

POLITECHNIKA KRAKOWSKA
WYDZIAŁ INŻYNIERII LĄDOWEJ
INSTYTUT TECHNOLOGII INFORMATYCZNYCH
W INŻYNIERII LĄDOWEJ (L-5)

Numeryczna analiza
wybranych problemów mechaniki
ośrodków niejednorodnych

Autor: mgr inż. Ł. Kaczmarczyk

Promotor: prof. zw. dr hab. inż. Zenon Waszczyszyn, dr hc.

KRAKÓW 2006



Autor składa podziękowania prof. zw. dr hab. inż Zenonowi Waszczyszynowi za cierpliwość i pomoc udzieloną podczas tworzenia pracy oraz pracownikom Instytutu Technologii Informatycznych w Inżynierii Lądowej na Politechnice Krakowskiej za cenne uwagi w trakcie pisania pracy.



Spis treści

Wstęp	6
Oznaczenia	7
1 Wprowadzenie	10
1.1 Motywacja i cel pracy	10
1.2 Zakres i układ pracy	11
1.3 Metody modelowania materiałów niejednorodnych	11
2 Podstawowe równania i założenia	14
2.1 Ośrodek ciągły rzędu I	15
2.2 Ośrodek ciągły rzędu II	16
2.2.1 Ośrodek rzędu II zredukowany do ośrodka klasycznego	17
2.2.2 Ośrodek rzędu II zredukowany do ośrodka mikropolarnego	18
3 Metody uśredniania	20
3.1 Reprezentatywny element objętościowy	21
3.2 Uśrednianie dla kontinuum rzędu I	24
3.2.1 Mikro-makro kinematyka	24
3.2.2 Odkształcenia	25
3.2.3 Naprężenia	25
3.2.4 Praca wirtualna i warunki brzegowe	26
3.3 Uśrednianie dla kontinuum rzędu II	28
3.3.1 Mikro-makro kinematyka	28
3.3.2 Odkształcenia	29
3.3.3 Naprężenia	30
3.3.4 Praca wirtualna i warunki brzegowe	30
4 Metoda numerycznej homogenizacji	33
5 Metoda elementów skończonych w numerycznej homogenizacji	36
5.1 Sformułowanie MES dla kontinuum rzędu I	36
5.1.1 Przestrzenie funkcji aproksymujących i wagowych	36
5.1.2 Sformułowanie słabe problemu	36
5.1.3 Dyskretyzacja słabej formy	37
5.1.4 Linearyzacja	37
5.2 Sformułowanie ES dla kontinuum rzędu II	38
5.2.1 Przestrzenie funkcji aproksymujących i wagowych	38
5.2.2 Sformułowanie słabe problemu brzegowego	38

5.2.3	Dyskretyzacja słabej formy	39
5.2.4	Linearyzacja	40
5.2.5	Zapis macierzowy	41
5.3	Stabilizacja dla kontinuum rzędu I	41
5.3.1	Macierz stabilizująca dla elementu Q4	42
5.3.2	Weryfikacja numeryczna	43
5.4	Stabilizacja dla kontinuum rzędu II	46
5.4.1	Macierz stabilizująca dla elementu Q18G16L4	48
5.4.2	Weryfikacja numeryczna	49
5.5	Modelowanie inkluzji i otworów	52
5.5.1	Metoda zbiorów poziomujących	52
5.5.2	Wzbogacanie aproksymacji elementu skończonego	54
5.5.3	Równania i funkcje wzbogacające dla otworów	56
5.5.4	Równania i funkcje wzbogacające dla inkluzji	57
5.5.5	Weryfikacja numeryczna	57
6	Warunki brzegowe dla modelu numerycznego reprezentatywnego elementu objętościowego	62
6.1	Wymuszanie warunków brzegowych	62
6.1.1	Sekwencyjne zadawanie warunków brzegowych	64
6.2	Odebranie możliwości wystąpienia ruchu sztywnego	64
6.3	Przemieszczeniowe warunki brzegowe	65
6.4	Naprężeniowe warunki brzegowe	65
6.4.1	Kontinuum rzędu I	65
6.4.2	Kontinuum rzędu II	66
6.5	Periodyczne warunki brzegowe	68
6.5.1	Kontinuum rzędu I	68
6.5.2	Kontinuum rzędu II	68
6.6	Obliczanie makroskopowych wektorów naprężeń	69
6.7	Obliczanie makroskopowych stycznych macierzy sztywności	69
6.8	Analiza szczególnego przypadku	71
7	Przykłady numeryczne	78
7.1	Test zginania	78
7.2	Test ścinania	82
7.3	Test indentacji	88
8	Sieci neuronowe w numerycznej homogenizacji	94
8.1	Analiza składników głównych dla testu indentacji	94
8.2	Bayesowskie sieci neuronowe	95
8.3	Identyfikacja charakterystycznego wymiaru RVE na przykładzie testu indentacji	96
8.3.1	Komputerowa symulacja testu indentacji	96
8.3.2	PCA	98
8.3.3	Regresja liniowa	98
8.3.4	BSSN	99
9	Uwagi końcowe i wnioski	101

A Implementacja metody numerycznej homogenizacji	106
A.1 Wdrożone biblioteki i programy	107
Podziękowania	108
Bibliografia	110

Wstęp

W wielu nowych konstrukcjach, zaczynając od promów kosmicznych, przez nowoczesne budowle, na przedmiotach codziennego użytku kończąc, stosowane są materiały o złożonej budowie wewnętrznej. Przykłady materiałów niejednorodnych mikroskopowo to: stopy metali, materiały porowate, materiały polikrystaliczne czy kompozyty. Składniki obecne w takim materiale posiadają zróżnicowane właściwości, które konstytuują materiałową mikrostrukturę. Rozmiar składników mikrostruktury, ich kształt, fizyczne właściwości i rozkład przestrzenny, mocno wpływają na wypadkowe makroskopowe zachowanie się materiału.

Rozwój inżynierii materiałowej, która jest nauką o wytwarzaniu i właściwościach materiałów, spowodował istotny postęp w metodach poszukiwania nowych materiałów o złożonej strukturze. Kluczową rolę w tej dziedzinie współcześnie odgrywają metody numeryczne stosowane w teorii homogenizacji. Określenie efektywnych właściwości mechanicznych, w ramach metod homogenizacyjnych, wspomaga proces projektowania materiału oraz umożliwia określenie zakresu bezpieczeństwa i trwałości wytworzonej konstrukcji przy użyciu materiału o złożonej mikrostrukturze.

Gdyby ktoś postawił sobie za cel wykonanie bezpośrednich numerycznych obliczeń konstrukcji (bez uciekania się do metod homogenizacyjnych), która zawiera wielką liczbę niejednorodności, musiałby zastosować bardzo gęstą siatkę elementów skończonych. Układ równań algebraicznych posiadałby wtedy miliardy stopni swobody. Takie zadania są poza możliwościami mocy obliczeniowej współczesnych komputerów i prognozowanej mocy komputerów najbliższej przyszłości. Nawet gdyby rozwiązać układ równań o miliardach stopni swobody, liczba informacji, którą należy przetworzyć byłaby tak duża, że utrudnione byłoby uzyskanie jakiegokolwiek istotnej informacji.

Nawet rozwiązanie równania różniczkowego cząstkowego dla fizycznie i geometrycznie liniowego problemu mechaniki jest trudne, gdy mamy wielką liczbę niejednorodności. Współczynniki równania różniczkowego są wtedy silnie nieliniowe. Z tej przyczyny poszukuje się zastępczego jednorodnego ośrodka ciągłego. Takie postępowanie nie jest niczym niezwykłym we wszystkich naukach technicznych i matematyczno-przyrodniczych. Zazwyczaj oblicza się związki konstytutywne pomiędzy mikroskopowymi wielkościami średnimi. Związki te następnie są używane do konstrukcji równań fizycznych zastępczego materiału jednorodnego makroskopowo. W rezultacie współczynniki równania różniczkowego, które obowiązują w skali makro, są gładkimi funkcjami zmiennych przestrzennych. Zadanie w makroskali możemy wtedy rozwiązać, posługując się znanymi metodami dla ośrodków jednorodnych.

Praca ta jest poświęcona analizie numerycznej ciał niejednorodnych, za pomocą metody numerycznej homogenizacji, która jest szczególnie atrakcyjna ponieważ nie wymaga żadnych założeń co do postaci zastępczych równań konstytutywnych. Starano się podążać za nowymi trendami we współczesnych metodach obliczeniowych materiałów niejednorodnych, o charakterystycznym wymiarze wewnętrznym. Dużą uwagę poświęcono problemom statystycznej homogenizacji dla kontinuum klasycznego i kontinuum gradientowego. Wyprowadzono wzory uśredniające i uogólnione warunki ograniczające, zgodne z twierdzeniem Hilla-Mandela.

Szczególna uwaga została poświęcona problemom o naturze obliczeniowej, związanym z metodą elementów skończonych. Zaproponowano oryginalną metodę formułowania warunków brze-

gowych dla reprezentatywnego elementu, posługując się macierzami rzutującymi. Dodatkowo zaprezentowano metodę stabilizacji elementów dla ośrodka klasycznego i gradientowego przy zredukowanym całkowaniu, znacząco obniżając czas obliczeń. Ponadto, zastosowano metodę zbiorów poziomujących przy wzbogacaniu aproksymacji elementu skończonego, do modelowania inkluzji i otworów.

Metoda numerycznej homogenizacji, ze względu na dużą złożoność obliczeniową, wymusiła potrzebę obliczeń równoległych, a przez to doboru odpowiednich standardów i technologii informatycznych. Dodatkowo, ponieważ nie istnieją komercyjne ani publicznie dostępne systemy wykorzystujące metodę numerycznej homogenizacji, realizacja pracy wymagała rozwiązania wielu niełatwych problemów informatycznych, takich jak wybór języków programowania, metod wizualizacji, sposobów przechowywania danych. Ich rozwiązanie umożliwiło autorowi realizację tej pracy.

Oznaczenia wielkości fizycznych

Stosowano zapisy tensorowe i macierzowe, podane oznaczenia obowiązują dla zapisu tensorowego lub macierzowego, zależnie od kontekstu. Niżej zestawiono obliczenia dla ośrodków płaskich (dwuwymiarowych).

$\mathbf{x} = \{x_1, x_2\}$	wektor wodzący w układzie kartezjańskim
$\boldsymbol{\varepsilon} = \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, 2\varepsilon_{12}\}$	tensor/wektor odkształcenia
$\boldsymbol{\eta} = \{\eta_{111}, \eta_{222}, \eta_{221}, \eta_{112}, 2\eta_{121}, 2\eta_{122}\}$	tensor/wektor wyższego odkształcenia
$\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}\}$	tensor/wektor naprężenia
$\boldsymbol{\tau} = \{\tau_{111}, \tau_{222}, \tau_{221}, \tau_{112}, \tau_{121}, \tau_{122}\}$	tensor/wektor wyższego naprężenia
$(\cdot)_{,i} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial x_i}$	pochodna cząstkowa w kierunku x_i
\mathbf{N}_u	macierz funkcji kształtu dla przemieszczeń
\mathbf{N}_H	macierz funkcji kształtu dla gradientów przemieszczeń
\mathbf{N}_ρ	macierz funkcji kształtu dla mnożników Lagrange'a
\mathbf{B}_u	dyskretny operator klasycznych zw. kinemtycznych ($\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}_u \mathbf{u}^e$)
\mathbf{B}_H	dyskretny operator zw. kinematycznych drugiego rzędu ($\boldsymbol{\eta} = \mathbf{B}_H \mathbf{H}^e$)
\mathbf{L}_u	operator typu grad[\mathbf{a}], \mathbf{a} jest wektorem
\mathbf{L}_H	operator typu grad[\mathbf{A}], \mathbf{A} jest tensorem drugiego rzędu
$\overline{(\cdot)}$	wielkość makroskopowa
t	czas
$(\cdot)_n$	wielkość w chwili t_n

Tensory i wektory

Tensory są określone w kartezjańskim układzie odniesienia, z bazą $\mathbf{e} : \vec{e}_i, i = 1, 2$. Konwencja sumacyjna Einsteina jest zastosowana dla powtarzających się indeksów.

Wielkości i działania na nich

a	skalar
$\mathbf{a} = a_i \vec{e}_i$	wektor
$\mathbf{A} = A_{ij} \vec{e}_i \vec{e}_j$	tensor rzędu II
$\mathbf{A} = A_{ijk} \vec{e}_i \vec{e}_j \vec{e}_k$	tensor rzędu III
$c = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	iloczyn skalarny: $c = a_i b_i$
$c = \mathbf{A} : \mathbf{B}$	podwójny iloczyn skalarny: $c = A_{ij} B_{ij}$
$c = \mathbf{A} : \mathbf{B}$	potrójny iloczyn skalarny: $c = A_{ijk} B_{ijk}$
$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	iloczyn zewnętrzny: $\mathbf{A} = a_i b_j \vec{e}_i \vec{e}_j$

Operatory

$\text{sym}[\mathbf{a}] = \frac{1}{2}(a_{ij} \vec{e}_i \vec{e}_j + a_{ji} \vec{e}_j \vec{e}_i)$	operator symetrii, gdzie \mathbf{a} jest tensorem
$\text{div}[\mathbf{a}] = a_{i,i}$	operator dywergencji, gdzie \mathbf{a} jest wektorem
$\text{grad}[\mathbf{a}] = a_{i,j} \vec{e}_i \vec{e}_j$	operator gradientów, gdzie \mathbf{a} jest tensorem II rzędu
$\text{div}[\mathbf{a}] = a_{ijk,i} \vec{e}_j \vec{e}_k$	operator dywergencji, gdzie \mathbf{a} jest tensorem III rzędu

Macierze i wektory

Wielkości

a	skalar
\mathbf{a}	wektor
\mathbf{A}	macierz

Operatory

$\mathbf{A}\mathbf{a} = A_{ij}a_j$	mnożenie macierzy przez wektor
$\mathbf{A}\mathbf{B} = A_{ij}B_{ji}$	mnożenie macierzy przez macierz
$\mathbf{A}^T = A_{ji}$	transpozycja macierzy

Rozdział 1

Wprowadzenie

1.1 Motywacja i cel pracy

Inżynierii materiałowej zawdzięczamy postęp praktycznie we wszystkich dziedzinach techniki. Można przypuszczać, że jej rozwój w najbliższym czasie będzie przyspieszony. Aby skonsumować osiągnięcia inżynierii materiałowej, musimy umiejętnie korzystać z nowych materiałów. Wiemy, że większość aktualnych modeli fenomenologicznych nie nadaje się do analizy materiałów niejednorodnych. Z tej przyczyny istnieje popyt po stronie przemysłu na takie modele.

Projektowanie i użytkowanie nowych materiałów, o złożonej wewnętrznie budowie wymusza badania nad metodami, które sprostają wymaganiom badaczy zajmujących się inżynierią materiałową. Możliwość symulacji eksperymentu, zarówno na poziomie mikroskali jak i makroskali, wydaje się być bardzo atrakcyjna gdyż pozwala przewidywać zachowanie się nowego materiału, a przez to umożliwia optymalny dobór składników materiału wielofazowego, ich kształtu czy odpowiedniego stosunku ilości składników; umożliwia planowanie eksperymentu.

Tym lepiej, bezpieczniej i taniej, wykorzystamy nowy materiał, im lepiej potrafimy przewidzieć jego zachowanie. By symulować zachowanie się konstrukcji, musimy zbudować związki konstytutywne, które możliwie dokładnie odtworzą istotne efekty obserwowane na poziomie konstrukcji. Ich weryfikacja wymaga przeprowadzenia doświadczeń, które mogą być czasochłonne. Konstruowanie związków fizycznych, a następnie oszacowanie ich parametrów, można uzyskać poprzez zastosowanie dokładniejszych, ale kosztownych obliczeniowo metod.

Metodą o ogromnym potencjale, pozwalającym na analizę zachowania szerokiej klasy niejednorodnych materiałów, jest metoda numerycznej homogenizacji (ang. *Computational homogenization*). Niewiele polskich prac odnosi się do tej metody. Niniejsza praca stanowi próbę wypełnienia tej luki. Celem pracy jest zatem przedstawienie metody CH i związanych z nią zagadnień natury teoretycznej i obliczeniowej.

Głównym celem pracy jest zrozumienie i pogłębienie teorii związanej z metodami homogenizacji statystycznej oraz rozwiązanie problemów związanych z rozważaną metodą o naturze obliczeniowej i informatycznej. Szczegółowymi celami pracy są:

- zbudowanie ogólnych warunków brzegowych dla reprezentatywnego elementu objętościowego (ang. *representative volume element RVE*), w szczególności dla przypadku homogenizacji statystycznej II rzędu
- budowa oryginalnego algorytmu wymuszania warunków brzegowych dla reprezentatywnego elementu objętościowego za pomocą macierzy rzutujących
- przyspieszenie obliczeń poprzez zastosowanie zredukowanego całkowania, w szczególności

zastosowanie zredukowanego całkowania i stabilizacji elementu mieszanego dla ośrodka gradientowego

- rozważenie przydatności (wraz z analizą przykładów numerycznych) metody zbiorów poziomujących w rozszerzonej metodzie elementów skończonych (ang. *extended finite element method* XFEM) do opisu geometrii mikrostruktury i jej ewolucji
- zastosowanie metod miękkich do oszacowania wymiaru charakterystycznego mikrostruktury za pomocą sztucznych sieci neuronowych (SSN)

1.2 Zakres i układ pracy

W pracy ograniczono się do statycznych, dwuwymiarowych problemów geometrycznie liniowych. Wszelkie nieliniowości, występujące w pracy, wynikają z nieliniowych związków fizycznych. Ponieważ analiza rzeczywistego materiału niejednorodnego jest, sama w sobie, złożonym problemem, analizę zawężono do problemów obrazujących potencjał, ograniczenia i wady metody numerycznej homogenizacji.

W rozdziale 2 przedstawiono zasadę prac wirtualnych i równania równowagi wynikające z tej zasady dla kontinuum klasycznego i gradientowego. Przedstawiono tam również założenia upraszczające dla ośrodka rzędu II, które prowadzą do klasycznych równań lub do równań ośrodka mikropolarnego. W rozdziale 3 przedstawiono metody uśredniające rzędu I i II, w szczególności podano ogólną postać warunków brzegowych dla RVE. Idee i algorytm metody numerycznej homogenizacji przedstawiono w rozdziale 4. W rozdziale 5 przedstawiono sformułowanie, stabilizację i weryfikację numeryczną elementów skończonych dla ośrodków rzędu I i II. Dodatkowo, w rozdziale tym omówiono idee zbiorów poziomujących i sposób jej zastosowania w rozszerzonej metodzie elementów skończonych. W rozdziale 6 przedstawiono metodę wymuszania warunków brzegowych dla skończenia elementowego modelu reprezentatywnego elementu objętościowego. W rozdziale 7 przedstawiono przykłady numeryczne. Zastosowanie sieci neuronowych w numerycznej homogenizacji opisano w rozdziale 8. Na koniec, w rozdziale 9 przedstawiono wnioski. Dodatek A dotyczy zagadnień związanych z implementacją metody numerycznej homogenizacji.

1.3 Metody modelowania materiałów niejednorodnych

Poniżej pobieżnie przedstawiony jest stan wiedzy z zakresu modelowania materiałów niejednorodnych. Głębszą interpretację wymienionych tutaj metod można znaleźć w pracach [12, 17, 53, 67, 76, 79]. Niektóre znane i uznane n/w prace są cytowane, podając jedynie nazwisko i rok wydania, a pomijając je w spisie literatury.

Najłatwiej określić wypadkowe właściwości materiałów, posługując się zasadą mieszania. Zasada mieszania uwzględnia jedynie jedną charakterystykę, tzn. stosunek objętości matrycy do inkluzji.

Następnym stosunkowo prostym podejściem jest estymacja wypadkowych właściwości mechanicznych dla kompozytu np. wypadkowego operatora sztywności i wypadkowego operatora podatności, wymuszając jednorodny stan odkształcenia lub naprężenia, odpowiednio dla założeń Voigta (1889) i Reussa (1929). Znacznie później zostało wykazane przez Hilla [29] i Paula (1960), że założenia Voigta i Reussa stanowią zgrubne oszacowanie, odpowiednio od dołu i góry, makronaprężeń wyrażonych przez zmienne makroskopowe.

Zaawansowanym podejściem jest efektywna aproksymacja niejednorodnego ciała, zaproponowana przez Eshelby'ego [19], a później rozwijana przez wielu innych autorów. Wypadkowe właściwości materiału otrzymanywane są na podstawie, analitycznego lub półanalitycznego, rozwiąza-

nia brzegowego problemu mechaniki. Zamiast zmagać się z niejednorodnym materiałem, wygodniej jest rozważyć jednorodny materiał o związkach fizycznych matrycy w każdym punkcie. Aby uwzględnić niejednorodności, odpowiednie odkształcenie ε^* lub naprężenie σ^* jest wprowadzone w miejscu inkluzji. Równoważny, jednorodny ośrodek ma wtedy taki sam stan odkształcenia i naprężenia, jak oryginalny niejednorodny ośrodek. Stan odkształcenia ε^* lub naprężenia σ^* , niezbędny do homogenizacji, nazywany jest odpowiednio odkształceniem własnym i naprężeniem własnym. Oryginalnie, analityczne rozwiązanie otrzymano dla nieskończonej matrycy, w której umieszczono elipsoidalną inkluzję.

Następnie wprowadzona została koncepcja reprezentatywnego elementu objętościowego Hilla (1963), Hashina (1964) i innych. Reprezentatywny element objętościowy (RVE) dla punktu materialnego jest statystyczną reprezentacją jego bliskiego otoczenia. Wykorzystując koncepcje RVE, zaproponowano wiele metod homogenizacyjnych.

Popularna jest aproksymacja materiału niejednorodnego przy założeniu braku interakcji pomiędzy inkluzjami, innymi słowy zakładamy rzadki rozkład inkluzji. Wyniki otrzymane przy takim założeniu są słuszne, gdy objętość inkluzji jest bardzo mała w stosunku do objętości matrycy. Obliczony, przy takim założeniu, iloczyn makroskopowego tensora sztywności i makroskopowego tensora podatności, odpowiednio dla zadanych makroodkształceń i makronaprężeń, nie jest tensorem jednostkowym [53].

Lepsze wyniki daje metoda wewnętrznie spójnej (ang. *self-consistent*) estymacji wypadkowych własności RVE; por. Kröner (1958), Budiansky (1965), Hill [30], Hashin (1968), Tanaka i Mori (1972). W tej metodzie inkluzja jest umieszczona w efektywnej matrycy. W wyniku iteracyjnego podejścia, obliczone zostają związki fizyczne zastępczej matrycy, a w granicy uzyskany zostaje unikalny operator sztywności/podatności. Wewnętrznie spójne podejście uwzględnia w ograniczony sposób interakcje pomiędzy inkluzjami, ale nadal przydatne jest jedynie do przypadków, gdy objętość inkluzji w stosunku do objętości matrycy jest mała. Metoda samospójna została również zaproponowana w wersji przyrostowej, pozwalając na analizę szerszej klasy kompozytów, których składniki opisane są nieliniowymi związkami konstytutywnymi.

Aby uogólnić rozwiązanie do niejednorodnych materiałów, dla których interakcje pomiędzy inkluzjami są znaczące, zaproponowano metodę różniczkową: Roscoe (1952,1973), Boucher (1974), McLaughlin (1977), Cleart et al. (1980), Norris (1985), Hashin (1988), Nemat-Naser i Hori (1990). Metoda ta zaczyna analizę od matrycy, zawierającej nieskończenie małe inkluzje. Rozwiązanie otrzymywane jest wtedy tak, jak dla rzadkiego rozkładu inkluzji. Objętość inkluzji wzrasta o nieskończenie małą wartość. Następnie obliczane są nowe wypadkowe operatory sztywności i podatności. Proces ten jest powtarzany, dopóki nie zostanie osiągnięty pożądaný stosunek objętości inkluzji do matrycy. Matematyczne sformułowanie tego postępowania prowadzi do zwykłego równania różniczkowego dla funkcji tensorowej zmiennej, będącej stosunkiem objętości inkluzji do matrycy, której wartością jest operator sztywności/podatności. Metody samospójna i różniczkowa zawodzą, gdy nie jest możliwe rozróżnienie matrycy i inkluzji, np. dla polikryształów.

Inna ważna grupa metod oparta jest na zasadzie prac wirtualnych Hashina-Shtrikmana [27]; Hill (1963). Energia sprężysta i komplementarna energia sprężysta wyrażone są przez funkcjonal odkształceń własnych e^* lub naprężeń własnych s^* . Punkt stacjonarny takiego funkcjonału jest równy ściśle wartości odpowiednio odkształceń własnych ε^* lub naprężeń własnych σ^* . W ogólności bardzo trudno jest uzyskać naprężenia lub odkształcenia własne, ale posługując się zasadą prac wirtualnych można obliczyć ich przybliżone wartości oraz oszacować dokładność przybliżenia. Willis (1977) zastosował zasadę prac wirtualnych Hashina-Shtrikmana do oszacowania odkształceń własnych, korzystając z funkcji Greena. Znaczące prace dotyczące tej grupy metod były prowadzone przez Nemata-Nasera i Horiego (1995), a także przez Hashina (1965), Walope'a (1966, 1969, 1981) i innych.

Istnieje również szereg metod stosowanych, gdy mikrostruktura ma budowę periodyczną. Wprowadzona została koncepcja jednostki elementarnej (ang. *unit cell*), która zawiera powtarzalną geometrię i właściwości materiałowe. Dla zadanych makroskopowych odkształceń lub makroskopowych naprężeń zakłada się, że rozwiązanie zawiera periodyczne rozkłady mikroskopowych wielkości. Jedną z metod rozwiązania problemów z periodyczną mikrostrukturą opiera się na aproksymacji nieznanymi mikroskopowymi pól za pomocą szeregu Fouriera. Następnie, na podstawie takiej aproksymacji, obliczane zostają rozkłady pól odkształceń lub naprężeń własnych; por. Fotiu i Nemat-Nasser (1995). Inne, nie opisane tutaj półanalizyczne metody, są oparte na pomysłach jednostki elementarnej, np. wykorzystuje się funkcję Greena; por. Walkera (1990, 1991).

Inna, odrębna metoda, opiera się na teorii matematycznej homogenizacji. Teoria matematycznej homogenizacji wprowadza definicję ciała homogenizowanego tj. ciała, dla którego rozwiązanie niejednorodnego zadania asymptotycznie można wyrazić przez rozwiązanie zastępczego jednorodnego zadania, gdy rozmiar charakterystycznej mikrostruktury zmierza do zera. Metoda asymptotycznej homogenizacji (por. Bensoussan [9]; Sanchez-Palencia (1980)) wykorzystuje koncepcję jednostki elementarnej, która wypełnia obszar rozważanego ciała. Jednym z podstawowych założeń teorii homogenizacji jest założenie, że zaburzenia poszukiwanych funkcji są małe. Pozwala to na przedstawienie tych funkcji w postaci rozwinięcia asymptotycznego względem małego parametru, który odpowiada charakterystycznemu wymiarowi mikrostruktury. Dalej zakłada się periodyczność poszukiwanych funkcji, jak i wszystkich składników rozwinięcia asymptotycznego. Wykorzystując powyższe założenia, po wstawieniu rozwinięć asymptotycznych niewiadomych funkcji do równań równowagi i po nadaniu małemu parametrowi znaczenia zmiennej niezależnej, otrzymuje się nieskończony układ równań różniczkowych. Biorąc pod uwagę równania odpowiadające kilku pierwszym potęgom małego parametru, poszukuje się rozwiązań tych równań. W wyniku znamy pierwsze składniki rozwiązania asymptotycznego. Metoda asymptotycznej homogenizacji pozwala uwzględnić efekty wyższych rzędów. Ta metoda została zastosowana również do analizy materiałów fizycznie nieliniowych por. np. Ghosh (1996), Lefik i Schlegler (1994), Fish (2001).

Większość metod homogenizacyjnych nie nadaje się do analizy problemów geometrycznie nieliniowych. Istnieją też istotne trudności przy próbie opisu geometrycznych i fizycznych zmian mikrostruktury. W ostatnich latach, wraz ze wzrostem mocy obliczeniowej komputerów, została rozwinięta metoda numerycznej homogenizacji (ang. *computational homogenization*). Metoda ta szacuje związek między odkształceniem i naprężeniem w punkcie makroskali, na podstawie odrębnych obliczeń RVE, przyporządkowanych temu punktowi. Analiza w punkcie przeprowadzana jest za pomocą metody elementów skończonych lub metody elementów brzegowych Suquet [65], Gudes i Kikuchi (1995), Terada i Kikuchi (2001), Smit et al. (1998), Miehe et al. (1999), Féyél i Chaboche (2000), metody komórek Voronoï; Ghosh [25]; Wriggers et al. (2003) lub szybkiej transformacji Fouriera; Moulinec i Suquet (1998). Modelowanie tego typu nie wymaga żadnych założeń, co do postaci makroskopowych równań konstytutywnych. Dodatkowo, w ramach tej metody, może być opisana ewolucja mikrostruktury. Metoda numerycznej homogenizacji została zastosowana dla kontinuum gradientowego; Kouznetsova i Geers [39], Ghosh (2001), Ostoja-Starzewski (2000). Poprzez uwzględnienie wyższych gradientów przemieszczeń w skali makro, może być wzięty pod uwagę absolutny rozmiar mikrostruktury (efekt skali) i inne efekty wyższego rzędu.

Są też i inne przydatne podejścia, które dają oszacowanie właściwości zastępczego materiału makroskopowego. Jedną z takich metod jest metoda stochastyczna; Beran (1968, 1961), Kröner (1971) i McCoy (1981). Metody stochastyczne są stosowane, gdy nie znamy dokładnie morfologii i rozkładu składników mikrostruktury.

Rozdział 2

Podstawowe równania i założenia

Dalsze rozważania ograniczone do problemów geometrycznie liniowych. Nie będziemy zatem różniczać konfiguracji podstawowej i aktualnej.

Klasyczne modele kontinuum materialnego pozwalają na matematyczny opis, za pomocą którego uzyskujemy wyniki zgodne z doświadczeniami. Materiał rzeczywisty modelowany jest wtedy przez związek konstytutywny dla materiału prostego (materiał klasy pierwszej), dla którego naprężenie rzeczywiste $\hat{\sigma}$ w punkcie \mathbf{x} jest funkcją gradientu przemieszczeń i jego historii:

$$\hat{\sigma} = \psi(\mathbf{x}, \varepsilon(\mathbf{x}, \tau)), \quad 0 \leq \tau \leq t, \quad (2.1)$$

gdzie:

$$\varepsilon = \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{u}]], \quad (2.2)$$

a t jest aktualną chwilą czasu.

Rozwój nieklasycznych modeli kontinuum materialnego wynika, nie z autonomicznych prawidłowości rozwoju nauki, ale w głównej mierze podyktowany jest potrzebami praktycznymi [60]. Właściwości nowych materiałów zależą od budowy mikrostruktury, której wypadkowe właściwości wpływają na zachowanie się ciała w makroskali. Do opisu mechanicznego takich materiałów często nie wystarcza już klasyczna koncepcja deformowalnego kontinuum.

Dla wielu materiałów z mikrostrukturą postulat lokalności jest zbyt restrykcyjny [17, 51]. Bogatszy opis uzyskamy przez przyjęcie modelu materiału klasy drugiej, dla którego uogólnione naprężenie w punkcie \mathbf{x} jest funkcją gradientu, drugiego gradientu przemieszczeń i ich historii:

$$\hat{\sigma} = \psi(\mathbf{x}, \varepsilon(\mathbf{x}, \tau), \eta(\mathbf{x}, \tau)), \quad (2.3)$$

gdzie:

$$\eta = \text{grad}[\text{grad}[\mathbf{u}]]. \quad (2.4)$$

W pracy uwaga skupiona jest na relacji naprężenia i odkształcenia, pomijana jest temperatura i efekty z nią związane. Dalej nasze rozważania ograniczymy do klasy materiałów, dla których wariację gęstości energii wewnętrznej da się wyrazić w postaci

$$\delta W = \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.5)$$

lub dla ośrodka rzędu II

$$\delta W = \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} : \delta \boldsymbol{\eta}, \quad (2.6)$$

gdzie klasyczne naprężenie $\boldsymbol{\sigma}$ i naprężenie wyższego rzędu $\boldsymbol{\tau}$ są sprzężone poprzez pracę sił wewnętrznych odpowiednio z $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ i $\delta \boldsymbol{\eta}$.

Uogólnione naprężenie $\hat{\sigma}$ będzie tożsame z naprężeniem Cauchy'ego σ , lub będzie funkcją naprężeń σ i τ , odpowiednio dla (2.1) i (2.3). Dla drugiego przypadku związek pomiędzy $\hat{\sigma}$, nazywanym naprężeniem rzeczywistym (ang. *real stress*) [2], a naprężeniem rzędu I i II zostanie podany później, gdy omawiany będzie ośrodek rzędu II.

Istnieją uznane podręczniki z mechaniki klasycznych ośrodków ciągłych [18, 54, 64], w których czytelnik może odnaleźć głębszą interpretację problemów analizowanych pobieżnie w tym rozdziale. Znaleźć tam można również opis ośrodków mikropolarnych i ośrodków Cosseratów. Przegląd modeli ośrodków gradientowych i mikropolarnych można znaleźć w pracach [17, 51, 56]. Szczegółowe przedstawienie wybranych metod modelowania ośrodków gradientowych można znaleźć w pracach [2, 23, 24, 31, 47–49, 70]. Termodynamiczne podstawy, które służą budowie związków fizycznych dla kontinuuów nielokalnych i gradientowych, znajdują się m. in. w artykule [57].

W tej pracy posłużono się sformułowaniem zaproponowanym w artykule [48]. Mimo, że sformułowanie to opiera się również na drugich gradientach pól odkształceń, uwaga będzie skupiona na sformułowaniu opartym jedynie na pierwszych i drugich gradientach pól przemieszczeń.

2.1 Ośrodek ciągły rzędu I

Z uwagi na kompletność pracy, w tym podrozdziale przedstawione zostały równania dla klasycznego ośrodka ciągłego. Ten problem mógłby być pominięty, ale zamieszczono go z uwagi na to, że równania dla ośrodka rzędu II będą konstruowane w analogiczny sposób. Ułatwi to śledzenie rozważań w następnym podpunkcie.

Wirtualna energia wewnętrzna dla ciała zajmującego obszar V z brzegiem Γ i normalną \mathbf{n} wynosi

$$\delta\mathcal{W}^{\text{int}} = \int_V \delta W \, dV = \int_V \boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{\varepsilon} \, dV. \quad (2.7)$$

Stosując następującą równość

$$\boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\sigma} : \text{grad}[\delta\mathbf{u}] = \text{div}[\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta\mathbf{u}] - \text{div}[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \delta\mathbf{u} \quad (2.8)$$

i używając twierdzenia o dywergencji otrzymujemy:

$$\delta\mathcal{W}^{\text{int}} = - \int_V \text{div}[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \delta\mathbf{u} \, dV + \int_\Gamma \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta\mathbf{u} \, d\Gamma. \quad (2.9)$$

Zgodnie z zasadą prac wirtualnych, praca wykonana przez siły wewnętrzne na wirtualnych przemieszczeniach, równa się pracy wykonanej przez siły zewnętrzne na przemieszczeniach wirtualnych. Praca wirtualna sił zewnętrznych jest określona wzorem

$$\delta\mathcal{W}^{\text{ext}} = \int_V \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV + \int_\Gamma \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} \, d\Gamma, \quad (2.10)$$

gdzie \mathbf{f} jest siłą masową i \mathbf{t} siłą brzegową.

Przyrównując do siebie (2.9) i (2.10) otrzymamy równanie, którego spełnienie dla każdej wariacji $\delta\mathbf{u}$ prowadzi do równań równowagi:

$$\text{div}[\boldsymbol{\sigma}] + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{w } V \quad (2.11)$$

i statycznych warunków brzegowych:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{t} = \mathbf{0} \quad \text{na } \Gamma_t, \quad (2.12)$$

gdzie Γ_t jest częścią brzegu, na której wariacja przemieszczeń jest różna od zera. Na pozostałej części brzegu Γ_u zadane są kinematyczne warunki brzegowe. Dopuszczalne są również mieszane warunki brzegowe.

2.2 Ośrodek ciągły rzędu II

Wirtualna energia wewnętrzna dla ciała zajmującego obszar V z brzegiem Γ i normalną \mathbf{n} wynosi

$$\delta\mathcal{W}^{\text{int}} = \int_V \delta W \, dV = \int_V \boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} : \delta\boldsymbol{\eta} \, dV. \quad (2.13)$$

Następnie stosując (2.8) i tożsamość:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} : \delta\boldsymbol{\eta} &= \boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\text{grad}[\delta\mathbf{u}]] = \text{div}[\boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\delta\mathbf{u}]] - \text{div}[\boldsymbol{\tau}] : \text{grad}[\delta\mathbf{u}] = \\ &= \text{div}[\boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\delta\mathbf{u}]] - \text{div}[\text{div}[\boldsymbol{\tau}] \cdot \delta\mathbf{u}] + \text{div}[\text{div}[\boldsymbol{\tau}]] \cdot \delta\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

oraz twierdzenie o dywergencji, otrzymamy:

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{W}^{\text{int}} &= - \int_V \text{div}[\boldsymbol{\sigma} - \text{div}[\boldsymbol{\tau}]] \cdot \delta\mathbf{u} \, dV \\ &+ \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \text{div}[\boldsymbol{\tau}]) \cdot \delta\mathbf{u} \, d\Gamma + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\delta\mathbf{u}] \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Można zauważyć, że gradientu $\text{grad}[\delta\mathbf{u}]$ nie można wyznaczyć jedynie na podstawie znajomości $\delta\mathbf{u}$ na powierzchni Γ . Jeśli znamy $\delta\mathbf{u}$ możemy obliczyć składową styczną $\text{grad}[\delta\mathbf{u}]$, ale nie składową normalną tego gradientu. Aby skonstruować równanie równowagi i statyczne warunki brzegowe rozdzielimy $\text{grad}[\delta\mathbf{u}]$ na część styczną $\mathbf{G}^s[\delta\mathbf{u}]$ i normalną $\mathbf{n} \otimes \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}]$:

$$\text{grad}[\delta\mathbf{u}] = \mathbf{G}^s[\delta\mathbf{u}] + \mathbf{n} \otimes \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}], \quad (2.16)$$

gdzie operatory gradientu stycznego i dywergencji stycznej są definiowane jako:

$$\mathbf{G}^s[\dots] = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \text{grad}[\dots]; \quad \mathbf{D}^s[\dots] = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) : \text{grad}[\dots] \quad (2.17)$$

i operator dywergencji normalnej jest definiowany jako:

$$\mathbf{D}[\dots] = \mathbf{n} \cdot \text{grad}[\dots]. \quad (2.18)$$

Analogicznie do (2.8) mamy:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\delta\mathbf{u}] = \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \delta\mathbf{u}] - \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}] \cdot \delta\mathbf{u} + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \mathbf{n} \otimes \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}] \quad (2.19)$$

i twierdzenie o dywergencji otrzymujemy w postaci:

$$\int_{\Gamma} \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \delta\mathbf{u}] \, d\Gamma = \int_{\Gamma} \mathbf{D}^s[\mathbf{n}] \otimes \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \delta\mathbf{u}) \, d\Gamma + \sum_i \int_{\partial\Gamma_i} \llbracket \mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \rrbracket \cdot \delta\mathbf{u} \, d\partial\Gamma, \quad (2.20)$$

gdzie indeksy i odpowiadają krzywym $\partial\Gamma_i$ leżącym na załamaniach powierzchni Γ . Niech wektor \mathbf{t} jest styczny do krzywej $\partial\Gamma_i$. Wektory \mathbf{n}^+ i \mathbf{n}^- będą normalnymi do powierzchni Γ po prawej i lewej stronie krzywej $\partial\Gamma_i$. Wektory \mathbf{n}^+ i \mathbf{n}^- nie są równe sobie, gdy powierzchnia jest załamana wzdłuż krzywej $\partial\Gamma_i$. Zatem, gdy $\mathbf{m}^+ = \mathbf{t} \times \mathbf{n}^+$, $\mathbf{m}^- = \mathbf{t} \times \mathbf{n}^-$ to otrzymujemy:

$$\llbracket \mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \rrbracket = \mathbf{m}^+ \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) - \mathbf{m}^- \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}). \quad (2.21)$$

W rezultacie ostatnia całka po prawej stronie w (2.15) (podobnie jak w teorii płyt i powłok [11], gdy wyznaczana jest wartość siły narożnej) będzie miała postać

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\delta\mathbf{u}] \, d\Gamma = \\ & \int_{\Gamma} \mathbf{D}^s[\mathbf{n}] \otimes \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \delta\mathbf{u} \, d\Gamma - \int_{\Gamma} \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}] \cdot \delta\mathbf{u} \, d\Gamma + \sum_i \int_{\partial\Gamma_i} \llbracket \mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \rrbracket \delta\mathbf{u} \, d\partial\Gamma \\ & + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \mathbf{n} \otimes \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}] \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Ostatecznie wirtualna praca sił wewnętrznych może być ujęta wzorem

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{W}^{\text{int}} = & - \int_V \text{div}[\boldsymbol{\sigma} - \text{div}[\boldsymbol{\tau}]] \cdot \delta\mathbf{u} dV \\ & + \int_{\Gamma} \{ \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \text{div}[\boldsymbol{\tau}]) + \mathbf{D}^s[\mathbf{n}] \otimes \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}] \} \cdot \delta\mathbf{u} d\Gamma \\ & + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \mathbf{n} \otimes \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}] d\Gamma \\ & + \sum_i \int_{\partial\Gamma_i} \llbracket \mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \rrbracket \delta\mathbf{u} d\partial\Gamma. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Zgodnie z zasadą prac wirtualnych, praca wykonana przez siły wewnętrzne na wirtualnych przemieszczeniach i składowych normalnych gradientów wirtualnych przemieszczeń, równa się pracy wykonanej przez siły zewnętrzne na tych samych zmiennych wirtualnych. Praca sił zewnętrznych, na niezależnych zmiennych wirtualnych, przyjmuje postać wzoru

$$\delta\mathcal{W}^{\text{ext}} = \int_V \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} dV + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} d\Gamma + \int_{\Gamma} \mathbf{r} \cdot \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}] d\Gamma + \sum_i \int_{\partial\Gamma_i} \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{u} d\partial\Gamma, \quad (2.24)$$

gdzie \mathbf{f} jest siłą masową, \mathbf{t} siłą brzegową, \mathbf{r} parą sił brzegowych, a \mathbf{p} siłą narożną.

Przyrównując do siebie (2.23) i (2.24) otrzymamy równanie, którego spełnienie dla każdej wariacji $\delta\mathbf{u}$ i $\mathbf{D}[\delta\mathbf{u}]$, prowadzi do równań równowagi:

$$\text{div}[\boldsymbol{\sigma} - \text{div}[\boldsymbol{\tau}]] + \mathbf{f} = \mathbf{0} \text{ w } V, \quad (2.25)$$

i warunków brzegowych na części brzegu Γ_t :

$$\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \text{div}[\boldsymbol{\tau}]) + \mathbf{D}^s[\mathbf{n}] \otimes \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}] - \mathbf{t} = \mathbf{0} \text{ na } \Gamma_t, \quad (2.26)$$

gdzie wirtualne przemieszczenia mają wartość różną od zera oraz warunków brzegowych na części brzegu Γ_r :

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{r} = \mathbf{0} \text{ na } \Gamma_r, \quad (2.27)$$

gdzie wirtualne normalne gradienty przemieszczeń mają wartość różną od zera. Na części krzywych $\partial\Gamma_i$ otrzymamy warunek statyczny:

$$\llbracket \mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \rrbracket - \mathbf{p} = \mathbf{0} \quad \text{na } \partial\Gamma_i, \quad (2.28)$$

gdzie wariacje przemieszczeń są różne od zera. Na pozostałej części brzegu Γ_u zadane są kinematyczne warunki brzegowe tak, jak w przypadku klasycznego kontinuum, dopuszczalne są również mieszane warunki brzegowe. Podsumowując, pole przemieszczeń \mathbf{u} musi spełniać trzy równania równowagi i sześć warunków brzegowych.

2.2.1 Ośrodek rzędu II zredukowany do ośrodka klasycznego

Pożytecznym będzie takie przekształcenie zasady prac wirtualnych dla ośrodka rzędu II, która po pewnych założeniach doprowadzi nas do postaci używanej w kontinuum klasycznym. Pracę wirtualnych sił wewnętrznych możemy napisać w postaci

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{W}^{\text{int}} = & \int_V \text{div}[\hat{\boldsymbol{\sigma}}] \cdot \delta\mathbf{u} dV + \int_{\Gamma} \{ \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{D}^s[\mathbf{n}] \otimes \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}] \} \cdot \delta\mathbf{u} d\Gamma \\ & + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} : \mathbf{n} \otimes \mathbf{D}[\delta\mathbf{u}] d\Gamma + \sum_i \int_{\partial\Gamma_i} \llbracket \mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \rrbracket \delta\mathbf{u} d\partial\Gamma, \end{aligned} \quad (2.29)$$

gdzie:

$$\hat{\sigma} = \sigma - \text{div}[\tau]. \quad (2.30)$$

Porównując (2.9) i (2.23) zauważymy, że będą potrzebne dwa dodatkowe założenia, by rozważaną zasadę prac wirtualnych zredukować do postaci klasycznej.

Po pierwsze zakładamy, że $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \forall \mathbf{x} \in \Gamma$ (2.29), wtedy

$$- \int_V \text{div}[\hat{\sigma}] \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma = 0, \quad (2.31)$$

gdzie: $\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \hat{\sigma}$ i równanie równowagi (2.11) jest automatycznie spełnione. Założenie jest słuszne, gdy do ciała nie przyłożono obciążeń rzędu II.

Po drugie zakładamy, że tensor $\boldsymbol{\tau}$ jest symetryczny. W ogólności tensor o walencji 3 można rozdzielić na część symetryczną i antysymetryczną, gdzie symetryczna część, dla kartezjańskiego układu odniesienia, dana jest wzorem

$$\tau_{ijk}^s = \frac{1}{3}(\tau_{ijk} + \tau_{jki} + \tau_{kij}), \quad (2.32)$$

a antysymetryczna $\tau_{ijk}^a = \tau_{ijk} - \tau_{ijk}^s$. Za pracą [23] można przedstawić τ_{ijk}^a wyłącznie poprzez składowe naprężenia momentowych m_{ji} (por. [54, 60]):

$$\tau_{jqr}^a = \frac{1}{4}\epsilon_{iqr}m_{ji} + \frac{1}{4}\epsilon_{ijr}m_{qi}, \quad (2.33)$$

gdzie ϵ jest symbolem permutacji. Zatem, jeżeli równanie fizyczne będzie miało postać, w której znikają naprężenia momentowe, to $\hat{\sigma}$ będzie symetryczne. Doprowadzi to nas do klasycznej postaci równań równowagi i warunków brzegowych.

Należy jedynie dodać, że równania równowagi i statyczne warunki brzegowe mają klasyczną postać, metody rozwiązywania dla związku odkształcenia - naprężenia (2.3) są niestandardowe, por. [23, 24, 56].

2.2.2 Ośrodek rzędu II zredukowany do ośrodka mikropolarnego

Na podstawie pracy [23], znane jest również przejście pomiędzy kontinuum gradientowym a mikropolarnym. Tensor drugich gradientów przemieszczeń $\boldsymbol{\eta}$ można rozłożyć na część symetryczną i antysymetryczną i dla kartezjańskiego układu odniesienia mamy

$$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}^s + \boldsymbol{\eta}^a, \quad (2.34)$$

gdzie:

$$\eta_{ijk}^s = \frac{1}{3}(\eta_{ijk} + \eta_{jki} + \eta_{kij}). \quad (2.35)$$

Antysymetryczna część jest określona wzorem

$$\eta_{ijk}^a = \eta_{ijk} - \eta_{ijk}^s = \frac{2}{3}\epsilon_{ikp}\chi_{pj} + \frac{2}{3}\epsilon_{jkp}\chi_{pi}, \quad (2.36)$$

gdzie χ jest gradientem rotacji [54, 60]. Powyższa relacja może być odwrócona, co daje:

$$\chi_{ij} = \frac{1}{2}\epsilon_{iqr}\eta_{jqr}^a. \quad (2.37)$$

Istnieje równość prac wirtualnych antysymetrycznych naprężeń τ^a na wirtualnych antysymetrycznych odkształceniach $\delta\eta^a$ i naprężeń momentowych \mathbf{m} na wirtualnych mikroobrotach $\delta\chi$:

$$\tau^a : \delta\eta^a = \mathbf{m} \cdot \delta\chi. \quad (2.38)$$

Powyższa równość definiuje naprężenia momentowe i może posłużyć do wyprowadzenia wzoru (2.33). Zakładając, że równanie konstytutywne wyrażone jest wyłącznie poprzez klasyczne naprężenia i naprężenia momentowe, zasada prac wirtualnych (2.23) poprowadzi do równań ośrodka mikropolarnego, gdzie równanie równowagi ma postać

$$\sigma_{ik,i} - \frac{1}{2}\epsilon_{jlk}m_{ij,il} + f_k = 0, \quad (2.39)$$

ze statycznymi warunkami brzegowymi

$$t_k - n_l(\sigma_{lk} - \frac{1}{2}m_{ij,i}\epsilon_{jkl}) = 0, \quad (2.40)$$

$$r_k - n_i m_{ik} + n_k n_p n_i m_{ip} = 0, \quad (2.41)$$

przy czym dla prostoty założono, że brzeg jest gładki.

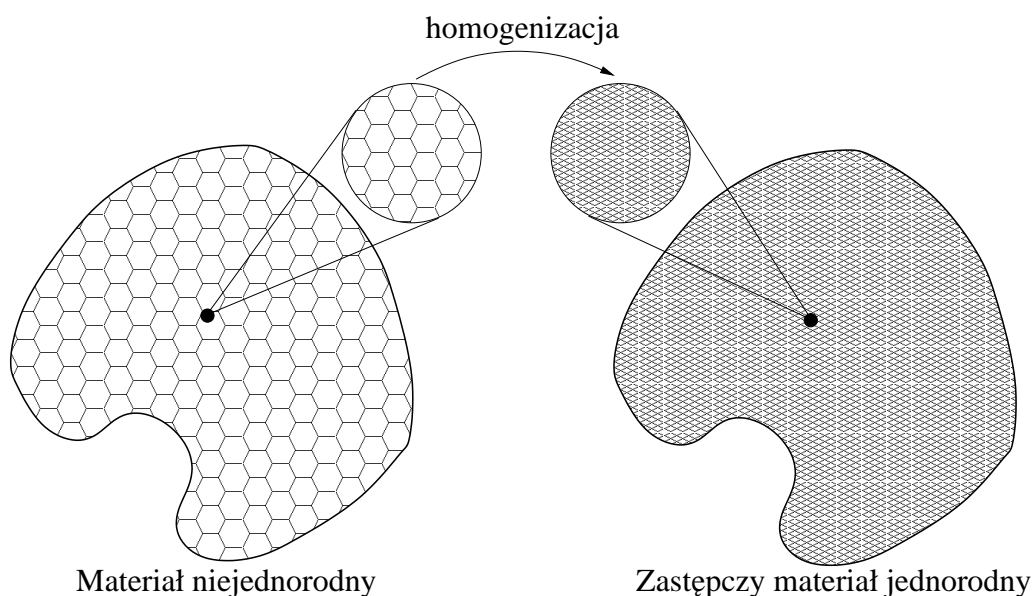
Rozdział 3

Metody uśredniania

Mechanika ośrodków ciągłych zajmuje się wyidealizowanym materiałem, znajdującym się w punktach materialnych i ich otoczeniach. Zakłada się, że rozkład naprężeń i odkształceń w otoczeniu punktu materialnego jest jednorodny. Jednak w mikroskali, na odpowiednio niskim poziomie obserwacji, otoczenie to zawiera dużą liczbę składników o różnych właściwościach i kształtach. Inaczej mówiąc, punkt materialny ma przyporządkowaną sobie złożoną i w ogólności, ewoluującą mikrostrukturę. Zatem pole naprężeń i odkształceń nie jest jednorodne na mikroskopowym poziomie obserwacji.

Celem metod homogenizacyjnych jest przedstawienie wielkości makroskopowych charakteryzujących stan ośrodka ciągłego (makroskopowo równoważnego), przyporządkowanych otoczeniu punktu materialnego poprzez zmienne, które opisują stan mikrostruktury oraz parametry składników mikrostruktury.

