Tạp chí Khoa học Công nghệ Xây dựng NUCE 2019. 13 (4V): 129–138

XÁC ĐỊNH ĐẶC TRƯNG HỮU HIỆU CỦA VẬT LIỆU ĐA TINH THỂ DỊ HƯỚNG BẰNG PHƯƠNG PHÁP ĐỒNG NHẤT HÓA

Nguyễn Hoàng Phương[a,*], Lê Văn Cảnh[a], Nguyễn Trung Kiên[b]

[a]*Bộ môn kỹ thuật xây dựng, Đại học Quốc Tế, Đại học Quốc gia TP. HCM, Khu phố 6, quận Thủ Đức, TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam*
[b]*Khoa Xây Dựng, Đại học Sư phạm kỹ thuật TP. HCM, 1 Võ Văn Ngân, quận Thủ Đức, TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam*

Nhận ngày 10/08/2019, Sửa xong 10/09/2019, Chấp nhận đăng 11/09/2019

Tóm tắt

Bài báo trình bày một hướng tiếp cận số nhằm xác định đặc trưng hữu hiệu của vật liệu đa tinh thể dị hướng. Kỹ thuật đồng nhất hóa được xây dựng trên mối liên hệ giữa hai cấp độ vật liệu (cấp độ vi mô và cấp độ vĩ mô). Cấp độ vi mô thể hiện cấu tạo vi mô của vật liệu bao gồm các pha vật liệu đa tinh thể dị hướng. Phân bố hướng của đơn tinh thể thay đổi ngẫu nhiên phụ thuộc vào từng loại vật liệu khác nhau. Thuộc tính hữu hiệu vật liệu đa tinh thể được tính toán trung bình thể tích của mẫu phần tử đại diện. Giá trị trung bình thể tích của các đặc tính hữu hiệu này được sử dụng cho một điểm vật liệu thuộc cấp độ tính toán vĩ mô. Kết quả nghiên cứu sẽ được so sánh với các nghiên cứu lý thuyết.

Từ khoá: đồng nhất hóa; phần tử đại diện; vật liệu đa tinh thể; phương pháp đa tỉ lệ; đặc trưng hữu hiệu.

DETERMINATION OF THE EFFECTIVE PROPERTIES OF RANDOM ORIENTATION POLYCRYSTALS USING HOMOGENIZATION METHOD

Abstract

This research presents a numerical approach to determine the effective elastic properties of polycrystalline materials with random orientations of constituent crystals. The homogenization method is based on two scale of materials (micro scale and macro scale). The Micro scale can show the details and structure of the components with various orientation of materials. The effective elastic properties of polycrystals, which have random of principle directions, can be calculated by averaging the Representation Volume Element (RVE). The result will be compared with analytical solutions.

Keywords: homogenization method; representation volume element; polycrystals materials; multiscale method; the effective properties.

https://doi.org/10.31814/stce.nuce2019-13(4V)-12 © 2019 Trường Đại học Xây dựng (NUCE)

1. Giới thiệu

Việc nghiên cứu về các tính chất đàn hồi của vật liệu luôn thu hút sự quan tâm của các bài toán kỹ thuật. Vật liệu đa tinh thể dị hướng đóng một vai trò quan trọng trong ngành xây dựng vì các vật liệu thể rắn hầu hết được cấu tạo dưới dạng đa tinh thể. Sự xếp chồng ngẫu nhiên các lớp tinh thể với sự phân bố hướng khác nhau thể hiện sự không đồng nhất của vật liệu. Ứng xử của vật liệu vĩ mô chịu tác động lớn bởi sự phân bố kết cấu và hình thái của các tinh thể. Để tiên đoán chính xác ứng xử toàn thể của nhóm tinh thể và sự phân bố ngẫu nhiên hướng vật liệu, hướng tiếp cận nguyên lý biến phân

*Tác giả chính. *Địa chỉ e-mail:* nhphuong@hcmiu.edu.vn (Phương, N. H.)

