Materiály s tvarovou pamětí a jejich matematické modelování

Ústav teorie informace a automatizace AV ČR

http://www.utia.cas.cz/kruzik

Obsah

- Co jsou materiály s tvarovou pamětí?
- Praktické aplikace
- Matematický model
- Numerické příklady

Materiály s tvarovou pamětí

Materiály s tvarovou pamětí (MTP) jsou slitiny vykazující dvě unikátní vlastnosti:

- tvarovou paměť
- pseudopružnost

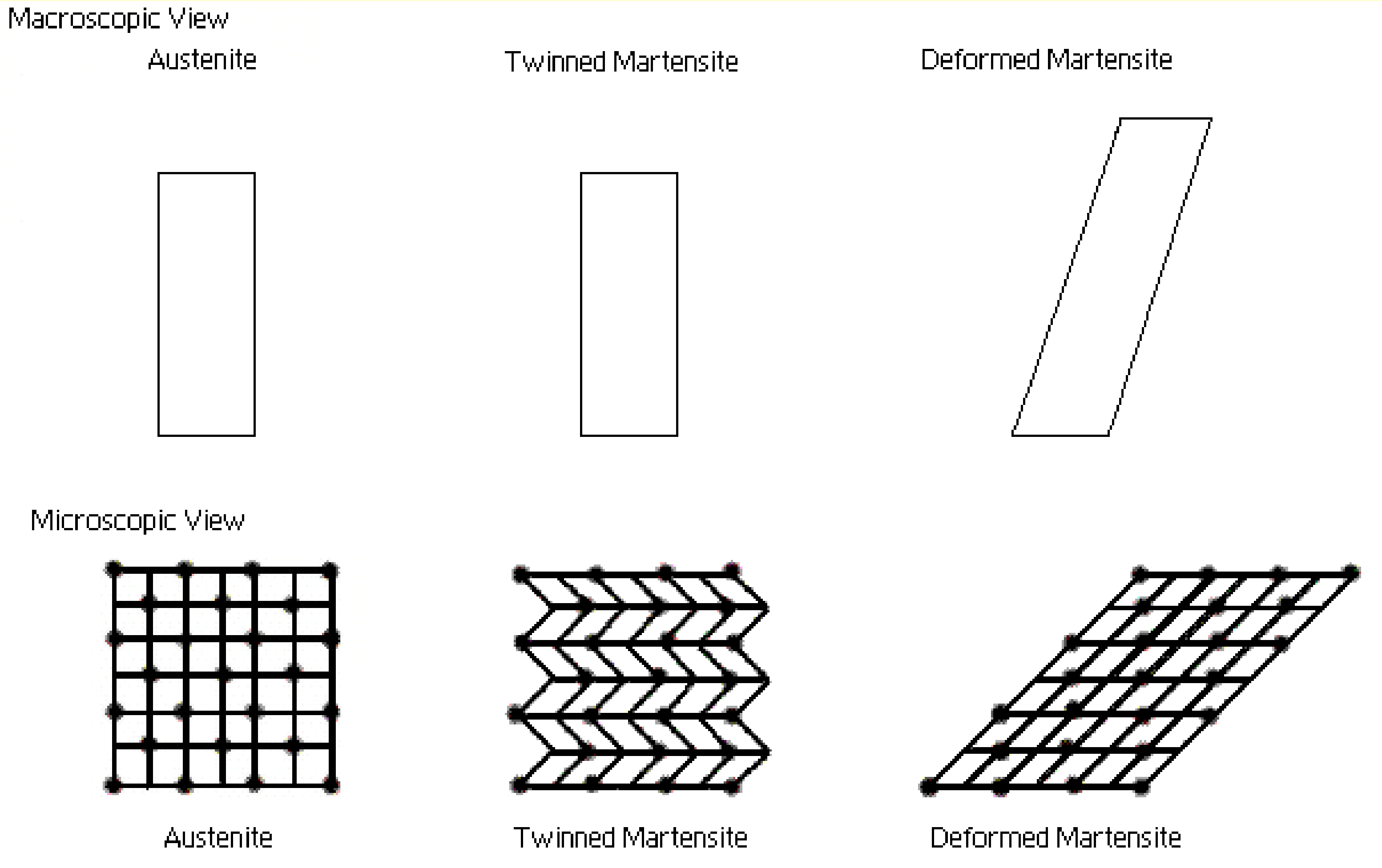
Obě vlastnosti mají diky fázové přeměně z pevné do pevné fáze. Fáze se nazývají austenit (vysokoteplotní) a martensit (nízkoteplotní).

Arne Olander pozoroval tvarovou paměť a pseudopružnost kolem roku 1938, intenzivní výzkum začal kolem roku 1960.

Martensit je relativně měkký, dobře deformovatelný a existuje ve více variantách (12 NiTi, 3 NiMnGa....). Atomická struktura martensitu se "dvojčatí" střídáním variant.