Za [67] możemy sprecyzować, co rozumiemy pod pojęciem ośrodka makroskopowo ekwiwalentnego. Głównym celem jest uzyskanie równoważnego opisu zagadnienia mechaniki, tzn. określenie relacji pomiędzy wielkościami makroskopowymi za pomocą parametrów efektywnych (istotnych). Relacje te opowiadają prawom fizycznym.



Rysunek 3.1: Ośrodek niejednorodny i proces homogenizacji prowadzący do ośrodka makroskopowo ekwiwalentnego

Konstrukcja związków fizycznych jednorodnego materiału zastępczego nie powinna naruszać zasad zachowania, ani zasad termodynamiki. Ponadto powinna być zgodna z ogólnymi zasadami

konstrukcji równań konstytutywnych. Poniżej zostaną przedstawione metody uśredniania, w wyniku których skonstruowane równania fizyczne dla materiału makroskopowo równoważnego, spełniające następujące postulaty:

Postulat współobecności, który głosi, że zmienne niezależne (wielkości makroskopowe, zmienne stanu), występujące w jednym z równań konstytutywnych, powinny występować w pozostałych, o ile nie narusza to zasad zachowania i zasad termodynamiki.

Postulat determinizmu, który głosi, że związki fizyczne zależą jednoznacznie od historii zmiennych niezależnych.

Postulat lokalności, który głosi, że wielkości konstytutywne dla cząstki zależą od zmiennych niezależnych w jej otoczeniu. Zauważymy, że postulat ten nie precyzuje, jakie jest to otoczenie, więc należy rozumieć to intuicyjnie, że jest ono dużo mniejsze od rozmiarów ciała. Ten postulat zostaje częściowo naruszony, gdy będziemy analizować przypadek ośrodka rzędu II. Nie mniej jednak, otoczenie będzie ograniczone i małe w porównaniu do rozmiarów ciała.

Postulat obiektywności materialnej, który głosi, że właściwości materiału nie zależą od położenia i ruchu obserwatora. Postulat ten jest spełniony, gdy stan naprężenia w punkcie wyznaczony zostanie wyłącznie na podstawie tensorów odkształceń i zmiennych historycznych, niezależnych od położenia i ruchu obserwatora, przyporządkowanych temu punktowi.

3.1 Reprezentatywny element objętościowy

Reprezentatywny element objętościowy (RVE), przyporządkowany punktowi materialnemu, jest objętością, która jest statystycznie reprezentatywna dla małego otoczenia tego materialnego punktu.

Charakteryzując RVE, należy posłużyć się dwiema długościami: jedna to długość makroskopowa L , która charakteryzuje wielkość obszaru makroskopowego w odniesieniu do której podana jest objętość RVE; druga to długość l , która charakteryzuje rozmiar najmniejszego składnika mikrostruktury, którego kształt i właściwości mają efektywny wpływ na odpowiedź ośrodka makroskopowo równoważnego.

W ogólności, gdy opisujemy efekty rzędu I, charakterystyczna długość makroskopowa L , powinna być o rząd większa od charakterystycznej długości mikroskopowej, tzn. $L/l \gg 1$. Gdy charakterystyczny wymiar mikrostruktury l jest porównywalny z L , należy uwzględnić efekty rzędu II. Jeżeli uwzględnienie efektów rzędu II jest niewystarczające, należy uwzględniać efekty związane z wyższymi gradientami, lub modelować niejednorodną budowę makroskopowej struktury w sposób pośredni.

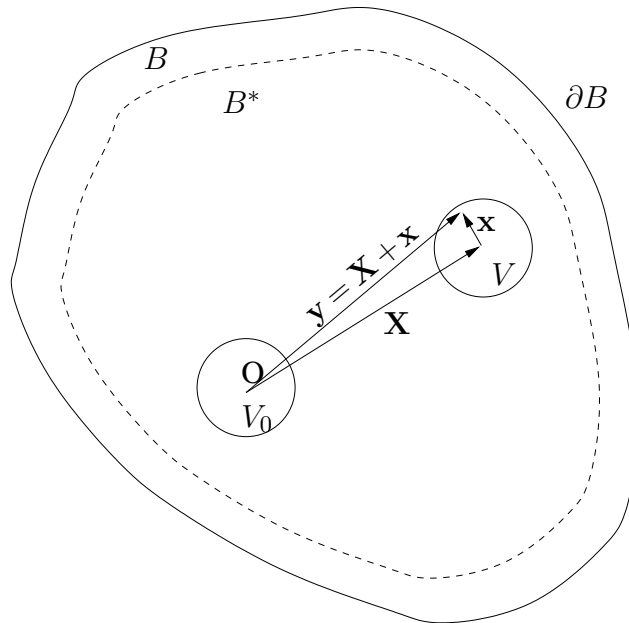
Dodatkowym problemem może być ewolucja jakiejś podlega mikrostruktura, np. wywołana mikropęknięciami. Ewolucja ta może w ogólności prowadzić do zmiany charakterystycznego rozmiaru mikrostruktury l . Uwzględnienie efektów związanych z tą zmianą nie jest możliwe, gdy uwzględnione są jedynie efekty rzędu I.

Zauważymy, że absolutny wymiar mikrostruktury może być bardzo duży lub bardzo mały, zależnie od wymiaru analizowanej makrostruktury. Znaczenie ma jedynie względny wymiar mikrostruktury. Na przykład, dla proszków metali, rozmiar charakterystyczny ziarna ma wymiar submikronów. Zatem rozmiar 100 mikronów będzie wystarczającym rozmiarem RVE. Natomiast, gdy analizujemy tamę, dla której charakterystyczny rozmiar kruszywa jest rzędu kilkunastu centymetrów, rozmiar RVE może być rzędu kilku lub kilkudziesięciu metrów.

Innym bardzo ważnym pytaniem jest, jakie są efektywne (znaczące) właściwości składników mikrostruktury? Jakie parametry składników mikrostruktury mają istotny wpływ na równoważną

odpowieź otoczenia punktu materialnego? Odpowiedzi na te pytania mogą być udzielone przez systematyczną analizę konkretnego problemu. Optymalnym doborem, efektywnych właściwości składników mikrostruktury i oddziaływań między nimi będzie taki dobór, który doprowadzi nas do możliwie najprostszego modelu. Może to być zrobione przez dokładne i uporządkowane zestawienie i uporządkowanie obserwacji, eksperymentów i analiz.

Na koniec tego podrozdziału należy rozważyć warunek statystycznej homogenizowalności, tzn. warunek, którego spełnienie zapewnia, że średnie z funkcji wielkości mikroskopowych są wielkościami makroskopowymi. Dla naszego problemu będzie rozważane pewne wnętrze obszaru ciała B , które oddalone jest o co najmniej L od brzegu ∂B obszaru B . Suma wszystkich takich wnętrz oznaczona zostanie przez B^* , por. rys. 3.2. Symbol V_0 oznacza obszar RVE. Punkty w V_0 będą



Rysunek 3.2: Ciało B , jego wnętrze B^* i RVE o obszarze V otrzymane przez transformacje obszaru V_0

określane przez wektory \mathbf{x} . Punkty, które wyznaczymy przez ruch sztywny określony przez wektor \mathbf{X} , będą określone przez równość $\mathbf{y} = \mathbf{X} + \mathbf{x}$. Średnie wartości odkształceń w obszarze RVE będą dane wzorami

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{ave}}(\mathbf{X}) = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X} + \mathbf{x}) dV, \quad (3.1)$$

$$\boldsymbol{\eta}_{\text{ave}}(\mathbf{X}) = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\eta}(\mathbf{X} + \mathbf{x}) dV. \quad (3.2)$$

W ogólności $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{ave}}(\mathbf{X})$ i $\boldsymbol{\eta}_{\text{ave}}(\mathbf{X})$ zależą od położenia \mathbf{X} , rozmiaru i kształtu RVE. Dla ustalonego V_0 , dla różnych wartości \mathbf{X} powyższe wzory definiują ruchome średnie odkształcenia.

Teraz można pokazać warunek statystycznej homogenizowalności rzędu I, rozumiany w sensie ruchomych średnich odkształceń: jeżeli istnieją warunki brzegowe, które dla odpowiednio dużego obszaru V_0 i niezależnie od kształtu jego brzegu, prowadzą do jednorodnego pola ruchomych średnich odkształceń $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{ave}}^0$ to ciało jest statystycznie homogenizowalne. Zatem dla odpowiedniego dużego obszaru $B \approx B^*$ ruchome średnie odkształcenia są wielkościami makroskopowymi

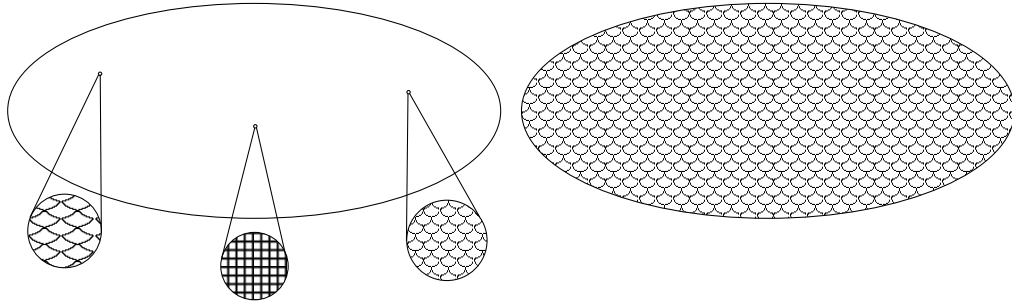
$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{y}) \approx \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) dV = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{ave}}(\mathbf{X}). \quad (3.3)$$

W analogicznym sensie, uogólniając do kontinuum gradientowego, podamy teraz warunek statystycznej homogenizowalności rzędu II, rozumiany w sensie ruchomych średnich odkształceń. Jeżeli istnieją warunki brzegowe, które dla odpowiednio dużego obszaru V_0 i niezależnie od kształtu jego brzegu, prowadzą do liniowego pola ruchomych średnich odkształceń $\varepsilon_{\text{ave}}^1$ i jednorodnego pola ruchomych średnich odkształceń η_{ave}^0 , to ciało jest statystycznie homogenizowalne. Zatem, dla odpowiedniego dużego obszaru $B \approx B^*$ ruchome średnie odkształcenia są wielkościami makroskopowymi

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}(\mathbf{y}) &\approx \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \varepsilon(\mathbf{x}) dV + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \text{sym}[\mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})] dV = \varepsilon_{\text{ave}}(\mathbf{X}), \\ \bar{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) &\approx \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) dV = \boldsymbol{\eta}_{\text{ave}}(\mathbf{X}).\end{aligned}\quad (3.4)$$

Podsumowując, warunek statystycznej homogenizowalności rzędu I zakłada, że w małym otoczeniu punktu materialnego rozkład makroskopowych odkształceń efektywnego materiału jest jednorodny. Warunek statystycznej homogenizowalności rzędu II, zakłada że w małym otoczeniu punktu materialnego rozkład makroskopowych odkształceń efektywnego materiału jest liniowy.

W ogólności nie wymaga się globalnej statystycznej homogenizowalności i wystarczy, że odpowiednio duże otoczenie B^* punktu \mathbf{X} jest statystycznie homogenizowalne. Umożliwia to analizę szerszej klasy problemów, w którym RVE jest statycznym reprezentantem pewnego otoczenia (odpowiednio dużego) rozpatrywanego punktu \mathbf{X} , por. rys. 3.3.



Rysunek 3.3: Po lewej ciało lokalnie statystycznie homogenizowane i po prawej ciało globalnie statystycznie homogenizowane

Zakładamy, że są znane równania fizyczne składników mikrostruktury (wiedząc, że dla szerokiej klasy materiałów prostych związki fizyczne są znane). Więcej, poprzez eksperyment znacznie łatwiej można wyznaczyć parametry równań fizycznych materiałów prostych. Ze względów praktycznych w metodzie numerycznej homogenizacji, przyjmujemy że rozpatrywane RVE jest opisane równaniami ośrodka rzędu I, zarówno dla makrokontinuum klasycznego i gradientowego. Zatem, w rozważanym RVE o objętości V z brzegiem Γ , obowiązuje następujący komplet równań

$$\text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = 0 \quad \text{w } V, \quad (3.5)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{u}]] \quad \text{w } V, \quad (3.6)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^\alpha = \mathcal{S}^\alpha \{\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha(\tau), \tau \in [0, t]\} \quad \text{w } V^\alpha, \quad (3.7)$$

gdzie t oznacza aktualny czas, $\alpha = 1, 2, \dots, N$, a N jest liczbą składników mikrostruktury, np. matrycy, inkluzji itd. Wpływ sił masowych jest pominięty, zakładając że mikrostruktura oddziałuje z otoczeniem wyłącznie poprzez siły kontaktowe. Do kompletu równań brakuje warunków brzegowych, które zostaną podane później.

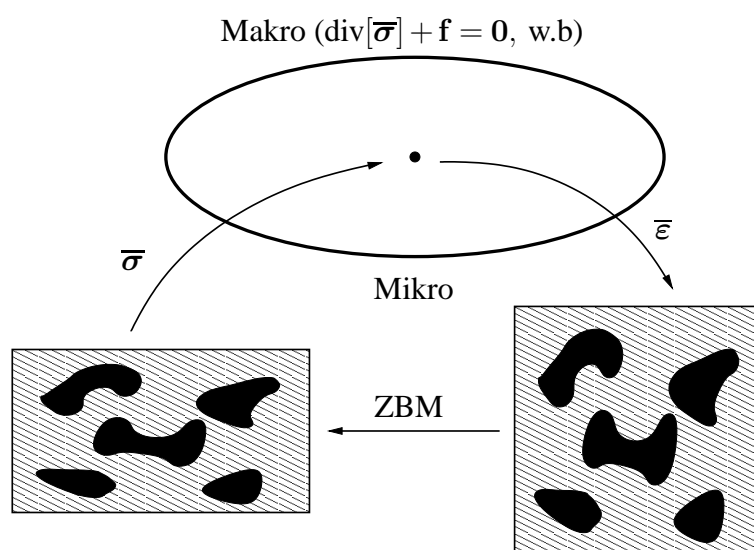
W szczególności, podane zostaną warunki brzegowe, zapewniające deformacje RVE zgodną z odkształceniem $\boldsymbol{\eta}$. Z [39] wiemy, że uśredniając wprost kontinuum gradientowe, na brzegu RVE

muszą być nałożone ograniczenia na normalne gradienty przemieszczeń, co nie jest spójne z intencją posługiwania się klasycznym opisem problemu brzegowego dla RVE. Z tej przyczyny, poniżej przedstawiona metoda uśredniająca, która nie prowadzi do warunków brzegowych wyższego rzędu.

3.2 Uśrednianie dla kontinuum rzędu I

Korzystając z prac [46, 53, 79], gdzie jest podana definicja makrowielkości wyrażonych przez wielkości mikroskalowe, zaprezentowano również, jak skonstruować uogólnione warunki brzegowe dla ośrodka rzędu I.

W szczególności, jest podane, jak dla danego makroodkształcenia są obliczane wielkości mikroskopowe, a następnie na ich podstawie makronapężenia, zob. rys. 3.4. Makroodkształcenie wyrażone jest w unikalny sposób, gdy znane są przemieszczenia na brzegu RVE. Z kolei makronapężenie wyznaczone jest jednoznacznie przez siły brzegowe RVE dla stanu równowagi.



Rysunek 3.4: Obliczanie makronapężenia

3.2.1 Mikro-makro kinematyka

Celem sformułowania poprawnych warunków brzegowych dla RVE, przemieszczenia są rozwijane w szereg Taylora, ograniczany do członu rzędu pierwszego:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}}^0(\mathbf{X}) + \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{X}) + \mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x}), \quad (3.8)$$

gdzie \mathbf{X} jest wektorem wodzącym środka geometrycznego RVE, \mathbf{x} jest wektorem wodzącym w lokalnym układzie RVE. Kreska ponad wielkościami oznacza wielkości makroskopowe. Dodatkowy człon \mathbf{r} jest błędem obcięcia, który interpretuje się jako mikrofluktuacje pola przemieszczeń. Różniczkując równanie (3.8) po \mathbf{x} , są określone relacje między mikroskopowym i makroskopowym odkształceniem:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{r}]], \quad (3.9)$$

dalej relacja ta zostanie spełniona w słabym sensie. Pole mikrofluktuacji przemieszczeń \mathbf{r} obliczone zostaje tak, by spełnione zostało równanie równowagi dla każdego punktu RVE, przy czym na to pole nakładane są odpowiednie warunki ograniczające.

3.2.2 Odształcenia

Makroodkształcenie $\bar{\epsilon}$ określone jako wartość średnią mikroodkształceń ϵ odniesione do objętości RVE. Całkując równanie (3.9) i skalując przez objętość RVE otrzymujemy

$$\frac{1}{V} \int_V \epsilon dV = \bar{\epsilon} + \frac{1}{V} \int_V \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{r}]] dV. \quad (3.10)$$

Równość między średnią wartością mikroodkształceń i lokalną wartością makroodkształcenia jest otrzymana z warunku:

$$\int_V \text{grad}[\mathbf{r}] dV = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \int_{\Gamma} \mathbf{r} \otimes \mathbf{n} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.11)$$

Warunek ten zapewnia, że deformacja brzegu RVE w średnim sensie jest zgodna z zadanym lokalnym makroodkształceniem $\bar{\epsilon}$. Żądamy, by części symetryczna i antysymetryczna gradientu mikrofluktuacji pola przemieszczeń były równa zero. Zerowanie się antysymetrycznej części gradientu przemieszczeń wynika z założenia małych rotacji. Równanie (3.11) jest dalej nazywane kinematycznym warunkiem brzegowym nałożonym na pole mikrofluktuacji przemieszczeń. Przepisując równanie (3.11) wyrażone w przemieszczeniach określone jest wzorem

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{u} d\Gamma. \quad (3.12)$$

Tak więc tensor makroskopowego odkształcenia wyrażony zostaje za pomocą przemieszczeń na brzegu RVE.

3.2.3 Naprężenia

Analogicznie, jak dla odkształceń, makroskopowe naprężenia $\bar{\sigma}$ są wyrażane przez wartość średnią mikronaprężenia:

$$\bar{\sigma} \equiv \frac{1}{V} \int_V \sigma dV \quad (3.13)$$

W następnym podpunkcie zostanie pokazane, że definicja (3.16) jest spójna z zasadą prac wirtualnych. Powyższą relację można wyprowadzić na podstawie twierdzenie Hilla-Mandela, tzn., że średnia wartość pracy mikronaprężeń jest równa pracy makroskopowych naprężeń.

Celem pokazania równości między całką po objętości i całką po brzegu RVE w równaniu (3.16), są wykorzystywane równania równowagi $\text{div}[\sigma] = \mathbf{0}$ we wzorze na pochodną iloczynu funkcji:

$$\mathbf{x} \otimes \text{div}[\sigma] + (\text{grad}[\mathbf{x}]) \cdot \sigma = \text{div}[\mathbf{x} \otimes \sigma] = \sigma. \quad (3.14)$$

Wykorzystując równość (3.14) i stosując twierdzenie o dywergencji otrzymujemy

$$\frac{1}{V} \int_V \text{div}[\mathbf{x} \otimes \sigma] dV = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \sigma \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma. \quad (3.15)$$

W rezultacie makronaprężenie wyrażone jest przez siły brzegowe:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \otimes \mathbf{x} d\Gamma. \quad (3.16)$$

3.2.4 Praca wirtualna i warunki brzegowe

Celem wykazania słuszności relacji pomiędzy makronapężeniem i wartością średnią mikronapężeń (3.16) dla ciała statystycznie homogenizowalnego pokażemy, że wartość pracy mikronapężeń na wirtualnych mikroodkształceniach jest równa pracy makronapężeń na makroodkształceniach:

$$\frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma. \quad (3.17)$$

Podstawiając wariacje przemieszczeń (3.8) do prawej strony równania (3.17) otrzymujemy:

$$\delta W = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{r} d\Gamma. \quad (3.18)$$

Wynika z (3.18), że twierdzenie Hilla-Mandela jest spełnione, gdy ostatnia całka w (3.18) jest równa zeru. Ostatni człon w (3.18) jest dalej nazwany statycznym warunkiem brzegowym, który, obok warunku kinematycznego, jest drugim ograniczeniem na pole mikrofluktuacji przemieszczeń.

Przemieszczeniowe warunki brzegowe

Definicja przemieszczeniowych warunków brzegowych ma postać

$$\mathbf{u} \equiv \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \forall x \in \Gamma. \quad (3.19)$$

Taki warunek wymusza liniową deformację na brzegu Γ . Wstawiając równanie (3.19) do (3.17) otrzymamy

$$\begin{aligned} \delta W &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{x} \cdot \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Gamma, \\ &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Warto spostrzec, że (3.19) można zapisać w postaci

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (3.21)$$

a przez to statyczny warunek brzegowy (3.18) jest z góry spełniony. Równanie (3.21) zapisane w formie residuów ważonych, ma postać

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{t} \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Gamma = 0 \quad \forall \delta \mathbf{t}, \quad (3.22)$$

Postać (3.22) przemieszczeniowych warunków brzegowych jest wygodna, kiedy zadanie na poziomie mikro rozwiązujemy metodami numerycznymi. Po wprowadzeniu, skończenie elementowej interpolacji przemieszczeń, powyższe równanie prowadzi do układu n równań algebraicznych, gdzie n jest liczbą stopni swobody na brzegu RVE.

Naprężeniowe warunki brzegowe

Definicja statycznych warunków brzegowych jest określona wzorem

$$\mathbf{t} \equiv \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \quad \forall x \in \Gamma, \quad (3.23)$$

który prowadzi do stałego rozkładu sił na brzegu Γ . Wstawiając statyczne warunki brzegowe do równania (3.17) i korzystając z definicji (3.10) otrzymujemy

$$\delta W = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \delta \mathbf{u} d\Gamma = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (3.24)$$

Wiedząc, że siły na brzegu Γ są stałe równanie równoważne do (3.23) przyjmuje postać

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}. \quad (3.25)$$

Korzystając z równania (3.25), otrzymamy równanie równoważne z równaniem (3.23):

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{u} d\Gamma = \mathbf{0}. \quad (3.26)$$

Zapisany, statyczny warunek brzegowy w postaci (3.26) jest konsystentny z przemieszczeniową metodą elementów skończonych [46]. Ponadto równanie (3.25) jest szczególnym przypadkiem równania (3.22), które jest spełnione dla wszystkich sił brzegowych stałych na brzegu Γ . Po dyskretyzacji, powyższe równanie prowadzi do układu trzech lub sześciu równań algebraicznych, odpowiednio w dwóch lub trzech wymiarach.

Periodyczne warunki brzegowe

Inną możliwością jest wymuszenie periodycznych warunków brzegowych:

$$\delta \mathbf{u}^+ - \delta \mathbf{u}^- \equiv (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) \cdot \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (3.27)$$

gdzie brzeg Γ składa się z dwóch części $\Gamma = \Gamma^+ \cup \Gamma^-$ z normalnymi $\mathbf{n}^+ = -\mathbf{n}^-$ i punktami $\mathbf{x}^+ \in \Gamma^+$ oraz $\mathbf{x}^- \in \Gamma^-$.

Celem pokazania, że periodyczne warunki brzegowe z góry spełniają twierdzenie Hilla-Mandela zastosujemy wzór (3.17):

$$\begin{aligned} \delta W &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma^+} \mathbf{t}^+ \cdot \delta \mathbf{u}^+ d\Gamma + \frac{1}{V} \int_{\Gamma^-} \mathbf{t}^- \cdot \delta \mathbf{u}^- d\Gamma \\ &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma^+} (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) \otimes \mathbf{t}^+ d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

Definicja (3.27) formułowana w równoważnej całkowej postaci jest dana wzorem:

$$\int_{\Gamma^+} \delta \mathbf{t}^+ \cdot \mathbf{r}^+ d\Gamma + \int_{\Gamma^-} \delta \mathbf{t}^- \cdot \mathbf{r}^- d\Gamma = 0. \quad (3.29)$$

Zapisując równanie (3.29) za pomocą przemieszczeń i wielkości makroodkształceń otrzymamy

$$\int_{\Gamma} (\delta \mathbf{t}^+ - \delta \mathbf{t}^-) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Gamma = 0. \quad (3.30)$$

Warto podkreślić, że równanie (3.11) będzie również z góry spełnione, więc deformacja RVE jest w średnim sensie zgodna z makroodkształceniem $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Tak sformułowane, periodyczne warunki brzegowe po dyskretyzacji łatwo zapisać w postaci układu równań algebraicznych.

Uogólnione warunki brzegowe

Równania kinematyczne (3.11) i statyczne (3.18), nałożone na pole mikrofluktuacji przemieszczeń określone są wzorami:

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{t} \cdot \mathbf{r} d\Gamma = 0, \quad \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.31)$$

gdzie $\delta \mathbf{t}$ jest dopuszczalnym rozkładem sił na brzegu RVE. Zapisując, (3.31) za pomocą przemieszczeń i makroodkształceń mamy

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{t} \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Gamma = 0, \quad (3.32)$$

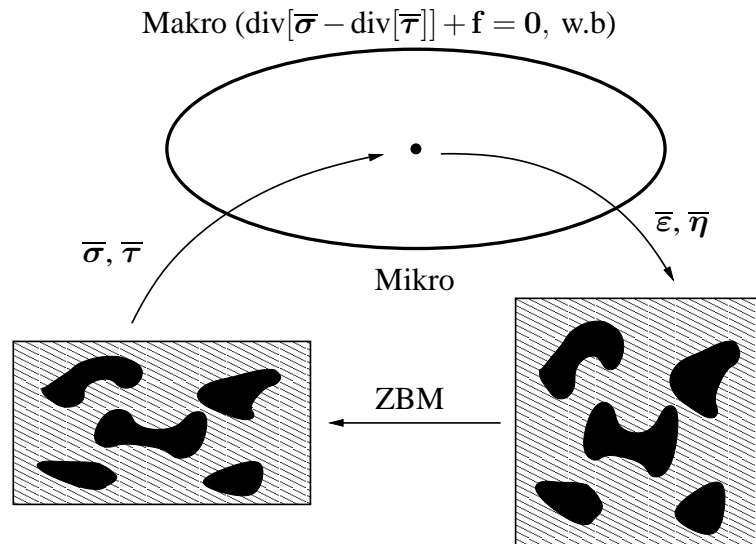
$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Gamma = \mathbf{0}. \quad (3.33)$$

Powyższe równania ujmują każde warunki brzegowe, które z góry spełniają twierdzenie o wartości średniej energii. Innymi słowy, uogólnione warunki brzegowe ujmują każdy przypadek poprawnie postawionych warunków brzegowych dla RVE. Ograniczenia te wraz z równaniami równowagi określają przestrzeń, kinematyczne i statycznie dopuszczalnych, mikrofluktuacji pola przemieszczeń, a zatem i samego pola przemieszczeń w RVE.

3.3 Uśrednianie dla kontinuum rzędu II

Korzystając z prac [39–41, 46, 53], można dojść do definicji makrowielkości wyrażonych poprzez wielkości mikroskopowe. Dodatkowo pokazane zostanie, jak skonstruować uogólnione warunki brzegowe dla homogenizacji statystycznej rzędu II.

Podobnie jak dla kontinuum klasycznego, makroodkształcenia i makronapężenia wyrażone zostaną odpowiednio przez przemieszczenia i siły na brzegu RVE. Dla znanych makroodkształceń obliczone zostają makronapężenia, zob. punkt 3.5. Istotą przedstawianego podejścia jest, że deformacja RVE zgodna z makroodkształceniem rzędu II nie będzie prowadziła do warunków na pochodne przemieszczeń.



Rysunek 3.5: Obliczanie makronapężeń

3.3.1 Mikro-makro kinematyka

Rozwiemy w szeregi Taylora pole przemieszczeń \mathbf{u} , ograniczony za kwadratowym członem:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{X}) + \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{X}) + \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{X}) + \mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x}), \quad (3.34)$$

gdzie \mathbf{X} jest wektorem wodzącym układu odniesienia w skali makroskopowej wskazującym na środek geometryczny RVE, a \mathbf{x} jest wektorem wodzącym dla układu odniesienia umieszczonego w środku geometrycznym RVE.

Związek pomiędzy gradientem przemieszczeń \mathbf{u} , a makroodkształceniami $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ i $\bar{\boldsymbol{\eta}}$ otrzymamy przez różniczkowanie (3.34)

$$\text{grad}[\mathbf{u}] = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} + \text{grad}[\mathbf{r}]. \quad (3.35)$$

Nieznane pole mikrofluktuacji przemieszczeń, po nałożeniu odpowiednich warunków ograniczających, zostaje obliczone tak, by dla każdego punktu RVE spełnione zostało równanie równowagi.

3.3.2 Odkształcenia

Makroodkształcenie $\bar{\epsilon}$ jest określone przez średnią wartość mikroodkształcenia ϵ , zatem całkując (3.35) po objętości RVE i skalując przez nią otrzymujemy

$$\frac{1}{V} \int_V \epsilon dV = \bar{\epsilon} + \bar{\eta} \frac{1}{V} \int_V \mathbf{x} dV + \frac{1}{V} \int_V \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{r}]] dV. \quad (3.36)$$

Jeśli centrum mikroskopowego układu odniesienia znajduje się w środku RVE, to zachodzi

$$\int_V \mathbf{x} dV = \mathbf{0}. \quad (3.37)$$

Dodatkowo, gdy:

$$\int_V \text{grad}[\mathbf{r}] dV = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \int_{\Gamma} \mathbf{r} \otimes \mathbf{n} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.38)$$

wartość makroskopowego odkształcenia określona jest przez wartość średnią mikroodkształceń w RVE. Warto zwrócić uwagę, że makroodkształcenia, zdefiniowane są w identyczny sposób dla homogenizacji statystycznej rzędu I. Powyższy warunek nazwany jest pierwszym kinematycznym warunkiem brzegowym.

Teraz zależność pomiędzy makroskopowym odkształceniem $\bar{\eta}$ i średnimi wielkościami mikroskopowymi jest formułowana w postaci, która nie doprowadzi do warunków na gradienty przemieszczeń na brzegu RVE, co jest spójne z intencją posługiwania się klasycznym opisem kontinuum odkształcalnego w mikroskali. Do tego celu wykorzystane zostały prace [39–41]. Mnożąc równanie (3.35) przez wektor położenia \mathbf{x} i całkując w obszarze RVE, przy założeniu, że środek mikroskopowego układu współrzędnych znajduje się w środku geometrycznym RVE, jest formułowana zależność

$$\mathbf{J} \cdot \bar{\eta} + \int_V \mathbf{x} \otimes \text{grad}[\mathbf{r}] dV = \int_V \mathbf{x} \otimes \text{grad}[\mathbf{u}] dV, \quad (3.39)$$

gdzie :

$$\mathbf{J} = \int_V \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} dV. \quad (3.40)$$

Używając reguły $\text{grad}[\mathbf{a}] \otimes \mathbf{x} = \text{grad}[\mathbf{a} \otimes \mathbf{x}] - \mathbf{a} \otimes \mathbf{I}$, słusznej dla dowolnego \mathbf{a} , w równaniu (3.39) i stosując twierdzenie o dywergencji, zmienimy całki po objętości na całki wzdłuż brzegu Γ :

$$\begin{aligned} \mathbf{J} \cdot \bar{\eta} + \frac{1}{2} \mathbf{I} \otimes \mathbf{J} : \bar{\eta} &= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{u} d\Gamma \\ &\quad - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{r} d\Gamma. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Z warunku, by wartość makroskopowego odkształcenia $\bar{\eta}$ była niezależna od mikrofluktuacji pola przemieszczeń \mathbf{r} , wynika równanie

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.42)$$

które jest nazywane drugim kinematycznym warunkiem brzegowym. Zapiszemy powyższe równanie w przemieszczeniach

$$\frac{1}{2} \int_V (\mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{x} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{x}) dV : \bar{\eta} = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{u} d\Gamma, \quad (3.43)$$

Gdy spełniony jest pierwszy kinematyczny warunek brzegowy (3.38) i drugi kinematyczny warunek brzegowy (3.42), odkształcenie RVE w średnim sensie jest zgodne z zadany makroodkształceniem $\bar{\epsilon}$ i makroodkształceniem $\bar{\eta}$.

3.3.3 Naprężenia

Oprócz wyprowadzonego naprężenia (3.16), można wyprowadzić wzór na naprężenia rzędu II wyrażone przez wielkości mikroskopowe. W następnym podpunkcie pokażemy, że poniżej przedstawiona definicja spełnia twierdzenie Hilla-Mandela. Tensor makronaprężenia trzeciego rzędu $\bar{\tau}$ ma postać

$$\bar{\tau} \equiv \frac{1}{2V} \int_V (\boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\sigma}) dV \quad (3.44)$$

Można wykazać, że równość między całką po objętości i po brzegu RVE jest prawdziwa. Korzystając z równań równowagi (zachowania pędu i momentu krętu): $\text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{0}$; $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$, otrzymana zostanie równość:

$$\text{div}[\mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{1} \otimes \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{x} \otimes \mathbf{1} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = (\mathbf{1} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \mathbf{1}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.45)$$

Stosując twierdzenie o dywergencji do (3.44) i używając (3.45) dochodzimy do zależności

$$\begin{aligned} \int_V (\boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\sigma}) dV &= \int_V \text{div}[\mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\sigma}] dV \\ &= \int_{\Gamma} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \mathbf{1}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Tensor $\bar{\tau}$, definiowany za pomocą (3.44), ma lewą symetrię i jest sprzężony przez pracę z $\bar{\eta}$. Ważnym jest, że makronaprężenia wyższego rzędu da się wyrazić przez siły brzegowe, co jest spójne z klasycznym opisem ośrodka ciągłego w RVE.

3.3.4 Praca wirtualna i warunki brzegowe

Twierdzenie Hilla-Mandela wymaga, by średnia pracy, wyrażona w wielkościach mikroskopowych, była równa pracy wyrażonej w wielkościach makroskopowych. Zapisane zostanie twierdzenie, które jest równoważne zasadzie prac wirtualnych:

$$\frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\boldsymbol{\tau}} : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}}. \quad (3.47)$$

Równanie (3.47) definiuje makronaprężenia $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ i $\bar{\boldsymbol{\tau}}$. Stosując twierdzenie o dywergencji do lewej strony (3.47) i korzystając z równań równowagi otrzymujemy

$$\delta W = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma. \quad (3.48)$$

Zapisując wektor przemieszczeń poprzez wielkości makroskopowe, w powyższym równaniu otrzymamy

$$\delta W = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}} + \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{r} d\Gamma, \quad (3.49)$$

co pokazuje, po uwzględnieniu definicji odkształceń i naprężeń, że twierdzenie Hilla-Mandela jest spełnione, gdy

$$\int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{r} d\Gamma = 0. \quad (3.50)$$

Równanie (3.50) zapewnia, że praca mikrofluktuacji wirtualnego pola przemieszczeń na siłach brzegowych jest równa zero. Powyższy warunek będzie nazywany statycznym warunkiem brzegowym. Ma on identyczną postać, jak dla homogenizacji statystycznej rzędu I.

Przemieszczeniowe warunki brzegowe

Definicja przemieszczeniowych warunków brzegowych ma postać

$$\mathbf{u} \equiv \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}} \quad \forall x \in \Gamma. \quad (3.51)$$

Pokażemy, że warunek brzegowy (3.51) spełniają twierdzenie o wartości średniej (tzw. Hilla-Mandela):

$$\begin{aligned} \delta W &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{x} \cdot \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}}) d\Gamma = \\ &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}} = \\ &= \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\boldsymbol{\tau}} : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Przemieszczeniowy warunek brzegowy (3.51) ma postać

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (3.53)$$

Pisząc powyższe równanie za pomocą przemieszczeń, otrzymujemy

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{t} \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}) d\Gamma = 0. \quad (3.54)$$

Przemieszczeniowe warunki brzegowe spełniają, z pierwszym i drugim, kinematyczny warunek brzegowy oraz statyczny warunek brzegowy.

Naprężeniowe warunki brzegowe

Naprężeniowe warunki brzegowe dla uśredniania rzędu II definiowane są w całkowym sensie. Przez naprężeniowe warunki brzegowe rozumiane są takie, które prowadzą do deformacji zgodnej z zadanymi miarami odkształceń oraz liniowego rozkładu sił na brzegu RVE. Warunki naprężeniowe formułowane są przez następujące równania:

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.55)$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.56)$$

gdzie statyczny warunek brzegowy (3.50) jest automatycznie spełniony. Zapisując powyższe równania w przemieszczeniach, dla zadanych makroodkształceń, otrzymujemy

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{u} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.57)$$

$$\frac{1}{2} \int_V (\mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{x} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{x}) dV : \bar{\boldsymbol{\eta}} - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{u} \otimes \mathbf{x} d\Gamma = \mathbf{0}. \quad (3.58)$$

Równanie (3.57) i (3.58) są konsyistentne z przemieszczeniową wersją metody elementów skończonych. Tak samo, jak dla przemieszczeniowych warunków brzegowych ich postać jest łatwa do zastosowania w skończenie elementowej aproksymacji. Powyższe równania są dla dwóch wymiarów układem odpowiednio: trzech i sześciu równań algebraicznych.

Periodyczne warunki brzegowe

Innym, często używanym rodzajem warunków brzegowych, jest

$$\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \equiv (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2}(\mathbf{x}^+ \otimes \mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^- \otimes \mathbf{x}^-) : \bar{\boldsymbol{\eta}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (3.59)$$

Pokażemy, że periodyczne warunki brzegowe z góry zapewniają spełnienie twierdzenia Hilla-Mandela. Z równania (3.47) mamy

$$\begin{aligned} \delta W &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma^+} \mathbf{t}^+ \cdot \delta \mathbf{u}^+ d\Gamma + \frac{1}{V} \int_{\Gamma^-} \mathbf{t}^- \cdot \delta \mathbf{u}^- d\Gamma = \\ &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma^+} (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) \otimes \mathbf{t}^+ d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2V} \int_{\Gamma^+} (\mathbf{x}^+ \otimes \mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^- \otimes \mathbf{x}^-) \otimes \mathbf{t}^+ d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}} = \\ &= \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{t} d\Gamma : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}} = \\ &= \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\boldsymbol{\tau}} : \delta \bar{\boldsymbol{\eta}}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Zauważmy, że twierdzenie o wartości średniej jest równoważne spełnieniu równania

$$\int_{\Gamma^+} \delta \mathbf{t}^+ \cdot \mathbf{r}^+ d\Gamma + \int_{\Gamma^-} \delta \mathbf{t}^- \cdot \mathbf{r}^- d\Gamma = 0. \quad (3.61)$$

Zapisując powyższe równanie w przemieszczeniach, otrzymamy

$$\int_{\Gamma} (\mathbf{t}^+ - \delta \mathbf{t}^-) \cdot (\delta \mathbf{u} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}) d\Gamma = 0. \quad (3.62)$$

Należy zwrócić uwagę, że periodyczne warunki brzegowe wymuszają deformację, zgodną z antysymetryczną częścią tensora odkształcenia rzędu II. Aby deformacja RVE była zgodna z symetryczną częścią $\bar{\boldsymbol{\eta}}$, należy dodać równanie (3.58).

Uogólnione warunki brzegowe

Równania kinematyczne (3.38) i (3.42) zapewniają, że RVE odkształca się w średni sposób zgodny z zadanymi makroodkształceniami. Równanie statyczne (3.50) spełnia twierdzenie Hilla-Mandela. Przypomnimy równania:

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{t} \cdot \mathbf{r} d\Gamma = 0, \quad \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad \int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes \mathbf{r} d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.63)$$

które zapisane w wirtualnych przemieszczeniach i wirtualnych makro wielkościach mają postać

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{t} \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}) d\Gamma = 0, \quad (3.64)$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}) d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (3.65)$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} \otimes (\mathbf{u} - \mathbf{x} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}) d\Gamma = \mathbf{0}. \quad (3.66)$$

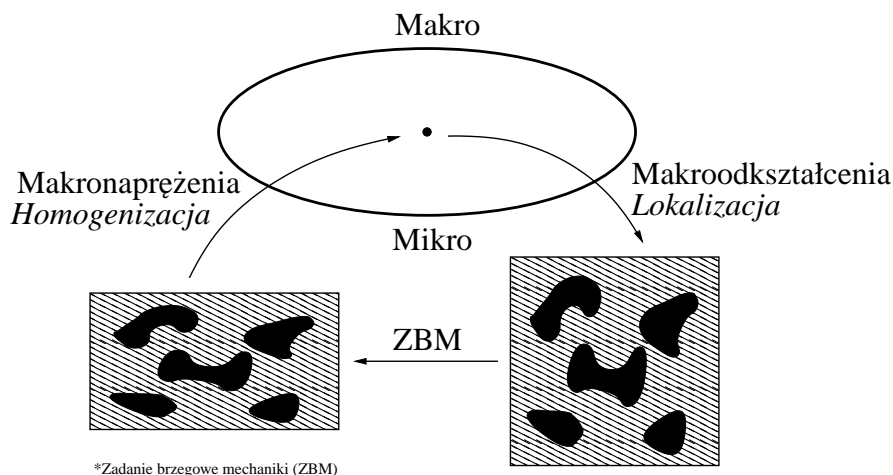
Taka postać warunków brzegowych jest wygodna w numerycznej analizie, szczególnie w metodzie numerycznej homogenizacji. Przedstawione warunki brzegowe (pierwszy kinematyczny warunek brzegowy, drugi kinematyczny warunek brzegowy i statyczny warunek brzegowy), określają przestrzeń dopuszczalnych mikrofluktuacji pola przemieszczeń. Po dodaniu równań równowagi, pole mikrofluktuacji przemieszczeń określone zostaje w sposób jednoznaczny.

Rozdział 4

Metoda numerycznej homogenizacji

Przeprowadzanie symulacji problemu z dużą liczbą niejednorodności MES, wymaga dyskretyzacji co najmniej o charakterystycznym rozmiarze niejednorodności, np. inkluzji, włókna. Jest to niemożliwe, ponieważ wymagałoby za dużo pamięci komputera i zbyt dużo czasu procesora. Z tej przyczyny, do rozwiązania problemu, najczęściej posługujemy się podejściem fenomenologicznym, konstruując związek konstytutywny na podstawie eksperymentu. Innym, bardziej złożonym obliczeniowo podejściem, jest dwuskalowa dyskretyzacja problemu, gdzie odpowiedź każdego RVE obliczana jest za pomocą MES.

W sformułowaniu MES, w którym dla znanych makroodkształceń poszukiwane będą makronapężenia i konsyistentne operatory sztywności. Obliczenia, w każdym z punktów całkowania Gaussa dla przydzielonego mu indywidualnego RVE, będą przeprowadzone za pomocą MES.



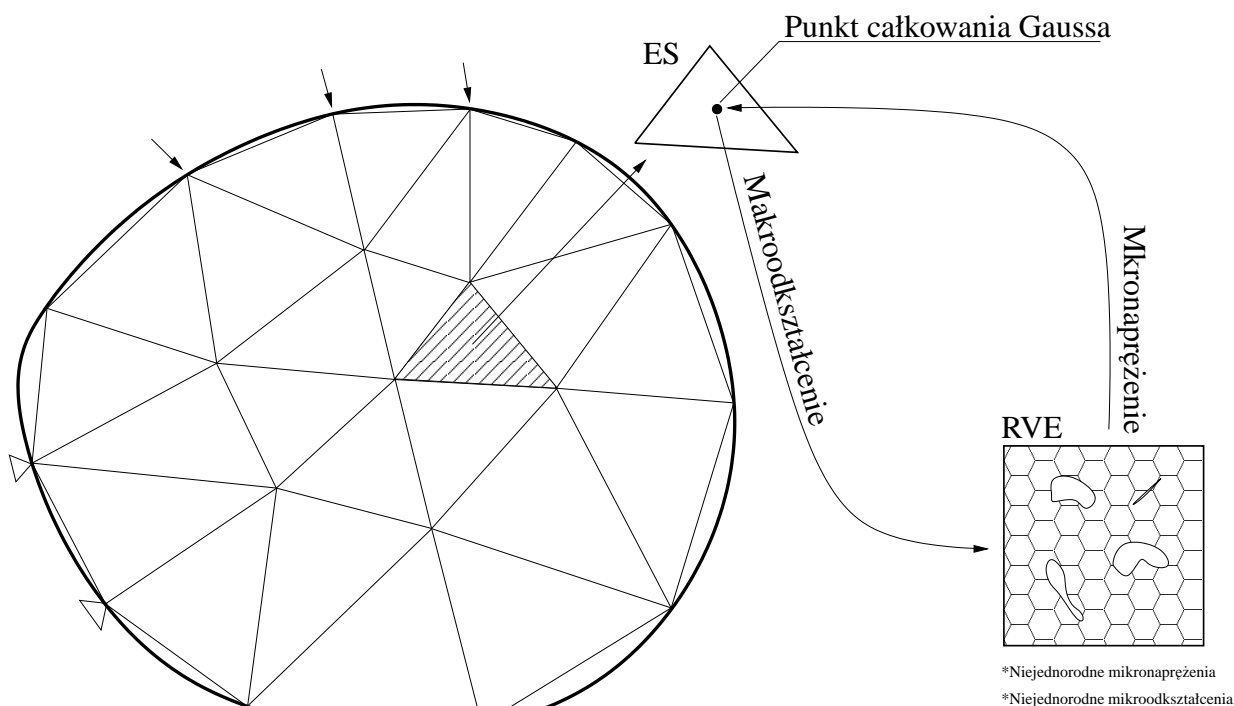
Rysunek 4.1: Obliczanie makronapężenia

Po wyborze skal makroskopowej i mikroskopowej, za pracami [20–22, 25, 39–41, 46], algorytm numerycznej homogenizacji (ang. *computational homogenization* CH) będzie opierał się na czterech zadaniach:

- modelowanie ciała w makroskopowej skali obserwacji
- modelowanie mechanicznego zachowania na poziomie mikroskopowej skali obserwacji
- *lokalizacji*, która determinuje rozwiązanie wewnątrz RVE, na podstawie danych miar makroodkształceń

- *homogenizacji*, służącej do obliczania miar makronaprzeżeń dla znanej dystrybucji mikronaprzeżeń w RVE, zob. 4.1.

Algorytm CH nie odbiega od klasycznego algorytmu MES dla zadań nieliniowych. W każdym makroskopowym punkcie całkowania Gaussa, zob. 4.2, obliczane jest makronaprzeżenie w chwili czasu t_n , znając: makroodkształcenie i przyrost makroodkształcenia w danej chwili; mechaniczną historię obciążenia, począwszy od $t = 0$. W klasycznym MES, historia brana jest pod uwagę poprzez zmienne wewnętrzne. W przypadku CH, w skali makro wewnętrzne zmienne nie występują w jawny sposób, historia uwzględniona zostaje poprzez mikroskopowe zmienne wewnętrzne. Wiąże się to z potrzebą zachowania w pamięci komputera zmiennych wewnętrznych dla każdego RVE.

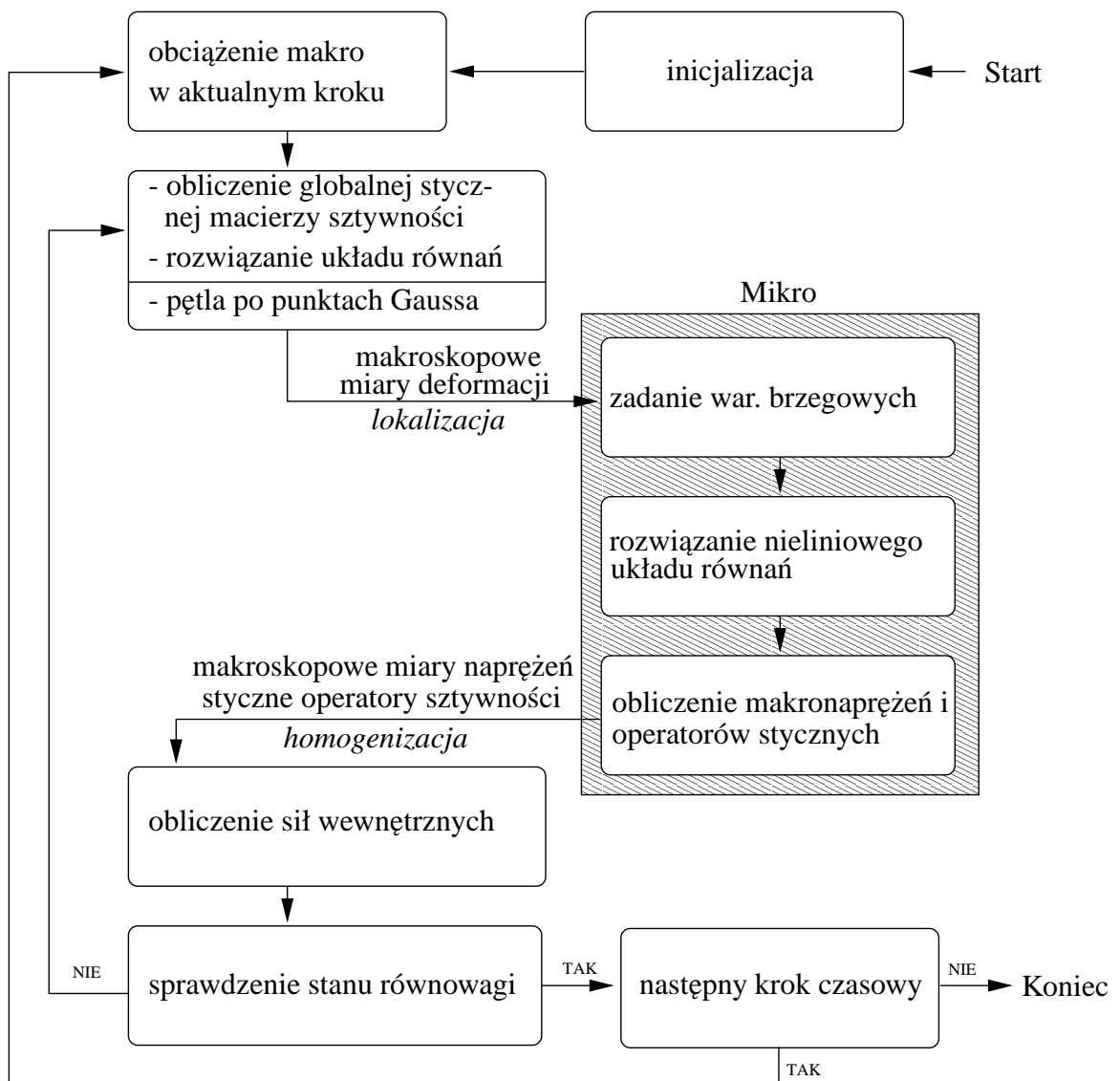


Rysunek 4.2: Idea metody numerycznej homogenizacji

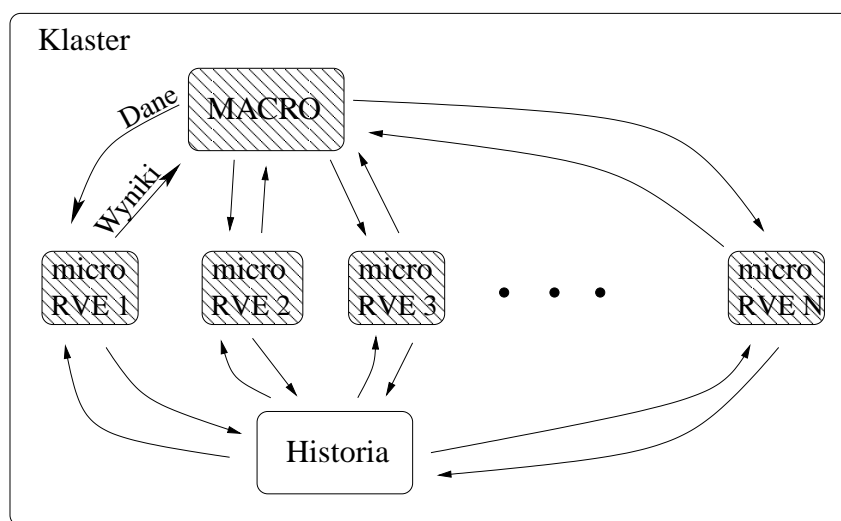
Z matematycznego punktu widzenia model fenomenologiczny jest najczęściej schematem różniczkowym, który w postaci przyrostowej pozwala na iteracyjne obliczanie przyrostów zmiennych wewnętrznych i naprężenia, dla danej chwili czasu. W przypadku CH, schemat różniczkowy zastąpiony jest przez odpowiedź RVE na podstawie rozwiązania zadania brzegowego mechaniki: t.zn znając makroskopowe odkształcenie, w danym punkcie całkowania Gaussa, RVE jest deformowane zgodnie z miarami makroodkształceń, następnie za pomocą MES (można użyć i innych metod dyskretyzacyjnych do rozwiązania zadania dla RVE, zob. [25]) obliczane są makronaprzeżenia.