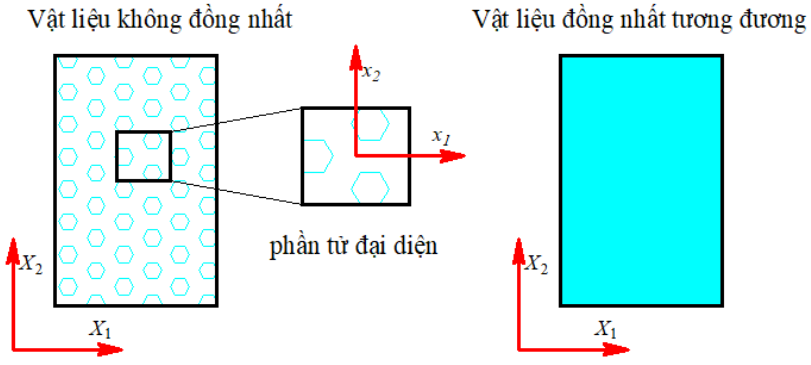
được thực hiện trong bài toán cận có thể xác định nhanh chóng các cận trên và dưới của các hằng số đàn hồi hữu hiệu của vật liệu nhiều pha vật liệu. Phương pháp cận Voight-Ruess-Hill [1–3] được xây dựng trên nguyên lý cực tiểu hoá năng lượng là phương pháp đơn giản nhất và được áp dụng rộng rãi. Nguyên lý biến phân của Hashin-Shtrikman [4] đã thu hẹp được khoảng cách giữa cận trên và cận dưới so với nghiên cứu của Hill. Bên cạnh các nghiên cứu ngoài nước, nghiên cứu của tác giả Pham Đức Chính [5, 6] đã đề xuất phương pháp biến phân để xác định các hằng số đàn hồi hữu hiệu. Tuy nhiên, các hướng tiếp cận theo nguyên lý biến phân chỉ đưa ra được khoảng dao động cho các hằng số vật liệu. Biên dao động này tuỳ vào từng trường hợp phân bố vật liệu. Điều này có thể giải quyết bằng các phương pháp FE^2 (sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn để rời rạc hoá bài toán cấp độ vĩ mô và bài toán cấp độ vi mô). Việc chụp XRay từng mặt cắt vật liệu được thực hiện và đưa ra các thông số giúp cho quá trình mô phỏng FE^2 thuận lợi. Điểm quan trọng của phương pháp này là kỹ thuật đồng nhất hoá vật liệu. Kỹ thuật đồng nhất hoá được thực hiện trong các nghiên cứu về các vật liệu không đồng nhất. Cấu tạo vật liệu không đồng nhất của cấp độ vi mô (micro scale) được đồng nhất hoá tính toán và áp dụng cho một điểm vật liệu của cấp độ vĩ mô (macro scale). Kỹ thuật này đang thu hút sự chú ý của các nhà nghiên cứu trên thế giới về vật liệu [7–18].

Qua các nghiên cứu trên, việc ước lượng các đặc trưng đàn hồi của vật liệu đa tinh thể dị hướng một cách chính xác hơn là một yêu cầu trong các bài toán có kích thước nhỏ. Trong bài báo này, phần tử đại diện hai chiều được sử dụng và rời rạc hóa bằng bằng phương pháp phần tử hữu hạn. Kỹ thuật đồng nhất hóa được áp dụng nhằm đưa ra đặc trưng hữu hiệu của vật liệu đa tinh thể dị hướng.

2. Lý thuyết cơ sở

2.1. Phần tử đại diện

Xem xét một vật liệu không đồng nhất và liên tục $A \in \Omega^2$ được thay thế bằng một vật liệu đồng nhất liên tục $A_M \in \Omega^2$ (cấp độ vĩ mô - Macro scale) tương đương và tại mỗi điểm vật liệu sẽ có một kết cấu vi mô (micro scale) không đồng nhất $A_m \in \Omega^2$ kèm theo.



Hình 1. Bài toán đồng nhất hoá thể tích phần tử đại diện

Kích thước bài toán vi mô l_{micro} nhỏ hơn nhiều lần với kích thước bài toán vĩ mô l_{macro} nên khi tính toán tại cấp độ vi mô thì lực thể tích có thể bỏ qua.

Phương trình cân bằng của bài toán cấp độ vi mô

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m = 0 \text{ trong } A_m \tag{1}$$

trong đó $\boldsymbol{\sigma}_m$ là ứng suất đàn hồi của bài toán ở cấp độ vi mô.

Các đặc trưng về cấu tạo vật liệu không đồng nhất được thể hiện thông qua phần tử thể tích đại diện (RVE) nên kích thước của RVE cần lựa chọn

- Đủ lớn để mô tả hết tính chất của vật liệu.
- Đủ nhỏ để đảm bảo thỏa mãn các yếu tố giảm yếu trong bài toán.

2.2. *Định lý trung bình*

Tensơ biến dạng vĩ mô $\boldsymbol{\varepsilon}_M$ bằng trung bình thể tích của tensơ biến dạng vi mô $\boldsymbol{\varepsilon}_m$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_M = \frac{1}{A_m}\int_{A_m} \boldsymbol{\varepsilon}_m \mathrm{d}A_m \tag{2}$$

Tensơ ứng suất vĩ mô σ_M bằng trung bình thể tích của tensơ ứng suất vi mô σ_m

$$\boldsymbol{\sigma}_M = \frac{1}{A_m}\int_{A_m} \boldsymbol{\sigma}_m \mathrm{d}A_m \tag{3}$$

Ứng suất tại cấp độ vi mô được thể hiện qua các biểu thức sau

$$\nabla \mathbf{X} = \mathbf{I} \tag{4}$$

trong đó X_i là vectơ vị trí của nút trên biên, và $\mathbf{I}$ là ma trận đơn vị.

