

KỸ THUẬT ĐỒNG NHẤT HÓA CHO VẬT LIỆU ĐA TINH THỂ DỊ HƯỚNG SỬ DỤNG PHẦN TỬ BIÊN TỈ LỆ

Nguyễn Hoàng Phương^{a,*}, Lê Văn Cảnh^a, Hồ Lê Huy Phúc^a

^aBộ môn kỹ thuật xây dựng, Đại học Quốc Tế - Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh,
Khu phố 6, quận Thủ Đức, TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam

Nhận ngày 14/10/2020, Sửa xong 03/11/2020, Chấp nhận đăng 12/11/2020

Tóm tắt

Bài báo trình bày phương pháp đồng nhất hóa cho vật liệu đa tinh thể dị hướng bằng phần tử biên tỉ lệ. Phần tử đại diện (Representative Volume Element- RVE) được rời rạc hóa thành các miền đa giác với số cạnh bất kỳ. Phần tử biên tỉ lệ (Scale Boundary Element Method-SBEM) được sử dụng để xấp xỉ trường chuyển vị của bài toán vi mô. Biến dạng tại điểm vật liệu của cấp độ vi mô được chuyển thành điều kiện biên trên phần tử đại diện. Các hằng số đàn hồi hữu hiệu của vật liệu đa tinh thể được xác định thông qua kỹ thuật đồng nhất hóa phần tử đại diện RVE. Ví dụ số được thực hiện cho mẫu vật liệu đa tinh thể với hướng góc α thay đổi. Kỹ thuật làm mịn lưới trên biên phần tử được áp dụng nhằm đánh giá độ hội tụ của phương pháp. Kết quả được so sánh với phương pháp phần tử hữu hạn thông thường FEM và nghiệm cận được cung cấp từ các nghiên cứu giải tích.

Từ khoá: phương pháp đa tỉ lệ; kỹ thuật đồng nhất hóa; vật liệu đa tinh thể; phần tử biên tỉ lệ.

HOMOGENIZATION TECHNIQUE FOR RANDOM ORIENTATED POLYCRYSTAL MATERIALS USING SCALED BOUNDARY ELEMENT

Abstract

This paper presents a scaled boundary element (SBEM) for computational homogenization of random polycrystal materials. A Representative Volume Element RVE is discretized into the domains of polygons with arbitrary number of edges. The Scaled Boundary Element Method (SBEM) is used to approximate the displacement field of representative volume element. Strains at a material point of macro problem are transferred as the boundary condition for micro problem. The effective elastic constants for polycrystal materials can be determined by the homogenization method overall the representative volume element RVE. The refining technique is applied for edge in order to study the convergence of presented method. The numerical examples are implemented for polycrystal materials with the random angle α . The obtained results are compared with the analytical and numerical solutions based on FEM.

Keywords: multiscale methods; homogenization techniques; crystal materials; scaled boundary element.

© 2021 Trường Đại học Xây dựng (NUCE)

1. Giới thiệu

Vật liệu đa tinh thể thường được cấu tạo bởi các mảng đơn tinh thể với góc hướng thay đổi ngẫu nhiên. Điều này có thể dẫn đến việc các thông số đàn hồi hữu hiệu cho vật liệu đa tinh thể có thể dao động trong một khoảng. Qua đó, việc dự đoán các ứng xử đàn hồi của vật liệu bằng phương pháp thí nghiệm có thể chưa bao quát hết khả năng của vật liệu. Một hướng tiếp cận bằng giải tích được xây dựng trên nguyên lý biến phân là phương pháp cận, như nghiên cứu cận trên của Voigt [1], nghiên cứu

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

cận dưới của Reuss [2] dựa trên nguyên lý biến phân bậc nhất; cận trên và cận dưới với nguyên lý biến phân bậc hai của Hashin và Shtrikman [3]. Các nghiên cứu được phát triển cho vật liệu đa tinh thể dị hướng được thực hiện bởi Berryman [4], Chinh và cs. [5–7], Kube và Arguelles [8]. Các nguyên lý biến phân này giúp ước lượng khoảng dao động của các hằng số đàn hồi hữu hiệu dựa theo thể tích và đặc trưng của các pha vật liệu khác nhau trong hỗn hợp. Tuy nhiên, sự phân bố vị trí và hình dạng của các pha vật liệu này chưa được kể đến trong hướng tiếp cận này. Một hướng tiếp cận khác có thể giải quyết được vấn đề này bằng cách xây dựng một phần tử đại diện-RVE và thực hiện kỹ thuật đồng nhất hóa nhằm xác định được các thông số hữu hiệu cần thiết. Hướng tiếp cận này ngày càng được chú trọng trong các tính toán cơ học vật liệu vi mô vì đặc tính đảm bảo được sự mô tả một cách chính xác hơn về sự phân bố các pha vật liệu.

