

## به کارگیری روش همگن سازی عددی برای مطالعه تأثیر آسیب‌های میکروسکوپی بر استحکام ماکروسکوپی ساختارهای پلی کریستالی

احمد اکبری\*

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران  
مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۲/۱۰؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۰۷/۳۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۰/۱۳

### چکیده

در این مقاله نشان داده می‌شود که می‌توان با استفاده از روش همگن‌سازی عددی نمودار ماکروسکوپی سطح شکست یک ماده پلی کریستالی را در حضور آسیب‌های اولیه میکروسکوپی به دست آورد. به این منظور نمونه‌هایی از ساختار میکروسکوپی ماده به صورت دوبعدی در قالب حجم نمونه‌هایی در نظر گرفته می‌شوند که شامل تعدادی دانه با خواص الاستیک خطی با مرز دانه‌هایی از نوع ترک چسبناک غیرخطی هستند. در این مدل‌سازی محل جوانه‌زنی و رشد میکروتورک‌ها مرز دانه‌ها می‌باشند. به منظور مطالعه اثر آسیب اولیه بر خواص ماکروسکوپی ماده، در مرکز هندسی حجم نمونه‌ها سه شکل متفاوت از آسیب‌های اولیه ایجاد می‌شود، به گونه‌ای که مرز دانه‌های آن ناحیه هیچ‌گونه توانایی ذخیره انرژی کششی یا برشی را ندارند. شرایط مرزی به صورت جابجایی دومیحوره و برگرفته از تانسور کرنش ماکروسکوپی به صورت گام‌به‌گام بر مرز بیرونی حجم نمونه‌ها اعمال می‌شود و تا لحظه شکست حجم نمونه ادامه می‌یابد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که وجود آسیب‌های اولیه استحکام ماده را به مقدار چشمگیری کاهش می‌دهد و می‌تواند سبب نامتقارن شدن نمودار سطح تسلیم ماده گردد. این در حالی است که وجود این آسیب‌ها تأثیری بر مدول الاستیسیته ماده ندارد.

**کلمات کلیدی:** تحلیل چندمقیاسه؛ همگن‌سازی عددی؛ آسیب میکروسکوپی؛ ساختار پلی کریستالی؛ مرز دانه چسبناک.

## Computational Homogenization to Study the Effect of Microscopic Cracks on the Macroscopic Strength of Polycrystalline Materials

A. Akbari\*

Assis. Prof., Mech. Eng., Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

### Abstract

In this paper, the capability of computational homogenization technique in the prediction of the macroscopic yield surface of polycrystalline materials at the presence of microscopic damage is investigated. The irregular shape representative volume element (RVE) composed of two dimensional grains is used to perform the homogenization. The grains are considered as an undamageable linear elastic material while the grain boundaries are modeled by a nonlinear cohesive interface law. To study the effect of initial microscopic damages, three different shapes of fully damaged grains are inserted at the center of RVEs. The Dirichlet's boundary conditions extracted from a macroscopic strain tensor is imposed on the boundary of RVEs and gradually increased until the full failure of samples. The results show that initial damages can dramatically reduce the material strength and give rise to an asymmetric yield surface whereas they have no effect on the macroscopic modulus of elasticity.

**Keywords:** Multiscale Modeling; Computational Homogenization, Microscopic Damage; Polycrystalline Structure; Cohesive Interface.

## ۱- مقدمه

میکروسکوپی و هم ساختار ماکروسکوپی مسئله با استفاده از روش اجزا محدود مدل سازی شده و شبیه سازی هر مقیاس به صورت پی در پی انجام می گیرد. این روش نوعی روش همگن سازی عددی است که بر پایه شرط هیل-مندل [۹] استوار است. نتایج حل مقیاس ماکرو به مقیاس میکرو ارسال می شود تا بر اساس آن، مسئله تعریف شده در مقیاس میکروسکوپی حل گردد. سپس نتایج حل مقیاس میکرو نیز به مقیاس بالاتر منتقل می شود تا در گام بعدی بارگذاری مورد استفاده قرار گیرد. معمولاً میدان تغییر شکل مقیاس ماکرو، به عنوان شرایط مرزی نمونه میکروسکوپی، به مقیاس پایین ارسال می شود. پاسخ نمونه میکروسکوپی به شرایط مرزی اعمالی که شامل یک ماتریس سختی و بردار نیروی عکس العمل است، به مقیاس ماکرو فرستاده می شود. از آنجاکه هر دو مقیاس به صورت متوالی از روش اجزا محدود استفاده می کنند، این روش را  $FE^2$  می نامند. این روش پایه انجام این پژوهش است.

گش و همکارانش [۱۰] مواد کامپوزیتی با زمینه پلیمری را به روش چند مقیاسی  $FE^2$  بررسی نموده اند. آن ها در تحقیق خود تأثیر اندرکنش الیاف و پلیمر بر رفتار ماکروسکوپی سازه را مدل سازی و تحلیل کرده اند. در مطالعه های دیگر [۱۱]، تأثیر خواص میکروسکوپی کامپوزیت ها بر کماتش سازه بررسی شده است. آن ها در مطالعات خود ریزساختار ماده را به صورت متناوب در نظر گرفته اند. روش اصلی بکار گرفته شده توسط آن ها همگن سازی ریزساختار است. با توجه به پیچیدگی ساختارهای میکروسکوپی مواد، درجاتی از عدم اطمینان یا عدم شناخت از خواص، هندسه و رفتار میکروساختارها وجود دارد؛ لذا پیوارف و همکارانش [۱۲]، یک روش همگن سازی بر پایه روش اجزا محدود فازی-آماری برای همگن سازی رفتار میکروساختارهای پلی کریستالی ارائه داده اند که در آن تأثیر مقادیر فازی بر تنش های به دست آمده از همگن سازی عددی بررسی شده است.

یکی دیگر از کاربردهای روش چندمقیاسی، بهینه سازی ساختار میکروسکوپی مواد برای ارتقای خواص ماکروسکوپی آن است. در این راستا می توان به پژوهش اورنگا و همکارانش [۱۳] اشاره کرد که در آن به کمک مدل سازی چندمقیاسی

رشد ترک در مواد شکننده اغلب به صورت ناگهانی رخ می دهد که سالانه خسارت های گزافی را به صنعت تحمیل می کند. با مطالعه رفتار مواد در حضور ترک می توان از این گونه رخدادها تا حدودی جلوگیری کرد. در دنیا مطالعات بسیار گسترده ای در زمینه شکست مواد و مکانیک شکست انجام شده است که بیشتر این مطالعات در یک مقیاس صورت گرفته است: یا مقیاس مهندسی (ماکروسکوپی) [۱،۲] یا مقیاس میکروسکوپی و یا مقیاس نانو [۳،۴]. در مطالعات انجام شده در مقیاس ماکروسکوپی معمولاً خواص مکانیکی و معادلات متشکله مواد بر اساس آزمایش های تجربی و مدل های ریاضی تعیین می شوند که در واقع میانگینی از خواص میکروسکوپی ماده می باشند. برای مطالعه شکست مواد در این مقیاس لازم است اندازه ترک ها نسبت به ابعاد هندسی سازه غیرقابل چشم پوشی باشند. برای مثال در یک سازه با ابعادی در مقیاس متر (m) نمی توان تأثیر ترک در مقیاس میکرومتر ( $10^{-6}m$ ) را بررسی کرد، چرا که در مقیاس های میکرو و نانو مواد ناهمگن و ناهمسانگرد هستند، در حالی که در مطالعات ماکروسکوپی آن ها را همگن و غالباً همسانگرد در نظر می گیرند. در بسیاری از مسائل حل معادلات در مقیاس مهندسی از دقت کافی برخوردار نبوده و نیازمند جزئیات بیشتری از ریزساختار ماده است؛ همچنین نسبت بسیار بزرگ ابعاد هندسی قطعات مهندسی به ابعاد ساختار میکروسکوپی آن ها این امکان وجود ندارد که معادلات به طور کامل در مقیاس میکروسکوپی حل شوند. روش چند مقیاسی این امکان را فراهم می کند که بتوان یک مسئله مهندسی را با در نظر گرفتن ساختار میکروسکوپی آن حل نمود. مطالعات دو یا چندمقیاسی ارتباط مستقیمی بین مقیاس میکروسکوپی و مقیاس ماکروسکوپی ماده برقرار می کند و همین امر کمک می کند که به طور هم زمان تأثیر خواص میکروسکوپی بر رفتار ماکروسکوپی ماده را واضح تر درک کرد [۵-۷].