Từ (1) và (4) ta xây dựng được mối liên hệ sau

$$\nabla\left(\boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{X}\right) = \left(\nabla \boldsymbol{\sigma}_m\right)\mathbf{X} + \left(\nabla \mathbf{X}\right)\boldsymbol{\sigma}_m = \boldsymbol{\sigma}_m \tag{5}$$

Áp dụng công thức (5) vào định lý trung bình (3) ta có

$$\boldsymbol{\sigma}_M = \frac{1}{A_m}\int_{A_m} \nabla\left(\boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{X}\right)\mathrm{d}A_m = \frac{1}{A_m}\int_{\Gamma_m} \mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{X}\mathrm{d}\Gamma_m = \frac{1}{A_m}\int_{\Gamma_m} \mathbf{f}\mathbf{X}\mathrm{d}\Gamma_m = \frac{1}{A_m}\sum_{i}^{N_p} f_i X_i \tag{6}$$

trong đó f_i là lực trên nút biên i, $\Gamma_m X_i$ là biên của phần tử đại diện và N_P là số nút trên biên.

2.3. *Điều kiện biên của bài toán cấp độ vi mô*

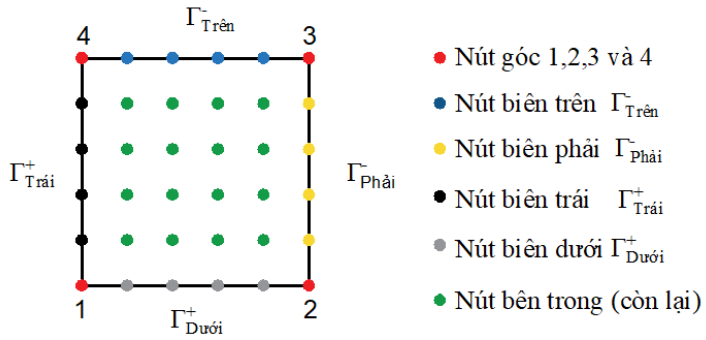
Trong bài toán vi mô, biến dạng ở cấp độ vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M$ được biến đổi thành điều kiện biên chuyển vị cho bài toán cấp độ vi mô. Nhiều quan điểm để áp đặt điều kiện biên này khác nhau dẫn đến các phương pháp khác nhau như Miehe [7], Molina [19], Kouznetsova [15].

Trường chuyển vị của bài toán cấp độ vi mô được chia thành hai thành phần, đó là trường chuyển vị trung bình $\bar{\mathbf{u}}$ và trường chuyển vị biến thiên tuần hoàn $\tilde{\mathbf{u}}$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \tag{7}$$

Trong trường hợp sử dụng điều kiện biên tuần hoàn

$$\tilde{\mathbf{u}} = 0 \text{ trên } \Gamma_m \tag{8}$$



Hình 2. Các nút trên phần tử đại diện RVE

Chuyển vị tại trung bình của phần tử đại diện RVE $\bar{\mathbf{u}}$ được xác định theo biểu thức

$$\bar{\mathbf{u}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} & \frac{1}{2}\bar{\varepsilon}_{12} \\ \frac{1}{2}\bar{\varepsilon}_{21} & \bar{\varepsilon}_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{Bmatrix} \tag{9}$$

trong đó $\mathbf{X}$ là toạ độ của các điểm thuộc phần tử đại diện, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M$ là biến dạng từ cấp độ vĩ mô.

Điều kiện biên tuần hoàn trong phần tử đại diện được thể hiện qua mối liên hệ tuần hoàn giữa các cặp nút trên biên độc lập Γ^+ và biên phụ thuộc Γ^-.

$$\tilde{\mathbf{u}}^+ = \tilde{\mathbf{u}}^- \tag{10}$$

trong đó $\tilde{\mathbf{u}}^+$ là chuyển vị trên biên trái và biên dưới; $\tilde{\mathbf{u}}^-$ là chuyển vị trên biên phải và biên trên.

Mối liên hệ biểu thức (10) được viết lại theo các bậc tự do

$$\mathbf{C}\mathbf{u} = \mathbf{0} \tag{11}$$

Ràng buộc tuần hoàn được phân loại thành bậc tự do độc lập và bậc tự do phụ thuộc

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_i & \mathbf{C}_d \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_i \\ \mathbf{u}_d \end{Bmatrix} = \mathbf{0} \tag{12}$$

Mối liên hệ giữa bậc tự do phụ thuộc $\mathbf{u}_d$ và bậc tự do độc lập $\mathbf{u}_i$ được thể hiện

$$\mathbf{u}_d = -\mathbf{C}_d^{-1}\mathbf{C}_i\mathbf{u}_i = \mathbf{C}_{di}\mathbf{u}_i \tag{13}$$

