

PHÂN TÍCH THỐNG KÊ TRƯỜNG ỨNG SUẤT ĐÀN HỒI CỦA CÁC HẠT TRÊN BỀ MẶT ĐA TINH THỂ: HƯỚNG TỚI NGHIÊN CỨU SỰ HÌNH THÀNH CỦA VẾT NỨT MỎI

STATISTICAL AND NUMERICAL STUDY OF LOCAL ELASTIC STRESS FIELD AT SURFACE OF POLYCRYSTALS: IMPLICATIONS TO THE FORMATION OF FATIGUE CRACKS

Đặng Văn Trường, Nguyễn Xuân Chung

TÓM TẮT

Bằng cách sử dụng phương pháp mô phỏng phần tử hữu hạn với các vi cấu trúc được xây dựng một cách ngẫu nhiên (tương tự với [1] và [3]), trường ứng suất đàn hồi trong hạt tinh thể trên bề mặt được tính toán một cách thống kê (giá trị trung bình và độ lệch). Các hướng tinh thể khác nhau được lựa chọn nhằm nghiên cứu ảnh hưởng của chúng tới phân bố ứng suất trong hạt tinh thể. Vai trò của hình dáng 3D của hạt cũng được phân tích. Các kết quả được trình bày trong bài báo này nhận được từ các mô phỏng sử dụng vật liệu thép không gỉ 316L với cấu trúc tinh thể lập phương tâm mặt (FCC) và chúng được so sánh với các kết quả đã được công bố với các vi cấu trúc 2D và 3D đơn giản hóa [1, 3].

Từ khóa: Đa tinh thể, phân bố ứng suất, mô phỏng bằng phần tử hữu hạn, sự hình thành vết nứt mỏi.

ABSTRACT

By using an approach based on numerical simulations (finite element method) with random polycrystalline microstructures (similar to [1] and [3]), the elastic stress field within the grains of surface is statistically evaluated (mean value and standard deviation). The different crystalline orientations have been selected to study their affects to the stress distribution within the grains. The role of 3D grain morphology is analyzed. The results were obtained for austenitic stainless steels 316L having a face centered cubic crystal structure (FCC) and they are compared with previous works on simplified 2D or 3D microstructures [1, 3].

Keywords: Polycrystals, stress distribution, simulation by finite element method, formation of fatigue cracks.

Đặng Văn Trường, Nguyễn Xuân Chung

Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội

Email: truongdv.ck@gmail.com

Ngày nhận bài: 02/08/2017

Ngày nhận bài sửa sau phản biện: 30/11/2017

Ngày chấp nhận đăng: 25/12/2017

1. GIỚI THIỆU

Hiện tượng mỏi là sự phá hủy của các vật liệu và kết cấu dưới tác dụng của tải trọng lặp đi lặp lại theo thời gian. Tuổi thọ mỏi được chia ra làm hai giai đoạn: Giai đoạn hình

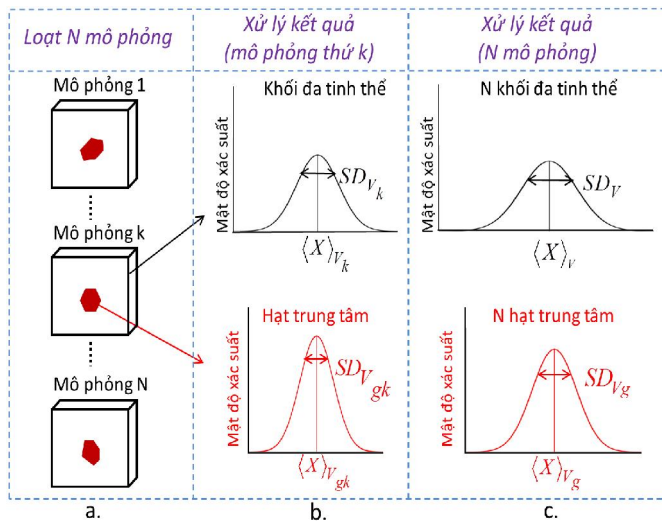
thành vết nứt và giai đoạn phát triển của vết nứt. Mặc dù đáp ứng của toàn bộ kết cấu là ở trong miền đàn hồi, biến dạng dẻo vẫn xuất hiện cục bộ tại một số hạt tinh thể ở bên trong đối với trường hợp vật liệu đa tinh thể. Các biến dạng dẻo cục bộ này xuất hiện ngày càng nhiều khi số chu kỳ tải trọng tăng dần. Chúng tồn tại dưới dạng các dải trượt. Các dải trượt này khi trở lên trên bề mặt sẽ là vị trí mà vết nứt mỏi có thể hình thành. Bài báo này tập trung vào giai đoạn hình thành vết nứt và hướng tới việc giải thích vết nứt sẽ hình thành trong hạt tinh thể nào thông qua các đặc điểm của hạt tinh thể như kích thước, hình dạng và phương tinh thể của hạt. Để đạt được điều đó, việc dự đoán trường ứng suất và biến dạng của một hạt tinh thể trên bề mặt là cần thiết. Những vị trí đầu tiên xuất hiện biến dạng dẻo, cũng là các vị trí tiềm năng xuất hiện vết nứt mỏi, là kết quả của sự phân bố không đồng đều của trường ứng suất do tính dị hướng của tinh thể và do các đặc tính của vi cấu trúc của đa tinh thể [1, 2]. Việc phân tích trường ứng suất cục bộ trong phạm vi hạt tinh thể cho phép ta xác định được các dạng vi cấu trúc cục bộ tạo điều kiện thuận lợi, cũng như hạn chế biến dạng dẻo và sự xuất hiện của vết nứt mỏi.

