

Phương pháp trường pha phân tích hư hỏng kết cấu chứa hai pha vật liệu được đồng nhất hóa theo ba điều kiện biên

Phase field method for damage analysis in structure containing two-phase homogenized by three boundary conditions

Vũ Bá Thành, Nguyễn Xuân Lam*

Trường Đại học Giao thông vận tải

*Tác giả liên hệ: nxlam@utc.edu.vn

Tóm tắt:

Một cấu trúc chứa hai pha vật liệu với pha nền và pha cốt (lỗ rỗng) được đồng nhất hóa theo ba điều kiện biên: (i) Điều kiện biên đồng nhất động học (KUBC); (ii) điều kiện biên tuần hoàn (PEBC) và (iii) điều kiện biên đồng nhất tĩnh học (SUBC) để xác định các đặc trưng vật liệu tương đương sau khi đồng nhất hóa. Sau đó, phương pháp trường pha với điều kiện trục giao ten-xơ biến dạng được thiết lập cho cấu trúc tương đương sau khi đồng nhất hóa để mô phỏng hư hỏng cấu trúc này. Các kết quả mô phỏng số đạt được về đường nứt, đường cong ứng xử vật liệu và năng lượng gây nứt (công cơ học) của cấu trúc tương đương sau khi đồng nhất hóa và cấu trúc không đồng nhất ban đầu được so sánh để đánh giá điều kiện biên đồng nhất hóa phù hợp cho các loại cấu trúc này. Đồng thời, các kết quả này có thể làm rõ được ảnh hưởng của ba điều kiện biên đến hư hỏng cấu trúc được đồng nhất hóa.

Từ khóa: Phương pháp trường pha; Đồng nhất hóa; Lan truyền vết nứt; Phân rã trục giao ten-xơ biến dạng.

Abstract:

A structure containing a two-phase matrix and inclusion (or pore) is homogenized using three boundary conditions: (i) kinematically uniform boundary conditions (KUBC); (ii) periodic boundary conditions (PEBC); and (iii) statically uniform boundary conditions (SUBC) to determine equivalent material characteristics after homogenization. Next, the phase field method with strain orthogonal decompositions is applied to the equivalent structures to simulate their damage. The numerical simulation results of the crack paths, material behavior curves, and total fracture resistance (mechanical work) of the equivalent structures after homogenization and the initial heterogeneous structure are obtained and compared to evaluate the most suitable homogenization boundary conditions for these types of structures. Furthermore, these results can clarify the influence of the three boundary conditions on homogenized structural failure.

Keywords: Phase field method; Homogenization; Crack propagation; Strain orthogonal decompositions.

1. Giới thiệu

Phương pháp đồng nhất hóa vật liệu [1] được tuân theo quy luật của cơ học môi trường liên tục. Tại cấp độ vĩ mô (cấp độ kết cấu), công trình được xem như là môi trường liên tục đại diện bởi phần tử thể tích đặc trưng (Representative Elementary Volume - REV).

Phần tử thể tích này phải đủ lớn để có đặc trưng cho toàn bộ tính chất vật liệu cấu thành. Trong cơ học phá hủy, sự đồng nhất ứng xử hư hỏng trong kết cấu nhiều pha gặp những khó khăn bởi các vấn đề: (i) tính ứng xử phi tuyến của kết cấu nhiều pha; (ii) khó hội tụ và ổn định ở cấp độ vĩ mô; (iii) khó xác định REV cho kết cấu. Khi đó,

các nghiên cứu chủ yếu dựa vào phương pháp số để giải quyết vấn đề này, ví dụ, khi xem xét hư hỏng của pha phân giới (Interphase) giữa hai pha vật liệu trong kết cấu, người ta sử dụng phương pháp dựa vào phần tử hữu hạn đa cấp (multilevel Finite Element-FE²) [2] đã được đề xuất trong các nghiên cứu [3], [4], trong đó một REV được định nghĩa trước để xác định một mô hình dích bám ở cấp độ vĩ mô. Nghiên cứu [5] đã lựa chọn nhiều kích thước REV cho cấu trúc hai pha vật liệu với pha cốt được bố trí ngẫu nhiên bằng việc sử dụng hai điều kiện biên đồng nhất KUBC và SUBC. Sau đó mô phỏng hư hỏng và so sánh kết quả để tìm được kích thước REV phù hợp đại diện cho toàn bộ cấu trúc. Những phương pháp trên đều tiêu tốn nhiều thời gian do phải tính toán các nhiệm vụ đồng thời và các phương pháp này rất khó để dự đoán lan truyền một hệ thống nhiều vết nứt phức tạp.

Trong thời gian gần đây, phương pháp trường pha được coi là một công cụ hiệu quả để dự đoán sự hình thành và lan truyền các vết nứt phức tạp trong nhiều loại vật liệu. Phương pháp mô phỏng số này sử dụng biến trường pha và hàm suy biến khả vi để mô tả sự suy giảm năng lượng cùng trạng thái hư hỏng trong vật thể dựa vào quá trình giải kết hợp biến trường pha và biến chuyển vị. Từ đó, một vài công trình đã được nhóm nghiên cứu sử dụng phương pháp này để mô phỏng hư hỏng trong các kết cấu và các vật liệu khác nhau, được đề cập trong [6]–[10]. Hơn nữa, phương pháp đồng nhất hóa được nhóm nghiên cứu sử dụng để phân tích ứng xử nhiệt trong kết cấu bê tông cốt thép ở trụ cầu [11], sau đó, tiến hành so sánh với dữ liệu thu được từ thực nghiệm hiện trường và cho thấy kết quả đáng tin cậy.

Trong một phân tích lý thuyết, nghiên cứu [12] đã đưa ra điều kiện phân rã trực giao của ten-xơ biến dạng để cải thiện độ chính xác của ứng xử cơ học vật liệu. Điều kiện trực giao này đã áp dụng vào phương pháp trường pha và được chứng minh rất hiệu quả ở [6], [7], [9]. Trong khi đó, nghiên cứu [5] đã dùng dạng phân

rã trực giao của [13] và không thỏa mãn điều kiện trực giao của [12].

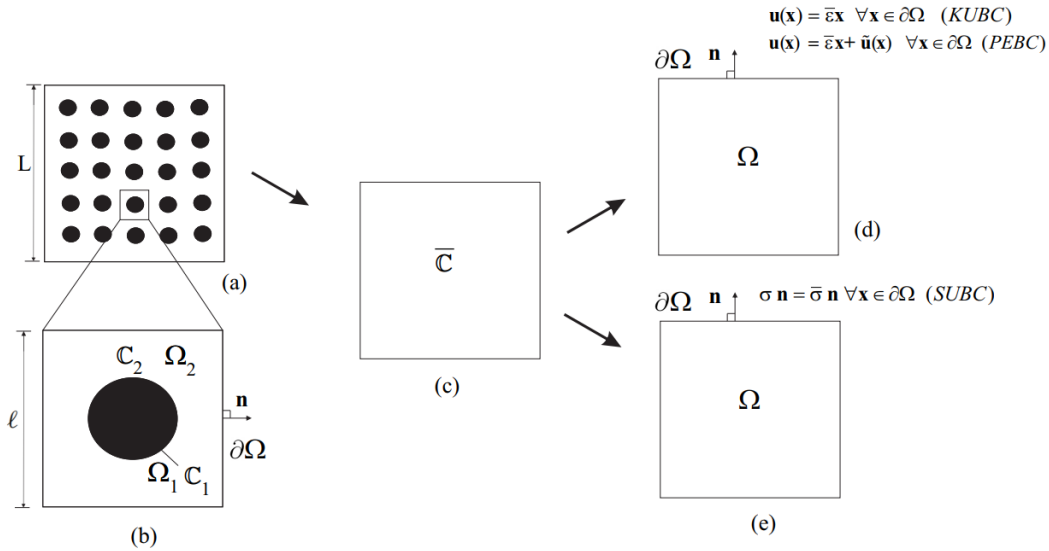
Do đó, để phân tích và đánh giá điều kiện biên đồng nhất hóa phù hợp, nghiên cứu này có một số cải tiến hơn so với [5] như sau: (i) đồng nhất hóa cấu trúc hai pha vật liệu để xác định các đặc trưng vật liệu tương đương của cấu trúc sau đồng nhất theo ba điều kiện biên khác nhau (SUBC, KUBC và PEBC); (ii) thiết lập phương pháp trường pha để mô phỏng hư hỏng cho cấu trúc tương đương sau khi đồng nhất và cấu trúc ban đầu với việc thỏa mãn điều kiện trực giao của [12]; (iii) cấu trúc được đồng nhất chứa pha nền và pha cốt hoặc pha nền và lỗ rỗng với việc khảo sát sự phân bố các hạt pha cốt (lỗ rỗng) trong khi tỷ lệ về diện tích của chúng không đổi.