امروزه روش چند مقیاسی جزو مباحث داغ مجامع عملی دنیا است و پژوهشگران و مراکز پژوهشی بسیاری در این زمینه فعالیت می کنند. یکی از روش های چند مقیاسی  $FE^2$  است که توسط فییل و کابوک [۸] برای همگن سازی مواد کامپوزیتی توسعه داده شد. در این روش هم ساختار

انجام داده‌اند. در یک مطالعه [۲۰] رشد ترک در ساختار میکروسکوپی اتصالات لحیم‌کاری بررسی شده است. شبیر و همکارانش [۲۱]، تأثیر پارامترهای میکرو ترک‌های چسبناک بر نحوه رشد ترک در ریزساختار سرامیک‌ها مورد بررسی قرار داده‌اند. یک روش چند مقیاسی جدید برای مدل‌سازی رشد ترک در موادی نظیر بتن‌ها ارائه شد است [۲۲]. آن‌ها در روش خود تأثیر اجزای ریزساختار بتن را بر رفتار ماکروسکوپی آن بررسی کرده‌اند. برای مدل‌سازی ترک، از روش تخریب پیوسته استفاده نموده که ناحیه ترک به صورت پیوسته مدل شده و هیچ‌گونه خط جدایشی به‌عنوان خط ترک گسسته پدیدار نمی‌شود. این نحوه مدل‌سازی ترک را نمی‌توان برای ساختارهای بلورهای بکار برد. عباس و همکارانش [۲۳]، رفتار ویسکوالاستیک بتن در مقیاس ماکروسکوپی را به کمک همگن‌سازی عددی ساختار میکروسکوپی بتن مطالعه نموده‌اند. در پژوهشی دیگر توسط یوسفی و همکارانش [۲۴]، با استفاده از روش همگن‌سازی عددی تأثیر نانولوله‌های کربنی و نانو مارپیچ‌های کربنی بر خواص الاستیک یک نانو کامپوزیت پلیمری مطالعه شده است. لازم به ذکر است، در مطالعات [۲۳-۲۴]، شرایط مرزی اعمال شده به حجم نمونه‌های میکروسکوپی به صورت تک راستا بوده و اثر بارگذاری در جهات مختلف و همچنین استحکام نمونه‌ها بررسی نشده است.

در مرجع [۲۵] اثر وجود میکروتُرک‌ها بر خواص مکانیکی یک چندلایه کامپوزیتی مورد بررسی قرار گرفته است. در آن مطالعه میزان کاهش سفتی خمشی و تغییرات نسبت پواسون به ازای چگالی‌های مختلف میکروتُرک‌ها ارزیابی شده است. اخیراً هون و همکارانش با استفاده از روش چندمقیاسه رشد ترک در یک ماده با ساختاری ناهمگن و تصادفی را مدل‌سازی کرده‌اند [۲۶]. آن‌ها تأثیر خواص تصادفی میکروساختار بر خواص ماکروسکوپی را در حضور یک ترک در میکروساختار بررسی کرده‌اند.

اکبری و همکارانش تأثیر خواص مرزدانه‌های تخریب‌شونده چسبناک در مرز بین دانه‌های یک ساختار بلورهای را بر خواص ماکروسکوپی آن مورد بررسی قرار داده‌اند [۲۷]. آن‌ها در مطالعه خود ساختار ابتدایی را بی‌نقص در نظر گرفته‌اند. به عبارت دیگر مقدار پارامتر تخریب در همه

ساختار بین‌لایه‌ای یک کامپوزیت فلز-الیاف برای جذب بیشتر انرژی ضربه بهینه شده است.

در هیچ‌یک از پژوهش‌های ذکر شده در بالا تأثیر میکروتُرک‌ها مطالعه نشده است. رشد ترک در دانه‌های یک ماده شکننده در مقیاس میکروسکوپی به کمک روش المان محدود توسعه‌یافته<sup>۱</sup> توسط سوکمار و همکارانش [۱۴] مدل‌سازی شده است. آن‌ها در این روش، رفتار دانه‌ها و میکروتُرک‌ها را به صورت الاستیک خطی در نظر گرفته و ماده را تنها از منظر میکروسکوپی بررسی کرده‌اند. تأثیر خواص مرزدانه‌ها بر رفتار الاستوپلاستیک ریزساختار مواد بلورهای توسط ویی و اناند [۱۵] مورد مطالعه قرار گرفت. آن‌ها معادله‌ای برای مدل نمودن تماس اصطکاکی و ارتجاعی مرز دانه‌ها ارائه دادند. مطالعات این گروه نیز، محدود به مقیاس میکروسکوپی بود. گُش و همکارانش [۱۶]، به کمک روش چند مقیاسی، تأثیر جدایش الیاف از ماتریس را بر رفتار ماکروسکوپی کامپوزیت‌ها بررسی کردند. جدایش الیاف از ماتریس در مقیاس میکروسکوپی رخ می‌دهد که به کمک روش  $FE^2$  میانگینی از رفتار الیاف، ماتریس و اتصال آن‌ها را در حالت‌های مختلف بدون آسیب، آسیب کم و یا جدایش کامل به‌عنوان خواص ماکروسکوپی کامپوزیت به دست می‌آورند. در روش آن‌ها آسیب میکروسکوپی فقط به صورت موضعی در مرز بین الیاف و ماتریس رخ می‌دهد و ترک قادر به رشد در میان ماتریس نیست. کرفریدن و همکارانش [۱۷]، جدایش در لایه‌های کامپوزیت‌ها را به صورت سه‌بعدی به کمک روش چند مقیاسی تقسیم حوزه‌ها<sup>۲</sup> مورد بررسی قرار داده‌اند. برخلاف روش  $FE^2$  که میانگینی از مقیاس میکروسکوپی را به دست می‌دهد، روش تقسیم حوزه‌ها به‌طور مستقیم ساختار میکروسکوپی را مدل می‌کند و برای کاهش هزینه و زمان محاسبات، ناحیه میکروسکوپی مورد بررسی را به بخشی از جسم محدود کرده که پراهمیت‌تر است. ورهوسل و گوتیرز [۱۸]، به مطالعه رشد ترک در مرزدانه‌ها و دانه‌ها در مواد پیزوالکتریک پرداخته‌اند. آن‌ها از روابط معروف نیرو-جدایش نیدلمن-ژو [۱۹] برای مدل‌سازی میکروتُرک‌ها استفاده کرده و مدل‌سازی را فقط در مقیاس میکروسکوپی

<sup>۱</sup> eXtended Finite Element Method (XFEM)

<sup>۲</sup> Domain Decomposition Method (DDM)

دانه‌های ریزساختار به‌صورت یک ماده همگن آیزوتروپیک و مرز بین کریستال‌ها به‌صورت یک ترک چسبناک با ضخامت صفر در نظر گرفته می‌شوند. دانه‌ها ترک بر نمی‌دارند و ترک‌ها فقط در مرز دانه‌ها به وجود می‌آیند که به کمک معادلات ترک چسبناک غیرخطی مدل می‌شوند. مسئله به‌صورت دوبعدی بررسی شده و برای رابطه کرنش-جابجایی روابط کرنش-ناچیز در نظر گرفته می‌شود. آنگاه شکل تضعیف شده معادله حاکم بر این ساختار در حوزه  $\Omega$  به‌صورت رابطه (۱) خواهد بود [۲۸]:

$$\int_{\Omega/\Gamma} \sigma \cdot \varepsilon(\delta u) d\Omega + \int_{\Gamma} T \cdot [[\delta u]] d\Gamma = 0, \quad (1)$$

که  $\sigma$  شکل برداری تنش کوشی،  $\varepsilon$  شکل برداری کرنش،  $T$  بردار ترکشن در مرز دانه‌ها و  $[[u]]$  میزان جدایش مرز دانه‌ها در مختصات اصلی است. قرارگرفته  $\delta$  در کنار هر متغیر نشان‌دهنده تغییرات تابعی<sup>۲</sup> آن متغیر در دامنه مسئله است، به‌طوری‌که در مرزهای جابجایی  $\delta u = 0$  است. شرایط مرزی معادله فوق در بخش‌های بعدی به تفصیل بیان خواهد شد.