Xem xét bài toán ở cấp độ vi mô, ta xây dựng phương trình tuyến tính hệ thống

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f} \tag{14}$$

Phương trình tuyến tính hệ thống được viết lại

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii} & \mathbf{K}_{id} \\ \mathbf{K}_{di} & \mathbf{K}_{dd} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_i \\ \mathbf{u}_d \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_i \\ \mathbf{f}_d \end{Bmatrix} \tag{15}$$

Phương trình tuyến tính hệ thống được rút gọn theo các bậc tự do độc lập

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^* &= \mathbf{K}_{ii} + \mathbf{K}_{id}\mathbf{C}_{di} + \mathbf{C}_{di}^T\mathbf{K}_{di} + \mathbf{C}_{di}^T\mathbf{K}_{dd}\mathbf{C}_{di} \\ \mathbf{f}^* &= \mathbf{f}_i + \mathbf{C}_{di}^T\mathbf{f}_d \\ \mathbf{K}^*\mathbf{u}_i &= \mathbf{f}^* \end{aligned} \tag{16}$$

2.4. Kỹ thuật trung bình hoá thể tích

Sau khi tính toán bài toán cấp độ vi mô, ma trận hằng số vật liệu tương đương sẽ thỏa mãn biểu thức sau

$$\boldsymbol{\sigma}_M = \mathbf{D}_M \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M \tag{17}$$

Trong bài toán 2D, chuyển vị của nút ở góc được xác định như sau

$$\bar{\mathbf{u}}_i = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & \frac{1}{2}X_2 \\ 0 & X_2 & \frac{1}{2}X_1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{12} \end{Bmatrix} = \mathbf{T}_P^i \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M \tag{18}$$

Chuyển vị của 4 nút tại góc của RVE được tính như sau

$$\mathbf{u}_b = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_P^1 & \mathbf{T}_P^2 & \mathbf{T}_P^3 & \mathbf{T}_P^4 \end{bmatrix}^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M = \mathbf{T}_P \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M \tag{19}$$

Phương trình tuyến tính hệ thống được viết lại theo các bậc tự do sau khi khử các điều kiện biên

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa}^* & \mathbf{K}_{ab}^* \\ \mathbf{K}_{ba}^* & \mathbf{K}_{bb}^* \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_a^* \\ \mathbf{u}_b^* \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \mathbf{f}_b^* \end{Bmatrix} \tag{20}$$

trong đó $\mathbf{u}_a^*$ là chuyển vị tại những nút không nằm ở góc RVE và $\mathbf{u}_b^*$ là chuyển vị tại những nút nằm tại góc RVE.

Sử dụng phương pháp giảm bậc tự do để chuyển về các bậc tự do ở nút

$$\begin{aligned} &\mathbf{K}_{bb}^* = \mathbf{K}_{bb}^* - \mathbf{K}_{ba}^* (\mathbf{K}_{aa}^*)^{-1} \mathbf{K}_{ab}^* \\ &\mathbf{K}_{bb}^* \mathbf{u}_b^* = \mathbf{f}_b \end{aligned} \tag{21}$$

Ứng suất của cấp độ vĩ mô tính theo công thức (6) được thay vào công thức (21)

$$\boldsymbol{\sigma}_M = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_P^T \mathbf{f}_b^* = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_P^T \mathbf{K}_{bb}^* \mathbf{u}_b^* = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_P^T \mathbf{K}_{bb}^* \mathbf{T}_P \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_M \tag{22}$$

Đồng nhất công thức (22) và công thức (15) ta thu được ma trận hằng số vật liệu

$$\mathbf{D}_M = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_P^T \mathbf{K}_{bb}^* \mathbf{T}_P \tag{23}$$

Với mỗi trường hợp phân bố vật liệu ngẫu nhiên các tính chất hữu hiệu được tính đồng nhất hóa. Sau đó phương pháp Monte-Carlo được sử dụng để ước lượng giá trị trung bình thống kê của bộ tính chất hữu hiệu của kết cấu.

2.5. Vật liệu đa tinh thể

Thông số của vật liệu đơn tinh thể đơn giản nhất (tinh thể đối xứng vuông) được thể hiện theo Bảng 1 với ba thông số độc lập.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \tag{24}$$

Ma trận vật liệu hữu hiệu của mỗi tinh thể với hướng ngẫu nhiên α

$$\mathbf{D}_\alpha = \mathbf{T}_\alpha^T \mathbf{D} \mathbf{T}_\alpha \tag{25}$$