Phần tử đại diện RVE có thể được rời rạc hóa và đồng nhất hóa bằng phương pháp phần tử hữu hạn [9–14]. Một tính chất của phần tử hữu hạn thông thường là miền thực hiện tích phân được giới hạn trong một phần tử có hình dạng tam giác FEM-T3 hay tứ giác FEM-Q4. Một phương pháp khác có thể đáp ứng tốt hơn với miền đa giác có số cạnh bất kỳ là phương pháp phần tử biên Boundary Element Method-BEM được xây dựng cho bài toán động học bởi Beskos [15]. Ma trận độ cứng trong bài toán phân tích tĩnh được xây dựng theo hướng tiếp cận động học và hàm bán giải tích trong phương pháp biên tỉ lệ Scaled Boundary Element Method-SBEM được đề xuất bởi Song và Wolf [16]. Sự hiệu quả của phương pháp phần tử biên tỉ lệ này được thể hiện qua các nghiên cứu về việc xây dựng đạo hàm cho phần tử SBEM dựa trên kỹ thuật trọng số dư [17] và trong bài toán phân tích quá trình phát triển của vết nứt [18].

Trong nghiên cứu này, phương pháp phần tử biên tỉ lệ SBEM được sử dụng với kỹ thuật đồng nhất hóa trong bài toán xác định các thông số đàn hồi hữu hiệu cho vật liệu đa tinh thể dị hướng. Trường chuyển vị tổng của bài toán trên phần tử đại diện RVE được sử dụng để rời rạc hóa thành các phần tử biên tỉ lệ SBEM. Kỹ thuật đồng nhất hóa được thực hiện nhằm đưa ra các thông số đàn hồi hữu hiệu bằng cách lấy trung bình thể tích phần tử đại diện RVE.

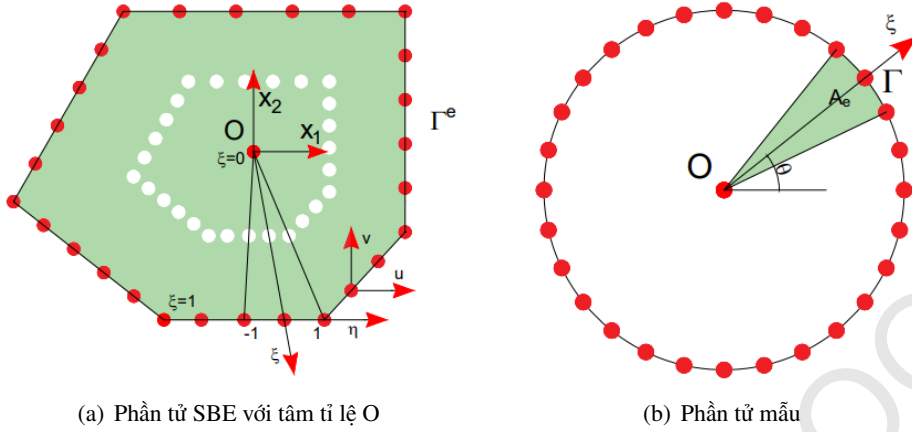
2. Cơ sở lý thuyết

2.1. Phần tử biên tỉ lệ

Khái niệm về phương pháp phần tử biên tỉ lệ được trình bày một cách tóm lược. Phần tử biên tỉ lệ [1], Scaled Boundary Element Method-SBEM, được thực hiện thông qua rời rạc hóa bài toán thành miền các đa giác với số cạnh bất kỳ. Dạng hình học của đa giác này phải đảm bảo yêu cầu như sau các đường thẳng từ tâm tỉ lệ của đa giác đến điểm đầu và cuối của từng cạnh đa giác sẽ không cắt qua bất kì cạnh đa giác còn lại. Các nghiên cứu của Song và cs. [16–18] về các kỹ thuật lấy đạo hàm cho phần tử biên tỉ lệ sử dụng kỹ thuật trọng số dư hay nghiên cứu của Deeks và Wolf [19] về hướng tiếp cận công ảo.

Tâm tỉ lệ O được chọn sao cho có thể thấy được tất cả các cạnh của đa giác và thông thường là trọng tâm của đa giác như Hình 1. Trong phương pháp này, chỉ có biên của đa giác được rời rạc hóa. Chuyển vị nút trên biên được kí hiệu $\mathbf{u}$ và lực trên biên được kí hiệu $\mathbf{F}$. Trong bài toán tầm phẳng hai chiều, biên Γ của miền diện tích A_e được rời rạc hóa thành nhiều phần tử đường thẳng.

Trên mỗi cạnh của đa giác, hệ tọa độ địa phương (ξ, η) được thể hiện trong Hình 1(a). ξ là tọa độ bán kính, bằng 0 tại tâm tỉ lệ và bằng 1 tại cạnh đa giác. η là tọa độ địa phương được xác định theo phần tử hữu hạn một chiều được rời rạc hóa dọc theo biên của phần tử SBEM (η thay đổi từ -1 đến 1). Biên của một phần tử SBEM được thể hiện trong Hình 1(b) được chuyển về phần tử mẫu với một vòng tròn được xác định bởi $\xi = 1$ và $\eta \in [-1; 1]$.



Hình 1. Rời rạc biên của miền đa giác thành các điểm và tâm tỉ lệ O của phần tử

Tọa độ Descartes $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ của các nút trong phần tử được xác định thông qua tọa độ của các nút trên biên $(\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b)$ và tọa độ của tâm tỉ lệ O $(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)$ thông qua công thức

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= x_0 + \xi \times [\mathbf{N}(\eta)] \{\mathbf{x}_b\} \\ \mathbf{y} &= y_0 + \xi \times [\mathbf{N}(\eta)] \{\mathbf{y}_b\} \end{aligned} \quad (1)$$

trong đó $\mathbf{N}(\eta)$ là ma trận hàm dạng. Trong nghiên cứu này, hàm dạng tuyến tính được sử dụng trong bài toán phẳng hai chiều. Vì vậy, ma trận $\mathbf{N}(\eta)$ có dạng

$$\mathbf{N}(\eta) = \begin{bmatrix} \mathbf{N}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{N}_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{N}_2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

trong đó $\mathbf{N}_i$ là hàm dạng tuyến tính của phần tử hữu hạn.