2. QUÁ TRÌNH MÔ PHỎNG VÀ XỬ LÝ KẾT QUẢ

2.1. Giới thiệu tổng quan về quá trình mô phỏng

Các mô phỏng được thực hiện nhằm đánh giá và phân tích sự phân bố của trường ứng suất trong các hạt tinh thể trên bề mặt và có cùng định hướng tinh thể. Hướng tinh thể được nghiên cứu là hướng của hạt nằm ở tâm của mặt tự do của khối đa tinh thể, được gọi là hạt trung tâm (hạt màu đậm thể hiện trong hình 1). Đối với mỗi khối đa tinh thể, hướng tinh thể của các hạt ngoại trừ hạt trung tâm được chọn một cách ngẫu nhiên. Mỗi khối đa tinh thể thể hiện một tập hợp khác nhau của các hạt lân cận của hạt trung tâm. Mỗi mô phỏng tương ứng với một khối đa tinh thể. Sau một loạt N mô phỏng tương ứng với N khối đa tinh thể có cùng định hướng tinh thể của hạt trung tâm (hình 1a), việc xử lý các kết quả thu được cho phép chúng ta phân tích sự phân bố của đại lượng X của mỗi mô phỏng

(hình 1b) và sau đó là của N mô phỏng (hình 1c) ở trong khối đa tinh thể cũng như ở trong hạt trung tâm.



Hình 1. Quá trình mô phỏng : a. Loại N mô phỏng với N đa tinh thể có hướng tinh thể của hạt ở giữa (màu đỏ) không thay đổi; b. Xử lý kết quả và phân tích phân bố của đại lượng X trong khối đa tinh thể (màu đen) và trong hạt trung tâm (màu đỏ) của mô phỏng thứ k ; c. Xử lý kết quả và phân tích phân bố của đại lượng X trong toàn bộ N đa tinh thể và trong toàn bộ N hạt trung tâm của loạt mô phỏng.

2.2. Các khái niệm và kí hiệu sử dụng

Với trường X được xác định trong miền thể tích V , giá trị trung bình $\langle X \rangle_V$ và phương sai $Var_V(X)$ của X trong V được xác định như sau:

$$\langle X \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V X(\bar{x}) dv$$

$$Var_V(X) = \frac{1}{V} \int_V (X(\bar{x}) - \langle X \rangle_V)^2 dv$$

Độ lệch chuẩn $SD_V(X)$ là căn bậc 2 của phương sai.

Trong mô phỏng bằng phần tử hữu hạn, trường X được xác định tại mỗi điểm tích phân i (integration point) của lưới trong miền V với n_{pi} điểm ($i = 1 \dots n_{pi}$). Do đó giá trị trung bình và độ lệch chuẩn của X được tính như sau:

$$\langle X \rangle_V = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_{pi}} X_i \Delta v_i$$

$$SD_V(X) = \sqrt{\frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_{pi}} (X_i - \langle X \rangle_V)^2 \Delta v_i}$$

Với X_i là giá trị của đại lượng X tại điểm i có thể tích Δv_i . Thể tích của miền V là tổng thể tích của n_{pi} điểm.