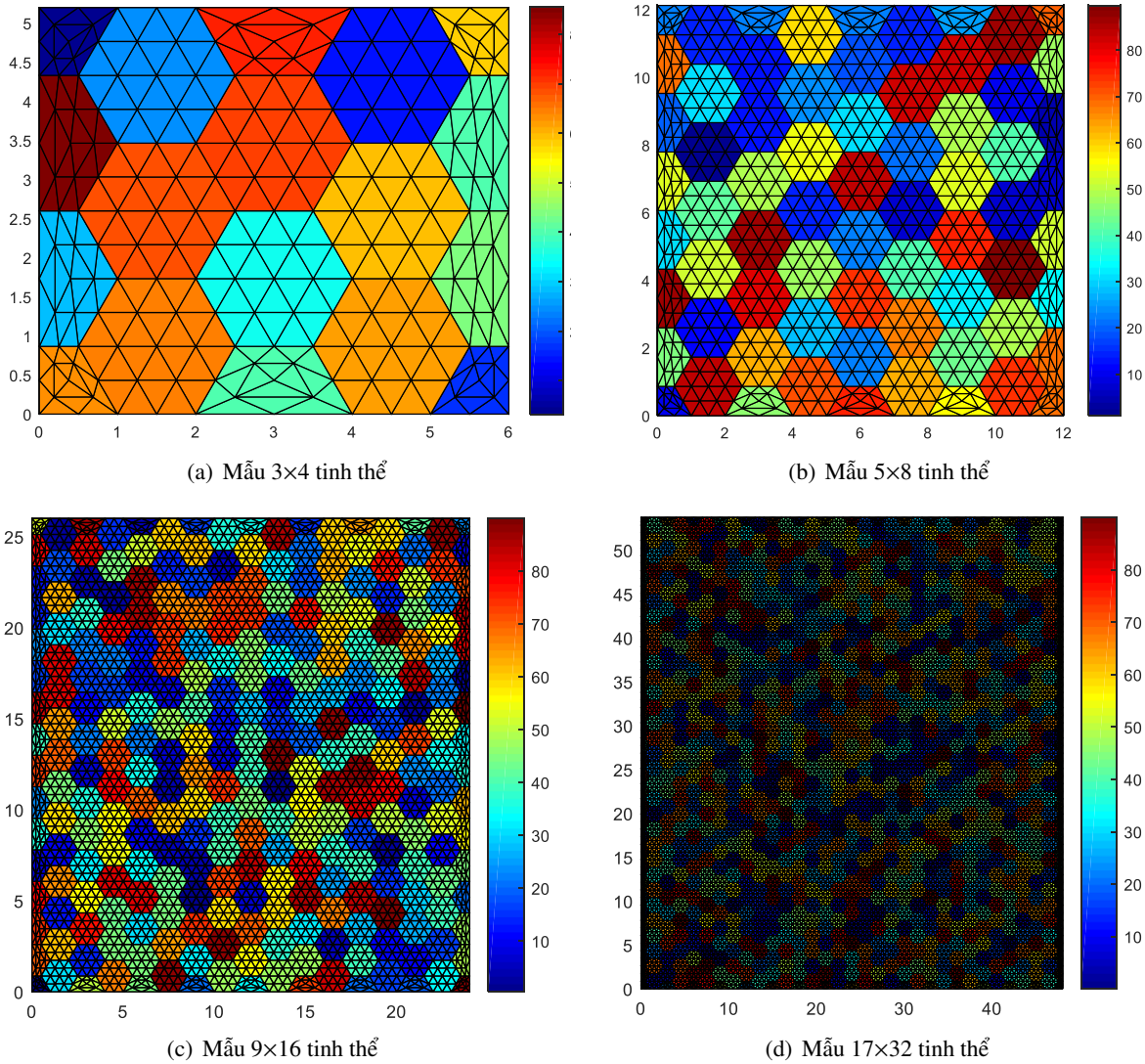
trong đó $\mathbf{T}_\alpha$ là ma trận xoay trục theo góc α.

Bảng 1. Mô đun đàn hồi hữu hiệu của đơn tinh thể

Vật liệu	$D_{11} = D_{22}$	D_{33}	D_{12}
Al	108.0	28.3	62.0

3. Ví dụ số

Xem xét vật liệu đa tinh thể lục giác với sự phân bố ngẫu nhiên hướng vật liệu $[0°; 90°]$ được thể hiện theo Hình 3. Kích thước của phần tử đại diện tăng dần với các lục giác đều có bán kính ngoại tiếp bằng 1. Mỗi tinh thể lục giác được chia thành 24 phần tử tam giác T3.