Trường chuyển vị $\mathbf{u}(\xi, \eta)$ được tách biến theo công thức

$$\mathbf{u}(\xi, \eta) = \mathbf{N}(\eta) \mathbf{u}_h(\xi) \quad (3)$$

trong đó $\mathbf{u}_h(\xi)$ là hàm chuyển vị giải tích thu được từ việc giải điều kiện cân bằng trên 1 phần tử SBEM. Điều kiện cân bằng này có thể được xây dựng trên nguyên lý công ảo [19] hay phương pháp trọng số dư [16–18].

Kết quả thu được phương trình cân bằng phần tử SBEM với trường chuyển vị

$$\mathbf{E}_0 \xi^2 \mathbf{u}_h(\xi)_{,\xi\xi} + (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1^T - \mathbf{E}_1) \xi \mathbf{u}_h(\xi)_{,\xi} - \mathbf{E}_2 \mathbf{u}_h(\xi) = 0 \quad (4)$$

trong đó $\mathbf{u}_h(\xi)_{,\xi\xi}$ và $\mathbf{u}_h(\xi)_{,\xi}$ là đạo hàm bậc hai và bậc nhất của hàm $\mathbf{u}_h(\xi)$.

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

$$\mathbf{D}_0 = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \quad (5)$$

Trong quá trình gia công chế tạo, các mảnh tinh thể được hình thành và phát triển trong các vật liệu. Khi đó, mỗi đơn tinh thể sẽ được sắp xếp lại một hướng ngẫu nhiên α so với đơn tinh thể ban đầu. Ma trận vật liệu hữu hiệu của mỗi tinh thể với hướng ngẫu nhiên α

$$\mathbf{D}_\alpha = \mathbf{T}_\alpha^T \mathbf{D}_0 \mathbf{T}_\alpha \quad (6)$$

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

Các ma trận hữu hiệu $\mathbf{E}_0$, $\mathbf{E}_1$ và $\mathbf{E}_2$ được xác định như sau

$$\mathbf{E}_0 = \int_{-1}^1 \mathbf{B}_1^T \mathbf{D}_\alpha \mathbf{B}_1 |\mathbf{J}| d\eta \quad (7)$$

$$\mathbf{E}_1 = \int_{-1}^1 \mathbf{B}_2^T \mathbf{D}_\alpha \mathbf{B}_1 |\mathbf{J}| d\eta \quad (8)$$

$$\mathbf{E}_2 = \int_{-1}^1 \mathbf{B}_2^T \mathbf{D}_\alpha \mathbf{B}_2 |\mathbf{J}| d\eta \quad (9)$$

trong đó ma trận $\mathbf{B}_1$ và $\mathbf{B}_2$ là hai ma trận chuyển vị biến dạng của phần tử SBEM; $\mathbf{D}_\alpha$ là ma trận hằng số vật liệu đơn tinh thể với góc nghiêng α ; $\mathbf{J}$ là ma trận Jacobian được xác định như sau

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} x_\eta & y_\eta \\ x_{\eta,\eta} & y_{\eta,\eta} \end{bmatrix} \quad (10)$$

Nghiệm của phương trình vi phân bậc hai cho phần tử SBEM thu được bằng cách chuyển thành phương trình vi phân bậc nhất với hai hệ số chưa biết

$$\xi \left\{ \begin{matrix} \mathbf{u}_h(\xi) \\ \mathbf{q}_h(\xi) \end{matrix} \right\}_{,\xi} = -\mathbf{Z} \left\{ \begin{matrix} \mathbf{u}_h(\xi) \\ \mathbf{q}_h(\xi) \end{matrix} \right\} \quad (11)$$

trong đó $\mathbf{q}_h(\xi)$ là vectơ hàm giải tích liên hệ với nội lực theo công thức

$$\mathbf{q}_h(\xi) = \mathbf{E}_0 \mathbf{u}_h(\xi)_{,\xi} + \mathbf{E}_1^T \mathbf{u}_h(\xi) \quad (12)$$

$\mathbf{Z}$ là ma trận Hamilton

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_0^{-1} \mathbf{E}_1^T & -\mathbf{E}_0^{-1} \\ -\mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_1 \mathbf{E}_0^{-1} \mathbf{E}_1^T & -\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_0^{-1} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Ma trận $\mathbf{Z}$ được chéo hóa bởi ma trận $\mathbf{V}$ theo biểu thức

$$\mathbf{ZV} = \mathbf{VS} \quad (14)$$

Ma trận đường chéo $\mathbf{S}$ được sắp xếp theo thứ tự tăng dần

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_n & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S}_p \end{bmatrix} \quad (15)$$

trong đó $\mathbf{S}_n$ và $\mathbf{S}_p$ là hai ma trận đường chéo với giá trị âm và giá trị dương dọc theo đường chéo của ma trận $\mathbf{S}$.