Từ đó, so sánh về đường nứt, đường cong ứng xử vật liệu và năng lượng gây nứt của cấu trúc tương đương sau khi đồng nhất hóa và cấu trúc ban đầu chưa được đồng nhất hóa để đánh giá điều kiện biên đồng nhất hóa phù hợp cho các loại cấu trúc này.

2. Sơ lược về đồng nhất hóa vật liệu theo ba điều kiện biên

Phần này mô tả sơ lược về phương pháp đồng nhất hóa vật liệu theo ba điều kiện biên: (i) Điều kiện biên đồng nhất động học (KUBC); (ii) điều kiện biên tuần hoàn (PEBC) và (iii) điều kiện biên đồng nhất tĩnh học (SUBC).

Hình 1a giới thiệu một kết cấu thực chứa pha cốt (màu đen) và pha nền (màu trắng). Một phần tử thể tích đặc trưng (REV) có diện tích Ω đại diện cho kết cấu thực nêu trên, trong đó, mỗi pha vật liệu thành phần có các đặc tính vật liệu khác nhau (với (C_1, Ω_1) , (C_2, Ω_2) là ten-xơ độ cứng đàn hồi và diện tích của pha cốt, pha nền, tương ứng); $\partial\Omega$ là biên ngoài của Ω với n là véc-tơ pháp tuyến của biên $\partial\Omega$ (xem hình 1b). Sau quá trình đồng nhất hóa theo điều kiện biên KUBC và PEBC (hình 1d) và điều kiện biên SUBC (hình 1e), đạt được một vật liệu đồng nhất với đặc trưng vật liệu (\bar{C}, Ω) như hình 1c.



Hình 1. Mô tả quá trình đồng nhất hóa: (a) kết cấu hai pha vật liệu; (b) phần tử thể tích đặc trưng (REV); (c) kết cấu sau đồng nhất; (d) điều kiện biên KUBC và PEBC; (e) điều kiện biên SUBC.

2.1. Mô tả bài toán đồng nhất hóa theo điều kiện biên KUBC và PEBC

Cho biến dạng vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$, tìm trường biến dạng $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ trong Ω (xem hình 1d), sao cho thỏa mãn phương trình cân bằng dưới đây:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) = 0; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (1)$$

Với định luật Hooke cho vật liệu đàn hồi tuyến tính:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \quad (2)$$

Sau đó xác nhận điều kiện $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ Trong đó $\nabla \cdot (\bullet)$, $\nabla(\bullet)$ và $\langle \bullet \rangle$ là các toán tử div, grad và trung bình của (\bullet) .

Với điều kiện biên KUBC như sau:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (3)$$

Và điều kiện biên PEBC được mô tả:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (4)$$

Trong đó $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ là chuyển vị biến thiên thỏa mãn $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = 0$ trên $\partial\Omega$ trên $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ biến thiên tuần hoàn trong Ω (như hình 1d). Trong điều kiện (3) và (4), biến dạng vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ được xác định:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (5)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{x})$ là ten-xơ tập trung biến dạng bậc 4 với $A_{ijkl}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ij}^{(kl)}(\mathbf{x})$. Theo [1], trong điều kiện KUBC (3) với quan hệ ứng suất vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ và biến dạng vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{C}}_{KUBC}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) \quad (6)$$

Với $\bar{\mathbf{C}}_{KUBC}$ là ten-xơ độ cứng đàn hồi bậc 4 được đồng nhất theo điều kiện KUBC. Ten-xơ này có thể được viết lại theo dạng trung bình trong Ω như sau:

$$\bar{\mathbf{C}}_{KUBC} = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle \quad (7)$$

Tương tự, quá trình trên được giải trong điều kiện biên PEBC (4), với ten-xơ độ cứng đàn hồi đồng nhất:

$$\bar{\mathbf{C}}_{PEBC} = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle \quad (8)$$

2.2. Mô tả bài toán đồng nhất hóa theo điều kiện biên SUBC

Bài toán đặt ra với ứng suất vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$, cần tìm $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ trong Ω (xem hình 1e) để thỏa mãn định luật Hooke (2). Sau đó xác nhận điều kiện ứng suất trung bình bằng ứng suất vĩ mô $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \bar{\boldsymbol{\sigma}}$. Điều kiện biên SUBC được mô tả như:

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (9)$$

Trong điều kiện (9), ứng suất vĩ mô $\bar{\sigma}$ được xác định:

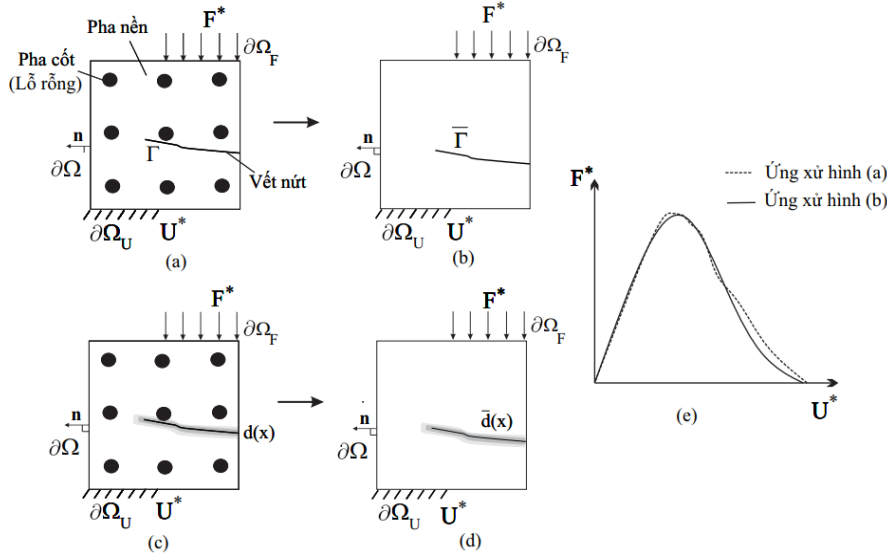
$$\sigma(\mathbf{x}) = \mathbb{B}(\mathbf{x}) : \bar{\sigma}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (10)$$

Ở đó, $\mathbb{B}(\mathbf{x})$ là ten-xơ tập trung ứng suất bậc 4 với $B_{ijkl}(\mathbf{x}) = \sigma_{ij}^{(kl)}(\mathbf{x})$. Với $\bar{\mathbb{C}}_{SUBC}$ là ten-xơ độ

cứng đàn hồi bậc 4 được đồng nhất theo điều kiện SUBC. Theo [1], ten-xơ độ cứng đàn hồi đồng nhất được giải trong điều kiện biên SUBC (9):

$$\bar{\mathbb{C}}_{SUBC} = \langle \mathbb{C}^{-1}(\mathbf{x}) : \mathbb{B}(\mathbf{x}) \rangle^{-1} \quad (11)$$

3. Phương pháp trường pha mô tả hư hỏng kết cấu



Hình 2. Mô tả phương pháp trường pha : (a) vết nứt thực trong REV, (b) vết nứt thực trong REV sau đồng nhất, (c) vết nứt thông qua biến trường pha $d(\mathbf{x})$ trong REV, (d) vết nứt thông qua biến trường pha $\bar{d}(\mathbf{x})$ trong REV sau đồng nhất, (e) ứng xử của REV (a) và (b).

