



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Μηχανικής Υλικών & Κατεργασιών

*Η ΜΕΘΟΔΟΣ FFT ΓΙΑ ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ ΜΕ
ΤΥΧΑΙΕΣ ΜΙΚΡΟΔΟΜΕΣ*

Διπλωματική Εργασία
Χαράλαμπος Χ. Σιδερής

Επιβλέπων Καθηγητής: Αγόρας Μιχάλης - Επίκουρος Καθηγητής Τ.Μ.Μ.

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των
απαιτήσεων για την απόκτηση του
Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού

Ιούλιος 2021, Βόλος

©2021 Σιδερίης Χαράλαμπος

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ.202 παρ.2)

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής
(Επιβλέπων)

Αγόρας Μιχάλης
Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα
Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής

Αράβας Νικόλαος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων
Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής

Καραμάνος Σπύρος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων
Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Περίληψη

Μείζον Πρόβλημα στη Μηχανική των Σύνθετων Υλικών αποτελεί ο προσδιορισμός της σχέσης μεταξύ των μακροσκοπικών τάσεων και παραμορφώσεων ενός σύνθετου υλικού, το γνωστό και ως Πρόβλημα της Ομογενοποίησης των Σύνθετων Υλικών. Η σπουδαιότητα της ανάλυσης και της επίλυσης του προβλήματος αυτού έγκειται στη βελτιστοποίηση των ιδιοτήτων ενός υπάρχοντος σύνθετου υλικού ή ακόμα και στο σχεδιασμό νέων υλικών με επιθυμητές ιδιότητες. Παραδείγματα σύνθετων υλικών τα οποία χρησιμοποιούνται συχνά στις εφαρμογές είναι διάφορα πολυμερή υλικά οπλισμένα με ανθρακονύματα ή υαλονύματα, σχετικά ελαφρά και μαλακά μέταλλα ενισχυμένα με σκληρότερα σωματίδια, πολυκρυσταλλικά υλικά όπως τα μέταλλα και τα κράματά τους, κράματα με μνήμη μορφής, πολυμερή υλικά με μνήμη μορφής, πιεζοηλεκτρικά υλικά, μαγνητορολογικά ελαστομερή, κ.α. Τα υλικά αυτά χρησιμοποιούνται ευρέως σε βιομηχανίες αυτοκινήτων, πλωτών μέσων, αεροπλάνων στη βιοϊατρική και αλλού.

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η περιγραφή και η εφαρμογή της υπολογιστικής μεθόδου "Fast Fourier Transform", FFT, που προτάθηκε από τους Suquet και Moulinec (1995), για την επίλυση του προβλήματος της Ομογενοποίησης των Σύνθετων Υλικών. Με τη μέθοδο αυτή, αποφεύγεται η δημιουργία πλέγματος για τους υπολογισμούς και μπορεί να χρησιμοποιηθεί απευθείας σε ψηφιακές εικόνες μικροδομών που προέρχονται από ηλεκτρονικά μικροσκόπια. Βασίζεται στην ακριβή έκφραση της συνάρτησης Green για γραμμικώς ελαστικό και ομογενές υλικό αναφοράς. Οι Suquet και Moulinec στην περίπτωση των υλικών που αποτελούνται από ελαστικές φάσεις εισήγαγαν έναν επαναληπτικό αλγόριθμο όπου επιλύει την εξίσωση Lippman Schwinger που προκύπτει μέσω του προβλήματος. Σε ένα επόμενο στάδιο, γενίκευσαν τον αλγόριθμο αυτό για τον υπολογισμό της μακροσκοπικής απόκρισης υλικών και με μη γραμμικές φάσεις. Για το λόγο αυτό, εφαρμόζουμε τη μέθοδο για τυχαίες μικροδομές σωματιδιακού τύπου μέσω του υπολογιστικού πακέτου *CraFT* που εμπεριέχει τους κώδικες αυτούς. Τέλος, συγκρίνουμε την αποδοτικότητα της μεθόδου ως προς τον απαιτούμενο χρόνο για τους υπολογισμούς με τους αντίστοιχους χρόνους που χρειάζεται η μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων, FEM για τις ίδιες μικροδομές και την ίδια φόρτιση.

Ευχαριστίες

Νιώθω την ανάγκη να ευχαριστήσω, αρχικά, τον καθηγητή κύριο Αράβα Νικόλαο για τις γνώσεις που μου έδωσε απλόχερα και για τις συζητήσεις που έγιναν επί του θέματος αλλιά και γενικότερα γύρω από το αντικείμενο της Μηχανικής των Υλικών.

Ένα τεράστιο ευχαριστώ στον επίκουρο καθηγητή κύριο Αγόρα Μιχάλη για την τιμή που μου έκανε να μου αναθέσει το παρόν θέμα και χάρη στην καθοδήγησή του κατάφερα να το ολοκληρώσω. Με εύστοχες επισημάνσεις, συζητήσεις επί του θέματος και γενικότερα στο αντικείμενο των Σύνθετων Υλικών και τη συνεχή του ευθάρρυνση ολοκληρώθηκε η παρούσα εργασία.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω, επίσης, τον καθηγητή κύριο Καραμάνο Σπύρο, για την αποδοχή του να είναι μέλος της τριμελούς επιτροπής, για το ενδιαφέρον που έδειξε για την εργασία μου αλλιά και για τις γνώσεις που μου μετέδωσε στο αντικείμενο των Πεπερασμένων Στοιχείων, απαραίτητες για την παρούσα εργασία.

Ο υποψήφιος διδάκτορας, Κων/νος Γαρυφαλλογιάννης, βοήθησε αρκετά στους υπολογισμούς που διενεργήθηκαν με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων και θα ήθελα να τον ευχαριστήσω για αυτό.

Οι φίλοι μου, Διγενής Στέφανος και Παπαγεωργίου Γεώργιος, με τις γνώσεις τους στο χώρο του Προγραμματισμού βοήθησαν να ξεπεραστούν αρκετά εμπόδια που προέκυψαν στην πορεία της διπλωματικής μου εργασίας και τους ευχαριστώ και αυτούς από καρδιάς

Θέλω ακόμα να ευχαριστήσω τους κύριους Guylaine Boittin, Daniela Garajeu, Alice Labé, Hervé Moulinec, Fabrice Silva και Pierre Suquet για την ευγενική χορήγηση του υπολογιστικού πακέτου CraFT που μέσω αυτού κατάφερα να ολοκληρώσω αρκετούς υπολογισμούς. Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Hervé Moulinec για τις συζητήσεις που είχαμε και για τη βοήθεια που μου έδωσε.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τους φίλους και συναδέλφους που βοήθησαν τα μέγιστα μέσα από τις εύστοχες συζητήσεις και την ψυχολογική τους στήριξη. Οι στιγμές μαζί τους θα μου μείνουν χαραγμένες. Η εργασία αυτή όμως είναι αφιερωμένη στην οικογένεια μου που με στήριξε όλα αυτά τα χρόνια να ολοκληρώσω τη διπλωματική μου εργασία και τις σπουδές μου γενικότερα.

Σιδερης Χαράλαμπος - Ιούλιος 2021, Βόλος

*Η ΜΕΘΟΔΟΣ FFT ΓΙΑ ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ ΜΕ
ΤΥΧΑΙΕΣ ΜΙΚΡΟΔΟΜΕΣ*

Χαράλαμπος Σιδερός

4 Ιουλίου 2021

Περιεχόμενα

Κατάλογος Σχημάτων	iii
Κατάλογος Πινάκων	1
1 Εισαγωγή	2
2 Το Πρόβλημα Ομογενοποίησης	5
3 Η μέθοδος FFT	11
3.1 Ο Αλγόριθμος για γραμμική συμπεριφορά φάσεων	12
3.2 Ο Αλγόριθμος για μη γραμμική συμπεριφορά φάσεων	14
4 Ο κώδικας CraFT	17
4.1 Εγκατάσταση	17
4.1.1 Εγκατάσταση Ubuntu	17
4.1.2 Εγκατάσταση CraFT	17
4.2 Καθορισμός και εκτέλεση	18
4.2.1 Αρχείο .in	20
4.2.2 Αρχείο .vtk	21
4.2.3 Αρχείο .phases	29
4.2.4 Αρχείο .mat	30
4.2.5 Αρχείο .load	32
4.2.6 Αρχείο .output	35
4.2.7 Αρχεία Αποτελεσμάτων	38
4.2.8 Παράδειγμα Απόκρισης Ελαστοπλαστικού υλικού υπό κυκλική φόρτιση	41
5 Εφαρμογές	48
5.1 Μικροδομή	49
5.2 Συνθήκες Φόρτισης	50
5.3 Εφαρμογές με μεταβολή των Ελαστικών Σταθερών των φάσεων	51
5.3.1 Περιοδική Μικροδομή με τυχαία Μονοδιασπορά 30 Σφαιριδίων που καταλαμβάνουν το 10% του RVE	52
5.3.2 Περιοδική Μικροδομή με τυχαία Μονοδιασπορά 30 Σφαιριδίων που καταλαμβάνουν το 20% του RVE	66
5.3.3 Περιοδική Μικροδομή με τυχαία Μονοδιασπορά 30 Σφαιριδίων που καταλαμβάνουν το 30% του RVE	75
5.4 Εφαρμογές με αλλαγή του ποσοστού φάσεων	82