## ۲-۱- خواص مکانیکی دانه‌ها

هر دانه کریستال به‌صورت یک ماده همسانگرد دوبعدی در نظر گرفته می‌شود که روابط حاکم بر آن به شکل زیر است:

$$\sigma = C \varepsilon \quad (2)$$

که  $C$  ماتریس سفتی دانه‌ها است که در حالت تنش صفحه‌ای در نظر گرفته شده‌اند:

$$C = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (1-\nu)/2 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

که  $E$  و  $\nu$  به ترتیب مدول الاستیک و نسبت پواسون می‌باشند. از آنجاکه هدف این تحقیق، مطالعه اثر آسیب‌های اولیه بر رفتار ساختار میکروسکوپی است، لذا برای جلوگیری از پیچیده شدن مسئله، شکل دانه‌ها یکسان در نظر گرفته می‌شوند. برای بررسی اثر اندازه و شکل دانه‌ها می‌توان به کار انجام شده در [۱۳] اشاره کرد.

میکروتُرک‌ها قبل از بارگذاری صفر  $d = 0$  در نظر گرفته شده که با اعمال بار اتصال بین دانه‌ها رو به زوال می‌گذارد و مقدار پارامتر تخریب در آن‌ها با افزایش بار افزایش می‌یابد. آن‌ها اثر پارامترهای میکروسکوپی را بر خواص الاستیکی ماکروسکوپی و همچنین نمودار صفحه تسلیم<sup>۱</sup> ماکروسکوپی بررسی نموده‌اند.

در اکثر مطالعات انجام شده، روش همگن‌سازی عددی به مطالعه ناهمگنی‌ها در ریزساختار پرداخته و به‌ندرت وجود ترک در ریزساختار حجم نمونه را در نظر گرفته‌اند. به‌عنوان ادامه کار [۲۷]، در این مطالعه فرض می‌شود که میکروساختار قبل از بارگذاری دارای آسیب‌های اولیه در برخی از مرز دانه‌هاست که به کمک پارامتر تخریب  $d = 1$  مدل می‌شوند. سپس با استفاده از همگن‌سازی عددی، تأثیر شکل این آسیب‌های اولیه بر استحکام نهایی نمونه بررسی می‌شود. ساختار میکروسکوپی ماده به‌صورت توده‌ای از دانه‌های بلوره‌ای همسانگرد در نظر گرفته شده و مرز بین دانه‌ها تنها محل جوانه‌زنی و رشد میکرو ترک‌ها است. با استفاده از روش همگن‌سازی عددی خواص ماکروسکوپی ماده از خواص میکروسکوپی آن استخراج می‌شود. این مدل‌سازی با استفاده از کد اجزا محدود غیرخطی نوشته شده در محیط نرم‌افزار MATLAB انجام می‌شود.

در ادامه این مقاله، ابتدا به معرفی معادلات، خواص مکانیکی و روابط حاکم بر ریزساختار پلی کریستالی در نظر گرفته شده پرداخته خواهد شد. در بخش سوم، روش همگن‌سازی عددی معرفی شده و شرایط مرزی اعمال شده بر آن بیان می‌شود. در بخش چهارم، حجم نمونه‌های در نظر گرفته شده برای همگن‌سازی معرفی شده و نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی تفسیر و تحلیل می‌شوند.

## ۲- میکروساختار پلی کریستال‌ها

در این مطالعه، ساختار میکروسکوپی  $\Omega$  با مرز  $\partial\Omega$  از دانه‌های کریستال  $\Omega_i$  تشکیل شده است که در ابتدا فرض می‌شود، بدون وجود هرگونه آسیب اولیه‌ای در مرز دانه‌ها  $\Gamma_i$  در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند (شکل ۱). جنس و رفتار مکانیکی

<sup>2</sup> Functional Variation

<sup>1</sup> Yield Surface

عمودی یکسان و به صورت تابعی از میزان بازشدگی ترک در راستاهای عمودی و مماسی در نظر گرفته می‌شود [۲۹]:

$$d = 1 - \sqrt{1 - \kappa},$$

$$\kappa = \min(1, \max(\kappa_{old}, \kappa_{eff})),$$

$$\kappa_{eff} = \sqrt{\left(\frac{\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket}{\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket_f}\right)^2 \mathcal{H}(\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket) + \left(\frac{\llbracket \tilde{u}_t \rrbracket}{\llbracket \tilde{u}_t \rrbracket_f}\right)^2} \quad (۶)$$

که  $\kappa_{old}$  مقدار  $\kappa$  در گام زمانی قبلی است. در روابط بالا زیرنویس  $f$  بیانگر حالتی است که نیرویی در مرز بین دو دانه وجود ندارد و ترک کامل تشکیل می‌شود. حضور تابع هویساید  $\mathcal{H}$  در روابط بالا مانع از افزایش مقدار پارامتر تخریب  $d$  به هنگام بسته شدن ترک در راستای عمودی می‌شود و چنانچه در گام‌های بعدی بارگذاری مقدار  $\kappa_{eff}$  کمتر از مقدار  $\kappa_{old}$  گردد، تابع  $\max$  مانع از کاهش پارامتر تخریب  $d$  می‌شود. مقدار بیشینه بازشدگی ترک چسبناک در راستاهای عمودی و برشی  $\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket_f$  و  $\llbracket \tilde{u}_t \rrbracket_f$  که سبب ایجاد ترک کامل می‌شود به کمک رابطه ۷ به دست می‌آیند [۲۸].

$$\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket_f = \alpha \frac{G_{Ic}}{\sigma_{max}}, \quad \llbracket \tilde{u}_t \rrbracket_f = \alpha \frac{G_{IIc}}{\tau_{max}}. \quad (۷)$$

همچنین رابطه بین  $k_n$  و  $k_t$  ( $G_{Ic}$  و  $G_{IIc}$ ) به صورت (۸) داده شده است [۲۸]:

$$k_n^+ = \beta \frac{\sigma_{max}^2}{G_{Ic}}, \quad k_n^- = 100k_n^+, \quad k_t = \beta \frac{\tau_{max}^2}{G_{IIc}}, \quad (۸)$$

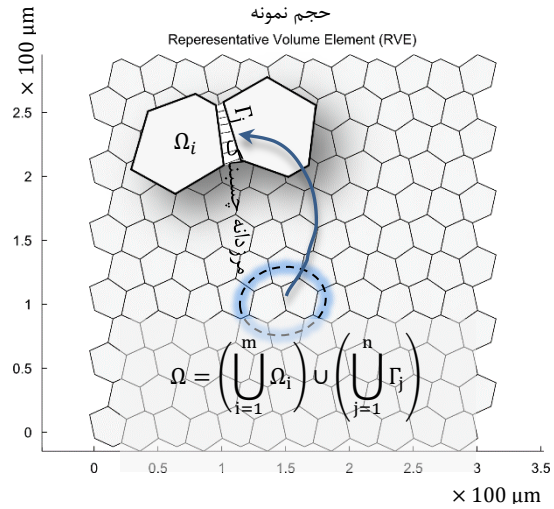
که مقادیر  $\alpha$  و  $\beta$  عبارتند از

$$\alpha = (n + 2) \left(\frac{n}{1+n}\right)^n, \quad \beta = \frac{1+n}{2+n} \left(\frac{1+n}{n}\right)^{2n} \quad (۹)$$

در این مطالعه مقدار  $n = 0.5$  در نظر گرفته شده است. خواص میکروسکوپی در نظر گرفته شده در این مقاله در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱- خواص میکروسکوپی پلی کریستال [۲۷]

$E = ۳۸۴/۶$ GPa	مدول یانگ	خواص
$\nu = 0.۲۴$	نسبت پواسون	مکانیکی
$l_g = ۲۵$ $\mu\text{m}$	طول مشخصه بلوره	بلوره‌ها
$\sigma_{max} = \tau_{max} = ۱$ GPa	تنش‌های بیشینه عمودی و برشی	خواص مرز چسبناک
$G_{Ic} = G_{IIc} = ۳۵$ J/m <sup>2</sup>	انرژی‌های شکست مودهای I و II	بلوره‌ها



