

# **MODELLAZIONE STOCASTICA DEL PROCESSO DI FRATTURA IN MATERIALI COMPOSITI A MATRICE CERAMICA, IN MATERIALI REFRAATTARI ED IN MATERIALI ETEROGENEI COMPLESSI**

Valeria Cannillo, Cristina Leonelli, Marcello Romagnoli, Paolo Veronesi

*Dipartimento di Ingegneria dei Materiali e dell'Ambiente  
Università di Modena e Reggio Emilia*

## **ABSTRACT**

In this work, an approach for numerical modeling of the fracture process of complex materials microstructures is presented. It is well known that the relation between a material microstructure and the resulting macroscopic properties is a problem of great practical interest. Thus, we study the effect of the particular microstructure on the fracture mechanism and damage accumulation.

To this aim, OOF, an innovative finite element code developed at the National Institute of Standards and Technologies (USA) and MIT (USA), is adopted. The innovative feature of this code is that the finite element method is applied at the microscale, so that all microstructural details can be included in the numerical model. This code can be used in conjunction with fracture criteria suitable for the description of brittle fracture: the Griffith criterion and a statistical approach based on the Weibull law. This approach allows to study crack initiation, propagation and damage accumulation in brittle materials of industrial interest, such as ceramic matrix composites, refractory materials, porous materials, innovative materials with complex microstructures. In particular, it is possible to study the effect of microstructural parameters on the fracture behavior and to optimize the microstructure in order to obtain an optimal response to prescribed thermo-mechanical loads.

## **SOMMARIO**

In questo lavoro, si propone un approccio di modellazione numerica per il processo di frattura di materiali aventi microstrutture complesse. E' noto che la correlazione tra la microstruttura di un materiale e le risultanti proprietà macroscopiche è un problema di grande interesse pratico. Si vuole pertanto studiare l'effetto della particolare microstruttura sul meccanismo di frattura del materiale e sul conseguente accumulo di danno.

A tale scopo, ci si avvale di OOF, un codice ad elementi finiti innovativo sviluppato presso il National Institute of Standards and Technologies (USA) e il MIT (USA). L'aspetto peculiare di tale codice, è che il metodo ad elementi finiti viene applicato alla microscala, per cui tutti gli aspetti microstrutturali possono essere inglobati nel modello numerico. Tale codice viene usato congiuntamente a modelli adatti a studiare la propagazione della frattura in materiali tipicamente fragili: il criterio di Griffith ed un approccio statistico basato sulla legge di Weibull. Ciò consente di studiare dettagliatamente l'innescò, il propagarsi della frattura, nonché l'accumulo di

danneggiamento in materiali di interesse pratico, quali compositi a matrice ceramica, materiali refrattari, materiali porosi, materiali innovativi caratterizzati da microstrutture complesse. In particolare e' possibile studiare l'influenza di taluni parametri microstrutturali sulla modalità di frattura ed eventualmente ottimizzare la microstruttura stessa in maniera tale da ottenere una risposta ottimale a determinate sollecitazioni termo-meccaniche.

## **INTRODUZIONE**

Il processo di frattura in materiali di natura fragile è un fenomeno piuttosto complesso che coinvolge diverse scale spaziali: quella macroscopica alla quale il fenomeno è osservabile e quella microscopica alla quale hanno luogo i fenomeni di innesco della frattura.

E' essenziale, infatti, analizzare i fenomeni che avvengono alla scala microscopica per comprendere appieno l'intero meccanismo di frattura. Ciò è di fondamentale importanza nei materiali complessi, come ad esempio i compositi, la cui rottura può essere data dalla concomitanza di diversi eventi: cricche nella matrice, rottura di fibre o inclusioni, distacco tra matrice e rinforzo, etc. In generale tutti i materiali dotati di microstrutture eterogenee hanno usualmente meccanismi di frattura complessi.