6	Συμπεράσματα και Σχόλια	87
7	Bibliography	91
A'	Ο Μετασχηματισμός Fourier	94

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Σύνθετο υλικό σωματιδιακού τύπου, όπου στην κλίμακα (L) είναι ομογενές και στην πολύ μικρότερη κλίμακα (l) είναι ετερογενές, με περιοδική διαφασική μικροδομή	6
2.2	Γραφική απεικόνιση των διανυσμάτων θέσης δύο απέναντι σημείων και των διανυσμάτων που υποδηλώνουν την περίοδο μιας μικροδομής	7
2.3	Γραφική απεικόνιση της περιοδικότητας των μετατοπίσεων και της αντιπεριοδικότητας του διανύσματος των τάσεων	8
2.4	Σχηματική απεικόνιση του RVE μιας τυχαίας μικροδομής με σφαιροειδή σωματίδια και η γεωμετρική απεικόνιση του σχήματος και της κατεύθυνσης των σφαιροειδών σωματιδίων	9
4.1	Εντολή επίκλησης της CraFT στο τερματικό Ubuntu	19
4.2	Εντολή τρεξίματος του αρχείου δεδομένων προβλήματος	20
4.3	Εντολή τρεξίματος του αρχείου δεδομένων προβλήματος με τον έλεγχο των αριθμό των πυρήνων	20
4.4	Δομή αρχείου περιγραφής των δεδομένων του προβλήματος με κατάληξη .in	21
4.5	Επεξήγηση γραφικού περιβάλλοντος διαδικτυακού μετατροπέα ανάλυσης της μικροδομής	23
4.6	Τρόπος επεξεργασίας χωρικής ανάλυσης μικροδομής	23
4.7	Παραγωγή μικροδομής με συμπαγή σωματίδια	24
4.8	Έλεγχος επίτευξης επιθυμητής μικροδομής	24
4.9	Αναλυτικότερος Έλεγχος επίτευξης επιθυμητής μικροδομής	25
4.10	Επιλογή επιθυμητής κατάληξης αρχείου	26
4.11	Τρόπος εξόδου επιθυμητού αρχείου σε κατάληξη .txt	26
4.12	Επιθυμητό αρχείο για την περιγραφή μικροδομής	27
4.13	Επιθυμητό αρχείο για την περιγραφή μικροδομής σε μεγέθυνση	28
4.14	Κώδικας στην MATLAB για δημιουργία αρχείου .vtk	29
4.15	Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των φάσεων με κατάληξη .pha	30
4.16	Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των ιδιοτήτων των υλικών με κατάληξη .mat	31
4.17	Επιθυμητό αρχείο περιγραφής της πορείας φόρτισης με κατάληξη .load	33
4.18	Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των αποτελεσμάτων με κατάληξη .output	36
4.19	Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των ιδιοτήτων των υλικών με κατάληξη .res	39
4.20	Αρχείο αποτελεσμάτων μέσω τάσεων για το φορέα και τα σωματίδια .mom	39
4.21	Αρχείο περιγραφής απαιτούμενου χρονικού διαστήματος επίλυσης του προβλήματος με κατάληξη .perf	40
4.22	Αρχείο Matlab μετατροπής των αποτελεσμάτων	41

4.23	Αρχείο μικροδομής παραδείγματος	42
4.24	Αρχείο χαρακτηριστικών σταθερών κάθε φάσης παραδείγματος	43
4.25	Αρχείο περιγραφής βημάτων φόρτισης αξονοσυμμετρικής διαμητικής παραμόρφωσης παραδείγματος	44
4.26	Αρχείο προσδιορισμού προσανατολισμών φάσεων παραδείγματος	45
4.27	Αρχείο προσδιορισμού επιθυμητών αποτελεσμάτων του παραδείγματος	45
4.28	Αρχείο προσδιορισμού των προηγούμενων αρχείων του παραδείγματος	46
4.29	Εντολή επίλυσης του προβλήματος σε τερματικό Ubuntu	46
4.30	Γραφική παράσταση μακροσκοπικής απόκρισης παραδείγματος, με την αποκλίνουσα τάση να κανονικοποιείται με το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα σε συνάρτηση της μακροσκοπικής απόκρισης	47
5.1	Αξονοσυμμετρική διάτμηση	51
5.2	Σύνθετο υλικό με περιοδική μικροδομή αποτελούμενο από 30 σφαίρες ίδιας ακτίνας R που καταλαμβάνουν το 10%	52
5.3	Διαφορετικές χωρικές αναλύσεις σε voxels της 3D μικροδομής του Σχήματος 5.2, μέσω του προγράμματος ParaView. Κάθε διαφορετική περίπτωση χωρικής ανάλυσης αντιστοιχεί σε διαφορετικό ποσοστό φάσεων. Όσο αυξάνεται το πλήθος των voxels, τόσο το $c^{(2)}$ τείνει στο 10%.	53
5.4	Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 10% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διαμητικής παραμόρφωσης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ ενώ δεξιά τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την $\bar{\epsilon}_{33}$, μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Και οι 2 περιπτώσεις χωρικής σύγκλισης αφορούν ανάλυση 64^3 , 128^3 , 180^3 , 210^3 , και 256^3 voxels. Οι εικόνες 5.4γ και 5.4δ είναι μεγέθυνση των 5.4α και 5.4β αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν 200 βήματα φόρτισης για τα αριστερά διαγράμματα και 120 για τα δεξιά.	55
5.5	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.4 για κάθε διαφορετική περίπτωση αριθμών voxels. Το αριστερό Ραβδοδιάγραμμα αντιστοιχεί σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$	56
5.6	Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 10% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και δεξιά $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την $\bar{\epsilon}_{33}$, μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, να αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην 5.6α περίπτωση έγινε ανάλυση για 55, 100, 200, και 500 βήματα φόρτισης, ενώ στη 5.6β για 55, 100, 120, και 200. Οι 5.6γ και 5.6δ αποτελούν μεγέθυνση των προηγούμενων αντίστοιχα. Η μικροδομή αποτελείται από 180^3 voxels	59

5.7	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.6 για κάθε διαφορετική περίπτωση πλήθους βημάτων φόρτισης. Το αριστερό Ραβδόγραμμα αντιστοιχεί σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$	60
5.8	Η διφασική μικροδομή σωματιδιακού τύπου αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 10 % του RVE για την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με την μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εικόνα (α') και με τη μέθοδο FFT, Εικόνα (β').	62
5.9	Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισοτροπή μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 10% υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5, 0.1, 0.01$ αριστερά και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2, 4, 100$ δεξιά. Η μακροσκοπική αξονική τάση, \bar{s}_{33} , κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην FFT χρησιμοποιήθηκε η μικροδομή με ανάλυση 180^3 voxels.	62
5.10	Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για τις μέσες τιμές των τασικών πεδίων της κάθε φάσης του σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης του σχήματος 5.9. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $s_{33}^{(r)}$ ($r = 1, 2$), κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$	64
5.11	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT και FEM για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.9 για τις μικροδομές του Σχήματος 5.8. Για τη μέθοδο FEM χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 79,193 βαθμούς ελευθερίας και για τη μέθοδο FFT μικροδομή με 5,832,000 voxels.	66
5.12	Σύνθετο υλικό με περιοδική μικροδομή αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 20%	67
5.13	Διαφορετικές χωρικές αναλύσεις σε voxels της 3D μικροδομής του Σχήματος 5.12, μέσω του προγράμματος ParaView. Κάθε διαφορετική περίπτωση χωρικής ανάλυσης αντιστοιχεί σε διαφορετικό ποσοστό φάσεων. Όσο αυξάνεται το πλήθος των voxels, τόσο το $c^{(2)}$ τείνει στο 20%.	68
5.14	Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισοτροπή μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 20% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και δεξιά $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την , \bar{s}_{33} , μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, να αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Και οι 2 περιπτώσεις χωρικής σύγκλισης αφορούν ανάλυση $64^3, 128^3, 180^3, 210^3$, και 256^3 voxels. Οι εικόνες 5.14γ' και 5.14δ' είναι μεγέθυνση των 5.14α' και 5.14β' αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν 200 βήματα φόρτισης για τα αριστερά διαγράμματα και 100 για τα δεξιά.	69