شکل ۱- حجم نمونه‌ای از ساختار میکروسکوپی با ۱۴۴ کریستال

## ۲-۲- روابط حاکم بر مرزدانه‌ها

برای مدل‌سازی مرز بین کریستال‌ها از المان‌های چهارگره‌ای با ضخامت صفر استفاده می‌شود که رابطه بین تنش‌های سطح ترک  $\tilde{T} = [\tilde{T}_n \quad \tilde{T}_t]^T$  و میزان بازشدگی ترک  $\llbracket \tilde{u} \rrbracket = [\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket \quad \llbracket \tilde{u}_t \rrbracket]^T$  در مختصات محلی با رابطه (۴) خواهد بود:

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} \tilde{K}_n & 0 \\ 0 & \tilde{K}_t \end{bmatrix} \llbracket \tilde{u} \rrbracket, \quad (۴)$$

که  $n$  و  $t$  نشان‌دهنده خواص در راستاهای عمود و مماس بر المان چسبناک است. انتقال این متغیرها از دستگاه مختصات محلی به دستگاه مختصات اصلی به کمک روابط مثلثاتی صورت می‌گیرد که جزئیات آن در مرجع [۲۷] آمده است. ضرایب ماتریس سفتی مرزدانه به شکل رابطه (۵) تعریف می‌شود [۲۹]:

$$\tilde{K}_n = (1 - d)k_n^+ \mathcal{H}(\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket) + k_n^- \mathcal{H}(-\llbracket \tilde{u}_n \rrbracket), \quad (۵)$$

$$\tilde{K}_t = (1 - d)k_t,$$

که  $k_n$  و  $k_t$  ضرایب سفتی اولیه ترک چسبناک به ترتیب در راستای عمودی و راستای مماسی ترک هستند. برای راستای عمودی دو ضریب سفتی  $k_n^+$  و  $k_n^-$  در نظر گرفته می‌شود که  $k_n^-$  چندین برابر  $k_n^+$  است تا مانع از نفوذ کریستال‌ها در یکدیگر شوند. پارامتر آسیب  $d \in [0, 1]$  تعیین‌کننده مقدار تخریب اتصال چسبناک است که برای هر دو جهت مماسی و

مقادیر  $\sigma_{max}$  و  $\tau_{max}$  بیشتر مقدار تنش‌های عمودی و برشی هستند که مرز دانه‌ها می‌توانند تحمل کنند؛ همچنین انرژی‌های لازم برای جدایش کامل دو کریستال از یکدیگر در موده‌های شکست I و II به ترتیب با  $G_{IIc}$  و  $G_{Ic}$  مشخص شده‌اند.

### ۳- همگن‌سازی عددی

حجم نمونه‌ای<sup>۱</sup> از ساختار میکروسکوپی که بتوان آن را نمونه‌ای از کل دانست در نظر گرفته می‌شود (شکل ۱). هر چه اندازه حجم نمونه بزرگ‌تر باشد، میانگینی که از رفتار ریزساختار به دست می‌آید دقیق‌تر خواهد بود؛ اما با افزایش اندازه آن هزینه محاسبات به‌صورت توانی افزایش خواهد یافت؛ بنابراین لازم است که کوچک‌ترین اندازه ممکن حجم نمونه را طوری تعیین کرد که خطا در محدوده قابل قبولی باقی بماند. بدین منظور اندازه حجم نمونه به‌عنوان یک متغیر به کمک روش‌های آماری بهینه می‌شود. در مطالعات قبلی بر روی ساختارهای کریستالی [۲۷] نشان داده شد که با در نظر گرفتن تعداد ۱۴۴ دانه (۱۲×۱۲) برای حجم نمونه نتایج همگرا خواهند شد و اندازه بزرگ‌تر حجم نمونه به‌جز بالا بردن زمان محاسبات تأثیر قابل‌توجهی بر نتایج نخواهد داشت؛ لذا در این مقاله نیز اندازه حجم نمونه برابر با ۱۴۴ دانه در نظر گرفته می‌شود.

همچنین در این مطالعه به‌منظور افزایش سرعت محاسبات و سهولت در ایجاد مش سازگار با هندسه پیچیده کریستال‌ها، از المان‌های دوبعدی مثلثی خطی با سه گره و یک نقطه انتگرال‌گیری برای حجم کریستال‌ها و از المان‌های چسبناک چهار گرهی خطی با ضخامت صفر و دو نقطه انتگرال‌گیری برای مرز دانه‌ها استفاده شده است. با توجه به اینکه رابطه تنش سطحی و جدایش دانه‌ها خطی نیست، لذا برای افزایش دقت انتگرال‌گیری در المان‌های چسبناک باید بیش از یک نقطه انتگرال‌گیری در نظر گرفته شود. بک و همکارانش [۳۰] در یک تحقیق به بررسی اثر تعداد نقاط انتگرال‌گیری در المان‌های چسبناک دو بعدی بر دقت و پایداری حل مسائل رشد ترک و تورق در آزمون جدایش

جفت تیر یکسر گیردار پرداخته‌اند. آن‌ها نشان می‌دهند که استفاده از چهار (۲×۲) نقطه انتگرال‌گیری برای المان‌های بزرگ سبب ایجاد خطا و ناپایداری حل هنگام رشد ترک می‌شود و پیشنهاد کرده‌اند که در مسائل مربوط به رشد ترک‌های چسبناک باید بیش از ۴ نقطه انتگرال‌گیری استفاده شود. از آنجاکه در این تحقیق، رشد میکروتُرک‌ها مدنظر نبوده و مدل‌سازی‌ها در لحظه شروع رشد ترک متوقف می‌شوند، لذا مشکل ناپایداری حل به وجود نیامده و برای جلوگیری از افزایش زمان محاسبات از دو نقطه انتگرال‌گیری برای محاسبه نیروی داخلی و سفتی المان‌های چسبناک استفاده شده است.

### ۳-۱- شرط هیل-مندل

شرط هیل-مندل<sup>۲</sup> [۹] یا شرط همگنی ماکروسکوپی<sup>۳</sup> ارتباط بین ساختار میکروسکوپی و ماکروسکوپی را مجاز می‌داند، به شرطی که کار مجازی انجام شده بر واحد حجم در هر نقطه دلخواه از مقیاس ماکروسکوپی با مقدار متوسط آن در حجم نمونه میکروسکوپی برابر باشد. به بیانی دیگر به شرطی می‌توان مقیاس ماکروسکوپی ماده را به‌صورت همگن در نظر گرفت که شرط هیل-مندل برقرار باشد؛ لذا برای مسئله ما که شامل ترک‌های چسبناک در مرز دانه‌ها است، شرط هیل-مندل به‌صورت زیر خواهد بود [۳۱]:

$$\sigma^M : \delta \varepsilon^M = \frac{1}{\Omega} \left( \int_{\Omega} \sigma : \delta \varepsilon \, dV + \int_{\Gamma} T \otimes [\delta u] \, d\Gamma \right), \quad (10)$$

که  $\sigma$  و  $\varepsilon$  به ترتیب تانسورهای تنش و کرنش بوده و حرف بالانویس M بیانگر مقیاس ماکروسکوپی است. حجم حجم نمونه (در حالت سه‌بعدی) و مساحت آن (در حالت دوبعدی) برابر  $\Omega$  است و  $\Gamma$  ناحیه مرز دانه‌هاست.

برای به دست آوردن خواص مکانیکی همگن شده، مسئله‌ای در مقیاس میکروسکوپی (حجم نمونه) تعریف کرده و پاسخ آن را به ازای شرایط مرزی‌های مختلف تعیین می‌کنند. البته لازم است، شرایط مرزی به‌گونه‌ای تعریف شود که با شرط هیل-مندل سازگار باشد؛ لذا معمولاً با فرض برابر

<sup>2</sup> Hill-Mandel Conditions

<sup>3</sup> Macrohomogeneity Condition

<sup>1</sup> Representative Volume Element (RVE)

شرایط مرزی جابجایی را می‌توان به‌گونه‌ای تعیین کرد که نیروهای عکس‌عملی و انرژی الاستیک ذخیره شده در حجم نمونه را به کمک رابطه (۸) و شرط هیل-مندل به تنش و ماتریس سفتی ماکروسکوپی ارتباط داد. در ادامه، روابط مورد نیاز برای تبادل داده‌ها بین مقیاس‌های میکرو و ماکرو، بر اساس معادلات (۷) تا (۹) و در چارچوب حل المان محدود ارائه می‌شود.