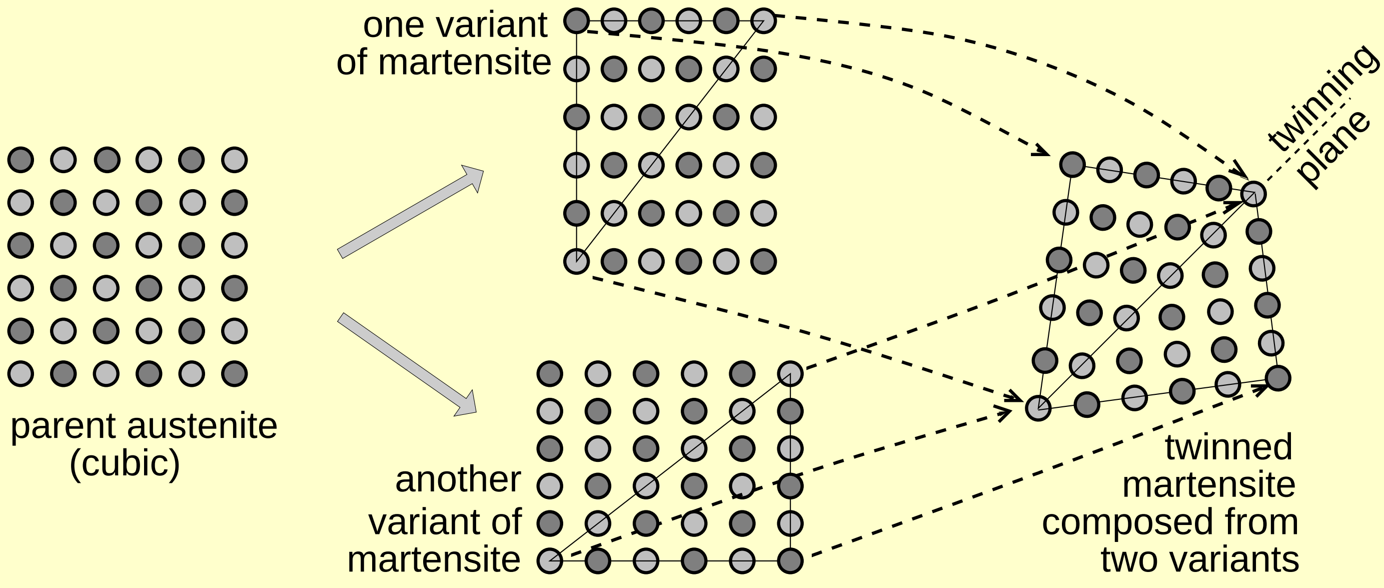
Austenit je méně poddajný a má kubickou strukturu. Při transformaci austenitu do martensitu a zpět prakticky nedochází k objemovým změnám.