Trong phần này, bài báo mô tả phương pháp trường pha dùng để mô phỏng hư hỏng của mẫu chứa hai pha vật liệu chưa đồng nhất và sau khi được đồng nhất. Một mẫu chứa hai vật liệu thành phần chưa đồng nhất có diện tích Ω và biên ngoài $\partial\Omega$ của mẫu (hình 2a). Cho Γ là vết nứt trong mẫu Ω . Trạng thái của vết nứt được mô tả bằng một biến trường pha $d(\mathbf{x})$ với $\mathbf{x} \in \Omega$ (xem hình 2b). Sau khi đồng nhất, mẫu chứa vết nứt $\bar{\Gamma}$ (hình 2c). Vết nứt được thông qua biến trường pha $\bar{d}(\mathbf{x}) \in \Omega$ (hình 2d). Hình 2e là đường cong quan hệ tải trọng - chuyển vị trong quá trình mô phỏng với đường nét đứt và nét liền tương ứng ở mẫu chưa đồng nhất và sau khi đồng nhất. Mục tiêu của bài báo so sánh sự tương đồng về đường vết nứt và đường cong ứng xử của hai mẫu nêu trên.

3.1. Phương pháp trường pha cho vật liệu chưa đồng nhất

Tổng năng lượng trong một vật thể bị nứt bao gồm hai thành phần như dưới đây:

$$E(\mathbf{u}, d) = \int_{\Omega} W_u(\boldsymbol{\varepsilon}, d) d\Omega + \int_{\Omega} g_c \gamma(d, \nabla d) d\Omega \quad (12)$$

Ở đó, $\gamma(d, \nabla d) = \frac{d^2}{2l} + \frac{l}{2} (\nabla d \cdot \nabla d)$ là hàm mật độ vết nứt, l là tham số chiều dài, g_c là năng lượng kháng nứt. Hàm mật độ năng lượng biến dạng của vật thể bị nứt $W_u(\mathbf{u}, d) = \Psi^+(\boldsymbol{\varepsilon})\{g(d) + k\} + \Psi^-(\boldsymbol{\varepsilon})$ với hàm suy biến khả vi $g(d) = (1-d)^2$ và k là số thực vô cùng nhỏ [13].

Trong nghiên cứu này sử dụng một loại phân rã ten-xơ biến dạng $\boldsymbol{\varepsilon}$ thỏa mãn điều kiện trực giao của [12] được mô tả cụ thể trong [7]. Với điều kiện này, hai thành phần $\boldsymbol{\varepsilon}^+$ và $\boldsymbol{\varepsilon}^-$ phải thỏa mãn $\boldsymbol{\varepsilon}^+ : (\mathbb{C}\boldsymbol{\varepsilon}^-) = 0$. Theo [7], đặt

$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm = \mathcal{C}^{1/2} \boldsymbol{\varepsilon}^\pm$ với $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+ + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^-$ thì hai thành phần $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+$ và $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^-$ phải trực giao với nhau, nghĩa là $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+$ và $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^-$ phải thỏa mãn điều kiện $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+ : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^- = 0$, với $\boldsymbol{\varepsilon}^\pm$ là hai thành phần được phân tách của $\boldsymbol{\varepsilon}$. Theo phân tích trên, ta có thể xác định $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm$ để thỏa mãn [12]. Khi đó, hai thành phần năng lượng biến dạng $\Psi^\pm(\boldsymbol{\varepsilon})$ được xác định như dưới đây:

$$\Psi^\pm(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^\pm : (\mathcal{C} \boldsymbol{\varepsilon}^\pm) = \frac{1}{2} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm \quad (13)$$

Hàm lịch sử biến dạng \mathcal{H} theo thời gian τ được mô tả như sau:

$$\mathcal{H} = \max_{\tau \in [0, t]} \{ \Psi^+(\mathbf{x}, \tau) \} \quad (14)$$

Để xác định biến trường pha $d(\mathbf{x})$ và biến chuyển vị \mathbf{u} , ta giải hệ phương trình được nêu cụ thể trong [14].

3.2. Phương pháp trường pha cho vật liệu sau đồng nhất

Trong phần này các biến và tham số liên quan tới vật liệu sau đồng nhất được ký hiệu ($\bar{\cdot}$).

Khi đó, để xác định biến trường pha $\bar{d}(\mathbf{x})$, có thể giải hệ phương trình với điều kiện biên:

$$\begin{cases} 2(1-\bar{d})\bar{\mathcal{H}} - \frac{\bar{g}_c}{l} \delta\gamma(\bar{d}, \nabla\bar{d}) = 0 & \text{trong } \Omega \\ \bar{d}(\mathbf{x}) = 1 & \text{tại } \bar{\Gamma} \\ \nabla\bar{d}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{tại } \partial\Omega \end{cases} \quad (15)$$

Ten-xơ hai thành phần phân rã $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm$ của ten-xơ biến dạng vĩ mô $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ thỏa mãn điều kiện trực giao của [12]. Đặt $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm = \bar{\mathcal{C}}^{1/2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm$ với $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+ + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^-$ và thỏa mãn điều kiện $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+ : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^- = 0$. Trong trường hợp này, có thể xác định $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm$:

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm = \sum_{i=1}^D \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^i \rangle_{\pm} \bar{\mathbf{n}}_i \otimes \bar{\mathbf{n}}_i \quad (16)$$

Ở đó, $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^i$ và $\bar{\mathbf{n}}_i$ với $i=1, \dots, D$ là các giá trị riêng và vec-tơ riêng của $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Do đó, hai thành phần năng lượng biến dạng $\Psi^\pm(\boldsymbol{\varepsilon})$ được xác định như dưới đây:

$$\Psi^\pm(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm : (\bar{\mathcal{C}}^{1/2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm) = \frac{1}{2} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm \quad (17)$$

Khi đó, ứng suất Cô-si được tính [9]:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \left\{ \begin{array}{l} \{g(\bar{d}) + k\} (\tilde{\bar{\mathcal{P}}}^+ : \bar{\mathcal{C}}^{1/2}) : (\tilde{\bar{\mathcal{P}}}^+ : \bar{\mathcal{C}}^{1/2}) + \\ (\tilde{\bar{\mathcal{P}}}^- : \bar{\mathcal{C}}^{1/2}) : (\tilde{\bar{\mathcal{P}}}^- : \bar{\mathcal{C}}^{1/2}) \end{array} \right\} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (18)$$

Trong đó, hai thành phần $\tilde{\bar{\mathcal{P}}}^\pm$ được xác định

$$\tilde{\bar{\mathcal{P}}}^\pm = \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}$$

theo thời gian τ được xác định như sau:

$$\bar{\mathcal{H}} = \max_{\tau \in [0, t]} \{ \bar{\Psi}^+(\mathbf{x}, \tau) \} \quad (19)$$

Để xác định biến chuyển vị $\bar{\mathbf{u}}$, giải hệ phương trình với các điều kiện biên (xem [18]):

$$\begin{cases} \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\bar{\mathbf{u}}, \bar{d}) = \mathbf{f}^* & \text{trong } \Omega \\ \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^* & \text{tại } \partial\Omega_u \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F}^* & \text{tại } \partial\Omega_F \end{cases} \quad (20)$$

Ở đó, \mathbf{u}^* là giá trị chuyển vị tại biên $\partial\Omega_u$, ứng suất $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ được tính theo công thức (18).