از المان‌های دوبعدی مثلثی سه‌گره‌ای با یک نقطه - انتگرال‌گیری برای مش‌بندی دانه‌های کریستال و از المان‌های چسبناک یک‌بعدی خطی با چهار گره و دونقطه انتگرال‌گیری برای مدل‌سازی مرزدانه‌ها،  $\Gamma_i$  استفاده می‌شود. شرایط مرزی جابجایی که به گره‌های واقع بر مرز حجم محدود  $\partial\Omega$  اعمال می‌شود، به‌صورت رابطه (۱۳) است [۳۱]:

$$\mathbf{u}_D = \boldsymbol{\varepsilon}^M \cdot \mathbf{x}_D, \quad (13)$$

که  $\mathbf{x}_D$  مختصات در مقیاس ماکروسکوپی و  $\mathbf{u}_D$  میزان جابجایی اعمالی برای هر نقطه واقع بر مرز  $\partial\Omega$  است. می‌توان نشان داد، رابطه فوق، تعارضی با رابطه (۱۲) ندارد. در رابطه فوق مقدار تانسور  $\boldsymbol{\varepsilon}^M$  به‌عنوان داده ورودی از مقیاس ماکروسکوپی آمده است. این تانسور در یک مسئله دوبعدی دارای دو مؤلفه مستقل کرنش‌های اصلی  $\varepsilon_1^M, \varepsilon_2^M$  است که در هر گام زمانی تغییر می‌کنند. پس از اعمال شرایط مرزی فوق و حل معادله (۱) به روش اجزا محدود دو خروجی به دست می‌آید: (۱) نیروی‌های عکس‌العمل در هر گره مرزی (۲) ماتریس سفتی ماکروسکوپی  $\mathbf{C}^M$  که در واقع شکل مماسی ماتریس سفتی است  $\mathbf{C}^M = \frac{\delta \boldsymbol{\sigma}^M}{\delta \boldsymbol{\varepsilon}^M}$  (شکل ۲). با قراردادن نیروهای عکس‌عملی در رابطه (۱۱)، تانسور تنش ماکروسکوپی به دست می‌آید. نحوه به دست آوردن ماتریس سفتی ماکروسکوپی  $\mathbf{C}^M$  نیز که ارتباط بین شکل برداری تنش و کرنش ماکروسکوپی را برقرار می‌کند، در مرجع [۲۸] به‌تفصیل بیان شده است. هرگاه یکی از ترک‌های چسبناک مرز دانه‌ها به نقطه استحکام نهایی خود برسد، ماتریس سفتی مماسی متناظر با آن المان برابر یا کمتر از صفر خواهد شد. همین امر سبب ناپایداری حل و کاهش ناگهانی مقادیر ویژه ماتریس سفتی ماکروسکوپی می‌شود. در این لحظه است که می‌توان گفت، حجم نمونه استحکام خود را از دست داده و به نقطه تسلیم نمونه رسیده است.

بودن میانگین میدان‌های تنش و کرنش در حجم نمونه با مقادیر این میدان‌ها در مقیاس ماکروسکوپی، شرایط مرزی‌هایی را به دست می‌آورند که با شرط هیل-مندل سازگارند [۳۱]. رابطه بین تنش ماکروسکوپی  $\boldsymbol{\sigma}^M$  و میانگین تنش ماکروسکوپی  $\boldsymbol{\sigma}$  به شکل رابطه (۱۱) است [۳۱]:

$$\boldsymbol{\sigma}^M = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} dV = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \otimes \mathbf{x} d\Gamma, \quad (11)$$

که  $\mathbf{t}$  بردار تنش وارد بر سطح بیرونی حجم نمونه و  $\mathbf{x}$  بردار مکان در مختصات محلی حجم نمونه است. رابطه بین کرنش ماکروسکوپی  $\boldsymbol{\varepsilon}^M$  و میانگین کرنش ماکروسکوپی  $\boldsymbol{\varepsilon}$  در حضور میکروتُرک‌ها به کمک جابجایی  $\mathbf{u}$  در مرز حجم نمونه به دست می‌آید [۳۱]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^M = \frac{1}{2\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} + (\mathbf{u} \otimes \mathbf{n})^T d\Gamma. \quad (12)$$

که  $\mathbf{n}$  بردار یکه عمود بر مرز حجم نمونه و در جهت بیرون آن و  $\otimes$  عملگر مولد تانسور است.

### ۳-۲- اعمال شرایط مرزی حجم نمونه

در همگن‌سازی عددی سه روش مرسوم اعمال شرایط مرزی به حجم نمونه وجود دارد که عبارت‌اند از (۱) جابجایی<sup>۱</sup> (۲) ترکشن<sup>۲</sup> (۳) متناوب<sup>۳</sup>. مطالعات نشان داده است که فارغ از نوع شرایط مرزی اعمالی، با افزایش اندازه حجم نمونه‌ها مقدار خواص همگن شده به یک مقدار همگرا می‌شود. البته با اعمال شرایط مرزی متناوب، همگرایی در اندازه‌های کوچک‌تر حجم نمونه رخ می‌دهد [۳۲]. در این مطالعه با توجه به هندسه نامتعارف حجم نمونه بکار گرفته شده، شرایط مرزی جابجایی، برای انجام همگن‌سازی عددی بر مرزهای حجم نمونه اعمال می‌شود.

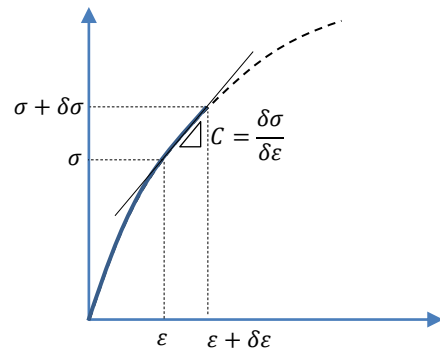
در روش همگن‌سازی عددی، با اعمال شرایط مرزی جابجایی بر تمامی مرز حجم نمونه و حل آن سه خروجی مهم به دست می‌آید که شامل (۱) نیروهای عکس‌عملی در مرزها (۲) انرژی الاستیک ذخیره شده (۳) نحوه توزیع پارامترهای ماکروسکوپی مانند آسیب‌ها، تغییر شکل‌های پلاستیک و ... در حجم نمونه است. با استفاده از معادله (۹)،

<sup>1</sup> Displacement Boundary Condition

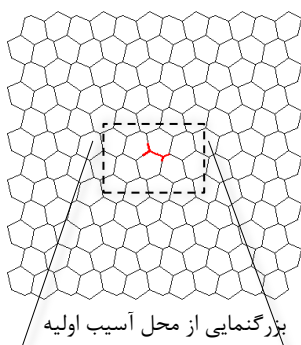
<sup>2</sup> Traction Boundary Condition

<sup>3</sup> Periodic Boundary Condition

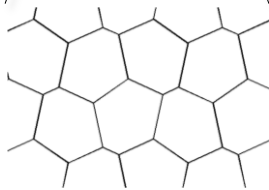
پدیده بر پاسخ همگن‌سازی عددی با افزایش اندازه حجم نمونه‌ها کاهش می‌یابد [۳۲]. البته افزایش اندازه حجم نمونه سبب افزایش تصاعدی حجم محاسبات می‌شود؛ لذا معمولاً اندازه حجم نمونه تا حدی افزایش می‌یابد که افزایش بیشتر از آن اثر چشمگیری بر مقادیر استحکام و سفتی به‌دست آمده از همگن‌سازی عددی نداشته باشد. همان‌طور که پیشتر گفته شد، اندازه مناسب حجم نمونه‌ها در کارهای قبلی نویسنده برابر ۱۴۴ دانه کریستال به دست آمده است [۲۷].