(a) Mẫu 3×4 tinh thể

(b) Mẫu 5×8 tinh thể

(c) Mẫu 9×16 tinh thể

(d) Mẫu 17×32 tinh thể

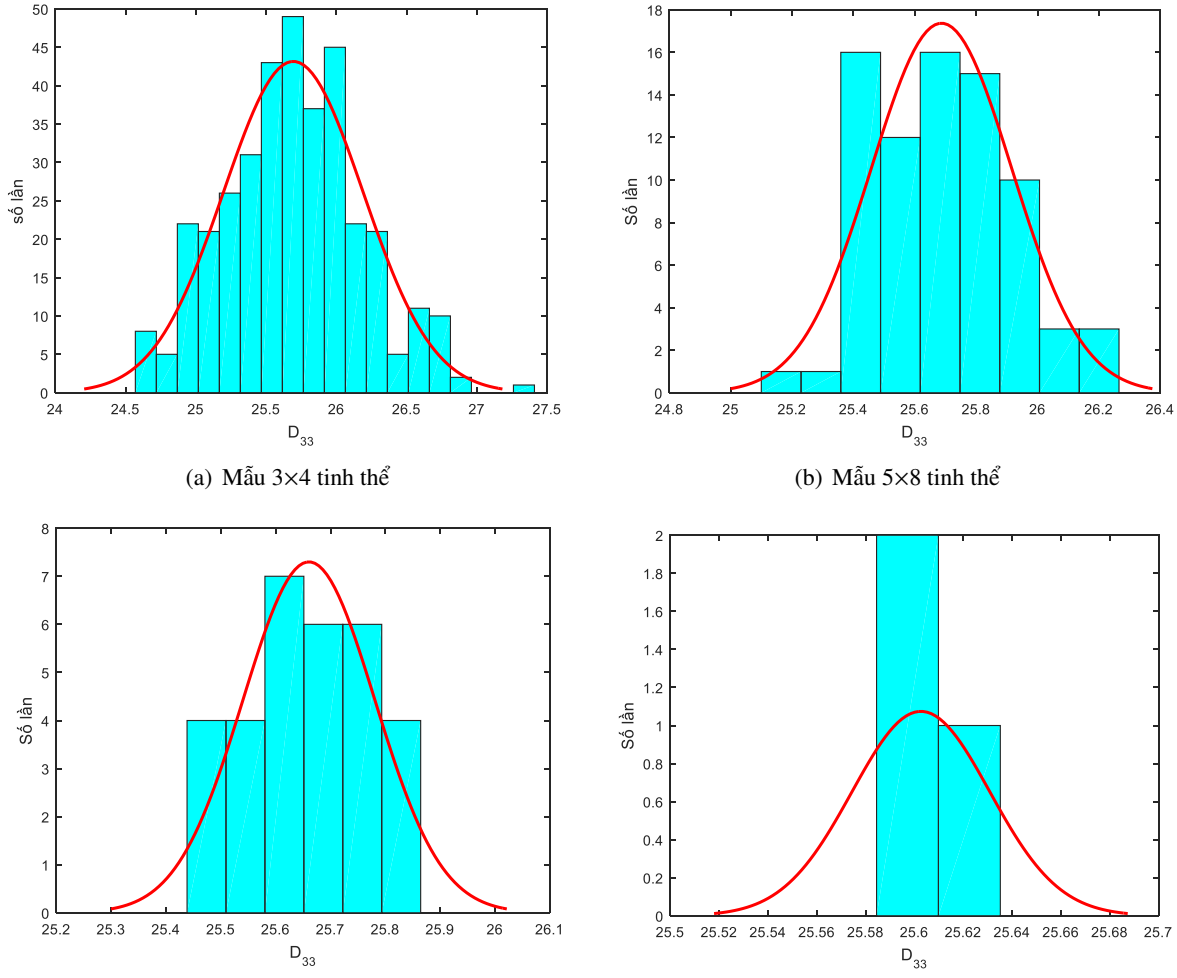
Hình 3. Phân bố ngẫu nhiên hướng vật liệu đa tinh thể $[0°; 90°]$

Hình 3(a) với 368 phần tử T3 và 406 bậc tự do trong bài toán 3×4 tinh thể, Hình 3(b) với 1504

phần tử T3 và 1574 bậc tự do trong bài toán 5×8 tinh thể, Hình 3(c) với 6080 phần tử T3 và 6214 bậc tự do trong bài toán 9×16 tinh thể và Hình 3(d) với 24448 phần tử T3 và 24710 bậc tự do trong bài toán 17×32 tinh thể.

Cận Voigt và Ruess của mô đun đàn hồi khối và mô đun đàn hồi trượt của đa tinh thể hình vuông được xác định như sau

$$\begin{aligned} K_V &= K_R = \frac{D_{11} + D_{12}}{2} \\ G_V &= \frac{D_{11} - D_{12} + 2 \times D_{33}}{4} \\ G_R &= \frac{2 \times (D_{11} - D_{12}) \times D_{33}}{(D_{11} - D_{12}) + 2 \times D_{33}} \end{aligned} \tag{26}$$