2.3. Xử lý kết quả mô phỏng

Quá trình xử lý kết quả của N mô phỏng được minh họa trong hình 1. Ban đầu, các kết quả được xử lý với từng mô phỏng k . Sau đó, giá trị trung bình và độ lệch chuẩn của trường X trong N mô phỏng sẽ được tính toán.

Đối với mỗi mô phỏng k , giá trị của trường X được xuất ra tại tất cả các điểm tích phân trong khối đa tinh thể cũng

như trong hạt trung tâm. Phân bố của trường X trong khối đa tinh thể và trong hạt trung tâm có thể được thể hiện dưới dạng biểu đồ mật độ xác suất trong hình 1. Với V_k và V_{gk} lần lượt là thể tích của khối đa tinh thể và của hạt trung tâm của mô phỏng k , ta có:

- Giá trị trung bình $\langle X \rangle_{V_k}$ và độ lệch chuẩn $SD_{V_k}(X)$ của trường X trong khối đa tinh thể có thể tích V_k .
- Giá trị trung bình $\langle X \rangle_{V_{gk}}$ và độ lệch chuẩn $SD_{V_{gk}}(X)$ của trường X trong hạt trung tâm có thể tích V_{gk} .

Tổng hợp các kết quả nhận được từ N mô phỏng, ta có thể biểu diễn phân bố của trường X trong N khối đa tinh thể có thể tích V và trong N hạt trung tâm có thể tích V_g , trong đó:

$$V = \sum_{k=1}^N V_k \quad \text{và} \quad V_g = \sum_{k=1}^N V_{gk}$$

Các giá trị trung bình ($\langle X \rangle_V$ và $\langle X \rangle_{V_g}$) và độ lệch chuẩn ($SD_V(X)$ và $SD_{V_g}(X)$) của trường X trong N khối đa tinh thể và trong N hạt trung tâm (thu được từ N mô phỏng) cũng lần lượt được tính toán. Các độ lệch chuẩn có thể được phân chia làm hai thành phần. Thành phần thứ nhất thể hiện độ sai lệch của trường X trong mỗi khối đa tinh thể, tương ứng với 1 mô phỏng, được gọi là độ lệch nội lớp (intra-class). Thành phần thứ hai thể hiện độ sai lệch của trường X giữa các khối đa tinh thể khác nhau, được gọi là độ lệch liên lớp (inter-class). Từ đó ta có định nghĩa phương sai nội lớp là trung bình các phương sai của mỗi mô phỏng. Ví dụ đối với N khối đa tinh thể, phương sai và độ lệch chuẩn nội lớp được tính như sau:

$$Var_V^{intra}(X) = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N Var_{V_k}(X) V_k$$

$$\Rightarrow SD_V^{intra}(X) = \sqrt{Var_V^{intra}(X)}$$

Phương sai liên lớp là phương sai của các giá trị trung bình nhận được từ mỗi mô phỏng:

$$Var_V^{inter}(X) = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N (\langle X \rangle_{V_k} - \langle X \rangle_V)^2 V_k$$

$$\Rightarrow SD_V^{inter}(X) = \sqrt{Var_V^{inter}(X)}$$

Ta chứng minh được rằng phương sai tổng thể sẽ là tổng của phương sai nội lớp và phương sai liên lớp. Biểu diễn dưới dạng độ lệch chuẩn ta có:

$$SD_V(X) = \sqrt{(SD_V^{intra}(X))^2 + (SD_V^{inter}(X))^2}$$

Các tính toán bổ trợ đã được thực hiện để lựa chọn số mô phỏng trong một loạt mô phỏng là 140. Số lần mô phỏng này đảm bảo sự hội tụ của kết quả và tiết kiệm thời gian mô phỏng. Trong bài báo này, đại lượng X được phân tích bao gồm ứng suất dọc trục theo phương kéo và ứng suất tiếp trên các mặt trượt (thông qua hệ số Schmid).

3. CÁC THÔNG SỐ CỦA BÀI TOÁN

3.1. Các hằng số của vật liệu

Ứng suất đàn hồi tuyến tính của 316L được mô tả thông qua ba hằng số độc lập C_{11} , C_{12} và C_{44} trong ma trận độ cứng (các giá trị này được xác định trong Bảng 1):

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}$$

Bảng 1. Các hằng số độc lập của vật liệu [4]

C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
198	125	122

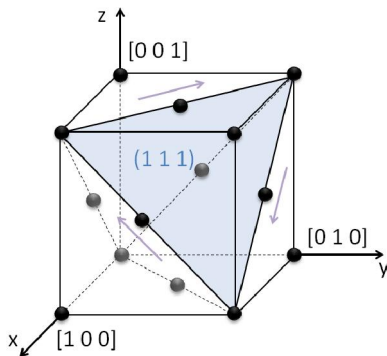
Mô đun đàn hồi E_t của một đơn tinh thể chịu kéo nén đơn giản theo phương t được tính theo công thức:

$$1/E_t = S_{ijkl} t_i t_j t_k t_l$$

Các thành phần S_{ijkl} của ten xơ độ mềm được tính toán từ các hằng số C_{ij} được cho trong bảng 1.