Materiály s tvarovou pamětí

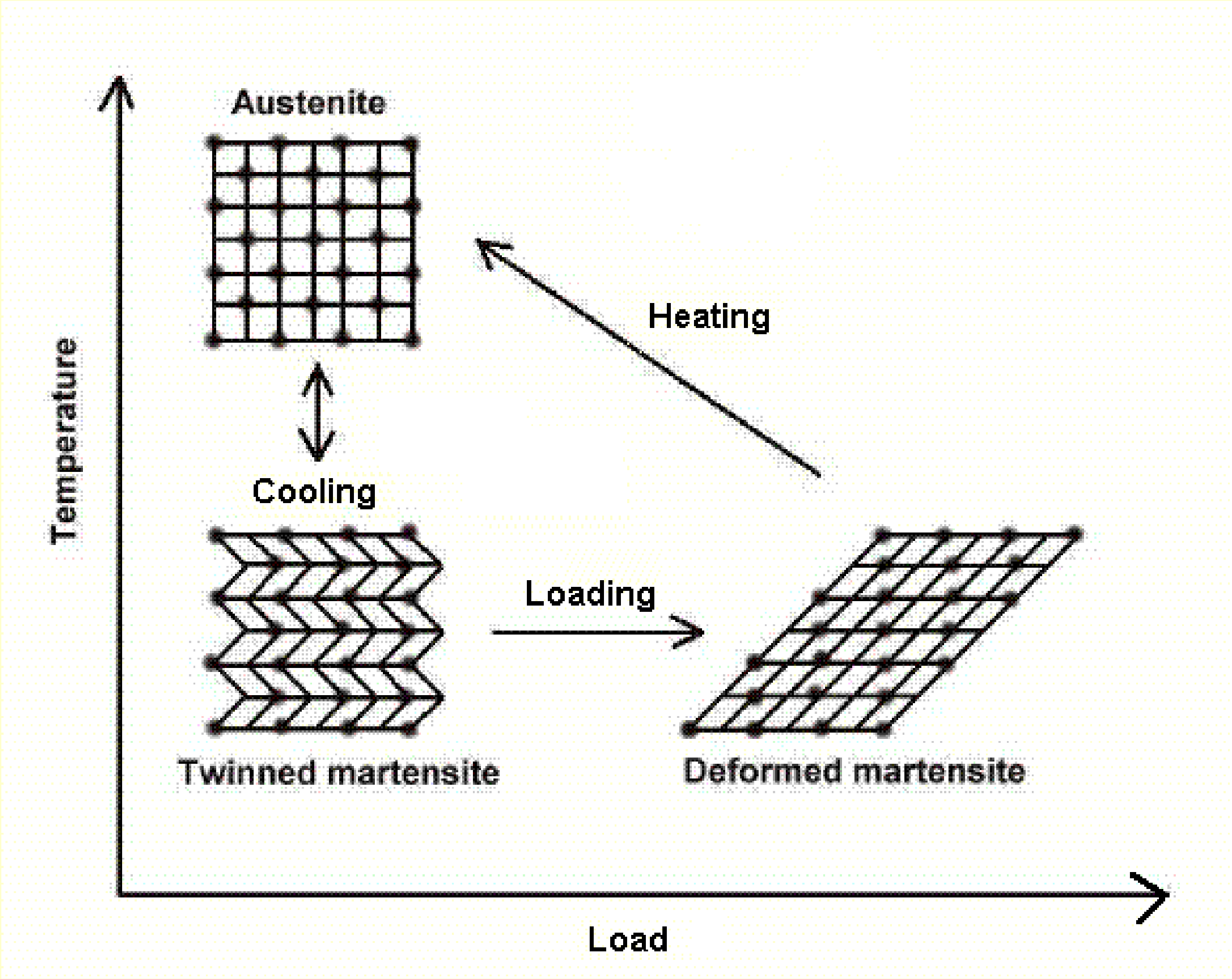


Oulu University, Finsko

Materiály s tvarovou pamětí



Tvarová paměť

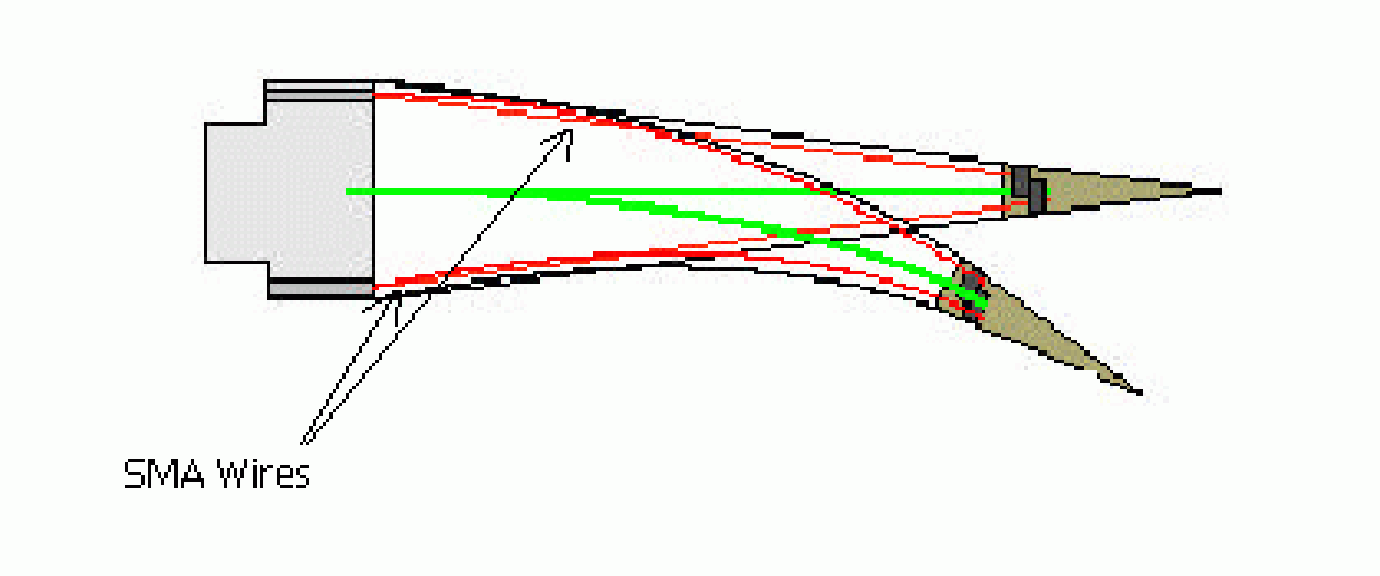


Oulu University, Finsko

Tvarová pamět'

vybrané aplikace:

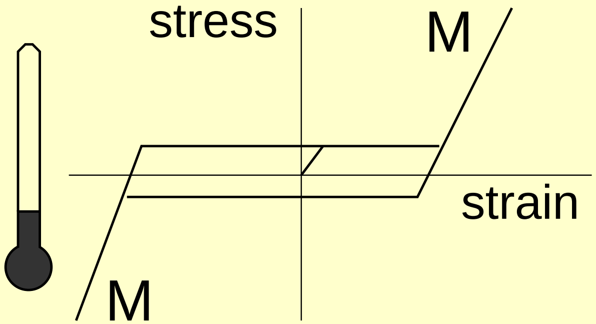
- ovládání křídel letadla
- kardiovaskulární stenty
- termostaty

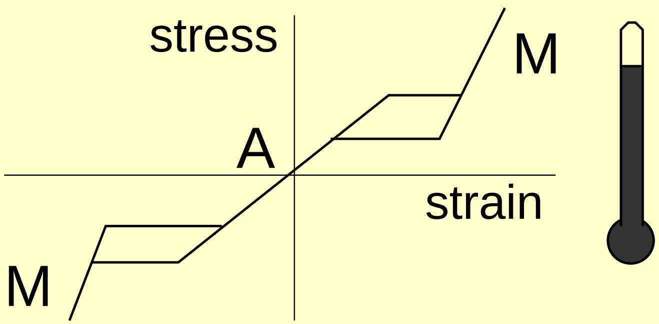


University of Alberta, Kanada

Pseudopružnost

Pseudopružnost se projevuje při dostatečně vysoké teplotě, pokud je slitina v austenitu, a působením mechanického zatížení se přetransformuje do martensitu. Po odtížení dojde k samovolné transformaci zpět do austenitu.