4. Ví dụ mô phỏng

Trong ví dụ này, một mẫu kích thước 1 x 1 mm chứa hai pha vật liệu với pha cốt (hoặc lỗ rỗng) có màu đen, pha nền có màu trắng như hình 3a. Mẫu có thể được xem là một REV đại diện cho một kết cấu không đồng nhất như hình 1a. Mẫu chứa một vết nứt môi dài 0.5 mm. Mục đích của ví dụ này là đồng nhất hóa mẫu chứa hai pha vật liệu theo ba điều kiện biên KUBC, PEBC và SUBC được nêu trong phần 2, sau đó dùng phương pháp trường pha để mô phỏng xác định và so sánh đường nứt cũng như các đường cong ứng xử của mẫu chưa đồng nhất và sau đồng nhất. Mẫu này bao gồm hai dạng: (i) mẫu chứa pha cốt và pha nền; (ii) mẫu chứa lỗ rỗng và pha nền (như hình 3a). Tỷ lệ về diện tích giữa pha cốt (lỗ rỗng) so với mẫu là $f = 0.3$. Hơn nữa, xét

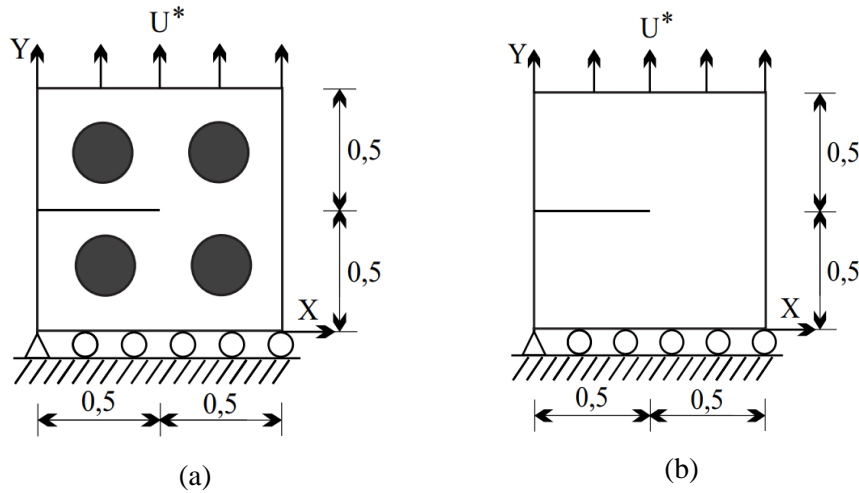
đến ảnh hưởng của sự phân bố pha cốt (lỗ rỗng) liên quan tới số hạt trên một hàng (gọi là N) tới kết quả sau đồng nhất, trong khi vẫn giữ nguyên tỷ lệ $f = 0.3$. Mẫu sau khi đồng nhất được mô tả như hình 3b. Tham số vật liệu của hai pha được lấy như sau: pha nền với $\lambda_2 = 121.15$ GPa và $\mu_2 = 80.77$ GPa, $g_{c2} = 0.0027$ kN/mm [8], trong trường hợp mẫu chứa pha cốt $\lambda_1 = 2\lambda_2$ và $\mu_1 = 80.77$ GPa, $g_{c1} = 2g_{c2}$ kN/mm; trường hợp mẫu chứa lỗ rỗng, giả định các tham số vật liệu lỗ rỗng rất nhỏ nhưng khác 0 để tránh hiện tượng xuất hiện điểm kỳ dị trong quá trình đồng nhất hóa, ta chọn $\lambda_1 = 10^{-6}$ GPa và $\mu_1 = \lambda_1 = 10^{-6}$ GPa, $g_{c1} = 10^{-6}$ kN/mm.

Do đó, có thể biểu diễn dạng ma trận độ cứng đàn hồi C tương ứng ten-xơ độ cứng \mathcal{C} của từng pha vật liệu trong mẫu chưa đồng nhất:

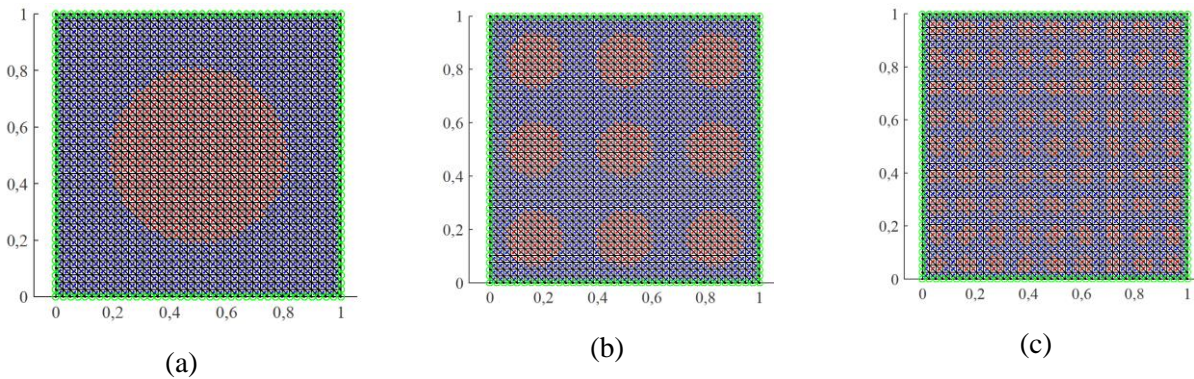
$$[C] = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1112} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2212} \\ C_{1112} & C_{2212} & C_{1212} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_i + 2\mu_i & \lambda_i & 0 \\ \lambda_i & \lambda_i + 2\mu_i & 0 \\ 0 & 0 & \mu_i \end{bmatrix} \quad (21)$$

Trong quá trình đồng nhất hóa mẫu được chia lưới với kích thước $h = 0.025$ mm với màu xanh đại diện cho pha nền và màu đỏ đại diện cho pha cốt (lỗ rỗng) như được mô tả trong hình 4 với sự phân bố theo số hạt trên một hàng $N = 1, 3, 9$. Sau khi đồng nhất với ba điều kiện biên KUBC, PEBC và SUBC, cho ma trận độ cứng \bar{C} của ten-xơ độ cứng $\bar{\mathcal{C}}$:

$$[\bar{C}] = \begin{bmatrix} \bar{C}_{1111} & \bar{C}_{1122} & \bar{C}_{1112} \\ \bar{C}_{1122} & \bar{C}_{2222} & \bar{C}_{2212} \\ \bar{C}_{1112} & \bar{C}_{2212} & \bar{C}_{1212} \end{bmatrix} \quad (22)$$



Hình 3. Kích thước mẫu và điều kiện tải trọng: (a) mẫu chưa đồng nhất với màu đen là pha cốt (lỗ rỗng) và màu trắng là pha nền, (b) mẫu sau đồng nhất.