3.2. Hệ số Schmid danh nghĩa

Đối với thép không gỉ 316L có kiểu mạng tinh thể FCC, cơ chế của biến dạng dẻo chủ yếu là do sự trượt của các khuyết tật trên 12 hệ trượt $\{111\} \langle 110 \rangle$ (hình 2).



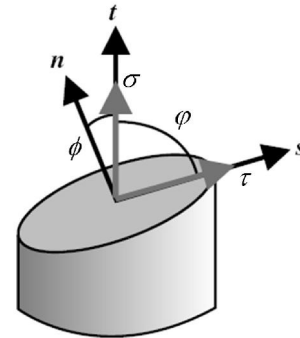
Hình 2. Minh họa hệ trượt trong kiểu mạng FCC

Sự xuất hiện của biến dạng dẻo được dự đoán nhờ vào định luật Schmid, theo đó sẽ không có biến dạng dẻo (hay sự trượt) trên hệ trượt α nếu giá trị của ứng suất tiếp trên mặt đó τ^α nhỏ hơn giá trị của ứng suất tiếp tới hạn τ_c . Trong trường hợp đơn tinh thể chịu kéo đơn giản (hình 3), hệ số Schmid được định nghĩa trên mặt trượt α bởi tỷ số giữa ứng suất tiếp và ứng suất kéo (giá trị này được gọi là hệ số Schmid danh nghĩa để phân biệt với hệ số Schmid hiệu dụng được định nghĩa trong phần sau):

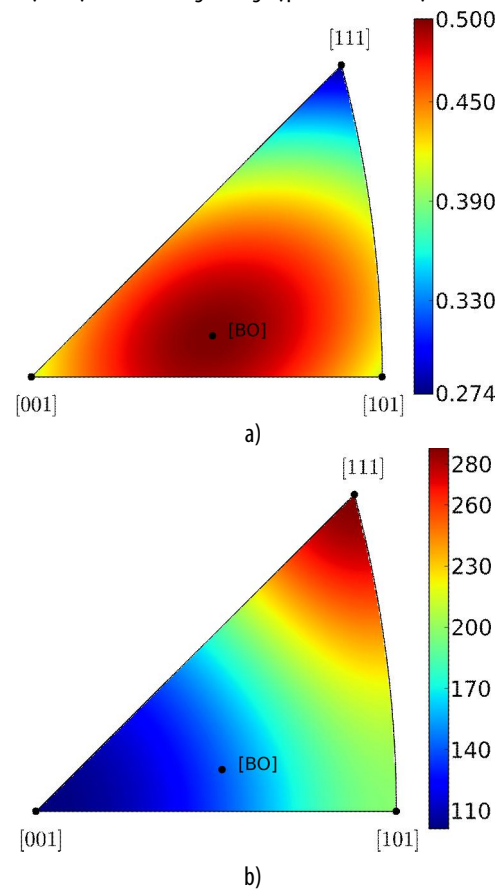
$$\mu^\alpha = \frac{\tau^\alpha}{\sigma} = (t_i n_i^\alpha)(t_j s_j^\alpha) = \cos \phi \cos \varphi$$

Trong đó, σ là ứng suất kéo với hướng được xác định bởi véc tơ đơn vị \vec{t} ($\sigma_{ij} = \sigma t_i t_j$). Hệ số Schmid μ sẽ là giá trị lớn nhất trong số 12 hệ trượt: $\mu = \max_\alpha(\mu^\alpha)$. Các đường đẳng

giá trị của hệ số Schmid μ và mô đun đàn hồi E_t của các hướng tinh thể có thể được biểu diễn trong tam giác chuẩn như trong hình 4.