Ma trận chuyển $\mathbf{V}$ được phân chia thành

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_u & \bar{\mathbf{V}}_u \\ \mathbf{V}_q & \bar{\mathbf{V}}_q \end{bmatrix} \quad (16)$$

trong đó $\mathbf{V}_u$ và $\bar{\mathbf{V}}_u$ liên quan đến chuyển vị trong phần tử SBEM, trong khi đó ma trận $\mathbf{V}_q$ và $\bar{\mathbf{V}}_q$ liên quan đến lực trên phần tử SBEM. Với miền bị chặn bởi đa giác được xem xét trong nghiên cứu này, chỉ ma trận chứa các trị riêng âm $\mathbf{S}_n$ và chuyển vị tại nút $\mathbf{V}_u$ và lực nút $\mathbf{V}_q$ dẫn đến chuyển vị hữu hạn tại tâm tỉ lệ O.

Nghiệm của hàm chuyển vị giải tích $\mathbf{u}_h(\xi)$ và hàm nội lực giải tích $\mathbf{q}_h(\xi)$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_h(\xi) &= \mathbf{V}_u \xi^{-\mathbf{S}_n} \mathbf{c} \\ \mathbf{q}_h(\xi) &= \mathbf{V}_q \xi^{-\mathbf{S}_n} \mathbf{c} \end{aligned} \quad (17)$$

trong đó $\mathbf{c}$ là hằng số tích phân tùy thuộc vào điều kiện biên và có thể tính từ chuyển vị nút của mỗi đa giác như sau

$$\mathbf{c} = \mathbf{V}_u^{-1} \mathbf{u}_b \quad (18)$$

trong đó $\mathbf{u}_b$ là vec tơ chuyển vị tại các điểm nút trên biên phần tử SBEM.

Ma trận độ cứng của một phần tử SBEM $\mathbf{K}_{cell}$ được định nghĩa

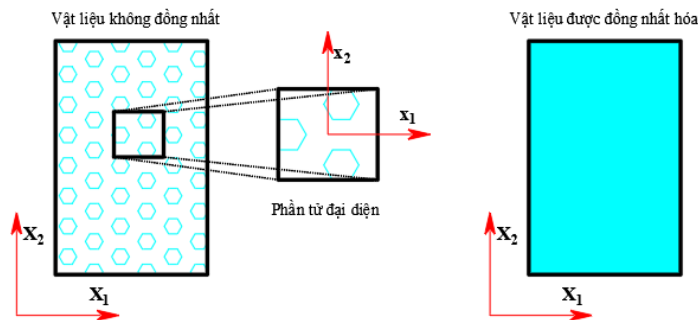
$$\mathbf{K}_{cell} = \mathbf{V}_q \mathbf{V}_u^{-1} \quad (19)$$

Phương trình tuyến tính hệ thống được tổng hợp theo bậc tự do

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (20)$$

2.2. Phần tử thể tích đại diện (RVE)

Xem xét một vật liệu không đồng nhất và liên tục diện tích $A \in \Omega^2$ được thay thế bằng một vật liệu được đồng nhất tương đương diện tích $A_M \in \Omega^2$ và tại mỗi vùng vật liệu sẽ có một kết cấu vi mô không đồng nhất đại diện $A_m \in \Omega^2$ kèm theo như Hình 2. Kích thước bài toán vi mô l_m nhỏ hơn nhiều lần với kích thước bài toán vĩ mô l_M nên khi tính toán tại cấp độ vi mô thì lực thể tích có thể được bỏ qua.



Hình 2. Phần tử thể tích đại diện-RVE

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

$$\boldsymbol{\varepsilon}_M = \frac{1}{A_m} \int_{A_m} \boldsymbol{\varepsilon}_m dA_m \quad (21)$$

Ứng suất vĩ mô $\boldsymbol{\sigma}_M$ bằng trung bình thể tích của ứng suất vi mô $\boldsymbol{\sigma}_m$

$$\boldsymbol{\sigma}_M = \frac{1}{A_m} \int_{A_m} \boldsymbol{\sigma}_m dA_m \quad (22)$$

Chuyển tích phân diện tích trong RVE về tích phân trên chu vi RVE

$$\boldsymbol{\sigma}_M = \frac{1}{A_m} \int_{A_m} \nabla (\boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{X}) dA_m = \frac{1}{A_m} \int_{\Gamma_m} \mathbf{n} \boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{X} d\Gamma_m = \frac{1}{A_m} \sum_i^{N_p} f_i X_i \quad (23)$$

trong đó f_i là lực trên nút biên i ; X_i là vectơ vị trí của nút trên biên và N_p là số nút trên biên.

2.3. Điều kiện biên tuần hoàn cho RVE

Trong bài toán vi mô, biến dạng ở cấp độ vĩ mô được chuyển thành điều kiện biên chuyển vị cho bài toán cấp độ vi mô. Nhiều quan điểm để áp đặt điều kiện biên khác nhau dẫn đến các phương pháp số khác nhau như Miehe và cs. [16]; Kouznetsova và cs. [15]. Qua các nghiên cứu trên, khi tỉ lệ giữa kích thước các pha vật liệu và kích thước của phần tử đại diện tương đối thì việc sử dụng điều kiện biên tuần hoàn cho kết quả đáp ứng tốt hơn. Khi tỉ lệ này giảm dần thì sự khác biệt khi sử dụng các điều kiện biên cũng giảm dần. Qua đó, điều kiện biên tuần hoàn đã được sử dụng trong nghiên cứu này.

