

University of Groningen

Fracture phenomena of disordered media

Chung, Jim

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2002

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Chung, J. (2002). *Fracture phenomena of disordered media: a computational approach*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

SAMENVATTING

Dit proefschrift gaat over een nieuwe aanpak in het modelleren van het breukgedrag van hoogporeuze keramische materialen. Het bestuderen van het breukgedrag is van wetenschappelijk maar ook van technologische belang. In de chemische industrie worden deze materialen toegepast als katalysator-dragers. De wetenschappelijke interesse wordt gewekt omdat ze door hun brosheid en hoge porositeit (70 vol. %) unieke eigenschappen hebben.

Met computersimulaties is het mogelijk om een bestaand proces zo goed mogelijk na te bootsen. Sommige experimenten zijn in praktijk zo lastig te realiseren dat een modelleerstudie de enige praktische mogelijkheid is om de invloed van bepaalde parameters op de eigenschappen snel te kunnen achterhalen. Een andere toepassing van computermodellering is het toetsen van een bepaalde hypothese.

In het onderzoek naar het breukgedrag werden tot nu toe voornamelijk computersimulaties uitgevoerd die uitgaan van regelmatig opgebouwde netwerken van veren. Deze verennetwerken bestaan uit "bouwstenen" in de vorm van driehoekjes of vierkantjes. Vervolgens verwijdert men volstrekt willekeurig 70 % van de veren. Als de gebruikte veerkracht en breekbaarheid van de veren uit het netwerk overeenkomen met de gemeten eigenschappen van keramiek, dan heb je een model van een stukje keramiek met een porositeit

van 70%. Door deze theoretische verennetwerken in computersimulaties “stuk te drukken” kunnen we het breukgedrag van hoog poreus keramiek in een computermodel bestuderen.

Bij toepassing van dit soort simulaties bleek dat de vorm van de netwerkbouwstenen (dus de driehoekjes of vierkantjes), het breukgedrag sterk te beïnvloeden. Dat is dan geen goed uitgangspunt voor het benaderen van de werkelijkheid, omdat de regelmatige vorm van de bouwstenen onbedoeld ook in het modelresultaat terugkomt. Verder bleek vanuit de industriële research, dat naast de hoeveelheid porositeit ook de vorm van de holtes in het materiaal van cruciaal belang is. Daaruit is het idee geboren om verschillende structuren te bouwen met gelijke dichtheid. Op basis van kennis over het productieproces van keramische materialen zijn we in de computer uitgegaan van kleverige balletjes die worden geschud. Tijdens het schudden wordt op gezette tijden de “ballenbak” stilgezet. Deze “bevroren” situaties van de ballenbak noemen we een knopenconfiguratie. Hierbij moet men zich voorstellen dat elke bal een knooppunt van veren is. In een dergelijke configuratie is dus tussen elke bal en zijn burens een veer geplaatst. Zo hebben we op een alternatieve wijze een netwerk van veren gebouwd die, in tegenstelling tot de “klassieke” netwerken van regelmatige figuren, rekening kan houden met aspecten van de vorm van de holtes. In plaats van een vaste hoeveelheid veren gebruiken we een constant aantal knooppunten.

In hoofdstuk 2 tonen we aan dat onze manier van netwerken bouwen wel degelijk kan. Verder hebben we de veren wat meer eigenschappen gegeven dan tot nu toe gebruikelijk was. Zo zijn de netwerken in dit proefschrift ruimtelijk opgebouwd en niet, zoals in meeste klassieke netwerksystemen, alleen maar op een plat vlak. Verder is uitgegaan van veren die, behalve door rek en strek, ook door buiging en torsie kunnen breken.

Om de antwoorden uit ons model beter te kunnen begrijpen hebben we in hoofdstuk 3 onderzocht hoe de modelparameters (variabelen) de resultaten van het model beïnvloeden. We hebben hierbij met name gekeken naar wat er gebeurt als je ook verder uit elkaar gelegen knopen met veren aan elkaar verbindt. Ook werden de breukcriteria onderzocht, dwz in hoeverre de veren mogen vervormen voordat ze stuk gaan.

Uiteraard hebben we ons model ook toegepast op het fenomeen van het schaalgedrag van de breuksterkte. In hoofdstuk 4 hebben we enige uit de vakliteratuur bekende computerberekeningen overgedaan met onze nieuwe aanpak. Daarnaast hebben we in hoofdstuk 4 bestudeerd wat het effect is van een tussenlaag van een ander materiaal. Een ander materiaal betekent hier een laag met een andere knopen verdeling. We spreken in dit verband ook wel van een composiet- model.

De oppervlakten onder uni-axiale compressie werden gevarieerd tussen $0.64 \mu\text{m}^2$ en $5.76 \mu\text{m}^2$, terwijl de hoogte h veranderd werd tussen $0.80 \mu\text{m}$ en $6.4 \mu\text{m}$. De breukspanning σ_{breuk} bij constant oppervlakte blijkt te schalen volgens:

$$\sigma_{breuk} \sim \left(\log \frac{h}{\xi} \right)^{-1/\mu} \quad (9.1)$$

waarbij ξ de correlatielengte voorstelt in het materiaal. De modulus μ blijkt ook af te hangen van de afmetingen van het materiaal, maar in alle gevallen zijn dunnere specimens sterker dan dikkere en blijkt de breuksterkte toe te nemen met toenemend coördinatiegetal.

In hoofdstuk 5 maken we tenslotte allerlei verschillende configuraties met onze netwerkgenerator. Verschillende structuren ontstaan door de snelheid waarmee de kleverige balletjes worden geschud te variëren. In ons model is de “draaiknop” om dit te doen de “wanorde parameter”. Analoog aan de praktijkmetingen bleek dat verschillende structuren netwerken opleveren met zeer uiteenlopende sterktes. Hieruit blijkt dat voor de materiaalsterkte de vorm van de holtes eigenlijk net zo belangrijk is als het porievolume zelf. Daarnaast hebben we een grootheid getest, waarmee we de structuur qua sterkte zouden kunnen samenvatten. Deze grootheid noemen we de correlatielengte.

Gedurende dit promotieonderzoek zijn er nogal wat verschillende invalshoeken op de probleemstelling losgelaten. Met deze modelleertechnieken hebben we al geëxperimenteerd en omdat deze technieken zo veel belovend lijken, hebben we ze samengevat in een “outlook” hoofdstuk.

CHAPTER 9

Tot slot hebben we in een separate appendix nog verscheidene computervisualisatie opgenomen. Deze computervisualisaties zijn haast onontbeerlijk bij modellering. Het interpreteren en vergelijken van de grote hoeveelheden data uit de computer modellen zou anders zoveel moeilijker of zelfs onmogelijk zijn.