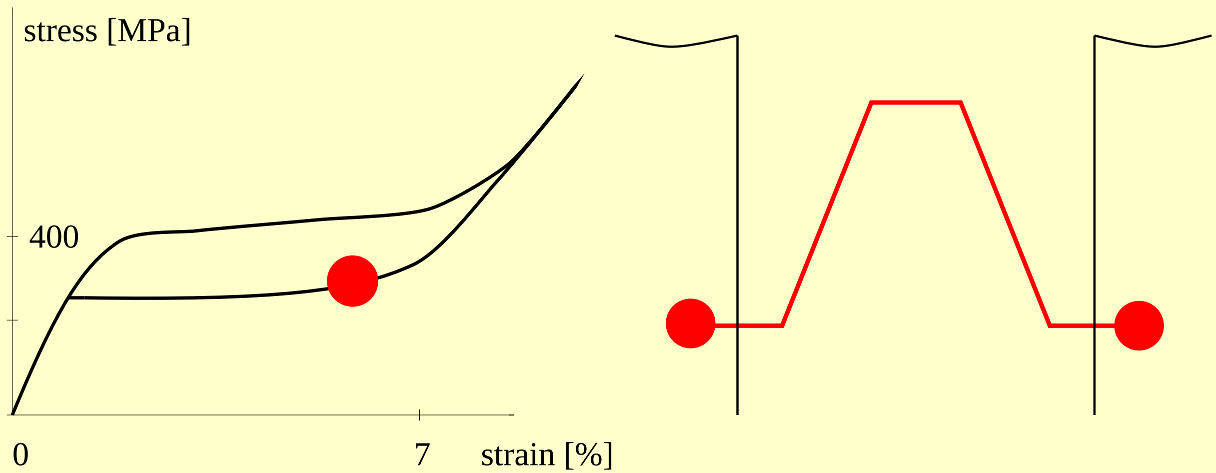




Pseudopružnost

vybrané aplikace:

- použití v medicíně (orthodoncie)



Materiály s tvarovou pamětí

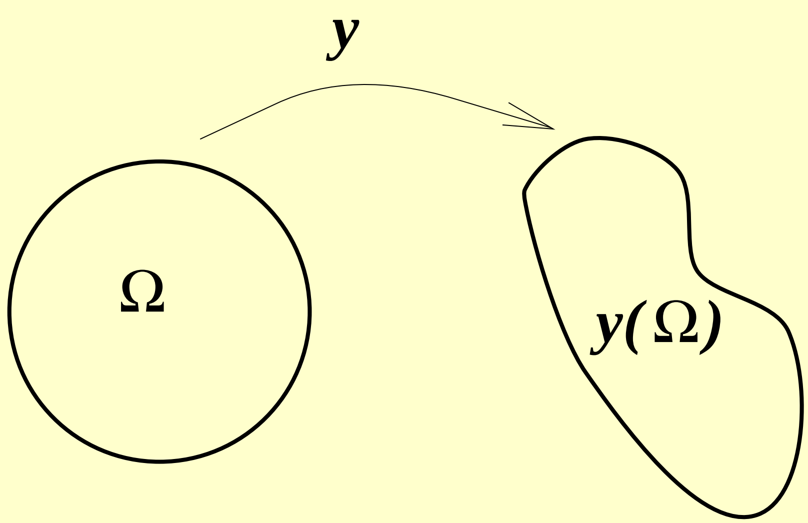
- bio-kompatibilita (NiTi)
- široké možnosti použití v technické praxi
- odolnost proti korozi a dobré mechanické vlastnosti

Matematický model

Pružné vlastnosti materiálu popisujeme pomocí volné energie ψ.

$$\psi = \psi(\theta, \nabla u) = \hat{\psi}(\nabla y, \theta)$$

θ. . . teplota
u. . . posunutí
y. . . deformace
∇u,∇y. . . gradient posunuti, gradient deformace



Matematický model

$$y(x) = x + u(x)\ ,\ \nabla y = \mathbf{I} + \nabla u$$

$\mathbf{I}$... jednotková matice

$$\nabla u = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}$$

Piolovo-Kirchhoffovo napětí

$$\sigma(\nabla u) = \frac{\partial}{\partial(\nabla u)}\psi(\theta, \nabla u)$$

Matematický model

Materiál se může nacházet v $\boldsymbol{L}$ beznapěťových stavech charakterizovaných maticemi $\boldsymbol{U_\ell}$, $\boldsymbol{\ell = 1, \ldots, L}$.