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

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \quad (24)$$

Trong trường hợp sử dụng điều kiện biên tuần hoàn

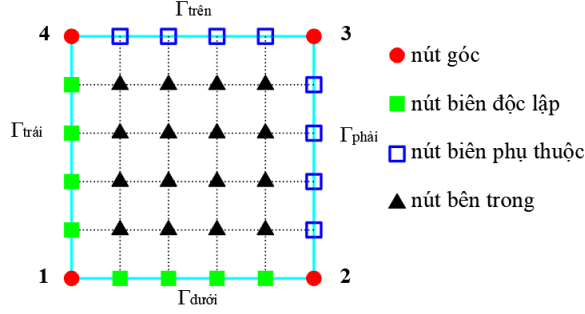
$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ tại các nút góc} \quad (25)$$

Trường chuyển vị trung bình của RVE $\bar{\mathbf{u}}$ được xác định

$$\bar{\mathbf{u}} = \boldsymbol{\varepsilon}_M \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} & \frac{1}{2} \bar{\varepsilon}_{12} \\ \frac{1}{2} \bar{\varepsilon}_{21} & \bar{\varepsilon}_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{Bmatrix} \quad (26)$$

trong đó $\mathbf{X}$ là toạ độ của các điểm trên biên của phần tử đại diện RVE; $\boldsymbol{\varepsilon}_M$ là biến dạng tại điểm vật liệu của cấp độ vĩ mô.

Điều kiện biên tuần hoàn nhằm đảm bảo hiệu chuyển vị tổng trên hai biên đối diện phải là hằng số và xác định theo biến dạng từ bài toán cấp độ vĩ mô. Trong nghiên cứu này, điều kiện biên tuần hoàn khi xấp xỉ trường chuyển vị tổng được thể hiện qua mối liên hệ giữa các cặp nút đối xứng (các



Hình 3. Phân loại các nút trên phần tử thể tích đại diện RVE

nút trên biên bên phải Γ_R và biên bên trái Γ_L ; giữa biên trên Γ_T và biên dưới Γ_B) thông qua mỗi liên hệ với chuyển vị của nút ở góc tương ứng như Hình 3.

$$\begin{aligned} u_R - u_L - u_2 + u_1 &= 0 \\ v_R - v_L - v_2 + v_1 &= 0 \\ u_T - u_B - u_4 + u_1 &= 0 \\ v_T - v_B - v_4 + v_1 &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

Mỗi liên hệ biểu thức (27) được sắp xếp lại theo các bậc tự do

$$\mathbf{Cu} = \mathbf{0} \quad (28)$$

Ma trận ràng buộc tuần hoàn $\mathbf{C}$ được phân loại theo bậc tự do độc lập $\mathbf{C}_i$ bao gồm các nút của biên trái, nút biên dưới, các nút bên trong và nút tại góc; bậc tự do phụ thuộc $\mathbf{C}_d$ bao gồm các nút bên phải và các nút bên trên.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_i & \mathbf{C}_d \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_i \\ \mathbf{u}_d \end{Bmatrix} = \mathbf{0} \quad (29)$$

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

$$\mathbf{u}_d = -\mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{C}_i \mathbf{u}_i = \mathbf{C}_{di} \mathbf{u}_i \quad (30)$$

Phương trình tuyến tính hệ thống được phân loại theo các bậc tự do độc lập $\mathbf{u}_i$ và bậc tự do phụ thuộc $\mathbf{u}_d$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii} & \mathbf{K}_{id} \\ \mathbf{K}_{di} & \mathbf{K}_{dd} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_i \\ \mathbf{u}_d \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_i \\ \mathbf{f}_d \end{Bmatrix} \quad (31)$$

Phương trình tuyến tính hệ thống được rút gọn theo các bậc tự do độc lập $\mathbf{u}_i$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^* \mathbf{u}_i &= \mathbf{f}^* \\ \mathbf{K}^* &= \mathbf{K}_{ii} + \mathbf{K}_{id} \mathbf{C}_{di} + \mathbf{C}_{di}^T \mathbf{K}_{di} + \mathbf{C}_{di}^T \mathbf{K}_{dd} \mathbf{C}_{di} \\ \mathbf{f}^* &= \mathbf{f}_i + \mathbf{C}_{di}^T \mathbf{f}_d \end{aligned} \quad (32)$$

2.4. Kỹ thuật đồng nhất hóa phần tử đại diện (RVE)

Ma trận hằng số vật liệu hữu hiệu sẽ thỏa mãn biểu thức sau

$$\sigma_M = \mathbf{D}_{eff} \epsilon_M \quad (33)$$

Chuyển vị cường bức tại mỗi nút ở góc RVE $\mathbf{u}_c^i$ được xác định như sau

$$\mathbf{u}_c^i = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & \frac{1}{2}X_2 \\ 0 & X_2 & \frac{1}{2}X_1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\epsilon}_{11} \\ \bar{\epsilon}_{22} \\ \bar{\epsilon}_{12} \end{Bmatrix} = \mathbf{T}_p^i \epsilon_M \quad (34)$$

Chuyển vị cường bức tại nút góc của RVE $\mathbf{u}_c$ được xác định theo biến dạng vĩ mô

$$\mathbf{u}_c = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_p^1 & \mathbf{T}_p^2 & \mathbf{T}_p^3 & \mathbf{T}_p^4 \end{bmatrix}^T \epsilon_M = \mathbf{T}_p \epsilon_M \quad (35)$$