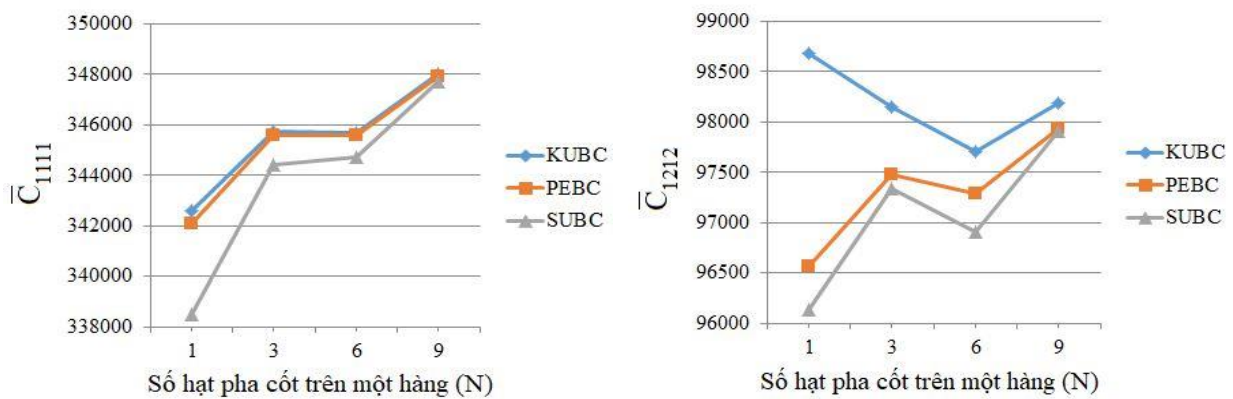


Hình 4. Tỷ lệ diện tích pha cốt (lỗ rỗng) $f = 0,3$ phân bố đều với số hạt trên một hàng N : (a) $N = 1$ (1 hạt), (b) $N = 3$ (9 hạt), (c) $N = 9$ (81 hạt).

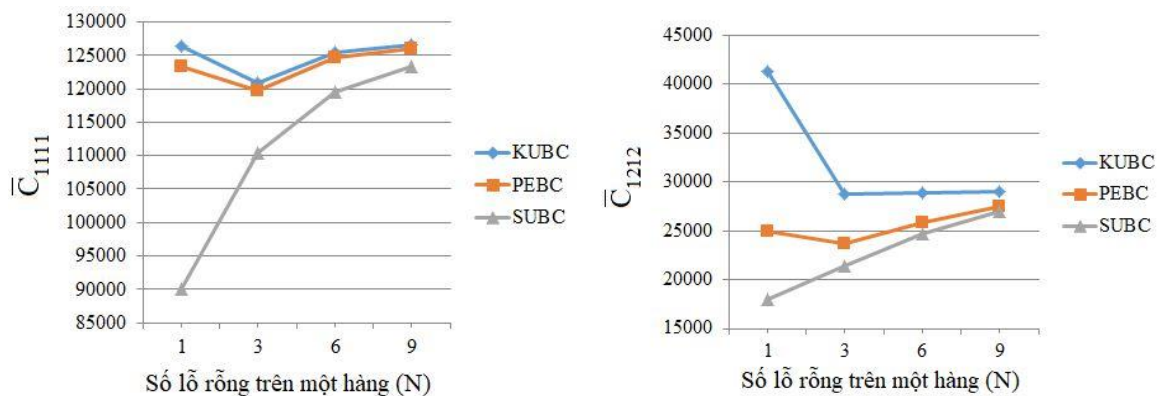
Một vài ma trận độ cứng sau đồng nhất của mẫu chứa pha cốt và mẫu chứa lỗ rỗng đại diện với $N = 3$ theo ba điều kiện biên được thể hiện như bảng 1 dưới đây:

Bảng 1. Ma trận độ cứng sau đồng nhất của mẫu theo ba điều kiện biên đồng nhất (MPa).

	Mẫu chứa pha cốt $N = 3$ (MPa)	Mẫu chứa lỗ rỗng $N = 3$ (MPa)
$[\bar{C}_{KUBC}]$	$\begin{bmatrix} 345739.040 & 144682.569 & -48.249 \\ 144682.569 & 345739.040 & -48.249 \\ -48.249 & -48.249 & 98146.239 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 120909.040 & 34506.175 & -50.895 \\ 34506.175 & 120909.040 & -50.895 \\ -50.895 & -50.895 & 28832.677 \end{bmatrix}$
$[\bar{C}_{PEBC}]$	$\begin{bmatrix} 345564.968 & 144626.796 & -42.678 \\ 144626.796 & 345564.968 & -42.678 \\ -42.678 & -42.678 & 97473.907 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 119825.130 & 33861.302 & -238.134 \\ 33861.302 & 119825.130 & -238.134 \\ -238.134 & -238.134 & 23730.530 \end{bmatrix}$
$[\bar{C}_{SUBC}]$	$\begin{bmatrix} 344399.222 & 145413.317 & -42.945 \\ 145413.317 & 344399.222 & -42.945 \\ -42.945 & -42.945 & 97335.982 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 110478.599 & 40392.101 & -147.178 \\ 40392.101 & 110478.599 & -147.178 \\ -147.178 & -147.178 & 21432.909 \end{bmatrix}$



Hình 5. So sánh thành phần \bar{C}_{1111} và \bar{C}_{1212} của ma trận độ cứng sau đồng nhất REV chứa pha cốt.



Hình 6. So sánh thành phần \bar{C}_{1111} và \bar{C}_{1212} của ten-xơ độ cứng sau đồng nhất REV chứa lỗ rỗng.

So sánh hai thành phần đại diện \bar{C}_{1111} và \bar{C}_{1212} cho ma trận độ cứng \bar{C} với trường hợp mẫu

chứa pha cốt và mẫu chứa lỗ rỗng được thể hiện trong hình 5 và hình 6, tương ứng. Trong mọi trường hợp với sự phân bố pha cốt (lỗ rỗng) $N =$

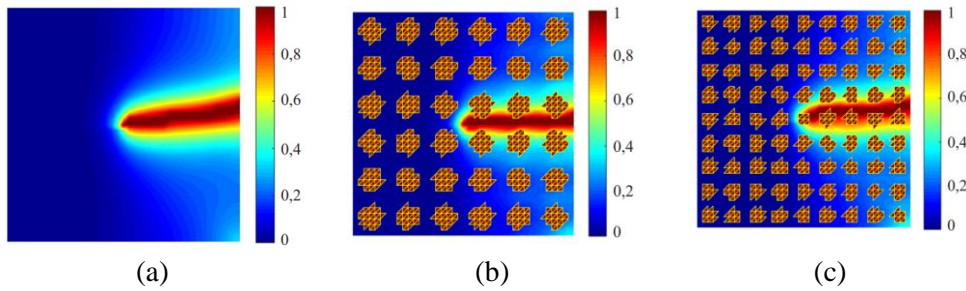
1, 3, 6, 9, nhận thấy: (i) khi N tăng thì ma trận độ cứng ứng với ba điều kiện biên càng hội tụ; (ii) vật liệu sau khi đồng nhất vẫn gần như đẳng hướng nếu hai pha là đẳng hướng và (iii) thỏa mãn $\bar{C}_{SUBC} \leq \bar{C}_{PEBC} \leq \bar{C}_{KUBC}$.