(a) Mẫu 3×4 tinh thể

(b) Mẫu 5×8 tinh thể

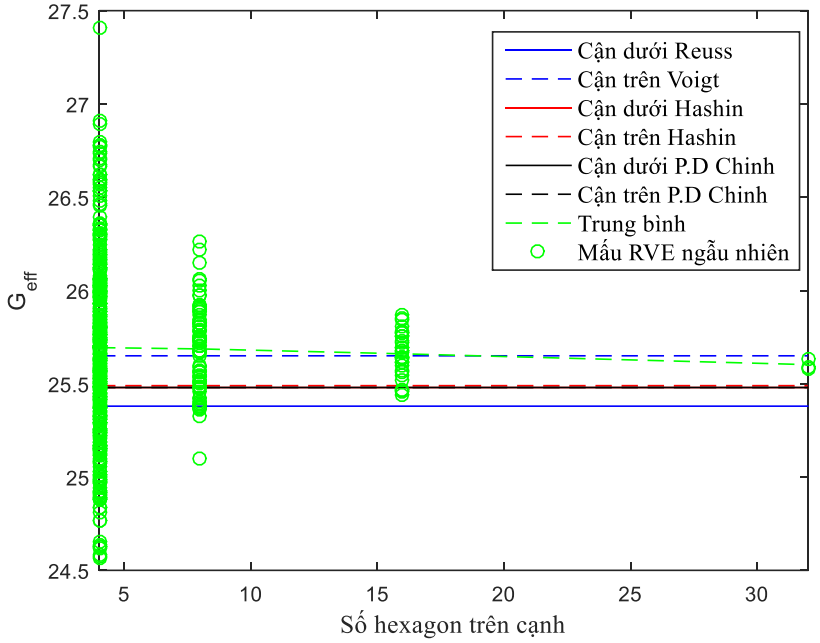
(c) Mẫu 9×16 tinh thể

(d) Mẫu 17×32 tinh thể

Hình 4. Phân bố của mô đun đàn hồi trượt hữu hiệu D_{33} của đa tinh thể dị hướng nhôm

Biểu đồ phân bố mô đun đàn hồi chịu kéo của các mẫu thử được thể hiện trong Hình 4. Đường cong phân phối chuẩn được ước lượng với độ tin cậy 95% và sai số chuẩn nhỏ hơn 0,02. Qua đó, khi tỉ lệ giữa mỗi tinh thể và kích thước của RVE giảm dần thì biên độ dao động của các giá trị ngẫu nhiên

cũng giảm dần. Điều này thể hiện sự giảm yếu tố dị hướng của các tinh thể và mô đun đàn hồi hữu hiệu trung bình thay đổi không đáng kể khi kích thước mẫu RVE đủ lớn.



Hình 5. Ảnh hưởng kích thước RVE đến mô đun đàn hồi trượt của đa tinh thể nhôm

Biên độ dao động của các mô đun đàn hồi hữu hiệu của các mẫu thử ngẫu nhiên khá lớn với trường hợp 3×4 mẫu tinh thể và giảm dần đến 17×32 mẫu tinh thể như Hình 5. Giá trị trung bình theo thống kê của các trường hợp khá tương đồng với các kết quả giải tích [1–4]. Qua đó, các đại lượng đặc trưng trung bình theo thống kê được thể hiện ở Bảng 2. Mô đun đàn hồi khối hữu hiệu trong các trường hợp đều bằng với $K_0 = K_V = K_G = 85$ GPa. Mô đun đàn hồi trượt hữu hiệu trung bình giảm dần nhưng vẫn chưa vào khoảng của cận của [1, 2]. Điều này có thể giải thích bằng hiện tượng "size effect" (ảnh hưởng tỷ lệ) hay tỉ lệ giữa kích thước của phần tử đại diện và bán kính của đơn tinh thể. Trường hợp tỉ lệ này lớn, kết cấu tuy dị hướng nhưng nhanh chóng hội tụ. Ngược lại, trường hợp tỉ lệ này nhỏ, sự bất đẳng hướng của vật liệu càng thể hiện rõ và phải thực hiện nhiều mẫu mới có thể hội tụ. Các thông số vật liệu sẽ có biên dao động lớn và nằm ngoài vùng dự đoán của các phương pháp giải tích. Khi tiếp cận theo hướng tính toán số, các thông số vật liệu sẽ xác định theo một phân bố hướng ngẫu nhiên cụ thể và được thống kê lại. Việc này sẽ dẫn đến tiết kiệm khi thực hiện các thí nghiệm ở cấp độ vi mô để xác định các thông số đặc trưng hữu hiệu của vật liệu.

Bảng 2. Mô đun đàn hồi hữu hiệu của đa tinh thể dị hướng nhôm

Vật liệu	D_{11}^{eff}	D_{12}^{eff}	G_{eff}	K_{eff}	G_R^L	G_{hs}^L	G_{hs}^U	G_V^U
Al (3×4)	110,606	59,394	25,694	85,00	25,38	25,48	25,49	25,63
Al (5×8)	110,613	59,387	25,687	85,00				
Al (9×16)	110,639	59,361	25,661	85,00				
Al (17×32)	110,697	59,303	25,603	85,00				