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

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{ac} \\ \mathbf{K}_{ca} & \mathbf{K}_{cc} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_a \\ \mathbf{u}_c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{f}_c \end{Bmatrix} \quad (36)$$

Trong các bậc tự do độc lập $\mathbf{u}_i$, $\mathbf{u}_a$ là chuyển vị tại những nút không nằm ở góc RVE; $\mathbf{u}_c$ 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 góc $\mathbf{u}_c$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{cc}^* &= \mathbf{K}_{cc} - \mathbf{K}_{ca} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ac} \\ \mathbf{K}_{cc}^* \mathbf{u}_c &= \mathbf{f}_c \end{aligned} \quad (37)$$

Thế công thức (37) và công thức (35) vào ứng suất của cấp độ vĩ mô σ_M ta thu được

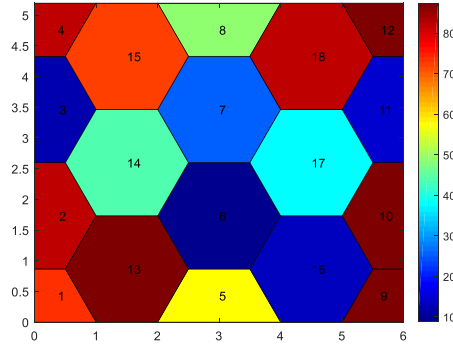
$$\sigma_M = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_p^T \mathbf{f}_c = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_p^T \mathbf{K}_{cc}^* \mathbf{u}_c = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_p^T \mathbf{K}_{cc}^* \mathbf{T}_p \epsilon_M \quad (38)$$

Đồng nhất công thức (38) và công thức (33) ta thu được ma trận hằng số vật liệu hữu hiệu $\mathbf{D}_{eff}$ như sau

$$\mathbf{D}_{eff} = \frac{1}{A_m} \mathbf{T}_p^T \mathbf{K}_{cc}^* \mathbf{T}_p \quad (39)$$

3. Ví dụ số

Trong ví dụ này, một phần tử thể tích đại diện RVE hình chữ nhật với 18 đơn tinh thể như Hình 4 của mẫu đa tinh thể kim loại đồng Cu được xem xét. Bảng 1 thể hiện thông số vật liệu của đơn tinh thể đồng Cu theo Chinh và cs. [7]. Phần tử đại diện này được phân chia thành 18 đơn tinh thể hình lục giác đều với góc hướng α thay đổi như Hình 4 có bán kính đường tròn ngoại tiếp $R = 1$. Các đơn tinh thể này có tính chất đối xứng nên hướng góc ngẫu nhiên α đã được giả định với sự thay đổi từ 0° đến 90° theo Bảng 2. Các kết quả số được lập trình bằng ngôn ngữ Matlab và thực hiện trên máy tính Core i5-CPU 1,70 GHz với RAM 4G.



Hình 4. Phân tử đại diện với phân bố hướng α ngẫu nhiên cho 18 tinh thể đồng

Bảng 1. Mô đun đàn hồi hữu hiệu của đơn tinh thể kim loại đồng (GPa) [7]

Vật liệu	D_{11}	D_{12}	D_{33}
Cu	169,0	122,0	75,3

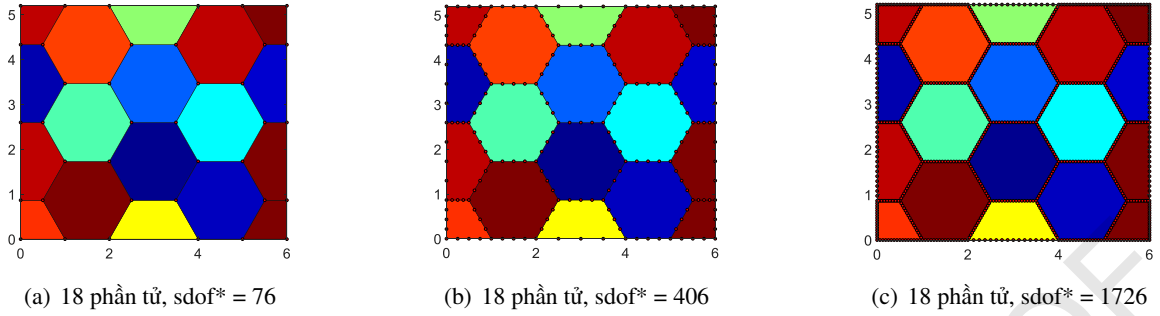
Bảng 2. Phân bố góc hướng α (°) ngẫu nhiên cho mỗi đơn tinh thể

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
góc	73	82	11	82	57	9	25	49	86	87	14	87	86	44	72	13	38	82