Dùng phương pháp trường pha để mô phỏng mẫu chưa đồng nhất và sau đồng nhất như hình 3. Trong nghiên cứu này, đặt tham số chiều dài của mẫu chưa đồng nhất và sau đồng nhất $l = \bar{l} = 2h = 0.05$ mm. Năng lượng kháng nứt sau đồng nhất $\bar{g}_c = f \cdot g_{c1} + (1-f) g_{c2}$. Mẫu chịu kéo với điều kiện như sau: góc dưới bên trái được cố định chuyển vị theo hai phương, trong khi các điểm khác của cạnh dưới tầm chuyển

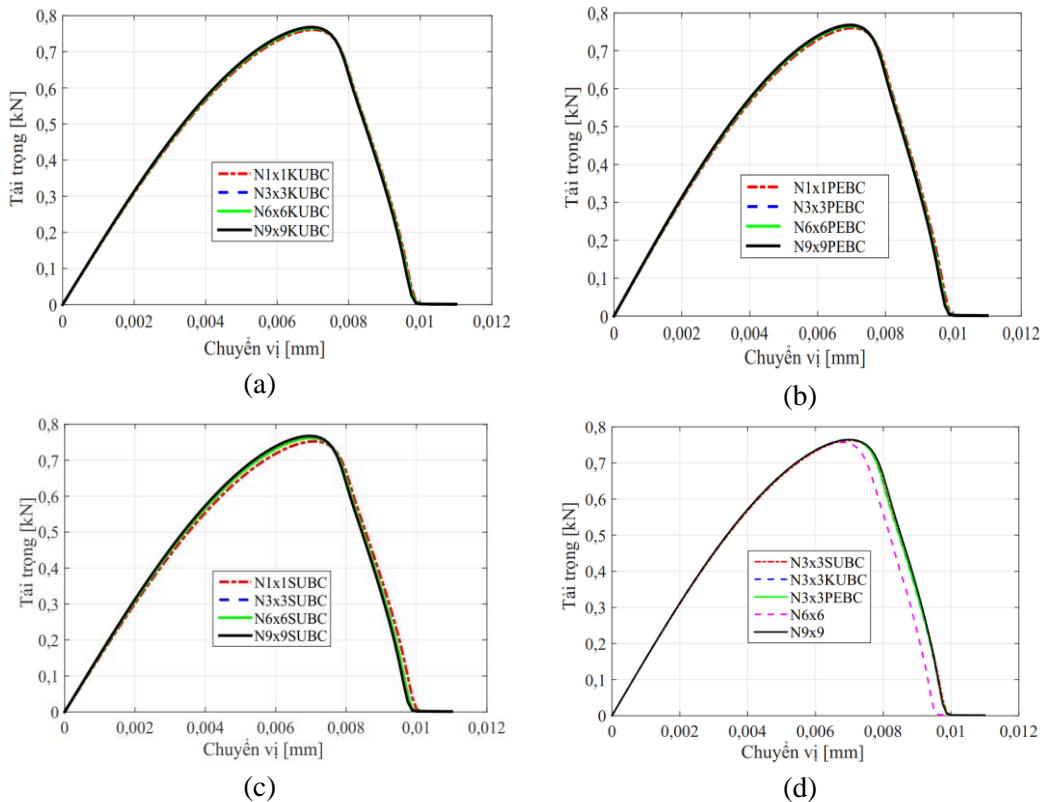
địch tự do theo phương ngang. Tại cạnh trên, tầm được gia tải đều theo phương đứng với bước chuyển vị là $\Delta u = 0.0001$ mm tới khi kết cấu bị nứt hoàn toàn. Để thực hiện đầy đủ mục đích của nghiên cứu, có thể so sánh: giữa đường nứt và đường cong tải trọng - chuyển vị; năng lượng gây nứt J của cả hai từ công thức (23) giữa trường hợp chưa đồng nhất và sau đồng nhất khi thay đổi N và ba điều kiện biên đồng nhất được nêu trong phần 2.

$$J = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (F_k^* + F_{k-1}^*) (U_k^* - U_{k-1}^*) \quad (23)$$

Trong đó, F_k^* và U_k^* là tải trọng và chuyển vị tại bước thứ k ; n là tổng số bước gia tải.



Hình 7. Đường nứt của mẫu chứa pha cốt: (a) sau đồng nhất, (b) chưa đồng nhất với $N = 6$, (c) chưa đồng nhất với $N = 9$.



Hình 8. So sánh đường cong tải trọng-chuyển vị của mẫu chứa pha cốt sau đồng nhất với sự phân bố hạt khác nhau theo: (a) KUBC, (b) PEBC, (c) SUBC, (d) ba điều kiện với mẫu chưa đồng nhất.

Đường nứt được thể hiện trong hình 7a đến hình 7c tương ứng với trường hợp sau đồng nhất, chưa đồng nhất của mẫu chứa pha cốt với $N = 6$ và chưa đồng nhất với $N = 9$ (do đường nứt trong trường hợp sau đồng nhất là tương tự nên chỉ thể hiện đại diện như hình 7a). Có thể thấy rằng hướng vết nứt giữa các trường hợp gần như nhau. Hình 7b và hình 7c, đường nứt có xu hướng phát triển ở pha nền và đi gần khu vực ranh giới giữa pha cốt và pha nền nơi có hiện tượng tập trung ứng suất do thay đổi độ cứng của hai pha.

Hình 8 thể hiện sự so sánh đường cong tải trọng - chuyển vị trong của mẫu chứa pha cốt sau đồng nhất với sự phân bố hạt khác nhau theo ba điều kiện biên đồng nhất. Sau khi đồng nhất các điều kiện biên, sự phân bố hạt pha cốt N không ảnh hưởng nhiều đến đường cong ứng xử (xem hình 8a-c). Hình 8d thể hiện sự so sánh ứng xử của mẫu sau đồng nhất và chưa đồng nhất ($N = 6, 9$). Từ hình 8d, khi chưa đồng nhất với $N = 6$, đường cong ứng xử có sự khác biệt

nhỏ từ khi vết nứt hình thành nhưng $N = 9$ thì đường cong ứng xử giống như mẫu sau đồng nhất. So sánh năng lượng gây nứt J giữa mẫu chứa pha cốt chưa đồng nhất và sau đồng nhất được trình bày trong bảng 2. Giá trị J được tính bởi đường cong ứng xử trong hình 8 theo công thức (23). Các giá trị J tương ứng với các điều kiện biên đồng nhất đều có quy luật $J_{SUBC} \leq J_{PEBC} \leq J_{KUBC}$ trong các trường hợp. Điều này thỏa mãn điều kiện $\bar{C}_{SUBC} \leq \bar{C}_{PEBC} \leq \bar{C}_{SUBC}$ ở trên. Nhưng sự chênh lệch giá trị J là không lớn với tất cả các trường hợp được khảo sát. Đối với giá trị J tương ứng với mẫu chưa đồng nhất với $N = 6$ là nhỏ nhất trong tất cả các giá trị, giá trị J của mẫu chưa đồng nhất với $N = 9$ tương đồng với các trường hợp sau đồng nhất. Từ hình 8 và bảng 2, nhận thấy khi N càng tăng thì đường cong ứng xử, đường nứt và giá trị J của mẫu sau đồng nhất và chưa đồng nhất càng hội tụ.

Bảng 2. So sánh năng lượng gây nứt J (mJ) giữa các trường hợp của mẫu chứa pha cốt.

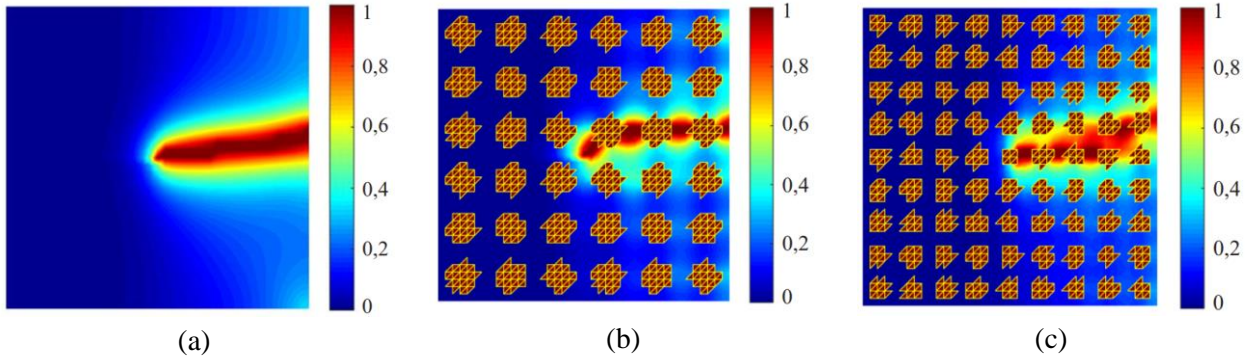
	Mẫu sau đồng nhất				Mẫu chưa đồng nhất	
	N = 1	N = 3	N = 6	N = 9	N = 6	N = 9
SUBC	4.5601	4.6425	4.6601	4.6671		
PEBC	4.6575	4.6607	4.6624	4.6675	4.4439	4.6973
KUBC	4.6611	4.6615	4.6632	4.6684		