Większość algorytmów MES jest opartych na metodzie Newtona-Raphsona, celem uwzględnienia nieliniowości. Z tego powodu, oprócz makronaprzeżenia, muszą być obliczone styczne operatory sztywności dla każdego RVE, zob. rys. 4.3.

Ze względu na dużą złożoność metody CH, czas obliczeń na jednym procesorze jest bardzo duży. Dla każdego makroskopowego podprzyrostu procedury Newtona - Raphsona należy rozwiązać zadanie brzegowe dla każdego punktu całkowania. Z drugiej strony, zadanie CH jest proste do zrównoleglenia. Zadania brzegowe mechaniki dla wielu RVE można rozwiązywać na wielu procesorach jednocześnie, zobacz rys. 4.4. Duży, jasny prostokąt symbolizuje przestrzeń klastra linukowego/uniksowego, czyli zbiór dostępnych węzłów, procesorów i pamięci. Małe, zakreskowane prostokąty symbolizują zadania przydzielone poszczególnym węzłom klastra.



Rysunek 4.3: Algorytm dla metody komputerowej homogenizacji



Rysunek 4.4: Zrównoleglenie metody numerycznej homogenizacji

Rozdział 5

Metoda elementów skończonych w numerycznej homogenizacji

5.1 Sformułowanie MES dla kontinuum rzędu I

Opis ośrodka ciągłego rzędu I, obowiązujące równania oraz pola przemieszczeń \mathbf{u} , miary odkształcenia $\boldsymbol{\varepsilon}$ i naprężenia $\boldsymbol{\sigma}$ zostały przedstawione w rozdziale 2. Sformułowanie przemieszczeniowe MES, dla kontinuum rzędu I, jest powszechnie znane, dla kompletności pracy zostanie ono jednak przypomniane. Dla prostoty zostanie pominięty wpływ sił masowych.

5.1.1 Przestrzenie funkcji aproksymujących i wagowych

Mamy przestrzenie funkcji aproksymujących i wagowych: funkcje przemieszczeń i wag należą do przestrzeni

$$\mathcal{U} = \{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{u} = \mathbf{g} \quad \text{na } \Gamma_u\}; \quad \mathcal{V}_u = \{\mathbf{v}_u \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{v}_u = \mathbf{0} \quad \text{na } \Gamma_u\}, \quad (5.1)$$

gdzie \mathcal{H}^1 jest przestrzenią Sobolewa [33].

5.1.2 Sformułowanie słabe problemu

Dla danych \mathbf{g} i \mathbf{t} , szukanych $\mathbf{u} = (\mathbf{v}_u + \mathbf{g}) \in \mathcal{U}$, dla każdego $\mathbf{v}_u \in \mathcal{V}_u$ napiszemy równanie całkowe:

$$\mathcal{F}(\mathbf{v}_u, \mathbf{u}) = \int_{\Omega} \text{grad}[\mathbf{v}_u] : \boldsymbol{\sigma} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{v}_u \cdot \mathbf{t} d\Gamma = 0, \quad (5.2)$$

gdzie tensor naprężenia jest funkcją $\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), t)$. Dowód na poprawność powyższego równania jest prosty i zostanie pominięty. Dla przemieszczeniowego sformułowania MES, z góry, spełnione są równania

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} \quad \text{na } \Gamma_u, \quad (5.3)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{u}]] \quad \text{w } \Omega, \quad (5.4)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}, t) \quad \text{w } \Omega. \quad (5.5)$$

Słabemu sformułowaniu odpowiadają równania w punkcie:

$$\text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{0} \quad \text{w } \Omega, \quad (5.6)$$

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \quad \text{na } \Gamma_{\sigma}. \quad (5.7)$$

5.1.3 Dyskretyzacja słabej formy

Wprowadzamy skończone wymiarowe podprzestrzenie funkcji aproksymujących $\mathcal{U}^h \subset \mathcal{U}$ i $\mathcal{V}_u^h \subset \mathcal{V}_u$. Zatem mamy

$$\mathcal{F}(\mathbf{v}_u^h, \mathbf{u}^h) = \int_{\Omega} \mathbf{v}_\varepsilon^h : \boldsymbol{\sigma}^h d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{v}_u^h \cdot \mathbf{t}^h d\Gamma = 0, \quad (5.8)$$

gdzie: $\mathbf{v}_\varepsilon^h = \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{v}_u^h]]$.

W dalszej części tego podrozdziału będziemy używać zapisu macierzowego dla skończone elementowej aproksymacji pola przemieszczeń. Zapiszemy podstawowe związki między przemieszczeniem, a wielkościami węzłowymi:

$$\mathbf{u}^h = \mathbf{N}_u \mathbf{u}, \quad (5.9)$$

gdzie \mathbf{N}_u jest macierzą funkcji kształtu. Związek między odkształceniem, a wartościami przemieszczeń węzłowych będzie dany wzorem

$$\boldsymbol{\varepsilon}^h = \mathbf{L}_u \mathbf{N}_u \mathbf{u} = \mathbf{B}_u \mathbf{u}, \quad (5.10)$$

gdzie \mathbf{L}_u jest macierzowym operatorem gradientów i \mathbf{B}_u jest operatorem odkształcenia - przemieszczenia, zawierającym gradienty funkcji kształtu.

5.1.4 Linearyzacja

Równanie równowagi dla dyskretnego równania, które wynika z (5.8) w chwili t_{n+1} , jest zapisane w postaci

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1} d\Omega = \mathbf{F}_{\text{ext},n+1}, \quad (5.11)$$

gdzie $\mathbf{F}_{\text{ext},n+1}$ jest wektorem zewnętrznych sił węzłowych. Stosując metodę Newtona, równanie (5.11) przyjmie postać

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \Delta \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \mathbf{F}_{\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i d\Omega. \quad (5.12)$$

Związek między podprzyrostem (iteracyjną korektą) wartości przemieszczeń węzłowych $\Delta \mathbf{u}$, a podprzyrostem naprężenia $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ ma postać

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} \mathbf{B}_u \Delta \mathbf{u}, \quad (5.13)$$

gdzie \mathbf{D} jest konsyistentną styczną macierzą sztywności. Wstawiając (5.13) do (5.11) daje zapisane równanie równowagi w postaci

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{D} \mathbf{B}_u d\Omega \Delta \mathbf{u} = \mathbf{F}_{\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i d\Omega \quad (5.14)$$

Dla równania (5.14) stosujemy podejście iteracyjne. W trakcie procedury Newtona wartości podprzyrostów przemieszczenia są sumowane według wzoru

$$\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{i+1} = \Delta \mathbf{u}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{u}. \quad (5.15)$$

Powyższe postępowanie prowadzi do rozwiązania ciągu równań macierzowych, o postaci

$$\mathbf{K} \Delta \mathbf{u} = \mathbf{F}, \quad (5.16)$$

gdzie:

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{D} \mathbf{B}_u d\Omega, \quad (5.17)$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i d\Omega \quad (5.18)$$

5.2 Sformułowanie ES dla kontinuum rzędu II

Opis ośrodka ciągłego rzędu II, rządzące równania oraz pola przemieszczeń \mathbf{u} , miary odkształceń $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\eta}$ i naprężeń $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\tau}$ zostały przedstawione w rozdziale 2. Wykorzystując prace [2, 63] sformułujemy mieszany element skończony, gdzie pola przemieszczeń i ich gradientów będą aproksymowane niezależnie. Dla prostoty zostanie pominięty wpływ sił masowych i zostanie założony gładki brzeg obszaru Ω . Rezygnacja z powyższych założeń jest możliwa w ramach przedstawianego podejścia (por. [2, 39]).

5.2.1 Przestrzenie funkcji aproksymujących i wagowych

Definiujemy niezależne przestrzenie funkcji aproksymujących i wagowych:

1. funkcje przemieszczeń i wagowe należące do przestrzeni

$$\mathcal{U} = \{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{u} = \mathbf{g} \text{ na } \Gamma_u\}; \quad \mathcal{V}_u = \{\mathbf{v}_u \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{v}_u = \mathbf{0} \text{ na } \Gamma_u\}, \quad (5.19)$$

2. funkcje gradientów przemieszczeń i wagowe należą do przestrzeni

$$\mathcal{H} = \{\mathbf{H} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \boldsymbol{\eta} = \text{grad}[\mathbf{g}] \text{ na } \Gamma_u\}; \quad \mathcal{V}_H = \{\mathbf{v}_H \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{v}_H = \mathbf{0} \text{ na } \Gamma_u\}, \quad (5.20)$$

3. funkcje dywergencji naprężeń wyższego rzędu należą do przestrzeni

$$\mathcal{P} = \{\mathbf{v}_\rho \in \mathcal{H}^0\}. \quad (5.21)$$

gdzie \mathcal{H}^0 i \mathcal{H}^1 są przestrzeniami Sobolewa,

5.2.2 Sformułowanie słabe problemu brzegowego

Dla danych funkcji na brzegu \mathbf{g} (przemieszczeń), \mathbf{t} (sił brzegowych) i \mathbf{r} (par sił brzegowych), szukanym pól $\mathbf{u} = (\mathbf{v}_u + \mathbf{g}) \in \mathcal{U}$, $\boldsymbol{\eta} = (\delta\boldsymbol{\eta} + \text{grad}[\mathbf{g}]) \in \mathcal{H}$ i $\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{P}$, dla każdego $\mathbf{v}_u \in \mathcal{V}_u$, $\mathbf{v}_H \in \mathcal{V}_H$ i $\mathbf{v}_\rho \in \mathcal{P}$ za [63] zostanie zapisane równanie całkowe

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{v}_u, \mathbf{v}_H, \mathbf{v}_\rho, \mathbf{u}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\rho}) = & \int_{\Omega} [\boldsymbol{\sigma} : \text{grad}[\mathbf{v}_u] + \boldsymbol{\tau} : \text{grad}[\mathbf{v}_H]] d\Omega + \\ & \int_{\Omega} [\boldsymbol{\rho} : (\mathbf{v}_H - \text{grad}[\mathbf{v}_u]) + \mathbf{v}_\rho : (\mathbf{H} - \text{grad}[\mathbf{u}])] d\Omega - \\ & \int_{\Gamma} [\mathbf{v}_u \cdot \mathbf{t} + \mathbf{v}_H : \mathbf{n} \otimes \mathbf{r}] d\Gamma - \\ & \int_{\Gamma} (\mathbf{v}_H - \text{grad}[\mathbf{v}_u]) : (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{r}) d\Gamma \\ & = 0, \end{aligned} \quad (5.22)$$

gdzie występują funkcje naprężenia $\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, t)$ i naprężenia wyższego rzędu $\boldsymbol{\tau} = \mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, t)$. W [2, 39] możemy znaleźć dowód na poprawność sformułowania mieszanego (5.22). Dla słabego sformułowania w (5.22) z góry spełniane są równania

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} \quad \text{na} \quad \Gamma_u, \quad (5.23)$$

$$\mathbf{H} = \text{grad}[\mathbf{g}] \quad \text{na} \quad \Gamma_u, \quad (5.24)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\text{grad}[\mathbf{u}]] \quad \text{w} \quad \Omega, \quad (5.25)$$

$$\boldsymbol{\eta} = \text{grad}[\mathbf{H}] \quad \text{w} \quad \Omega, \quad (5.26)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, t) \quad \text{w} \quad \Omega, \quad (5.27)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, t) \quad \text{w} \quad \Omega. \quad (5.28)$$

Warto zwrócić uwagę, że istnieją inne możliwości zdefiniowania odkształceń ε i η : równania (5.25) i (5.26). Silna postać równań, które są spełnione w sensie słabym

$$\operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\rho}] = \mathbf{0} \quad \text{w} \quad \Omega, \quad (5.29)$$

$$\boldsymbol{\rho} = \operatorname{div}[\boldsymbol{\tau}] \quad \text{w} \quad \Omega, \quad (5.30)$$

$$\mathbf{H} = \operatorname{grad}[\mathbf{u}] \quad \text{w} \quad \Omega, \quad (5.31)$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\rho}) - \mathbf{D}^s[\mathbf{n}] \otimes \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) - \mathbf{D}^s[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad \text{na} \quad \Gamma_\sigma, \quad (5.32)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \quad \text{na} \quad \Gamma_\sigma. \quad (5.33)$$

5.2.3 Dyskretyzacja słabej formy

Wprowadzamy skończenie wymiarowe podprzestrzenie funkcji aproksymujących $\mathcal{U}^h \subset \mathcal{U}$, $\mathcal{H}^h \subset \mathcal{H}$, $\mathcal{P}^h \subset \mathcal{P}$ i podobnie dla przestrzeni funkcji wagowych. Gdy spełnione są równania (5.31) i (5.33) w całkowym sensie, ostatni człon w (5.22) jest znacznie mniejszy niż pozostałe. Dlatego pominiemy ten człon w dalszych rozważaniach. Ostatecznie mamy równanie postaci

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{v}_u^h, \mathbf{v}_H^h, \mathbf{v}_\rho^h, \mathbf{u}^h, \mathbf{H}^h, \boldsymbol{\rho}^h) = & \\ & \int_\Omega [\boldsymbol{\sigma}^h : \operatorname{grad}[\mathbf{v}_u^h] + \boldsymbol{\tau}^h : \operatorname{grad}[\mathbf{v}_H^h]] d\Omega + \\ & \int_\Omega [\boldsymbol{\rho}^h : (\mathbf{v}_H^h - \operatorname{grad}[\mathbf{v}_u^h]) + \mathbf{v}_\rho^h : (\mathbf{H}^h - \operatorname{grad}[\mathbf{u}^h])] d\Omega - \\ & \int_\Gamma [\mathbf{v}_u^h \cdot \mathbf{t} + \mathbf{v}_H^h : \mathbf{n} \otimes \mathbf{r}] d\Gamma - \\ & = 0. \end{aligned} \quad (5.34)$$

W dalszej części tego podrozdziału będziemy używać zapisu macierzowego dla skończenie elementowej aproksymacji MES. Pole przemieszczeń, gradientów przemieszczeń i dywergencji naprężenia rzędu II będą dane wzorami

$$\mathbf{u}^h = \mathbf{N}_u \mathbf{u}, \quad (5.35)$$

$$\mathbf{H}^h = \mathbf{N}_H \mathbf{h}, \quad (5.36)$$

$$\boldsymbol{\rho}^h = \mathbf{N}_\rho \boldsymbol{\rho}, \quad (5.37)$$

gdzie \mathbf{N}_u , \mathbf{N}_H i \mathbf{N}_ρ są odpowiednio: funkcjami kształtu pola przemieszczeń, gradientów przemieszczeń i pola dywergencji naprężeń wyższego rzędu. Związki między wielkościami węzłowymi, a odkształceniem rzędu I i II mają postać

$$\varepsilon^h = \mathbf{B}_u \mathbf{u}, \quad (5.38)$$

$$\eta^h = \mathbf{B}_H \mathbf{h}, \quad (5.39)$$

gdzie \mathbf{B}_u jest standardowym operatorem odkształcenia-przemieszczenia zawierającym pochodne funkcji kształtu dla przemieszczeń, \mathbf{B}_H jest operatorem wiążącym odkształcenie wyższego rzędu z gradient przemieszczenia zawierającym pochodne funkcje kształtu dla gradientów przemieszczeń. Związek między polami przemieszczeń, a węzłowymi przemieszczeniami jest określany wzorem

$$\operatorname{grad}[\mathbf{u}^h] = \mathbf{L}_u \mathbf{u}, \quad (5.40)$$

gdzie \mathbf{L}_u jest operatorem gradientów przemieszczeń funkcji kształtu pola przemieszczeń.

5.2.4 Linearyzacja

Stosując metodę Newtona dla chwili t_{n+1} , na podstawie (5.34) piszemy układ równań

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1} + \mathbf{B}_H^T \boldsymbol{\tau}_{n+1} + (\mathbf{L}_u^T - \mathbf{N}_H^T) \rho_{n+1} d\Omega = \mathbf{F}_{\text{ext},n+1}, \quad (5.41)$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{N}_\rho^T (\mathbf{L}_u \mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{N}_H \mathbf{h}_{n+1}) d\Omega = \mathbf{0}, \quad (5.42)$$

gdzie pierwsze z równań jest równaniem równowagi, a drugie równaniem ciągłości.

Równanie równowagi

Linearyzując równanie równowagi (5.41), otrzymujemy w wyniku równanie postaci

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \Delta \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B}_H^T \Delta \boldsymbol{\tau} + (\mathbf{L}_u^T - \mathbf{N}_H^T) \Delta \rho d\Omega = \\ & \mathbf{F}_{\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i + \mathbf{B}_H^T \boldsymbol{\tau}_{n+1}^i + (\mathbf{L}_u^T - \mathbf{N}_H^T) \rho_{n+1}^i d\Omega, \end{aligned} \quad (5.43)$$

gdzie wartości przyrostów naprężeń wyrażamy

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}^1 \Delta \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{D}^2 \Delta \boldsymbol{\eta} \quad (5.44)$$

$$\Delta \boldsymbol{\tau} = \mathbf{D}^3 \Delta \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{D}^4 \Delta \boldsymbol{\eta}, \quad (5.45)$$

a \mathbf{D}^1 , \mathbf{D}^2 , \mathbf{D}^3 i \mathbf{D}^4 są konsyistentnymi stycznymi macierzami sztywności. Ostatecznie równania równowagi przyjmują postać

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T (\mathbf{D}^1 \mathbf{B}_u \Delta \mathbf{u} + \mathbf{D}^2 \mathbf{B}_H \Delta \mathbf{h}) d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \mathbf{B}_H^T (\mathbf{D}^3 \mathbf{B}_u \Delta \mathbf{u} + \mathbf{D}^4 \mathbf{B}_H \Delta \mathbf{h}) d\Omega + \\ & \int_{\Omega} (\mathbf{L}_u^T - \mathbf{N}_H^T) \mathbf{N}_\rho \Delta \rho d\Omega = \\ & \mathbf{F}_{\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i + \mathbf{B}_H^T \boldsymbol{\tau}_{n+1}^i + (\mathbf{L}_u^T - \mathbf{N}_H^T) \rho_{n+1}^i d\Omega, \end{aligned} \quad (5.46)$$

W procedurze iteracyjnej wartości przyrostów przemieszczenia, gradientów przemieszczeń i mnożników Lagrange'a są sumowane według wzorów

$$\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{i+1} = \Delta \mathbf{u}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{u}, \quad (5.47)$$

$$\Delta \mathbf{h}_{n+1}^{i+1} = \Delta \mathbf{h}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{h}, \quad (5.48)$$

$$\Delta \boldsymbol{\rho}_{n+1}^{i+1} = \Delta \boldsymbol{\rho}_{n+1}^i + \Delta \boldsymbol{\rho}. \quad (5.49)$$

Równanie ciągłości

Równanie ciągłości (5.42) między gradientami aproksymowanego pola przemieszczeń, a aproksymowanym polem gradientów przemieszczeń w chwili czasu t_{n+1} ma postać

$$\int_{\Omega} \mathbf{N}_\rho^T (\mathbf{L}_u \Delta \mathbf{u} - \mathbf{N}_H \Delta \mathbf{h}) d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{N}_\rho^T (\mathbf{L}_u \mathbf{u}_{n+1}^i - \mathbf{N}_H \mathbf{h}_{n+1}^i) d\Omega. \quad (5.50)$$

5.2.5 Zapis macierzowy

Równania (5.46) i (5.50) piszemy w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{L} & \mathbf{C} \\ \mathbf{M} & \mathbf{T} & \mathbf{E} \\ \mathbf{C}^T & \mathbf{E}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{h} \\ \Delta \boldsymbol{\rho} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{F}_H \\ \mathbf{F}_\rho \end{Bmatrix}, \quad (5.51)$$

gdzie po lewej stronie występują macierze

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{D}^1 \mathbf{B}_u d\Omega, \quad (5.52)$$

$$\mathbf{L} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{D}^2 \mathbf{B}_H d\Omega, \quad (5.53)$$

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \mathbf{L}_u^T \mathbf{N}_\rho d\Omega, \quad (5.54)$$

$$\mathbf{M} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_H^T \mathbf{D}^3 \mathbf{B}_u d\Omega, \quad (5.55)$$

$$\mathbf{T} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_H^T \mathbf{D}^4 \mathbf{B}_H d\Omega, \quad (5.56)$$

$$\mathbf{E} = - \int_{\Omega} \mathbf{N}_H^T \mathbf{N}_\rho d\Omega. \quad (5.57)$$

Składowe prawej strony równań 5.81 mają postać

$$\mathbf{F}_u = \mathbf{F}_{u,\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i d\Omega, \quad (5.58)$$

$$\mathbf{F}_H = \mathbf{F}_{H,\text{ext},n+1} - \int_{\Omega} \mathbf{B}_H^T \boldsymbol{\tau}_{n+1}^i d\Omega, \quad (5.59)$$

$$\mathbf{F}_\rho = - \int_{\Omega} \mathbf{N}_\rho^T (\mathbf{L}_u \mathbf{u}_{n+1}^i - \mathbf{N}_H \mathbf{h}_{n+1}^i) d\Omega. \quad (5.60)$$

Wektory sił zewnętrznych wyrażone są przez wzory

$$\mathbf{F}_{u,\text{ext},n+1} = \int_{\Gamma_\sigma} \mathbf{N}_u t d\Gamma_\sigma, \quad \mathbf{F}_{H,\text{ext},n+1} = \int_{\Gamma_\sigma} \mathbf{N}_H r d\Gamma_\sigma \quad (5.61)$$

5.3 Stabilizacja dla kontinuum rzędu I

Metoda CH wymaga dużej mocy obliczeniowej. W każdym punkcie numerycznego całkowania, aby obliczyć naprężenie odpowiadające znanemu odkształceniu, musimy rozwiązać złożone obliczeniowo zadanie brzegowe mechaniki. Jednym ze sposobów przyspieszenia obliczeń jest zmniejszenie liczby punktów całkowania Gaussa. Dodatkowo, obniżenie rzędu kwadratury Gaussa, zmniejsza rozmiar pamięci potrzebnej na przechowywanie zmiennych historycznych, ponadto istnieje możliwość ograniczenia operacji na elementach macierzy. Zredukowane całkowanie jest jednak przyczyną zmniejszenia rzędu elementowej macierzy sztywności [7, 33]. Oprócz ruchów sztywnych pojawiają się pasożytnicze postacie deformacji o zerowej energii. Oscylacje w rozwiązaniu, związane z niefizycznymi postaciami deformacji, mogą zostać wyeliminowane przez odpowiednią stabilizację elementowej macierzy sztywności.

W pracach [32, 58, 59] wykazano podobieństwo elementu ze zredukowanym całkowaniem do elementów mieszanych, z aproksymowanym polem naprężeń lub z rozszerzonym polem założonych odkształceń (ang. *enhanced assumed strain*).

5.3.1 Macierz stabilizująca dla elementu Q4

Dla równania $\mathbf{K}\Delta\mathbf{u} = \mathbf{F}$ i jednopunktowego całkowania styczna macierz sztywności i wektor prawych stron oblicza się według wzorów

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{B}^e)_u^T \mathbf{D}^e \mathbf{B}_u^e d\Omega \approx \sum_{e=1}^{n_{el}} J^e \mathbf{B}_u^e(\mathbf{c})^T \mathbf{D}(\mathbf{c}) \mathbf{B}_u^e(\mathbf{c}), \\ \mathbf{F} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} (\mathbf{F}_{\text{ext},n+1}^e - \int_{\Omega^e} (\mathbf{B}_u^e)^T (\boldsymbol{\sigma}^e)^i_{n+1} d\Omega) \\ &\approx \sum_{e=1}^{n_{el}} (\mathbf{F}_{\text{ext},n+1}^e - J^e \mathbf{B}_u^e(\mathbf{c})^T \boldsymbol{\sigma}^e(\mathbf{c})^i_{n+1}).\end{aligned}\quad (5.62)$$

Współrzędna \mathbf{c} jest środkiem geometrycznym elementu, w którym jest określany J^e jakobian. Dla równoległoboków jest on stały w elemencie. W ogólnym przypadku czworoboku jakobian nie jest stały w obszarze elementu. Ponadto, jeden punkt całkowania Gaussa w elemencie Q4 prowadzi do powstania dwu dodatkowych zerowych wartości własnych, które nie są związane z ruchem sztywnym.

Podobnie jak w pracach [15, 36, 37, 71], obliczamy człony stabilizujące, które zostaną dodane do macierzy sztywności i wektora prawych stron:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{L}_u^T \boldsymbol{\sigma}(\delta\mathbf{u}^h))^T \boldsymbol{\varphi} \mathbf{L}_u^T \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^h) d\Omega, \quad (5.63)$$

gdzie $\boldsymbol{\varphi} = \varphi \mathbf{I}$ jest współczynnikiem stabilizującym. Dobór wartości współczynnika φ jest podany niżej. Dobór wagi $(\mathbf{L}_u^T \boldsymbol{\sigma}(\delta\mathbf{u}^h))^T$ odpowiada minimalizacji residuum w sensie najmniejszych kwadratów [14]. Teraz zajmiemy się wagą i residuum w powyższym równaniu.

Podobnie jak w [15, 71] waga jest zapisana w postaci

$$\mathbf{P}_u(\delta\mathbf{u}^h) = \mathbf{L}_u^T \mathbf{D} \mathbf{B}_u \delta\mathbf{u} = \mathbf{G} \delta\mathbf{u}, \quad (5.64)$$

unikając jej linearyzacji. Warto zwrócić uwagę, że \mathbf{G} zawiera drugie gradienty funkcji kształtu, a nie zawiera jednak członu stałego i liniowego aproksymowanego pola przemieszczeń. Residuum w kroku $(n+1)$ i iteracji $(i+1)$ dane jest wzorem

$$\mathbf{R}_{\sigma,n+1}^{i+1} = \mathbf{L}_u^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{i+1}(\mathbf{u}^h) = \mathbf{L}_u^T [\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^i(\mathbf{u}^h) + \Delta\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{R}_{\sigma,n+1}^i + \Delta\mathbf{R}_{\sigma}, \quad (5.65)$$

gdzie:

$$\Delta\mathbf{R}_{\sigma} = \mathbf{L}_u^T \mathbf{D} \mathbf{B} \Delta\mathbf{u} = \mathbf{G} \Delta\mathbf{u}_{n+1}^{i+1}, \quad (5.66)$$

a zatem residuum przyjmuje postać

$$\mathbf{R}_{\sigma,n+1}^{i+1} = \mathbf{R}_{\sigma,n+1}^i + \mathbf{G} \Delta\mathbf{u}. \quad (5.67)$$

W rezultacie w zapisie macierzowym człon stabilizujący (5.63) ma postać

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \mathbf{G}^T \boldsymbol{\varphi} (\mathbf{R}_{\sigma,n+1}^i + \mathbf{G} \Delta\mathbf{u}) d\Omega. \quad (5.68)$$

Następnie piszemy globalny układ równań:

$$(\mathbf{K} + \mathbf{K}_{\text{stab}}) \Delta\mathbf{u} = \mathbf{F} + \mathbf{F}_{\text{stab}}, \quad (5.69)$$

w którym macierz stabilizująca ma postać

$$\mathbf{K}_{\text{stab}} = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{G}^e)^T \varphi^e \mathbf{G}^e d\Omega \approx \sum_{e=1}^{n_{el}} J^e (\mathbf{G}^e(\mathbf{c}))^T \varphi^e \mathbf{G}^e(\mathbf{c}), \quad (5.70)$$

a stabilizujący wektor prawych stron

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{stab}} &= - \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{G}^e)^T \varphi^e (\mathbf{R}^e)^i_{\sigma, n+1} d\Omega \\ &\approx \sum_{e=1}^{n_{el}} J^e \mathbf{G}^e(\mathbf{c})^T \varphi^e (\mathbf{R}(\mathbf{c})^e)^i_{\sigma, n+1}. \end{aligned} \quad (5.71)$$

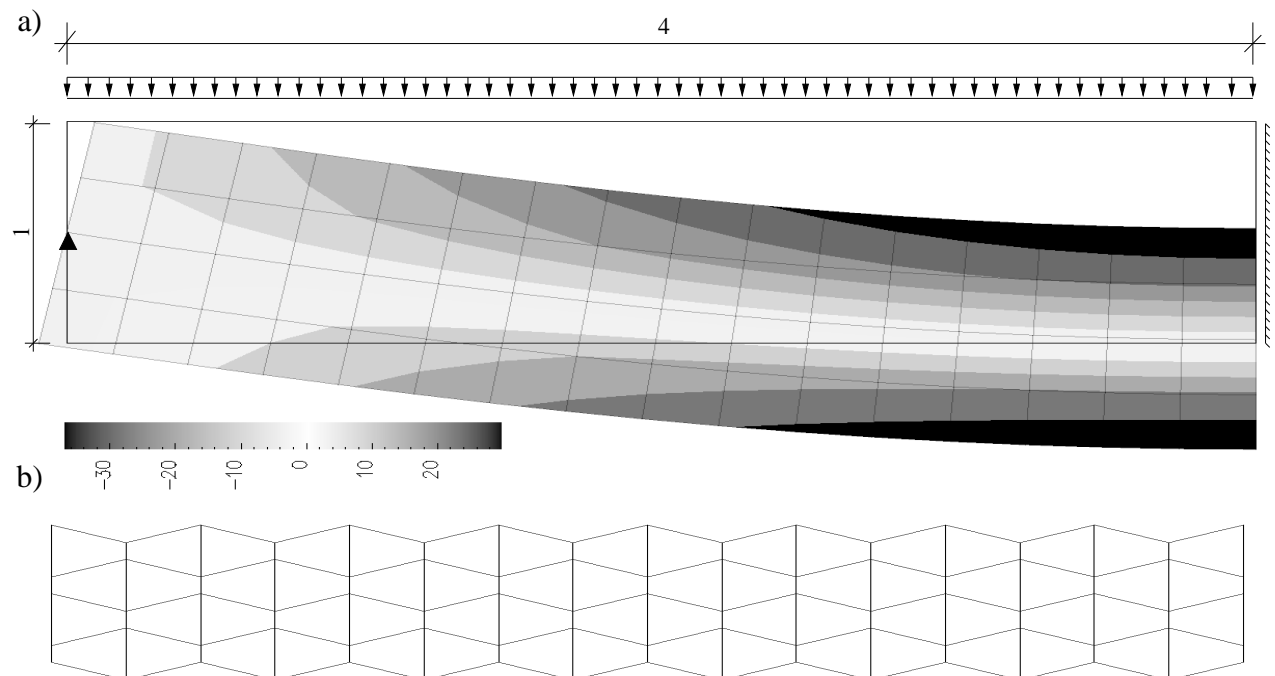
Pozostał nam jeszcze dobór współczynnika stabilizującego φ . Posługując się analizą wymiarową wartość współczynnika jest przyjęta w postaci, por. [15]

$$\varphi = \frac{\alpha^e (h^e)^2}{2\mu}, \quad (5.72)$$

gdzie h^e jest wymiarem charakterystycznym ES, μ jest modułem ścinania, α^e jest bezwymiarowym skalarem, którego wartość musi być odpowiednio dobrana.

5.3.2 Weryfikacja numeryczna

Rozważane są dwa przykłady numeryczne. Pierwszy przykład przedstawia powstanie pasożytniczej postaci deformacji, nazywanej klepsydrą (ang. *hourglass*), por. rys. 5.1b. Poprawne rozwiązanie jest przedstawione na rys. 5.1a po dodaniu macierzy stabilizującej.



Rysunek 5.1: a) Poprawna deformacja i dystrybucja naprężenia σ_x , dla $\alpha = 10^{-8}$

b) Pasożytnicza forma deformacji o charakterystycznym kształcie klepsydry dla $\alpha = 0$

Drugi przykład numeryczny przedstawia rozwiązanie zadania brzegowego (rys. 5.4) dla materiału o liniowych i nieliniowych związkach konstytutywnych. Do rozwiązania zadania użyto elementu czterowęzłowego Q4 z kwadraturą Gaussa 2x2 oraz elementu stałego naprężenia CST z kopertową siatką, ang. *cross-diagonal mesh* (Wiadomo z literatury [7, 33], że taka siatka nie jest wrażliwa na blokadę objętościową) i elementu Q4 z jednopunktową kwadraturą Gaussa i macierzą stabilizującą (przyjęto $\alpha = 10^{-18}$). Przyjęto spójny układ jednostek. Rozwiązanie dokładne, otrzymane na podstawie modelu numerycznego z siatką kopertową, elementem CST i 131072 stopniami swobody.

Rozwiązanie dla materiału ściśliwego Hooke'a (rys. 5.2a i tab. 5.1) wykazuje kwadratową zbieżność przemieszczenia do rozwiązania dokładnego, przy wzroście gęstości siatki. Rozwiązanie dla elementu Q4 z jednopunktową kwadraturą Gaussa, zbiega się od góry do rozwiązania dokładnego, gdy dla elementu Q4 z kwadraturą 2x2 i elementu CST rozwiązanie zbiega do rozwiązania ścisłego od dołu.

Wiemy, że rozważane MES wykazują kwadratową zbieżność przemieszczeń dla liniowej sprężystości [7, 33]. Dla elementu CST i Q4 błąd aproksymacji pola przemieszczeń jest oszacowany przez nierówność

$$\| \mathbf{u} - \mathbf{u}^h \|_{\mathcal{H}^0} \leq C(h^e)^2 \| \mathbf{u} \|_{\mathcal{H}^0}, \quad (5.73)$$

gdzie \mathcal{H}^0 jest odpowiednią przestrzenią Hilberta. Wartość stałej C nie zależy od gęstości siatki h^e i jest różna w różnych zadaniach.

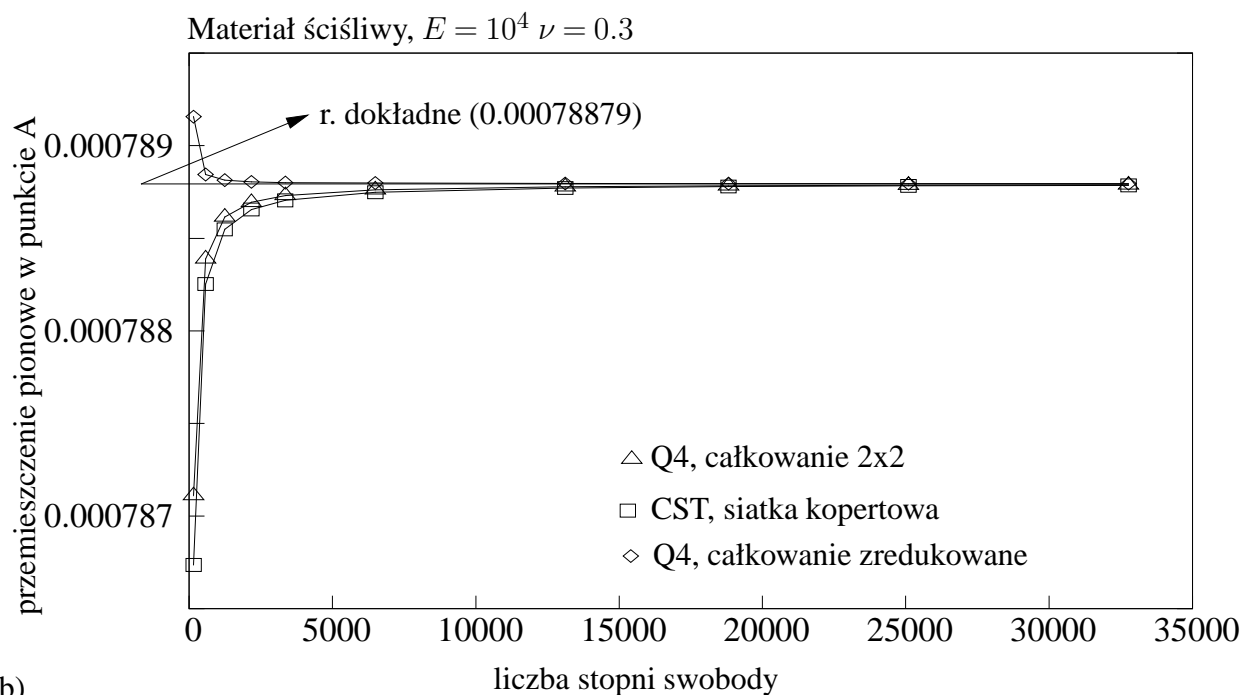
Wartość stałej C, dla tego zadania, ma w przybliżeniu wartość 0.00132, 0.00181 i 0.00014, odpowiednio dla elementów: Q4 (2x2), CST (siatka kopertowa) i Q4 (1x1). Dla tego szczególnego problemu kwadratura z jednym punktem Gaussa w elemencie Q4 daje lepszą dokładność, niż element Q4 z pełnym całkowaniem lub CST dla siatki kopertowej. Zredukowane całkowanie eliminuje blokadę ścinania [7, 33], co wyjaśnia dobre wyniki dla elementu Q4 i całkowania 1x1.

Tabela 5.1: Zbieżność rozwiązania dla materiału ściśliwego dla punktu A i przemieszczenia pionowego. (Materiał Hooke'a, płaski stan naprężenia, por. rys. 5.4)

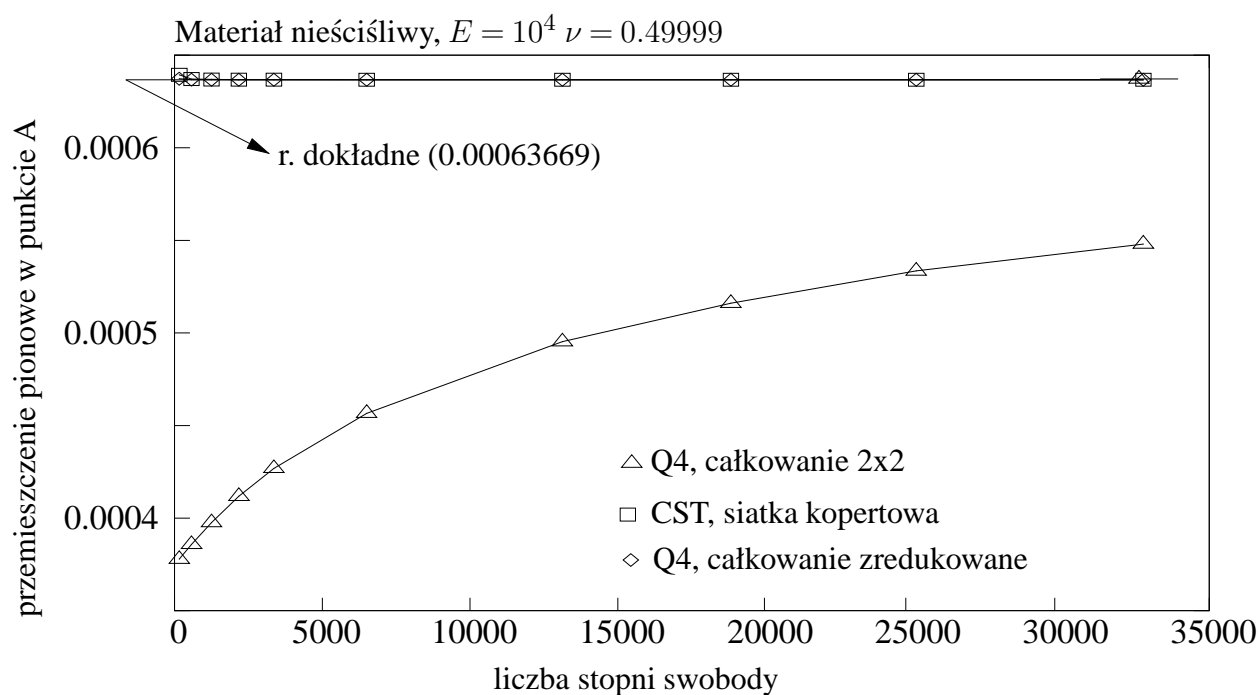
LSS	Q4 (2x2)	CST(kopertowa)	Q4 (1x1)
162	0.78711e-3(0.213%)	0.78673e-3(0.261%)	0.78916e-3(0.047%)
578	0.78838e-3(0.052%)	0.78825e-3(0.068%)	0.78884e-3(0.006%)
1250	0.78861e-3(0.023%)	0.78854e-3(0.032%)	0.78881e-3(0.002%)
2178	0.78869e-3(0.013%)	0.78865e-3(0.018%)	0.78880e-3(0.001%)
3362	0.78873e-3(0.008%)	0.78870e-3(0.011%)	0.78880e-3(0.001%)
6498	0.78876e-3(0.004%)	0.78875e-3(0.005%)	0.78879e-3(0.000%)
13122	0.78877e-3(0.002%)	0.78877e-3(0.002%)	0.78879e-3(0.000%)
18818	0.78878e-3(0.001%)	0.78878e-3(0.001%)	0.78879e-3(0.000%)
25088	0.78878e-3(0.001%)	0.78878e-3(0.001%)	0.78879e-3(0.000%)
32768	0.78878e-3(0.001%)	0.78879e-3(0.000%)	0.78879e-3(0.000%)
132098		0.78879e-3	
C	0.00132	0.00181	0.00014

Z literatury wiadomo [7, 33, 71], że element Q4 z pełnym całkowaniem wykazuje blokadę objętościową dla materiału bliskiego nieściśliwemu. Blokada charakteryzuje się tym, że rozwiązanie zbiega się wolno (nie ma zbieżności kwadratowej przemieszczenia w rozważanym przypadku) lub nie zbiega się w ogóle. Dla elementu CST, z siatką kopertową i elementu Q4, ze zredukowanym całkowaniem, zauważono kwadratową zbieżność, a wartość stałej C, dla rozważanego zadania, jest w przybliżeniu równa odpowiednio: 0.00143 i 0.00041. Jak poprzednio element, Q4 ze zredukowanym całkowaniem daje lepszą dokładność dla rozważanego przypadku.

a)



b)



Rysunek 5.2: Zbieżność dla materiału ściśliwego i nieściśliwego

Tabela 5.2: Zbieżność rozwiązania dla materiału nieściśliwego dla punktu A i przemieszczenia pionowego. (Materiał Hooke’a, płaski stan naprężenia, por. rys. 5.4)

LSS	Q4 (2x2)	CST (kopertowa)	Q4 (1x1)
162	0.37784e-3(40.656%)	0.63937e-3(0.421%)	0.63724e-3(0.086%)
578	0.38582e-3(39.402%)	0.63709e-3(0.063%)	0.63680e-3(0.016%)
1250	0.39764e-3(37.546%)	0.63685e-3(0.025%)	0.63673e-3(0.006%)
2178	0.41176e-3(35.328%)	0.63677e-3(0.013%)	0.63671e-3(0.003%)
3362	0.42688e-3(32.953%)	0.63674e-3(0.078%)	0.63670e-3(0.002%)
6498	0.45669e-3(28.271%)	0.63671e-3(0.031%)	0.63669e-3(0.000%)
13122	0.49521e-3(22.221%)	0.63670e-3(0.016%)	0.63669e-3(0.000%)
18818	0.51605e-3(18.948%)	0.63669e-3(0.000%)	0.63669e-3(0.000%)
25088	0.53347e-3(16.212%)	0.63669e-3(0.000%)	0.63669e-3(0.000%)
32768	0.54797e-3(13.935%)	0.63669e-3(0.000%)	0.63669e-3(0.000%)
132098		0.63669e-3	
C	brak zb.	0.00143	0.00041

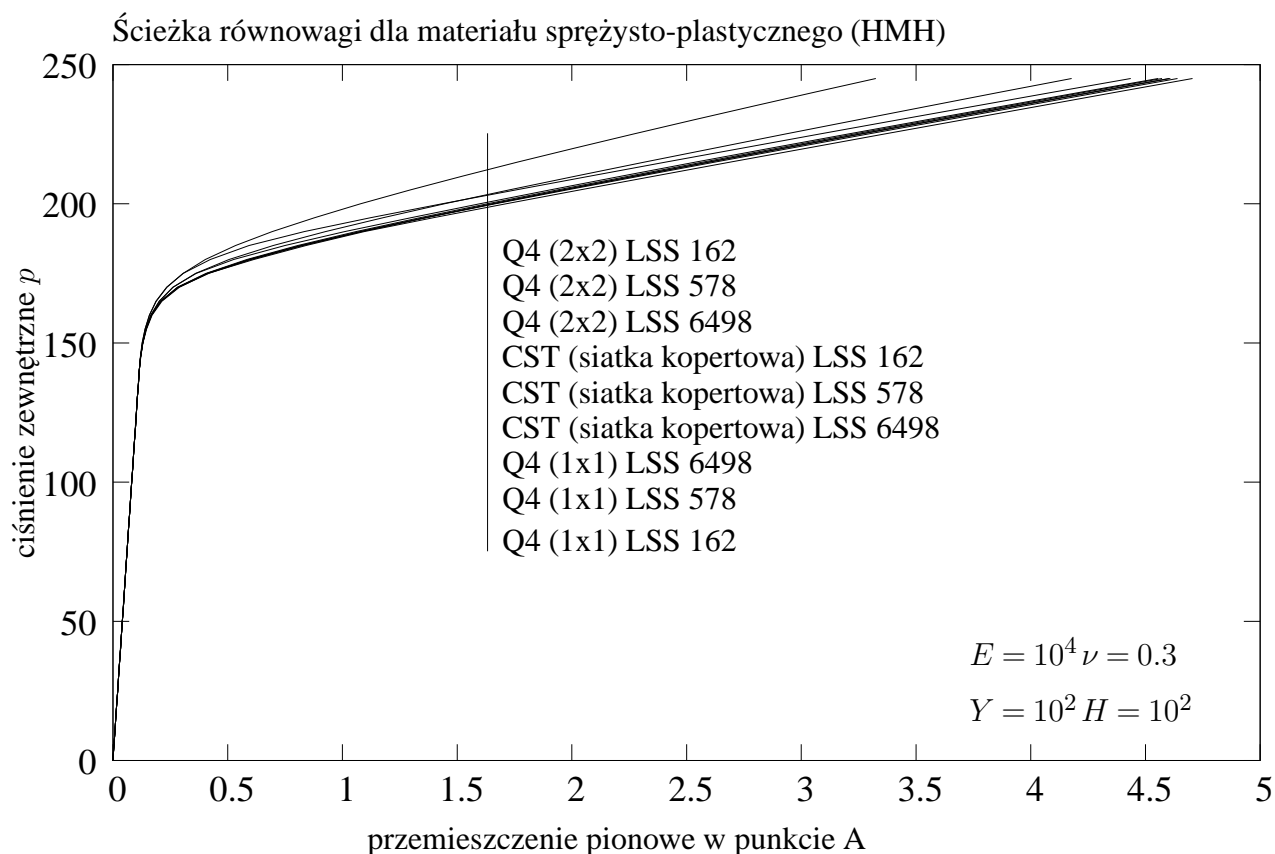
Następnie rozwiązano zadanie o geometrii i warunkach brzegowych, jak na rys. 5.4, dla materiału sprężysto-plastycznego o powierzchni plastyczności HMH z granicą plastyczności $Y = 10^2$ i izotropowym wzmocnieniem $H = 10^2$. Dla rzadkiej siatki (por. rys. 5.3 i tab.5.3) element Q4, z pełnym całkowaniem, wykazuje nadmierną sztywność podczas procesu plastycznego płynięcia. Dla stowarzyszonego prawa płynięcia i plastyczności HMH w płaskim stanie odkształcenia lub w zadaniach 3D, gdy materiał płynie, nie zmienia się jego objętość. Mamy wtedy do czynienia z blokadą objętościową dla elementu Q4 z kwadraturą 2x2 [71]. To wyjaśnia większą sztywność dla elementu Q4 z pełną kwadraturą Gaussa. Dla rzadkiej siatki, jak poprzednio, zauważono nadmierną podatność dla elementu Q4 ze zredukowanym całkowaniem (zobacz tab. 5.3).

Tabela 5.3: Wartość przemieszczenia pionowego dla punktu A i obciążenia $p = 240$, por. rys. 5.4. (Materiał sprężysto-plastyczny z powierzchnią plastyczności HMH i izotropowym wzmocnieniem)

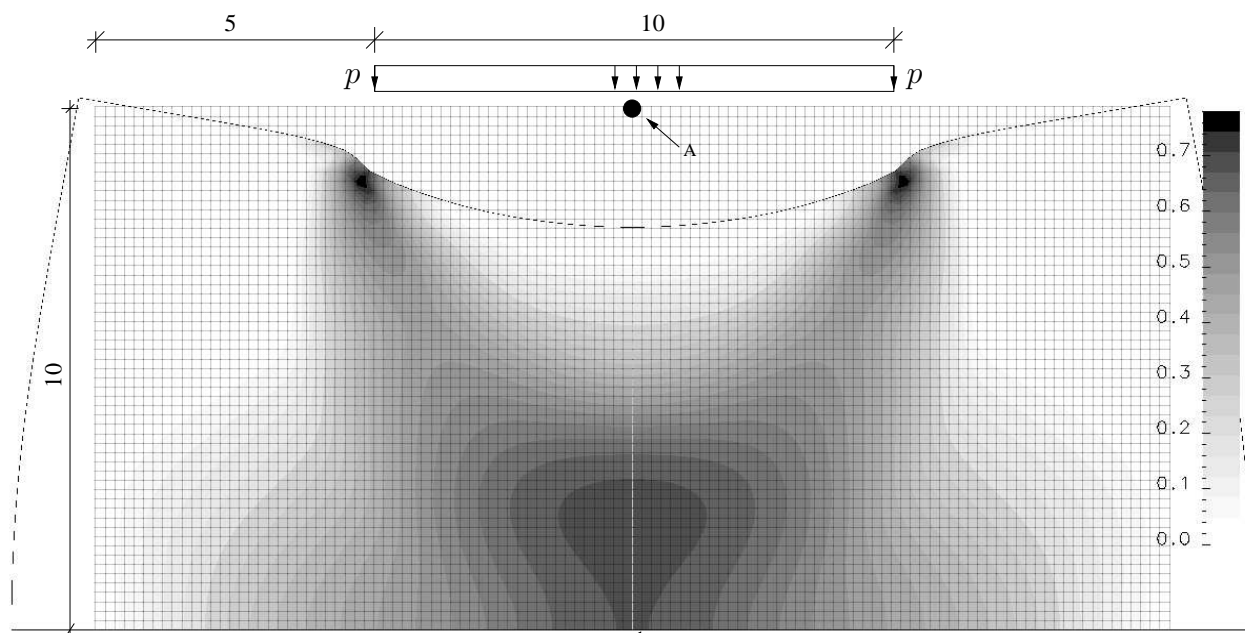
LSS	Q4 (2x2)	CST (kopertowa)	Q4 (1x1)
162	3.05	4.09	4.36
578	3.86	4.21	4.29
6498	4.23	4.26	4.26

5.4 Stabilizacja dla kontinuum rzędu II

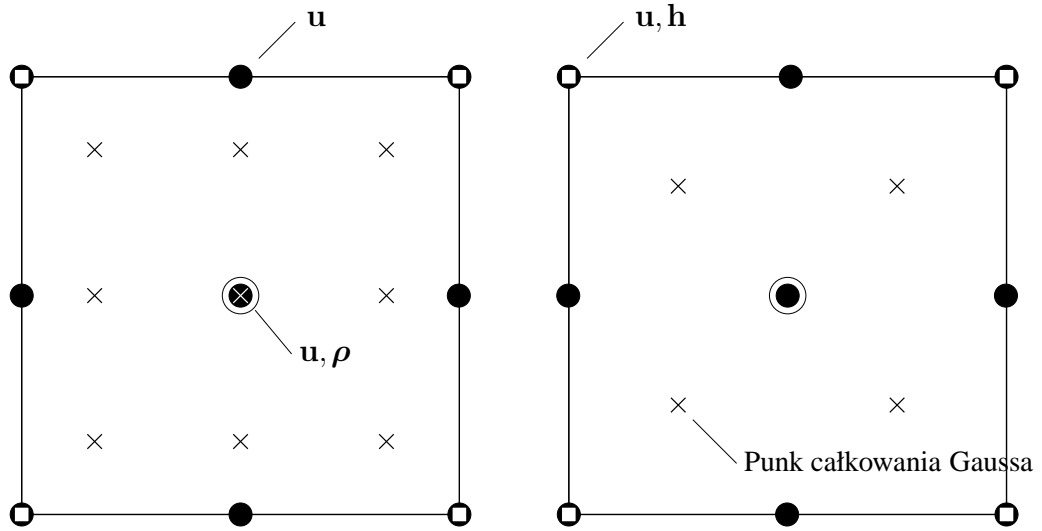
Czerpiąc z doświadczeń innych badaczy, do rozwiązania zadań testowych zastosowano element Q18G16L4, zob. 5.5. Element Q18G16L4 ma bikwadratową aproksymację dla pola przemieszczeń u^h (klasy C^0), biliniową aproksymację dla pola gradientów przemieszczeń h^h (klasy C^0) i stałą aproksymację dla pola dywergencji naprężeń wyższego rzędu ρ^h (klasy C^{-1}). Element ten wymaga całkowania kwadraturą Gaussa 3x3. Taki element jest rekomendowany do praktycznych zastosowań w [39, 63]. Q18G16L4 spełnia warunek stabilnej aproksymacji podany przez Zienkiewicza i Taylora [78]. Jeżeli ten warunek nie byłby spełniony dla skończonego wymiarowego aproksymacji układ równań algebraicznych miałby niejednoznaczne rozwiązanie. Prosty do sprawdzenia warunek z [78], $\min[n_u] + \min[n_H] > \max[n_q]$, jest warunkiem koniecznym, ale nie wystarczającym do jednoznaczności rozwiązania. Trudniejszy do udowodnienia warunek stabilności rozwiązania, znany w literaturze pod nazwami LBB, BB lub inf-sup, można znaleźć w pracach [3, 4, 6].