Kupříkladu $\boldsymbol{L = 1 + 3}$ pro NiMnGa (kubická$\longrightarrow$ tetragonální)

$\boldsymbol{L = 1 + 12}$ pro NiTi (kubická$\longrightarrow$ monoklinická)

$$\boldsymbol{\hat{\psi}_\ell(F, \theta) = \left\langle e^\ell; E^\ell e^\ell \right\rangle - c_\ell \theta \ln\left(\frac{\theta}{\theta_0}\right) + d_\ell}$$

$$\boldsymbol{e^\ell(F) = \frac{(U_\ell^\top)^{-1} F^\top F U_\ell^{-1} - \mathrm{I}}{2}}$$

$\boldsymbol{E^\ell}\ldots$ matice elastických konstant

$\boldsymbol{c_\ell}\ldots$ tepelná kapacita

$\boldsymbol{d_\ell}\ldots$ posun

Matematický model

volnou energii materiálu $\hat{\psi}$ definujeme jako

$$\hat{\psi} = \min_{\ell} \hat{\psi}_{\ell}$$

$$\psi(\theta, F) = \hat{\psi}(\theta, F - \mathrm{I})$$

ne(kvazi)konvexita ψ v F !!!
$\Rightarrow$
rychlé oscilace v ∇u při minimalizaci energie

$$\int_{\Omega} \psi(\theta, \nabla u) \mathrm{d}x$$

mohou vést k neexistenci minima.

Musíme tedy zobecnit pojem řešení.

Matematický model

Jednou z možností je sledovat s jakou pravděpodobností se oscilace vyskytují v různých bodech prostoru. To vede k pojmu gradientní Youngovy míry. Použitý postup je však zcela deterministický.

Uvažujme situaci, kdy $\nabla u_k(x)$ osciluje mezi dvěma maticemi $F_1(x)$ a $F_2(x)$ s pravděpodobností $\xi(x)$, respektive $1 - \xi(x)$.
Pišme v limitě pro $k \to \infty$

$$\nabla u(x) = \xi_1(x) F_1(x) + (1 - \xi_1(x)) F_2(x) \; .$$

Spojitost u dává podmínku

$$F_1(x) - F_2(x) = a(x) \otimes n(x) \; ,$$

kde matice $a(x) \otimes n(x)$ má složky

$$(a(x) \otimes n(x))_{ij} = a_i(x) n_j(x)$$

Matematický model

Místo

$$\int_{\Omega} \psi(\theta, \nabla u) \mathrm{d}x$$

píšeme

$$\int_{\Omega} \left(\xi(x)\psi(\theta, F_1(x)) + (1 - \xi(x))\psi(\theta, F_2(x))\right) \, \mathrm{d}x$$

Minimalizujeme přes $0 \leq \xi \leq 1$, F_1 a F_2.

Gradientní Youngova míra se v tomto případě napíše jako

$$\nu_x = \xi(x)\delta_{F_1(x)} + (1 - \xi(x))\delta_{F_2(x)} \, .$$

Obecně mohou být gradientní Youngovy míry mnohem komplikovanější a zatím je neumíme efektivně charakterizovat.

Matematický model

K realistickému popisu MTP nestačí pouze volná energie, ale potřebujeme matematicky popsat také disipační energii, která udává energetické ztráty spojené s transformací mezi různými stavy materiálu.

V souladu s experimenty požadujeme, aby disipovaná energie nezávisela na rychlosti transformace. Takto můžeme popsat hysterézní chování MTP.

Matematický model

V daném bodě materiálu můžeme popsat objemové zlomky jednotlivých fází materiálu

$$\boldsymbol{\lambda} = (\boldsymbol{\lambda}_1, \dots, \boldsymbol{\lambda}_L) \, .$$

Disipační energii fenomenologicky definujeme jako

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\lambda}) = \int_{\Omega} \left| \frac{\partial \boldsymbol{\lambda}}{\partial t} \right|_{L} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \, .$$

Matematický model

Energii do materiálu dodáváme například prací vnějších (časově závislých) sil $\boldsymbol{f}$

$$-\int_{\boldsymbol{\Omega}} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{t}) \cdot \boldsymbol{u}\,\mathbf{d}\boldsymbol{x}$$

a předepisujeme také vhodné okrajové podmínky, vyjadřující např., že materiál je někde pevně uchycen.

Matematický model

Pro definici řešení požadujeme, aby:

- v každém čase procesu byla minimalizována
  volná energie $+$ disipační energie $+$ práce vnějších sil
- práce vnějších sil byla zcela použita na změnu volné energie a disipaci

Numerické příklady

NiMnGa, $\boldsymbol{L = 4}$, $\boldsymbol{U_1 = \mathbf{I}}$ a $\mathbf{3}$ tetragonální varianty martensitu

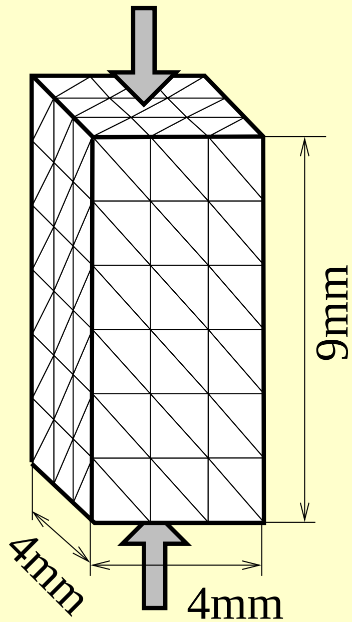
$$\boldsymbol{U_2} = \begin{pmatrix} \eta_2 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{pmatrix} ,$$