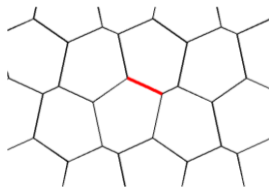
شکل ۲- شماییک سفتی مماسی  $C$  در نمودار تنش- کرنش



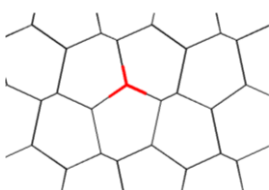
حجم نمونه با ۱۴۴ دانه



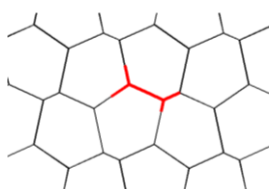
بدون آسیب اولیه



آسیب اولیه I شکل



آسیب اولیه Y شکل



آسیب اولیه YY شکل

شکل ۳- شکل‌های مختلف آسیب اولیه در مرکز هندسی

#### ۴- نتایج و بحث

در شکل ۳ یک حجم نمونه با انواع مختلف آسیب اولیه نشان داده شده است. این آسیب‌های اولیه در ناحیه مرکزی حجم نمونه قرار دارند که در ادامه، تأثیر هر یک از این آسیب‌های اولیه بر رفتار ماکروسکوپی ماده بررسی می‌شود.

طبق رابطه ۱۳، کرنش ماکروسکوپی شرایط مرزی جابجایی حجم نمونه را تعیین می‌کند. برای آنکه بتوان سطح تسلیم ماکروسکوپی را ترسیم کرد، شرایط مرزی بر اساس کرنش‌های اصلی ماکروسکوپی (تنش برشی صفر  $\epsilon_{xy}^M = 0$ ) تعیین می‌شود.

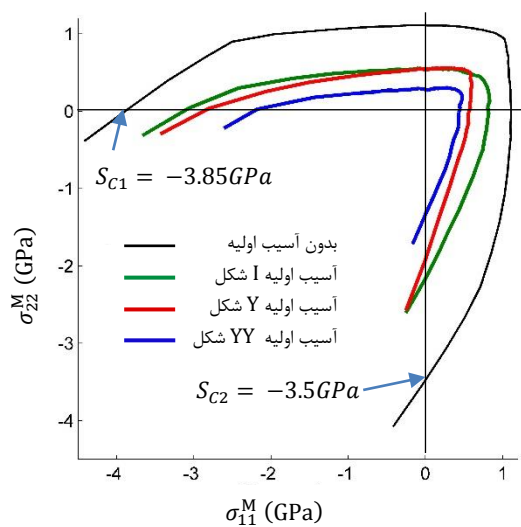
رابطه بین کرنش‌های اصلی  $\epsilon_1^M$  و  $\epsilon_2^M$  به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\begin{aligned} \epsilon_1^M &= \epsilon_i^M \cos \theta, \\ \epsilon_2^M &= \epsilon_i^M \sin \theta, \\ \gamma_{12}^M &= 0, \end{aligned} \quad (14)$$

که  $165^\circ \leq \theta \leq 75^\circ$  و  $\epsilon_i^M$  ضریبی است که با افزایش گام‌های بارگذاری  $i$  تا لحظه شکست حجم نمونه افزایش می‌یابد. در شکل ۴ توزیع تنش فون-میسز در لحظه تسلیم یک حجم نمونه با آسیب اولیه YY شکل نشان داده شده است که تحت بارگذاری دو محوره متقارن قرار دارد. همان‌گونه که انتظار می‌رود، بیشترین مقدار تنش در نوک شاخه‌های آسیب اولیه ظاهر می‌شود.

همچنین در شکل ۴ نوسانات ناخواسته تنش در مرزها قابل مشاهده است. که با عنوان عوارض شرایط مرزی همگن‌سازی عددی شناخته می‌شود. عوارض و اثرات این



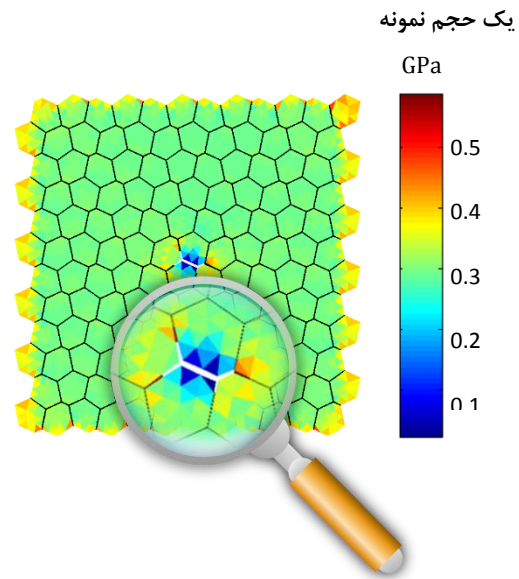


شکل ۵- معیارهای شکست به دست آمده از روش همگن سازی عددی

جدول ۱- نسبت تنش های تسلیم در راستاهای اصلی

نسبت $\frac{S_{C1}}{S_{C2}}$	نسبت $\frac{S_{T1}}{S_{T2}}$	نوع حجم نمونه
۱/۱	۰/۹۹۶	بدون آسیب اولیه
۱/۴۲	۱/۴۷	آسیب اولیه I شکل
۱/۴۶	۱/۰۳	آسیب اولیه Y شکل
۱/۶۳	۱/۵۱	آسیب اولیه YY شکل

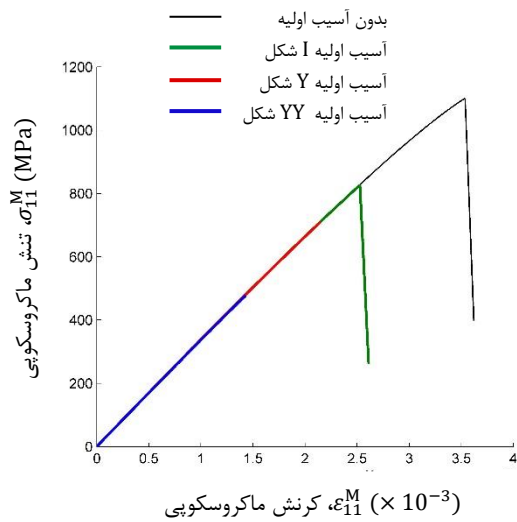
بر اساس این نتایج، در حجم نمونه بدون آسیب اولیه نسبت استحکام‌های کششی در هر دو راستای اصلی تقریباً برابرند. در حضور ترک I شکل استحکام‌های کششی و فشاری در راستای ۱ تقریباً ۴۵ درصد بیش از استحکام‌های متناظر در راستای ۲ است. دلیل این امر جهت قرارگیری آسیب اولیه I شکل است که با راستای اصلی ۱ همسو بوده و سبب می‌شود، حجم نمونه در راستای ۲ بیشتر تضعیف گردد. در حجم نمونه با آسیب Y شکل، تنش‌های کششی دو راستای اصلی تقریباً برابرند و این می‌تواند به دلیل متقارن بودن آسیب اولیه‌ی Y شکل باشد؛ اما با حضور آسیب اولیه YY شکل، مجدداً استحکام کششی در راستای ۱ بیش از استحکام راستای ۲ می‌شود.



شکل ۴- تنش فون-میسز در دانه‌ها و تنش سطحی در مرز دانه‌های یک حجم نمونه با آسیب اولیه YY شکل تحت بارگذاری کششی دوماحوره  $(\theta = 45^\circ), \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$

برای به دست آوردن سطح تسلیم، تنش در راستاهای اصلی در لحظه شکست حجم نمونه و به ازای مقادیر مختلف  $\theta$  در مقابل یکدیگر رسم می‌شود (شکل ۵). همان‌طور که انتظار می‌رود، سطح شکست در حالت بدون آسیب اولیه در هر دو بارگذاری کششی و فشاری استحکام بیشتری را نشان می‌دهد و طبق انتظار با افزایش اندازه آسیب اولیه استحکام کاهش یافته و در نتیجه سطح معیار شکست کوچک‌تر می‌شود.