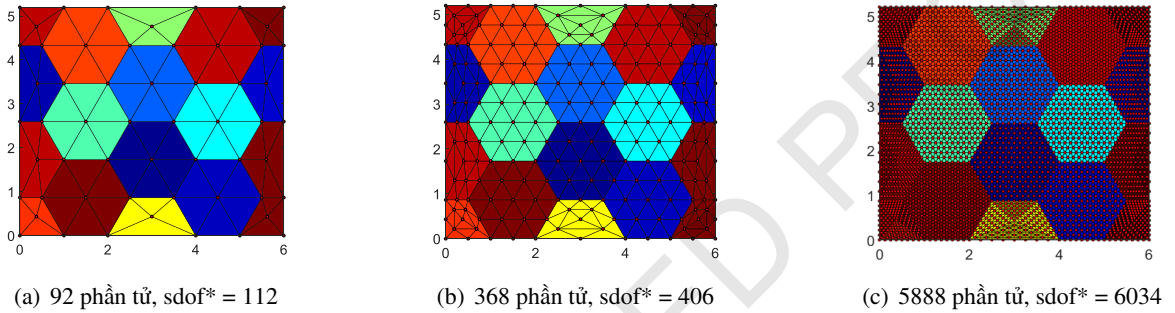
Cận Voigt và Reuss của mô đun đàn hồi khối và mô đun đàn hồi trượt của đa tinh thể đồng được xác định như sau

$$\begin{aligned}
 K_V = K_R &= \frac{D_{11} + D_{12}}{2} = 14,5 \text{ (GPa)} \\
 G_V &= \frac{D_{11} - D_{12} + 2D_{33}}{4} = 49,900 \text{ (GPa)} \\
 G_R &= \frac{2(D_{11} - D_{12})D_{33}}{(D_{11} - D_{12}) + 2D_{33}} = 35,821 \text{ (GPa)}
 \end{aligned} \tag{40}$$

Hệ lưới phần tử biên tỉ lệ SBEM với kỹ thuật làm mịn nút trên biên phần tử được thể hiện trong Hình 5. Kỹ thuật làm mịn biên thông qua việc chia đôi cạnh ở mỗi hệ lưới phần tử. Hệ lưới phần tử hữu hạn thông thường FEM-T3 với kỹ thuật làm mịn phần tử bên trong được thể hiện trong Hình 6. Qua mỗi bước làm mịn lưới FEM-T3, một phần tử tam giác sẽ được chia thành 4 hình tam giác đồng dạng với tam giác ban đầu. Kết quả ma trận vật liệu hữu hiệu của mẫu vật liệu đa tinh thể dị hướng đồng được thể hiện ở Bảng 3. Các mẫu đều có mô đun đàn hồi khối hữu hiệu $K_{eff} = K_V = K_R = 145,5$ GPa tương đồng với kết quả nghiệm giải tích Voigt và Reuss. Mô đun đàn hồi kháng trượt hữu hiệu $G_{eff} = D_{33}$ và mô đun đàn hồi kéo dọc trục D_{11} giảm dần khi chia nhỏ các điểm trên biên phần tử như Hình 7. Sai số nhỏ nhất khi xem xét mô đun đàn hồi kháng trượt hữu hiệu là 0,08% và 0,01% khi xem xét mô đun đàn hồi kéo dọc trục. Riêng thông số D_{12} có xu hướng tăng dần và hội tụ khi chia nhỏ điểm trên biên phần tử và có sai số nhỏ nhất là 0,02%. Qua đó, sự hội tụ số của kết quả khi sử dụng phần tử SBEM với kỹ thuật làm mịn trên biên phần tử được thể hiện trong Hình 7 tốt hơn khi sử dụng phần tử hữu hạn thông thường FEM-T3 với kỹ thuật làm mịn phần tử bên trong.



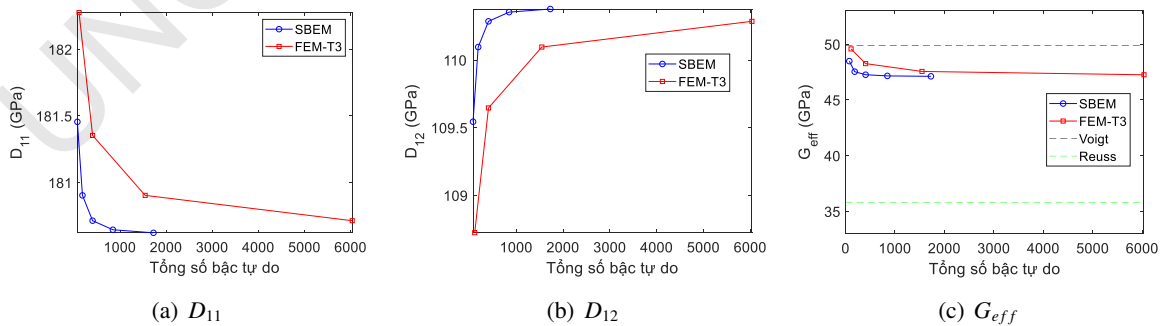
Hình 5. Hệ lưới phần tử biên tỉ lệ SBEM cho mẫu 18 tinh thể (*: Tổng số bậc tự do của mô hình)



Hình 6. Hệ lưới phần tử hữu hạn FEM-T3 cho mẫu 18 tinh thể (*: Tổng số bậc tự do của mô hình)

Bảng 3. Ma trận vật liệu hữu hiệu cho vật liệu đa tinh thể dị hướng đồng

Phương pháp	Tổng số bậc tự do	D_{11} (GPa)	Sai số (%)	D_{12} (GPa)	Sai số (%)	D_{33} (GPa)	Sai số (%)
SBEM	76	181,456	-	109,544	-	48,481	-
	186	180,904	0,31	110,096	0,50	47,534	1,99
	406	180,714	0,11	110,286	0,17	47,261	0,58
	846	180,646	0,04	110,354	0,06	47,156	0,22
	1726	180,623	0,01	110,377	0,02	47,118	0,08
FEM-T3	112	182,276	-	108,724	-	49,576	-
	406	181,354	0,51	109,646	0,84	48,257	2,73
	1546	180,904	0,25	110,096	0,41	47,556	1,47
	6034	180,714	0,11	110,286	0,17	47,256	0,63