5.15	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.14 για κάθε διαφορετική περίπτωση αριθμών voxels. Το αριστερό Ραβδοδιάγραμμα αντιστοιχεί $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ σε ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$	70
5.16	Η διφασική μικροδομή σωματιδιακού τύπου αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 20 % του RVE για την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με την μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εικόνα (α') και με τη μέθοδο FFT, Εικόνα (β').	71
5.17	Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισοτροπή μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 20% υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5, 0.1, 0.01$ αριστερά και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2, 4, 100$ δεξιά. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}$, κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην FFT χρησιμοποιήθηκε η μικροδομή με ανάλυση 180^3 voxels.	72
5.18	Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για τις μέσες τιμές των τασικών πεδίων της κάθε φάσης του σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης του σχήματος 5.17. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}^{(r)}$ ($r = 1, 2$), κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$	73
5.19	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT και FEM για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.17 για τις μικροδομές του Σχήματος 5.16. Για τη μέθοδο FEM χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 97,327 βαθμούς ελευθερίας και για τη μέθοδο FFT μικροδομή με 5,832,000 voxels.	74
5.20	Σύνθετο υλικό με περιοδική μικροδομή αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 30%	75
5.21	Διαφορετικές χωρικές αναλύσεις σε voxels της 3D μικροδομής του Σχήματος 5.20, μέσω του προγράμματος ParaView. Κάθε διαφορετική περίπτωση χωρικής ανάλυσης αντιστοιχεί σε διαφορετικό ποσοστό φάσεων. Όσο αυξάνεται το πλήθος των voxels, τόσο το $c^{(2)}$ τείνει στο 30%.	76
5.22	Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισοτροπή μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 30% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και δεξιά $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την , $\bar{\sigma}_{33}$, μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, να αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Και οι 2 περιπτώσεις χωρικής σύγκλισης αφορούν ανάλυση $64^3, 128^3, 185^3, 256^3$, και 285^3 voxels. Οι εικόνες 5.22γ' και 5.22δ' είναι μεγέθυνση των 5.22α' και 5.22β' αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν 55 βήματα φόρτισης για τα αριστερά διαγράμματα και 100 για τα δεξιά.	77

5.23	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.22 για κάθε διαφορετική περίπτωση αριθμών voxels. Το αριστερό Ραβδοδιάγραμμα αντιστοιχεί σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ σε ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$	78
5.24	Η διφασική μικροδομή σωματιδιακού τύπου αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 30 % του RVE για την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με την μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εικόνα (α') και με τη μέθοδο FFT, Εικόνα (β').	79
5.25	Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισοτροπή μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 30% υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5, 0.1, 0.01$ αριστερά και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2, 4, 100$ δεξιά. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}$, κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην FFT χρησιμοποιήθηκε η μικροδομή με ανάλυση 256^3 voxels.	80
5.26	Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για τις μέσες τιμές των τασικών πεδίων της κάθε φάσης του σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης του σχήματος 5.25. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}^{(r)}$ ($r = 1, 2$), κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$	81
5.27	Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT και FEM για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.25 για τις μικροδομές του Σχήματος 5.16. Για τη μέθοδο FEM χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 239,561 βαθμούς ελευθερίας και για τη μέθοδο FFT μικροδομή με 16,777,216 voxels.	82
5.28	Σύγκριση αποτελεσμάτων μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης για διάφορες περιπτώσεις $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ και διαφορετικό ποσοστό φάσης των 30 σωματιδίων c^2 . Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}$, κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$	84
5.29	Απαιτούμενοι χρόνοι σε λεπτά για κάθε περίπτωση που εξετάστηκε στο Σχήμα 5.28	85
6.1	Σύγκριση της μακροσκοπικής απόκρισης ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με 30 σφαίρες που πιάνουν το 20% της μοναδιαίας κυψελίδας για διαφορετική περίπτωση ελαστικών σταθερών του υλικού αναφοράς όπως περιγράφονται από τις Εξισώσεις (6.1) και (6.2)	88
6.2	Σύγκριση απαιτούμενης χρονικής διάρκειας για τους υπολογισμούς του Σχήματος 6.1	89

Κατάλογος Πινάκων

5.1 Το ποσοστό φάσης των σωματιδίων, το πλήθος αυτών, ο αριθμός κόμβων και στοιχείων και οι βαθμοί ελευθερίας που χρησιμοποιήθηκαν σε κάθε περίπτωση στην Επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων	50
5.2 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.5	57
5.3 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.7	61
5.4 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.11	66
5.5 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.15	70
5.6 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.19	74
5.7 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.23	78
5.8 Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.27	82

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζεται σήμερα στα Σύνθετα Υλικά και στην έρευνα αυτών, μιας και τείνουν να αντικαταστήσουν τα μεταλλικά υλικά, για αυτό η ενασχόληση με αυτά και η περιγραφή της συμπεριφοράς τους μακροσκοπικά είναι ιδιαίτερα χρήσιμοι. Η παρούσα εργασία βασίζεται πάνω στην αριθμητική λύση του Προβλήματος Ομογενοποίησης, του προβλήματος υπολογισμού της σχέσης μεταξύ των μακροσκοπικών τάσεων με τις μακροσκοπικές παραμορφώσεις σε ένα σύνθετο υλικό. Η μέθοδος που θα εξετάσουμε προτάθηκε από τους Moulinec και Suquet [1] και βασίζεται στη μέθοδο FFT. Η αρχική ιδέα που οδήγησε τους Moulinec και Suquet στην επίλυση με τη μέθοδο αυτή ήταν να μπορεί να λυθεί το πρόβλημα αριθμητικά για μικροδομές που προέρχονται από ψηφιακές φωτογραφίες από Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο (SEM). Με τη μέθοδο αυτή, αποφεύγεται η δημιουργία πλέγματος που χρειάζεται κατά την επίλυση με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων.

Με κατάλληλη αναδιατύπωση του προβλήματος, το σύστημα εξισώσεων του Προβλήματος Ομογενοποίησης οδηγεί σε μια ολοκληρωτική εξίσωση, η οποία είναι δύσκολο να λυθεί. Ο μετασχηματισμός Fourier μετατρέπει την ολοκληρωτική εξίσωση σε απλή αλγεβρική εξίσωση στο χώρο Fourier με την επίλυση του Προβλήματος να γίνεται πολύ πιο απλή. Γίνεται χρήση του Γρήγορου Μετασχηματισμού Fourier, FFT, για την αποδοτική επίλυση του προβλήματος μέσω του επαναληπτικού κώδικα που πρότειναν, τόσο στην περίπτωση του υλικού που αποτελείται από ελαστικές φάσεις, όσο και στη περίπτωση που αποτελείται από μη γραμμικές φάσεις.

Στο Κεφάλαιο 2 θα περιγράψουμε το Πρόβλημα Ομογενοποίησης και την αναδιατύπωση αυτού.

Στο Κεφάλαιο 3 θα συνδέσουμε το Πρόβλημα με τη μέθοδο FFT παραθέτοντας τους αλγόριθμους που πρότειναν οι Moulinec και Suquet(1995) τόσο για σύνθετο υλικό που αποτελείται από γραμμικώς ελαστικές φάσεις όσο και για φάσεις με μια γραμμική συμπεριφορά.

Οι υπολογισμοί με τη μέθοδο FFT έχουν γίνει χάρη στην ευγενική χορήγηση του υπολογιστικού πακέτου ονόματι CraFT, (Composite Response and Fourier Transforms), από τους κυρίους Guylaine Boittin, Daniela Garajeu, Alice Labé, Hervé Moulinec, Fabrice Silva και Pierre Suquet. Η έκδοση που χρησιμοποιήθηκε είναι

η CraFT 1.0.12g. Στο Κεφάλαιο 4 θα αναφέρουμε πλήρως τα βήματα που κάποιος θα μπορεί αν τα ακολουθήσει να τρέξει τον κώδικα CraFT για τυχαίες μικροδομές σωματιδιακού τύπου. Θα παραθέσουμε αναλυτικά ένα παράδειγμα μακροσκοπικής απόκρισης σύνθετου υλικού με σωματίδια σφαιρικού σχήματος. Αναλυτικές οδηγίες για τη χρήση του κώδικα υπάρχουν και στο CraFT User's guide [2].

Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζουμε τις εφαρμογές της μεθόδου με τη χρήση του CRaFT. Οι υπολογισμοί αφορούν ένα διφασικό υλικό σωματιδιακού τύπου με ισοτροπες φάσεις, με το φορέα να συμπεριφέρεται ως ελαστικό τέλεια πλαστικό υλικό και τα σωματίδια ως γραμμικώς ελαστικά, σφαιρικού σχήματος. Το πλήθος αυτών επιλέγουμε να ανέρχεται στα 30, τα οποία διατάσσονται τυχαία μέσω της μεθόδου RSA που προτάθηκε από τους Rintoul και Torquato [3]. Η μοναδιαία κυψελίδα ή αλλιώς το Αντιπροσωπευτικό Στοιχείο Όγκου (RVE) υπόκειται σε κυκλική φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Η περιοδικότητα της μικροδομής στις 3 διαστάσεις αφενός οδηγεί στην επιβολή των περιοδικών συνοριακών συνθηκών και αφετέρου στη γενίκευση του αποτελέσματος απόκρισης για το RVE, για όλο το υλικό μακροσκοπικά. Εξαιτίας της επιλογής μας οι φάσεις να τείνουν στην ασυμπίεστοτητα, χρησιμοποιείται το αποκλίνον μέρος των τάσεων στους υπολογισμούς και στα διαγράμματα μακροσκοπικής απόκρισης, μιας και όπως θα συζητηθεί αυτό είναι που εμπεριέχεται για τη συγκεκριμένη φόρτιση στις καταστατικές εξισώσεις. Παρουσιάζονται οι υπολογισμοί με τη μέθοδο FFT με μεταβολή:

- του λόγου των μέτρων διατμήσεων $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$, όπου ο δείκτης (1) αναφέρεται στο φορέα και ο (2) στα σωματίδια, αλλαγή δηλαδή των ιδιοτήτων των φάσεων
- του ποσοστού φάσεων των σωματιδίων $c^{(2)}$, αλλαγή δηλαδή της γεωμετρίας

Σύμφωνα με τις εφαρμογές αυτές, το υλικό μακροσκοπικά χαρακτηρίζεται από μια γραμμικά ελαστική συμπεριφορά στην αρχή, στη συνέχεια ελαστο-πλαστική μεταβατική συμπεριφορά και εν τέλει τέλεια πλαστική συμπεριφορά, με την επιρροή των προαναφερθέντων μεταβολών να επηρεάζουν κατάλληλα τις καμπύλες. Σύμφωνα με προηγούμενες έρευνες των Moulinec και Suquet [4], Michel et. al. [5] και Lahellec και Suquet [6], πέρα από τα παρόμοια αποτελέσματα που δίνει η FFT και η FEM, αξιοσημείωτη είναι η σύγκριση του απαιτούμενου χρόνου για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων. Η FFT, σύμφωνα με τις έρευνες αυτές, αποτελεί μια γρηγορότερη μέθοδο από αυτή των Πεπερασμένων Στοιχείων για κάποιες περιπτώσεις υλικών. Για το λόγο αυτό, συνδέουμε στο παρόν κεφάλαιο τις εφαρμογές από την εργασία για ελαστοπλαστικά υλικά με τυχαίες μικροδομές των Agoras et al. [7] όπου έκαναν υπολογισμούς για την μακροσκοπική απόκριση τυχαίων μικροδομών σωματιδιακού τύπου σφαιρικού και ελλειψοειδούς σχήματος με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM, Finite Element Method). Αφού επιβεβαιώσουμε την ταύτιση των αποτελεσμάτων συγκρίνουμε την αποτελεσματικότητα ως προς τον απαιτούμενο χρόνο για τις 2 μεθόδους και παρατηρούμε σε ποιες περιπτώσεις η FFT είναι πιο αποδοτική από την FEM.

Στο Κεφάλαιο 6 σχολιάζουμε τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της μεθόδου και πως η παρούσα εργασία θα μπορούσε να συνεχιστεί σε επόμενο στάδιο.

Όσον αφορά το κομμάτι του συμβολισμού, στην παρούσα εργασία θα ακο-

λουθήσουμε το μοτίβο των περισσότερων εργασιών στον κλάδο της Υπολογιστικής Μηχανικής των Υλικών. Έντονα γράμματα αντιστοιχούν για διανύσματα και μεγαλύτερης τάξης τανυστές και για να είναι πλήρως διαχωρίσιμα μεταξύ τους θα γίνει αναφορά στο κείμενο. Το εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων συμβολίζεται με \cdot δηλαδή $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$, με τον επαναλαμβανόμενο δείκτη $i = 1, 2, 3$, το τανυστικό γινόμενο συμβολίζεται χωρίς κάποιο σύμβολο, δηλαδή $\mathbf{ab} = a_i b_j \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$ και το εσωτερικό γινόμενο δύο τανυστών 2ας τάξεως συμβολίζεται με $:$, θεωρώντας έναν τανυστή 2ας τάξεως \mathbf{A} δηλαδή $A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$, $\mathbf{A} : \mathbf{A} = A_{ij} A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$. Αντίστοιχα αν \mathbb{C} ένας τανυστής 4ης τάξεως και $\boldsymbol{\varepsilon}$ ένας τανυστής 2ας τάξεως, το εσωτερικό γινόμενο αυτών θα συμβολίζεται ως εξής:
 $\mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$.

Κεφάλαιο 2

Το Πρόβλημα Ομογενοποίησης

Για να λυθεί το πρόβλημα, θα πρέπει να ικανοποιούνται μια σειρά εξισώσεων σε κάθε σημείο του RVE. Με την επίλυση αυτών των εξισώσεων θα μπορούν να εξαχθούν τιμές για τάσεις και παραμορφώσεις για κάθε σημείο και σε επόμενο στάδιο μέσω των παρακάτω τύπων θα μπορέσουν να υπολογιστούν οι μέσες τιμές αυτών και συνεπώς να υπολογιστεί η σχέση τάσεων παραμορφώσεων για την υπό εξέταση μικροδομή.

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} d\Omega, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega \quad (2.1)$$

Οι εξισώσεις που πρέπει να ικανοποιούνται σε κάθε σημείο, είτε αυτό βρίσκεται στο σύνορο φάσεων, είτε στο εσωτερικό αυτών περιγράφονται σύμφωνα με τις παρακάτω εξισώσεις.

- *Καταστατικές Εξισώσεις:* Θεωρούμε απειροστό πεδίο μετατοπίσεων άρα και μικρές παραμορφώσεις και περιστροφές, ο ρυθμός παραμόρφωσης $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ σε κάθε σημείο \mathbf{x} μπορεί να σπάσει σε δύο μέρη, στον ελαστικό και στον πλαστικό ρυθμό παραμόρφωσης.

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p \quad (2.2)$$

Ο ελαστικός ρυθμός, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e$, υπολογίζεται σύμφωνα με τη Σχέση (2.3), όπου με $\boldsymbol{\sigma}^{(r)}$ γίνεται αναφορά στο ρυθμό των τάσεων, $\mathbb{S}^{(r)}$ ο τανυστής ενδοτικότητας της φάσης r , με \mathbb{K} ο μοναδιαίος τανυστής των αποκλινόντων τανυστών 4^{ης} τάξεως, με \mathbb{J} ο μοναδιαίος τανυστής στο χώρο των σφαιρικών τανυστών 4^{ης} τάξεως, με $\mu^{(r)}$ το μέτρο διατμήσεως της και με $\kappa^{(r)}$ το μέτρο διόγκωσης της φάσης r .

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e = \mathbb{S}(\mathbf{x})\dot{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbb{S}(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^2 \chi^{(r)}(\mathbf{x})\mathbb{S}^{(r)}, \quad \mathbb{S}^{(r)} = \frac{1}{2\mu^{(r)}}\mathbb{K} + \frac{1}{3\kappa^{(r)}}\mathbb{J} \quad (2.3)$$

Ο πλαστικός ρυθμός, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$ ορίζεται από το γινόμενο του μη αρνητικού τοπικού πλαστικού παράγοντα $\dot{\eta}$ με το διάνυσμα κάθετο στην καμπύλη διαρροής \mathbf{N} , όπως μαρτυρά και η Σχέση (2.5). Υποθέτοντας ότι και τα δύο υλικά υπακούουν στο κριτήριο διαρροής κατά Von Mises με καθετότητα, η καμπύλη διαρροής

περιγράφεται από την Εξίσωση (2.4), με την ισοδύναμη τάση κατά Von Mises, σ_{eq} , να υπολογίζεται σύμφωνα με τη σχέση (2.4).

$$\Phi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}) = \sigma_{eq}(\boldsymbol{\sigma}) - \sigma_y(\mathbf{x}) = 0, \quad (2.4)$$

$$\sigma_{eq}(\boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}}, \quad s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{\sigma_{kk}}{3}, \quad \sigma_y(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^2 \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \sigma_y^{(r)}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p = \dot{\lambda} \mathbf{N}, \quad \mathbf{N} = \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (2.5)$$

Το όριο διαρροής, $\sigma_y^{(r)}$, κάθε υλικού εν γένει δεν είναι σταθερό, στους παρόντες υπολογισμούς, όμως, θα χρησιμοποιήσουμε σύνθετα υλικά που θα αποτελούνται από ελαστικώς τέλεια πλαστικούς φορείς, συνεπώς θα ισχύει: $\sigma_y^{(r)} = \sigma_0^{(r)}$.