نکته دیگری که در این نمودارها قابل مشاهده است، نامتقارن بودن سطح معیار تسلیم است که ناشی از نابرابری تنش تسلیم در راستاهای اصلی ۱ و ۲ است. برای مثال تنش تسلیم فشاری در راستای ۱ که با  $S_{C1}$  نمایش داده شده است از نظر اندازه از تنش تسلیم فشاری راستای ۲،  $S_{C2}$  بزرگ‌تر است. یکی از دلایل این پدیده نحوه چیدمان دانه‌ها است. این چیدمان به‌گونه‌ای است که مرز دانه‌ها در راستای افقی مسیر هموارتری را برای رشد ترک نسبت به راستای عمودی ایجاد می‌کنند. نسبت تنش‌های تسلیم کششی  $\frac{S_{T1}}{S_{T2}}$  و همچنین نسبت تنش‌های تسلیم فشاری  $\frac{S_{C1}}{S_{C2}}$  به ازای شکل‌های مختلف آسیب اولیه در جدول ۱ آمده است.



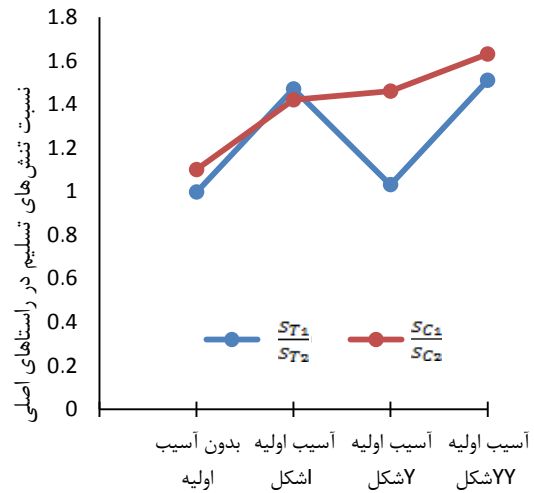
شکل ۷- تأثیر اشکال مختلف آسیب اولیه بر منحنی تنش- کرنش ماکروسکوپی

همگن سازی تحلیلی انجام شد، نتایج مشابهی به دست آمده است. مطابق شکل ۸ در آن تحقیق نشان داده می شود که اندازه ترک اثری بر شیب نمودار تنش-جابجایی ندارد و به طور مشابه با افزایش اندازه ترک استحکام شکست کاهش می یابد.

در شکل ۹ اثر اندازه دانه های کریستال بر تنش و کرنش شکست نشان داده شده است. این نمودار با فرض عدم وجود آسیب های اولیه به دست آمده است. طبق این نمودار، با کاهش اندازه دانه ها به مقادیر کمتر از  $10 \mu m$ ، استحکام تنشی و کرنشی شکست از دیدگاه ماکروسکوپی با شیب تندی افزایش می یابد. از سوی دیگر با افزایش اندازه دانه ها استحکام های تنشی و کرنشی هر یک به سمت یک مقدار مجانب می شوند. در این مقاله اندازه دانه ها  $25 \mu m$  در نظر گرفته شده است.

### ۵- نتیجه گیری

در این مقاله اثرات میکروتُرک های اولیه بر استحکام و مدول الاستیسته ی یک ماده با ساختار پلی کریستالی مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور از روش همگن سازی عددی برای همگن سازی رفتار یک حجم نمونه شامل ۱۴۴ دانه الاستیک خطی با مرز دانه هایی از نوع چسبناک غیرخطی به ضخامت صفر استفاده شده است. سه نوع ترک اولیه به صورت I شکل،



شکل ۶- تغییر نسبت تنش های تسلیم در راستای اصلی به ازای اشکال مختلف آسیب اولیه

در شکل ۶ نمودار نسبت استحکام کششی (فشاری) در راستای ۱ به همان استحکام ها در راستای ۲ نمایش داده شده است و نشان می دهد که آسیب های Y شکل تأثیر بیشتری در ناهمسانگردی تنش تسلیم فشاری دارد. به طور کلی می توان نتیجه گرفت که شکل و زاویه قرارگیری یک آسیب اولیه می تواند سبب ناهمسانگردی استحکام ماکروسکوپی مواد گردد. این پدیده در شکست ناشی از خستگی نیز حائز اهمیت است؛ چراکه معمولاً راستای میکروتُرکها عمود بر راستای بارهای متناوب بوده و همین امر سبب می شود، در یک ماده همسانگرد، شکل سطح معیار تسلیم در اثر خستگی از حالت متقارن به نامتقارن تبدیل شود. در نامتقارن شدن معیار تسلیم و رفتار ناهمسانگرد ماده در اثر آسیب های میکروسکوپی ناشی از خستگی مورد بررسی قرار گرفته است [۳۳-۳۵].

در شکل ۷ اثر آسیب های اولیه بر مدول الاستیسته نشان داده شده است. بر اساس این شکل وجود ترکها تأثیری بر فرم کلی منحنی تنش-کرنش ماکروسکوپی ندارد؛ لذا نمی توان به کمک مدول الاستیسته ماده اندازه میکروتُرکها را پیش بینی کرد.

در یک تحقیق که توسط داسکالو و همکارانش [۳۶] برای بررسی اثر میکروتُرکها و اندازه آنها بر رفتار ماکروسکوپی یک ماده الاستیک خطی با استفاده از روش

ماتریس سفتی ماکروسکوپی، خواص استحکامی ماکروسکوپی را نیز از مدل‌های میکروسکوپی ماده استخراج نماید.

### ۶- قدردانی

این مقاله از طرح پژوهشی با عنوان "مدل‌سازی دو مقیاسی مواد کامپوزیتی با ریزساختار بلوره‌ای: تأثیر میکروترک‌ها بر رفتار ماکروسکوپی" مستخرج شده است که تحت حمایت دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرمانشاه است.

### ۷- مراجع

[۱] مهرداد شکریه م، زین الدینی ا (۱۳۹۴) مدل‌سازی چقرمگی شکست تورق مود ترکیبی اول و دوم در نمونه یکسر گیردار دو لبه نامتقارن کامپوزیت‌های لایه‌ای. مدل‌سازی در مهندسی ۱۱-۱: ۴۱.

[۲] سلیمانی م، طهانی م، زمانی پ (۱۳۹۷) بررسی اثر ناحیه غنی از رزین بر رشد ترک در هسته فومی پره کامپوزیتی توربین بادی به روش المان محدود. مجله مکانیک سازه‌ها و شماره‌ها ۳۸-۲۷: ۸(۴).

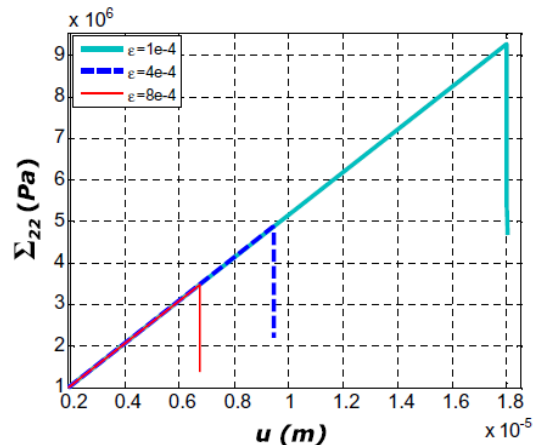
[۳] رحیم نژاد م، وحیدی ب، ابراهیمی حسین زاده ب، یزدیان ف (۱۳۹۸) شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برهم‌کنش داروی ضد سرطان پاکلیتاکسل با غشای سلولی: بررسی تغییرات انرژی و اندروالسی و فاصله مرکز جرم. مدل‌سازی در مهندسی ۲۵-۱۵: ۵۷.

[۴] یاسینی س، شریعتی م (۱۳۹۶) مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار کمانشی نانو سیم‌های سیلیسیم {۱۱۱} و {۱۰۰} با استفاده از روش مکانیک ساختاری. مدل‌سازی در مهندسی ۹۳-۸۵: ۵۰.