Trong trường hợp mẫu chứa lỗ rỗng, đường nứt được thể hiện trong hình 9a-c tương ứng với trường hợp sau đồng nhất, chưa đồng nhất với $N = 6$ và chưa đồng nhất với $N = 9$. Ta thấy rằng sự phát triển vết nứt cơ bản giống nhau giữa các hình này. Do ảnh hưởng cục bộ của lỗ rỗng trong mẫu chưa đồng nhất trong hình 9a-c, đường nứt xuất phát từ vết nứt môi và lan truyền qua các lỗ lân cận nơi mà đường như độ cứng của mẫu là yếu nhất, nhưng đường nứt vẫn có xu hướng phát triển ngang như mẫu sau đồng nhất trong hình 9a.

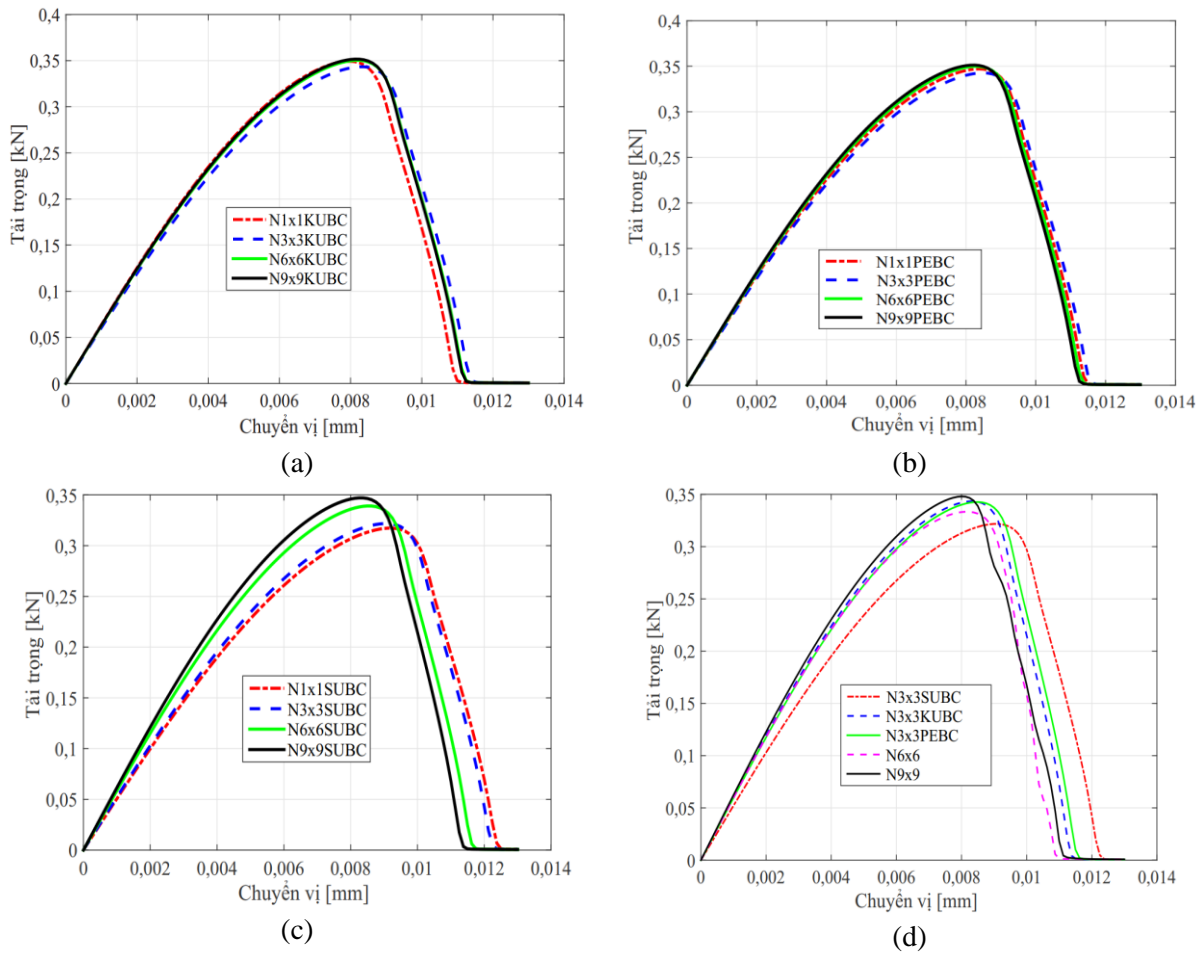
Hình 10 thể hiện sự so sánh đường cong tải trọng-chuyển vị của mẫu chứa lỗ rỗng với sự phân bố khác nhau theo ba điều kiện biên. Ta thấy rằng khi đồng nhất hóa theo điều kiện KUBC, PEBC thì ảnh hưởng của sự phân bố lỗ ít ảnh hưởng tới kết quả đạt được (xem hình 10a và hình 10b). Nhưng theo điều kiện SUBC như hình 10c, khi $N = 1$ hoặc 3 thì góc của phần đầu đường cong ứng xử có khác biệt khá rõ so với khi $N = 6$ hoặc 9. Hình 10d so sánh ứng xử của mẫu chưa đồng nhất khi $N = 6$ và 9 với mẫu sau đồng nhất theo ba điều kiện tương ứng với $N = 3$, ta thấy rằng ứng xử của mẫu sau đồng nhất

theo SUBC khác biệt so với các trường hợp còn lại. Điều này chứng tỏ khi sử dụng SUBC trong mẫu chứa lỗ rỗng ta phải tăng $N > 3$ để đảm bảo

kết quả chính xác hơn, trong khi hai điều kiện KUBC và PEBC đảm bảo chính xác với các giá trị của N .



Hình 9. Đường nứt của REV chứa lỗ rỗng: (a) sau đồng nhất, (b) chưa đồng nhất với $N = 6$, (c) chưa đồng nhất với $N = 9$.



Hình 10. So sánh đường cong tải trọng-chuyển vị của mẫu chứa lỗ rỗng sau đồng nhất với sự phân bố khác nhau theo: (a) KUBC, (b) PEBC, (c) SUBC, (d) ba điều kiện với mẫu chưa đồng nhất.

Bảng 3. So sánh năng lượng gây nứt J (mJ) giữa các trường hợp của mẫu chứa lỗ rỗng.

	Mẫu sau đồng nhất				Mẫu chưa đồng nhất	
	$N = 1$	$N = 3$	$N = 6$	$N = 9$	$N = 6$	$N = 9$
SUBC	2.3794	2.3828	2.447	2.4509	2.265	2.356

	Mẫu sau đồng nhất				Mẫu chưa đồng nhất	
	$N = 1$	$N = 3$	$N = 6$	$N = 9$	$N = 6$	$N = 9$
PEBC	2.4518	2.4509	2.4578	2.4539		
KUBC	2.4701	2.4683	2.4688	2.4601		

So sánh năng lượng gây nứt J của mẫu chứa lỗ rỗng trong các trường hợp khảo sát được thể hiện trong bảng 3. Giá trị J được tính bởi đường cong ứng xử trong hình 10 theo công thức (23). Các giá trị J vẫn thỏa mãn $J_{SUBC} \leq J_{PEBC} \leq J_{KUBC}$ trong các trường hợp tương ứng với điều kiện $\bar{C}_{SUBC} \leq \bar{C}_{PEBC} \leq \bar{C}_{SUBC}$. Các giá trị J giữa các trường hợp của mẫu chưa đồng nhất và sau đồng nhất chênh lệch không lớn. Đối với giá trị J tương ứng với mẫu chưa đồng nhất với $N = 6$ là nhỏ nhất, và giá trị J của mẫu chưa đồng nhất với $N = 9$ tương đồng với các trường hợp sau đồng nhất. Từ hình 10 và bảng 3, cũng thấy rằng khi N càng tăng, đường cong ứng xử, đường nứt và giá trị J của mẫu sau đồng nhất và chưa đồng nhất càng hội tụ.