- *Κινηματικές σχέσεις* : Η σχέση μετατοπίσεων - παραμορφώσεων :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x})^T) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.6)$$

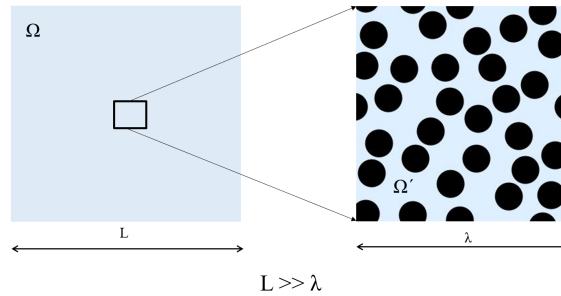
περιγράφοντας τόσο τη σχέση μετατοπίσεων - παραμορφώσεων στο εσωτερικό των φάσεων αλλά και τη συνέχεια των μετατοπίσεων στη διεπιφάνεια

- *Εξισώσεις Ισορροπίας* : Υποθέτουμε ότι οι μαζικές δυνάμεις (π.χ. βαρυτική δύναμη) είναι αμελητέες με την ισορροπία να ικανοποιείται μέσω σχέσης :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}(\mathbf{x}) \stackrel{\mathbf{b}(\mathbf{x})=0}{=} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.7)$$

Η σχέση αυτή, περιγράφει τόσο την εξίσωση ισορροπίας για το εσωτερικό των φάσεων αλλά και τη συνέχεια των τάσεων στη διεπιφάνεια των φάσεων.

- *Συνοριακές συνθήκες* : Οι μικροδομές που θα εξεταστούν στην παρούσα εργασία, όπως φαίνεται για παράδειγμα και στο Σχήμα 2.1 είναι περιοδικές, δηλαδή προκύπτουν από την επανάληψη της κυψελίδας στις 2 ή στις 3 κατευθύνσεις.



Σχήμα 2.1: Σύνθετο υλικό σωματιδιακού τύπου, όπου στην κλίμακα (L) είναι ομογενές και στην πολύ μικρότερη κλίμακα (λ) είναι ετερογενές, με περιοδική διαφασική μικροδομή

Λόγω της περιοδικότητας της μικροδομής, η λύση του προβλήματος ομογενοποίησης στο Ω είναι αντίστοιχα περιοδική με ίδια περίοδο με της μοναδιαίας κυψελίδας Ω' . Ως αποτέλεσμα, ό,τι επιβληθεί σε μακροσκοπικό επίπεδο θα

είναι περιοδικό και η λύση του προβλήματος για τη μοναδιαία κυψελίδα και ο υπολογισμός της μακροσκοπικής απόκρισης του σύνθετου υλικού θα ταυτίζεται με τη μέση απόκριση του RVE. Η μόνη διαφορά θα είναι οι συνοριακές συνθήκες ανάμεσα στο πρόβλημα για το Ω και στο πρόβλημα για το Ω' .

Πιο συγκεκριμένα:

- Το πεδίο των μετατοπίσεων \mathbf{u} μπορεί να χωριστεί σε ένα γραμμικό μέρος $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x}$ και έναν περιοδικό διορθωτικό όρο, τέτοια ώστε:

$$\mathbf{u} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^*, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega', \quad (2.8)$$

και συμβολίζεται με $\mathbf{u}^{\#}$. Το \mathbf{u}^* παράγει παραμορφώσεις $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^*)$, αλλά όχι μέσες παραμορφώσεις, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}^*) = 0$, με:

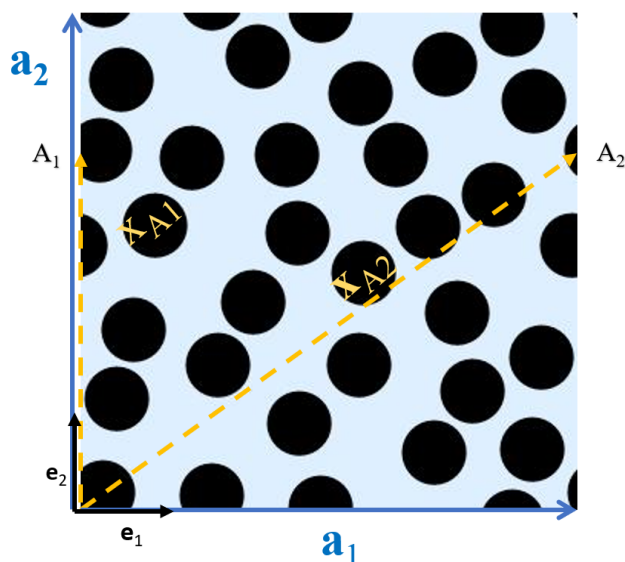
$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^*) \quad (2.9)$$

- Το διάνυσμα της τάσης \mathbf{t} , κατά Cauchy, αποτελεί έναν αντί-περιοδικό όρο, όπου:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega' \quad (2.10)$$

και συμβολίζεται με $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \#$, ενώ το \mathbf{n} αναφέρεται στο μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στο υπό εξέταση επίπεδο

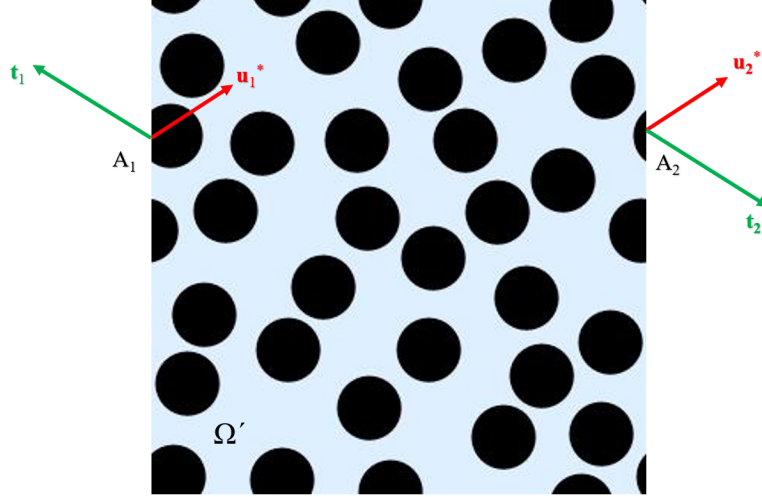
Έστω για απλότητα η διδιάστατη περιοδική μικροδομή του Σχήματος 2.2 και \mathbf{a}_1 και \mathbf{a}_2 τα διανύσματα που ορίζουν την περίοδο της μικροδομής, διαλέγονται δύο σημεία, A_1 και A_2 τέτοια ώστε $\mathbf{x}_{A_2} = \mathbf{x}_{A_1} + \mathbf{a}_1$:



Σχήμα 2.2: Γραφική απεικόνιση των διανυσμάτων θέσης δύο απέναντι σημείων και των διανυσμάτων που υποδηλώνουν την περίοδο μιας μικροδομής

Αυτό που ισχύει με τους παραπάνω όρους για τα σημεία A_1 και A_2 , φαίνεται στο Σχήμα 2.3 και κατά συνέπεια:

$$\mathbf{t}_1 = -\mathbf{t}_2, \quad \mathbf{u}_1^* = \mathbf{u}_2^* \quad \forall (A_1, A_2), \text{ όπου } \begin{cases} \mathbf{x}_{A_2} = \mathbf{x}_{A_1} + \mathbf{a}_1 & \text{ή} \\ \mathbf{x}_{A_2} = \mathbf{x}_{A_1} + \mathbf{a}_2 & \text{ή} \\ \mathbf{x}_{A_2} = \mathbf{x}_{A_1} + \mathbf{a}_3 & \text{αν η μικροδομή 3D} \end{cases} \quad (2.11)$$



Σχήμα 2.3: Γραφική απεικόνιση της περιοδικότητας των μετατοπίσεων και της αντι-περιοδικότητας του διανύσματος των τάσεων

Θα πρέπει να γίνει μια αναφορά στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της μικροδομής και στις υποθέσεις που έχουμε κάνει. Αρχικά, θεωρούμε ότι η κλίμακα μεγέθους (L) όπου το υλικό είναι ομογενές στο Ω είναι κατά πολύ μεγαλύτερη από την κλίμακα μεγέθους της ετερογένειας (λ) στο Ω' , όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.1. Οι κλίμακες, δηλαδή, υποθέτουμε πως είναι καλά χωρισμένες, δηλαδή:

$$L \gg \lambda$$

Επειδή οι πληροφορίες που απαιτούνται για την περιγραφή μιας τυχαίας μικροδομής είναι στατιστικού χαρακτήρα υποθέτουμε ότι η μικροδομή είναι στατιστικώς ομοιογενής. Οι συναρτήσεις πιθανότητας πολλών σημείων, δηλαδή, είναι αναλλοίωτες σε μεταφορές. Για ένα σημείο η πιθανότητα $p^{(r)}$ θα είναι σταθερή, για δύο σημεία η $p^{(rs)}$ θα εξαρτάται από την σχετική απόσταση $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|$ ως εξής:

$$p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = p^{(rs)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.12)$$