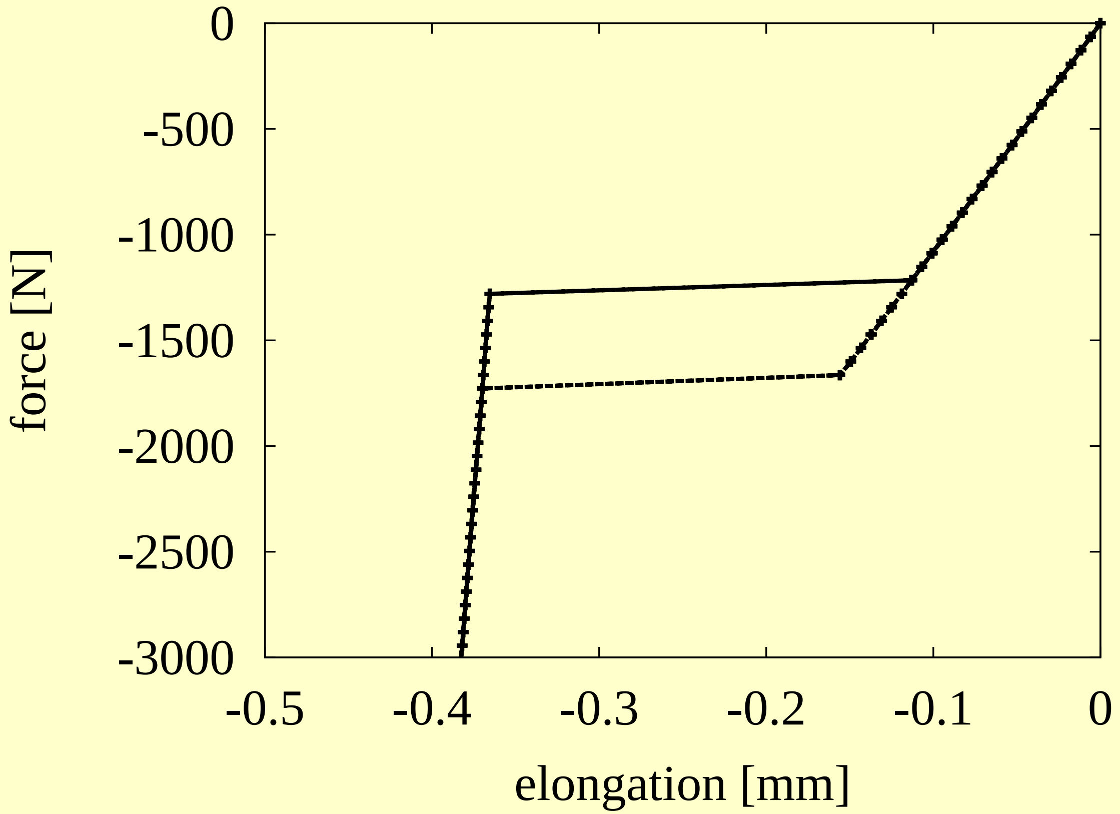
$$\boldsymbol{U_3} = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{pmatrix} ,$$

$$\boldsymbol{U_4} = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_2 \end{pmatrix} ,$$

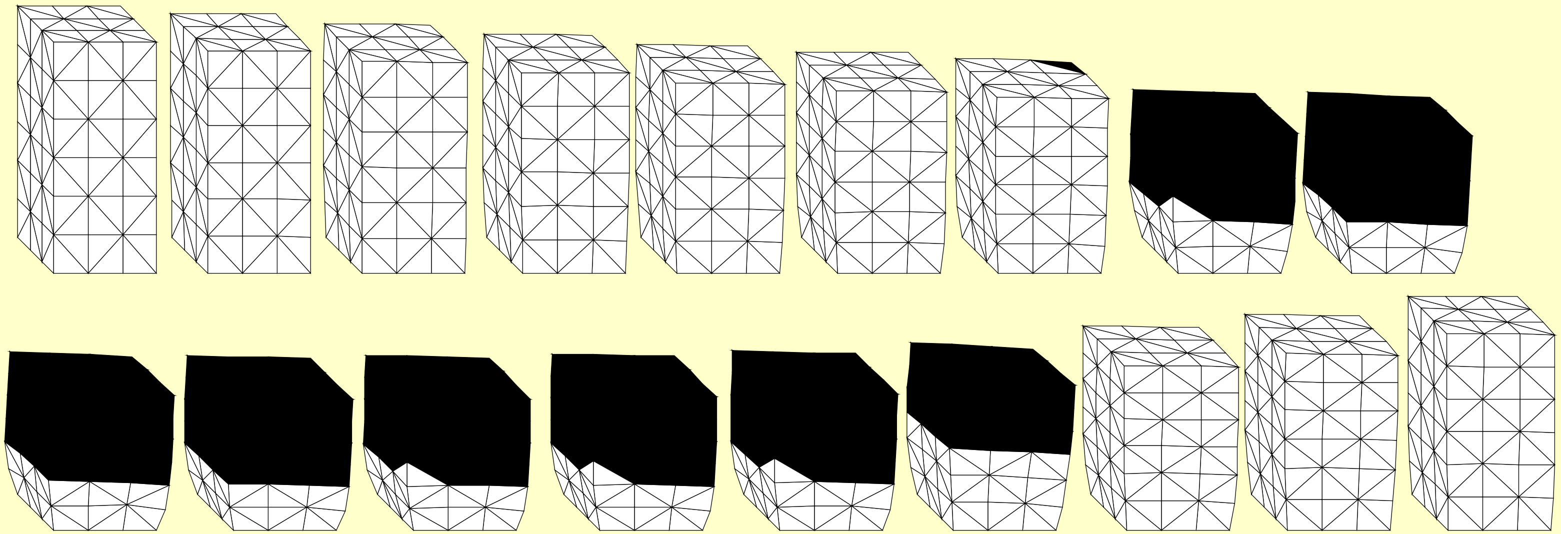
$$\eta_1 = 1.018 \, , \; \eta_2 = 0.9608$$