E' in quest'ottica che risulta estremamente interessante sviluppare modelli di calcolo in grado di studiare la propagazione della frattura nei materiali inglobando nel modello stesso i dettagli microstrutturali. In questo modo è possibile valutare anche l'effetto della microstruttura sul comportamento globale ed eventualmente ottimizzare la microstruttura stessa al fine di ottenere una risposta ottimale ad una determinata sollecitazione.

## **METODO**

Al fine di studiare il meccanismo di frattura in materiali fragili a partire dalla scala microstrutturale, ci si avvale di uno strumento estremamente innovativo: OOF [1].

OOF è un particolare codice di calcolo ad elementi finiti sviluppato presso il Massachusetts Institute of Technology (MIT) ed il National Institute of Standards and Technologies, USA.

L'aspetto innovativo di tale codice sta nel fatto che, invece di operare come i codici tradizionali alla scala macroscopica, lavora alla scala microscopica.

Il preprocessore, infatti è in grado di accettare come input immagini micrografiche del materiale in esame. Tali immagini, tramite una routine apposita, vengono convertite dal programma in mesh ad elementi finiti. La mesh può quindi essere rifinita a discrezione dell'utente. Tale tool di calcolo consente dunque di inglobare nel modello numerico tutti i dettagli microstrutturali, in modo tale da poter studiare l'effetto della particolare microstruttura sul comportamento globale del materiale stesso.

Sul campione di materiale considerato può quindi essere applicata una qualsiasi sollecitazione termo-meccanica e, tramite il solutore ad elementi finiti, vengono calcolati sforzi e deformazioni nel provino.

Il codice di calcolo OOF può essere integrato con determinati criteri di frattura. In particolare, per lo studio della frattura fragile è possibile avvalersi di due differenti

approcci: il criterio di Griffith ed un criterio probabilistico basato sulla legge di Weibull.

Con entrambi i criteri di rottura, dapprima vengono calcolati tramite il solutore ad elementi finiti gli stress nel materiale; se qualcuno degli elementi soddisfa il criterio di rottura prescelto, perde la propria rigidità e gli stress vengono ridistribuiti tra gli elementi circostanti: tale ridistribuzione di stress può quindi causare la rottura di altri elementi.

Per quanto riguarda i criteri di rottura sopra citati, il criterio di Griffith è un approccio classico basato su un bilancio energetico tra energia meccanica ed energia di superficie. L'approccio stocastico per la modellazione della frattura si basa sulla legge di Weibull. Tale legge mette in relazione la probabilità di rottura  $P_{fail}$  di un campione con lo stato di sforzo e la dimensione del campione stesso:

$$P_{fail} = 1 - \exp[-(\sigma/\sigma_0)^m (V/V_0)] \quad (1)$$

dove  $m$  e  $\sigma_0$  sono il parametro di Weibull ed il coefficiente di scala, rispettivamente.

A ciascun elemento, oltre alle proprietà termoelastiche, viene assegnato un numero compreso tra 0 e 1 detto probabilità di test. Quindi, per la data sollecitazione, vengono calcolati gli stress e, tramite la (1), la probabilità di rottura dell'elemento stesso. Se tale probabilità supera la probabilità di test, tale elemento si rompe, ridistribuendo i propri stress tra gli elementi attigui.

In questo modo è possibile tracciare il processo di frattura, seguendo lo svilupparsi ed il propagarsi delle cricche. Tali informazioni possono quindi essere usate come indicazioni per comprendere il fenomeno di frattura alla scala di lunghezza superiore, la macroscale.

## **ESEMPI APPLICATIVI**

Il codice OOF è stato recentemente utilizzato per studiare i meccanismi di danneggiamento e frattura in diversi materiali di interesse pratico.

Sviluppare un modello numerico in grado di prevedere le proprietà dei materiali è un problema cruciale specialmente per i materiali eterogenei, che sono per loro stessa natura complessi.