Επίσης, υποθέτουμε ότι η μικροδομή είναι εργοδοτική, όπου μια μόνο τυχαία υλοποίηση της μικροδομής αρκεί για να υπολογιστούν οι συναρτήσεις πιθανότητας πολλών σημείων. Για ένα σημείο θα ισχύει ότι η πιθανότητα θα είναι ίση με το ποσοστό φάσης r :

$$p^{(r)} = c^{(r)} \quad (2.13)$$

και για δύο σημεία :

$$p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = c^{(r)}c^{(s)} \quad (2.14)$$

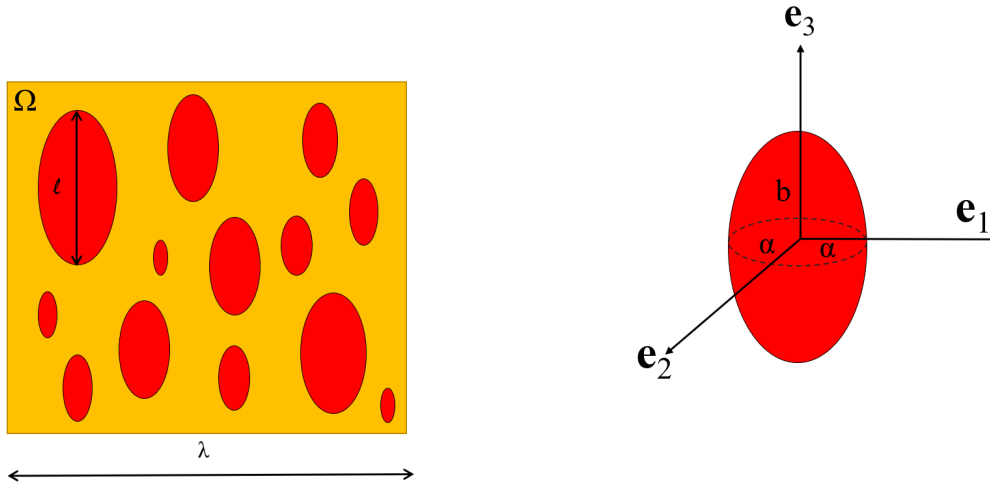
Τέλος, θεωρούμε ότι η μικροδομή έχει ελλειψοειδή συμμετρία. Η πιθανότητα δύο σημείων θα περιγράφεται από την εξίσωση :

$$p^{(rs)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = p^{(rs)}(|\mathbf{Z}^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')|) \quad (2.15)$$

όπου ο \mathbf{Z} είναι ο τανυστής 2ας τάξεως συμμετρικός και θετικά ορισμένος, ο τανυστής μορφής του ελλειψοειδούς, που περιγράφει δηλαδή το σχήμα και την κατεύθυνση των σωματιδίων και ορίζεται ως εξής :

$$\mathbf{Z} = a\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 + a\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 + b\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3$$

Με a και b ορίζονται τα μήκη των ημιαξόνων και τα διανύσματα e_i ορίζουν τις αντίστοιχες κύριες κατευθύνσεις των σφαιροειδών. Το μέγεθος των σφαιροειδών χαρακτηρίζεται από τη τιμή της μεταβλητής, $w = b/a$. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι η κλίμακα ετερογένειας (λ) είναι κατά πολύ μεγαλύτερη από την κλίμακα ομογένειας των σωματιδίων (ℓ), δηλαδή $\lambda \gg \ell$, ικανοποιώντας και πάλι την υπόθεση των καλώς χωρισμένων κλιμάκων. Στην παρούσα εργασία θα γίνει αναφορά μόνο σε μικροδομές με σφαιρικό σχήμα, που αποτελεί ειδική περίπτωση της σφαιροειδούς μικροδομής με την τιμή $w = 1$.



Σχήμα 2.4: Σχηματική απεικόνιση του RVE μιας τυχαίας μικροδομής με σφαιροειδή σωματίδια και η γεωμετρική απεικόνιση του σχήματος και της κατεύθυνσης των σφαιροειδών σωματιδίων

Επίσης, τα ποσοστά φάσεων της φάσης (r), $c^{(r)}$, υπολογίζονται ως εξής :

$$c^{(r)} = \frac{|\Omega^{(r)}|}{|\Omega|} = \langle \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.16)$$

όπου με $\langle \cdot \rangle$ αναφερόμαστε στη μέση τιμή ενός βαθμωτού μεγέθους ή ενός τανυστή στο Ω και με $\chi^{(r)}$ συμβολίζεται η χαρακτηριστική εξίσωση της φάσης r :

$$\chi^{(r)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Omega^{(r)} \\ 0, & \mathbf{x} \notin \Omega^{(r)} \end{cases} \quad (2.17)$$

Η αναλυτική λύση είναι ανέφικτη, λόγω του μη γραμμικού χαρακτήρα των καταστατικών εξισώσεων των φάσεων, όπως περιγράφηκε και προηγουμένως καθώς και στην πολυπλοκότητα των τυχαίων μικροδομών. Για το λόγο αυτό οδηγούμαστε στην αριθμητική επίλυση του προβλήματος είτε με την FEM είτε με την FFT.

Την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης περιοδικών μικροδομών έχουν εξετάσει στις έρευνές τους οι Paradioti et. al. [8] όπου σύγκριναν τα αποτελέσματα της μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων με μοντέλο βασισμένο στο μη γραμμικό συναρτησιακό Ομογενοποίησης για μη γραμμικά σύνθετα υλικά. Επίσης, οι Απουκου et. al. [9] (2018), επέκτειναν τη μέθοδο RSA για μονοδιασπορά και πολυδιασπορά ελλειψοειδών σωματιδίων για περιοδικές μικροδομές μέσω της μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων και τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν για τις ίδιες μικροδομές με τη μέθοδο FFT. Μέθοδο που χρησιμοποίησαν και νωρίτερα οι Moulinec και Suquet [1] και στη συνέχεια οι Michel et. al. [5]. Μια ακόμα επίλυση για περιοδικές μικροδομές σύνθετου υλικού με ελαστοπλαστικές φάσεις επιλύθηκε με την FEM από τους González et. al. [10] και συγκρίθηκε με θεωρητικό μοντέλο Ομογενοποίησης που περιέχει τη μη γραμμική συμπεριφορά του φορέα.

Κεφάλαιο 3

Η μέθοδος FFT

Προσπαθώντας να αναδιατυπώσουμε το πρόβλημα, ορίζουμε έναν νέο τανυστή $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$, τον τανυστή πόλωσης όπου :

$$\boldsymbol{\tau} = (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^{(0)}) : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (3.1)$$

Το $\mathbb{C}^{(0)}$ αναφέρεται στο ισότροπο ελαστικό υλικό αναφοράς.

Η νέα αυτή μεταβλητή βοηθάει στην εξαγωγή μιας ολοκληρωτικής εξίσωσης για την εύρεση του πεδίου των παραμορφώσεων (3.2) όπως αποδεικνύεται και στις σημειώσεις του Willis [11]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} - \Gamma^{(0)} * \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \quad (3.2)$$

όπου ο τελεστής $\Gamma^{(0)}$ ορίζει το συμμετρικό τανυστή 4^{ης} τάξεως που υπολογίζεται μέσω της συνάρτησης Green G και σχετίζεται με το υλικό αναφοράς $\mathbb{C}^{(0)}$:

$$\Gamma_{ijpq}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \left[\frac{\partial^2 G_{ip}^{(0)}}{\partial x_j \partial x'_q}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \right]_{(ij)(pq)} \quad (3.3)$$

Η εξίσωση αυτή προτάθηκε από τους Zeller και Dederichs [12] όπου στην έρευνα τους για εξαγωγή εκφράσεων για τις ελαστικές σταθερές πολυκρυστάλλων απέδειξαν και έκαναν χρήση του τελεστή Green για την ολοκληρωτική μορφή της εξίσωσης. Επειδή η έκφραση έχει ακριβώς την ίδια μορφή με την εξίσωση που προτάθηκε από τους Lippmann - Schwinger [13] για την θεωρία κβαντικής μηχανικής σκέδασης, η εξίσωση (3.2) ονομάστηκε Lippmann - Schwinger.

Οι Moulinec και Suquet (1995) αφορμώμενοι από την εξίσωση αυτή, σκέφτηκαν να μεταφέρουν το Πρόβλημα από τον πραγματικό χώρο (Ω), στο χώρο Fourier $\Omega_{\mathcal{F}}$, όπου η πράξη της συνέλιξης θα μετατραπεί σε απλό γινόμενο πινάκων.

Κάνοντας χρήση του θεωρήματος συνέλιξης και επιλέγοντας το $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$, η εξίσωση θα γραφτεί στο χώρο Fourier ως εξής:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) = -\hat{\Gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}), \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}, \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{0}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (3.4)$$

Οι εκάστοτε τανυστές μπορούν να υπολογιστούν με τον διακριτό μετασχηματισμό Fourier όπως παραθέτουμε στο Παράρτημα Α'.