Rysunek 5.3: Ścieżki równowagi dla materiału sprężysto-plastycznego z powierzchnią plastyczności HMH i izotropowym wzmocnieniem (por. rys. 5.4 i tab. 5.3)



Rysunek 5.4: Geometria, warunki brzegowe, deformacja i rozkład zastępczych odkształceń plastycznych



Rysunek 5.5: Element Q18G16L4, po lewej z pełnym całkowaniem, po prawej ze zredukowanym całkowaniem

Zgodnie z [39, 63] całkowanie elementu Q18G16L4 kwadraturą Gaussa 2x2 powoduje zbyt niski rząd podmacierzy \mathbf{K} (zobacz wzór (5.52)) i rozwiązanie przestaje być stabilne. Jednak zalety wynikające z obniżenia rzędu kwadratury Gaussa w CH, skłoniły autora do budowy stabilizowanego sformułowania elementu Q18G16L4 z kwadraturą Gaussa 2x2.

5.4.1 Macierz stabilizująca dla elementu Q18G16L4

Podobnie do podejścia w [15, 36, 37, 71] dodamy elementową macierz stabilizującą w celu zapewnienia usunięcia defektu rzędu macierzy sztywności przy zredukowanym całkowaniu. Równanie stabilizujące będzie miało postać

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \mathbf{L}_u^T \boldsymbol{\sigma}(\delta \mathbf{u}^h, \delta \mathbf{h}^h) \boldsymbol{\varphi}^e \mathbf{L}_u^T (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^h, \mathbf{H}^h) - \mathbf{N}_\rho \boldsymbol{\rho}^h) d\Omega^e = \mathbf{0}, \quad (5.74)$$

gdzie $\boldsymbol{\varphi} = \varphi \mathbf{I}$, a φ jest współczynnikiem stabilizującym. Współczynnik został określony na podstawie analizy wymiarowej i ma identyczną postać, jak w podrozdziale 5.3. Poprzez (5.74) żądamy spełnienia równań równowagi w sensie metody najmniejszych kwadratów.

Dla równania (5.74) podamy wagę i residuum. Wagę zapiszemy w postaci

$$\mathbf{P} = \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^1 \mathbf{B}_u \delta \mathbf{u} + \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^2 \mathbf{B}_H \delta \mathbf{h} = \mathbf{G}_u \delta \mathbf{u} + \mathbf{G}_H \delta \mathbf{h}. \quad (5.75)$$

Macierze \mathbf{G}_u i \mathbf{G}_H zawierają drugie pochodne funkcji kształtu. Uprościmy \mathbf{P} , biorąc pod uwagę jedynie pierwszy człon:

$$\mathbf{P}_u = \mathbf{G}_u \delta \mathbf{u}. \quad (5.76)$$

Teraz zajmiemy się residuum dla kroku $(n+1)$ i iteracji $(i+1)$:

$$\mathbf{R}_{\sigma, n+1}^{i+1} = \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^1 \mathbf{B}_u \mathbf{u}_{n+1}^{i+1} + \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^2 \mathbf{B}_H \mathbf{h}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{L}_u^T \mathbf{N}_\rho \boldsymbol{\rho}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{R}_{\sigma, n+1}^i + \Delta \mathbf{R}_\sigma, \quad (5.77)$$

gdzie przyrostowe sformułowanie równań fizycznych zostanie użyte do obliczenia $\Delta \mathbf{R}_\sigma$:

$$\Delta \mathbf{R}_\sigma = \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^1 \mathbf{B}_u \Delta \mathbf{u} + \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^2 \mathbf{B}_H \Delta \mathbf{h} - \mathbf{L}_u^T \mathbf{N}_\rho \Delta \boldsymbol{\rho}. \quad (5.78)$$

Residuum $\mathbf{R}_{\sigma,n+1}^{i+1}$ będzie miało postać:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\sigma,n+1}^{i+1} = \\ \mathbf{R}_{\sigma,n+1}^i + \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^1 \mathbf{B}_u \Delta \mathbf{u} + \mathbf{L}_u^T \mathbf{D}^2 \mathbf{B}_H \Delta \mathbf{h} - \mathbf{L}_u^T \mathbf{N}_\rho \Delta \rho = \\ \mathbf{R}_{\sigma,n+1}^i + \mathbf{G}_u \Delta \mathbf{u} + \mathbf{G}_H \Delta \mathbf{h} - \mathbf{G}_\rho \Delta \rho. \end{aligned} \quad (5.79)$$

Ponieważ, w rozważanym elemencie, pole ρ^h aproksymujące mnożniki Lagrange'a jest stałe, macierz \mathbf{G}_ρ jest zerowa. Dodatkowo założymy, że naprężenie σ nie zależy od drugiego gradientu przemieszczeń lub zależy w pomijalnie małym stopniu. Założenia te sprawią że stabilizowana będzie jedynie ta część macierzy sztywności, która związana jest wyłącznie z interpolacją przemieszczeń. Z przyjętego założenia pominięty zostanie człon związany z macierzą \mathbf{G}_H . Równanie stabilizujące piszemy w postaci

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{G}_u^e \delta \mathbf{u})^T \varphi^e (\mathbf{R}_{\sigma,n+1}^{e,i} + \mathbf{G}_u^e \Delta \mathbf{u}) d\Omega = 0. \quad (5.80)$$

Globalny układ równań ze stabilizacją przyjmie postać

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} + \mathbf{K}_{stab} & \mathbf{L} & \mathbf{C} \\ \mathbf{M} & \mathbf{T} & \mathbf{E} \\ \mathbf{C}^T & \mathbf{E}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{h} \\ \Delta \rho \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_u - \mathbf{F}_{u,stab} \\ \mathbf{F}_H \\ \mathbf{F}_\rho \end{bmatrix}, \quad (5.81)$$

gdzie macierz stabilizujące ma postać

$$\mathbf{K}_{stab} = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{G}_u^e)^T \varphi^e \mathbf{G}_u^e d\Omega, \quad (5.82)$$

a wektor stabilizujący po prawej stronie jest równy

$$\mathbf{F}_{u,stab} = \mathbf{R}_{\sigma,n+1}^i + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathbf{G}_u^e)^T \varphi^e \mathbf{G}_u^e \Delta \mathbf{u} d\Omega. \quad (5.83)$$

5.4.2 Weryfikacja numeryczna

Przedstawione zostaną dwa przykłady numeryczne, dla których znamy rozwiązanie analityczne. Pierwszy z testów przedstawia problem, w którym rozwiązanie mieści się w przestrzeni aproksymacyjnej pola przemieszczeń i pola gradientów przemieszczeń ES, więc powinniśmy uzyskać rozwiązanie ściśle. Zadanie rozwiązane dla materiału ściśliwego i prawie nieściśliwego. Drugi z testów numerycznych przedstawia cienką ścinaną warstwę, gdzie na postać rozwiązania duży wpływ będzie miał kinematyczny warunek brzegowy wyższego rzędu, nałożony na gradienty przemieszczeń. Rozwiązanie drugiego problemu nie zawiera się w przestrzeni aproksymacyjnej ES. Pokazana zostanie również wrażliwość rozwiązania na charakterystyczny wymiar skali. Testy zostaną przeprowadzone dla materiału o związkach fizycznych Mindlina [47–49, 70]:

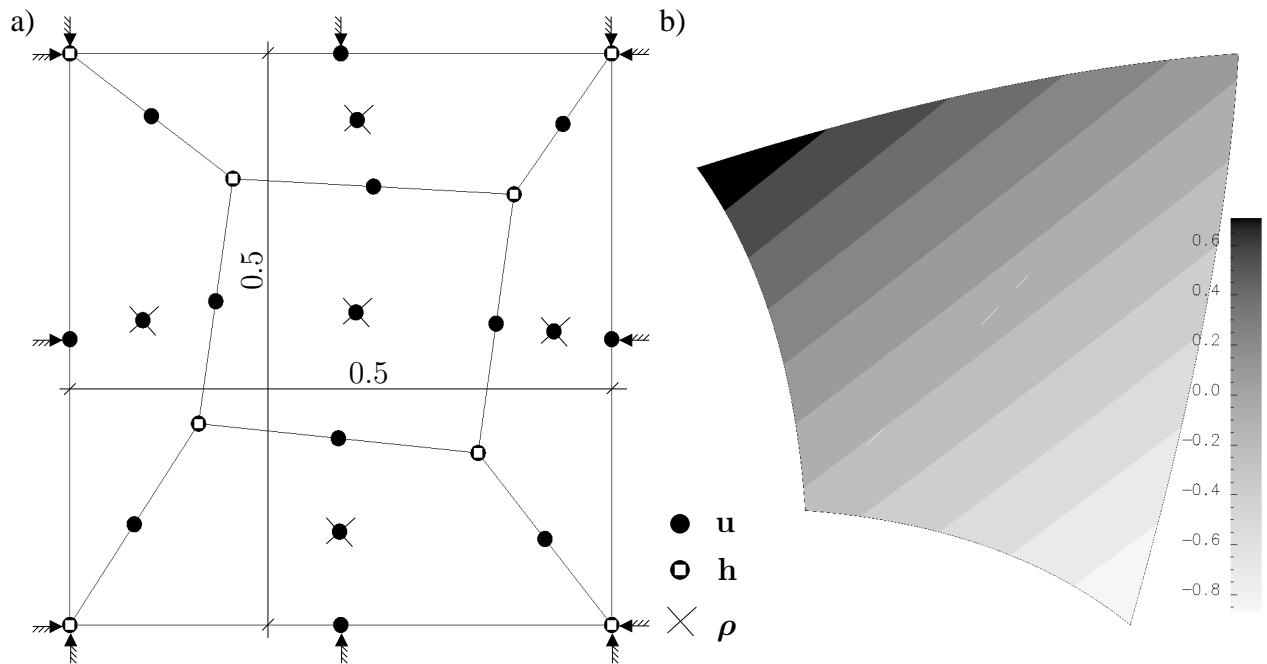
$$\begin{aligned} W = \frac{1}{2} \lambda \varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj} + \mu \varepsilon_{ij} \varepsilon_{ij} + \\ a_1 \eta_{ijj} \eta_{ikk} + a_2 \eta_{iik} \eta_{kjj} + a_3 \eta_{iik} \eta_{jjk} + a_4 \eta_{ijk} \eta_{ijk} + a_5 \eta_{ijk} \eta_{kji}. \end{aligned} \quad (5.84)$$

Powszechnie znane są testy z liniowym polem przemieszczeń (stałe pola naprężenia i odkształcenia). W przypadku kontinuum rzędu II należy również sprawdzić ES dla kwadratowej aproksymacji pola przemieszczeń. Zadanie to wymaga obliczenia takiego pola przemieszczeń, które spełnia

równanie równowagi (u nas jest to równanie z zerowymi siłami masowymi). Kwadratowe funkcje przemieszczeń można otrzymać za pomocą obliczeń symbolicznych na podstawie prac [34, 38], uogólniając prezentowane tam podejścia do kontinuum rzędu II. Do testów wybrano jedną z czterech liniowo niezależnych funkcji kwadratowych, która ma postać

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \frac{x^2(\lambda+4\mu)}{\lambda+6\mu} - \frac{1}{2} \frac{y^2(\lambda+4\mu)}{\lambda+6\mu} + xy \\ -\frac{1}{2} \frac{x^2(\lambda+4\mu)}{\lambda+6\mu} - \frac{1}{2} \frac{y^2(\lambda+4\mu)}{\lambda+6\mu} + xy \end{bmatrix}. \quad (5.85)$$

Rozwiązanie sprawdzano dla nieregularnej siatki przedstawionej na rys. 5.6a. Wybrano parametry materiału $\lambda = 576.923$, $\mu = 384.615$, $l = 0.5$ i $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = a_5 = 0.5\mu l^2$ dla spójnego układu jednostek. Dla zadania o geometrii jak na rys. 5.6a i warunkach brzegowych zadanych zgodnie z (5.85) energia sprężysta wynosi $W = 2202.99$. Błąd względny rozwiązania jest rzędu $1e - 9\%$ i jest błędem zaokrągleń. Dla elementu Q18G16L4 z pełnym całkowaniem, kwadraturą Gaussa 3x3 oraz kwadraturą Gaussa 2x2 i stabilizacją otrzymano identyczne rozwiązanie. Dla materiału prawie nieściśliwego rozważany ES nie wykazywał blokady objętościowej w przypadku pełnego i zredukowanego całkowania. Należy podkreślić, że rozważany element mieszany nie pozwala na analizę materiałów nieściśliwych.



Rysunek 5.6: a) Nieregularna siatka dla zadania testowego b) Deformacja i rozkład u_x

Na podstawie artykułu [39, 63] przeprowadzimy test ścinania dla cienkiej warstwy z warunkiem brzegowym wyższego rzędu, pokazany na rys.5.7. Rozpatrywane zadanie mechaniki można rozważać w jednym wymiarze, opisane przez liniowe równanie różniczkowe z warunkami brzegowymi, przy założeniu małych odkształceń.

$$4\mu \frac{d^2 u}{dy^2} - \frac{3}{2} \mu l^2 \frac{d^4 u}{dy^4} = 0, \quad (5.86)$$

$$u(-h/2) = 0, u(+h/2) = u_0, \quad (5.87)$$

$$\frac{du}{dy} \Big|_{y=-h/2} = 0, \frac{du}{dy} \Big|_{y=+h/2} = 0. \quad (5.88)$$

Rozwiązanie analityczne dla przemieszczeń jest dane wzorem

$$u(y) = Au_0(B + 4y \cosh(C)^2 - 4y \cosh(C) \sinh(C) - \sqrt{6} \cosh(C) \sinh(2yC)l + \sqrt{6} \sinh(C) \sinh(2yC)l), \quad (5.89)$$

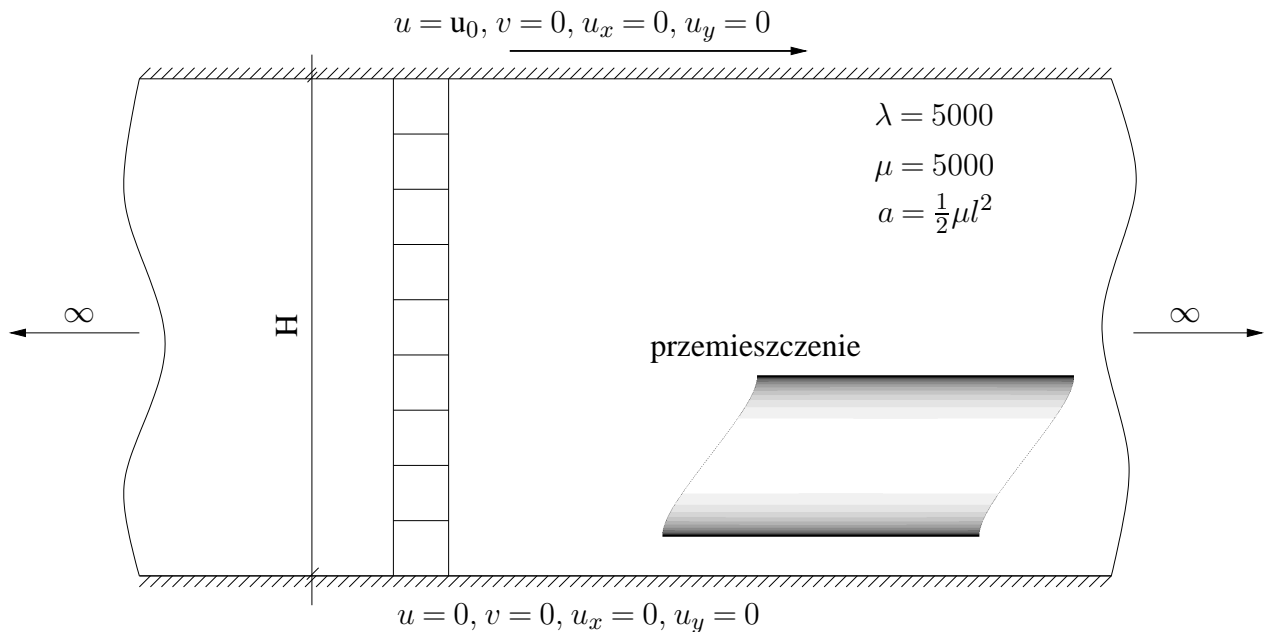
gdzie stałe A, B i C są równe

$$A = 1/2B, \quad (5.90)$$

$$B = (2H(\cosh(C))^2 - 2 \cosh(C) \sinh(C))H + (\sqrt{6}(\cosh(C))^2 - \sqrt{6} \cosh(C) \sinh(C) - \sqrt{6})l, \quad (5.91)$$

$$C = \frac{\sqrt{6}H}{3l}. \quad (5.92)$$

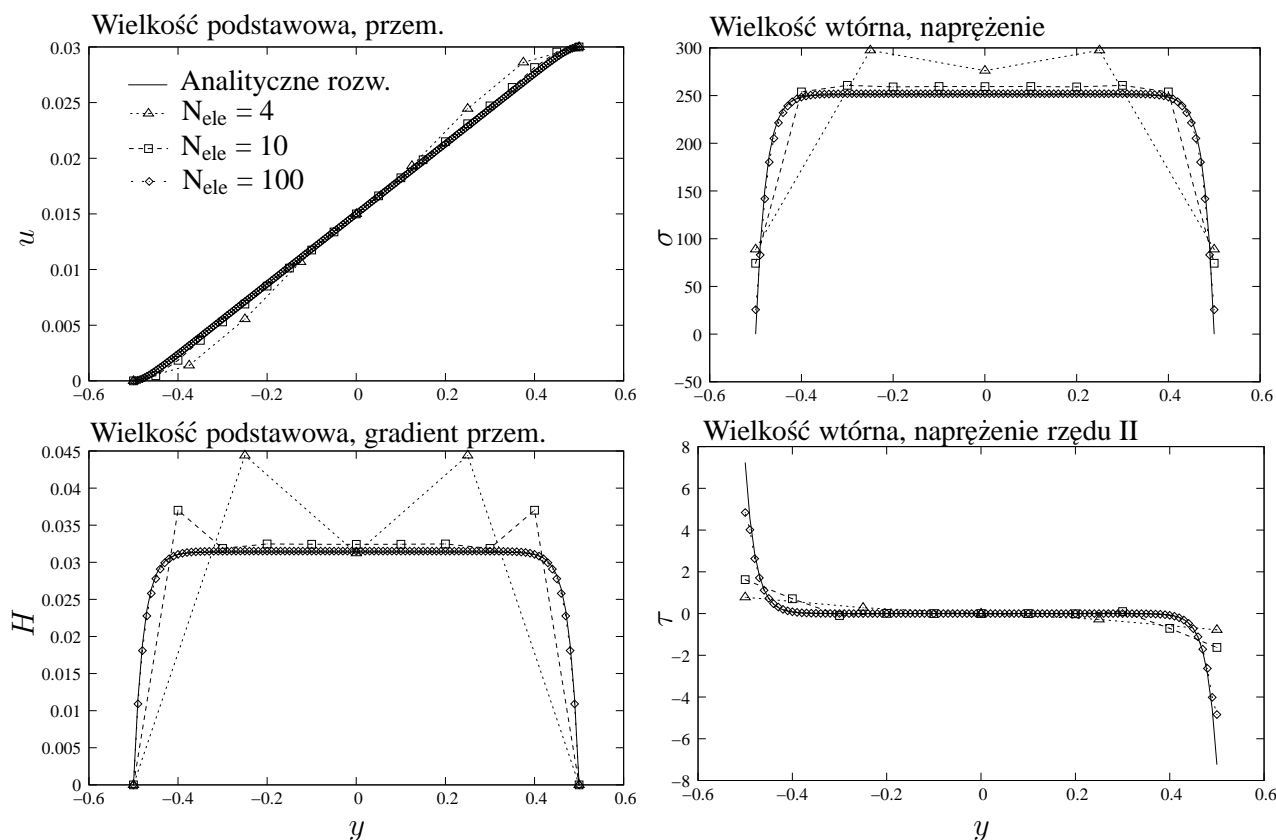
Zadanie jest rozwiązane dla sprężystego materiału Mindlina, ze stałymi materiałowymi $\lambda = 5000$, $\mu = 5000$ i $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = a_5 = 0.5\mu l^2$. Analiza zostanie przeprowadzona dla dwóch wymiarów charakterystycznych mikrostruktury $l = 0.25$ i $l = 0.05$. Przyjęto wysokość warstwy $H = 1.0$. Dla siatki MES, jak na rys.5.7, zadano warunki brzegowe zgodnie z (5.87) i (5.88). Aby zapewnić stałe pola gradientów przemieszczeń w kierunku poziomym, zablokowane zostały przemieszczenia w kierunku pionowym po prawej i lewej stronie siatki MES. Rozwiązania z pełnym i



Rysunek 5.7: Cienka ścinana warstwa z warunkami brzegowymi wyższego rzędu

zredukowanym całkowaniem nie różniły się od siebie w istotny sposób, otrzymano wyniki identyczne w granicach błędu numerycznego. Rozwiązanie dla aproksymowanych pól przemieszczeń \mathbf{u}^h i gradientów przemieszczeń \mathbf{H}^h szybko zbiega się do stałej wartości. Istnieje dobra zgodność między gradientami pola przemieszczeń $\text{grad}[\mathbf{u}^h]$, a aproksymowanym polem gradientów przemieszczeń \mathbf{H}^h . Błąd względny odkształceń ścinających w środku warstwy dla $l = 0.25$ i $l = 0.05$ wynosi odpowiednio: 0.4% i 0.1%, dla siatki z 100 ES. Na rysunkach 5.8 i 5.9 przedstawiono wykresy dla wielkości podstawowych, uzyskanych bezpośrednio przez rozwiązanie układu równań \mathbf{u}^h i \mathbf{H}^h , a także wielkości wtórnych $\boldsymbol{\sigma}^h$ i $\boldsymbol{\tau}^h$, uzyskanych na podstawie gradientów pól \mathbf{u}^h i \mathbf{H}^h . Naprężenia uzyskano w punktach całkowania Gaussa, następnie przez aproksymację MWLS (ang. Moving Weighted Least Squares) [31, 42] otrzymano wartości w węzłach siatki. Przez porównanie rysunków

5.8 i 5.9 można łatwo zauważyć wpływ warunków brzegowych wyższego rzędu na rozwiązanie, zależnie od wymiaru charakterystycznego mikrostruktury l . Tam, gdzie wymiar charakterystyczny ciała jest porównywalny z charakterystycznym wymiarem mikrostruktury, efekt skali ma istotny wpływ na rozwiązanie. Warto dodać, że dla $l = 0$ naprężenie ścinające jest stałe wzdłuż wysokości warstwy, a warunki nałożone na gradient przemieszczenia nie mają wpływu na stan naprężenia.



Rysunek 5.8: Dokładność rozwiązania w zależności od stopnia aproksymacji dla zadania z $l = 0.05$

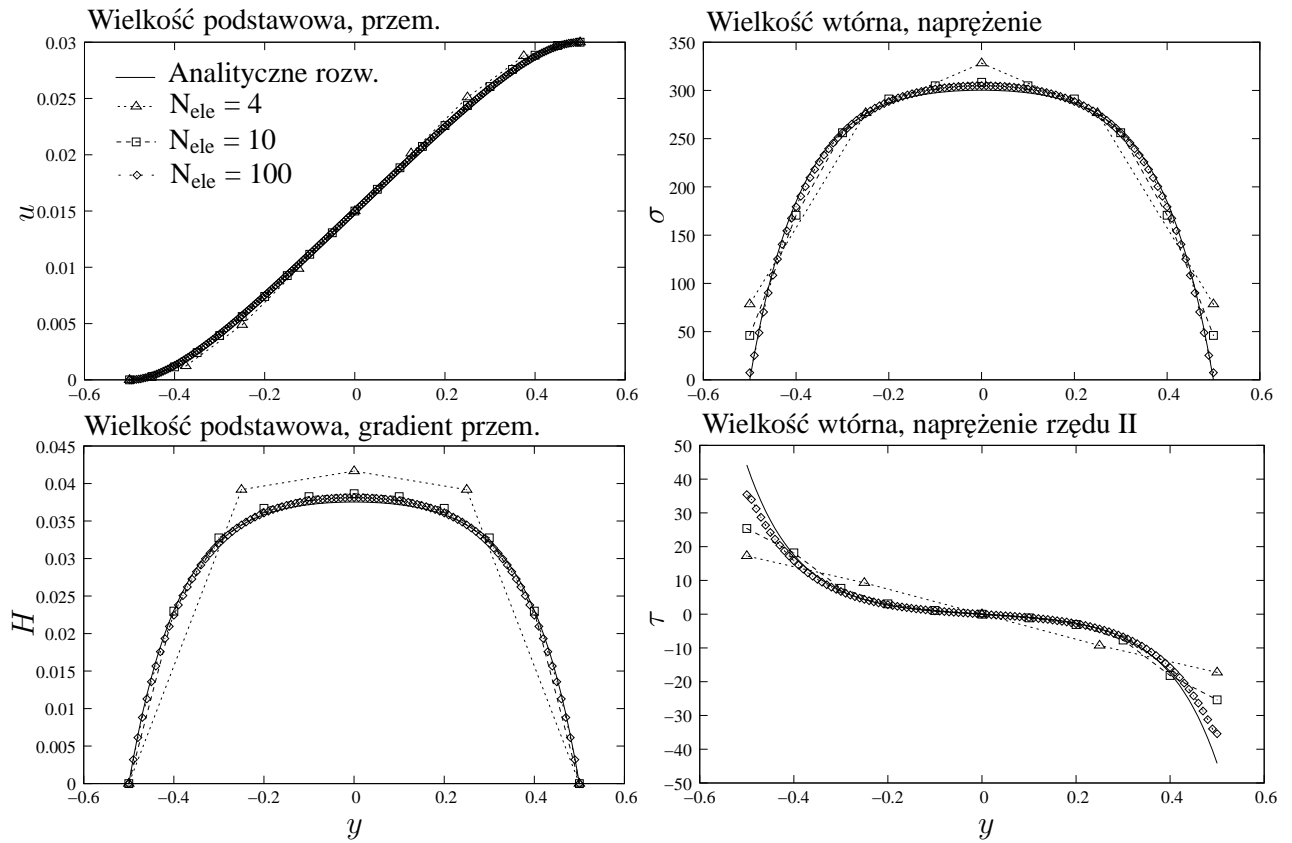
5.5 Modelowanie inkluzji i otworów

Mikroskopowa budowa rzeczywistych materiałów ma często złożoną geometrię. Dodatkowo zjawiska zachodzące na warstwie przejściowej, np. dekohezja, ewolucja interfejsu, mają istotny wpływ na obserwowane zachowanie materiału w skali makro.

W rozdziale tym przedstawione zostanie podejście pozwalające na modelowanie otworów i inkluzji o dowolnym kształcie, niezależnie od wcześniej stworzonej siatki MES. Podejście to łączy metodę zbiorów poziomujących (ang. *Level Set Method*) ze wzbogaconą metodą elementów skończonych (ang. *Extended Finite Element Method*). Będą rozważane przypadki dwuwymiarowe, ale metoda bez trudu może być zastosowana do analizy problemów trójwymiarowych.

5.5.1 Metoda zbiorów poziomujących

Metoda zbiorów poziomujących jest numerycznym podejściem stosowanym do śledzenia poruszającego się interfejsu. Istnieje wiele zastosowań metody zbiorów poziomujących [61, 62]. Dalej będzie użyta metoda zbiorów poziomujących we wzbogaconej metodzie elementów skończonych do



Rysunek 5.9: Dokładność rozwiązania w zależności od stopnia aproksymacji dla zadania z $l = 0.25$

reprezentacji położenia interfejsu lub otworu w dwuwymiarowej mikrostrukturze. Za pracą [68] ograniczymy się do przypadku statycznego.

Metoda nie skupia się na ruchu punktów należących do interfejsu (które mogą się poruszać w złożony sposób). Problem ewolucji interfejsu opisany jest przez paraboliczne równanie różniczkowe funkcji wielu zmiennych $f : \mathcal{R}^n \times \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$.

Poruszający się interfejs $\Gamma_d(t)$ w chwili czasu t jest dany przez krzywą zbioru poziomującego, określoną za pomocą funkcji f , np. dla dwuwymiarowego problemu mamy:

$$\Gamma_d(t) = \{(x_1, x_2) \in \mathcal{R}^2 : f(x_1, x_2, t) = 0\}. \quad (5.93)$$

Dla przykładu, gdy funkcja zbioru poziomującego będzie dana wzorem $f(x_1, x_2, t) = x_1^2 + x_2^2 - t$, interfejs Γ w chwili t jest okręgiem o środku $(0, 0)$ i promieniu \sqrt{t} .

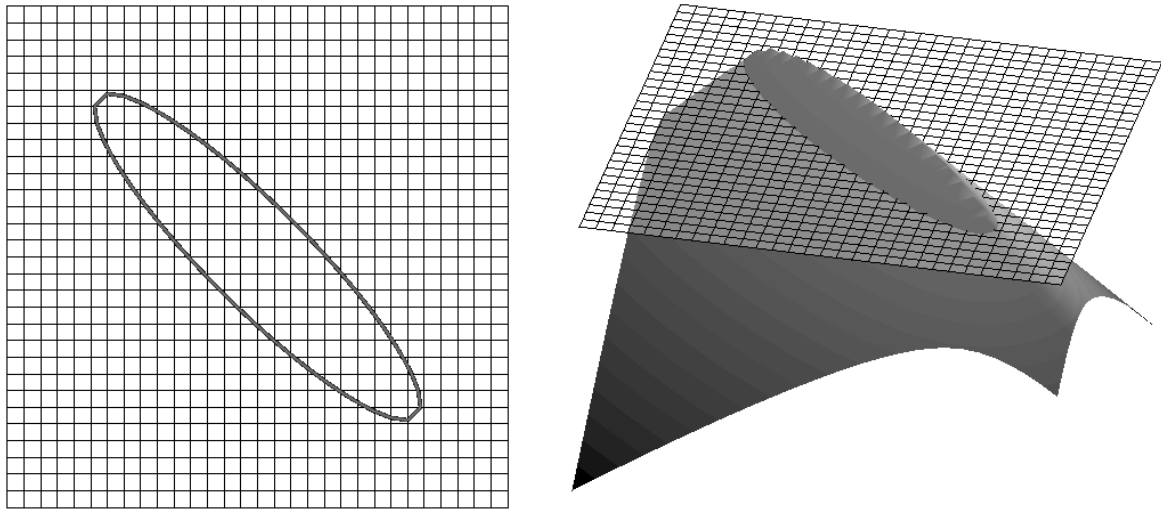
Ewolucja interfejsu jest opisana przez wspomniane równanie różniczkowe funkcji zbiorów poziomujących f . Równanie takie dane jest wzorem, por. [62]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V(\mathbf{x}, t) \text{grad}[f(\mathbf{x})] = 0, \quad (5.94)$$

gdzie $V(\mathbf{x}, t)$ jest prędkością interfejsu w punkcie $\mathbf{x} \in \Gamma_d(t)$ w kierunku zewnętrznej, normalnej do brzegu interfejsu.

Jedną z zalet metody jest to, że funkcje f można policzyć w węzłach siatki MES, dla określonej chwili czasu t_n . Następnie numerycznie całkując po czasie, obliczone zostają wartości funkcji f w następnej chwili czasowej t_{n+1} . Podczas analizy numerycznej analityczna postać funkcji f jest nieznaną.

Na koniec tego podrozdziału, na rys. 5.10, przedstawione są wartości funkcji zbioru poziomującego i krzywa zbioru poziomującego między matrycą i inkluzją dla regularnej siatki MES.



Rysunek 5.10: Siatka MES z interfejsem i wykres wartości funkcji zbiorów poziomujących dla elipsy

5.5.2 Wzbogacanie aproksymacji elementu skończonego

W prezentowanej metodzie, znanej pod skróconą nazwą XFEM, przedstawionej np. w pracach [8, 16, 50, 72, 74, 77], przez odpowiednie wzbogacenie aproksymacji pola przemieszczeń elementu skończonego, uzyskujemy możliwość modelowania dowolnej nieciągłości pola przemieszczeń.

Metoda podziału jedności

Podziałem jedności będziemy nazywać zbiór dodatnich funkcji ψ_i klasy ciągłości co najmniej C^0 , które przyjmują niezerowe wartości na podobszarze Ω_i i dla każdego punktu obszaru Ω spełniają równanie

$$\sum_i^n \psi_i(\mathbf{x}) = 1 \text{ w } \mathbf{x} \in \Omega, \quad (5.95)$$

gdzie Ω_i pokrywają obszar Ω , innymi słowy: $\Omega = \bigcup_i \Omega_i$, por. [73]. Jeśli ψ jest podziałem jedności, pole przemieszczeń \mathbf{u}^h możemy interpolować przez skończoną liczbę wielkości węzłowych:

$$\mathbf{u}^h = \sum_i^n \psi_i \left(\mathbf{a}_i + \sum_j^m b_{ij} \gamma_j \right), \quad (5.96)$$

gdzie \mathbf{a} i \mathbf{b} są wektorami wielkości węzłowych, γ_j jest funkcją bazową wzbogaconego pola aproksymacyjnego skojarzoną z danym węzłem. Warto zwrócić uwagę, że takie podejście pozwala na dowolne wzbogacenie aproksymacji o dodatkowe funkcje dla każdego z węzłów z osobna. Dodatkowo możemy wzbogacić aproksymację dowolnego węzła podczas obliczeń.

Równanie (5.95) można traktować jako łącznik między metodami bezsiatkowymi, a metodą elementów skończonych [74]. Różnica między wymienionymi metodami, w świetle metody podziału jedności, wynika z odpowiedniego doboru funkcji ψ . W przypadku MES, funkcje kształtu są podziałem jedności, ponieważ mamy

$$\sum_i^n N_{u,i}(\mathbf{x}) = 1. \quad (5.97)$$

W standardowej MES nie używamy funkcji wzbogacających γ .

Możemy pokazać, że funkcję wzbogacającą γ można zastosować w MES np. do modelowania interfejsu. Teraz przedstawimy interpolację pola przemieszczeń \mathbf{u}^h ze wzbogaceniem w postaci wygodnej dla MES, a więc mamy

$$\mathbf{u}^h = \mathbf{N}_u \mathbf{a} + \mathbf{N}_u (\mathbf{N}_\gamma \mathbf{b}), \quad (5.98)$$

gdzie \mathbf{N}_u jest wielomianową macierzą funkcji kształtu, a zawiera regularne stopnie, \mathbf{N}_γ jest macierzą zawierającą bazę funkcji wzbogacających aproksymację, a \mathbf{b} jest wektorem zawierającym wartości wzbogacających stopni swobody.

Baza funkcji wzbogacających aproksymację $\mathbf{N}_u \mathbf{N}_\gamma$ musi być liniowo niezależna od bazy funkcji kształtu \mathbf{N}_u , inaczej pole przemieszczeń nie będzie jednoznacznie wyznaczone przez wartości węzłowe \mathbf{a} i \mathbf{b} .

Wzbogacanie węzłów

Węzły, które zostaną wzbogacone, zostają wyznaczone na podstawie wartości węzłowych funkcji zbiorów poziomujących f . Wartości funkcji f są obliczone dla wszystkich węzłów geometrycznych (do analizy MES używane są elementy subparametryczne, których geometryczne funkcje kształtu są linowe) leżących w rogach elementu. Następnie wyszukiwane są wszystkie krawędzie, dla których wartości funkcji f w węzłach geometrycznych są różnych znaków. Na tej podstawie można wyznaczyć punkt leżący na krawędzi elementu, który należy do interfejsu, rys. 5.11.

Funkcje, o które wzbogacona jest aproksymacja elementu, są silnie nieliniowe (nieciągłe lub ich gradienty są nieciągłe) wzdłuż interfejsu. Funkcja wzbogacająca dla elementów, w których nie ma interfejsu, w przypadku modelowania otworu będzie mieścić się w przestrzeni aproksymacyjnej standardowego MES. Z tej przyczyny, by uzyskać jednoznaczne rozwiązanie, wzbogacane są tylko węzły elementów, przez które przechodzi interfejs.

Jak widzimy w równaniu (5.98), macierz bazy funkcji wzbogacających \mathbf{N}_γ mnożona jest przez macierz funkcji kształtu \mathbf{N}_u . Dlatego, gdy funkcje wzbogacające są dodane do wybranego węzła, ich wpływ będzie ograniczony do nośnika tego węzła, innymi słowy z podobszaru złożonego do elementów, do których należy węzeł. Na rys. 5.11 przedstawione jest, jak wzbogacono węzły dla dwóch subiektywnie wybranych siatek.

Interfejs dzieli element na dwa podobszary Ω^+ i Ω^- , gdy jedno z pól tych podobszarów jest równe zero lub bliskie zero rozwiązanie jest niejednoznaczne. Z tej przyczyny wzbogacane zostają elementy, dla których spełniona jest nierówność

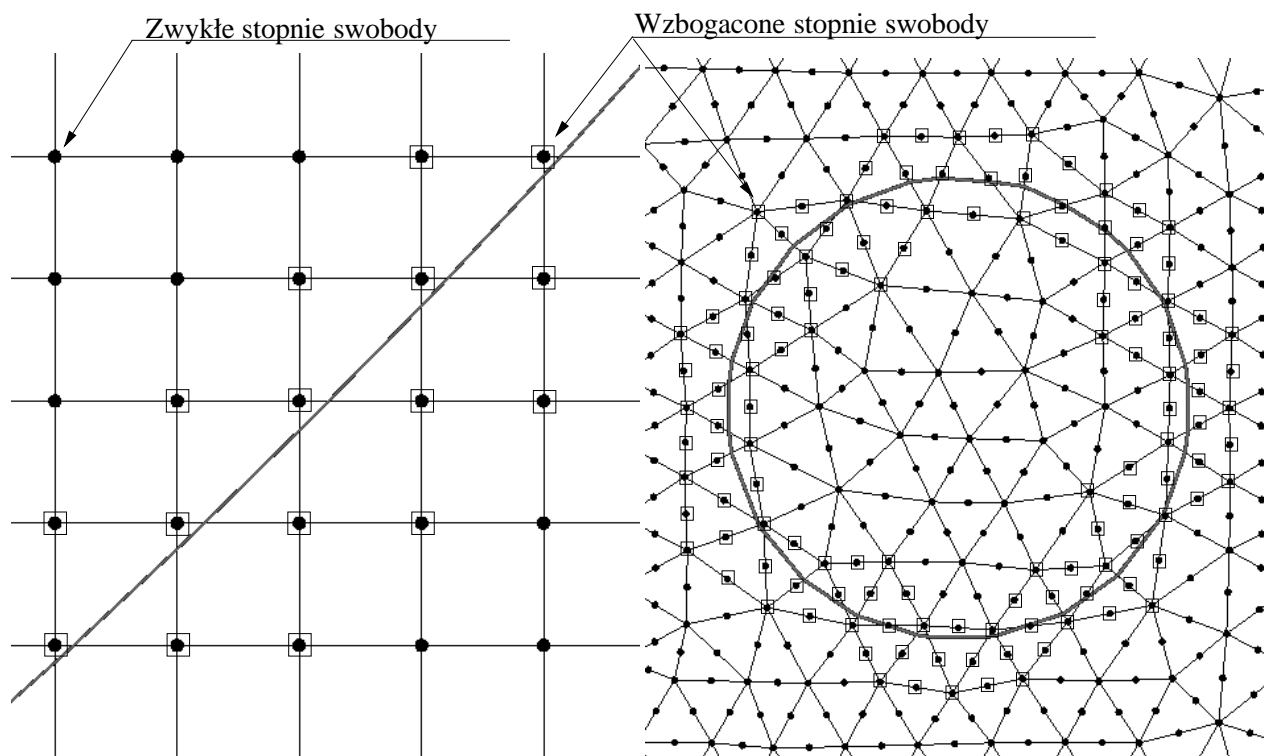
$$\frac{\min[\Omega^+, \Omega^-]}{\Omega^e} > tol, \quad (5.99)$$

gdzie Ω^e jest polem elementu, Ω^+ i Ω^- polami powierzchni po stronie odpowiednio ujemnych i dodatnich wartości funkcji poziomujących. Wartość parametru tol powinna być dobrana odpowiednio do problemu i może być tym mniejsza, im większa jest precyzja solwera.

Numeryczne całkowanie

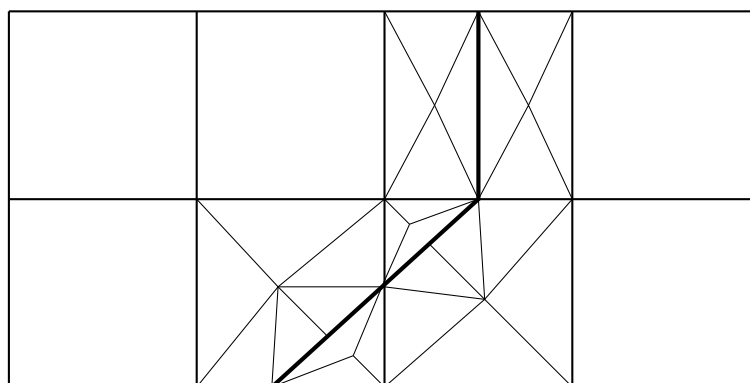
W metodzie XFEM używamy niestandardowych funkcji kształtu, które wymagają odpowiedniego schematu całkowania. Niewłaściwy schemat całkowania może doprowadzić do liniowo zależnego układu równań lub otrzymane wyniki nie będą miarodajne. Z tej przyczyny według prac [8, 50, 68] jest stosowany schemat całkowania dla nieciągłych funkcji kształtu lub posiadających nieciągłą pochodną.

Podobszary Ω^- i Ω^+ każdego z elementów, przez który przechodzi interfejs, są dzielone na trójkąty, tak jak na rys. 5.12. Następnie każdy z trójkątów, zależnie od wybranego typu elementu CTS,



Rysunek 5.11: Zwykłe i wzbogacone węzły elementów Q4 na regularnej siatce i elementów LST (ang. *Linear Strain Triangle*) na nieregularnej siatce

LST lub Q4 i dodatkowych funkcji wzbogacających, ma wprowadzony odpowiedni rząd kwadratury Gaussa, np. jednopunktową, trójpunktową itd.



Rysunek 5.12: Schemat całkowania dla elementów, dla których wzbogacona została aproksymacja

5.5.3 Równania i funkcje wzbogacające dla otworów

Modelowanie otworów w XFEM jest realizowane przez wzbogacenie aproksymacji o funkcję:

$$\gamma(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{H}_d(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{jeśli } f(\mathbf{x}) \geq 0 \\ 0, & \text{jeśli } f(\mathbf{x}) < 0, \end{cases} \quad (5.100)$$

gdzie \mathcal{H}_d jest funkcją skoku Heaviside'a, f jest funkcją zbiorów poziomujących. Po wzbogaceniu, aproksymująca funkcja \mathbf{u}^h , ma nieciągłość na brzegu otworu Γ_d .

Na brzegu Γ_d naprężeniowy warunek równowagi jest spełniony w sensie metody Galerkina:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma} d\Gamma - \mathbf{F}_{\text{ext}} = \mathbf{0}. \quad (5.101)$$

Warunek ten obowiązuje, gdy w wektorze prawych stron zostaną uwzględnione jedynie przyłożone siły zewnętrzne. \mathbf{B}_u jest macierzą gradientów funkcji kształtu daną wzorem:

$$\mathbf{B}_u = \mathbf{L}_u \mathbf{N}_u + \mathbf{L}_u (\mathbf{N}_u \mathcal{H}_d), \quad (5.102)$$

gdzie \mathbf{L}_u jest klasycznym operatorem macierzowym gradientów dla przemieszczeń.

Po numerycznym całkowaniu słabej formy (5.8), a następnie agregacji elementowych macierzy sztywności i wektorów prawych stron, stopnie swobody leżące wewnątrz otworu, które nie należą do elementów o wzbogaconej aproksymacji, eliminowane są z układu równań.

5.5.4 Równania i funkcje wzbogacające dla inkluzji

Modelowanie inkluzji w XFEM jest realizowane przez wzbogacenie aproksymacji o funkcję:

$$\gamma(\mathbf{x}) \equiv |f(\mathbf{u})|, \quad (5.103)$$

gdzie f jest funkcją zbiorów poziomujących. Warto podkreślić, że w ogólnym przypadku analityczna postać funkcji f nie jest znana. Z tej przyczyny funkcja f jest aproksymowana na podstawie wartości węzłowych. Po wzbogaceniu, aproksymująca funkcja \mathbf{u}^h ma nieciągłość gradientów na brzegu otworu Γ_d . Warunek ciągłości przemieszczeń zostaje przy takiej aproksymacji spełniony w sposób ścisły, zgodnie z sensem przemieszczeniowego sformułowania MES.

Na brzegu Γ_d , naprężeniowy warunek równowagi, spełniony zostaje w sensie metody Galerkina:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma} d\Gamma - \mathbf{F}_{\text{ext}} = \mathbf{0}. \quad (5.104)$$

Warunek ten jest spełniony, gdy w wektorze prawych stron zostaną uwzględnione jedynie przyłożone siły zewnętrzne. \mathbf{B}_u jest macierzą gradientów funkcji kształtu odkształcenia określoną wzorem

$$\mathbf{B}_u = \mathbf{L}_u \mathbf{N}_u + \mathbf{L}_u (\mathbf{N}_u |f|), \quad (5.105)$$

gdzie \mathbf{L}_u jest klasycznym operatorem macierzowym gradientów dla przemieszczeń.

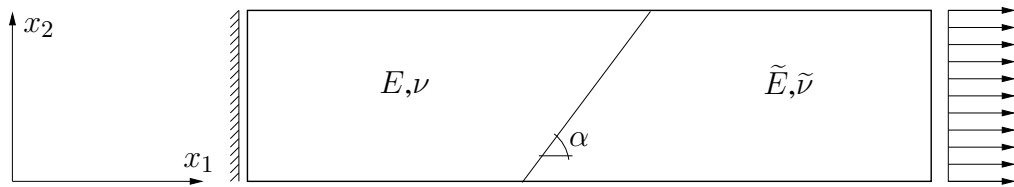
5.5.5 Weryfikacja numeryczna

Przedstawione są dwa rodzaje testów numerycznych. Pierwszy rodzaj, zweryfikuje poprawność metody i jej implementację, a drugi test przedstawi zastosowanie rozważanej metody w modelowaniu RVE.

Na początku rozważymy płaską tarczę w stanie czystego rozciągania. Tarcza jest wykonana z dwóch liniowo sprężystych, jednorodnych i izotropowych materiałów, por. rys. 5.13. Granica między materiałami jest odcinkiem nachylonym pod kątem wyznaczonym według wzoru

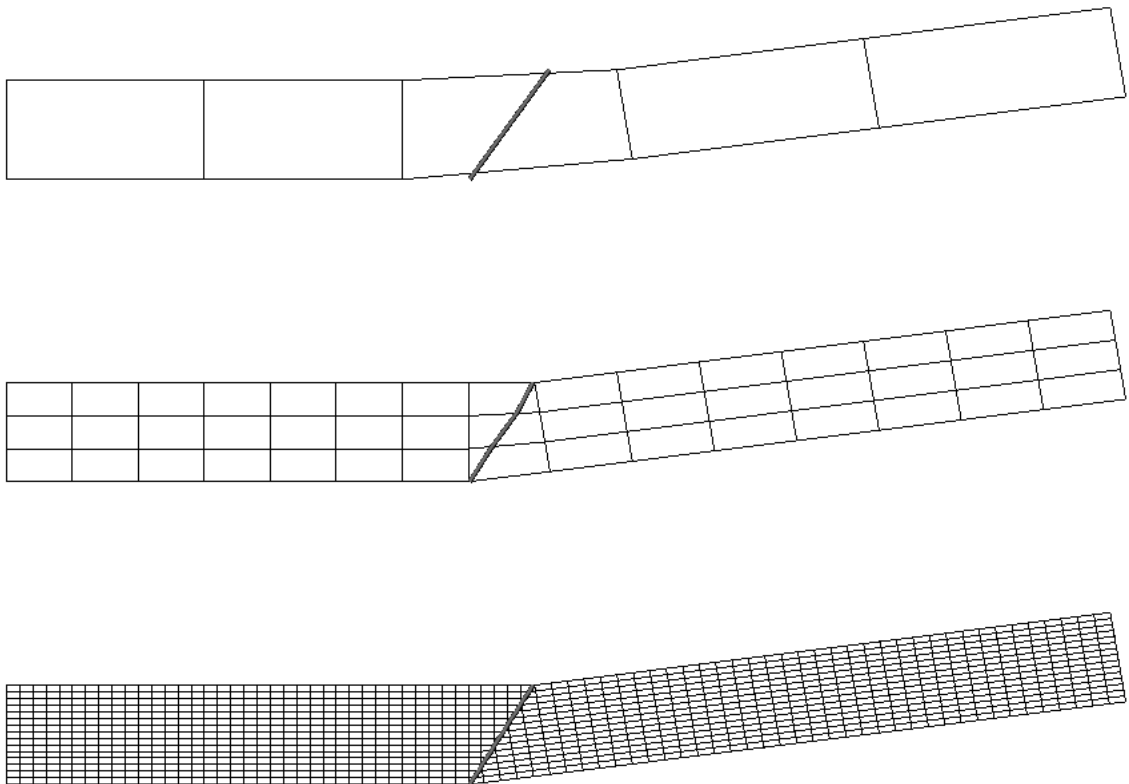
$$\text{tg}^2 \alpha = \frac{\tilde{E} - E}{\tilde{E}\nu - E\tilde{\nu}}, \quad (5.106)$$

por. [45]. Dla ukośnej granicy materiałowej, której kąt nachylenia do osi poziomej wyznaczono według wzoru (5.106), stany naprężeń są jednorodne.



Rysunek 5.13: Tarcza z ukośną granicą materiałową [45]

Dla dwóch materiałów Hooke'a, o subiektywnie dobranych parametrach, $E = 10^5$, $\nu = 0.4$, $\tilde{E} = 10^3$ i $\tilde{\nu} = 0.2$, obliczono kąt ukośnej granicy materiałowej według wzoru (5.106). Następnie odpowiednie węzły regularnych siatek zostały wzbogacone o funkcję posiadającą nieciągłe pochodne na interfejsie. Po wzbogaceniu aproksymacji, przy użyciu metody XFEM, rozwiązanie ściśle mieści się w przestrzeni aproksymacyjnej. Dlatego rozwiązanie numeryczne zadania trzczy, wykonanej z dwóch materiałów Hooke'a i odpowiednio wyznaczonej ukośnej granicy, odtwarza rozwiązanie ściśle. Deformacja tarczy, dla arbitralnie wybranych siatek MES przedstawiona jest na rys. 5.14.



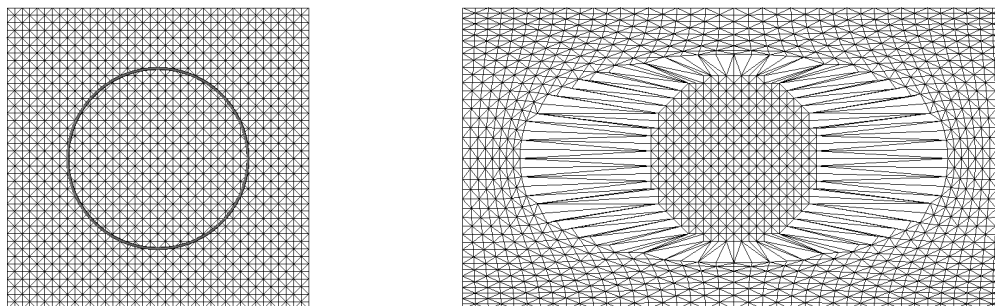
Rysunek 5.14: Deformacja tarczy z nachyloną granicą ukośną

Następny przykład odnosi się do RVE w płaskim stanie odkształcenia, z otworem o promieniu $R = 0.3$ umieszczonym w jego środku geometrycznym. Mikrostruktura wykonana jest z materiału o związkach fizycznych Hooke'a. Moduły Younga i Poissona wynoszą odpowiednio: $E = 10^3$ i $\nu = 0.3$, przyjęto spójny układ jednostek. RVE poddajemy deformacji, zgodnej w średni sposób z makroodkształceniem $\bar{\varepsilon} = \{10^{-3}, 0, 0\}$, a następnie obliczamy makronapężenie $\bar{\sigma}$, stosując periodyczne warunki brzegowe. Zadanie rozwiązano dla różnych typów elementów tzn. Q4, CST i LST. Siatka elementów LST i jej deformacja, dla podziału brzegu na $N = 40$ części, przedstawiona jest

na rys. 5.15. Wykres zależności błędu bezwzględnego naprężenie $\bar{\sigma}_x$ od liczby podziałów brzegu na N części przedstawiony jest na rys. 5.16. Rozwiązanie, do którego odniesiono błąd, otrzymano na podstawie rozwiązania dla siatki posiadającej 5639 stopni swobody, przy aproksymacji elementami LST i klasycznej dyskretyzacji geometrii. Wartości liczbowe są przedstawione w tab. 5.4. Wartość makronaprężenia zbiega się do rozwiązania dokładnego oraz rząd zbieżności dla XFEM, jest taki sam jak w przypadku klasycznej MES.

