

PHÂN TÍCH GIỚI HẠN HỘI TỤ VÀ LÝ GIẢI NGUYÊN NHÂN VIỆC KHÔNG HỘI TỤ CỦA PHƯƠNG PHÁP NEWTON KHI ÁP DỤNG TÍNH TOÁN CHO MÔ HÌNH THÉP TINH THỂ

TS. NGUYỄN CẦN NGÔN
 Trường Đại học Vinh

Tóm tắt: Bài báo tập trung phân tích giới hạn hội tụ và lý giải nguyên nhân việc không hội tụ của phương pháp Newton khi áp dụng tính toán cho mô hình thép tinh thể. Bài báo lần lượt trình bày: vấn đề gặp phải, mô hình thép tinh thể, giải thích cùng các minh họa cho việc không hội tụ.

Từ khóa: tích phân số Newton, mô hình thép tinh thể, tính hội tụ, tính phân kỳ, thép bainite.

1. Đặt vấn đề

Phương pháp tích phân Newton được sử dụng rộng rãi [1-6], và có mặt trong hầu hết các tính toán tích phân. Tính hội tụ của phương pháp này ở mỗi mô hình phụ thuộc rất nhiều vào bản chất của từng

phương trình tạo thành mô hình đó. Việc nghiên cứu sự hội tụ của phương pháp Newton cụ thể cho từng mô hình giúp cho việc chọn các điều kiện khống chế được chính xác, thuận lợi. Điều này đặc biệt có ý nghĩa lớn cho các mô hình được sử dụng nhiều lần có tính kế thừa cao và các mô hình đòi hỏi khả năng tính toán lớn [1].

Sau khi đưa mô hình thép tinh thể (trình bày ở Mục 2 dưới đây) vào trong chương trình tính toán ZéBuLon [7] bằng phương pháp tích phân không tường minh Newton. Mô hình được kiểm tra mức độ hội tụ bằng cách tính toán trên một điểm Gauss. Tham số của vật liệu cho ở bảng 1, điều kiện gia tải cho ở bảng 2.

Bảng 1. Tham số của vật liệu

C11(GPa)	C12(GPa)	C44(GPa)	$\dot{\gamma}_0$ (s ⁻¹)	d (μm)	b (m)	a_{su}	ρ (m ⁻²)
275,2	112,4	81,4	10 ⁶	2,5	2,514x10 ⁻¹⁰	0,25	10 ¹⁴
K	g_c	τ_0 (MPa)	τ_R (MPa)	ΔG_0 (eV)	T (°K)	P	q
22,9	8x10 ⁻³⁸	132	498	0,77	298	0,335	1,12

Bảng 2. Điều kiện gia tải lên điểm Gauss

Thời gian (s)	σ 11 (MPa)	σ 22 (MPa)	σ 12 (MPa)	σ 23 (MPa)	σ 31 (MPa)	eto33
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2

Chương trình tính toán cho thấy quá trình tính toán sẽ không còn hội tụ khi số bước tính nhỏ hơn 34 khi coi tinh thể thép chỉ có 12 mặt trượt và nhỏ hơn 314 khi coi tinh thể thép có 24 mặt trượt.

2. Mô hình thép tinh thể

Mô hình thép tinh thể được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu sự hình thành, phân bố, phát triển và cơ

chế ngăn cản các vi nứt thông qua việc nghiên cứu mối liên hệ giữa mật độ khuyết tật tinh thể với trường ứng suất, biến dạng ở cấp độ vi mô [1,3,5,6]. Chúng ta nhắc lại ở đây các phương trình của mô hình cùng với ý nghĩa vật lý của các tham số.

Quy luật chảy dẻo:

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b T}\right] \text{sign}(\tau_s) = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T} \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] \text{sign}(\tau_s)$$

Quy luật cứng nguội:

$$\tau_{int} = \frac{(\alpha\mu b)^2 \rho}{\tau^s - \tau_0} \quad \tau_{eff}^s = \tau^s - \tau_0 - \tau_{int}^s = \tau^s - \tau_0 - \frac{(\alpha\mu b)^2 \rho}{\tau^s - \tau_0}$$

Quy luật biến đổi mật độ khuyết tật tinh thể:

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s \neq u} \rho^u}}{K(T)} - g_c(T) \rho^s \right),$$

trong đó:

ΔG - năng lượng kích hoạt tách đúp; k_B - hằng số Boltmann; T - nhiệt độ tuyệt đối; τ_{eff} - ứng suất cắt tác dụng trực tiếp lên khuyết tật; τ_R - ứng suất tuyệt đối để dịch chuyển hàng khuyết tật ở nhiệt độ 0 K; p, q - hai tham số xác định hình dạng của năng lượng kích hoạt; $\dot{\gamma}_0$ - vận tốc trượt ở chế độ không phụ thuộc nhiệt độ; τ_{int} - chuyển động của khuyết tật tinh thể bị cản trở bởi một rừng các khuyết tật tinh thể khác; τ_0 - tính tới vai trò của hợp chất các bon, các chất kết tủa và vùng biên hạt cản trở chuyển động khuyết tật tinh thể; τ_s - hình chiếu ứng suất cắt lên mặt phẳng trượt; ρ^s - mật độ khuyết tật tinh thể của mặt trượt s ; a_{us} - hệ số ảnh hưởng lẫn nhau

giữa hai hệ thống trượt u và s ; μ - module cắt; b - vector Burgers; $\sqrt{\sum_{s \neq u} \rho^u}$ - khoảng cách trung bình giữa các khuyết tật cắt qua mặt phẳng trượt s ; D_{grain} - kích thước trung bình hạt; $K(T)$ - hệ số đặc trưng cho tính hiệu quả giữ khuyết tật tinh thể; $g_c(T)$ - hệ số đặc trưng cho tính hiệu quả trong phá hủy lẫn nhau giữa các khuyết tật cùng hệ thống trượt.

3. Lý giải nguyên nhân và minh họa

Để có thể minh họa sự hoạt động của phương pháp tích phân, chúng ta nhắc lại ở đây hệ phương trình vector phần dư cùng với một số đơn giản hóa nhằm có thể đưa hệ đa chiều với 54 ẩn thành hệ 1 ẩn.

$$\begin{cases} \mathfrak{R}_e = \Delta \underline{\varepsilon}^e - \Delta \underline{\varepsilon}^t - \sum_s \Delta \gamma^s \underline{m}^s \text{signe}(\tau_s^s) \\ \mathfrak{R}_\gamma = \Delta \gamma^s - \dot{\gamma}_0 \exp \left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T} \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}^s (\underline{\varepsilon}^e + \theta \Delta \underline{\varepsilon}^e)}{\tau_R} \right)^p \right)^q \right] \text{sign}(\tau_s) \Delta t \\ \mathfrak{R}_r = \Delta r^s - \left| \Delta \gamma^s \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s \neq u} (r_t^u + \Delta \theta r_t^u)}}{K(T)} - \frac{g_c(T)}{b} (r_t^u + \Delta \theta r_t^u) \right) \right| \end{cases} \quad (1)$$

3.1 Nguyên nhân thứ nhất

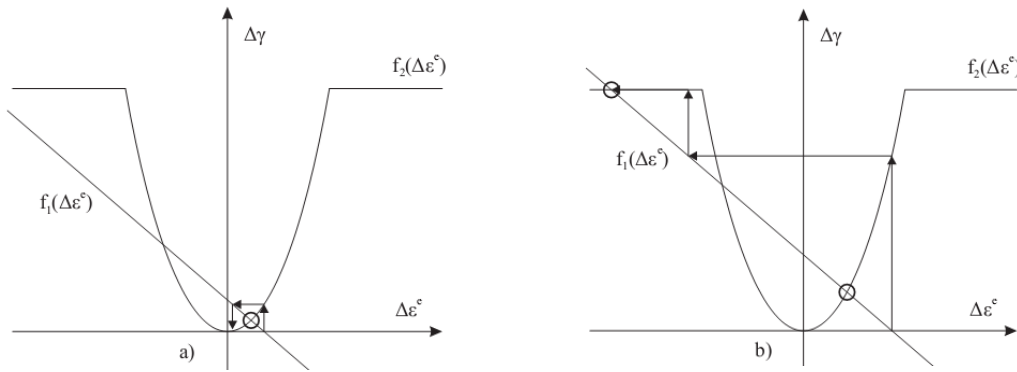
Chúng ta xem xét khi xuất hiện bước tính biến dạng dẻo đầu tiên, tại đó chúng ta giả sử rằng chỉ có một mặt phẳng trượt xuất hiện. Trong trường hợp này, tất cả các thành phần trong biến dạng dẻo là cân xứng và việc xem xét hệ thống được giới hạn thành:

$$\begin{cases} \Delta \varepsilon_{11}^e = \Delta \varepsilon_{11}^t - \Delta \gamma^s m_{11}^s \\ \Delta \gamma^s = \dot{\gamma}_0 \exp \left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T} \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}^s (\underline{\varepsilon}^e + \theta \Delta \underline{\varepsilon}^e)}{\tau_R} \right)^p \right)^q \right] \Delta t \quad ; \frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R} < 1 \\ \Delta \gamma^s = \dot{\gamma}_0 \cdot \Delta t \quad ; \frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R} \geq 1 \end{cases} \quad (2)$$