In particolare è stato oggetto di studio un materiale composito a matrice vetrosa. È noto infatti che il vetro, pur presentando proprietà estremamente interessanti, è caratterizzato da un'estrema fragilità. Si è dunque progettato un materiale composito, in cui alla matrice di vetro fossero aggiunte particelle di allumina, materiale ceramico caratterizzato da elevata durezza. Tale processo ha permesso di tenacizzare il vetro. Tramite OOF in congiunzione con il criterio di Griffith è stato possibile modellare il materiale composito e studiare la propagazione della frattura [3-6]. È stato infatti analizzato il ruolo delle particelle nel meccanismo di innesco della frattura e si è ottimizzata la loro frazione di volume, dimensione e disposizione al fine di avere la massima tenacità possibile. Dunque l'approccio di modellazione numerica consente non solo di determinare la soglia di innesco della frattura e il conseguente fenomeno di propagazione di cricche, ma anche di ottimizzare il materiale in modo tale da avere una buona performance meccanica.

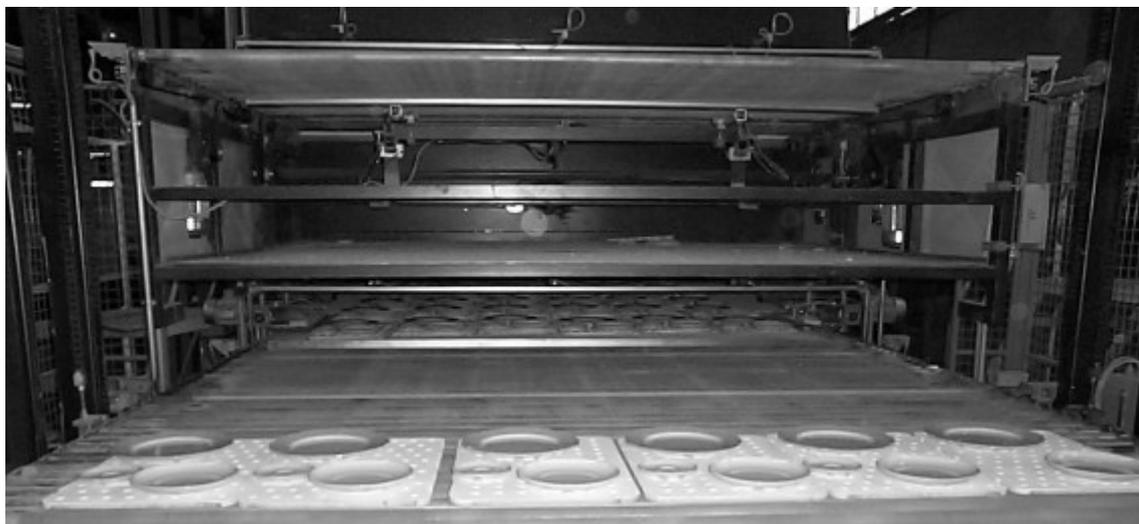
La seconda categoria di materiali studiata è stata quella dei Functionally Graded Materials (FGM). Si tratta di materiali innovativi caratterizzati da un gradiente di una proprietà (per esempio il modulo elastico) lungo una particolare direzione. Ciò consente di ottenere una risposta ottimale in termini di accumulo di danno in problemi di contatto. Tali materiali vengono in genere ottenuti mescolando due fasi diverse: ciò dà luogo ad una microstruttura che è discreta, in cui sono chiaramente distinguibili le due fasi differenti. Avvalendosi di OOF è stato studiato l'effetto della microstruttura – dunque della miscelazione delle due fasi diverse- sulla formazione ed il percorso delle microcricche [7-9].

Un'altra categoria di materiali studiati è stata quella dei materiali porosi. In particolare sono stati considerati materiali vetrosi a porosità controllata. Anche in questo caso ci si è avvalsi della modellazione numerica con OOF in congiunzione con il criterio di rottura di Griffith. Ciò ha permesso di identificare alcuni pori di una determinata dimensione come iniziatori di frattura [10].

Più recentemente, lo studio ha coinvolto piastre forate di materiali refrattari utilizzati come supporteria di infornamento per piastrelle, stoviglieria e ciotole di calcinazione.