Tabela 5.4: Zbieżność rozwiązania dla RVE z otworem (zobacz rys. 5.16)

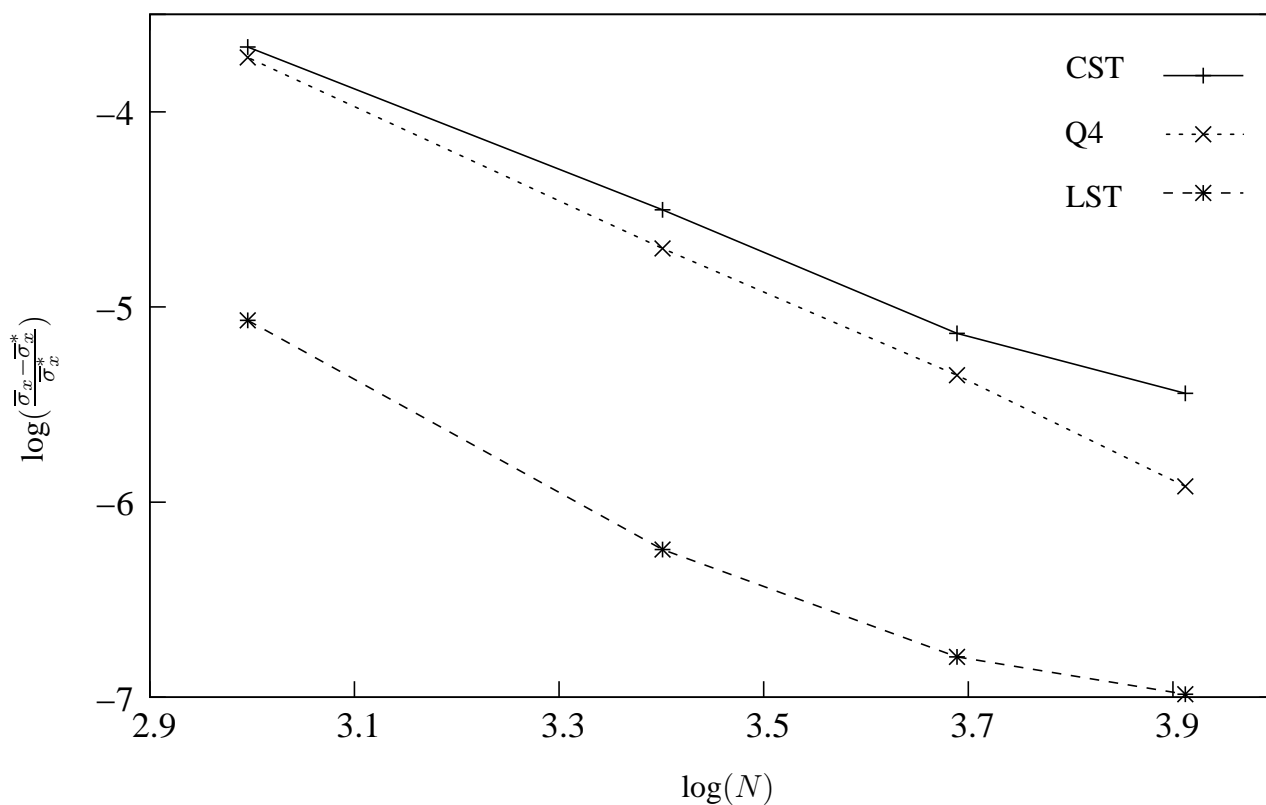
N	Naprężenie $\bar{\sigma}_x$ (błąd $\frac{\bar{\sigma}_x - \bar{\sigma}_x^*}{\bar{\sigma}_x^*} 100\%$)		
	CST	Q4	LST
20	0.6823 (2.5550%)	0.6810 (2.4219%)	0.6631 (0.6291%)
30	0.6679 (1.1085%)	0.6659 (0.9099%)	0.6587 (0.1943%)
40	0.6627 (0.5885%)	0.6615 (0.4749%)	0.6579 (0.1121%)
50	0.6611 (0.4329%)	0.6595 (0.2686%)	0.6577 (0.0926%)



Rysunek 5.15: Siatka MES i deformacja RVE z otworem wywołana makroodkształceniem $\bar{\epsilon} = \{1, 0, 0\}$

Na końcu rozważamy RVE w płaskim stanie odkształcenia, z centralnie umieszczoną, okrągłą inkluzją. Materiał matrycy i inkluzji opisany został równaniem Hooke'a o parametrach $E = 10^3$, $\nu = 25$ dla matrycy i $\hat{E} = 10^5$, $\hat{\nu} = 0.45$ dla inkluzji. Mikrostrukturę poddano makroodkształceniu $\bar{\epsilon} = \{10^{-3}, 0, 0\}$, które zostało wymuszone za pomocą periodycznych warunków brzegowych. Do dyskretyzacji użyto regularnej siatki złożonej z 1600 elementów Q4. Używając metody zbiorów poziomujących, w XFEM symulowano ewolucję inkluzji, której promień R zmieniał się od wartości 0.0 do 0.45. Na wykresie 5.17 przedstawiono zależność $\bar{\sigma}_x$ od R . Rys. 5.18 obrazuje ewolucję interfejsu inkluzji i deformacje RVE. Test ten ma na celu dyskusję jednego z zastosowań omawianej metody w numerycznej homogenizacji.

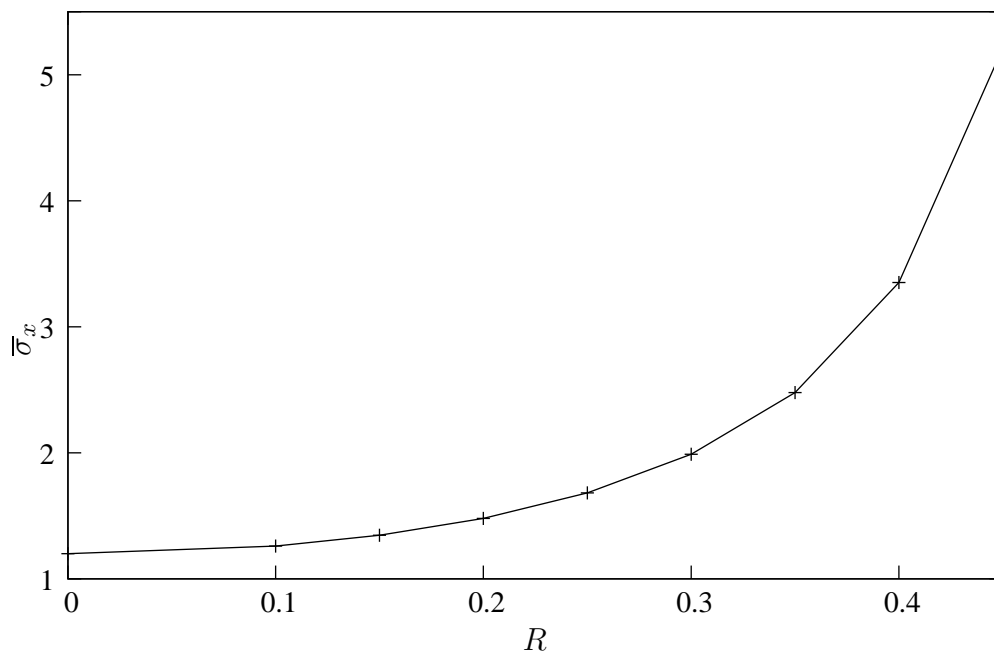
Mimo że w rozważanych przykładach analizowane były okrągłe otwory lub inkluzje nie ma żadnych przeszkód, aby interfejs miał dowolny kształt. Przykład praktycznego zastosowania XFEM do modelowania materiałów porowatych przedstawiony jest w punkcie 7.2.



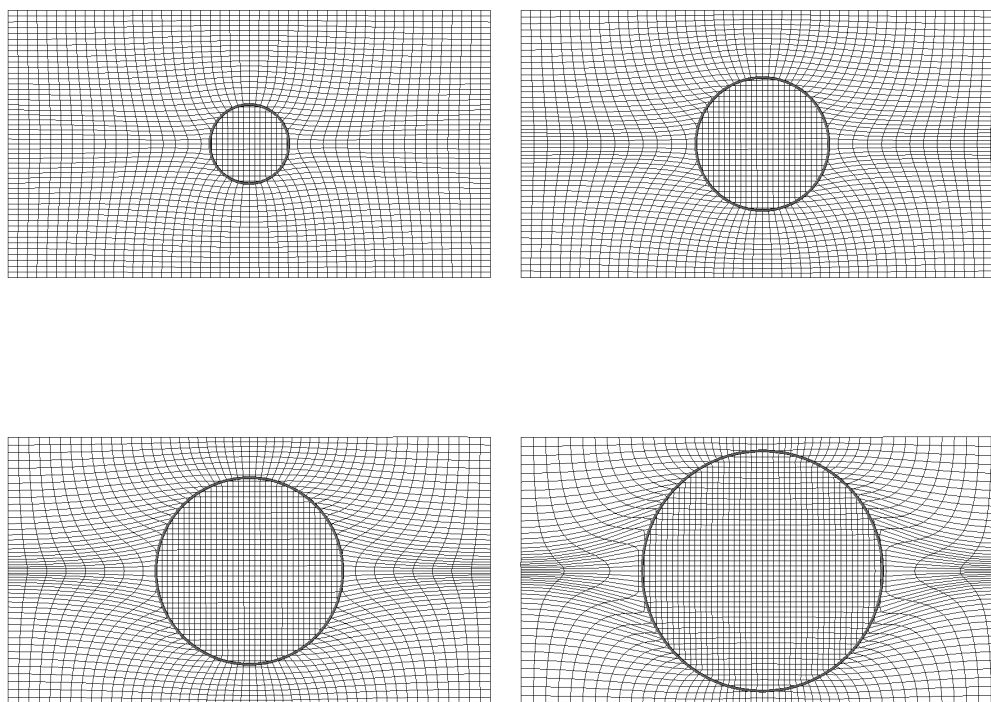
Rysunek 5.16: Zbieżność makronapężenia $\bar{\sigma}_x$ dla RVE z otworem o średnicy $R = 0.3l$ do wartości dokładnej, gdzie $\bar{\sigma}_x$ jest makroskopowym napężeniem i N liczbą elementów w wierszu/kolumnie (zobacz rys. 5.15)

Tabela 5.5: Zależność makronapężenia $\bar{\sigma}_x$ od promienia R inkluzji

R	$\bar{\sigma}_x$
0.45	5.212
0.40	3.352
0.35	2.479
0.30	1.989
0.25	1.682
0.20	1.480
0.15	1.346
0.10	1.261
0.00	1.200



Rysunek 5.17: Zależność makronapężenia $\bar{\sigma}_x$ od promienia R inkluzji, por. tab. 5.5



Rysunek 5.18: Deformacja RVE dla makroodkształcenia $\bar{\varepsilon} = \{10^{-3}, 0, 0\}$ i okresowych warunków brzegowych

Rozdział 6

Warunki brzegowe dla modelu numerycznego reprezentatywnego elementu objętościowego

W tym rozdziale jest omawiana metoda narzucania warunków brzegowych dla RVE. Prezentowane podejście nawiązuje do znanych metod z pozycji [46] i [39–41]. Dla jasności wywodu ograniczymy się do przypadku liniowej teorii sprężystości. Rozszerzenie do przypadku nieliniowego jest możliwe i mieści się w ramach metody.

Celem tego rozdziału jest przedstawienie metody obliczenia makroskopowego naprężenia $\bar{\sigma}$ i stycznej macierzy sztywności \bar{C}^1 , dla przypadku kontinuum rzędu I, w skali makro. Przez analogię, dla ośrodka rzędu II, będzie obliczane naprężenie $\bar{\sigma}$, naprężenie wyższego rzędu $\bar{\tau}$ i styczne materiałowe macierze sztywności \bar{C}^1 , \bar{C}^2 , \bar{C}^3 i \bar{C}^4 .

6.1 Wymuszanie warunków brzegowych

Problem brzegowy mechaniki, formułowany dla danego RVE, po dyskretyzacji, możemy rozwiązać przez minimalizację funkcji z warunkami ograniczającymi:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{u}} \quad Q &= \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} - \mathbf{u}^T \mathbf{F} \\ \text{z warunkami} \quad \mathbf{C} \mathbf{u} - \mathbf{g} &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

gdzie \mathbf{K} jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną, \mathbf{u} wektorem niewiadomych. Problem (6.1) jest poprawnie postawiony, gdy warunki brzegowe nie są zbyt ograniczające, tzn. istnieje co najmniej jeden wektor \mathbf{u} , który spełnia równanie $\mathbf{C} \mathbf{u} = \mathbf{g}$ oraz wiersze macierzy \mathbf{C} są od siebie liniowo niezależne.

Problem brzegowy możemy rozwiązać stosując metodę Lagrange’a:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} - \mathbf{u}^T \mathbf{F} + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{C} \mathbf{u} - \mathbf{g}), \quad (6.2)$$

gdzie $\boldsymbol{\lambda}$ jest mnożnikiem Lagrange’a. Równania Eulera dla punktu stacjonarnego mają wtedy postać

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \mathbf{u} + \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda} &= \mathbf{F}, \\ \mathbf{C} \mathbf{u} &= \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Układ równań (6.3) można rozwiązać, ale dla metody CH mamy dużą złożoność obliczeniową i podejście oparte na mnożnikach Lagrange'a jest zbyt czasochłonne. Z tej przyczyny podamy alternatywne podejście w oparciu o prace [1, 66].

Mnożąc równanie (6.3) lewostronnie przez C i rozwiązując je ze względu na λ mamy równanie

$$\lambda = (CC^T)^{-1}C(F - Ku). \quad (6.4)$$

Wstawiając równanie na λ do pierwszego równania w (6.3) i wykorzystując drugie równanie w (6.2) otrzymujemy

$$Ku = F - KC^T(CC^T)^{-1}g - C^T(CC^T)^{-1}CF. \quad (6.5)$$

Warto zwrócić uwagę, że równanie (6.5) ma niejednoznaczne rozwiązanie, gdyż macierz K jest osobliwa (istnieje możliwość ruchu sztywnego).

Definiujemy podprzestrzeń S w przestrzeni przemieszczeń węzłowych, której wektory bazowe są dane przez wiersze macierzy C . Macierz rzutująca P na podprzestrzeń S jest określona wzorem

$$P = C^T(CC^T)^{-1}C. \quad (6.6)$$

Rzut dowolnego punktu F na podprzestrzeń S jest równy PF , a ponownie rzutowanie dla punktu $P(PF)$ nie przesuwają tego punktu. Łatwo możemy sprawdzić, że P ma właściwości $P^T = P$ i $P^2 = P$.

Definiujemy podprzestrzeń T , w której każdy wektor jest ortogonalny do wektorów w podprzestrzeni S . Macierz rzutująca na podprzestrzeń T dana jest wzorem

$$Q = I - C^T(CC^T)^{-1}C. \quad (6.7)$$

Można sprawdzić, że $Q^T = Q$ i $Q^2 = Q$. Dodatkowo, ponieważ podprzestrzeń S jest ortogonalna do T , mamy $CQ = 0$ i $QP = 0$.

Dla znanych macierzy rzutujących P i Q , równanie (6.5) dwukrotnie mnożymy przez Q i po przekształceniach otrzymujemy

$$Q^TKQu = Q^T(F - KRg), \quad (6.8)$$

gdzie: $R = C^T(CC^T)^{-1}$. Zauważamy, że prawa i lewa strona należy do podprzestrzeni T . Wektory należące do tej podprzestrzeni są liniowe, niezależne od dowolnego wektora należącego do podprzestrzeni S . Na tej podstawie możemy pomnożyć drugie równanie w (6.3) przez C i dodać do (6.8), co daje:

$$\widetilde{K}u = \widetilde{F}, \quad (6.9)$$

gdzie występuje macierz \widetilde{K} i wektor \widetilde{F} :

$$\widetilde{K} = C^TC + Q^TKQ, \quad (6.10)$$

$$\widetilde{F} = C^Tg + Q^T(F - KRg). \quad (6.11)$$

Dowód na to, że rozwiązanie układu równań (6.9) jest równoważne rozwiązaniu problemu (6.1) można znaleźć w [1, 66]. Dla kompletności jest podany wzór na wartość wektora mnożników Lagrange'a:

$$\lambda = R^T(F - Ku). \quad (6.12)$$

6.1.1 Sekwencyjne zadawanie warunków brzegowych

Dla wygody będziemy posługiwać się trzema grupami równań ograniczających. Pierwsza grupa blokuje ruch sztywny, druga wymusza deformację RVE zgodną z makroodkształceniem rzędu I, a trzecia grupa wymusza deformację RVE zgodną z makroodkształceniem rzędu II. Kolejno wyrazimy je przez równania

$$\mathbf{C}_T \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (6.13)$$

$$\mathbf{C}_\varepsilon \mathbf{u} = \mathbf{D} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{g}_\varepsilon, \quad (6.14)$$

$$\mathbf{C}_\eta \mathbf{u} = \mathbf{E} \bar{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{g}_\eta. \quad (6.15)$$

Dla kolejności zadawania ograniczeń T , ε i η definiowane są następujące macierze:

$$\tilde{\mathbf{K}}_\eta = \mathbf{C}_\eta^T \mathbf{C}_\eta + \mathbf{Q}_\eta^T \mathbf{K} \mathbf{Q}_\eta, \quad \tilde{\mathbf{F}}_\eta = \mathbf{C}_\eta^T \mathbf{g}_\eta - \mathbf{Q}_\eta^T \mathbf{K} \mathbf{R}_\eta \mathbf{g}_\eta, \quad (6.16)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\eta,\varepsilon} = \mathbf{C}_\varepsilon^T \mathbf{C}_\varepsilon + \mathbf{Q}_\varepsilon^T \tilde{\mathbf{K}}_\eta \mathbf{Q}_\varepsilon, \quad \tilde{\mathbf{F}}_{\eta,\varepsilon} = \mathbf{C}_\varepsilon^T \mathbf{g}_\varepsilon - \mathbf{Q}_\varepsilon^T (\tilde{\mathbf{F}}_\eta - \tilde{\mathbf{K}}_\eta \mathbf{R}_\varepsilon \mathbf{g}_\varepsilon), \quad (6.17)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\eta,\varepsilon,T} = \mathbf{C}_T^T \mathbf{C}_T + \mathbf{Q}_T^T \tilde{\mathbf{K}}_{\eta,\varepsilon} \mathbf{Q}_T, \quad \tilde{\mathbf{F}}_{\eta,\varepsilon,T} = -\mathbf{Q}_T^T \tilde{\mathbf{F}}_{\eta,\varepsilon}. \quad (6.18)$$

W ten sposób otrzymujemy układ równań:

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\eta,\varepsilon,T} \mathbf{u} = \tilde{\mathbf{F}}_{\eta,\varepsilon,T}. \quad (6.19)$$

Jest możliwa taka implementacja MES, dla której warunki ograniczające są narzucane podczas agregacji macierzy sztywności i wektora prawych stron. Wystarczająco efektywne i proste do zastosowania jest również użycie macierzy rzadkich.

Dodatkowo, stosunek największej do najmniejszej wartości własnej układu (6.19) jest co najmniej równy stosunkowi największej wartości własnej do najmniejszej niezerowej wartości własnej macierzy \mathbf{K} [1].

6.2 Odebranie możliwości wystąpienia ruchu sztywnego

Dla naprężeniowych warunków brzegowych i periodycznych warunków brzegowych należy wyeliminować ruch sztywny RVE. Z tego powodu prawa strona w równaniu (6.13) przyjmujemy w postaci

$$\mathbf{C}_T = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_T \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma, \quad (6.20)$$

gdzie macierz \mathbf{N}_u jest macierzą funkcji kształtu. Macierz \mathbf{H}_T jest określona wzorem

$$\mathbf{H}_T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ y_1 & -x_1 & y_2 & -x_2 & \dots & y_n & -x_n \end{bmatrix}, \quad (6.21)$$

gdzie n jest liczbą stopni swobody RVE, $[x_i, y_i]$ jest współrzędną i -tego stopnia swobody. Zakładamy, że parzyste stopnie swobody związane są z przemieszczeniem poziomym, nieparzyste z przemieszczeniem pionowym. Wektor \mathbf{g} prawej strony w (6.13) ma postać

$$\mathbf{g} = \{0, 0, 0\}. \quad (6.22)$$

6.3 Przemieszczeniowe warunki brzegowe

Przemieszczeniowe warunki brzegowe są najprostszym przypadkiem, dla którego nie jest konieczna blokada ruchu sztywnego. Na podstawie równań (3.22) i (3.54), warunki tego typu piszemy w postaci macierzowej

$$\mathbf{C}\mathbf{u} = \mathbf{D}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{g}, \quad (6.23)$$

gdzie \mathbf{C} określona jest wzorem

$$\mathbf{C} = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_u \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma. \quad (6.24)$$

Macierze \mathbf{D} i \mathbf{E} mają o postać

$$\mathbf{D} = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_u \mathbf{N}_u^T \mathbf{X} d\Gamma, \quad (6.25)$$

$$\mathbf{E} = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_u \mathbf{N}_u^T \mathbf{Z} d\Gamma. \quad (6.26)$$

Macierze \mathbf{X} i \mathbf{Z} określone są wzorami

$$\mathbf{X} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2x & 0 & y \\ 0 & 2y & x \end{bmatrix}, \quad (6.27)$$

$$\mathbf{Z} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2x^2 & 0 & 2y^2 & 0 & xy & 0 \\ 0 & 2y^2 & 0 & 2x^2 & 0 & xy \end{bmatrix}. \quad (6.28)$$

Wiersze iloczynu macierzy $\mathbf{H}_u \mathbf{N}_u^T$ interpretowane są jako liniowo niezależne funkcje dopuszczalnych rozkładów sił brzegowych. Kolumny macierzy \mathbf{H}_u interpretujemy, jako wartości siły węzłowych, a \mathbf{N}_u jest macierzą funkcji interpolujących. Równanie (6.24) wymusza deformacje RVE, zgodną z zadanymi miarami makroodkształceń oraz zapewnia, że praca dopuszczalnych rozkładów sił brzegowych na mikrofluktuacji pola przemieszczeń jest równa zero. Dla przemieszczeniowych warunków brzegowych każdy rozkład sił brzegowych jest dopuszczalny. Zatem, jedną z możliwych postaci macierzy \mathbf{H}_u jest macierz jednostkowa o wymiarze $(n \times n)$.

6.4 Naprężeniowe warunki brzegowe

Do narzucania naprężeniowych warunków brzegowych zastosowane jest podejście sekwencyjne. Stan przemieszczenia, dla tego typu warunków brzegowych, jest niejednoznaczny względem stanu naprężenia. Z tego powodu musi być odebrana możliwość ruchu sztywnego. Dla naprężeniowych warunków brzegowych żądamy, by praca mikrofluktuacji pola przemieszczeń na dopuszczalnych siłach brzegowych była równa zero. W przypadku kontinuum rzędu I statycznie dopuszczalne siły brzegowe mają rozkład stały na brzegu Γ , por. rys. 6.1. Dla kontinuum rzędu II siły brzegowe mają rozkład, jak na rys. 6.2. Warto podkreślić, że postaci naprężenia na rys. 6.1 i rys. 6.2 są ortogonalne względem siebie, gdyż praca sił brzegowych rzędu I na deformacji rzędu II jest równa zero i na odwrót, praca sił brzegowych rzędu II na deformacji rzędu I jest równa zero.

6.4.1 Kontinuum rzędu I

Dla przypadku warunków brzegowych rzędu I piszemy równanie (3.26) w postaci macierzowej:

$$\mathbf{C}_\varepsilon \mathbf{u} = \mathbf{D}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{g}_\varepsilon, \quad (6.29)$$

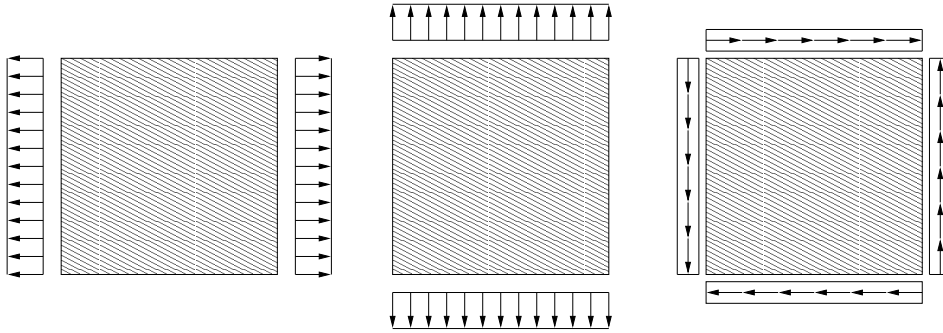
gdzie macierz C_ε określana jest wzorem

$$C_\varepsilon = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_\varepsilon \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma, \quad (6.30)$$

Wektor \mathbf{g}_ε prawych stron obliczamy za pomocą macierzy \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_\varepsilon \mathbf{N}_u^T \mathbf{X} d\Gamma. \quad (6.31)$$

Dla naprężeniowych warunków brzegowych dopuszczalne są stałe rozkłady sił brzegowych



Rysunek 6.1: Trzy liniowo niezależne rozkłady sił brzegowych

na na brzegu RVE, zob. rys. 6.1. Zatem, macierz \mathbf{H}_ε ma taką postać, że iloczyn macierzy $\mathbf{H}_\varepsilon \mathbf{N}_u^T$ dla deformacji RVE rzędu I ma wymiar (3×2) , gdzie poszczególne wiersze związane są z 3 funkcjami rozkładu sił brzegowych na rys. 6.1. Należy zwrócić uwagę, że dla naprężeniowych warunków brzegowych twierdzenie Hilla-Mandla jest spełnione oraz, że deformacja RVE jest zgodna z zadanym makroodkształceniem I rzędu.

6.4.2 Kontinuum rzędu II

Dla naprężeniowych warunków brzegowych możemy podać jedynie cztery (poza pokazanymi na rysunku 6.1) równania brzegowe, ponieważ istnieje jedynie tyle liniowo niezależnych postaci deformacji spełniających równania równowagi. Konsekwencją tego jest fakt, że RVE deformuje się zgodnie z zadanym makroodkształceniem rzędu II wyłącznie wtedy, gdy makroodkształcenie to jest statycznie dopuszczalne. Dla przypadku warunków ograniczających rzędu II równanie (3.58) można napisać w postaci macierzowej:

$$\mathbf{C}_\eta \mathbf{u} = \mathbf{E}_\eta \bar{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{g}_\eta, \quad (6.32)$$

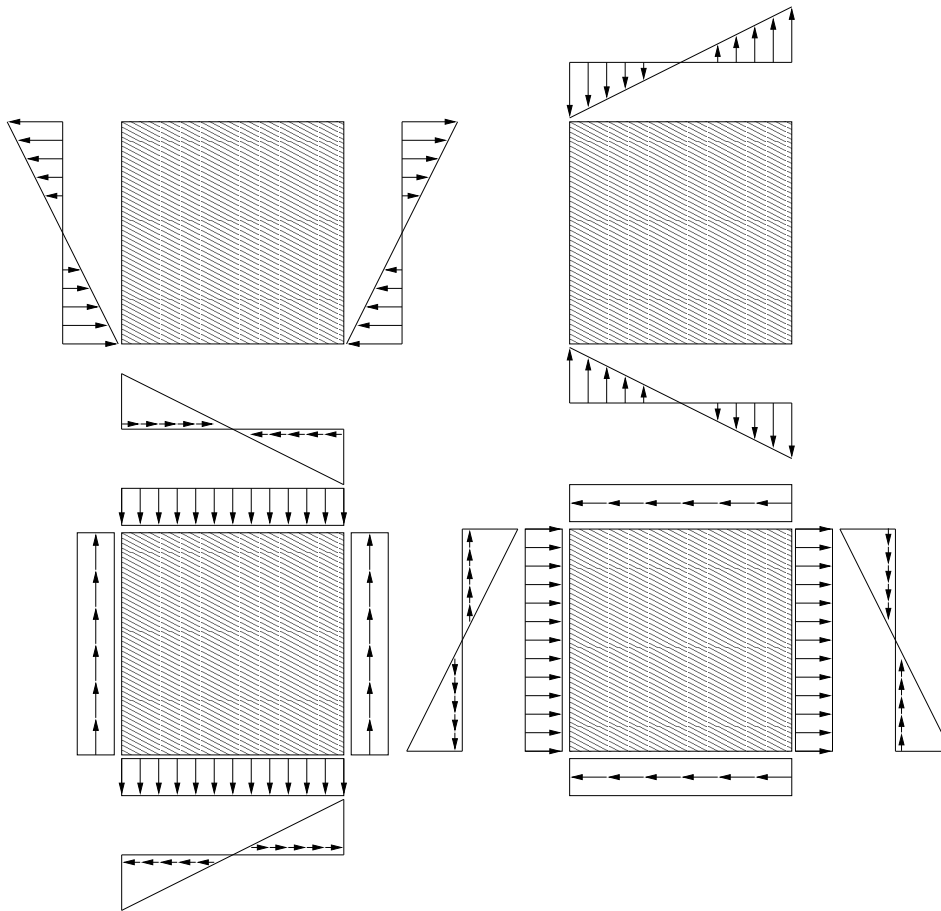
gdzie macierz \mathbf{C}_η jest określona wzorem

$$\mathbf{C}_\eta = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_\eta \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma. \quad (6.33)$$

Macierz \mathbf{E} po prawej stronie równania (6.32) ma postać:

$$\mathbf{E}_\eta = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_\eta \mathbf{N}_u^T \mathbf{Z} d\Gamma. \quad (6.34)$$

Aby uwzględniona została deformacja RVE, która jest zgodna z makroodkształceniem rzędu II, dodatkowe formy rozkładów sił brzegowych są nałożone, zob. rys. 6.2. Zatem kolumny macierzy \mathbf{H}_η zawierają wartości węzłowe rozkładów z rys. 6.2. Macierz \mathbf{H}_η ma wymiar $(4 \times n)$.



Rysunek 6.2: Liniowo niezależne rozkłady sił brzegowych dla warunków brzegowych rzędu II

6.5 Periodyczne warunki brzegowe

Nałożenie wyłącznie warunków periodycznych oznacza, że RVE jest deformowane zgodnie z zadanym makro odkształceniem $\bar{\epsilon}$. Część symetryczna tensora makroodkształcenia wyższego rzędu $\bar{\eta}$ nie jest uwzględniona. Aby deformacja RVE była zgodna z zadanym makroodkształceniem rzędu II, są zadane dodatkowe warunki brzegowe. Podobnie do tego, co zostało pokazane w podrozdziale opisującym wymuszanie naprężeniowych warunków brzegowych, w przypadku periodycznych warunków brzegowych zastosujemy podejście sekwencyjne z podrozdziału 6.1.1. Stosując podejście sekwencyjne wymuszania warunków brzegowych, oddzielnie piszemy warunki brzegowe dla kontinuum rzędu I i II.

6.5.1 Kontinuum rzędu I

Równanie dla periodycznych warunków brzegowych ma postać:

$$\mathbf{C}_\epsilon \mathbf{u} = \mathbf{D}\bar{\epsilon} = \mathbf{g}_\epsilon, \quad (6.35)$$

gdzie macierz \mathbf{C}_ϵ jest określona wzorem

$$\mathbf{C}_\epsilon = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_{pI} \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma, \quad (6.36)$$

Macierz \mathbf{D} jest dana wzorem

$$\mathbf{D} = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_{pI} \mathbf{N}_u^T \mathbf{X} d\Gamma. \quad (6.37)$$

Macierz \mathbf{H}_{pI} dla periodycznych warunków jest dobrana tak, by spełnione zostało równanie (3.30). Zawiera wszystkie liniowo niezależne wektory wartości sił węzłowych, które prowadzą do antyperiodycznego rozkładu sił brzegowych.

6.5.2 Kontinuum rzędu II

Warunki brzegowe rzędu II związane z makroodkształceniem $\bar{\eta}$ potraktujemy podobnie, jak w podrozdziale 6.4.2, tzn. spełnimy je w sposób słaby. Nakładając periodyczne warunki brzegowe wymuszona zostaje deformacja związana z antysymetryczną częścią tensora drugich gradientów przemieszczeń $\bar{\eta}$. Aby, w sposób całkowity, RVE deformowało się zgodnie z zadanym makroskopowym odkształceniem, nałożymy warunki brzegowe w postaci

$$\mathbf{C}_\eta \mathbf{u} = \mathbf{E}\bar{\eta} = \mathbf{g}_\eta, \quad (6.38)$$

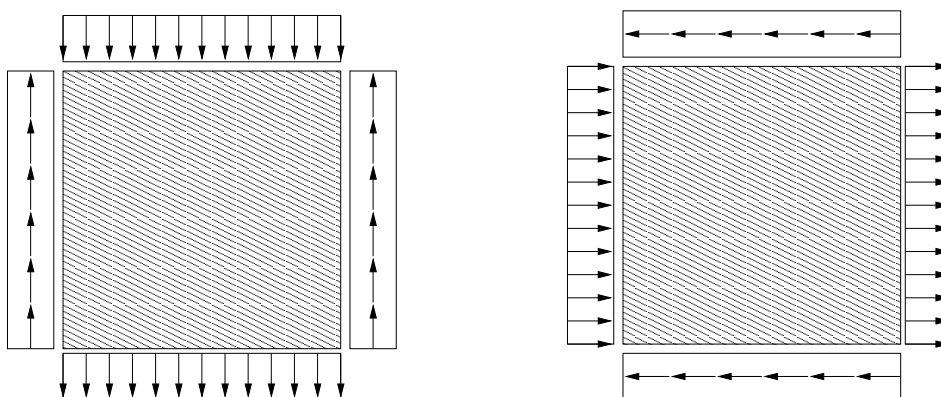
gdzie macierz \mathbf{C}_η dana jest wzorem

$$\mathbf{C}_\eta = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_{pII} \mathbf{N}_u^T \mathbf{N}_u d\Gamma. \quad (6.39)$$

Macierz \mathbf{E} po prawej stronie równania (6.32) zapiszemy w postaci

$$\mathbf{E} = \int_{\Gamma} \mathbf{H}_{pII} \mathbf{N}_u^T \mathbf{Z} d\Gamma. \quad (6.40)$$

Dodatkowe formy rozkładów sił brzegowych są uwzględnione, aby nałożona została deformacja RVE, która jest zgodna z symetryczną częścią makroodkształcenia rzędu II, zob. rys. 6.3. Zatem, kolumny macierzy \mathbf{H}_{pII} zawierają wartości węzłowe rozkładów z rys. 6.2. Macierz \mathbf{H}_{pII} ma wymiar $(2 \times n)$.



Rysunek 6.3: Liniowo niezależne rozkłady sił brzegowych dla warunków brzegowych rzędu II

6.6 Obliczanie makroskopowych wektorów naprężeń

Na podstawie wzorów (3.16) i (3.44) naprężenia możemy wyrazić przez siły brzegowe wynikające z dyskretyzacji sił węzłowych na brzegu RVE. Na podstawie zasady prac wirtualnych możemy wykazać równość pracy sił węzłowych na przemieszczeniach i pracy mnożników Lagrange'a na uogólnionych przemieszczeniach, a więc mamy

$$\mathbf{u}^T \mathbf{t} = \mathbf{g}^T \boldsymbol{\lambda}. \quad (6.41)$$

Uogólnione przemieszczenia wyrazimy przez makroodkształcenia, co daje

$$\mathbf{u}^T \mathbf{t} = (\mathbf{D}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E}\bar{\boldsymbol{\eta}})^T \boldsymbol{\lambda}, \quad (6.42)$$

gdzie $\boldsymbol{\lambda}$ jest obliczane ze wzoru (6.12). Na podstawie powyższej równości i wykorzystując twierdzenia Hilla-Mandela dla numerycznego modelu RVE, makronaprężenia rzędu I są wyrażone wzorem

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \mathbf{D}^T \boldsymbol{\lambda}. \quad (6.43)$$

Natomiast makronaprężenia rzędu II są określone wzorem

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{V} \mathbf{E}^T \boldsymbol{\lambda}. \quad (6.44)$$

6.7 Obliczanie makroskopowych stycznych macierzy sztywności

Związki fizyczne między wielkościami makroskopowymi w metodzie CH nie są znane w sposób jawny. MES, zastosowana do rozwiązania zadania w skali makro, wymaga określenia stycznych materiałowych macierzy sztywności. Zlinearyzowane związki między przyrostami makroodkształceń, a przyrostami makronaprężeń mają postać

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbf{C}}^1 \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\mathbf{C}}^2 \Delta \bar{\boldsymbol{\eta}}, \quad (6.45)$$

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\tau}} = \bar{\mathbf{C}}^3 \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\mathbf{C}}^4 \Delta \bar{\boldsymbol{\eta}}, \quad (6.46)$$

gdzie styczne materiałowe macierze sztywności zostaną wyznaczone na podstawie globalnych macierzy sztywności dla RVE znajdującego się w równowadze.

Styczne materiałowe macierze sztywności wyznaczmy rozwiązując, 3 + 6 liniowych równań algebraicznych. Macierz \bar{C}^1 , łącząca przyrosty makroodkształcenia $\Delta\bar{\epsilon}$ z przyrostem makronapężenia $\Delta\bar{\sigma}$, ma wymiar 3x3:

$$\bar{C}^1 = [\delta\bar{\sigma}^1, \delta\bar{\sigma}^2, \delta\bar{\sigma}^3]. \quad (6.47)$$

Napężenia $\delta\bar{\sigma}^i$, $i = 1, 2, 3$ obliczymy, rozwiązując 3 liniowe układy równań dla RVE, którego warunki brzegowe są określane zgodnie z odkształceniami

$$\begin{aligned} \delta\bar{\sigma}^1 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [100], \quad \delta\bar{\eta} = [000000], \\ \delta\bar{\sigma}^2 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [010], \quad \delta\bar{\eta} = [000000], \\ \delta\bar{\sigma}^3 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [001], \quad \delta\bar{\eta} = [000000]. \end{aligned} \quad (6.48)$$

Związek między przyrostem makroodkształcenia $\Delta\bar{\eta}$ i przyrostem makronapężenia $\Delta\bar{\sigma}$ jest uwzględniony przez macierz materiałową \bar{C}^2 o wymiarze 3x6:

$$\bar{C}^2 = [\delta\bar{\sigma}^1, \delta\bar{\sigma}^2, \delta\bar{\sigma}^3, \delta\bar{\sigma}^4, \delta\bar{\sigma}^5, \delta\bar{\sigma}^6], \quad (6.49)$$

gdzie napężenia $\delta\bar{\sigma}^i$, $i = 1..6$ dla \bar{C}^2 obliczamy dla deformacji RVE zgodnej z odkształceniami

$$\begin{aligned} \delta\bar{\sigma}^1 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [100000], \\ \delta\bar{\sigma}^2 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [010000], \\ \delta\bar{\sigma}^3 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [001000], \\ \delta\bar{\sigma}^4 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [000100], \\ \delta\bar{\sigma}^5 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [000010], \\ \delta\bar{\sigma}^6 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [000001]. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Macierz, zawierającą związek między przyrostem makroodkształcenia $\Delta\bar{\epsilon}$ i przyrostem makronapężenia $\Delta\bar{\tau}$, jest wyrażona przez macierz materiałową \bar{C}^3 o wymiarze 6x3:

$$\bar{C}^3 = [\delta\bar{\tau}^1, \delta\bar{\tau}^2, \delta\bar{\tau}^3], \quad (6.51)$$

gdzie napężenia $\delta\bar{\tau}^i$, $i = 1, 2, 3$ dla \bar{C}^3 obliczamy dla deformacji RVE zgodnej z odkształceniami

$$\begin{aligned} \delta\bar{\tau}^1 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [100], \quad \delta\bar{\eta} = [000000], \\ \delta\bar{\tau}^2 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [010], \quad \delta\bar{\eta} = [000000], \\ \delta\bar{\tau}^3 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [001], \quad \delta\bar{\eta} = [000000]. \end{aligned} \quad (6.52)$$

Ostatnia macierz \bar{C}^4 zawiera zależność między przyrostem makroodkształcenia $\Delta\bar{\eta}$, a przyrostem makronapężenia $\Delta\bar{\tau}$, która ma wymiar 6x6:

$$\bar{C}^4 = [\delta\bar{\tau}^1, \delta\bar{\tau}^2, \delta\bar{\tau}^3, \delta\bar{\tau}^4, \delta\bar{\tau}^5, \delta\bar{\tau}^6], \quad (6.53)$$

gdzie makronapężenia $\delta\bar{\tau}^i$, $i = 1..6$ są obliczane dla deformacji RVE zgodnej z zadanymi odkształceniami

$$\begin{aligned} \delta\bar{\tau}^1 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [100000], \\ \delta\bar{\tau}^2 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [010000], \\ \delta\bar{\tau}^3 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [001000], \\ \delta\bar{\tau}^4 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [000100], \\ \delta\bar{\tau}^5 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [000010], \\ \delta\bar{\tau}^6 : & \quad \text{dla} \quad \delta\bar{\epsilon} = [000], \quad \delta\bar{\eta} = [000001]. \end{aligned} \quad (6.54)$$

Dla kontinuum rzędu I obliczamy wyłącznie macierz \bar{C}^1 , a dla materiału jednorodnego macierze \bar{C}^2 i \bar{C}^3 są zerowe.

6.8 Analiza szczególnego przypadku

W tym podrozdziale pokażemy postaci deformacji RVE, wywołane makroskopowymi odkształceniami rzędu I i II. Rozważając szczególny przypadek materiału jednorodnego, są wyprowadzone makroskopowe styczne macierze sztywności $\bar{\mathbf{C}}^1$ i $\bar{\mathbf{C}}^4$. Na tej podstawie zostanie pokazane, że sztywność jest funkcją rozmiaru charakterystycznego RVE dla kontinuum rzędu II w przeciwieństwie do kontinuum klasycznego.

Na początku jest analizowany stan naprężenia dla niejednorodnej mikrostruktury, z nieregularnym rozkładem okrągłych otworów o stałym promieniu. Dla 16-stu otworów i subiektywnie wybranego stanu naprężenia $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \{1, 0, 0\}$ i $\bar{\boldsymbol{\tau}} = \{0, 0, 0, 0, 0\}$ obliczono makroskopowe materiałowe macierze sztywności $\bar{\mathbf{C}}^1$, $\bar{\mathbf{C}}^2$, $\bar{\mathbf{C}}^3$ i $\bar{\mathbf{C}}^4$, a następnie jest rozwiązany układ równań (6.45) dla znanych makronaprężeń i nieznanymi makroodkształceniami. Dla obliczonych odkształceń deformacja, siły brzegowe i rozkład mikroskopowej składowej naprężenia σ_x są przedstawione na rys. 6.4. Do obliczeń wybrano materiał Hooke'a. Na rys. 6.4 można zauważyć jakościowe różnice w rozkładach sił brzegowych i przemieszczeniach dla standardowych warunków brzegowych, tzn. naprężeniowych, periodycznych i przemieszczeniowych.

Podobnie można pokazać stan naprężenia dla niezerowego tensora rzędu II. Dla przykładu pokażemy przypadek, gdy $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \{0, 0, 0\}$ i $\bar{\boldsymbol{\tau}} = \{1, 0, -1, 0, 0\}$. Dla obliczonych makroskopowych stycznych macierzy sztywności, jak poprzednio rozwiązano układ równań (6.45), dla każdego typu warunków brzegowych z osobna. Następnie wymuszono deformacje RVE, zgodnie z obliczonymi makroodkształceniami. Na rys. 6.5 przedstawiono deformacje, siły brzegowe i rozkład drugiego niezmiennika dewiatora mikronaprężeń J_2 . Należy zwrócić uwagę, że symetryczna część tensora odkształcenia $\bar{\boldsymbol{\eta}}$ dla periodycznych warunków brzegowych wymuszona jest w sposób słaby (całkowy) przez dodanie dodatkowych równań, por. podpunkt 6.5.2. Dodanie dodatkowych równań do warunków periodyczności przemieszczeń powoduje, że dla drugiego wiersza na rys. 6.5 przemieszczenia na brzegu RVE są lokalnie periodyczne.

Teraz zajmiemy się analizą szczególnego przypadku materiału mikroskopowo jednorodnego. Na początku rozważymy deformację zgodną z odkształceniem $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ i stan naprężania zgodny z naprężeniem $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$. Na rys. 6.6 przedstawiono przemieszczenia i rozkład sił brzegowych dla dwóch z trzech podstawowych postaci naprężenia. Analizując równie (3.8)

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}}^0(\mathbf{X}) + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{x} + \mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$$

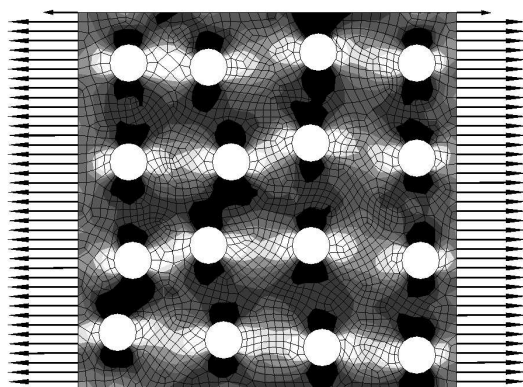
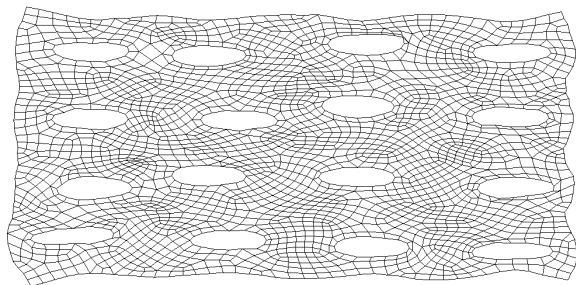
należy podkreślić, że wartość mikrofluktuacji $\mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ jest tożsamościowo równa zero dla materiału jednorodnego. Dodatkowo, każde pole przemieszczeń $\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$, którego składowe dane są funkcją liniową, tożsamościowo spełniają równanie równowagi. Z tej przyczyny, dla materiału mikroskopowo jednorodnego, rozwiązanie nie zależy od sposobu wymuszania warunków brzegowych dla RVE. Dla przypadku ogólnego, gdy materiał jest mikroskopowo niejednorodny, możemy pole przemieszczeń przedstawić w postaci

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_L(\mathbf{X}, \mathbf{x}) + \mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x}), \quad (6.55)$$

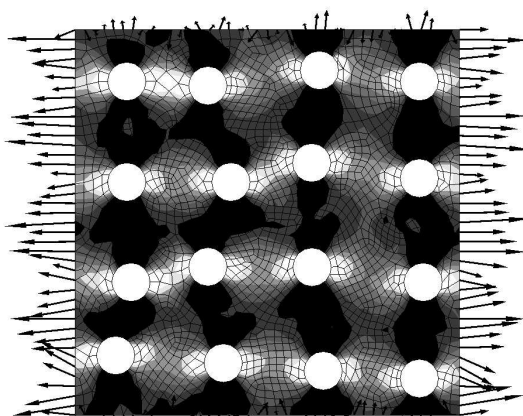
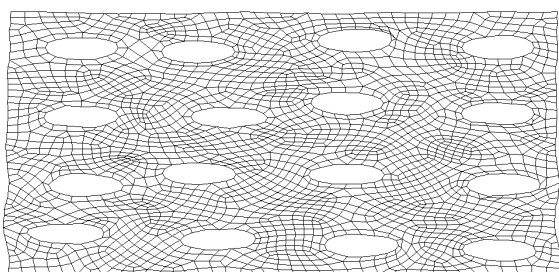
gdzie pole $\mathbf{u}_L(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ jest zgodne z wymuszonym odkształceniem, a pole mikrofluktuacji przemieszczeń $\mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ wynika z spełnienia równań równowagi.

Dla przykładu, kwadratowy RVE o długości boku L jest modelowany jednym bikwadratowym elementem skończonym. Upraszczając, do analizy przyjęto materiał Hooke'a. W programie *Ma-ple* [43] obliczono symbolicznie elementową macierz sztywności \mathbf{K} , wykorzystując wzory z tego rozdziału do wymuszenia naprężeniowych warunków brzegowych. Jako wynik otrzymano symboliczną postać macierzy sztywności. Związek między makroodkształceniem i makronaprężeniem

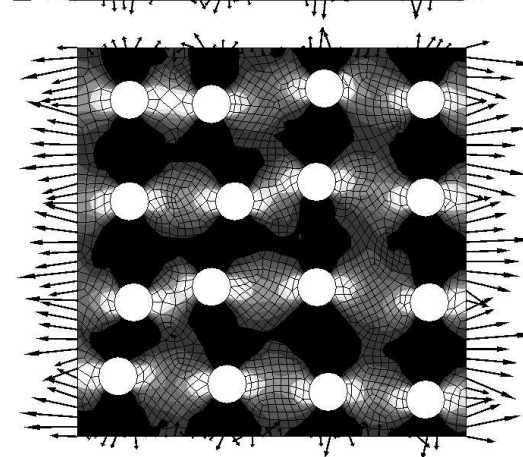
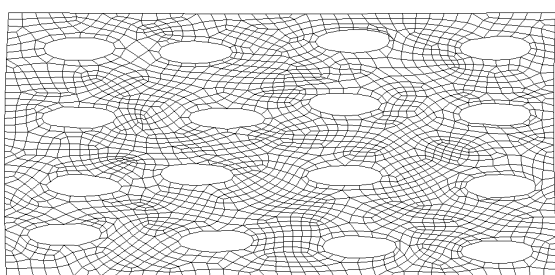
Statyczne w.b.



Periodyczne w.b.

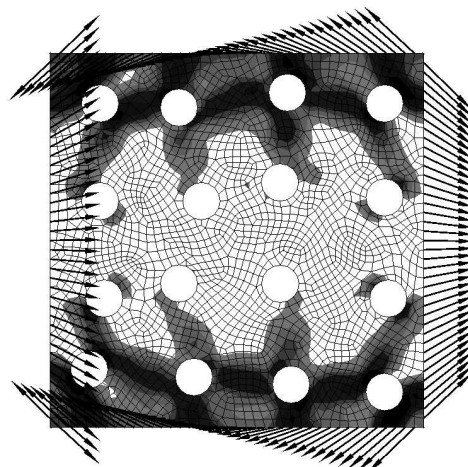
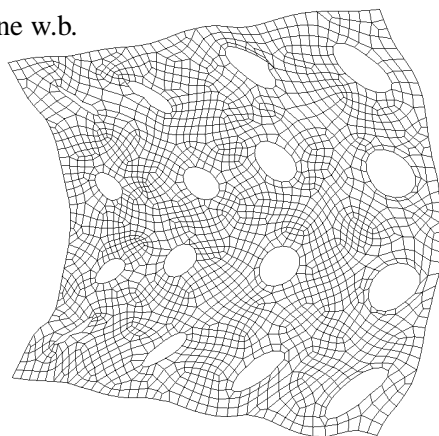


Przemieszczeniowe w.b.