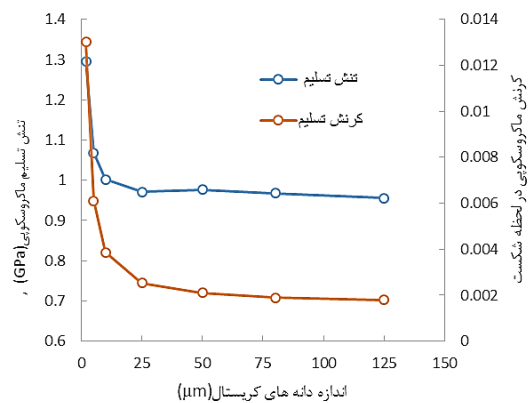
[۵] آلبویه علیرضا (۱۳۹۵) تحلیل عددی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های متخلخل مزوپروس سیلیکا و هیدروکسی آپاتیت-پلی پروپیلن. مجله مکانیک سازه‌ها و شماره‌ها ۳۰۹-۲۹۹: ۶(۳).

[6] Oskay C (2015) Multiscale modeling of the response and life prediction of composite materials. In Camanho PP, Hallett SR (eds.), Numerical Modelling of Failure in Advanced Composite Materials pp 351-375. Woodhead Publishing.

[۷] مهدوی م، بنی اسدی م، باغانی م (۱۳۹۵) بازسازی سه بعدی کامپوزیت نانولوله کربنی با استفاده از



شکل ۸- تأثیر میکروترک با طول مختلف بر منحنی تنش-جابجایی ماکروسکوپی (برگرفته از [۳۶])



شکل ۹- تأثیر اندازه دانه‌های کریستال بر تنش و کرنش ماکروسکوپی در لحظه تسلیم

شکل Y و YY شکل در مرکز هندسی حجم نمونه‌ها ایجاد شده و نتایج همگن‌سازی این نمونه‌ها با نمونه‌ی بدون آسیب اولیه مقایسه گردید. به‌طور خلاصه می‌توان گفت که وجود آسیب اولیه در یک ماده می‌تواند استحکام آن را به‌شدت کاهش دهد و سبب نامتقارن شدن نمودار سطح تسلیم آن گردد؛ همچنین آسیب‌های اولیه میکروسکوپی تأثیر معناداری بر مدول الاستیسیته ماده ندارند. لازم به ذکر است، علی‌رغم کاربرد وسیع روش‌های همگن‌سازی، پژوهشگران معمولاً این روش را برای استخراج ماتریس سفتی ماکروسکوپی مواد از خواص میکروسکوپی آن‌ها به کار می‌برند. این مطالعه نشان داد که روش همگن‌سازی عددی می‌تواند علاوه بر استخراج

- microstructural phenomena with X-FEM. *Comput Mater Sci* 50: 1145-1156.
- [21] Shabir Z, Giessen E Van Der, Duarte C a, Simone A, Van der Giessen E (2011) The role of cohesive properties on intergranular crack propagation in brittle polycrystals. *Model Simul Mater Sci Eng* 19: 035006.
- [22] Nguyen VP, Lloberas-valls O, Stroeven M, Sluys LJ (2012) Computational homogenization for multiscale crack modeling . Implementational and computational aspects. *Int J Numer Methods Eng* 89: 192-226.
- [23] Abbès F, Abbès B, Benkabou R, Asroun A (2020) A FEM multiscale homogenization procedure using nanoindentation for high performance concrete. *J Appl Comput Mech* 6: 493-504.
- [۲۴] یوسفی ا، بنی اسدی م، مهدوی م، باغانی م، فرجی ق (۱۳۹۷) شبیه‌سازی و بررسی نانو کامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی و نانو هلیکال‌های کربنی. *مهندسی عمران* ۱۰۲-۹۵: ۳۴.
- [25] Hajikazemi M, Sadr MH (2014) Stiffness reduction of cracked general symmetric laminates using a variational approach. *Int J Solids Struct* 51: 1483-1493.
- [26] Hun D, Guilleminot J, Yvonnet J, Bornert M (2019) Stochastic multi-scale modeling of crack propagation in random heterogeneous media. *Int J Numer Methods Eng* 119(13): 1-22.
- [27] Akbari A, Kerfriden P, Bordas S (2018) On the effect of grains interface parameters on the macroscopic properties of polycrystalline materials. *Comput Struct* 196: 355-368.
- [28] Akbari A (2014) Error controlled adaptive multiscale method for fracture in polycrystalline materials.
- [29] Allix O, Kerfriden P, Gosselet P (2010) On the control of the load increments for a proper description of multiple delamination in a domain decomposition framework . *Int J Numer Methods Eng* 11: 1518-1540.
- [30] Bak BL V, Lindgaard E, Lund E (2014) Analysis of the integration of cohesive elements in regard to utilization of coarse mesh in laminated composite materials. *Int J Numer Methods Eng* 99: 566-586.
- [31] Zohdi TI, Wriggers P (2008) An introduction to computational micromechanics. Springer.
- [32] Kouznetsova VG, Geers MGD, Brekelmans W a. M (2002) Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *Int J Numer Methods Eng* 54: 1235-1260.
- توابع آماری همبستگی. *مجله مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها* ۳۳-۴۲: ۶(۳).
- [8] Feyel F, Chaboche J (2000) FE<sup>2</sup> multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC / Ti composite materials. *Comput Methods Appl Mech Eng* 183: 309-330.
- [9] Hill R (1972) On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proc R Soc London A Math Phys Sci* 326: 131-147.
- [10] Ghosh S, Lee K, Raghavan P (2001) A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials. *Int J Solids Struct* 38: 2335-2385.
- [11] Miehe C, Becker M, Schruder J (2002) Computational homogenization analysis in finite elasticity: material and structural instabilities on the micro- and macro-scales of periodic composites and their interaction. *Comput Methods Appl Mech Eng* 191: 4971-5005.
- [12] Pivovarov D, Oberleiter T, Willner K, Steinmann P (2018) Fuzzy-stochastic FEM-based homogenization framework for materials with polymorphic uncertainties in the microstructure. *Int J Numer Methods Eng* 116: 633-660.
- [13] Vila-Ortega J, Ridruejo A, Martínez-Hergueta F (2020) Multiscale numerical optimisation of hybrid metal/nonwoven shields for ballistic protection. *Int J Impact Eng* 138: 103478.
- [14] Sukumar N, Srolovitz DJ, Baker TJ, Prā J (2003) Brittle fracture in polycrystalline microstructures with the extended finite element method. *Int J Numer Methods Eng* 2037: 2015-2037.
- [15] Wei Y, Anand L (2004) Grain-boundary sliding and separation in polycrystalline metals: application to nanocrystalline fcc metals. *J Mech Phys Solids* 52: 2587-2616.
- [16] Ghosh S, Bai J, Raghavan P (2007) Concurrent multi-level model for damage evolution in microstructurally debonding composites. *Mech Mater* 39: 241-266.
- [17] Kerfriden P, Allix O, P. Gosselet (2009) A three-scale domain decomposition method for the 3D analysis of debonding in laminates. *Comput Mech* 44: 343-362.
- [18] Verhoosel CV, Gutiérrez M a. (2009) Modelling inter- and transgranular fracture in piezoelectric polycrystals. *Eng Fract Mech* 76: 742-760.
- [19] Xu X-P, Needleman A (1994) Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids. *J Mech Phys Solids* 42: 1397-1434.
- [20] Menk A, Bordas SP a. (2011) Crack growth calculations in solder joints based on

- [35] Balachandramurthi AR, Moverare J, Hansson T, Pederson R (2020) Anisotropic fatigue properties of Alloy 718 manufactured by Electron Beam Powder Bed Fusion. *Int J Fatigue* 141: 105898.
- [36] Dascalu C, Bilbie G, Agiasofitou E (2008) Damage and size effects in elastic solids: A homogenization approach. *Int J Solids Struct* 45: 409-430.
- [۳۳] کلهر م، گنجیانی م، اعظمی ا (۱۳۹۷) بررسی تجربی رشد آسیب خستگی با استفاده از روش های سنجش تغییرات مدول و تری و میکروسختی در فولاد ضد زنگ ۳۱۶ کم کربن. مهندسی مکانیک امیرکبیر ۵۰: ۵۲۵-۵۳۲
- [34] Vijay A, Sadeghi F (2019) An anisotropic damage model for tensile fatigue. *Fatigue Fract Eng Mater Struct* 42: 129-142.