Il materiale refrattario è costituito da una miscela di polveri pressate e sinterizzate a temperature superiori a 1350°C, per formare un monolito cordieritico.

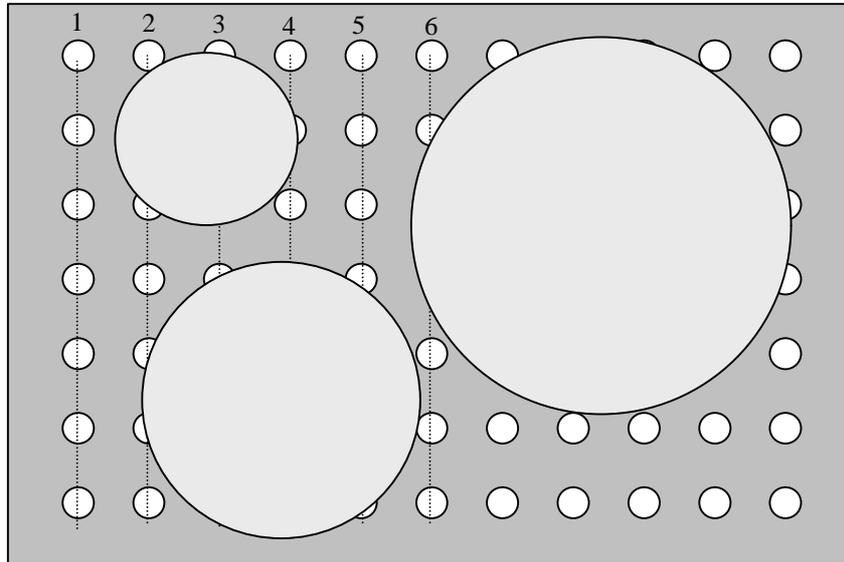
La piastra ha geometria rettangolare, di lati 360 X 530 mm, con fori di diametro 21 mm disposti a formare un reticolo con spaziatura 40 mm tra i centri dei fori. Tra il centro dei fori più esterni della piastra e le estremità della stessa esiste una distanza minima di 45 mm. Nel bordo esterno, sono ricavati due intagli per svincolare quanto più possibile la deformazione dei lati, non forati. La piastra, impiegata come supporteria di cottura per piatti ceramici, scorre entro un forno a rulli, mostrato in figura 1, nel quale, in tempi di 50-90 minuti, avviene la cottura del prodotto.



*Figura 1: forno a rulli con piastre caricate di stoviglieria – sezione di uscita -*

La curva di cottura presenta una criticità in corrispondenza della sezione di raffreddamento del forno, in cui viene insufflata aria fredda per velocizzare il ciclo produttivo. Le parti della piastra non coperte di materiale cotto vengono esposte

direttamente al flusso di aria fredda, mentre le parti coperte si trovano ad una temperatura anche di 200°C superiore, a seconda della geometria del caricamento. Le piastre sottoposte ciclicamente a questo ciclo termico presentano danni visibili già dopo alcune decine di cicli, e l'insorgere e la propagazione della frattura avviene nella quasi totalità dei casi nella direzione indicata con 3 e 4 nella figura 2.



*Figura 2: geometria della piastra di refrattario e posizione dell'elemento in cottura*

Nella figura 3 sono riportate le immagini relative alla rottura di piastre di uno stesso lotto produttivo, impiegate nel medesimo ciclo di cottura, in cui si evidenzia la frattura in posizioni differenti, e la frequenza con cui essa è stata riscontrata nella posizione indicata. Si noti che l'alta frequenza della frattura in posizione 3 è anche da imputarsi alla presenza dell'intaglio, ottenuto per lavorazione meccanica dopo cottura, e del conseguente indebolimento della sezione. In realtà, esiste un'ulteriore modalità di frattura, dovuta all'indesiderato contatto tra la piastra e le cinghie laterali del sistema di trasmissione del moto del forno a rulli. Data l'occasionalità del fenomeno, e la sua non pertinenza con lo studio in corso, tale dato è stato omissivo.