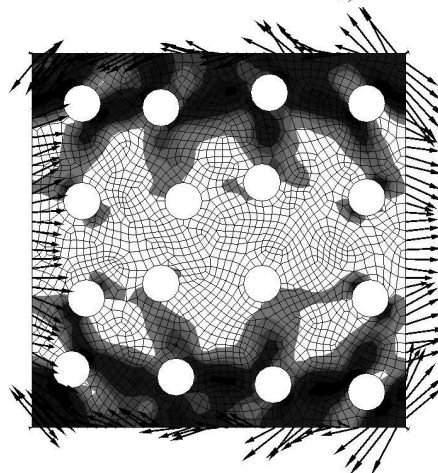
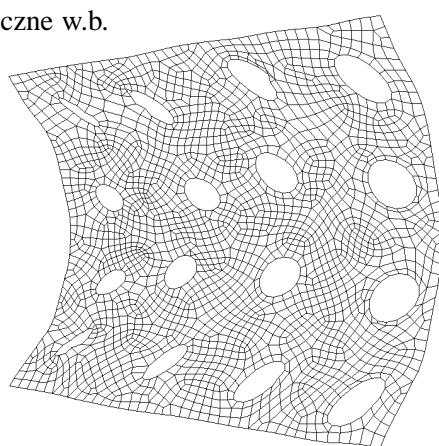


Rysunek 6.4: Deformacja, siły brzegowe i rozkład składowej mikronapężenia σ_x dla naprężeniowych, okresowych i przemieszczeniowych warunków brzegowych i makronapężenia $\bar{\sigma} = \{1, 0, 0\}$

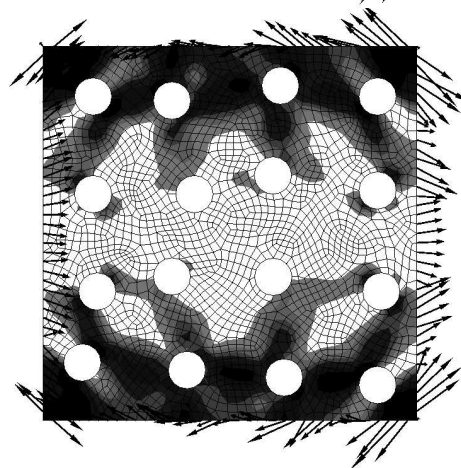
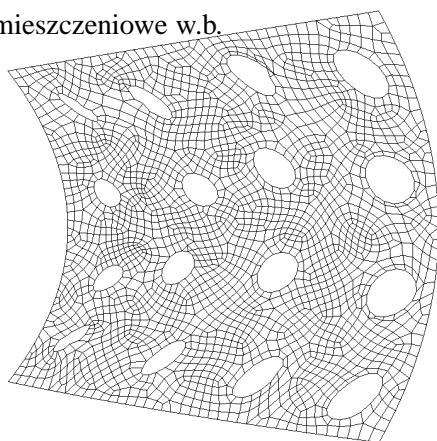
Stacyjne w.b.



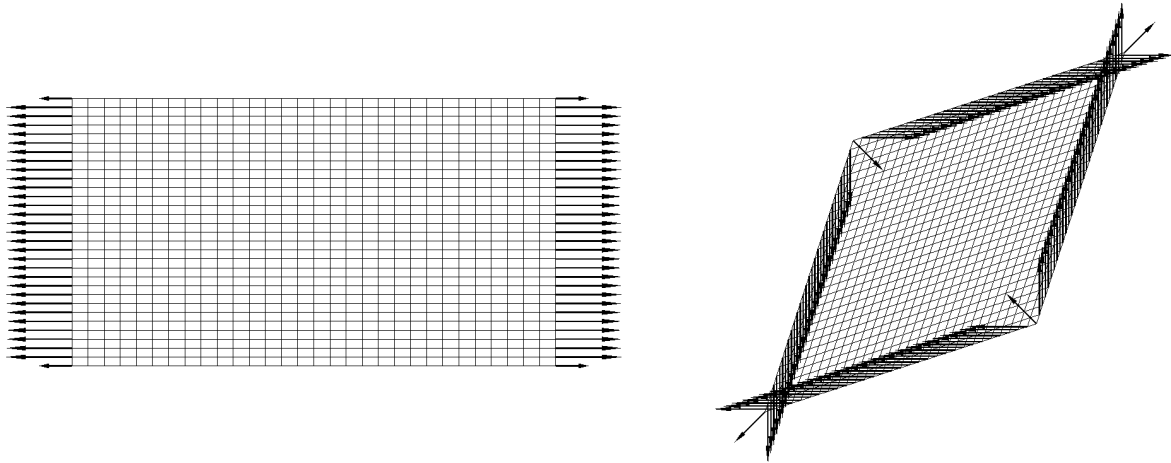
Periodyczne w.b.



Przemieszczeniowe w.b.



Rysunek 6.5: Deformacje, siły brzegowe i rozkład drugiego niezmiennika dewiatora mikronaprężeń J_2 , dla naprężeniowych, okresowych i przemieszczeniowych warunków brzegowych i naprężenia rzędu II $\bar{\tau} = \{1, 0, -1, 0, 0\}$



Rysunek 6.6: Postacie deformacji RVE i rozkłady sił brzegowych dla makronapężenia $\bar{\sigma}$

rzędu I ma postać, por. (6.45):

$$\begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \end{bmatrix}. \quad (6.56)$$

Należy dodać, że dla materiału jednorodnego macierz sztywności $\bar{\mathbf{C}}^2$ jest macierzą zerową. Zastępczy materiał w skali makro, który został wyprowadzony na podstawie analizy symbolicznej jednorodnego RVE, jest opisany równaniami Hooke'a i postać macierzy $\bar{\mathbf{C}}^1$ nie zależy od wymiaru RVE. Na tej podstawie możemy powiedzieć, że homogenizacja rzędu I, w której do opisu deformacji używamy jedynie gradientów przemieszczeń, modeluje materiał prosty. Taki opis nie pozwala poprawnie opisać efektu skali.

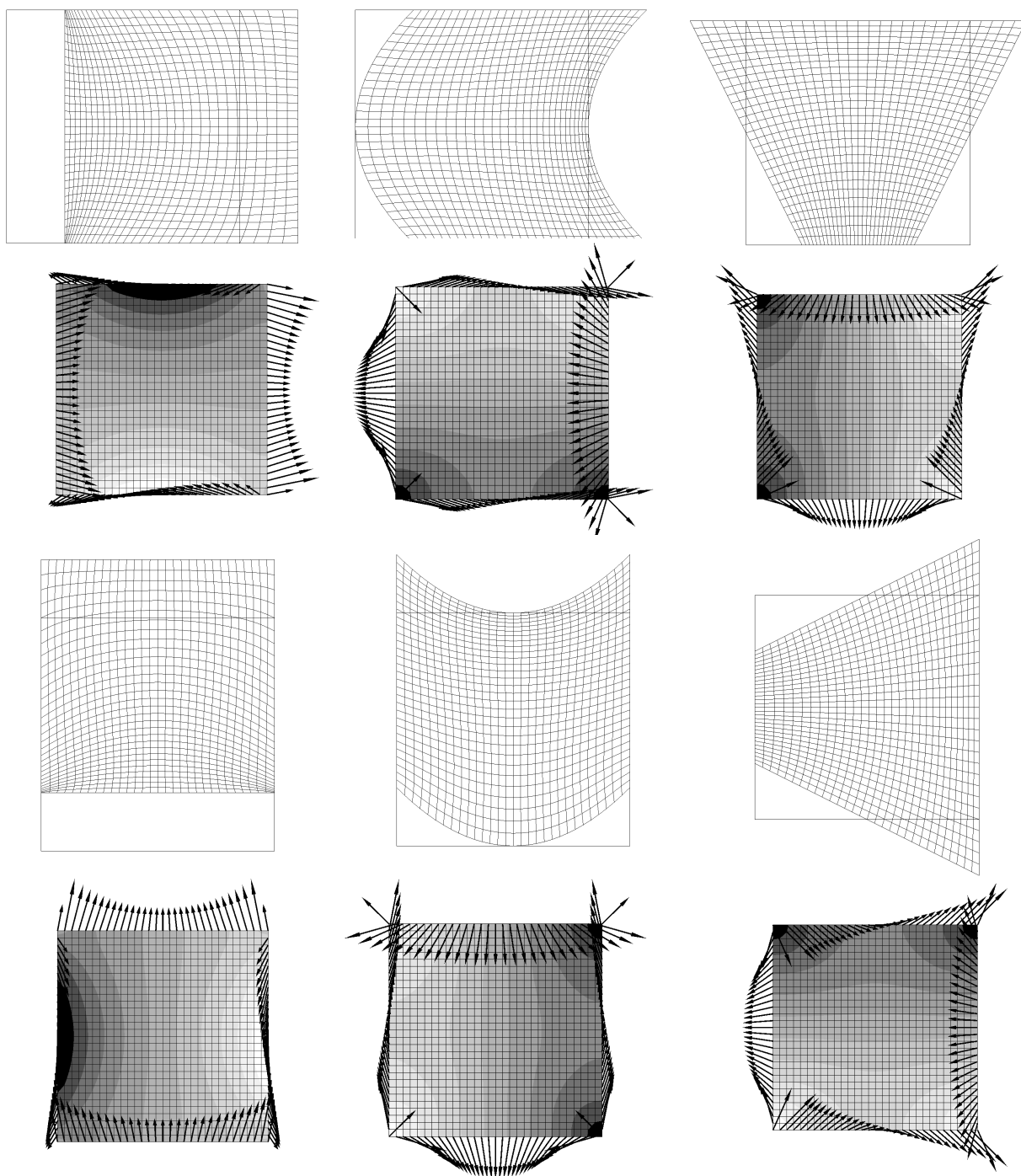
Dla zadań 2D istnieje 6 niezależnych postaci deformacji RVE, związanych z makroskopowym odkształceniem rzędu II. Na rys. 6.7 przedstawiono postacie odkształcenia $\bar{\boldsymbol{\eta}}$ dla jednorodnej geometrii RVE, materiału Hooke'a i przemieszczeniowych warunków brzegowych. Analizując rys. 6.7 i równanie (3.34):

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{X}) + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} : \bar{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{X}) + \mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x}),$$

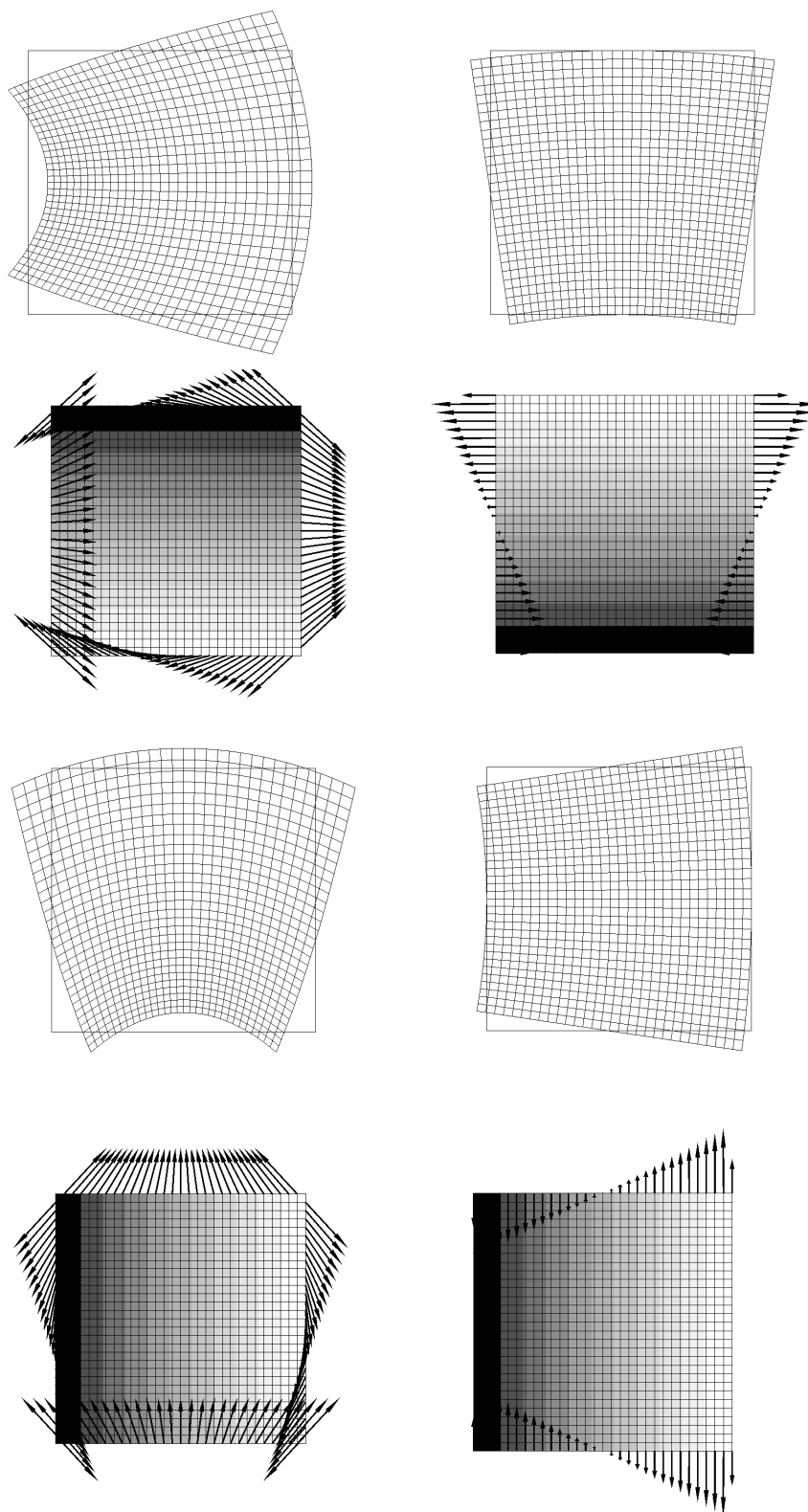
można zauważyć, że wartość mikrofluktuacji pola przemieszczeń $\mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ jest różna od zera dla przypadku materiału mikroskopowo jednorodnego i homogenizacji numerycznej rzędu II. Jeżeli pole przemieszczeń myślowo rozdzielimy na część niezależną od typu warunków brzegowych i część od nich zależną:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_K(\mathbf{X}, \mathbf{x}) + \mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \quad (6.57)$$

to niezerowa wartość mikrofluktuacji pola przemieszczeń $\mathbf{r}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ jest tak dobrana, by spełnione zostały równania równowagi w RVE. Postacie deformacji rzędu II, dla których wartość pola mikrofluktuacji przemieszczeń $\mathbf{r}(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ jest równa zero, są przedstawione na rys. 6.8. Deformacje te są zgodne z makroodkształceniem $\bar{\boldsymbol{\eta}}$, które jest statycznie dopuszczalne. Ta uwaga jest istotna, ponieważ dla materiału jednorodnego rozwiązanie nie zależy od typu warunków brzegowych, gdy spełnione jest równanie równowagi w skalach makro i mikro. Tak więc dla przemieszczeniowych, periodycznych i naprężeniowych warunków brzegowych otrzymamy ten sam wynik, po spełnieniu równań równowagi w skalach makro i mikro.



Rysunek 6.7: Postacie deformacji i rozkłady sił brzegowych związane z makroodkształceniem $\bar{\eta}$



Rysunek 6.8: Cztery liniowo niezależne postacie deformacji i rozkłady sił brzegowych, dla których mikrofluktuacja pola przemieszczeń jest zerowa i nie zależy od typu warunków brzegowych

Z drugiej strony, dla naprężeniowych warunków brzegowych, żądamy by rozkład sił na brzegu RVE był co najwyżej liniowy. Możemy podać jedynie cztery (poza stałymi) postaci naprężenia, o rozkładach wynikających z równań równowagi. Postacie naprężeń przedstawione są na rys. 6.8. Ponieważ rozwiązanie dla naprężeniowych warunków brzegowych mieści się w przestrzeni aproksymacyjnej dziewięciowęzłowego elementu skończonego, można symbolicznie obliczyć macierz $\overline{\mathbf{C}}^4$. Po uwzględnieniu, że macierz $\overline{\mathbf{C}}^3$ jest zerowa dla analizowanego przypadku, związek między odkształceniem $\overline{\boldsymbol{\eta}}$ i naprężeniem $\overline{\boldsymbol{\tau}}$ ma postać

$$\begin{bmatrix} \overline{\tau}_{111} \\ \overline{\tau}_{222} \\ \overline{\tau}_{221} \\ \overline{\tau}_{112} \\ \overline{\tau}_{121} \\ \overline{\tau}_{122} \end{bmatrix} = d \begin{bmatrix} a & 0 & -a & 0 & 0 & -b \\ 0 & a & 0 & -a & -b & 0 \\ -a & 0 & a & 0 & 0 & b \\ 0 & -a & 0 & a & b & 0 \\ 0 & -b & 0 & b & c & 0 \\ -b & 0 & b & 0 & 0 & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\eta}_{111} \\ \overline{\eta}_{222} \\ \overline{\eta}_{221} \\ \overline{\eta}_{112} \\ 2\overline{\eta}_{121} \\ 2\overline{\eta}_{122} \end{bmatrix}, \quad (6.58)$$

gdzie:

$$a = L^2(2\mu + \lambda)/2, \quad b = L^2\mu, \quad c = L^2(3\mu + \lambda), \quad d = \frac{\mu}{3(4\mu + \lambda)}. \quad (6.59)$$

Macierz $\overline{\mathbf{C}}^4$ jest funkcją wymiaru charakterystycznego RVE, a przez to rozwiązanie w ogólnym przypadku będzie zależęć od wymiaru RVE. Z analizy wartości własnych macierzy $\overline{\mathbf{C}}^4$ wynika, że dwie spośród nich są zerowe. Jest to spowodowane czterema liniowymi i statycznie dopuszczalnymi rozkładami mikronaprężenia odpowiadającymi sześciu postaci odkształcenia rzędu II (w dwóch wymiarach). Oznacza to, że stan odkształcenia w punkcie da się jednoznacznie wyznaczyć na podstawie stanu naprężenia, dopiero po uwzględnieniu równań równowagi w skali makro.

Analityczna postać macierzy $\overline{\mathbf{C}}^4$, dla okresowych warunków brzegowych, jest taka sama, jak dla naprężeniowych warunków brzegowych.

Dla rozważanego przypadku, z analizy obliczonych macierzy sztywności wiemy, że zastępczy materiał makroskopowy jest izotropowy, ale nie jest centrosymetryczny (materiał niezmienny ze względu na obroty [54]). Kwadratowy RVE posiada 4 osie symetrii, co powoduje, że postać operatorów sztywności, związanych z naprężeniami lub odkształceniami wyższych rzędów, będzie zależęć od wyboru mikroskopowego układu odniesienia. Wynika z tego, że dla kwadratowego RVE i materiału jednorodnego mikroskopowo nie można wyznaczyć parametrów dla związku konstytutywnego Mindlina. Równanie konstytutywne Mindlina jest funkcją niezmienników tensora odkształceń rzędu I i II, zatem materiał opisany tym związkiem jest izotropowy i centrosymetryczny.

Rozdział 7

Przykłady numeryczne

W rozdziale zamieszczono trzy testy numeryczne. Ograniczono się jedynie do akademickich problemów obrazujących potencjalne zastosowanie metody CH do rozwiązywania rzeczywistych problemów inżynierskich. W przedstawionych przykładach pokazane zostały zagadnienia, które uwypuklają wybrane zalety, omawianego w pracy, podejścia.

7.1 Test zginania

Test zginania służy weryfikacji jakościowej i ilościowej metody CH oraz sprawdza poprawność jej sformułowania i implementacji. W teście przeprowadzono numeryczną analizę kompozytu, który poddany jest zginaniu. Problem rozwiązano przy małej rozdzielności skali makro od mikro ($L/l = 6$), tak, by uwypuklone zostały niektóre różnice wynikające z klasycznego i gradientowego opisu ośrodka ciągłego.

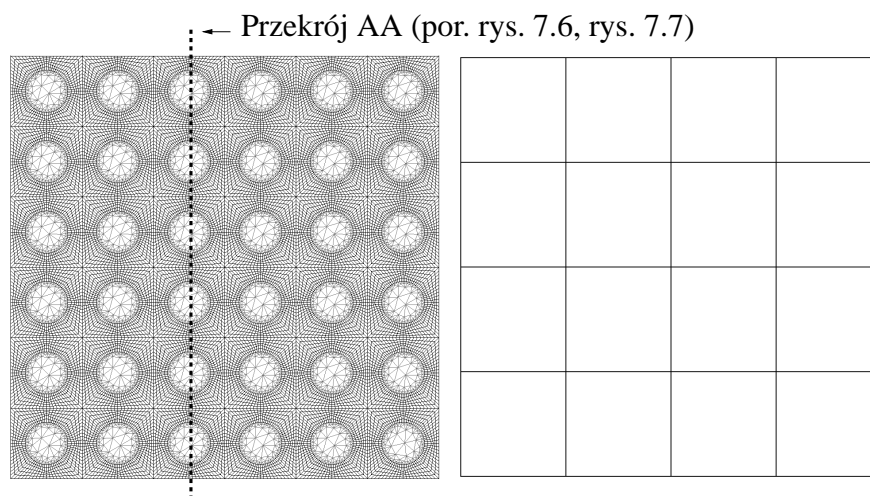
Rozważany był problem w płaskim stanie odkształcenia. Kwadratowy kompozyt o wymiarze boku 3 mm został poddany zginaniu. Kompozyt złożony jest z matrycy i długich równomiernie rozłożonych włókien o średnicy 0.15 mm. Zadanie rozwiązano na trzy różne sposoby:

- bezpośrednio dyskretyzując mikroskopową strukturę materiału
- z zastosowaniem metody CH, z klasycznym opisem ośrodka ciągłego
- z zastosowaniem metody CH, z gradientowym opisem ośrodka ciągłego.

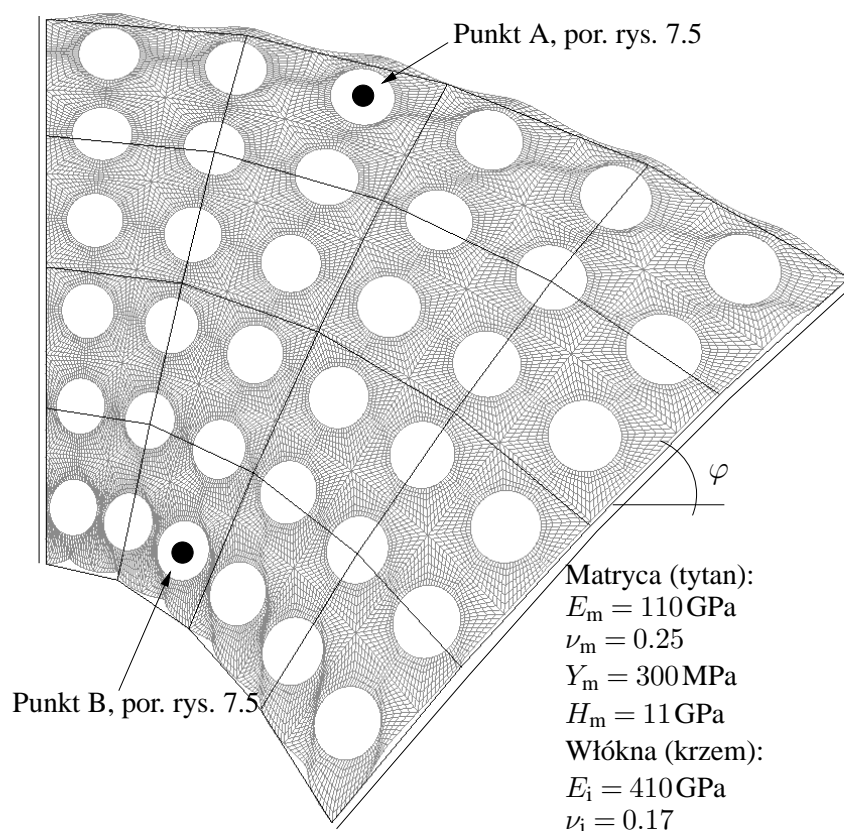
Dla podejść dwuskalowych przyjęto, że RVE zawiera jedną jednostkę elementarną (jedno włókno) i ma kształt kwadratu o boku 0.5 mm. Deformacja RVE, zgodna z makroskopowymi miarami odkształceń, jest określona na trzy sposoby, tj. za pomocą naprężeniowych, periodycznych i przemieszczeniowych warunków brzegowych.

Bezpośrednia dyskretyzacja mikrostruktury, rys. 7.1 po lewej, zawiera 41735 stopni swobody. Założono, że tytanowa matryca opisana jest za pomocą sprężysto-plastycznego modelu materiału (powierzchnia plastyczności HMH, stowarzyszone prawo płynięcia, izotropowe liniowe wzmocnienie). Celem uniknięcia blokady objętościowej, występującej w płaskim stanie odkształcenia, do skończenie elementowej dyskretyzacji zastosowano stabilizowany element przemieszczeniowy Q4 (8 stopni swobody, bilinowa interpolacja pola przemieszczeń wewnątrz elementu) ze zredukowanym całkowaniem. Do dyskretyzacji sprężystych i sztywnych włókien zastosowano element przemieszczeniowy CST (6 s.s., linowa interpolacja pola przemieszczeń wewnątrz elementu). Zadanie rozwiązane metodą bezpośrednią zostało przyjęte, jako rozwiązanie referencyjne, do którego odniesione są rozwiązania otrzymane metodą CH.

Do dyskretyzacji dwuskalowego zadania w skali makroskopowej zastosowano siatkę 16 elementów skończonych, przedstawioną na rys. 7.1 po prawej. Do analizy ośrodka klasycznego zastosowano element przemieszczeniowy Q9 (18 s.s., kwadratowa interpolacja pola przemieszczeń wewnątrz elementu). Do analizy ośrodka gradientowego zastosowano element mieszany Q18G16L4, omówiony w podrozdziale 5.2.



Rysunek 7.1: Dyskretyzacja dla bezpośredniej dyskretyzacji niejednorodnej budowy kompozytu i za pomocą dwuskalowego podejścia MES



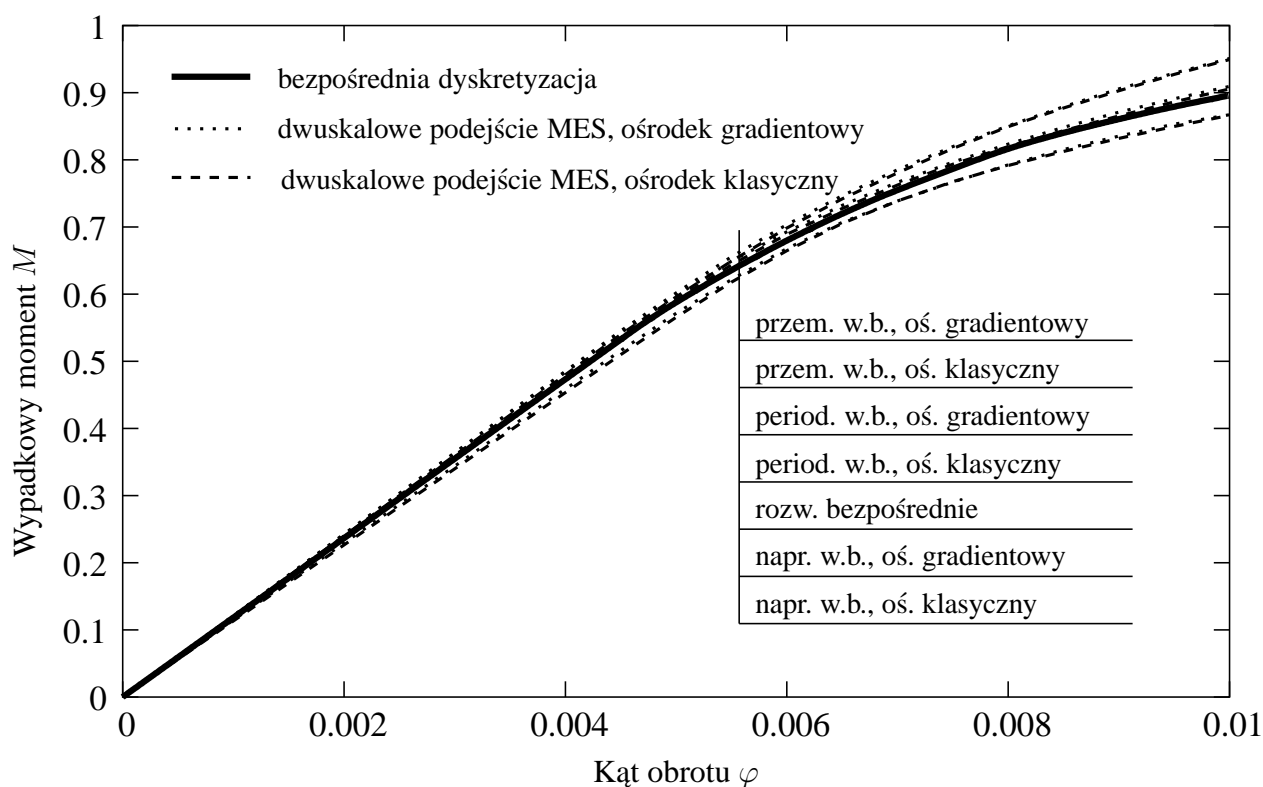
Rysunek 7.2: Deformacja w skali makro

Do analizy przyjęto proste modele materiału. Dla sprężysto-plastycznej matrycy zadano po-

wierzchnię plastyczności HMH liniowym prawem izotropowego wzmocnienia i stowarzyszone prawo płynięcia. Sprężystą odpowiedź matrycy i włókien opisuje liniowy związek fizyczny Hooke'a. Parametry przyjętych związków fizycznych podano u dołu rys. 7.2. Parametry modeli fizycznych zbliżone są do przyjmowanych dla tytanu i krzemu. Test zginania nie jest weryfikowany przez doświadczenie, jest przeprowadzony dla hipotetycznego, niejednorodnego materiału złożonego z matrycy i inkluzji.

Kwadratowy kompozyt poddany jest kinematycznie wymuszonemu zginaniu. Deformacja dla zadania referencyjnego i zadania dwuskalowego przedstawiona jest na rys. 7.2. Dla ośrodka klasycznego łatwym jest nałożenie warunków brzegowych. Poprzez blokadę przemieszczenia pionowego jednego z węzłów odbieramy możliwość translacji w kierunku pionowym. Na lewej krawędzi odebrana jest możliwość przemieszczeń poziomych. Na prawej krawędzi zadane są przemieszczenia, które są zgodne z wymuszonym kątem obrotu φ .

W przypadku ośrodka gradientowego dodatkowo należy podać warunki brzegowe nałożone na gradienty pola przemieszczeń. Na lewej krawędzi odebrano możliwość mikrorotacji przez wymuszenie zerowych wartości w antysymetrycznym tensorze gradientu pola przemieszczeń. Na prawej krawędzi, mikrorotacja, wymuszona jest zgodnie z zadanym kątem obrotu φ



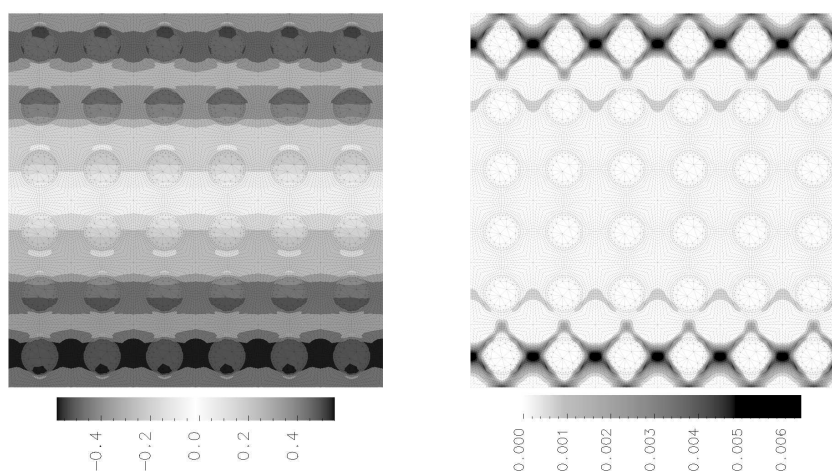
Rysunek 7.3: Ścieżki równowagi dla niejednorodnego zadania zginania, rozwiązane metodą bezpośrednią oraz przy zastosowaniu metod numerycznej homogenizacji, dla ośrodka klasycznego i gradientowego

Zadanie referencyjne obliczono, wykonując 1000 kroków z przyrostem $\Delta\varphi = 0.00001$. Zadania z dwuskalową dyskretyzacją obliczono, wykonując 20 kroków z przyrostem $\Delta\varphi = 0.0005$. Duża liczba kroków przyrostowych dla zadania referencyjnego wynika z powstania wielu stref plastycznych w analizowanym zadaniu. Znaczne zwiększenie długości kroku $\Delta\varphi$ dla metody CH jest możliwe dzięki rozprężeniu analizy na poziomie mikroskali od analizy w makroskali, ponieważ odpowiedzi w makroskopowych punktach całkowania Gaussa obliczane są niezależnie.

Na rys. 7.3 są przedstawione ścieżki równowagi dla wszystkich analizowanych przypadków.

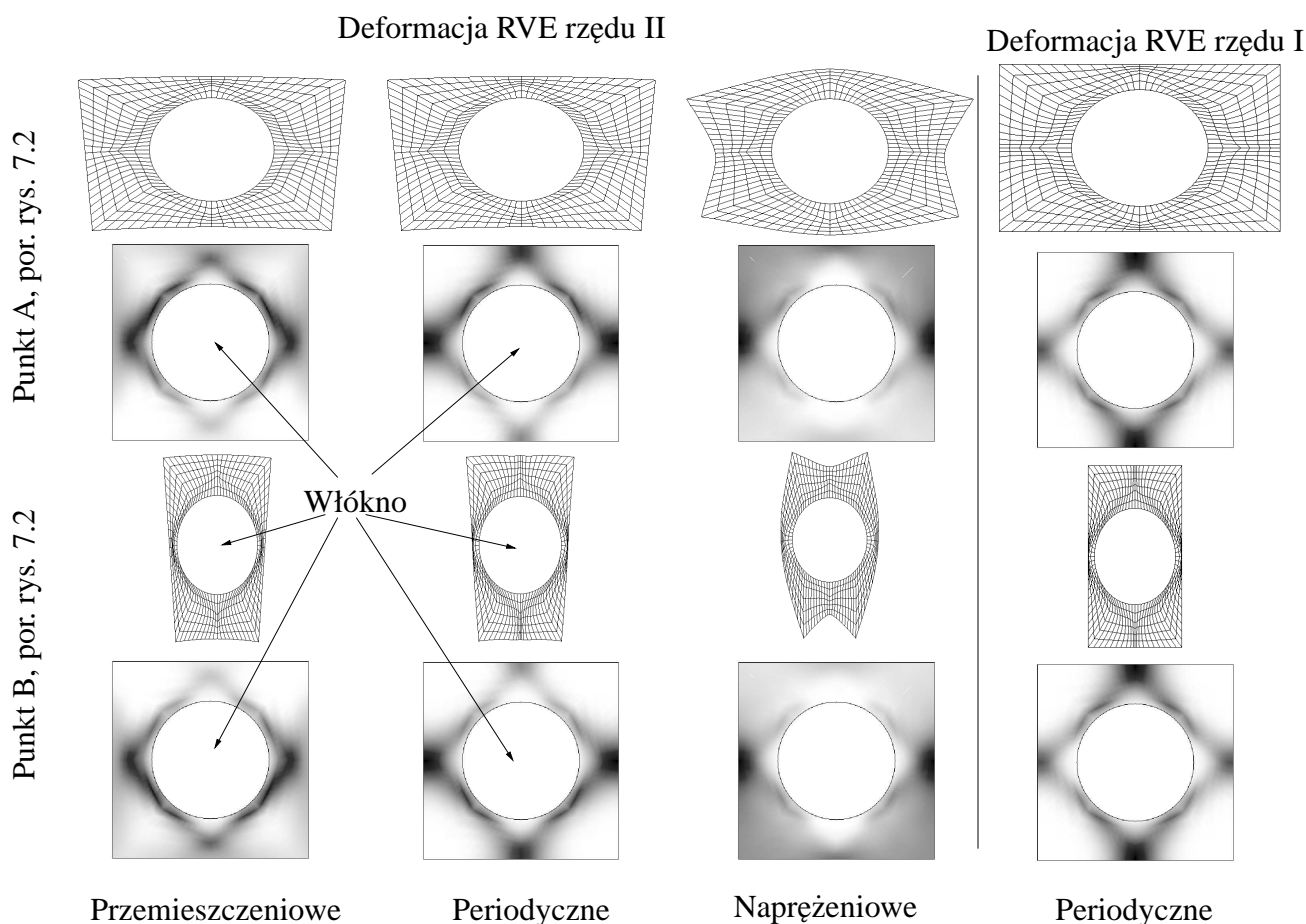
Pogrubiona linia przedstawia ścieżkę równowagi dla zadania referencyjnego. Dla zakresu sprężystego jest obserwowana dobra zgodność między odpowiedzią otrzymaną z zadania referencyjnego, a odpowiedziami otrzymanym z analizy dwuskalowej dla ośrodka klasycznego i gradientowego. Obserwujemy znaną zależność (por. [53]), że w stosunku do rozwiązania referencyjnego, analiza dwuskalowa z kinematycznymi warunkami brzegowymi dla RVE daje oszacowanie wypadkowego momentu zginającego od góry, a naprężeniowe warunki brzegowe dają oszacowanie wypadkowego momentu zginającego od dołu. Natomiast okresowe warunki brzegowe dają oszacowanie wypadkowego momentu zginającego między tymi oszacowaniami. Na makroskopowym poziomie obserwacji nie widać istotnej różnicy między rozwiązaniem otrzymanym za pomocą homogenizacji rzędu I i II.

Analizując dystrybucje naprężeń σ_x i zastępczych odkształceń plastycznych e_p , dla rozwiązania referencyjnego na rys. 7.4 można zauważyć gradient naprężeń i odkształceń po wysokości jednostki elementarnej. Porównując rozkłady deformacji i rozkład e_p w RVE z rozwiązaniem referencyjnym zauważymy różnice między sposobem wymuszenia deformacji RVE (t.zn. różnice między naprężeniowymi, okresowymi i przemieszczeniowymi warunkami brzegowymi), rys. 7.5. Zauważymy, że dla ośrodka gradientowego deformacja RVE, zgodna z odkształceniem rzędu II, powoduje zginanie RVE i prowadzi do jakościowo poprawnego, w porównaniu do rozwiązania referencyjnego, rozkładu zastępczych odkształceń plastycznych w RVE. W przypadku homogenizacji rzędu I obserwowana jest niezdolność do utworzenia poprawnego rozkładu wielkości mikroskopowych, bo RVE się nie zgina. W ogólnym przypadku, gdy komponenty kompozytu miękną lub pękają analiza, dla homogenizacji rzędu I, będzie prowadzić do błędnych wyników. Ponadto można zauważyć, że naprężeniowe warunki brzegowe prowadzą do niewłaściwej deformacji RVE oraz błędnej dystrybucji ekwiwalentnych odkształceń plastycznych.



Rysunek 7.4: Rozkład naprężeń (po lewej) i zastępczych odkształceń plastycznych (po prawej), dla zadania referencyjnego

Ilościowa analiza rozkładu odkształcenia ε_x i naprężenia σ_x wzdłuż przekroju AA została przedstawiona odpowiednio na wykresach 7.6 i 7.7. Na wykresach można zauważyć zaskakująco dobrą zgodność między rozwiązaniem referencyjnym, a rozwiązaniem otrzymanym dla ośrodka gradientowego. Wyniki dla ośrodka gradientowego, ze względu na zerowanie w zadaniu sprężystym symetrycznej części odkształcenia rzędu II, są identyczne, jak dla ośrodka mikropolarnego, por. [20]. W przypadku homogenizacji rzędu I widzimy niezdolność do odtworzenia poprawnego rozkładu naprężeń i odkształceń po wysokości RVE, chociaż ich wartość średnia po RVE jest równa wartości dla rozwiązania referencyjnego.



Rysunek 7.5: Deformacja RVE i rozkład ekwiwalentnych odkształceń plastycznych w RVE

Podsumowując, metoda CH pozwala na redukcję makroskopowych stopni swobody. Dodatkowo następuje rozprężenie zadania. Niezależne obliczanie makroskopowych miar naprężeń i materiałowych operatorów sztywności, dla każdego RVE przydzielonego do punktu całkowania Gaussa, pozwala wydłużyć krok przyrostowy.

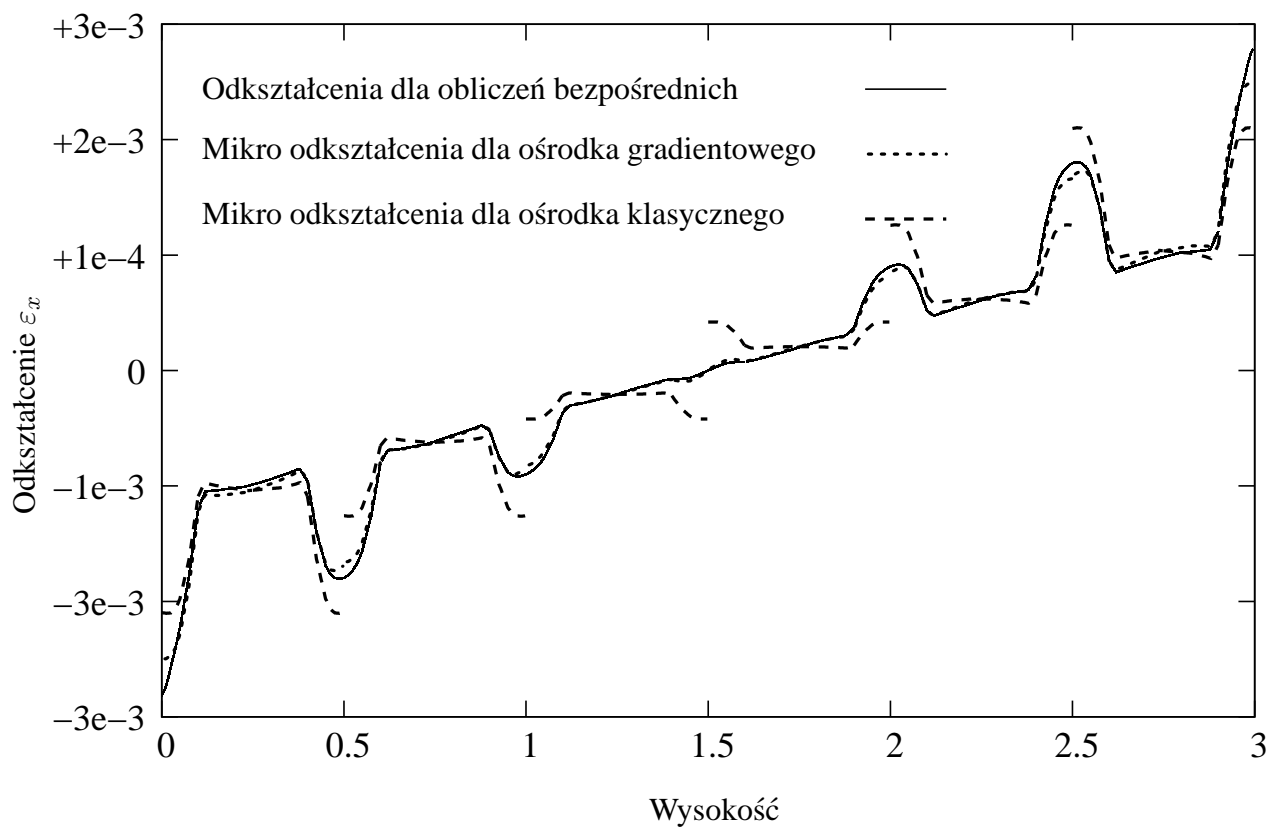
Metoda CH rzędu I nie daje poprawnego rozkładu wielkości mikroskopowych dla zadań o słabo rozdzielonych skalach makro od mikro, co w ogólnym przypadku będzie prowadzić do niemiaraodajnych rezultatów w skali makro. Metoda CH rzędu II zaskakująco dobrze, jakościowo i ilościowo, odtwarza rozkłady mikronaprężeń i mikroodkształceń.

Dla testu czystego zginania przemieszczenia są wielomianami drugiego stopnia. Przyczyną tego jest brak różnic między rozwiązaniem klasycznym, a gradientowym w skali makro. Dla zadań, o złożonych stanach naprężeń, różnice między opisem klasycznym będą zauważalne, co zostanie pokazane w następujących przykładach.

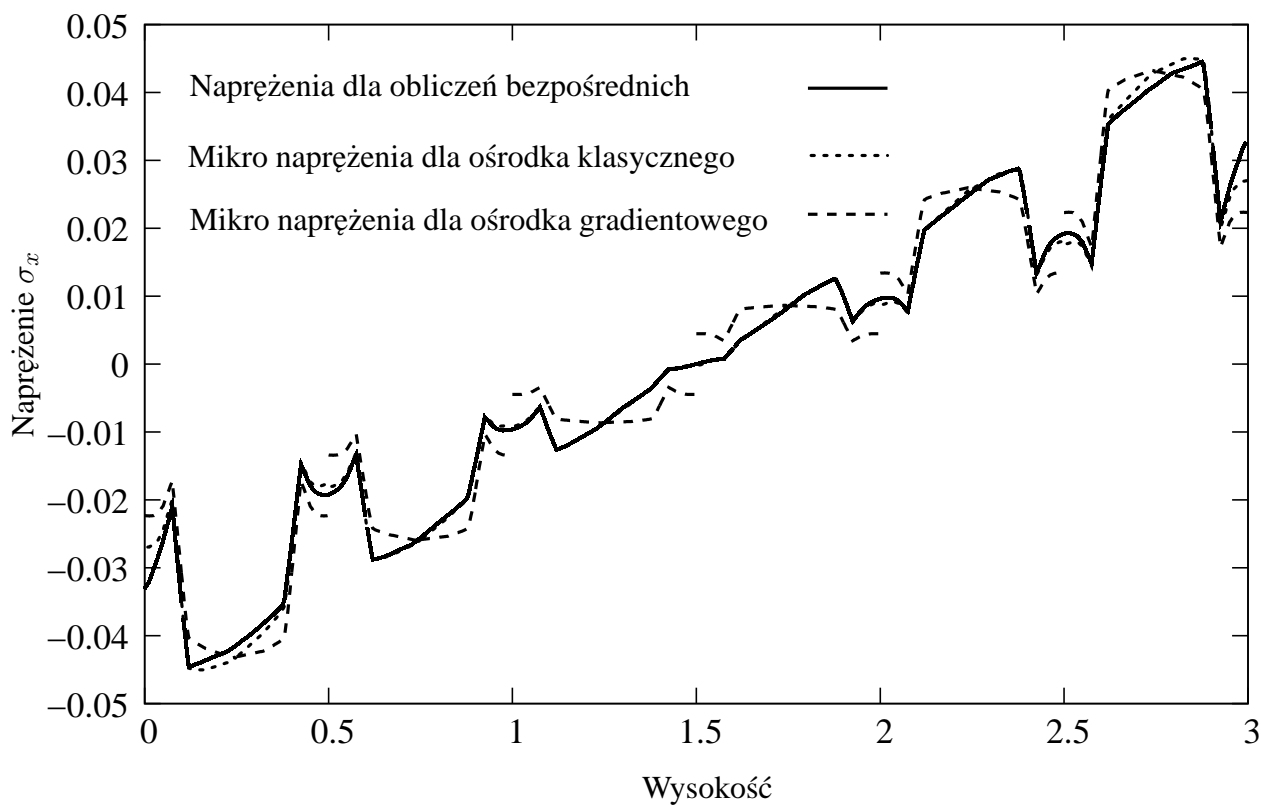
7.2 Test ścinania

Test ścinania cienkiej warstwy służy jakościowej analizie wpływu wymiaru charakterystycznego RVE na rozwiązanie. W teście rozważono przypadki o różnym stopniu statystycznej reprezentatywności RVE, analizując jej wpływ na dokładność oszacowanych naprężeń i odkształceń.

W skali makroskopowej problem został postawiony, jak w podrozdziale 5.4.2, por. rys. 5.7. Wpływ charakterystycznego rozmiaru mikrostruktury na rozwiązanie został przedstawiony przez rozważenie dwóch przypadków, z grubością ścinanej warstwy $H = 10.0\text{ mm}$ i $H = 1.0\text{ mm}$. Do

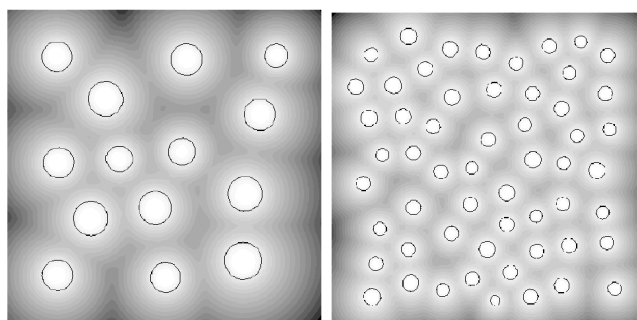


Rysunek 7.6: Rozkład odkształceń ε_x wzdłuż przekroju AA dla kąta obrotu $\varphi = 0.0005$



Rysunek 7.7: Rozkład naprężeń σ_x wzdłuż przekroju AA dla kąta obrotu $\varphi = 0.0005$

dyskretyzacji zadania w skali makro zastosowano 100 elementów typu Q18G16L4, który został omówiony w podrozdziale 5.2.



Rysunek 7.8: Rozkład funkcji zbioru poziomującego i geometria losowego RVE o stałym $V_f \approx 0.12$ i $L = 0.6$ mm oraz dwa warianty $r_{ave} = 0.032$ mm i $r_{ave} = 0.016$ mm

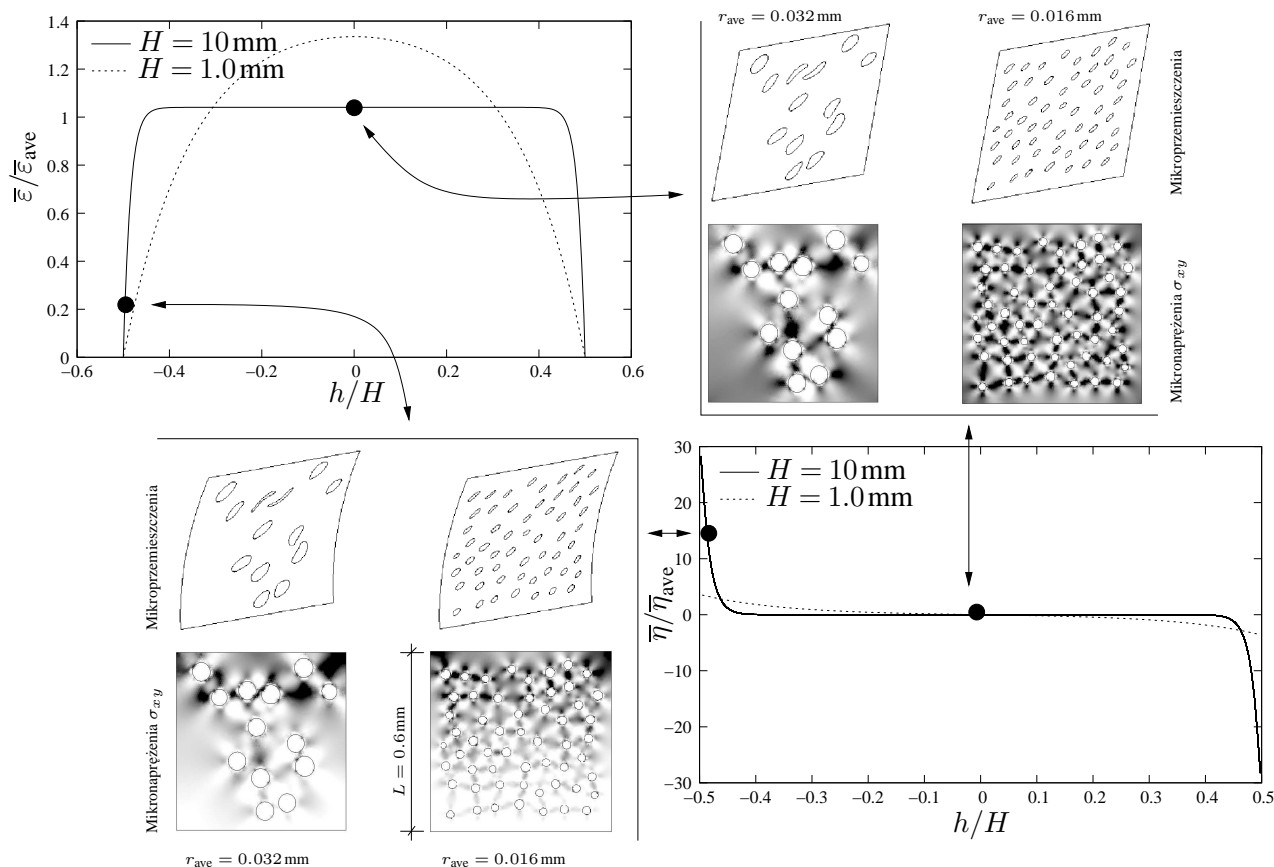
Na poziomie mikroskali rozważano sprężystą matrycę o losowo rozłożonych, sferycznych otworach (otwory stanowią 12% objętości materiału), por. rys. 7.8. Parametry materiału odpowiadają sprężystemu zakresowi pracy stali T67CA, tzn. przyjęto moduł Younga $E = 210$ GPa i moduł Poissona $\nu = 0.3$. Do skończenie elementowej aproksymacji RVE zastosowano nieregularną siatkę złożoną z 24427 elementów CST o charakterystycznym wymiarze elementu skończonego $h^e = 0.008$ mm. Losowo rozłożone otwory były modelowane, niezależnie od wygenerowanej siatki elementów za pomocą metody zbiorów poziomujących w rozszerzonej metodzie elementów skończonych, por. rozdział 5.5. Rozważano dwa przypadki o różnych średnich wartościach promieni otworów, przy stałym wymiarze boku RVE ($L = 0.6$ mm) i stosunku objętości otworów do matrycy ($V_f \approx 0.12$). Przyjęto średnie wartości promieni otworów $r_{ave} = 0.032$ mm i $r_{ave} = 0.016$ mm, np. geometria arbitralnie wybranych RVE przedstawiona jest odpowiednio po lewej stronie i prawej stronie na rys. 7.8.

