier-Doyen, M. Huger, A discrete element thermo-mechanical modelling of diffuse damage induced by thermal expansion mismatch of two-phase materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 318, pp. 898-916, 2017.
- [25] J. Rojek, Discrete element thermomechanical modelling of rock cutting with valuation of tool wear, *Computational Particle Mechanics*, Vol. 1, No. 1, pp. 71-84, 2014.
- [26] H. Huang, B. Spencer, J. Hales, Discrete element method for simulation of early-life thermal fracturing behavior in ceramic nuclear fuel pellets, *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 278, pp. 515-528, 2014.
- [27] J. Rojek, E. Oñate, Multiscale analysis using a coupled discrete/finite element model, *Interaction and Multiscale Mechanics*, Vol. 1, No. 1, pp. 1-31, 2007.
- [28] F. A. Tavaréz, M. E. Plesha, Discrete element method for modelling solid and particulate materials, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 70, No. 4, pp. 379-404, 2007.
- [29] H. Kim, M. P. Wagoner, W. G. Butlar, Simulation of fracture behavior in asphalt concrete using a heterogeneous cohesive zone discrete element model, *Journal of Materials in Civil Engineering*, Vol. 20, No. 8, pp. 552-563, 2008.
- [30] E. Giner, N. Sukumar, J. E. Tarancón, F. J. Fuenmayor, An Abaqus implementation of the extended finite element method, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 76, No. 3, pp. 347-368, 2009.
- [31] H. Haddad, W. Leclerc, M. Guessasma, C. Pélegrin, N. Ferguen, E. Bellenger, Application of DEM to predict the elastic behavior of particulate composite materials, *Granular Matter*, Vol. 17, No. 4, pp. 459-473, 2015.
- [32] J. Beuth, Cracking of thin bonded films in residual tension, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 29, No. 13, pp. 1657-1675, 1992.

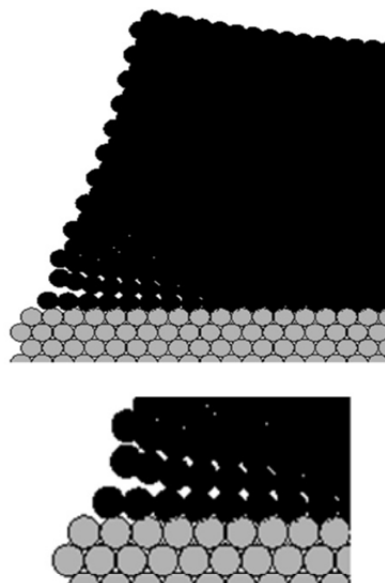


Fig. 19 damage growth simulation with elastic mismatch of $\alpha=-0.8$

شکل 19 شبیه‌سازی گسترش آسیب با اختلاف ضرایب الاستیک $\alpha=-0.8$

4- نتیجه‌گیری

روش المان گسسته به منظور شبیه‌سازی فرآیند ایجاد آسیب اولیه و نحوه گسترش آن از ریشه ترک کانالی شکل، در یک ساختار شامل پوشش و بستر، مورد استفاده قرار گرفت. بارگذاری نیز به صورت کاهش دما به کل مجموعه اعمال شد. همچنین سفتی بستر بیشتر و ضریب انبساط حرارتی آن، کم‌تر از پوشش در نظر گرفته شد. اثر اختلاف ضرایب الاستیک بین پوشش و بستر و همچنین ضخامت پوشش، بر ایجاد آسیب اولیه و نحوه گسترش آن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که آسیب اولیه در فصل مشترک بین پوشش و بستر به صورت جدایش بین آن‌ها اتفاق می‌افتد. اما نحوه گسترش آن، بسته به اختلاف ضرایب الاستیک، متفاوت است و می‌تواند در داخل پوشش و یا در فصل مشترک گسترش پیدا کند. همچنین نتایج نشان داد که با کاهش ضخامت پوشش، احتمال ایجاد جدایش اولیه در فصل مشترک کاهش می‌یابد، به طوری که می‌توان گفت به ازای ضخامت‌ها کم‌تر از یک مقدار خاص، جدایش اتفاق نمی‌افتد.

5- مراجع

- [1] Z. C. Xia, J. W. Hutchinson, Crack patterns in thin films, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, No. 6, pp. 1107-1131, 2000.
- [2] T. Ye, Z. Suo, A. Evans, Thin film cracking and the roles of substrate and interface, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 29, No. 21, pp. 2639-2648, 1992.
- [3] H. Mei, Y. Pang, R. Huang, Influence of interfacial delamination on channel cracking of elastic thin films, *International Journal of Fracture*, Vol. 148, No. 4, pp. 331, 2008.
- [4] H. Mei, S. Gowrishankar, K. M. Liechti, R. Huang, Initiation and propagation of interfacial delamination in integrated thin-film structures, in *Proceedings of 12th IEEE Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems*, Las Vegas NV USA, pp. 1-8, 2010.
- [5] H. Chai, J. Fox, On delamination growth from channel cracks in thin-film coatings, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 49, No. 22, pp. 3142-3147, 2012.
- [6] Y. Yan, F. Shang, Cohesive zone modeling of interfacial delamination in PZT thin films, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 46, No. 13, pp. 2739-2749, 2009.