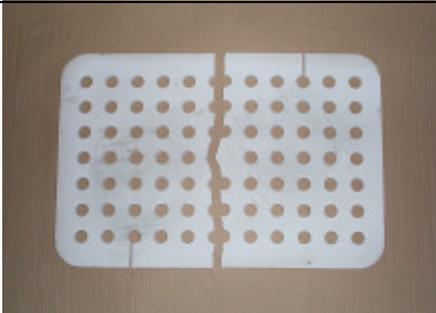
Per la piastra in materiale refrattario ci si è avvalsi di OOF, studiando il processo di frattura riscontrato sperimentalmente alla scala macroscopica.

In particolare si è studiato l'effetto dello sbalzo termico prodotto dalla presenza della stovigliera circolare appoggiata sul materiale refrattario.

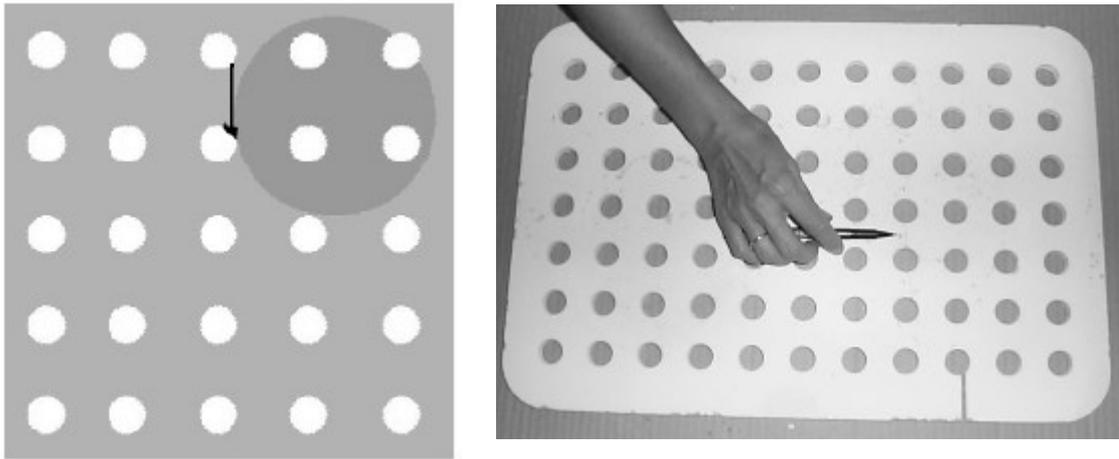
La piastra è stata modellata associando ad ogni elemento finito le proprietà termoelastiche del refrattario e avvalendosi del criterio di Griffith per la modellazione della frattura fragile. I valori utilizzati sono stati di 100GPa per il modulo di Young,  $3 \cdot 10^{-6}$  per il coefficiente di Poisson, e  $5 \cdot 10^{-6}$  GPa mm come energia superficiale.

Si è osservato che la cricca è originata dal campo di stress provocato dalla differente temperatura a cui è sottoposto il refrattario nella zona sottostante la piastrina. La cricca ha origine in corrispondenza di un foro della piastra e quindi propaga fino al foro successivo.

In Figura 4a è illustrata la formazione della cricca (in nero sono rappresentati gli elementi fratturati). I risultati sono in accordo con quanto riscontrato sperimentalmente e riportato in figura 4b.

Posizione	Figura	Frequenza
1	Non riscontrata	0
2	Non riscontrata	0
3		41 %
4		38 %
5		12 %
6		9 %

*Figura 3: tipi e frequenza di frattura nella piastra di refrattario*



*Figura 4: a) simulazione della frattura nella piastra di refrattario (in nero elementi fratturati); b) zona di inizio della frattura sulla piastra reale*

Attualmente, in collaborazione con la RS – Refrattari Speciali S.p.A. di Roteglia (RE) è allo studio una nuova geometria di piastra in grado di rispondere meglio alle sollecitazioni del ciclo termico. Un netto miglioramento delle prestazioni è inoltre stato ottenuto modificando le proprietà termiche del materiale refrattario, intervenendo sulla composizione e sulla granulometria delle materie prime.