Hình 3. Định luật Schmid trong trường hợp đơn tinh thể chịu kéo đơn giản [5]



Hình 4. Đường đẳng trị trong tam giác chuẩn a) hệ số Schmid; b) mô đun đàn hồi (GPa)

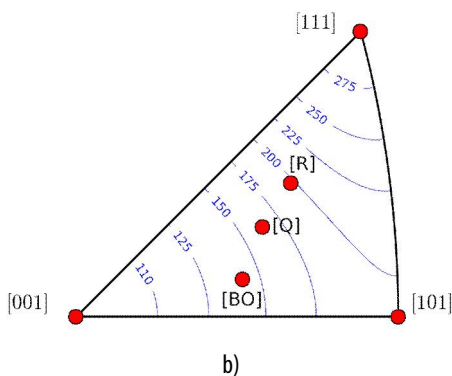
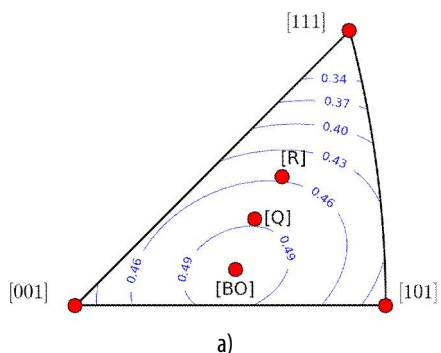
3.3. Hệ số Schmid hiệu dụng

Trong trường hợp của đơn tinh thể được trình bày ở trên, việc tính toán hệ số Schmid dựa trên giả thiết rằng ứng suất kéo trong đơn tinh thể là đồng nhất. Tuy nhiên, đối với đa tinh thể, do sự định hướng khác nhau của các tinh thể nên ứng suất sẽ khác nhau giữa các tinh thể. Trong trường hợp này, hệ số Schmid của 1 tinh thể được định nghĩa là tỷ số giữa ứng suất tiếp trên mặt trượt và ứng suất kéo tổng thể được xác định trên toàn khối đa tinh thể. Giá trị này được gọi là hệ số Schmid hiệu dụng:

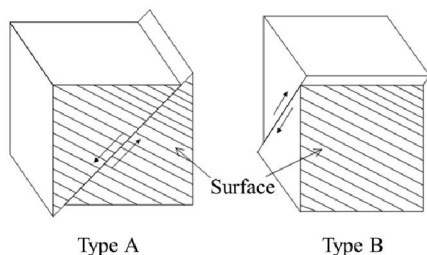
$$\mu_{eff}^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\langle \sigma_{11} \rangle_V}$$

3.4. Hướng tinh thể của hạt trung tâm

Trong nghiên cứu này, một số hướng tinh thể đặc biệt đã được lựa chọn. Chúng được thể hiện bằng các chấm đỏ trong tam giác chuẩn (hình 5). Ba hướng đầu tiên nằm ở 3 đỉnh của tam giác chuẩn tương ứng với các hướng tinh thể [100], [110] và [111]. Hướng [B.O.] là hướng có hệ số Schmid danh nghĩa lớn nhất ($\mu = 0,5$). Nói cách khác, các đơn tinh thể có định hướng [B.O.] sẽ dễ xảy ra sự trượt nhất. [R.] là hướng có tỷ số giữa hệ số Schmid danh nghĩa lớn thứ 2 và lớn nhất (trong số 12 hệ số Schmid trên 12 hệ trượt đang xét) đạt giá trị nhỏ nhất. [Q.] là hướng được chọn bất kỳ trong vùng giữa của tam giác chuẩn. Với hai hướng tinh thể [B.O.] và [R.], ta phân biệt hướng tinh thể loại A và loại B (hình 6). Một hướng tinh thể được gọi là loại A (type A) nếu khi xảy ra sự trượt, các dải trượt không trôi lên trên bề mặt. Khi phương trượt tạo với pháp tuyến của mặt tự do góc 45 độ, ta gọi đó là hướng tinh thể loại B (type B).



Hình 5. Các hướng tinh thể được nghiên cứu thể hiện trong tam giác chuẩn với các đường đẳng trị của a) hệ số Schmid; b) mô đun đàn hồi (GPa)



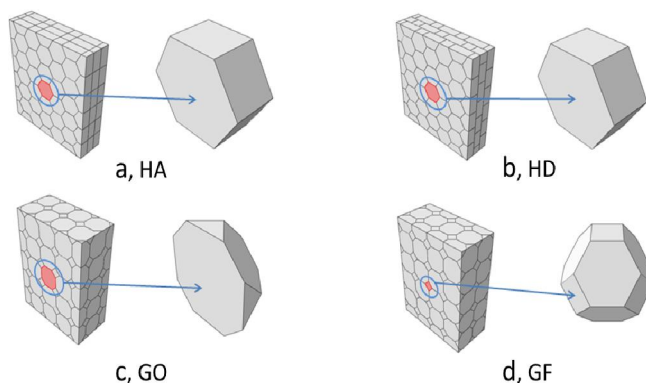
Hình 6. Hệ trượt loại A (type A) và loại B (type B)