Giả sử rằng $\Delta \underline{\varepsilon}^e = \Delta \varepsilon_{11}^e$ chúng ta có mối liên hệ giữa hai phương trình trên thông qua hàm chung của $\Delta \underline{\varepsilon}^e$:

$$\begin{cases} f_1(\Delta \underline{\varepsilon}^e) = \Delta \gamma^s m_{11}^s = \Delta \varepsilon_{11}^t - \Delta \varepsilon_{11}^e \\ f_2(\Delta \underline{\varepsilon}^e) = \Delta \gamma^s m_{11}^s = \begin{cases} \dot{\gamma}_0 \exp \left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T} \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}^s (\underline{\varepsilon}^e + \theta \Delta \underline{\varepsilon}^e)}{\tau_R} \right)^p \right)^q \right] \Delta t & ; \frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R} < 1 \\ \dot{\gamma}_0 \cdot \Delta t & ; \frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R} \geq 1 \end{cases} \end{cases} \quad (3)$$

Giao của đồ thị hai hàm số chính là nghiệm của hệ. Ở đây giá trị ban đầu của thuật toán Newton gồm: $\Delta \underline{\varepsilon}^e = \Delta \varepsilon^t$ và $\Delta \gamma = 0$. Như chúng ta thấy trên minh họa ở hình 1. Khi bước chia nhỏ, thuật toán Newton hội tụ về nghiệm mong đợi, khi bước chia lớn hơn và vượt quá giới hạn, thuật toán Newton sẽ cho nghiệm không thực tế.



Hình 1. Thuật toán Newton hội tụ về nghiệm mong đợi khi bước chia nhỏ và cho nghiệm không thực tế với bước chia lớn

3.2 Nguyên nhân thứ hai

Nguyên nhân thứ hai đến từ phương trình biến đổi mật độ khuyết tật tinh thể (Phương trình thứ ba của

hệ (1):

$$\Delta r_t^s = \left| \Delta \gamma^s \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s \neq u} (r_t^u + \Delta \theta r_t^u)}}{K(T)} - \frac{g_c(T)}{b} (r_t^u + \Delta \theta r_t^u) \right) \right| \quad (4)$$

Lúc bắt đầu xảy ra trượt, với hướng có tính đối xứng cao chẳng hạn như hướng (001), sẽ có bốn mặt trượt hoạt động, còn các mặt trượt còn lại sẽ không xảy ra vì bị ngăn cản bởi hệ số tương tác

trong quy luật cứng nguội. Khi gia tải bằng bước nhảy lớn, giá trị Δr^s có thể lớn hơn rất nhiều so với giá trị ban đầu của r^s . Do vậy (4) có thể được viết lại như sau:

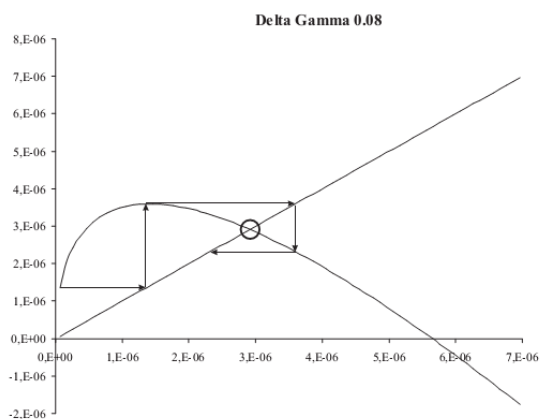
$$\Delta r_t^s = \left| \Delta \gamma_t^s \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{3 \Delta r_t^s}}{K(T)} - \frac{g_c(T)}{b} \Delta r_t^s \right) \right|_{t+\theta t} \quad (5)$$

Nghiệm của phương trình trên cũng là nghiệm của hệ sau:

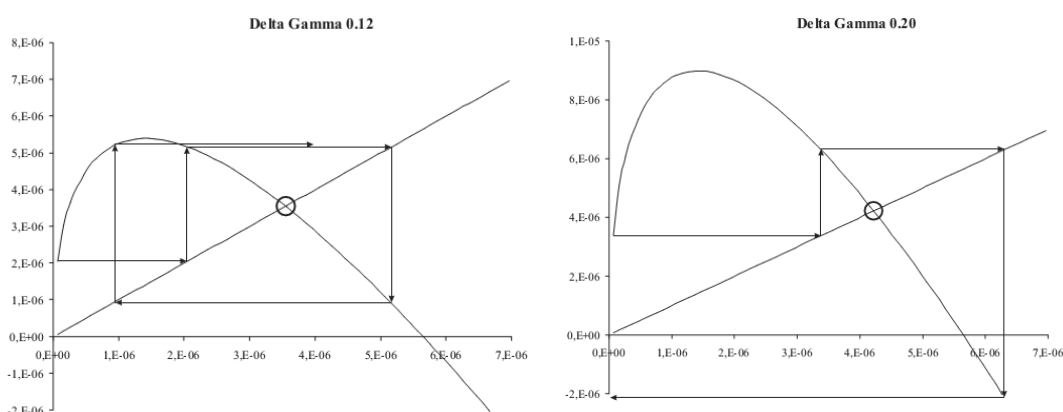
$$\begin{cases} f_1(\Delta r_t^s) = \left| \Delta \gamma_t^s \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{3 \Delta r_t^s}}{K(T)} - \frac{g_c(T)}{b} \Delta r_t^s \right) \right|_{t+\theta t} \\ f_2(\Delta r_t^s) = \Delta r_t^s \end{cases} \quad (6)$$

Do đó, giao đồ thị của hai hàm sẽ là nghiệm của hệ. Đồ thị được vẽ với các giá trị khác nhau của γ .

Quá trình tìm nghiệm theo phương pháp Newton bắt đầu với: $f_2(\Delta r_t^s) = 0$ và $f_1(\Delta r_t^s) = \left| \Delta \gamma_t^s \right| \frac{b}{D_{grain}}$



Hình 2. Quá trình tìm nghiệm hội tụ khi $\Delta\gamma$ bé



Hình 3. Quá trình tìm nghiệm không còn hội tụ khi $\Delta\gamma$ lớn

4. Kết luận

Bài báo cung cấp một góc nhìn sâu hơn quá trình sử dụng thuật toán Newton trong việc tìm nghiệm cho mô hình thép tinh thể. Bài báo cũng cho thấy khi sử dụng phương pháp này việc lựa chọn số bước chia tải phải được chọn đủ nhỏ để quá trình tìm nghiệm hội tụ. Điều này đặc biệt nhạy cảm và cần chú trọng thích đáng khi sử dụng mô hình vật liệu phức tạp, với số bậc tự do lên đến hàng triệu, tài nguyên sử dụng cho tính toán lên đến 120Gb RAM, thời gian tới vài tháng [1].

Việc so sánh với các mô hình vật liệu tinh thể khác đã có sẵn cho thấy đây là một vấn đề chung khi tính toán số, điều này đòi hỏi phải không chế số bước tính tối thiểu khi thực hiện tính toán. Cũng với tính toán kéo đơn giản đến 20% tại một điểm Gauss với mô hình mà Abrivard sử dụng trong [2] cần ít nhất 282 bước chia. Vấn đề bước chia tối thiểu cũng đã được đề cập tới ở [3,4].

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyen, C.N. (2010). Modélisation du comportement en plasticité et à rupture des aciers bainitiques

irradiés. *PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.*

- [2] Abrivard, G. (2007). Approche multiéchelle pour la prédiction de la recristallisation des alliages métalliques à partir d'une approche micro-mécanique. *PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.*
- [3] Musienko, A. (2005). Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement. *PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.*
- [4] Kalidindi, S. and Anand, L. (1994). Macroscopic shape change and evolution of crystallographic texture in pre-textured fcc metals. *Mechanics and Physics of Solids, 42 :459–490.*
- [5] Libert, M. (2007). Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés. *PhD thesis, Ecole Centrale Paris.*
- [6] Osipov, N. (2007). Génération et calcul de microstructures bainitiques, approche locale intragranulaire de la rupture. *PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.*
- [7] <http://www.zset-software.com/products/zebulon/>.

Ngày nhận bài: 23/7/2016

Ngày nhận bài sửa lần cuối: 04/01/2017.