Dla każdego z przypadków wysokości ścinanej warstwy $H = 10$ mm i $H = 1.0$ mm oraz średniego promienia otworów $r_{ave} = 0.032$ mm i $r_{ave} = 0.016$ mm wylosowano 100 geometrii RVE. RVE zadawano standardowe warunki brzegowe, tzn. naprężeniowe, periodyczne i przemieszczeniowe. Łącznie przeprowadzono $2 \times 2 \times 100 \times 3 = 1200$ dwuskałowych symulacji ścinania cienkiej warstwy z porowatym materiałem, wynikających z przyjętych: 2 grubości warstw, 2 promieni otworów, 3 w.b. i 100 losowań.

Rozkład odkształcenia ścinającego i jego gradientu, wzdłuż wysokości warstwy dla przemieszczeniowego wymuszenia deformacji RVE i arbitralnie wybranej geometrii RVE znajduje się na rys. 7.9. Wykresy obrazują wpływ grubości ścinanej warstwy na rozkład makro odkształceń rzędu I i II.

Rysunki w górnym prawym i dolnym lewym rogu na rys. 7.9 przedstawiają deformacje RVE i rozkład mikroskopowych naprężeń ścinających. Łatwo można zauważyć, że, dla punktu w środku warstwy, dla którego makroodkształcenie rzędu II jest równe zero (por. rys. 7.9 w górnym prawym rogu), RVE poddane jest wyłącznie ścinaniu, a rozkład mikroskopowych fluktuacji naprężeń ścinających jest równomiernie rozłożony wzdłuż wysokości RVE. Dla punktu, który znajduje się blisko dolnego brzegu ścinanej warstwy odkształcenie rzędu II, ma wartość różną od zera. Z tej przyczyny, obserwując deformacje RVE można zauważyć gradient makroodkształceń ścinających wzdłuż wysokości RVE (rys. 7.9 w dolnym lewym rogu). Przyglądając się rozkładowi mikronaprężeń ścinających, zauważymy ich narastanie wzdłuż wysokości RVE w wyniku wymuszonej deformacji zgodnej z makroodkształceniem rzędu II.

Zestawienie wartości średnich makronaprężeń ścinających znajduje się w tab. 7.1. Zwraca uwagę, że naprężeniowe i przemieszczeniowe warunki brzegowe dają oszacowanie odpowiednio od



Rysunek 7.9: Wykresy zależności uśrednionych mikroodkształceń rzędu I i II wzdłuż wysokości ścinanej warstwy, dla stałego stosunku objętości otworów do objętości matrycy $V_f \approx 0.12$ oraz wymiaru RVE $L/H = 0.06$. Deformacja RVE i rozkład mikronaprzeżeń ścinających dla przypadku $L/H = 0.06$

dołu i od góry. Periodyczne warunki brzegowe dają oszacowanie leżące pomiędzy nimi. Dla RVE o średnim promieniu otworów $r_{ave} = 0.032$ mm, odchylenie standardowe makronaprzeżeń ścinających jest większe od odchylenia standardowego makronaprzeżenia ścinającego dla RVE o średnim promieniu otworów $r_{ave} = 0.016$ mm. Wynika to z faktu, że różnica między oszacowaniem górnym i dolnym jest mniejsza dla RVE, w którym średnia wartość promienia otworów jest mniejsza. Tłumaczy się to tym, że statystyczna reprezentatywność RVE jest większa dla $r_{ave} = 0.016$.

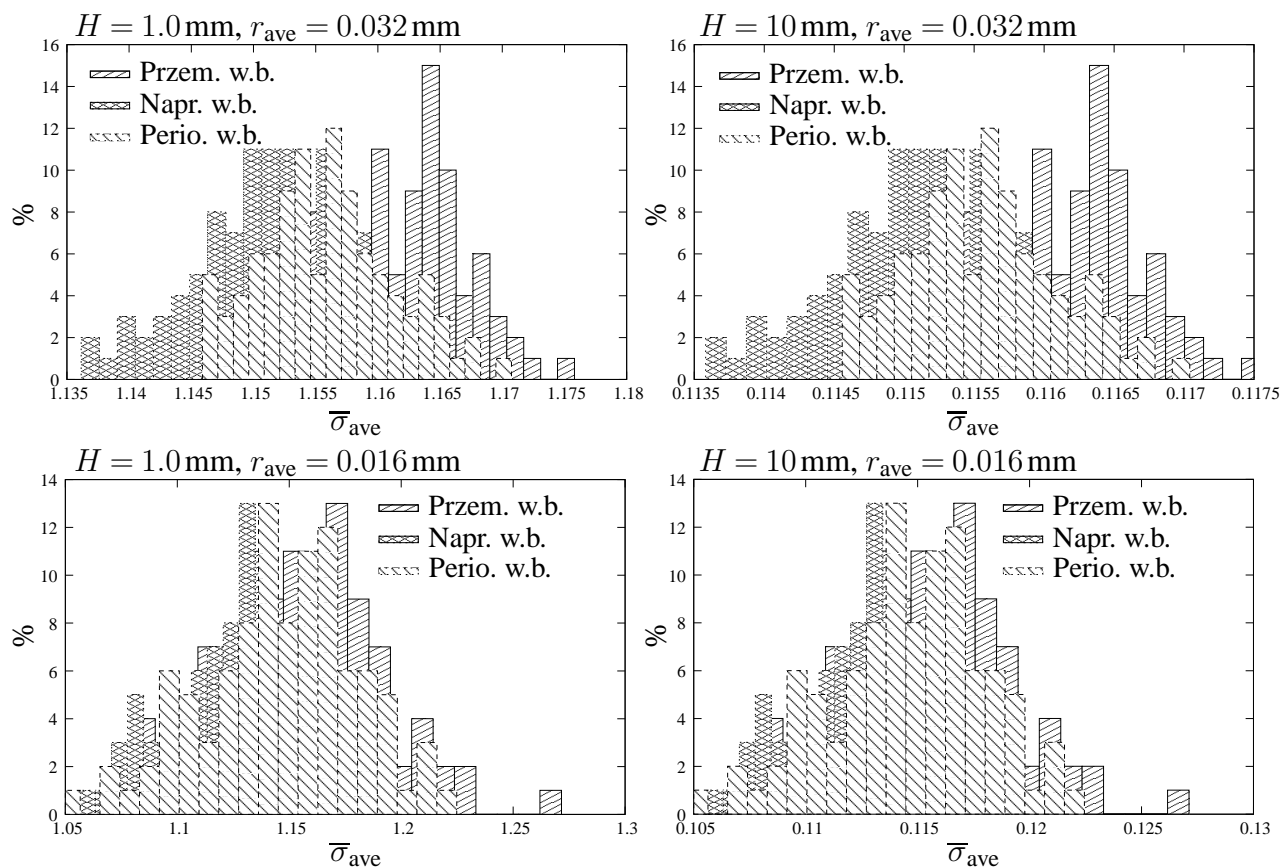
Zależności zestawione w tab. 7.1 odzwierciedlają histogramy na rys. 7.10 i rys. 7.11. Na rys. 7.10 przedstawiono histogramy dla każdego z rozważanych przypadków, zestawiając ze sobą różne typy narzucania deformacji RVE. Na histogramach z rys. 7.11 przedstawiono wartości średnie makronaprzeżeń ścinających, otrzymanych dla periodycznych warunków brzegowych dla $H = 10$ mm i $H = 1.0$ mm. Analiza histogramów potwierdza wnioski wyciągnięte z analizy tab. 7.1. Na rysunkach 7.12, 7.13 przedstawiono rozkłady makronaprzeżeń ścinających $\bar{\sigma}_{xy}$ po grubości ścinanej warstwy.

Podsumowując powyższe uwagi, można wyciągnąć wnioski, że test cienkiej ścinanej warstwy, uwzględnienie warunków brzegowych wyższego rzędu prowadzi do niejednorodnego stanu makroodkształceń i makronaprzeżeń ścinających. Poprzez odpowiednie nałożenie warunków brzegowych, na lewej i prawej krawędzi, pozostałe składowe naprężeń i odkształceń są równe zeru.

Test ścinanej warstwy daje różne rozwiązania w zależności od grubości warstwy. Dla grubości warstwy między 1.0 mm i 10 mm różnice między rozwiązaniem dla ośrodka klasycznego i gradientowego są duże (efekt skali).

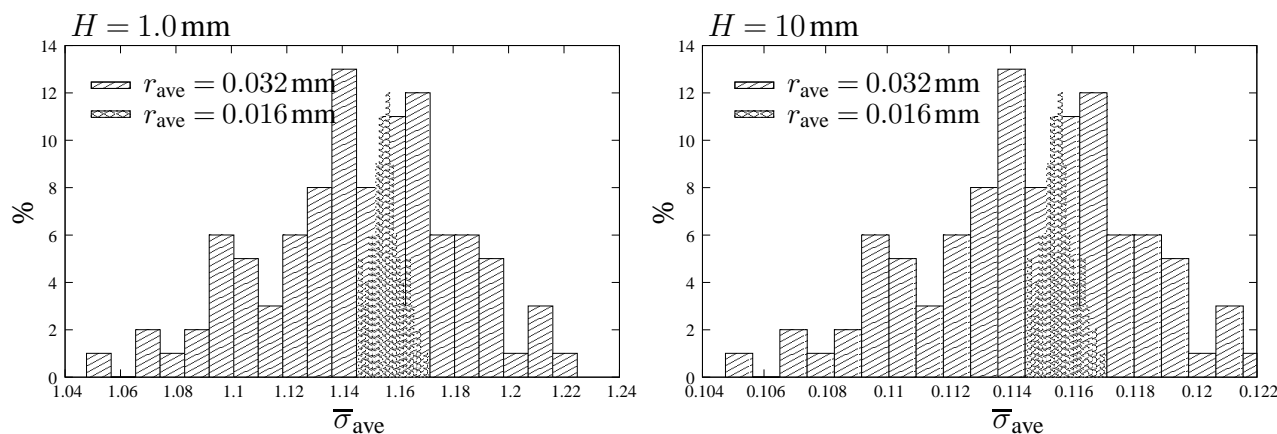
Tabela 7.1: Zestawienie wartości średniej makronaprzeżeń ścinających i ich odchylenia standardowego

	H	t_{ave}	średnia	standardowe odchylenie
Przemieszczeniowe w.b.	10	0.032	0.11621	0.00057392
Periodyczne w.b.	10	0.032	0.11557	0.00054202
Naprężeniowe w.b.	10	0.032	0.11507	0.00059218
Przemieszczeniowe w.b.	10	0.016	0.11557	0.0035448
Periodyczne w.b.	10	0.016	0.11464	0.0034561
Naprężeniowe w.b.	10	0.016	0.11333	0.0031305
Przemieszczeniowe w.b.	0.1	0.032	1.1613	0.0057411
Periodyczne w.b.	0.1	0.032	1.1560	0.0059238
Naprężeniowe w.b.	0.1	0.032	1.1510	0.0059238
Przemieszczeniowe w.b.	0.1	0.016	1.1560	0.035458
Periodyczne w.b.	0.1	0.016	1.1467	0.034571
Naprężeniowe w.b.	0.1	0.016	1.1336	0.031315

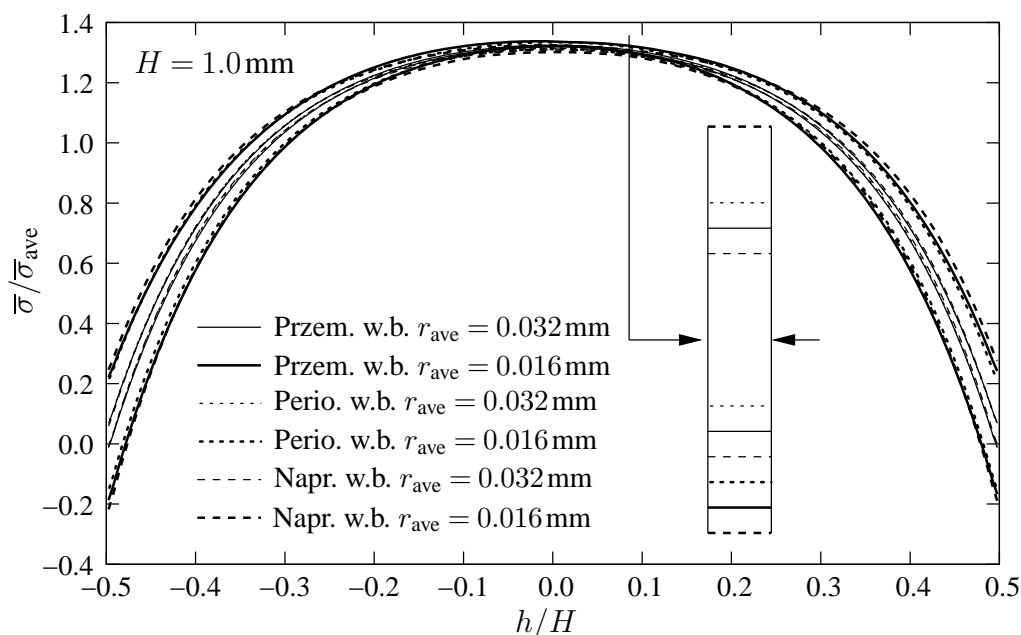


Rysunek 7.10: Histogramy wartości średnich makronaprzeżeń ścinających w zależności od typu warunków brzegowych nałożonych na brzeg RVE

Test ścinania bada statystyczną reprezentatywność dla jednej zależności między makroodkształceniem ścinającym, a makronaprzeżeniem ścinającym. Dla uzyskania pełnej odpowiedzi, czy dane RVE jest statystycznie reprezentatywne dla innych składowych tensora naprzeżeń, należy przeprowadzić testy dla innych stanów odkształceń. Problem statycznej reprezentatywności RVE i jej wpływu na miary makroskopowe rozważany był w pracy [26], gdzie zajmowano się homogenizacją rzędu I mikrostruktury, w której jeden ze składników pęka.



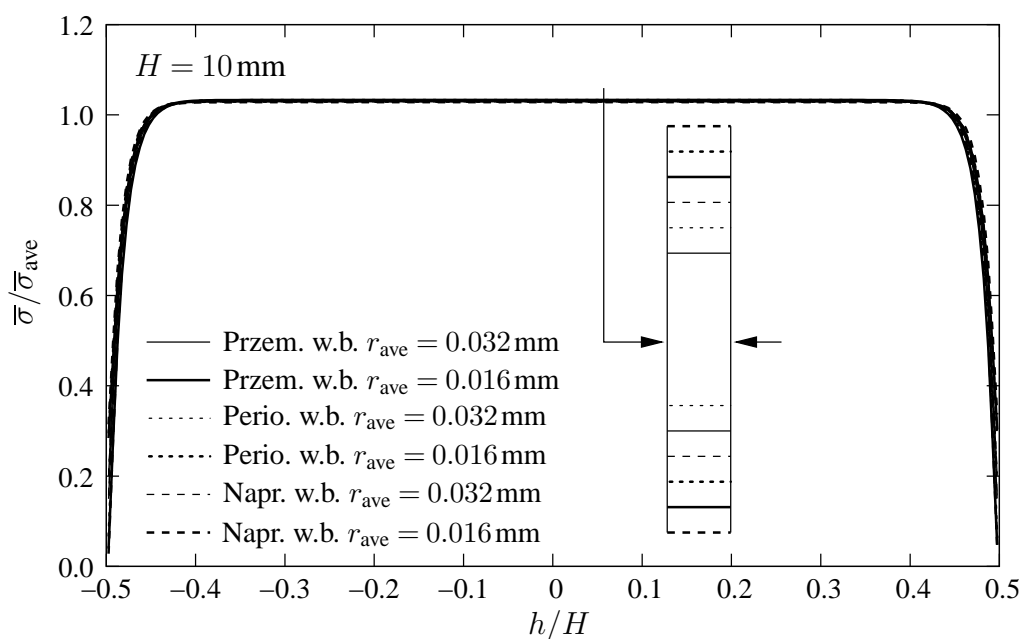
Rysunek 7.11: Histogramy wartości średnich makronaprężeń ścinających w zależności od średniej wartości promienia otworu dla okresowych warunków brzegowych



Rysunek 7.12: Rozkład makronaprężeń ścinających wzdłuż grubości warstwy dla $H = 1.0$ mm, dla maksymalnych i minimalnych wartości, spośród 100 losowo wygenerowanych geometrii RVE

Należy dodać, że dla niejednorodnych materiałów losowych ich wymiar charakterystyczny jest wielkością, która w ogólności powinna być wyznaczona w sposób doświadczalny. Aktualny stan wiedzy nie pozwala podać związku między mikrostrukturalną budową materiału niejednorodnego a wymiarem charakterystycznym RVE.

Na koniec rozważony jest problem wymiaru charakterystycznego i statystycznie reprezentatywnej objętości przydzielonej makroskopowemu punktowi. Wymiar charakterystyczny definiuje objętość otoczenia punktu w skali makro. Z drugiej strony staramy się, by objętość przydzielona do punktu zawierała dużą liczbę niejednorodności (tak dużą na jaką pozwala nam moc obliczeniowa komputera). W powyższym teście założono, że wymiar charakterystyczny niejednorodności (tutaj promień mikrootworu) jest nieistotny. Zauważono, że w rozważanym przykładzie, istotnym jest stosunek średniego promienia mikrootworu do średniej odległości między otworami.



Rysunek 7.13: Rozkład makronaprężeń ścinających wzdłuż grubości warstwy dla $H = 10 \text{ mm}$, dla maksymalnych i minimalnych wartości, spośród 100 losowo wygenerowanych geometrii RVE

7.3 Test indentacji

Na przykładzie testu indentacji przedstawiona zostaje metoda CH rzędu II, która znacząco redukuje liczbę stopni swobody i poprawnie opisuje efekt skali.

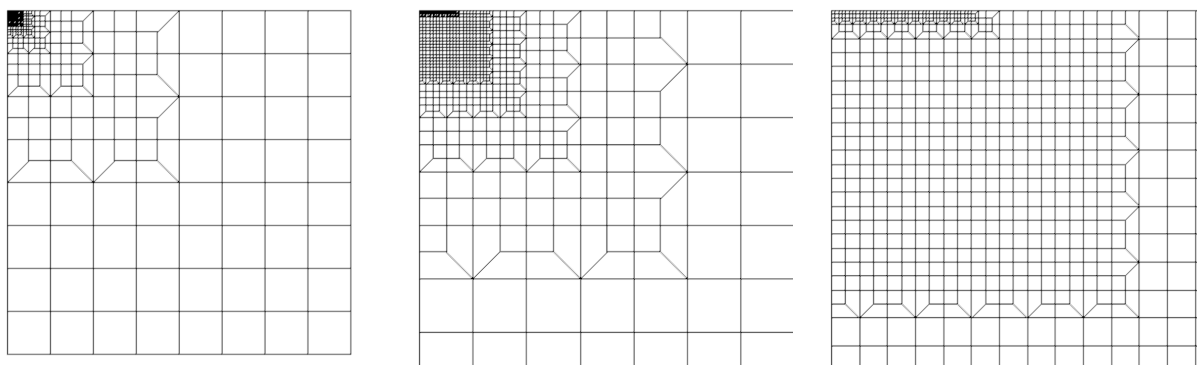
Test indentacji wymaga opisu opartego na dużych przemieszczeniach i deformacjach. Zmusza to do rozpatrzenia istotnych zjawisk fizycznych i chemicznych zachodzących na poziomie mikrostruktury. Symulacja numeryczna indentacji z tych przyczyn staje się bardzo złożona. Więcej, identyfikacja istotnych zjawisk, zachodzących w szczególnym materiale wielofazowym, nie może się odbyć bez ścisłej współpracy materiałowiadawcy, eksperymentatora i mechanika.

Z tych przyczyn poczyniono szereg założeń uniemożliwiających ilościową analizę otrzymanych wyników. Przeprowadzony w pracy test indentacji może jednak służyć jakościowej analizie otrzymanych rezultatów, prowadząc do głębszego zrozumienia problemu indentacji materiałów z mikrostrukturą oraz eksponuje zalety podejścia prezentowanego w pracy.

W pracy przyjęto, że przemieszczenia są małe i zastosowano liniowe miary odkształceń. Nieliniowości wynikają z jednostronnych warunków brzegowych, opisujących kontakt między sztywnym indenterem, a niejednorodnym sprężysto-plastycznym ciałem. Dodatkowo założono płaski stan odkształceń. Poszerzenie opisu o nieliniowości geometryczne oraz uwzględnienie zjawiska pęknięcia komponentów kompozytu jest możliwe w ramach prezentowanej metody [44].

Rozważono próbkę o wymiarze 20.48 mm , w którą wciskano indenter o kącie rozwarcia 150° . Ze względu na symetrię dyskretyzowano jedynie połowę. Indenter wciśnięto na maksymalną głębokość 0.0875 mm . Ze względu na duży rozmiar ciała w porównaniu z głębokością indentera zbudowano siatkę elementów skończonych, dla której rozmiar charakterystyczny elementu zawierał się w przedziale $h^e \in [0.0025 \text{ mm}, 0.16 \text{ mm}]$, por. rys. 7.14. Do skończenia elementowej dyskretyzacji zastosowano element mieszany Q18G16L4, omówiony w podrozdziale 5.2.

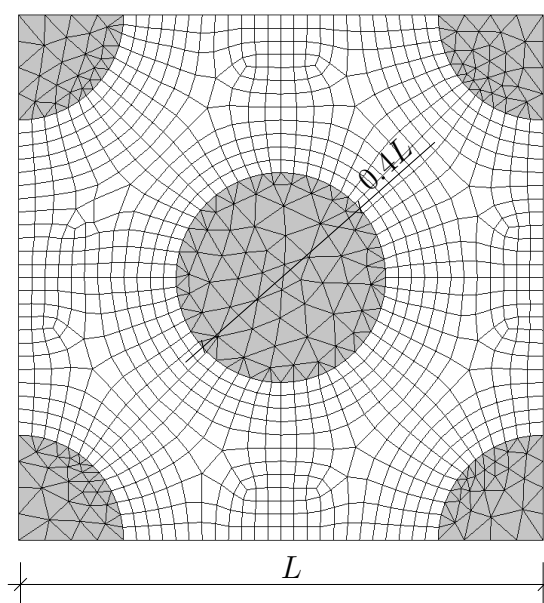
Założenie o geometrycznej liniowości oraz szczególnie charakter problemu pozwalają na pewne uproszczenia. Za [75] dla geometrycznie linowego problemu rozważono kontakt typu węzeł do węzła (ang. *node to node*). Dodatkowo, potencjalną strefę kontaktu można z góry założyć, a jej powierzchnię poprawiać w sposób iteracyjny, sprawdzając na każdym kroku wartość sił węzłowych



Rysunek 7.14: Siatka elementów skończonych typu Q16G16L4

w założonej strefie. Nie uwzględniono tarcia, gdyż na podstawie [13, 69] wiadomo, że dla dużych kątów rozwarcia stożka indentera wpływ sił tarcia na siłę oporu indentera jest pomijalnie mały. Taki algorytm postępowania nie jest wystarczający dla szerszej klasy problemów kontaktu ciał odkształcalnych, jednak w rozpatrywanym problemie algorytm jest efektywny i prowadzi do poprawnych rezultatów.

Na dolnej krawędzi próbki, w skali makro odebrano możliwość przemieszczeń w kierunku pionowym i wymuszono zerową wartość gradientu przemieszczenia pionowego w kierunku pionowym. Na lewej i prawej krawędzi odebrano możliwość przesunięcia poziomego i założono zerową wartość gradientu przemieszczenia poziomego w kierunku poziomym. W strefie kontaktu wymuszano odpowiednią wartość przemieszczenia pionowego i gradientu przemieszczenia pionowego w kierunku pionowym.



Matryca (aluminium):

$$E_m = 70\text{GPa}$$

$$\nu_m = 0.33$$

$$Y_m = 460 \cdot 10\text{MPa}$$

$$H_m = 70\text{MPa}$$

Inkluzja (krzem)

$$E_i = 450\text{GPa}$$

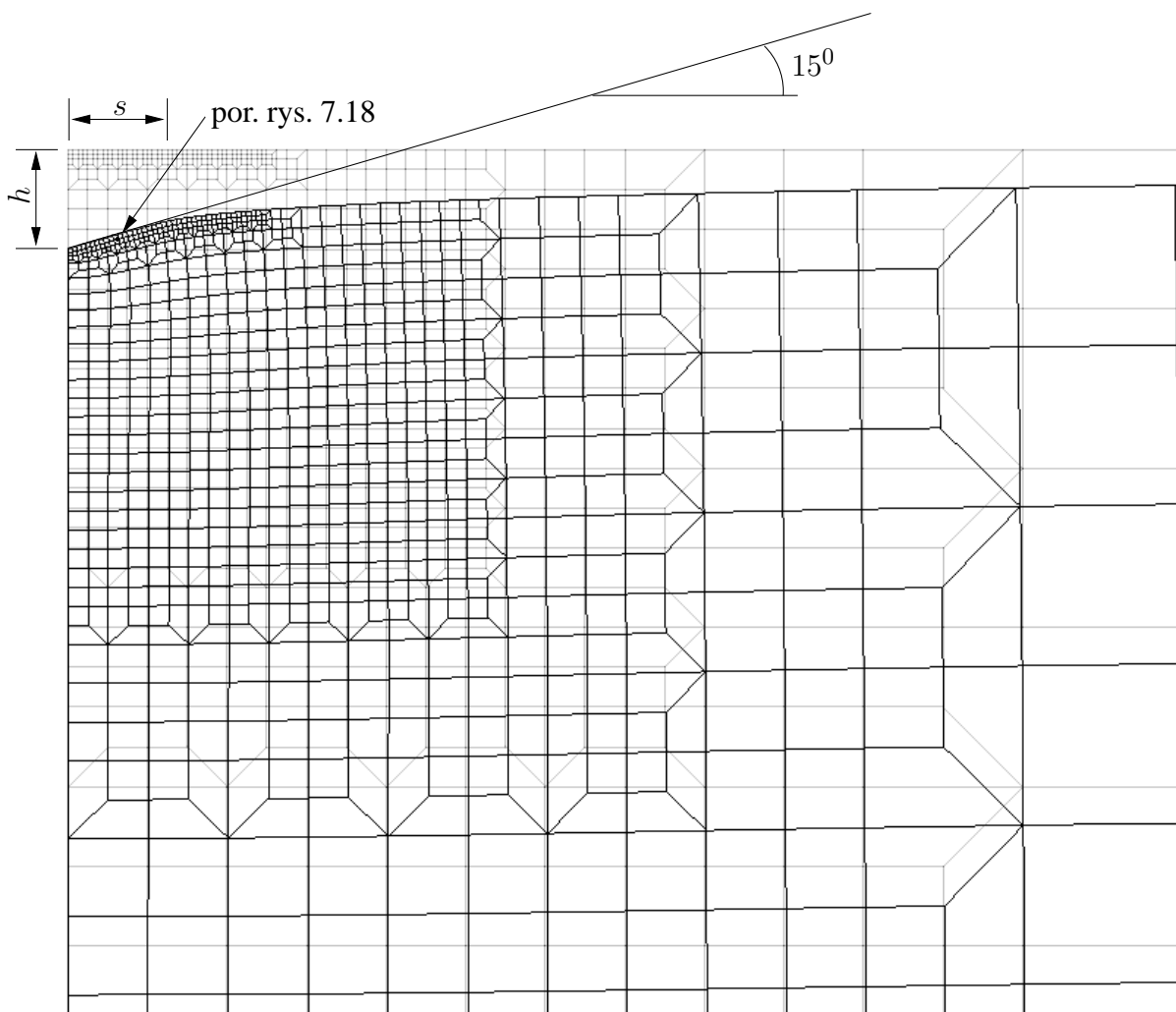
$$\nu_i = 0.17$$

$$V_f = 0.251$$

Rysunek 7.15: Dyskretyzacja RVE

Do każdego punktu całkowania Gaussa przydzielony jest RVE, którego dyskretyzacja przedstawiona jest na rys. 7.15. Stałe materiałowe matrycy i inkluzji odpowiadają odpowiednio aluminium i krzemowi, w sprężystym zakresie ich pracy. Należy podkreślić, że test ten nie jest próbą symulacji indentacji kompozytu stopu aluminium i krzemu, gdyż założenia są zbyt mocne. Przeprowadzono obliczenia dla $L = 0.001$ mm, $L = 0.002$ mm i $L = 0.004$ mm. Zastosowano przemieszczeniowy typ warunków brzegowych, wymuszających deformację RVE.

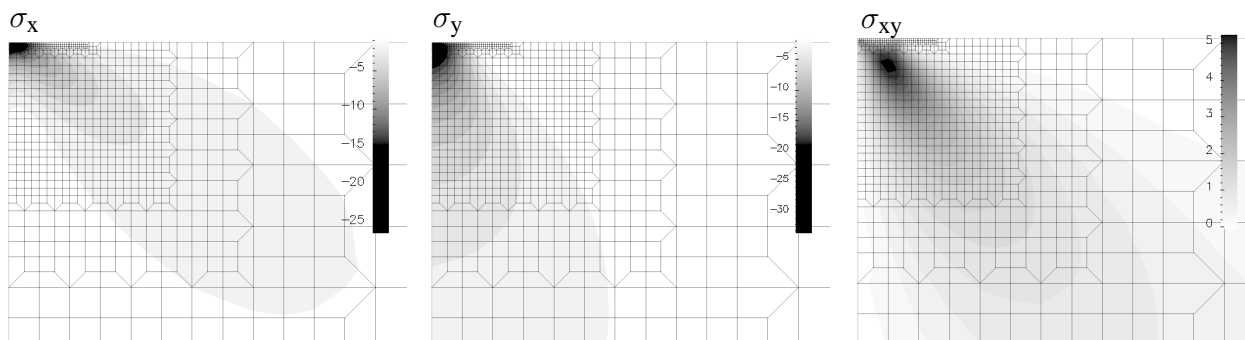
Do dyskretyzacji matrycy w RVE zastosowano elementy Q4 z jednym punktem całkowania Gaussa i stabilizacją. Do dyskretyzacji inkluzji w RVE zastosowano elementy CST, por. rys. 7.15. Łączna liczba stopni swobody, użytych do dyskretyzacji matrycy i inkluzji w RVE, wynosi 2346. Warto dodać, że gdyby mikrostrukturalną budowę kompozytu modelowano w sposób bezpośredni, to rozważany test indentacji posiadałby około $246e9$, $61e9$ i $9e9$ stopni swobody, odpowiednio dla $L = 0.001$ mm, $L = 0.002$ mm i $L = 0.004$ mm. Obliczenia o takiej liczbie stopni swobody przekraczają możliwości komercyjnych programów oraz zapotrzebowanie na moc obliczeniową i pamięć współczesnych komputerów.



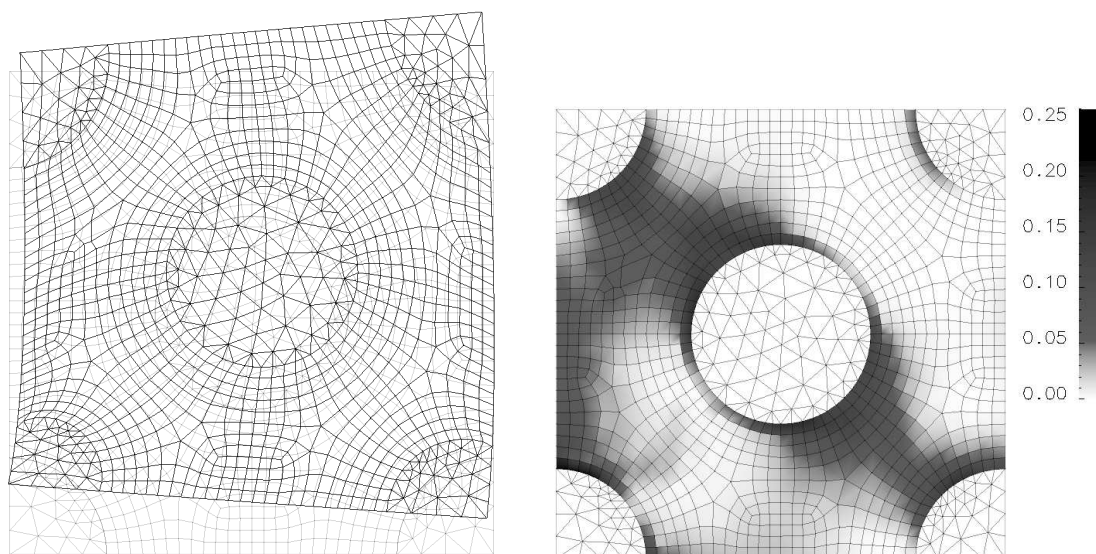
Rysunek 7.16: Przemieszczenie w otoczeniu indentera

Analiza dwuskalowa została przeprowadzona dla elementów o wymiarze charakterystycznym $h^e \leq 0.01$ mm, por. rys. 7.14 po prawej stronie. Dla pozostałych punktów całkowania wcześniej obliczono sprężyste operatory sztywności dla analizowanego kompozytu. Na rys. 7.16 przez h oznaczono głębokość indentacji, a przez s powierzchnię kontaktu. Rys. 7.16 przedstawia deformację siatki w otoczeniu indentera dla $h = 0.05$ mm i $L = 0.002$ mm.

Rys. 7.17 przedstawia rozkład makroskopowych naprężeń w otoczeniu indentera. Koncentracja makronaprężeń $\bar{\sigma}_x$ i $\bar{\sigma}_y$ występuje bezpośrednio pod indenterem. Koncentracja naprężeń ścinających oddalona jest od górnej krawędzi ciała, ze względu na brak tarcia między indenterem a ciałem. Warto zwrócić uwagę, że w gradientowym opisie ośrodka ciągłego nie występują osobliwości. Dodatkowo analizowano sprężysto-plastyczny problem, w którym nie występują osobliwości pola naprężeń.



Rysunek 7.17: Makroskopowe naprężenia

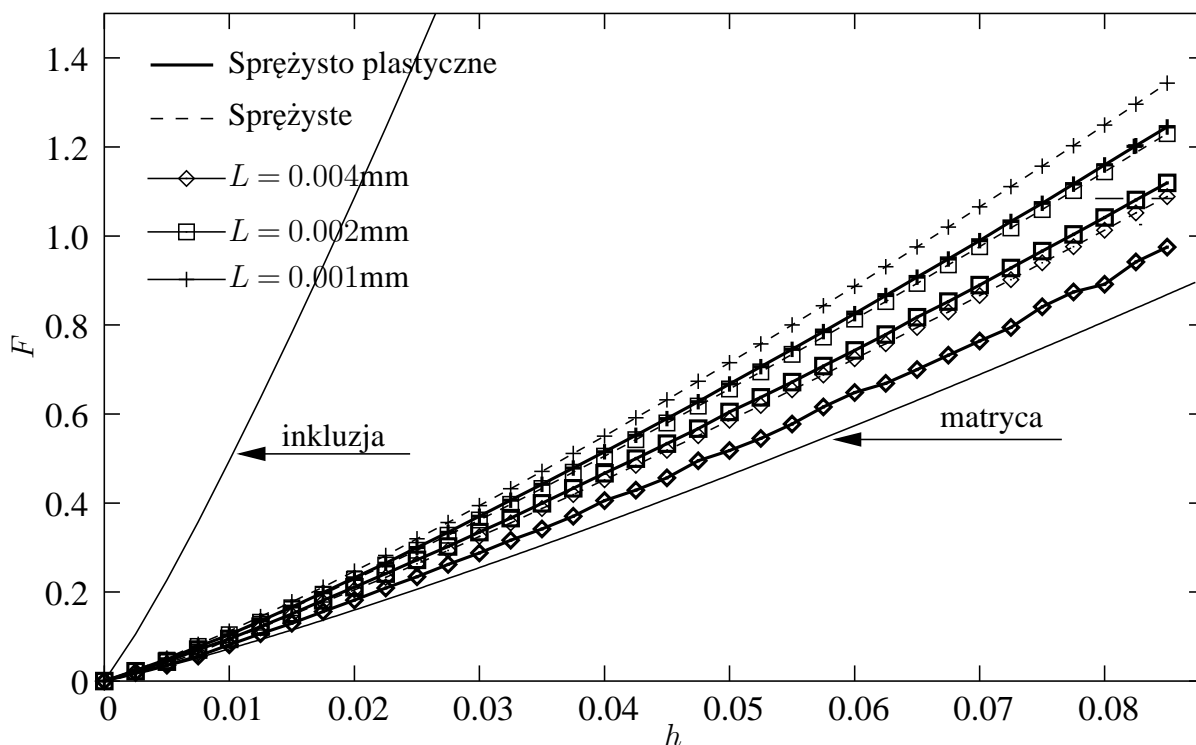


Rysunek 7.18: Deformacja i rozkład mikronaprężeń w punkcie całkowania Gaussa znajdującym się bezpośrednio pod indenterem, por. rys. 7.16

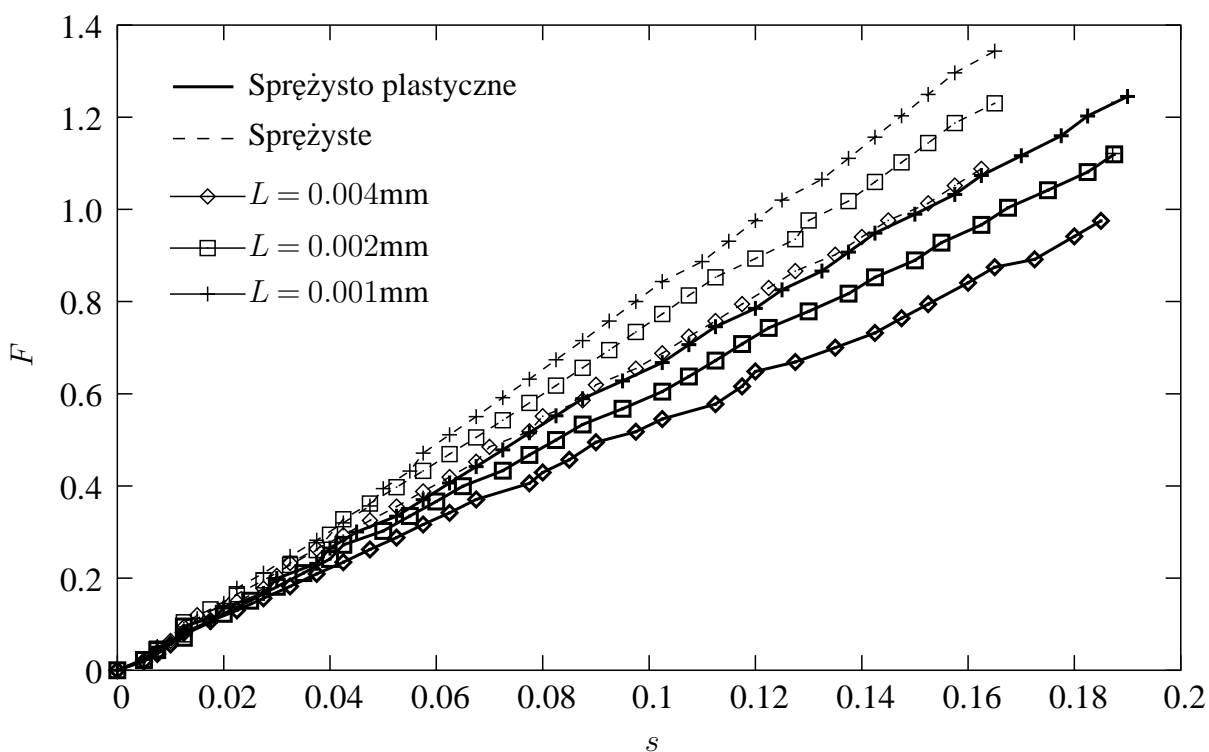
Analiza przeprowadzona za pomocą metody CH, w przeciwieństwie do metod analitycznych, dostarcza informacji o rozkładach mikrowielkości. Na rys. 7.18 zamieszczone jest mikroskopowe pole deformacji po lewej i rozkład ekwiwalentnych mikroodkształceń plastycznych po prawej. Na tym rysunku można zauważyć istotny wpływ odkształceń wyższego rzędu na deformacje RVE, co tłumaczy wpływ wymiaru charakterystycznego na postać rozwiązania. Dodatkowo widać wpływ narastania odkształceń ściskających, od lewej do prawej, wywołanych stożkowym kształtem indentora. Rozkład ekwiwalentnych mikroodkształceń plastycznych z pozoru nie odpowiada postaci deformacji, ponieważ zależą one od historii deformacji.

Na rys. 7.19 zamieszczono ścieżkę równowagi, tzn. zależność siły oporu indentora F od głębokości indentacji h . Jako odniesienie podano rozwiązanie problemu indentacji, dla próbki wykonanej wyłącznie z materiału inkluzji i rozwiązanie problemu indentacji, dla próbki wykonanej wyłącznie z materiału matrycy. Na rysunku widać wpływ wymiaru charakterystycznego L na rozwiązanie. Im wymiar jest mniejszy tym twardość, określona jako stosunek F do h , jest większa. Materiały o małej wielkości ziarna są twardsze. Na analizowanym rysunku cienką, przerywaną linią przedstawiono rozwiązanie dla zadania sprężystego, grubą, ciągłą linią przedstawiono rozwiązanie sprężysto-plastyczne.

Efekt skali można również obserwować na rys. 7.20 obrazującym zależność siły oporu indentora F od długości strefy kontaktu s . Podobnie, jak na rys. 7.19 wartość siły oporu indentora F zależy



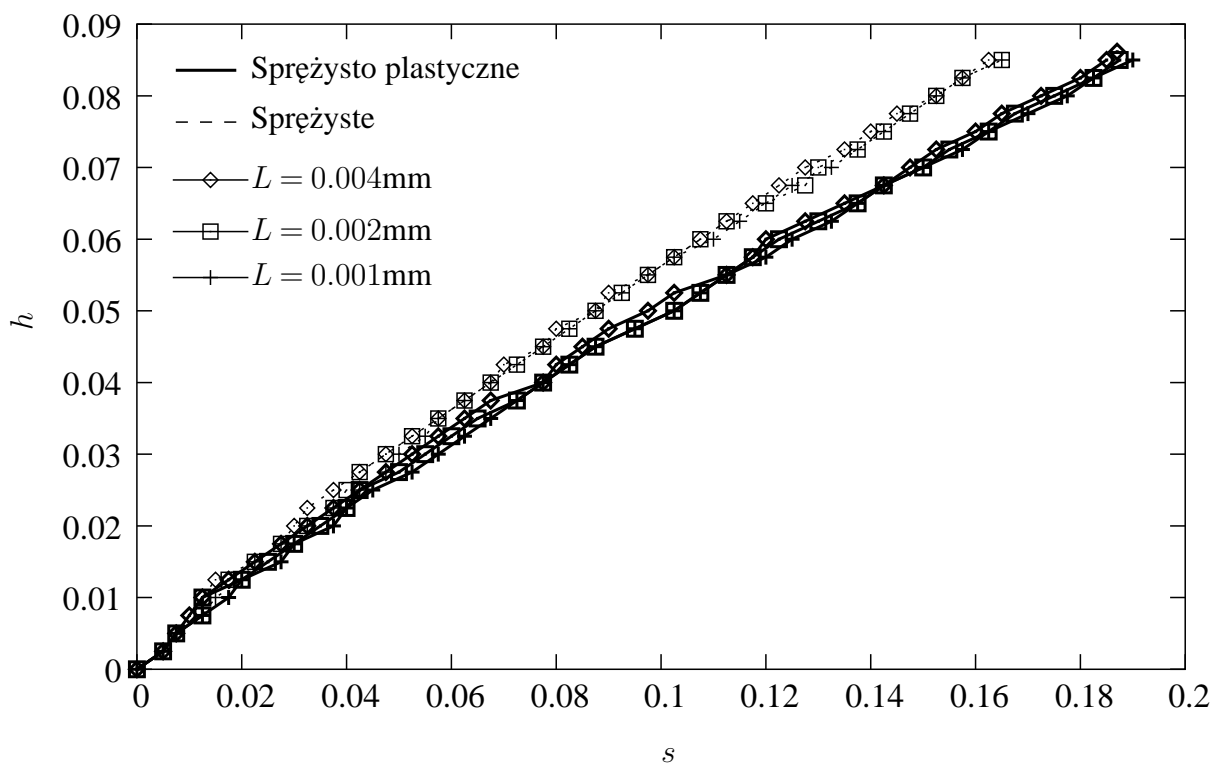
Rysunek 7.19: Zależność głębokości siły oporu indentera F od głębokości indentacji h



Rysunek 7.20: Zależność siły oporu indentera F od długości strefy kontaktu s

zarówno od wymiaru charakterystycznego RVE, jak też od tego czy materiał jest sprężysty czy sprężysto-plastyczny.

Dla odmiany, na rys. 7.21 efekt skali jest niezauważalny. Zależność głębokości indentacji h od długości strefy kontaktu s zależy wyłącznie od tego, czy analizowany materiał jest sprężysty czy



Rysunek 7.21: Zależność głębokości indentacji h od długości strefy kontaktu s

sprężysto-plastyczny. Długość strefy kontaktu nie jest funkcją wymiaru charakterystycznego RVE.

Należy zwrócić uwagę, że gdyby kalibrować parametry modelu materiały na podstawie doświadczenia indentacji, dla którego obserwowany jest efekt skali, a następnie dla skalibrowanych parametrów np. porównać ścieżkę równowagi dla doświadczenia jednoosiowego rozciągania z ścieżką równowagi otrzymaną, ze symulacji komputerowej, to dla klasycznego opisu kontinuum obserwowane będzie zaniżona sztywność materiału. Z tej przyczyny by uzyskać miarodajne rezultaty, do symulacji testu indentacji materiałów z mikrostrukturą, która ma pewien wymiar charakterystyczny, należy posługiwać się nieklasycznym opisem ośrodka ciągłego.

Rozdział 8

Sieci neuronowe w numerycznej homogenizacji

Dla materiałów niejednorodnych wymiar charakterystyczny mikrostruktury nie jest wyznaczany w wyniku procesu homogenizacji, lecz jest on parametrem modelu, który należy określić na podstawie doświadczenia.

Rozważona zostanie metoda estymacji wymiaru charakterystycznego RVE. Celem weryfikacji proponowanego podejścia, wykorzystano numeryczny test indentacji opisany w poprzednim rozdziale, który będzie traktowany jako pseudo-doświadczenie. Ograniczono się do przypadku sprężystego, jednak prezentowane podejście może zostać zastosowane do bardziej złożonych materiałów.

Przyjęto, że parametry konstytutywnych związków fizycznych, składników mikrostruktury zostały określone na podstawie odrębnych doświadczeń. Po wykonaniu pseudo-doświadczenia, zidentyfikowany jest wymiar charakterystyczny RVE.

Ze względu na dużą liczbę informacji (dla 344 próbek wykonano 35 zagłębień indentera, gdzie mierzono wartości siły oporu indentera F i powierzchni kontaktu s indentera z próbką), wykonana jest dekompozycja danych według składników głównych [28, 55] (ang. *Principal Component Analysis, PCA*). Dla problemu odwrotnego identyfikacji wymiaru charakterystycznego, budowany jest model za pomocą bayesowskiej sztucznej sieci neuronowej (BSSN). BSSN jest uczona za pomocą danych otrzymanych z pseudo-doświadczenia.

8.1 Analiza składników głównych dla testu indentacji

Analiza składników głównych (PCA) jest metodą, która prowadzi do redukcji danych. Oparta jest na liniowej transformacji do nowego układu współrzędnych, dla którego zbiór danych ma największą wariancję gdy jest rzutowany na pierwszą oś główną. Zbiór danych rzutowany na drugą oś współrzędnych ma drugą w kolejności największą wariancję, itd. [28] Transformując dane do układu składników głównych, a następnie zmniejszając wymiar przestrzeni danych do wymiarów mających istotną wariancję, liczba danych zostaje zredukowana.

Dane, o zerowej wartości średniej, wyrażone są za pomocą wektora losowego

$$\mathbf{x} = [\hat{h}_1, \hat{h}_2, \dots, \hat{h}_{35}, \hat{F}_1, \hat{F}_2, \dots, \hat{F}_{35}, \hat{s}_1, \hat{s}_2, \dots, \hat{s}_{35}]^T, \quad (8.1)$$

gdzie \hat{h}_i, \hat{F}_i i \hat{s}_i są odpowiednio głębokością zagłębienia indentera, wartościami siły oporu indentera i powierzchni kontaktu, pomierzonymi w 35 krokach. Wielkość losowa (oznaczona daszkiem \hat{a}) jest określona wzorem $\hat{a} = (a - E[a])/E[a]$. Macierz korelacji jest określona wzorem

$$\mathbf{R}_{xx} \approx \frac{1}{p} \sum_{k=1}^p \mathbf{x}_k \mathbf{x}_k^T = \frac{1}{p} \mathbf{X} \mathbf{X}^T, \quad (8.2)$$

gdzie $p = 344$ jest liczbą przeprowadzonych pseudo-doświadczeń dla pomierzonych h , s i F . Macierz danych \mathbf{X} dana jest wzorem $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p]$.

Macierz autokorelacji \mathbf{R}_{xx} jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną, dla której wartości własne λ_j są liczbami rzeczywistymi i dodatnimi. Wiadomo również, że skojarzone z wartościami własnymi wektory własne \mathbf{w}_j są do siebie ortogonalne. Wektory i wartości własne powiązane są zależnością

$$\mathbf{R}_{xx}\mathbf{w}_j = \lambda_j\mathbf{w}_j. \quad (8.3)$$

Macierz $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_p]^T$ jest macierzą przekształcenia PCA do układu składników głównych, zatem mamy transformacje [28]

$$\mathbf{Y} = \mathbf{W}\mathbf{X} \quad (8.4)$$

do przestrzeni składników głównych, gdzie wektor $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_p]^T$.

Za [55] można pokazać, że transformacja PCA jest rozkładem macierzy korelacji według wartości własnych. Wektory własne, odpowiadające pierwszym wartościom własnym (uporządkowanym od największej do najmniejszej wartości), mają największy wkład w wariancję danych.

8.2 Bayesowskie sieci neuronowe

W tym podrozdziale rozważane zostanie podejście oparte na BSSN, której uczenie oparto na twierdzeniu Bayesa:

$$\Pr(A|B) = \frac{\Pr(B|A)\Pr(B)}{\Pr(A)}, \quad (8.5)$$

gdzie odpowiednio: $\Pr(A)$ i $\Pr(B)$ jest prawdopodobieństwem zajścia zdarzenia A i B , $\Pr(A|B)$ i $\Pr(B|A)$ są prawdopodobieństwami warunkowymi zajścia zdarzenia A i B , odpowiednio pod warunkiem, że zaszło zdarzenie B i A .

Za [10] podane zostaną główne zalety prezentowanego podejścia:

- metody oparte na minimalizacji błędu uczenia stanowią szczególny przypadek podejścia bayesowskiego
- regularyzacja ma naturalną interpretację dla metody uczenia SSN opartej na podejściu Bayesa.

Powszechnie stosowana jest technika uczenia SSN oparta na maksymalizacji funkcji wiarygodności (ekwiwalentna do minimalizacji funkcji błędu), która prowadzi do jednego zbioru wartości, wag sieci neuronowej. Dla sieci neuronowych, uczonych za pomocą wnioskowania bayesowskiego podejście jest inne: poszukujemy funkcji gęstości prawdopodobieństwa (FGP), dla której wartości wag są zmienną losową. Charakter FGP reprezentuje stopień niepewności co do różnych wartości wag. FGP dla wag na początku przyporządkowany zostaje pewien z góry założony rozkład *a priori*. Po przedstawieniu SSN zbioru danych uczących, otrzymujemy FGP *a posteriori* dla wag.