3.5. Các dạng đa tinh thể được sử dụng

Để tập trung vào nghiên cứu ảnh hưởng của các hướng tinh thể, hình dạng các hạt trong đa tinh thể đã được đơn giản hóa. Hình 7 minh họa 4 kiểu đa tinh thể được sử dụng trong nghiên cứu này:

- Khối đa tinh thể với các hạt lăng trụ lục giác được xếp thẳng (HA).
- Khối đa tinh thể với các hạt lăng trụ lục giác được xếp lệch (HD).
- Khối đa tinh thể với các hạt bát diện bị cắt đi 6 đỉnh trong đó hạt trung tâm là 1 nửa của khối bát diện bị cắt đỉnh (GO).
- Khối đa tinh thể với các hạt bát diện bị cắt đi 6 đỉnh trong đó hạt trung tâm là toàn bộ khối bát diện bị cắt đỉnh (GF).

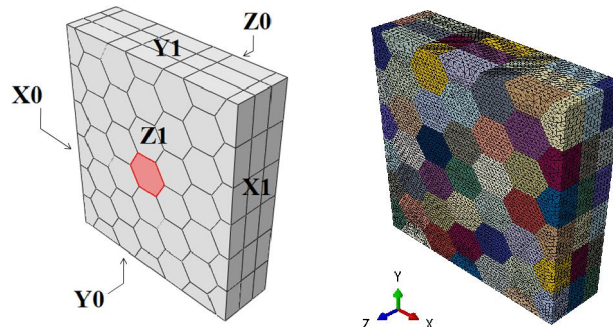
Tỷ số diện tích bề mặt chia chiều sâu trong trường hợp hạt HA và GO là xấp xỉ nhau (khoảng 35). Tỷ số này là 2,5 đối với hạt GF.



Hình 7. Các dạng đa tinh thể được sử dụng

3.6. Điều kiện biên

Khối đa tinh thể được dùng trong tính toán của nghiên cứu này là 1 phần thể tích trên bề mặt của mẫu vật liệu chịu kéo nên các điều kiện biên được áp đặt vào mô hình sao cho ta thu được một mặt tự do trên mô hình (mặt Z1 với hạt trung tâm là hạt được tô đậm) và trạng thái ứng suất tổng thể là trạng thái kéo dọc trục theo phương X (hình 8). Tải được đặt vào mặt X1 tương ứng với biến dạng 0,1% theo phương X. Tải trọng này tương ứng với đáp ứng ở trong miền đàn hồi của mô hình.



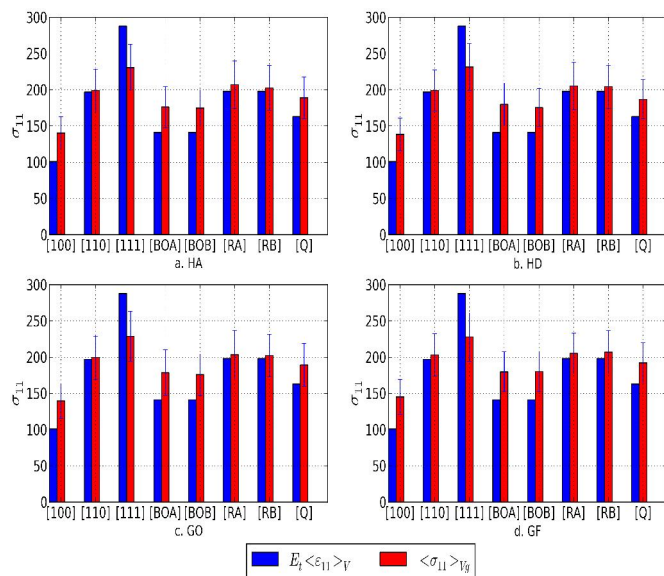
Hình 8. Kí hiệu các mặt để đặt điều kiện biên

4. KẾT QUẢ

Các kết quả được phân tích dưới đây thu được từ 32 loạt mô phỏng (8 hướng tinh thể và 4 dạng mô hình đa tinh thể), mỗi loạt mô phỏng gồm 140 mô phỏng tương ứng với 140 vi cấu trúc khác nhau của cùng 1 hạt trung tâm (hướng tinh thể của hạt trung tâm không đổi). Giá trị của các đại lượng (ứng suất dọc trục và hệ số Schmid) được phân tích thống kê là giá trị trung bình thu được từ 140 “mẫu” (140 vi cấu trúc).