Các thông số đàn hồi hữu hiệu như mô đun kháng trượt hữu hiệu G_{eff} có giá trị nhỏ hơn so với đơn tinh thể. Việc phân bố ngẫu nhiên hướng của các tinh thể làm giảm yếu khả năng chịu lực của vật liệu. Bên cạnh đó, những trường hợp mà các hằng số vật liệu nằm ngoài các cận của nghiên cứu theo phương pháp nguyên lý biến phân. Điều này giúp xác định ngưỡng khi tỉ lệ giữa đơn tinh thể và kích thước của phần tử đại diện mà vật liệu dị hướng có thể xem gần như là đẳng hướng. Vì các thay đổi hướng của đơn tinh thể không còn ảnh hưởng lớn đến các đặc trưng vật liệu hữu hiệu của phần tử đại diện. Ngoài ra, khi xem xét về mô đun đàn hồi khối hữu hiệu K_{eff} thì hầu như không thay đổi đối với vật liệu tinh thể đối xứng vuông như nhôm.

4. Kết luận

Kỹ thuật đồng nhất hóa đã được áp dụng nhằm xác định được các thông số đặc trưng hữu hiệu của vật liệu có cấu trúc đa tinh thể dị hướng. Kích thước RVE tăng dần ảnh hưởng đến các thông số đặc trưng của vật liệu đa tinh thể dị hướng. Kết quả trung bình thống kê của đại lượng đặc trưng vật liệu tương đồng với các kết quả giải tích. Tuy nhiên biên dao động của các hằng số vật liệu hữu hiệu với trường hợp kích thước RVE nhỏ thì nằm ngoài ước lượng cận bằng hướng tiếp cận giải tích. Ngược lại, khi kích thước RVE đủ lớn, kết quả hội tụ dần và tính dị hướng cũng giảm dần. Qua đó, chúng ta có thể ước lượng chính xác hơn các đặc trưng hữu hiệu của vật liệu đa tinh thể dị hướng ứng với kích thước của mẫu vật liệu vi mô.

Lời cảm ơn

Tác giả chân thành cảm ơn sự hỗ trợ tài chính của quỹ NCKH của trường Đại học Quốc tế - Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh cho đề tài "Xác định đặc trưng đàn hồi hữu hiệu cho vật liệu đa tinh thể dị hướng bằng kỹ thuật đồng nhất hoá"

Tài liệu tham khảo

[1] Voigt, W. (1889). Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Annalen Der Physik*, 274(12):573–587.

[2] Reuss, A. (1929). Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9(1):49–58.

[3] Hill, R. (1952). The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(5):349.

[4] Hashin, Z. S. H. T. R., Shtrikman, S. (1962). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(4):343–352.

[5] Chinh, P. D. (1999). Bounds for the effective elastic properties of completely random planar polycrystals. *Journal of Elasticity*, 54(3):229–251.

[6] Chinh, P. D. (2002). Bounds on the elastic moduli of completely random two-dimensional polycrystals. *Meccanica*, 37(6):503–514.

[7] Michel, J.-C., Moulinec, H., Suquet, P. (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1-4):109–143.

[8] Ghosh, S., Mukhopadhyay, S. N. (1991). A two-dimensional automatic mesh generator for finite element analysis for random composites. *Computers & Structures*, 41(2):245–256.

[9] Smit, R. J. M., Brekelmans, W. A. M., Meijer, H. E. H. (1998). Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155(1-2):181–192.

[10] Feyel, F. (2003). A multilevel finite element method (FE^2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in applied Mechanics and engineering*, 192 (28-30):3233–3244.

[11] Feyel, F., Chaboche, J.-L. (2000). FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183 (3-4):309–330.

[12] Terada, K., Kikuchi, N. (2001). A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(40-41):5427–5464.

[13] Miehe, C., Schotte, J., Lambrecht, M. (2002). Homogenization of inelastic solid materials at finite strains based on incremental minimization principles. Application to the texture analysis of polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(10):2123–2167.

[14] Coenen, E. W. C., Kouznetsova, V. G., Geers, M. G. D. (2010). Computational homogenization for heterogeneous thin sheets. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(8-9):1180–1205.

[15] Kouznetsova, V., Brekelmans, W. A. M., Baaijens, F. P. T. (2001). An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Computational Mechanics*, 27(1):37–48.

[16] Budiansky, B. (1965). On the elastic moduli of some heterogeneous materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4):223–227.

[17] Hershey, A. V. (1954). The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *Journal of Applied Mechanics-Transactions of the ASME*, 21(3):236–240.

[18] Bình, T. A. (2017). Sử dụng phương pháp XFEM/Level-set để khảo sát ảnh hưởng của kích thước, hình dạng cốt liệu tới hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu không đồng nhất. *Tạp Chí Khoa Học Công Nghệ Xây Dựng (KHCNXD) - ĐHXD*, 11(1):19–24.

[19] Molina, A. J. C., De Souza Neto, E. A., Peric, D. (2005). Homogenized tangent moduli for heterogenous materials. *Proceedings of the 13th UK National Conference of the Association of Computational Mechanics in Engineering*, Citeseer, 17–20.