W przypadku klasycznych metod uczenia SSN, złożonym obliczeniowo elementem jest minimalizacja funkcji błędu. Dla podejścia bayesowskiego, złożonym obliczeniowo momentem jest całkowanie po wielowymiarowej przestrzeni wag. Analityczne metody lub standardowe metody numerycznego całkowania zawodzą dla funkcji spotykanych w rozważanej metodzie uczenia SSN. Z tych przyczyn, dla rozważanego podejścia, stosowane są metody, które przy całkowaniu stosują losowe próbkowanie po wielowymiarowej przestrzeni wag. Takie metody są oparte na podejściu Monte Carlo, por. [5].

Metoda uczenia SSN oparta na podejściu bayesowskim, jest zbyt złożona, by pełen jej opis mógł być zamieszczony w tej pracy, z tej przyczyny ograniczono się do jej podstawowych wzorów. Funkcja gęstości rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej losowej wag oznaczona jest przez $p(\mathbf{w})$, gdzie $\mathbf{w} = [w_1, \dots, w_W]$. Zbiór wyjść danych uczących oznaczony zostanie przez $\mathcal{D} \equiv \{\hat{L}_1, \dots, \hat{L}_N\}$. Gdy dane uczące zostaną przedstawione, zgodnie z twierdzeniem Bayesa, możemy napisać wyrażenie na funkcje rozkładu gęstości prawdopodobieństwa *a posteriori*:

$$p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathcal{D})}, \quad (8.6)$$

gdzie wyrażenie w mianowniku jest współczynnikiem normalizującym danym wzorem

$$p(\mathcal{D}) = \int p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w}) d\mathbf{w}. \quad (8.7)$$

Funkcja wiarygodności $p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$ reprezentuje model szumu dla danych wyjściowych.

Algorytm uczenia bayesowskiego wygląda następująco. Zaczynamy od pewnego prawdopodobieństwa *a priori* $p(\mathbf{w})$. Ponieważ mamy małą wiedzę na temat, jakie powinny być wagi SNN, zatem funkcja gęstości prawdopodobieństwa *a priori* powinna wyrażać pewne ogólne właściwości, np. gładkość funkcji. Po uwzględnieniu danych pomiarowych, na podstawie twierdzenia Bayesa (8.6), obliczona jest FGP *a posteriori*. FGP *a posteriori* będzie bardziej zwarta niż FGP *a priori*, tzn. wariancja wag będzie mniejsza, ponieważ dostarczona została informacja, które wartości wag są bardziej spójne z obserwacją. Warto dodać, że aby obliczyć FGP *a posteriori* należy przyjąć FGP *a priori* $p(\mathbf{w})$ i założyć warunkowe FGP $p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$.

Ważnym elementem bayesowskiego podejścia uczenia SSN jest marginalizacja, która dla statycznego modelu, daje przewidywane wartości danych wyjściowych na podstawie prawdopodobieństwa rozkładu wag *a posteriori* i danych wejściowych. Dla obliczonej FGP, w wyniku marginalizacji, wartość oczekiwana wyjścia jest określona wzorem

$$\langle \hat{L} \rangle = \int BSNN(y, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) d\mathbf{w}. \quad (8.8)$$

8.3 Identyfikacja charakterystycznego wymiaru RVE na przykładzie testu indentacji

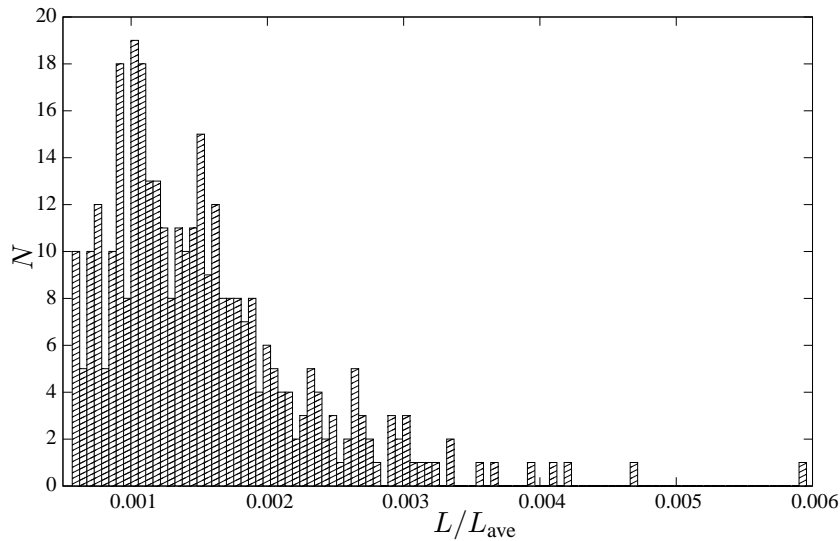
8.3.1 Komputerowa symulacja testu indentacji

Za pomocą autorskiego programu wieloskalowego MES opartego na metodzie CH, przeprowadzona została symulacja testu indentacji. Przyjęto siatkę MES na poziomie mikro i makro, tak jak w podrozdziale 7.3. Ze względu na złożoność problemu ograniczono się do zadań liniowo-sprężystych.

Aby przeprowadzić komputerową symulację testu indentacji losowano zbiór próbek za pomocą generatora liczb losowych. Przyjęto, że próbki są niejednorodne, a parametry równań konstytutywnych składników kompozytu (matrycy i inkluzji) fluktuują wokół pewnej wartości średniej z pewną wariancją. W teście każda próbka miała wylosowany moduł Younga dla matrycy i inkluzji, za pomocą generatora liczb losowych próbkującego z rozkładu Gaussa.

Celem rozważanej metody jest estymacja wymiaru charakterystycznego, który jest funkcją danych pomiarowych. Aby otrzymać aproksymacje poszukiwanej funkcji, za pomocą symulacji MES, wygenerowano zbiór danych za pomocą generatora liczb losowych, losując dla każdej próbki wymiar charakterystyczny L . Rozkład prawdopodobieństwa dla L wybrano, opierając się na hipotezie, że wymiar charakterystyczny jest zawsze większy od zera i jego rozkład prawdopodobieństwa jest

niesymetryczny. Na tej podstawie rozważano rozkład prawdopodobieństwa Lognormalny i rozkład prawdopodobieństwa Gamma. Do obliczeń wybrano rozkład Gamma (nie istnieje literatura poświęcona temu zagadnieniu).

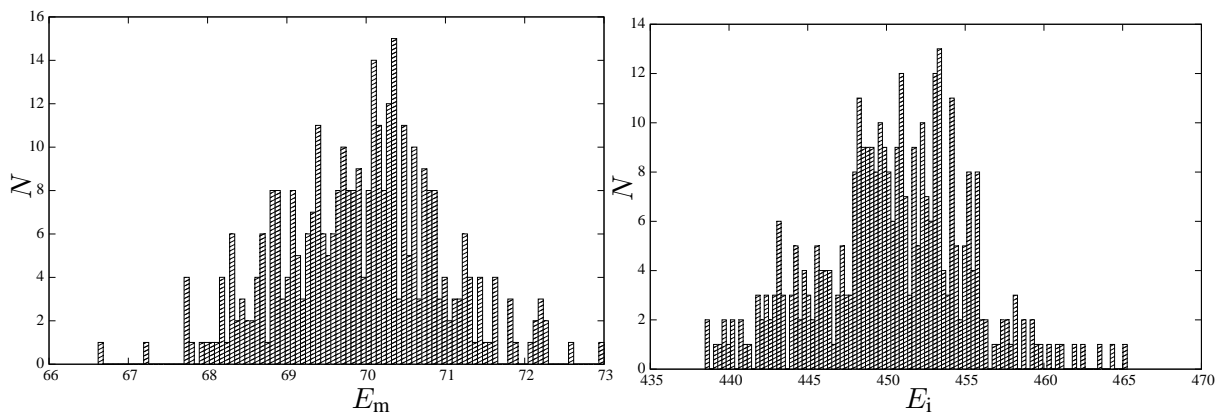


Rysunek 8.1: Histogram dla wymiaru charakterystycznego L dla 344 losowań według rozkładu Gamma o parametrach $k = 2$ i $\theta = 2$, przeskalowanego o $s = 10^{-3}$ i przesuniętego o wartość $w = 0.5e - 3$

Wymiar charakterystyczny L jest określony rozkładem prawdopodobieństwa Gamma o parametrach $k = 2$ i $\theta = 2$, funkcja gęstości prawdopodobieństwa określona jest wzorem:

$$p(L, k, \theta) = x^{k-1} \frac{e^{-x/\theta}}{\theta^k \Gamma(K)} \quad \text{dla } x \geq 0, \quad (8.9)$$

gdzie $\Gamma(k) = \int_0^\infty t^{k-1} e^{-k} dt$. Wylosowane wartości z rozkładu Gamma skalowano o wartość $s = 10^{-3}$ i przesuwano o wartość $w = 0.5e - 3$. Histogram dla 344 losowań umieszczony jest na rys. 8.1. W dalszej części pracy wymiar charakterystyczny L jest identyfikowany po uprzednim podziale zbioru na część do uczenia o liczebności 144 elementów, a pozostała część użyta jest do testowania.



Rysunek 8.2: Histogram dla modułu Younga macierzy E_m i modułu Younga inkluzji E_i dla 344 losowań według rozkładu normalnego o parametrach $\mu = 70, \sigma^2 = 100$ i $\mu = 450, \sigma^2 = 500$, odpowiednio dla macierzy i inkluzji

Dla ustalonych wartości parametrów związków konstytutywnych składników mikrostruktury, danej ścieżce równowagi odpowiada dokładnie jeden wymiar charakterystyczny RVE. Na podstawie danej ścieżki równowagi jednoznacznie można obliczyć wymiar charakterystyczny L .

W rzeczywistości, każda z badanych w laboratorium próbek jest inna, parametry związków fizycznych są różne, pomiary wykonywane są ze skończoną dokładnością. Z tego powodu do symulacji doświadczenia przyjęto, że parametry związków fizycznych składników materiału wielofazowego fluktuują wokół pewnej wartości średniej. Losowano moduły Younga, matrycy E_m i inkluzji E_i z rozkładu normalnego, o ustalonej wartości średniej i odchylenia standardowego, przyjmując parametry rozkładu normalnego: $\mu = 70, \sigma^2 = 100$ i $\mu = 450, \sigma^2 = 500$ odpowiednio dla matrycy i inkluzji. Na rys. 8.2 zamieszczono histogramy wylosowanych 344 dla modułów Younga matrycy i inkluzji.

8.3.2 PCA

Dla rozważanego testu indentacji pierwsze 3 wartości własne są równe

$$\lambda_1 = 0.055, \quad \lambda_2 = 8.69e - 06, \quad \lambda_3 = 4.83e - 6.$$

Ponieważ pierwsza wartość własna ma znacznie większy wkład w wariancję, niż pozostałe, analiza jest ograniczona do wektora pierwszego składnika głównego. Wektor pierwszego składnika głównego dany jest wzorem

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{w}_1 \mathbf{X}, \quad (8.10)$$

gdzie \mathbf{w}_1 jest wektorem własnym, odpowiadającym największej wartości własnej λ_1 . Zatem współczynniki y_k wektora $\hat{\mathbf{Y}}$ są kombinacją liniową wektorów losowych \mathbf{x}_k .

Transformacja PCA minimalizuje wartość oczekiwaną błędu rekonstrukcji danych określonego wzorem

$$E_r = E[\|\mathbf{X} - \mathbf{w}_1^T \hat{\mathbf{Y}}\|], \quad (8.11)$$

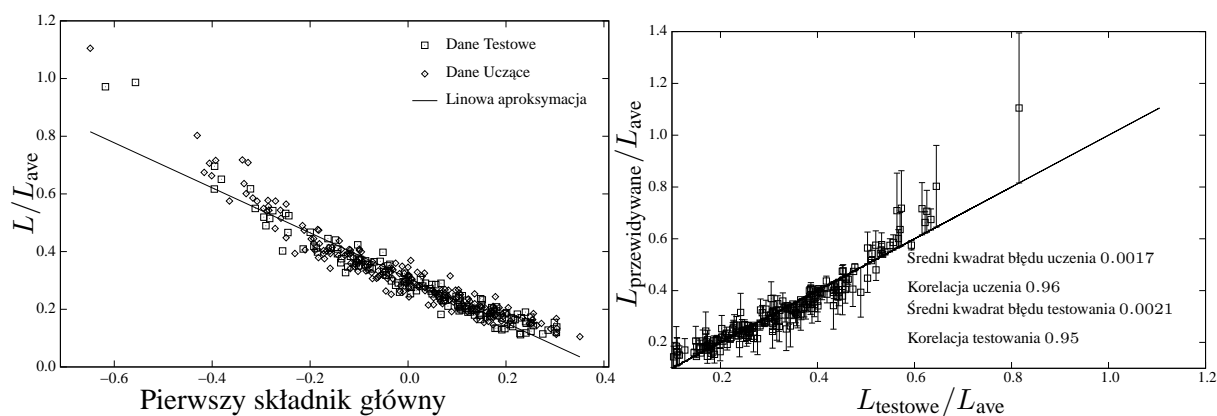
który może być określony zależnością

$$E_r = \sum_{i=2}^p \lambda_i. \quad (8.12)$$

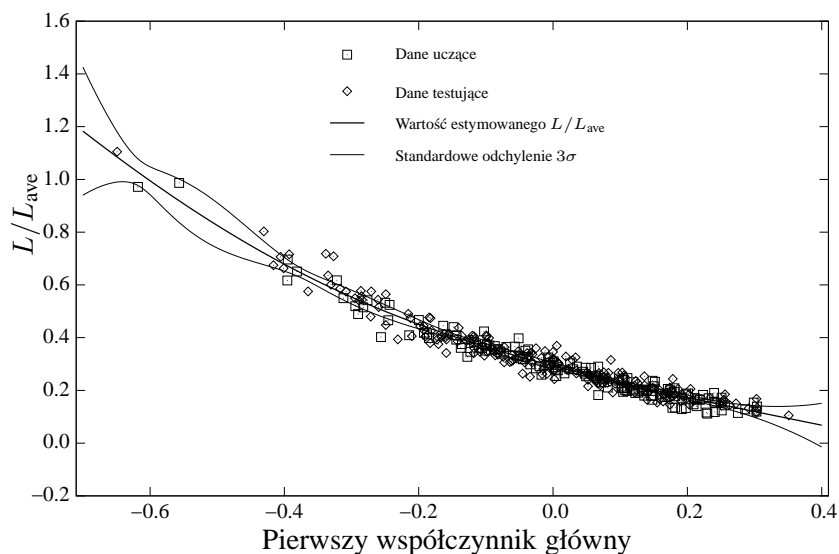
Dla rozważanego przypadku błąd rekonstrukcji wynosi $E_r = 2.52e - 5$. Warto dodać, że analiza PCA minimalizuje oczekiwaną wartość błędu rekonstrukcji i maksymalizuje oczekiwany błąd rzutowania, który dla naszego przypadku jest równy pierwszej wartości własnej.

8.3.3 Regresja liniowa

Po wykonaniu transformacji PCA za pomocą regresji liniowej, wyznaczona został zależność między pierwszym składnikiem głównym, a identyfikowanym wymiarem charakterystycznym L , por. rys. 8.3 po prawej. Dodatkowo na rys. 8.3 po lewej umieszczono zależność między testowanym, a przewidywanym wymiarem charakterystycznym \bar{L} . Wyniki otrzymane za pomocą liniowej regresji dla zbioru testującego, w szczególności dla dużych wartości L , odbiegają znacząco od tych, które wynikają z analizy numerycznej. Dla podziału danych na 144 elementowy zbiór uczący i 200 elementowy zbiór testujący, maksymalny błąd testowania dla zbioru testowania wynosi 44%. Z tej przyczyny w dalszej części pracy zostanie zaprezentowana metoda oparta na BSSN.



Rysunek 8.3: Liniowa aproksymacja



Rysunek 8.4: Estymowana wartość L/L_{ave}

8.3.4 BSSN

Do uczenia SSN metodą bayesowską wykorzystano ogólnie dostępny program [52]. Do uczenia wybrano SSN o architekturze 1 – 16 – 1 i sigmoidalnych funkcjach aktywacji. Skrypt napisany w powłoce basha wywołujący funkcje programu [52] jest umieszczony poniżej:

```
#!/bin/sh

# Commands to apply a Bayesian neural network to the problem of identification
# intrinsic lenght scale.
# L. Kaczmarczyk

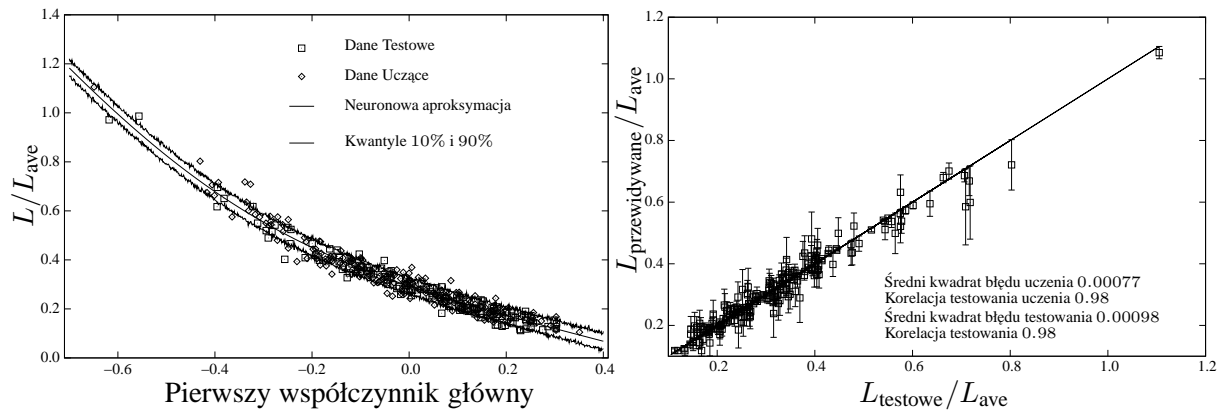
net-spec mylog.net 1 16 1 / - 0.05:0.5 0.05:0.5 - x0.05:0.5 - 100
model-spec mylog.net real 0.05:0.5

data-spec mylog.net 1 1 / myrdata@1:144 . myrdata@145:344 .

net-gen mylog.net fix 0.5
mc-spec mylog.net repeat 10 sample-noise heatbath hybrid 100:10 0.2
net-mc mylog.net 1
```

```
mc-spec mylog.net sample-sigmas heatbath hybrid 1000:10 0.4
net-mc mylog.net 1000
```

Przewidywana wartość wymiaru charakterystycznego RVE oraz jej wariancja przedstawione są na rys. 8.4. Informacja o wariancji dla L zmienia się zależnie od ilości informacji zawartej w zbiorze danych uczących i jest funkcją pierwszego składnika głównego. Na rys. 8.4 obserwujemy dużą wariancję tam, gdzie jest mała liczba punktów zbioru uczącego. Wariancja wzrasta nieograniczenie, gdy oddalamy się od przedziału, w którym zawarte są wartości y zbioru uczącego. Na postać wariancji na rys. 8.4 ma wpływ przyjęty rozkład prawdopodobieństwa z którego losowano L . Założony rozkład prawdopodobieństwa Gamma odzwierciedla przekonanie do przewidywanej wartości L . Rozkład prawdopodobieństwa, z którego losowane jest L odzwierciedla wiedzę eksperta *a priori*.



Rysunek 8.5: Neuronowe aproksymacje dla podziału danych na 144 elementy zbioru uczący i 200 elementów zbioru testujący

Po prawej na rys. 8.5 umieszczone są kwantyle 10% i 90% dla rozkładu prawdopodobieństwa L , pod warunkiem że znana jest wartość y . W zależności od problemu wariancja $\langle L \rangle$ przy znanym y będzie ulegać zmianie. Dla przypadku stałych wartości parametrów fizycznych komponentów mikrostruktury wariancja będzie równa zero (przypadek idealny, w którym wszystkie próbki są identyczne). Z kolei, gdy wzrasta niepewność, co do dokładności parametrów związków konstytutywnych składników mikrostruktury wariancja będzie większa. Im większa wariancja rozkładów z których losowano E_i i E_m , tym większa będzie wariancja wartości oczekiwanej L . Należy dodać, że wartości średnie i ich wariancje powinny być określone na podstawie odrębnych doświadczeń wykonanych dla każdego z komponentów mikrostruktury.

Po lewej rys. 8.5 umieszczona jest zależność pomiędzy wartością L testowanego i L przewidywanego przez bayesowską SSN. W porównaniu do liniowej regresji średni błąd kwadratowy i korelacja uległy znacznej poprawie. Widać że maksymalny błąd predykcji jest znacznie mniejszy, niż dla modelu liniowego.

Zastosowanie SSN do identyfikacji L na podstawie testu indentacji nie wymusza przyjęcia *a priori* postaci funkcji aproksymującej, co pozwala na aplikacje metody dla przypadków bardziej złożonych. W szczególności dotyczy to problemów, gdy model ma większą liczbę wejść i pod uwagę branych jest kilka pierwszych współczynników głównych.

Rozdział 9

Uwagi końcowe i wnioski

Celem badań przedstawionych w pracy jest modelowanie materiałów z mikrostrukturą, która ma pewien wymiar charakterystyczny.

Do budowy nowoczesnych konstrukcji stosowane są materiały o złożonej budowie. Ich wykorzystanie będzie tym lepsze im lepsze będą modele opisujące pracę tych materiałów. Modele wieloskalowe, które uwzględniają istotne zjawiska zachodzące w mikroskopowej skali obserwacji, umożliwiają projektowanie konstrukcji, które są lżejsze, bezpieczniejsze i oszczędniejsze.

Jest wiele metod, które służą opisowi zachowania niejednorodnego materiału. Makroskopowe modele ciała oparte są na modelach fenomenologicznych materiałów niejednorodnych. Można również dyskretyzować mikroskopową budowę ciała. Te dwa podejścia mają pewne zalety, ale posiadają też istotne wady. Często nie jest możliwa estymacja parametrów modelu fenomenologicznego za pomocą doświadczenia. Z kolei, gdy dyskretyzowana jest mikroskopowa budowa ciała, numeryczny model ma dużą złożoność obliczeniową, przekraczającą często możliwości komputerów. Alternatywą wobec wyżej wymienionych podejść są metody homogenizacji, w szczególności te metody, które uwzględniają duży zakres zjawisk zachodzących w skali mikro. Współcześnie metodą posiadającą ogromny potencjał jest metoda numerycznej homogenizacji (CH).

Metoda CH oparta jest na rozwiązaniu dwóch problemów brzegowych mechaniki, a dokładniej problem w skali makro jest sprzężony z problemem w skali mikro. Podstawowymi cechami metody CH są:

- Metoda nie wymaga żadnych równań konstytutywnych w skali makro. Związki te są wyznaczone w sposób niejawni dla każdego przyrostu obciążenia. Niejawne związki konstytutywne wyznaczone są na podstawie numerycznego modelu reprezentatywnego elementu objętościowego (RVE). Do wyznaczenia niejawnych związków fizycznych w skali makro wymagana jest znajomość geometrii mikrostruktury oraz jej ewolucji, równań obowiązujących w mikrostrukturze, a w szczególności równań fizycznych i ich parametrów.
- Analiza oparta na metodzie CH dostarcza informacji o polach wielkości makroskopowych i mikroskopowych. W odróżnieniu od analitycznych i pół-analitycznych metod homogenizacji, metoda numerycznej homogenizacji pozwala na analizę rozkładu mikronaprężeń i mikroodkształceń w RVE.
- Metoda CH umożliwia uwzględnienie nieliniowości materiałowych na poziomie mikro i makro. Każdy ze składników mikrostruktury może być opisany odrębnymi równaniami fizycznymi. Warto dodać, że znana jest duża liczba fenomenologicznych związków fizycznych dla szerokiej gamy materiałów jednofazowych. Za pomocą metody CH budowane są niejawnie związki fizyczne materiału wielofazowego. Metoda umożliwia opis materiału makroskopowo anizotropowego lub takiego, którego anizotropia jest indukowana przez deformacje.

- CH umożliwia uwzględnienie nieliniowości geometrycznych na makroskopowym i mikroskopowym poziomie obserwacji. Metoda ta umożliwia w szczególności uwzględnienie dużych deformacji, a więc pozwala na opis zjawisk związanych z utratą stateczności materiału na poziomie mikro w wyniku utraty stateczności mikrostruktury, jako przyczyny utraty stateczności materiału.
- Metoda CH umożliwia opis ewolucji geometrii mikrostruktury. Inne metody wieloskalowe nie pozwalają na opis zjawisk, dla których geometria ulega zmianie. Możliwy jest między innymi opis pękania zarówno matrycy jak i inkluzji. Możliwa jest analiza problemów, dla których występuje zjawisko pękania na granicach składników kompozyt.

Ze względu na złożoność metody, w pracy zawężono rozważania do pewnych zagadnień, przyjęto uproszczenia, ale nie stanowią ograniczenia dla metody CH, a w szczególności rozważano problemy, którymi są:

- problemy dwumiarowe,
- problemy prawie statyczne (rzeczywisty czas nie występuje jawnie, siły bezwładności nie są uwzględniane),
- teorie ośrodka ciągłego z klasycznym i gradientowym opisem,
- teorie geometrycznie liniowe w skalach mikro i makro,
- materiały nieliniowe, w szczególności o związkach fizycznych sprężysto-plastycznych ze wzmocnieniem.

W pracy nie ograniczono się wyłącznie do zrozumienia i własnej implementacji opisów metody CH dostępnej w literaturze. Oryginalnie elementy badań to:

- sposób wyprowadzenia warunków brzegowych metody uśredniającej po RVE dla ośrodka gradientowego, który uwzględnia wszystkie możliwe typy warunków brzegowych dla RVE, np. statyczne, kinematyczne i periodyczne;
- metoda wymuszania warunków brzegowych dla RVE za pomocą macierzy rzutujących. Metoda ta umożliwia przeprowadzenie analizy dla dowolnej metody uśredniającej, zgodnej z twierdzeniem Hilla-Mandela. Ponadto, metoda może być bez trudu zastosowana do dowolnego kształtu RVE, np. kwadratu, okręgu;
- wyprowadzono analityczną postać operatorów sztywności dla jednorodnego materiału rzędu II przy przyjęciu kwadratowego kształtu RVE;
- zaproponowana metoda identyfikacji wymiaru charakterystycznego RVE. Metoda jest oparta na budowie zredukowanego modelu odwrotnego, za pomocą sztucznych sieci neuronowych (SSN), której zbiór uczący wygenerowano na podstawie symulacji komputerowej indentacji.

Metoda CH wymaga efektywnych algorytmów numerycznych, które pozwalają modelować zjawiska zachodzące w skali makro i mikro. Z tej przyczyny część pracy została poświęcona numerycznym zagadnieniom MES w metodzie komputerowej homogenizacji. Dotyczy to w szczególności:

- implementacji ES dla ośrodka gradientowego w płaskim stanie odkształcenia,
- zastosowano zredukowane całkowanie z stabilizacją dla ES, zyskując przez to:

- na poziomie makro znacząco zmniejszono złożoność obliczeniową zadania;
 - na poziomie mikro, przez redukcję punktów całkowania w skończone elementowym modelu RVE, znacząco ograniczono rozmiar pamięci potrzebnej do przechowywania zmiennych historycznych;
 - na poziomie mikro była możliwa analiza zadań dla materiałów prawie nieściśliwych lub sprężysto-plastycznych w płaskim stanie odkształcenia.
- użyto metody zbiorów poziomujących (ang. *Level Set*) w rozszerzonej MES (XFEM) do opisu geometrii mikrostruktury na regularnej siatce elementów skończonych. Ta metoda posiada duże możliwości zastosowań w CH, np. do opisu geometrii RVE w zadaniach trójwymiarowych.

Przy zastosowaniu autorskiego systemu wieloskalowej MES, opartego na metodzie CH, rozwiązano testy numeryczne obrazujące zalety rozważanej metody, a w szczególności jej wariantu dla ośrodka gradientowego. Rozwiązano następujące zadania testowe:

- Test zginania dla małej rozdzielności skal. Ze względu na charakter rozwiązania w skali makro nie występują dla tego testu różnice między klasycznym i gradientowym kontinuum w makroskopowej skali obserwacji. Na poziomie mikro różnice te są istotne. Dla ośrodka klasycznego RVE się nie zgina, co prowadzi do niewłaściwego rozkładu pól mechanicznych w skali mikro.
- Test cienkiej ścinanej warstwy obrazuje wpływ warunków brzegowych wyższego rzędu oraz wymiaru charakterystycznego RVE na postać rozwiązania. Dodatkowo przedstawiono postać deformacji i rozkład naprężeń ścinających w RVE w wybranych makroskopowych punktach. Analizowany był również wpływ względnego rozmiaru RVE (reprezentatywności RVE) na postać rozwiązania.
- Test indentacji uwypukla korzyści płynące z podejścia wieloskalowego MES, tzn. znaczącą redukcję stopni swobody w stosunku do bezpośredniej dyskretyzacji mikrostruktury. Rozważany był również wpływ wymiaru charakterystycznego RVE na twardość kompozytu. Dla testu indentacji zaproponowano metodę identyfikacji wymiaru charakterystycznego RVE za pomocą bayesowskich sztucznych sieci neuronowych (BSSN).

Metoda numerycznej homogenizacji dla klasycznego continuum wymaga obliczenia makroskopowego tensora odkształceń. Następnie, zgodnie z koncepcją lokalizacji, warunki brzegowe, równania równowagi, równania kinematyczne i związki konstytutywne prowadzą do klasycznego zadania brzegowego mechaniki. Zadanie to rozwiązane jest za pomocą MES. Zgodnie z koncepcji homogenizacji, obliczany jest makroskopowy tensor naprężenia i styczne operatory sztywności. Metoda CH dla klasycznego ośrodka ciągłego (rzędu I) stosowana jest do opisu materiałów o następujących właściwościach:

- Wymiar charakterystyczny mikrostruktury jest bardzo mały w porównaniu do konstrukcji. Zgodnie z postulatem lokalności zakładamy, że stan naprężenia i odkształcenia w punkcie zależy od bliskiego otoczenia tego punktu. Homogenizacja statystyczna I rzędu nie może być stosowana, gdy jest mała rozdzielczość skal.
- Nie jest obserwowany efekt skali.

Kiedy tylko istnieje duża separacja skal oraz gdy nie występuje lokalizacja odkształceń w skali makro, zalecane jest stosowanie podejścia opartego na numerycznej homogenizacji rzędu I.

Uciekając od ograniczeń homogenizacji rzędu I, w pracy przedstawiono homogenizację rzędu II. Do opisu ośrodka ciągłego w skali makro zastosowano continuum gradientowe, w którym oprócz klasycznych miar odkształceń i naprężeń występują dodatkowe miary odkształceń i naprężeń, które są funkcją drugich gradientów przemieszczeń. Podejście wymaga odpowiedniej koncepcji lokalizacji, tzn. wymuszenia deformacji RVE zgodnej z zadanymi makroskopowymi miarami odkształceń za pomocą warunków brzegowych, nałożonych wyłącznie na przemieszczenia (nie gradienty przemieszczeń) na brzegu RVE oraz stosowania koncepcji homogenizacji, tzn. obliczenia makroskopowych miar makronaprężeń, obliczonych wyłącznie na podstawie wartości sił brzegowych (a nie ich gradientów). Szczególną cechą rozważanego podejścia jest, że na poziomie mikro continuum pozostaje klasyczne. Rozpatrywanie zadania w skali mikro, za pomocą klasycznego opisu continuum, jest istotne ze względów praktycznych. Istnieje duża liczba związków konstytutywnych dla materiałów jednofazowych klasy I w porównaniu do bardzo małej liczby związków konstytutywnych materiałów klasy II. Numeryczna homogenizacja rzędu II pozwala na analizę następujących problemów:

- charakterystyczny rozmiar mikrostruktury nie może być pominięty w porównaniu do charakterystycznego rozmiaru analizowanego ciała w skali makro,
- istotne są efekty wyższego rzędu związane z warunkami nałożonymi na gradienty przemieszczeń,
- odpowiedź mikrostruktury jest czuła na gradient deformacji, tzn. dla problemów, w których występuje lokalizacja wewnątrz mikrostruktury.

Z analizy przeprowadzonych testów numerycznych i rozwiązania analitycznego wynikają następujące wnioski:

1. Dla rozważanego przypadku kwadratowego RVE i mikroskopowo jednorodnego materiału, np. danego równaniami Hooke'a, każda deformacja RVE, zgodna z odkształceniem rzędu I, prowadzi do jednorodnego pola mikronaprężeń i mikroodkształceń. Innymi słowy, mikrofluktuacja pola przemieszczeń w każdym punkcie RVE jest równa zero, gdy materiał jest mikroskopowo jednorodny. Zatem, makronaprężenie nie zależy od rodzaju metody uśredniającej, tzn. od typu warunków brzegowych.
2. Deformacja RVE, dla kinematycznych warunków brzegowych i mikroskopowo jednorodnego materiału, wywołana odkształceniem rzędu II, prowadzi do pola mikrofluktuacji przemieszczeń, które jest różne od zera. Dla periodycznych i naprężeniowych warunków brzegowych pole mikrofluktuacji przemieszczeń jest równe zero w każdym punkcie RVE. Zatem mimo, że materiał jest mikroskopowo jednorodny, równanie konstytutywne otrzymane dla skali makro jest zależne od sposobu wymuszania deformacji RVE. Jednak, gdy deformacja RVE wywołana jest miarami makroodkształceń rzędu I i II, które spełniają równanie równowagi w skali makro, metoda uśredniająca (warunki brzegowe przemieszczeniowe, periodyczne lub statyczne) dla materiału mikroskopowo jednorodnego prowadzą do identycznego tensora makronaprężeń rzędu I i II. Ten wniosek jest istotny, ponieważ dla przypadku materiału niejednorodnego, w granicy warunki brzegowe naprężeniowe, periodyczne i przemieszczeniowe będą prowadzić do identycznego pola makroskopowych naprężeń.
3. Materiałowy operator sztywności dla ośrodka gradientowego, otrzymany dla kwadratowego RVE, mikroskopowo jednorodnego materiału i naprężeniowych warunków brzegowych, jest funkcją wymiaru boku RVE. Innymi słowy, w przeciwieństwie do homogenizacji rzędu I, sztywność materiału jest funkcją wymiaru charakterystycznego RVE.

4. Wymiar charakterystyczny RVE nie jest obliczony w wyniku procesu homogenizacji, lecz jest makroskopowym parametrem modelu, który w ogólnym przypadku należy wyznaczyć na podstawie eksperymentu. W pracy zaproponowano metodę umożliwiającą identyfikację wymiaru charakterystycznego RVE z zastosowaniem BSSN i doświadczenia indentacji.
5. Postać makroskopowych związków konstytutywnych zależy od liczby osi symetrii RVE. Otrzymanie związków fizycznych Mindlina dla ośrodka rzędu II jest możliwe wyłącznie, gdy objętość RVE jest kulą w 3D i okręgiem w 2D (materiał Mindlina jest materiałem centro-symetrycznym). Metoda wymuszania deformacji RVE, zgodnie z makroskopowymi miarami odkształceń, oparta na macierzach rzutujących, może być bez trudu uogólniona do przypadku RVE o dowolnym kształcie.
6. Metoda numerycznej homogenizacji będzie prowadzić do błędnych wyników jeżeli, drugi gradient przemieszczeń nie jest stały wewnątrz RVE.

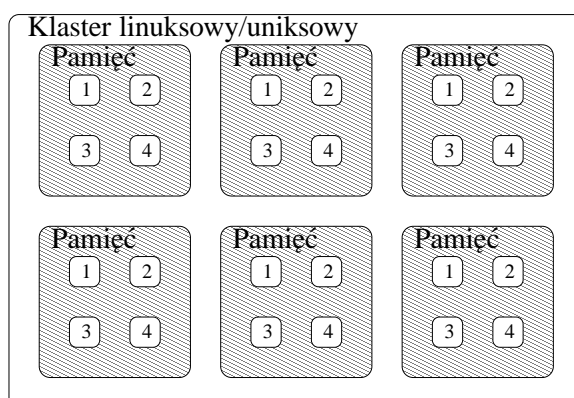
Praca dotyczy w ograniczonym stopniu komputerowej implementacji metody numerycznej homogenizacji. Nie oznacza to jednak, że te zagadnienia są trywialne. Na implementację komputerowej metody autor poświęcił większość czasu. Należy podkreślić, że metoda wymaga trudnej implementacji na komputery wieloprocessorowe o pamięci rozproszonej.

Dodatek A

Implementacja metody numerycznej homogenizacji

Wszelkie czasochłonne algorytmy stosowane w pracy programowano w C++, procedury materiałowe zostały sformułowane w języku Fortran. Stosując technologie osadzania i rozszerzania, interfejs użytkownika został przeniesiony do skryptowego języka Python za pomocą programu SWIG.

Ciągi układów liniowych, wynikających z zastosowanej metody dyskretyzacyjnej, zostały rozwiązywane przy zastosowaniu solverów SuperLU lub WSMP. Dokonano takiego wyboru solverów ze względu na możliwość rozwiązywania układu równań w wątkach, co daje lepsze wykorzystanie dostępnej mocy obliczeniowej komputerów wieloprocesorowych (węzły klastra linuxowego/unikowego posiadają często kilka procesorów, które współdzielą pamięć, zob. A.1).



Rysunek A.1: Schemat klastra linuxowego/unikowego

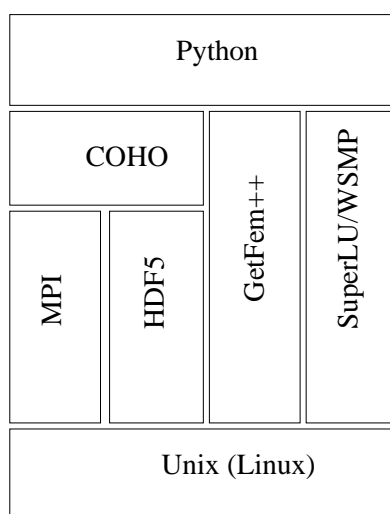
Algorytm numerycznej homogenizacji jest równoległy w naturalny sposób. Do komunikacji między procesami wykorzystano bibliotekę MPICH opartą na standardzie MPI dla pamięci rozproszonej. Zrównoleglony algorytm pozwolił na wykorzystanie mocy komputerów dostępnych w macierzystym instytucie ITIWIL.

Wizualizacje realizowano za pomocą programu/biblioteki OpenDX, po uprzednim przygotowaniu zbiorów wynikowych. Do wygładzania i aproksymacji wyników wykorzystano procedurę fortranowską, opartą na metodzie ruchomych najmniejszych kwadratów, która została udostępniona autorowi i napisana przez W. Cecota.

A.1 Wdrożone biblioteki i programy

- Getfem++: Generic Finite Element library in C++.
- Gmm++: Generic Template Matrix C++ Library.
- OpenDX: IBM Visualization Data Explorer.
- HDF5: General purpose library and file format for storing scientific data.
- MPICH: Portable Implementation of MPI, the Standard for message-passing libraries.
- WSMP: Watson Sparse Matrix Package.
- Python: Interpreted, interactive, object-oriented programming language.
- SWIG.
- Doxygen: Doxygen is a documentation system for C++, C.
- Inne popularne narzędzia systemu UNIX/Linux.

Wymienione oprogramowanie posiada licencje GNU lub jest darmowe w przypadku zastosowanie niekomercyjnego lub naukowego.



Rysunek A.2: Schemat współpracy bibliotek; COHO część autorska systemu

Getfem Ogólna biblioteka metody elementów skończonych. Umożliwia aproksymacje obszarów jedno i wielowymiarowych, funkcji skalarnych, wektorowych i tensorowych. Po własnej modyfikacji możliwa jest również analiza zadań geometrycznie i fizycznie nieliniowych zadań mechaniki jedno i wieloskalowych.

<http://www.gmm.insa-tlse.fr/getfem/>

Gmm++ Ogólna bibliotekę algebry liniowej współpracująca z BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms), LAPACK (Linear Algebra PACKage), SyperLU.

<http://www.gmm.insa-tlse.fr/getfem/>

OpenDX Program i biblioteka pomocna wizualizacji danych naukowych.

<http://www.opendx.org>

HDF5 Biblioteka ogólnego użytku będąca standardem zapisywania danych naukowych do pliku. Umożliwia zapis i odczyt pliku przez wiele procesów jednocześnie.

<http://hdf.ncsa.uiuc.edu/HDF5/>

MPICH Przenośna biblioteka zgodna z standardem MPI. Umożliwia komunikacje pomiędzy procesami działającymi równolegle.

<http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>

WSMP Solver równoległy dla pamięci dzielonej i rozproszonej.

<http://www-users.cs.umn.edu/agupta/wsmp.html>

SuperLU Solver równoległy dla pamięci dzielonej i rozproszonej.

<http://crd.lbl.gov/xiaoye/SuperLU/>

Python Interpreter obiektowo zorientowanego języka programowania. Poprzez technologie osadzania i rozszerzania wykorzystywany jako interpreter danych i kontroler algorytmu w analizie metody elementów skończonych.

<http://www.python.org>

SWIG Oprogramowanie służące do łączenia C,C++ z językami skryptowymi, między innymi pythonem.

<http://www.swig.org>

Doxygen Program do tworzenia automatycznej dokumentacji oprogramowania w postaci stron www, plików postscriptowych i innych formatach. *<http://www.stack.nl/dimitri/doxygen/>*

Ogólny opis własnego programu COHO został wykonany w ramach subsydium FNP [35].

Podziękowania

Część pracy została wykonana w ramach Subsydium FNP (Subsydium Profesorskie Nr 13/2001) i projektu badawczego MNI Nr 4 T07E 060 29.

Bibliografia

- [1] Ainsworth M. Essential boundary conditions and multi-point constraints in finite element analysis. *Comput. Methods, Appl. Mech. Engrg.*, 190:6323–6339, 2001.
- [2] Amanatidou E. and Aravas N. Mixed finite element formulations of strain-gradient elasticity problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191:1723–1751, 2002.
- [3] Arnold D.N. Mixed Finite Element Methods For Elliptic Problems.
- [4] Babuska I. and Narasimhan R. The Babuska-Brezzi condition and the patch test: an example. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 140(1997):183–199, 1996.
- [5] Barber D. and Bishop C.M. *Neural networks and machine learning*, chapter Ensemble learning in bayesian neural networks, pages 215–237. Springer, 1998.
- [6] Bathe K.J. The infsup condition and its evaluation for mixed finite element methods. *Computers and Structures*, 79(2001):243–252, 1999.
- [7] Belytschko T., Liu Kam Wing, and Moran B. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Wiley & Sons, Ltd, 2001.
- [8] Belytschko T., Moës N., Usui S., and Parimi C. Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 50:993–1013, 2001.
- [9] Bensoussan A, Lions J.L, and Papanicolaou G. *Asymptotic analysis for periodic structures*. North-Holland, 1978.
- [10] Bishop M.C. *Neural networks for pattern recognition*. Oxford, 1996.
- [11] Borkowski A., Cichoń Cz., Radwańska M., Sawczuk A., and Waszczyszyn Z. *Mechanika budowli. Ujęcie komputerowe*. Arkady, Warszawa, 1995.
- [12] Boso D.P., Schlegler B.A., Gabin B., Gross D., Karihaloo B.L., and et al. TR2-5: Micro-macro transition, multiscale modelling, effective properties. Technical report, Network of Excellence: KMM NoE, 2005.
- [13] Bucaille J.L., S. Stauss, E. Felder, and J. Michler. Determination of plastic properties of metals by instrumented indentation using different sharp indenters. *Acta Materialia*, 51:1663–1678, 2003.
- [14] Cichon Cz., Cecot W., Krok J., and Plucinski P. *Metody komputerowe w liniowej mechanice konstrukcji*. Politechnika Krakowska, 2002.

- [15] Commend S., Truty A., and Zimmermann T. Stabilized finite elements applied to elastoplasticity: I. Mixed displacement-pressure formulation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193:3559–3586, 2004.
- [16] De Borst R. *Encyclopedia of Computational Mechanics; Solids and Structures*, chapter Damage, Material Instabilities, and Failure, pages 335–373. John Wiley & Sons, 2004.
- [17] De Borst R., Van Der Giessen E., and et al. *Material Instabilities in Solids*. John Wiley & Sons, 1998.
- [18] Eriungen A. C. *Mechanics of Continua*. John Wiley & Sons, New York, 1967.
- [19] Eshelby J.D. The determination of the field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. Lond*, 241:376–396, 1957.
- [20] Feyel F. Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16:344–354, 1999.
- [21] Feyel F. Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 1999.
- [22] Feyel F. A multilevel finite element method (FE2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, (192):3233–3244, 2003.
- [23] Fleck N.A. and Hutchinson J.W. Strain Gradient Plasticity. *Advanced in Applied Mechanics*, 33:295–361, 1997.
- [24] Fleck N.A. and Hutchinson J.W. A Discussion of Strain Gradient Plasticity Theories and Application to Shear Bands. *Material Instabilities in Solids*, pages 507–519, 1998.
- [25] Ghosh S., Kyunghoon L., and Moorthy S. Two scale analysis of heterogenous elasto-plastic materials with asymptotic homogenization and Voronoi cell finite element model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 132:63–116, 1996.
- [26] Gitman Inna M. *Representative volumes and multi-scale modelling of quasi-brittle materials*. PhD thesis, Technische Universiteit Delft, 2006.
- [27] Hashin Z and Shtrikman S. On some variational principles in anisotropic and nonhomogenous elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 10:335–342, 1962.
- [28] Haykin S. *Neural Networks A Comprehensive Foundation*. Prentice Hall International, Inc., 1999.
- [29] Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc*, 21:357–372, 1952.
- [30] Hill R. A self-consistent mechanics composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, (13):213–222, 1965.
- [31] Hinton E. and Campbell J. Local and global smoothing of discontinued finite element functions using a least square method. *International Journal Numerical Methods and Engineering*, 8(1974):461–480, 1974.

- [32] Hu Y-Kan and Nagy L.I. A one-point quadrature eight-node brick element with hourglass control. *Computers and Structures*, 65(6):893–902, 1997.
- [33] Hughes T.J.R. *The Finite Element Method*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1987.
- [34] Kaczmarczyk Ł. Implementacja i sformułowanie tarczowego elementu skończonego w ujęciu hybrydowym-Trefftza, model nprężeniowy. Master's thesis, Politechnika Krakowska, 2001.
- [35] Kaczmarczyk Ł. COHO1 program do homogenizacji obliczeniowej rzędu I. Technical report, Instytut Metod Komputerowych w Inżynierii Łądowej, 2005.
- [36] Kasper E.P and Taylor R.L. A mixed-enhanced strain method Part I: Geometrically linear problems. *Computers and Structures*, 75:237–250, 2000.
- [37] Klaas O., Maniatty A., and Shephard M.S. A stabilized mixed Finite element method for Finite elasticity. Formulation for linear displacement and pressure interpolation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 180:65–79, 1999.
- [38] Kompiš V., Konol' F., and Vaško M. Trefftz-polynomial reciprocity based FEM formulations. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Science*, 8(2/3):385–398, 2001.
- [39] Kouznetsova V.G. *Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials*. PhD thesis, Technische Universiteit, Eindhoven, 2002.
- [40] Kouznetsova V.G., Geers M.G.D., and Brekelmans V.A.M. Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials: a nested finite element solution strategy. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 194:5525–5550, 2004.
- [41] Kouznetsova V.G., Geers M.G.D., and Brekelmans W.A.M. Size of a Representative Volume Element in a Second-Order Computational Homogenization Framework. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2(4):575–598, 2004.
- [42] Liszka T. and Orkisz J. The finite difference method at arbitrary irregular grids and its applications in applied mechanics. *Comp. & Struct.*, 11:83–95, 1980.
- [43] Maplesoft. Maple. <http://www.maplesoft.com/>.
- [44] Massart T.J. *Multi-scale modeling of damage in masonry structures*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2003.
- [45] Matuszak A. *Częściowa wymiana materiału bez zmiany stanu naprężenia w płaskich zagadnieniach teorii sprężystości*. PhD thesis, Politechnika Krakowska, Kraków, 2003.
- [46] Miehe C. and Koch A. Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains. *Archive of Applied Mechanics*, 72:300–317, 2002.
- [47] Mindlin R.D. Micro-structure in linear elasticity. *Archives Rational Mechanical Analysis*, 16:52–77, 1963.
- [48] Mindlin R.D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 1:417–438, 1965.
- [49] Mindlin R.D and Tiersten H.F. Effects of Couple-stresses in Linear Elasticity. *Archives Rational Mechanical Analysis*, 1972.

- [50] Moës N., Dolbow J., and Belytschko T. A Finite Element Method For Crack Growth Without Remeshing. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 1999(46):131–150, 1999.
- [51] Mühlhaus H.B., editor. *Continuum Models for Materials with Microstructure*. John Wiley & Sons, 1995.
- [52] Neal R. Software for Flexible Bayesian Modeling and Markov Chain Sampling. <http://www.cs.toronto.edu/~radford/fbm.software.html>, 2004.
- [53] Nemat-Nasser S. and Hori M. *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*. Elsevier, 1999.
- [54] Nowacki W. *Teoria sprężystości*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1970.
- [55] Osowski S. *Sieci neuronowe do przetwarzania informacji*. Politechnika Warszawska, 2000.
- [56] Pamin J. *Gradient-enhanced continuum models: formulation, discretization and application*. Monografia, Politechnika Krakowska, Kraków, 2004.
- [57] Polizzotto C. Unified thermodynamic framework for nonlocal/gradient continuum theories. *European Journal of Mechanics*, 22:651–668, 2003.
- [58] Reese S., Kussner M., and Reddy B.D. A new stabilization technique for finite elements in non-linear elasticity. *A new stabilization technique for finite elements in non-linear elasticity*, 44:1617–1652, 1999.
- [59] Reese S. and Wriggers P. A stabilization technique to avoid hourglassing in finite elasticity. *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, 48(2000):79–109, 2000.
- [60] Rymarz Cz. *Mechanika ośrodków ciągłych*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1993.
- [61] Sethian J.A. Fast Marching Method and Level Set Methods. Dept. of Mathematics, Univ. of California, Berkeley, California 94720. http://math.berkeley.edu/~sethian/level_set.html.
- [62] Sethian J.A. *Level Set Methods and Fast Marching Methods Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge University Press, 1999.
- [63] Shu J.Y., King W.E., and Fleck N.A. Finite element for materials with strain gradient effects. *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, 44(1999):373–391, 1999.
- [64] Simo J.C. and Hughes T.J.R. *Computational Inelasticity*. Springer, New York, 1998.
- [65] Squet P. M. *Plasticity today: modelling, methods and applications*, chapter Local and global aspects in the mathematical theory of plasticity, pages 279–310. Elsevier, London, 1985.
- [66] Strang G. *Introduction to applied mathematics*. Wellesley-Cambridge Press, 1986.
- [67] Strzelecki T. and et al. *Mechanika ośrodków niejednorodnych. Teoria homogenizacji*. Dolnośląskie Wydawnictwo Naukowe, 1996.

- [68] Sukumar N., Chopp D.L., Moës N., and Belytschko T. Modelling holes and inclusions by level set method in the extended finite-element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:6183–6200, 2001.
- [69] Swaddiwudhipong S., Tho K.K., Hua J., and Liu Z.S. Mechanism-based strain gradient plasticity in C0 axisymmetric element. *International Journal of Solids and Structures*, (43):1117–1130, 2006.
- [70] Toupin R.A. Elastic Materials with Couple-stresses. *Archives Rational Mechanical Analysis*, 11:385–413, 1968.
- [71] Truty A. *On certain classes of mixed and stabilized mixed finite elements formulations for single and two-phase geomaterials*. Monografia, Politechnika Krakowska, Kraków, 2002.
- [72] Ventura G., Xu J.X., and Belytschko T. A vector level set method and new discontinuity approximations for crack growth by EFG. *International Journal for Numerical Methods In Engineering*, 54:923–944, 2002.
- [73] Weisste E.W. Partition of Unity. MathWorld—A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/PartitionofUnity.html>.
- [74] Wells G.N. *Discontinuous modelling of strain localisation and failure*. PhD thesis, Delft University of Technology, 2001.
- [75] Wriggers P. *Computational Contact Mechanics*. John Wiley & Sons, Ltd, 2002.
- [76] Zienkiewicz O.C. and Taylor R.L. *The Finite Element Method for Solid And Structural Mechanics*. Elsevier, 2005.
- [77] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., and Zhu J.Z. *The Finite Element Method; Its Basis & Fundamentals*. Elsevier, 2005.
- [78] Zienkiewicz O.C. and Taylor R.C. *The Finite Element Method*. McGraw-Hill, New York, 1991.
- [79] Zohdi I.T. *Encyclopedia of Computational Mechanics*, volume Solids and Structures, chapter Homogenization Methods and Multiscale Modelling, pages 407–430. John Wiley & Sons, 2004.