## **CONCLUSIONI**

L'approccio proposto è basato sulla modellazione numerica del processo di frattura avvalendosi di un codice ad elementi finiti usato in congiunzione con criteri adatti a materiale fragile.

Tale approccio consente di studiare l'innesco e la propagazione della frattura, inglobando nel modello, ove necessario, la particolare microstruttura del materiale in esame.

## **RINGRAZIAMENTI**

Si ringrazia la RS – Refrattari Speciali S.p.A. di Roteglia (RE), nella persona di R. Biasco per la discussione tecnica e la fornitura dei materiali

## **BIBLIOGRAFIA**

- [1] W.C. Carter, S.A. Langer, E.R. Fuller. The OOF manual: version 1.0, (<http://www.ctcms.nist.gov/oof/>), 1998.
- [2] V. Cannillo, C. Leonelli, Modeling and simulations at microscopical scale in materials science and engineering: a review. *Materials Engineering*, 12:73-83, 2001.
- [3] V. Cannillo, A. Corradi, C. Leonelli, A.R. Boccaccini. A simple approach for determining the "in-situ" fracture toughness of ceramic platelets used in composite materials by numerical simulations, *Journal of Materials Science Letters*, 20, 1889-1891, 2001.

- [4] V. Cannillo, C. Leonelli, A. Boccaccini. Numerical models for thermal residual stresses in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> platelets/borosilicate glass matrix composites, *Materials Science and Engineering*, A323: 246-250, 2002.
- [5] V. Cannillo, G.C. Pellacani, C. Leonelli, A.R. Boccaccini. Numerical modeling of the fracture behavior of a glass matrix composite reinforced with alumina platelets. Submitted Composites A.
- [6] V. Cannillo, A. Corradi, A.R. Boccaccini, Numerical models for the mechanical behavior of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-platelets/borosilicate glass matrix composites. Euromat 2001, Rimini, Italy.
- [7] V. Cannillo, G.C. Pellacani, W.C. Carter, Numerical modeling of the behavior of graded materials. ACerS 103<sup>rd</sup> Annual Meeting, Indianapolis, Indiana, USA, April 22-25, 2001.
- [8] V. Cannillo, T. Manfredini, A. Corradi, W.C. Carter, Numerical Models of the Effect of Heterogeneity on the Behavior of Graded Materials. Key Engineering Materials Vols. 206-213 (2002), 2163-2166, Trans Tech Publications, Switzerland. (Proceedings ECERS 2001, Brugge, Belgium).
- [9] V. Cannillo, W.C. Carter, Numerical Models of the Effect of Elastic Heterogeneity on the Toughness of Graded Materials. 10<sup>th</sup> ICF- International Congress on Fracture, Honolulu, Hawaii, USA, 2-6 December 2001.
- [10] A.R. Boccaccini, J. Spino, V. Cannillo, Hermetic glass bodies with controlled porosity: processing and properties. Accepted for publication in CESP (Ceramic Engineering and Science Proceedings).
- [11] V. Cannillo, W. C. Carter, Computation and Simulation of Reliability Parameters and their Variations in Heterogeneous Materials, *Acta Materialia*, 48:3593-3605, 2000.
- [12] V. Cannillo, W.C. Carter, Modeling Fracture and Reliability in Brittle and Damage-Tolerant Materials with a Parametric Statistical Approach. Invited talk, ACerS 102<sup>nd</sup> Annual Meeting, St. Louis, Missouri, USA, April 30-May 3, 2000.
- [13] V. Cannillo, W.C. Carter, Stochastic modeling of the mechanical behavior and reliability of brittle or moderately damage-tolerant materials, Accepted for publication, Cimtec Proceedings