Ο αλγόριθμός που χρησιμοποιείται για το γρήγορο υπολογισμό του διακριτού μετασχηματισμού Fourier, ονομάζεται «Fast Fourier Transform» FFT. Μέσω της μεθόδου “διαίρει και βασίλευε” και βασισμένο στην διάσπαση σε μονά και ζυγά στοιχεία αναδρομικά, όπως αναφέρει και στην έρευνά τους οι Hlawitschka et. al. [14], επιτυγχάνεται η μεταφορά μιας συνάρτησης ή ενός τανυστή από τον πραγματικό χώρο, στον φανταστικό χώρο Fourier αρκετά γρήγορα.

Διάφορα προγράμματα έχουν στις βιβλιοθήκες τους τον κώδικα αυτό και μέσω μιας απλής εντολής, συνήθως “fft” καταφέρνουν το γρήγορο μετασχηματισμό ενός συνόλου τιμών, ενός διανύσματος, ενός τανυστή κ.ο.κ. Στον κώδικα της CraFT, που θα αναλυθεί παρακάτω στο Κεφάλαιο 4, οι αλγόριθμοι είναι γραμμένοι σε C και έχει χρησιμοποιηθεί η βιβλιοθήκη FFTW3, όπως προτάθηκε από Frigo και Johnson [15]. Στη βιβλιοθήκη αυτή χρησιμοποιείται είτε ο αλγόριθμος Cooley-Turkey [16] είτε ο αλγόριθμος του Rader [17] είτε του Bluestein [18]. Την πρώτη μεθοδολογία, τη χρησιμοποιεί στην περίπτωση όπου το πλήθος των δεδομένων είναι της μορφής (2^k) ενώ για τις άλλες περιπτώσεις χρησιμοποιείται συνδυασμός των άλλων δύο αλγορίθμων. Συνεπώς, επιτυγχάνονται οι μετασχηματισμοί των πεδίων τάσεων, παραμορφώσεων και πόλωσης των σχέσεων (Α'.5), (Α'.2) και (Α'.6) για οποιοδήποτε αριθμό σημείων N^2 αν το πρόβλημα είναι δύο διαστάσεων και N^3 αν είναι τριών, όπως ακριβώς είναι στους παρόντες υπολογισμούς.

3.1 Ο Αλγόριθμος για γραμμική συμπεριφορά φάσεων

Οι Moulinec και Suquet(1995) επιλέγουν η μοναδιαία κυψελίδα να διακριτοποιείται σε $N_1 \times N_2 \times N_3$ voxels. Οι συνιστώσες του κάθε voxel, του τρισδιάστατου pixel δηλαδή, επιλέγουμε να συμβολίζονται με i_1, i_2, i_3 :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(i_1, i_2, i_3) &= \left((i_1 - 1) \frac{T_1}{N_1}, (i_2 - 1) \frac{T_2}{N_2}, (i_3 - 1) \frac{T_3}{N_3} \right), \\ i_1 &= 1, \dots, N_1, \\ i_2 &= 1, \dots, N_2, \\ i_3 &= 1, \dots, N_3 \end{aligned} \tag{3.5}$$

αφού υποθέσουμε ότι με T_j συμβολίζεται η περίοδος της μικροδομής στην j κατεύθυνση. Η διακριτοποίηση αυτή, είναι κατάλληλη για τη χρήση του αλγορίθμου FFT.

Με $\mathcal{F}(\cdot)$ θα συμβολίσουμε το γρήγορο μετασχηματισμό Fourier, με $\mathcal{F}^{-1}(\cdot)$ θα συμβολίσουμε τον αντίστροφο γρήγορο μετασχηματισμό Fourier και οι μετασχηματισμένες ποσότητες θα συμβολιστούν με το καπέλο $\langle \hat{\cdot} \rangle$.

Για τον τελεστή Green στο χώρο Fourier $\Gamma^{(0)}$ που θα χρειαστεί για την επίλυση της εξίσωσης Lippmann - Schwinger (3.2) παραθέτεται στο Παράρτημα Α' στο άρθρο των Moulinec και Suquet [4], η απόδειξη ότι το $\Gamma^{(0)}$ για ισότροπο ελαστικό υλικό

αναφοράς ισούται με :

$$\hat{\Gamma}_{klhj}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4\mu^{(0)}|\boldsymbol{\xi}|^2} (\delta_{kl}\xi_h\xi_j + \delta_{hi}\xi_k\xi_j + \delta_{lj}\xi_h\xi_i + \delta_{hj}\xi_k\xi_i) - \frac{\bar{\mu}^{(0)} + \mu^{(0)}}{\mu^{(0)}(\bar{\mu}^{(0)} + \mu^{(0)})} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_h}{|\boldsymbol{\xi}|^4}, \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad (3.6)$$

όπου τα ξ_j αντιστοιχούν στις $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ συχνότητες στο χώρο Fourier και T_j στην περίοδο της μικροδομής στην κατεύθυνση $j = 1, 2, 3$,

$$\xi_j = \begin{cases} \frac{1-(N_j/2)}{T_j}, \dots, \frac{N_j/2}{T_j}, & N_j \text{ ζυγός} \\ \frac{-(N_j-1)/2}{T_j}, \dots, \frac{(N_j-1)/2}{T_j}, & N_j \text{ μονός} \end{cases} \quad (3.7)$$

Για να λυθεί το πρόβλημα μέσω της μεθόδου, θα χρειαστεί μια αρχικοποίηση τιμών όπως γίνεται συνήθως και ένας επαναληπτικός κώδικας έως ότου συγκλίνει κάπου και δώσει αποτέλεσμα. Στην ειδική περίπτωση όπου και τα δύο υλικά υπακούουν σε καθαρά γραμμική ελαστική συμπεριφορά, τότε και το σύνθετο υλικό συμπεριφέρεται αντίστοιχα ως γραμμικά ελαστικό. Ο αλγόριθμος που πρότειναν οι Moulıneć και Suquet (1995) είναι ιδιαίτερα απλός έχοντας ως βάση την εξίσωση Lippman - Schwinger και κάνοντας επαναληπτικά υπολογισμούς για κάθε voxel με τη χρήση και των καταστατικών εξισώσεων.

- Αρχικοποίηση

Δίνονται αρχικές τιμές σε $\boldsymbol{\varepsilon}$ και $\boldsymbol{\sigma}$ σύμφωνα με τους παρακάτω τύπους :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (3.8)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}), \quad \mathbb{C}(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\mathbf{x})\mathbb{C}^{(r)} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (3.9)$$

- Επαναληπτικός κώδικας

Επιθυμούμε να υπολογίσουμε τα $\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1}$ και $\boldsymbol{\sigma}^{i+1}$, έχοντας γνωστά τα $\boldsymbol{\varepsilon}^i$ και $\boldsymbol{\sigma}^i$

1. Μετατροπή των τάσεων από τον πραγματικό χώρο, στον φανταστικό χώρο Fourier, με τον αλγόριθμο FFT

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^i = \mathcal{F}(\boldsymbol{\sigma}^i) \quad (3.10)$$

2. Έλεγχος σύγκλισης που ισοδυναμεί με την ικανοποίηση της εξίσωσης ισορροπίας στον φανταστικό χώρο, με $\langle \cdot \rangle$ συμβολίζεται η μέση τιμή, επιλέγεται σφάλμα μικρότερο του 10^{-4}

$$e^i = \frac{\left(\langle \|\text{div}(\boldsymbol{\sigma}^i)\|^2 \rangle \right)^{1/2}}{\|\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle\|} = \frac{\left(\frac{1}{N} \left\| \sum_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^i(\boldsymbol{\xi}) \right\|^2 \right)^{1/2}}{\|\hat{\boldsymbol{\sigma}}^i(\mathbf{0})\|} < 10^{-4} \quad (3.11)$$

3. Χρήση της εξίσωσης των *Lippmann Schwinger*, χρησιμοποιώντας τον ορισμό του τανυστή πόλωσης και της ιδιότητας του τελεστή Green ($\hat{\Gamma}^0 * (\mathbb{C}^{(0)} : \boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\varepsilon}$) προκύπτει επαναληπτικά:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{i+1}(\boldsymbol{\xi}) = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \hat{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \hat{\boldsymbol{\sigma}}^i(\boldsymbol{\xi}), \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad (3.12)$$

4.