4.1. Ứng suất dọc trục

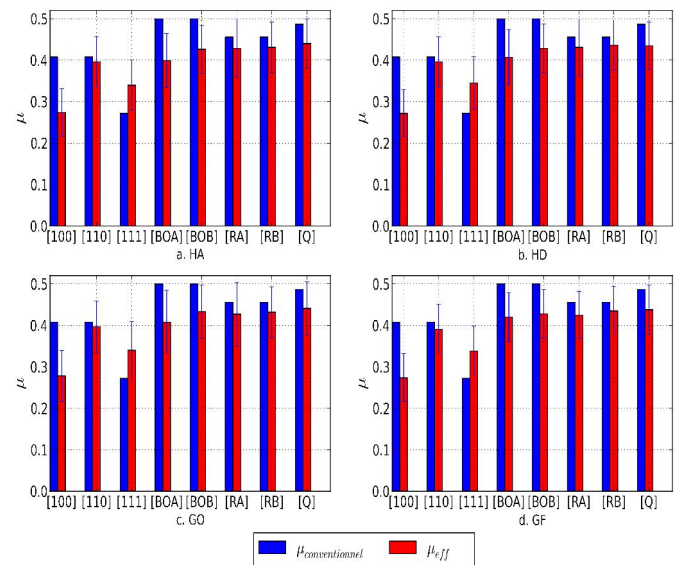
Giá trị trung bình $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ và sai lệch tổng thể của ứng suất dọc trục trong hạt trung tâm với 8 hướng tinh thể và 4 kiểu hạt được thể hiện trong biểu đồ hình 9. Biểu đồ này cho ta thấy rằng định hướng tinh thể ảnh hưởng mạnh nhất tới ứng suất dọc trục trong hạt trung tâm. Ảnh hưởng của 4 kiểu hạt là không đáng kể. Ngoài ra, ta thấy rằng độ lệch chuẩn gần như không phụ thuộc vào phương tinh thể cũng như kiểu hạt. Ứng suất dọc trục trung bình $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ thay đổi từ 140 MPa đối với hướng [100] đến 230 MPa đối với hướng [111]. Độ lệch của hai giá trị này bằng 45% của ứng suất dọc trục trong khối đa tinh thể $\langle \sigma_{11} \rangle_V$, điều này cho thấy sự thay đổi lớn của ứng suất giữa các hạt trung tâm có hướng tinh thể khác nhau. Giá trị ứng suất thu được tỷ lệ với mô đun đàn hồi E_t của hạt tinh thể với định hướng tương ứng. Mô đun đàn hồi của các tinh thể được thể hiện gián tiếp thông qua các cột màu xanh trong hình 9. Việc phân tích các giá trị độ lệch cho thấy độ lệch nội hạt luôn lớn hơn độ lệch liên hạt. Thật vậy, độ lệch nội hạt thay đổi trong khoảng từ 11-13% của ứng suất dọc trục trung bình trong khi độ lệch liên hạt là từ 8-10%.



Hình 9. Ứng suất trung bình $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ (cột màu nhạt) và độ lệch chuẩn tổng thể $SD_{Vg}(\sigma_{11})$. (đoạn thẳng màu đậm) (MPa) được tính trong 140 hạt trung tâm của 32 loạt mô phỏng (8 hướng tinh thể và 4 dạng mô hình đa tinh thể). Độ dài của đoạn thẳng màu đậm tương ứng với 2 lần độ lệch chuẩn tổng thể