Hình 7. Hằng số vật liệu hữu hiệu cho mẫu 18 tinh thể dị hướng đồng

Bảng 4 thể hiện thời gian tính toán khi thực hiện phương pháp SBEM và phương pháp FEM-T3. Qua đó, phương pháp SBEM với 1726 bậc tự do đạt thời gian tính toán thấp hơn khoảng 5 lần so với phương pháp FEM-T3 với 6034 bậc tự do. Trong khi đó, sai biệt giữa hai phương pháp là 0,05% đối với D_{11} ; 0,08% đối với D_{12} ; 0,29% đối với D_{33} .

Bảng 4. Thời gian tính toán khi sử dụng các phương pháp số

Phương pháp	Tổng số bậc tự do	Số phần tử	Thời gian (s)
SBEM	76	18	0,4
	186	18	0,5
	406	18	0,6
	846	18	1,8
	1726	18	9,7
FEM-T3	112	92	0,4
	406	368	0,4
	1546	1472	2,2
	6034	5888	48,5

4. Kết luận

Nghiên cứu đã trình bày hướng tiếp cận kỹ thuật đồng nhất hóa cho vật liệu đa tinh thể dị hướng với phần tử biên tỉ lệ SBEM. Phương pháp này hội tụ dần khi chia nhỏ các cạnh trên biên phần tử SBEM. Qua đó, các thông số đàn hồi hữu hiệu của mẫu đa tinh thể dị hướng được xác định. Mô đun đàn hồi khối hữu hiệu K_{eff} là hằng số trong các mẫu mô hình. Điều này tương đồng với nghiên cứu giải tích của Voigt và Reuss. Mô đun đàn hồi kháng trượt hữu hiệu G_{eff} giảm dần và hội tụ khi các kỹ thuật làm mịn lưới được áp dụng. Kết quả khi sử dụng phần tử biên tỉ lệ với kỹ thuật làm mịn trên biên phần tử hội tụ nhanh hơn khi so sánh với sử dụng phần tử hữu hạn.

Lời cảm ơn

Tác giả xin chân thành cảm ơn sự hỗ trợ tài chính của Trường Đại học Quốc tế ĐHQG-HCM cho đề tài có mã số T2019-02-CE.

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] Hashin, Z., 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.
- [4] Berryman, J. G. (2005). Bounds and self-consistent estimates for elastic constants of random polycrystals with hexagonal, trigonal, and tetragonal symmetries. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 (10):2141–2173.

- [5] Pham, D. C. (2006). [Revised bounds on the elastic moduli of two-dimensional random polycrystals.](#) *Journal of Elasticity*, 85(1):1–20.
- [6] Chinh, P. D. (2012). [Bounds on the elastic moduli of statistically isotropic multicomponent materials and random cell polycrystals.](#) *International Journal of Solids and Structures*, 49(18):2646–2659.
- [7] Pham, D. C., Le, C. H., Vuong, T. M. H. (2016). [Estimates for the elastic moduli of d-dimensional random cell polycrystals.](#) *Acta Mechanica*, 227(10):2881–2897.
- [8] Kube, C. M., Arguelles, A. P. (2016). [Bounds and self-consistent estimates of the elastic constants of polycrystals.](#) *Computers & Geosciences*, 95:118–122.
- [9] Terada, K., Hori, M., Kyoya, T., Kikuchi, N. (2000). [Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches.](#) *International Journal of Solids and Structures*, 37(16):2285–2311.
- [10] 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.
- [11] Coenen, E. W. C., Kouznetsova, V. G., Bosco, E., Geers, M. G. D. (2012). [A multi-scale approach to bridge microscale damage and macroscale failure: a nested computational homogenization-localization framework.](#) *International Journal of Fracture*, 178(1-2):157–178.
- [12] 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.
- [13] Teferra, K., Graham-Brady, L. (2018). [A random field-based method to estimate convergence of apparent properties in computational homogenization.](#) *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 330:253–270.
- [14] Phường, N. H., Cảnh, L. V., Kiên, N. T. (2019). [Xác định đặc trưng hữu hiệu của vật liệu đa tinh thể dị hướng bằng phương pháp đồng nhất hóa.](#) *Tạp chí Khoa học Công nghệ Xây dựng (KHCN XD)-ĐHXD*, 13 (4V):129–138.
- [15] Beskos, D. E. (1987). [Boundary element methods in dynamic analysis.](#)
- [16] Song, C., Wolf, J. P. (1997). [The scaled boundary finite-element method—alias consistent infinitesimal finite-element cell method—for elastodynamics.](#) *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 147(3-4):329–355.
- [17] Wolf, J. P., Song, C. (2000). [The scaled boundary finite-element method—a primer: derivations.](#) *Computers & Structures*, 78(1-3):191–210.
- [18] Ooi, E. T., Song, C., Tin-Loi, F., Yang, Z. (2012). [Polygon scaled boundary finite elements for crack propagation modelling.](#) *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 91(3):319–342.
- [19] Deeks, A. J., Wolf, J. P. (2002). [A virtual work derivation of the scaled boundary finite-element method for elastostatics.](#) *Computational Mechanics*, 28(6):489–504.