5. Kết luận

Bài báo sử dụng ba điều kiện biên đồng nhất hóa (KUBC, SUBC, PEBC) để xác định các đặc trưng vật liệu tương đương của vật liệu sau đồng nhất. Cấu trúc ban đầu chứa hai pha vật liệu gồm pha nền và pha cốt (hoặc lỗ rỗng). Trong đó, giữ nguyên tỷ lệ về diện tích của pha cốt (lỗ rỗng) nhưng pha cốt (lỗ rỗng) có thể phân bố nhỏ thành nhiều hạt (đặc trưng bằng N). Tiếp đó, bài báo khảo sát sự ảnh hưởng của N tới các đặc trưng vật liệu tương đương sau khi đồng nhất. Phương pháp trường pha được sử dụng để mô phỏng hư hỏng của cấu trúc trước và sau đồng nhất. Từ các kết quả đạt được, tác giả đúc kết một vài kết luận:

- Trong mọi trường hợp với sự phân bố pha cốt (lỗ rỗng) $N = 1, 3, 6, 9$, luôn có: (i) khi N tăng, ma trận độ cứng ứng với ba điều kiện biên càng hội tụ; (ii) vật liệu sau khi đồng nhất vẫn

gần như đẳng hướng nếu hai pha là vật liệu đẳng hướng và (iii) thỏa mãn $\bar{C}_{SUBC} \leq \bar{C}_{PEBC} \leq \bar{C}_{SUBC}$;

- Hướng phát triển vết nứt giữa các trường hợp gần tương tự nhau với cấu trúc trước và sau đồng nhất hóa;

- Trong trường hợp cấu trúc chứa pha nền và pha cốt, sau khi đồng nhất với các điều kiện biên, sự phân bố hạt pha cốt N không ảnh hưởng nhiều đến đường cong ứng xử, nhưng khi N càng tăng, đường cong ứng xử, đường nứt và giá trị J của mẫu sau đồng nhất và chưa đồng nhất càng hội tụ;

- Trong trường hợp cấu trúc chứa pha nền và lỗ rỗng, theo điều kiện SUBC với $N = 1$ và 3, đường cong ứng xử có sự khác biệt rõ rệt so với hai điều kiện biên còn lại. Điều này chứng tỏ khi sử dụng SUBC trong mẫu chứa lỗ rỗng, cần phải tăng $N > 3$ để đảm bảo kết quả chính xác hơn, trong khi hai điều kiện KUBC và PEBC đảm bảo chính xác với các giá trị khảo sát của N .

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Giao thông vận tải thông qua đề tài mã số “T2023-CT-025”.

Tài liệu tham khảo

- [1] J. Yvonnet; “Computational homogenization of heterogeneous materials with finite elements.” Basel, Switzerland:Springer Nature. 2019.
- [2] F. Feyel, J. L. Chaboche; “FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fiber sic/ti composite materials”. Comput. Methods Appl. Mech. Eng.

- 2000; 183(3-4): 309-330. DOI:10.1016/S0045-7825(99)00224-8.
- [3] C. Hirschberger, S. Ricker, P. Steinmann, N. Sukumar; “Computational multiscale modelling of heterogeneous material layers”. *Eng. Fract. Mech.* 2009; 76(6): 793-812. DOI:10.1016/j.engfracmech.2008.10.018.
- [4] M. Kulkarni, K. Matouš, P. Geubelle; “Coupled multi-scale cohesive modeling of failure in heterogeneous adhesives”. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 2010; 84(8): 916-946. DOI:10.1002/nme.2923.
- [5] D. A. Hun, J. Guillemot, J. Yvonnet, M. Bornert; “Stochastic multiscale modeling of crack propagation in random heterogeneous media”. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 2019; 119(13): 1325-1344. DOI:10.1002/nme.6093.
- [6] V. B. Thành, T. A. Tuấn, N. Đ. Hải, N. X. Lam; “Phương pháp phase field với sử dụng phân rã trực giao thành phần ten-xơ biến dạng để dự đoán sự phát triển vết nứt trong vật liệu giòn”, *Kỷ yếu Hội nghị khoa học toàn quốc Cơ học vật rắn lần thứ 15, Thái Nguyên 9/2021*, 866-874.
- [7] B. T. Vu, H. L. Quang, Q.C. He; “Modelling and simulation of fracture in anisotropic brittle materials by the phase-field method with novel strain decompositions”. *Mechanics Research Communications.* 2022; 124: 103936. DOI:10.1016/j.mechrescom.2022.103936.
- [8] V. B. Thành, T. A. Tuấn, N. Đ. Hải; “Mô phỏng sự lan truyền vết nứt trong kết cấu nhiều pha vật liệu bằng phương pháp phase field có xét tới hư hỏng mặt phân giới giữa các pha”. *Tạp chí khoa học Giao thông vận tải.* 2021; 72 (8):893-907. DOI:10.47869/tcsj.72.8.4.
- [9] B. T. Vu, X. L. Nguyen, A. T. Do; “Strain orthogonal decomposition implemented within the phase field method with interfacial damage to model fracture in multi-phase heterogeneous materials”. *Transport and Communications Science Journal.* 2023; 74 (4):386-399.
- [10] V. B. Thành, N. V. Thức, B. T. Thành, T. T. Truyền, Đ. A. Tú; “Mô phỏng sự hình thành và lan truyền vết nứt trong dầm bê tông cường độ cao có chất kết dính bổ sung nano-silica bằng phương pháp phase field”. *Tạp chí khoa học Giao thông vận tải.* 2021; 72 (6):672-686. DOI:10.47869/tcsj.72.6.1.
- [11] N. X. Lam, L. B. Anh, V. B. Thành, N. D. Tiến, N. N. Long; “Phân tích sự phân bố nhiệt độ do nhiệt thủy hóa xi măng trong trụ cầu bê tông cốt thép ở tuổi sớm bằng phương pháp đồng nhất hóa”. *Tạp chí khoa học Giao thông vận tải.* 2021; 72 (6):738-752. DOI:10.47869/tcsj.72.6.6.
- [12] Q. C. He, Q. Shao; “Closed-form coordinate-free decompositions of the two-dimensional strain and stress for modeling tension-compression dissymmetry.” 2019; *J. Appl. Mech.* 86(3):031007. DOI:10.1115/1.4042217.
- [13] T. T. Nguyen, J. Yvonnet, Q.Z. Zhu, M. Bornert, C. Chateau; “A phase field method to simulate Crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure”. *Eng. Fract. Mech.* 2015; 139: 18-39. DOI:10.1016/j.engfracmech.2015.03.045.
- [14] T. T. Nguyen, J. Yvonnet, M. Bornert, C. Chateau, K. Sab, R. Romani, R. Le Roy; “On the choice of parameters in the phase field method for simulating crack initiation with experimental validation”. *Int. J. Fracture.* 2016; 197: 213-226. DOI:10.1007/s10704-016-0082-1.