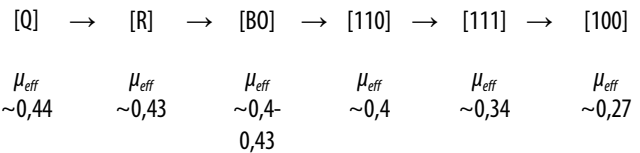
4.2. Hệ số Schmid

Hình 10 thể hiện giá trị của hệ số Schmid hiệu dụng μ_{eff} (cột màu nhạt) và độ lệch chuẩn tổng thể tương ứng. Tương tự với kết quả của ứng suất dọc trục, hệ số Schmid hiệu dụng phụ thuộc chủ yếu vào định hướng tinh thể, ít phụ thuộc vào kiểu hạt. Đối với hướng tinh thể [100], giá trị của μ_{eff} là nhỏ nhất do ứng suất dọc trục thu được trong trường hợp này là nhỏ nhất. Đây là hướng có sự giảm nhiều nhất của hệ số Schmid so với hệ số Schmid danh nghĩa. Ngược lại, hướng tinh thể [111] có sự tăng của hệ số Schmid. Ảnh hưởng của kiểu hạt tới giá trị trung bình của hệ số Schmid hiệu dụng và độ lệch của nó là không đáng kể.



Hình 10. Hệ số Schmid quy ước (cột màu đậm), Hệ số Schmid hiệu dụng (cột màu nhạt) và độ lệch chuẩn tổng thể (đoạn thẳng màu đậm) đối với 8 hướng tinh thể và 4 dạng mô hình đa tinh thể

Ta thấy rằng, đối với các hướng nằm ở vùng tâm của tam giác chuẩn: [B.O.], [R.] và [Q.], khoảng biến thiên của hệ số Schmid hiệu dụng (trong khoảng từ 0,426 đến 0,44 ngoại trừ hướng [B.O.A.]) là nhỏ hơn so với khoảng biến thiên của hệ số Schmid danh nghĩa (trong khoảng từ 0,456 đến 0,5). Điều này có nghĩa rằng có một sự đồng đều hóa của ứng suất gây trượt đối với các hướng tinh thể này. Dựa vào giá trị của hệ số Schmid hiệu dụng, trình tự xảy ra trượt sẽ như sau (từ sớm đến muộn):



Trình tự này khác hoàn toàn với trình tự xảy ra trượt đối với đơn tinh thể được dự đoán dựa trên hệ số Schmid quy ước.

Để so sánh, bảng 2 nhắc lại các kết quả thu được bởi Sauzay [6]. Ta thấy có sự tương đồng về kết quả thu được tuy nhiên các giá trị nhận được không hoàn toàn giống nhau. Sự khác biệt này có thể đến từ sự khác nhau của các

thông số được sử dụng trong tính toán: khác nhau về số mô phỏng với một hướng tinh thể, khác nhau về mô hình được sử dụng trong mô phỏng.

Bảng 2. So sánh với kết quả nghiên cứu đã được công bố

Hướng tinh thể	[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]
μ_{eff}	0,274	0,396	0,340	0,399	0,426
Meff – M. Sauzay	0,27	0,36	0,31	0,43	0,43

5. KẾT LUẬN

Việc áp dụng quy trình tính toán được trình bày trong phần 2 vào vật liệu có kiểu mạng CFC cho phép ta xác định được sự phân bố của ứng suất trong khối đa tinh thể cũng như trong hạt trung tâm và sự phân bố của ứng suất tiếp trên các hệ trượt trong hạt trung tâm. Một cách khái quát, ta thấy rằng các giá trị ứng suất và hệ số Schmid hiệu dụng ít chịu ảnh hưởng của dạng hình học của hạt trung tâm. Chúng chịu ảnh hưởng chủ yếu của định hướng tinh thể của hạt. Các kết quả thu được trong nghiên cứu này là cơ sở quan trọng để tiếp tục nghiên cứu đáp ứng của vật liệu khi tính đến cả sự xuất hiện của biến dạng dẻo và xa hơn nữa là việc giải bài toán với tải trọng chu kỳ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. M. Sauzay et T. Jourdan, 2006. *Polycrystalline microstructure, cubic elasticity, and nucleation of high-cycle fatigue cracks*. International Journal Fracture, vol. 141, p. 431-446.
- [2]. R. Brenner, R. A. Lebensohn, and O. Castelnau, 2009. *Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals*. International Journal of Solids and Structures, vol. 46, p. 3018-3026.
- [3]. Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J.-M. Stéphan, et G. Cailletaud, 2010. *Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals*. International Journal of Fatigue, vol. 32, p. 1748-1763.
- [4]. H.B. Huntington, 1958. *The elastic constants of crystals*. Solid State Physics, vol. 7, p. 214-351.
- [5]. F. Dunne, N. Petrinic, 2005. *Introduction to Computational Plasticity*. OUP Oxford.
- [6]. M. Sauzay, 2007. *Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystals*. Acta Materialia, vol. 55, p. 1193-1202.