Numerické příklady

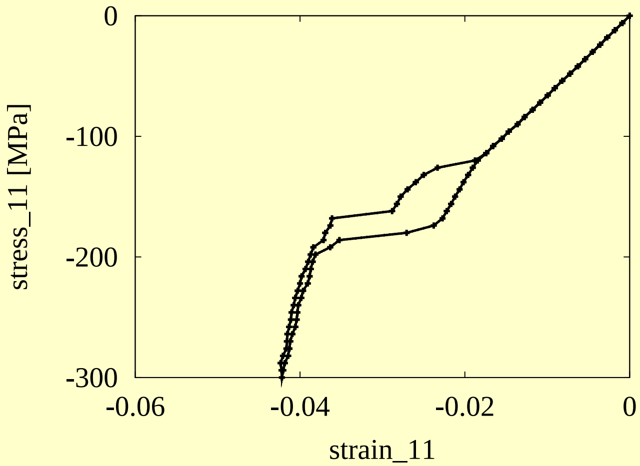


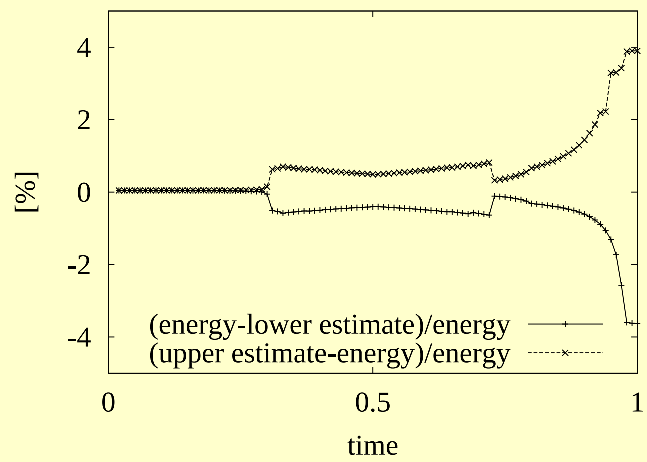


Numerické příklady

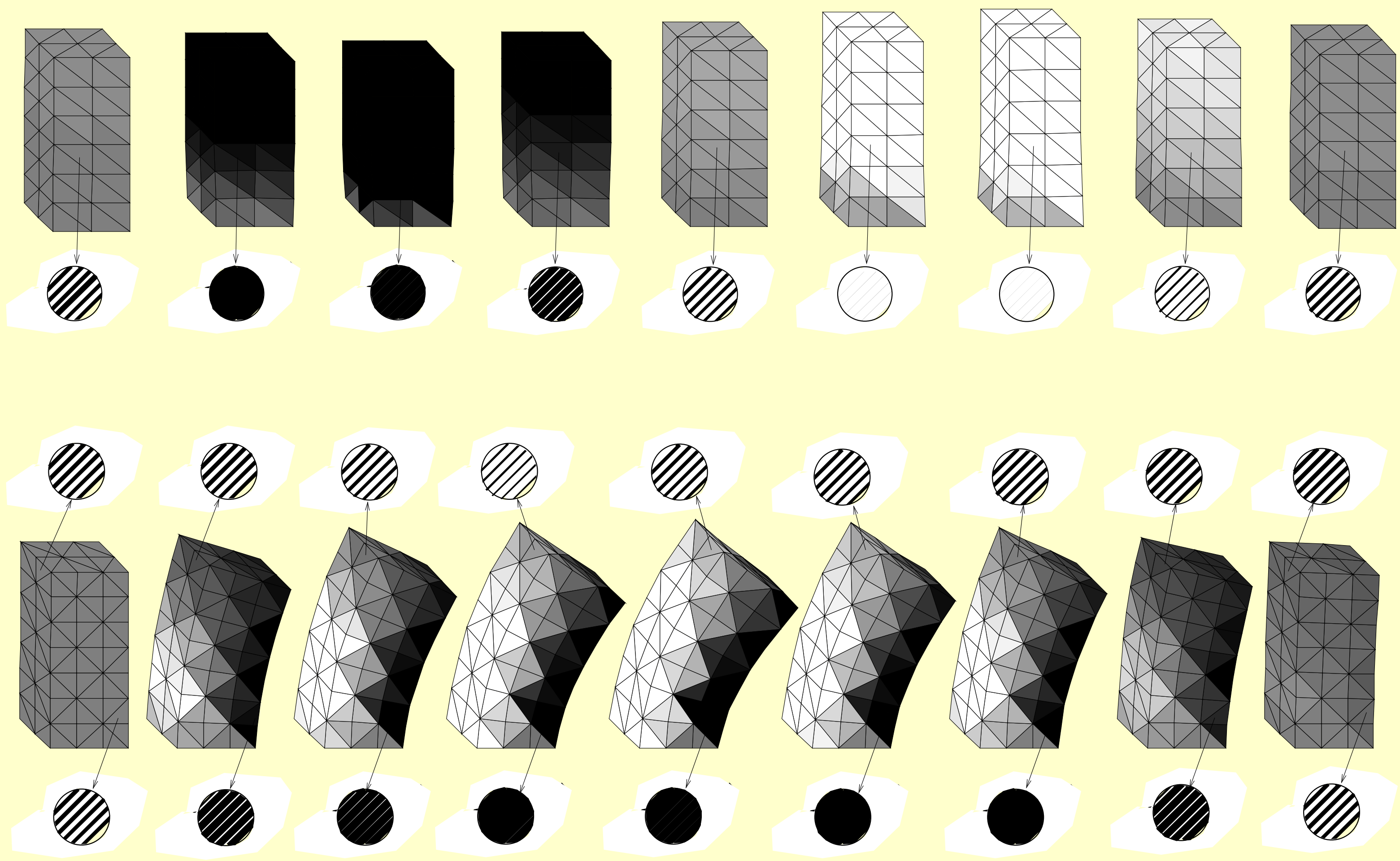


Numerické příklady



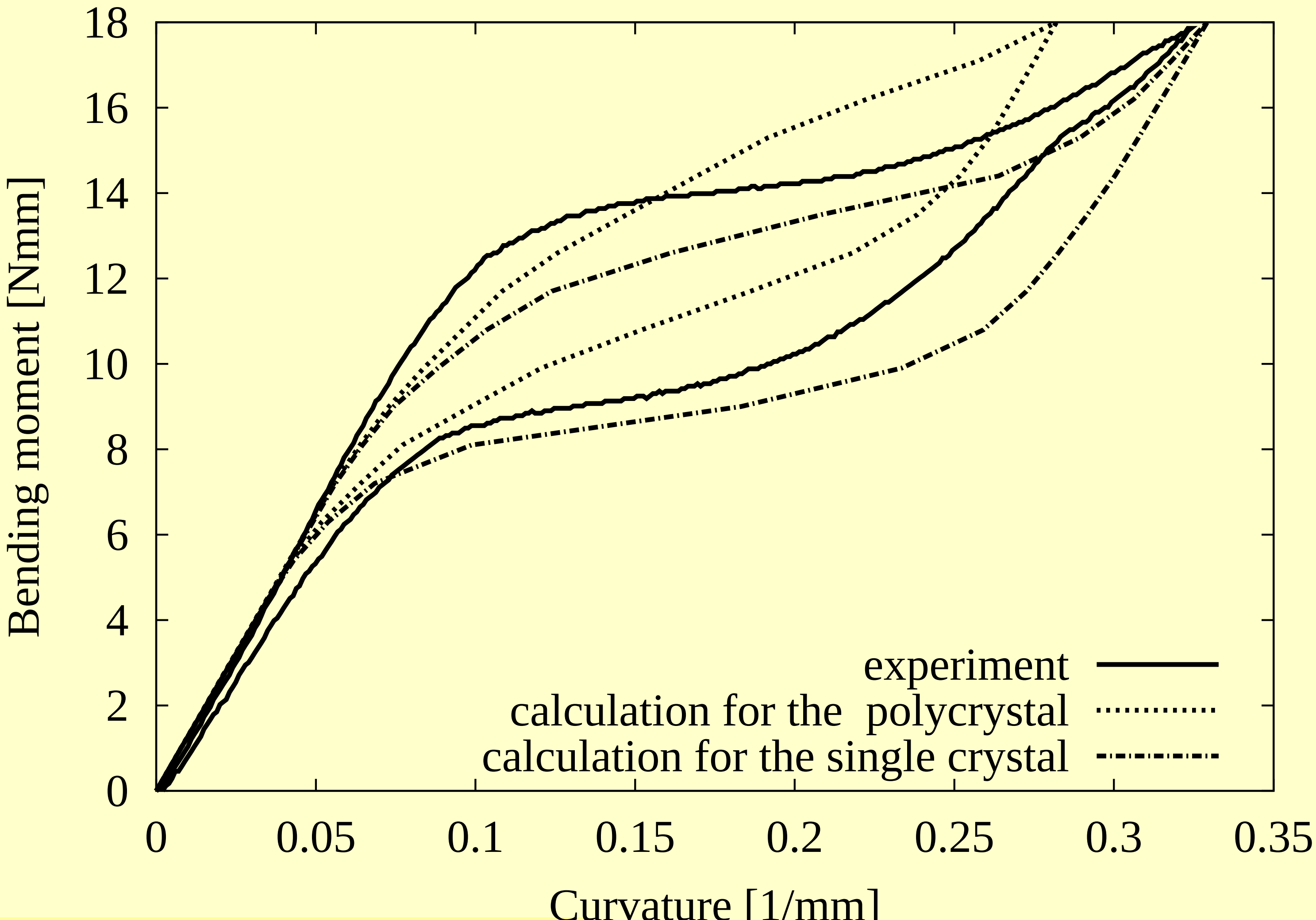


Numerické příklady



Numerické příklady

NiTi- orthodontický drátek spolupráce s `caesar` Bonn, Universität Bonn, Universität Düsseldorf, Dentaurum GmbH



Numerické příklady