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{i+1}(\mathbf{0}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (3.13)$$

5. Επιστροφή στον πραγματικό χώρο μέσω του αντίστροφου γρήγορου μετασχηματισμού Fourier

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} = \mathcal{F}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{i+1}) \quad (3.14)$$

6. Υπολογισμός των τάσεων για την υπολογισμένη παραμόρφωση του προηγούμενου βήματος

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{i+1}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (3.15)$$

3.2 Ο Αλγόριθμος για μη γραμμική συμπεριφορά φάσεων

Στη γενικότερη περίπτωση όπου το σύνθετο υλικό αποτελείται από φάσεις που υπακούουν στο κριτήριο Von Mises με ισότροπη κράτυνση ο προηγούμενος αλγόριθμος θα πρέπει να μετατραπεί κατάλληλα ώστε να ικανοποιούνται οι καταστατικές εξισώσεις ελαστοπλαστικού προβλήματος. Η πορεία φόρτισης χωρίζεται σε βήματα $[t_n, t_{n+1}]$, με τις τάσεις τις παραμορφώσεις και τη ισοδύναμη πλαστική παραμόρφωση να είναι γνωστά σε κάθε σημείο τη χρονική στιγμή t_n . Επιθυμούμε σε πρώτο στάδιο να υπολογίσουμε την παραμόρφωση την ακριβώς επόμενη χρονική στιγμή για να εφαρμόσουμε τις κατάλληλες καταστατικές εξισώσεις. Για το λόγο αυτό, θα γίνει και πάλι μια αρχικοποίηση των παραμορφώσεων και θα υπολογιστούν οι υπόλοιπες τιμές για να τρέξει επαναληπτικά ο αλγόριθμος.

- Αρχικοποίηση

Η αρχική τιμή της παραμόρφωσης συναρτήσσει των 2 προηγούμενων βημάτων ως εξής:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_n(\mathbf{x}) + \frac{t_{n+1} - t_n}{t_n - t_{n-1}} (\boldsymbol{\varepsilon}_n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{n-1}(\mathbf{x})), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (3.16)$$

ενώ τα $\boldsymbol{\sigma}^0$ και $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^0$ υπολογίζονται μέσω των $\boldsymbol{\varepsilon}^0, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_n, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^n$ όπως αποτυπώνεται και στα Βήματα 6β' και 6γ' παρακάτω.

- Επαναληπτικός κώδικας

Συνεπώς τα $\boldsymbol{\varepsilon}^i$ και $\boldsymbol{\sigma}^i$ στην επανάληψη i είναι γνωστά, με αποτέλεσμα να μπορεί να συνεχίσει ο κώδικας στην εύρεση της ακριβούς μακροσκοπικής τάσης για συγκεκριμένη μακροσκοπική παραμόρφωση. Επιθυμούμε να υπολογίσουμε τα $\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1}$ και $\boldsymbol{\sigma}^{i+1}$

1. Μετατροπή των τάσεων από τον πραγματικό χώρο, στον φανταστικό χώρο Fourier, με τον αλγόριθμο FFT

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^i = \mathcal{F}(\boldsymbol{\sigma}^i) \quad (3.17)$$

2. Έλεγχος σύγκλισης που ισοδυναμεί με την ικανοποίηση της εξίσωσης ισορροπίας στον φανταστικό χώρο

$$e^i = \frac{\left(\frac{1}{N} \left\| \sum_d \boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^i(\boldsymbol{\xi}) \right\|^2 \right)^{1/2}}{\left\| \hat{\boldsymbol{\sigma}}^i(\mathbf{0}) \right\|} < 10^{-4} \quad (3.18)$$

3. Χρήση της εξίσωσης των *Lippman Schwinger*

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{i+1}(\boldsymbol{\xi}) = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \hat{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \hat{\boldsymbol{\sigma}}^i(\boldsymbol{\xi}), \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad (3.19)$$

- 4.

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{i+1}(\mathbf{0}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1} \quad (3.20)$$

5. Επιστροφή στον πραγματικό χώρο μέσω του αντίστροφου γρήγορου μετασχηματισμού Fourier

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} = \mathcal{F}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{i+1}) \quad (3.21)$$

6. Υπολογισμός των τάσεων $\boldsymbol{\sigma}^{i+1}$ και της πλαστικής παραμόρφωσης $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^{n+1}$ για την υπολογισμένη παραμόρφωση του προηγούμενου βήματος μέσω των παρακάτω εξισώσεων

Δηλαδή

- (α) Υπολογισμός ισοδύναμης τάσης για την ελαστική πρόβλεψη $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^T$:

$$\mathbf{s}_{n+1}^T = \mathbf{s}_n + 2\mu(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_n), \quad (\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^T)_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s}_{n+1}^T : \mathbf{s}_{n+1}^T}$$

- (β) Έλεγχος αν η ελαστική πρόβλεψη είναι μεγαλύτερη ή μικρότερη του ορίου διαρροής:

$$\text{αν } (\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^T)_{eq} < \sigma_0(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^n)$$

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^{n+1} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^n, \quad \mathbf{s}_{n+1} = \mathbf{s}_{n+1}^T$$

αλλιώς υπολογίζεται εκ νέου η πλαστική παραμόρφωση, υποθέτοντας ότι γίνεται αναφορά σε κράτυνση και όχι σε πράυνση η σχέση, $h(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) = \sigma_0(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) + 3\mu\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^n$, μπορεί να αντιστραφεί, άρα:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^{n+1} = h^{-1}\left((\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^T)_{eq} + 3\mu\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^n\right)$$

και στην ειδική περίπτωση της γραμμικής κράτυνσης ($\sigma_0(\bar{\varepsilon}_p) = \sigma_0 + H\bar{\varepsilon}_p$):

$$\bar{\varepsilon}_p^{n+1} = \frac{3\mu}{H + 3\mu} \bar{\varepsilon}_p^n + \frac{(\sigma_T^{n+1})_{eq} - \sigma_0}{H + 3\mu}$$

με το αποκλίνον μέρος μέρος της τάσης θα ισούται με:

$$\mathbf{s}_{n+1} = \frac{\sigma_0(\bar{\varepsilon}_p^{n+1})}{(\sigma_{n+1}^T)_{eq}} \mathbf{s}_{n+1}^T$$

(γ) Αντικατάσταση στην εξίσωση εύρεσης του τανυστή των τάσεων:

$$tr(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}) = tr(\boldsymbol{\sigma}_n) + 3\kappa tr(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_n), \quad \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}) \mathbb{I} + \mathbf{s}_{n+1}$$

Με το πέρας του αλγόριθμου για κάθε βήμα $n + 1$ υπολογίζονται το μακροσκοπικό πεδίο τάσεων μέσω της εξίσωσης:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{n+1} = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \boldsymbol{\sigma}^{n+1}(\mathbf{x}) \quad (3.22)$$

ενώ το πεδίο των παραμορφώσεων $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{n+1}$ είναι γνωστό.

Οι προαναφερθέντες αλγόριθμοι αφορούν γνωστές μακροσκοπικές παραμορφώσεις και υπολογίζονται οι αντίστοιχες μικροσκοπικές τάσεις. Ο αλγόριθμος για μη γραμμική συμπεριφορά φάσεων και η απόδειξη των παραπάνω τύπων υπάρχουν στο Παράρτημα C στο άρθρο των Moulinec και Suquet [4]. Μπορεί να γίνει και το αντίστροφο, δηλαδή να είναι γνωστές οι μακροσκοπικές τάσεις και να υπολογιστούν οι μακροσκοπικές παραμορφώσεις μέσω των μικροσκοπικών τάσεων και παραμορφώσεων, όπως αναλύεται στο Παράρτημα B του ίδιου άρθρου.

Η επίλυση με τη μέθοδο της FFT, δεν περιορίζεται μόνο σε αυτές τις περιπτώσεις συμπεριφορών υλικού. Στη νέα έκδοση του υπολογιστικού πακέτου (CraFT 2.0 (2021) <https://lma-software-CraFT.cnrs.fr/download/>) υπάρχουν αρκετές παραπάνω υπορουτίνες που καλύπτουν και άλλες περιπτώσεις υλικών.

Κεφάλαιο 4

Ο κώδικας CraFT

4.1 Εγκατάσταση

Δίνονται αναλυτικές οδηγίες για την Εγκατάσταση μέσα στο συμπιεσμένο αρχείο της CraFT (CraFT 1.0.2.tar.gz) αλλά καλό θα ήταν μια αναφορά στο πως μπορεί κάποιος να εγκαταστήσει το πρόγραμμα με πολύ απλό τρόπο και με αναλυτικά βήματα ένα προς ένα. Για να τρέξουν οι αλγόριθμοι χρειάζεται η ύπαρξη τερματικού Linux, για αυτό χωρίζουμε τις οδηγίες σε δύο στάδια. Σε ένα πρώτο στάδιο θα εγκαταστήσουμε το τερματικό αυτό (Τερματικό Ubuntu) και σε ένα δεύτερο στάδιο θα εγκαταστήσουμε τους κώδικες. Αν έχουμε υπολογιστή με λειτουργικό Windows θα πρέπει να γίνουν και τα δύο βήματα, ενώ αν έχουμε Linux μόνο το δεύτερο.

Αρχικά θα πρέπει να γίνει αποσυμπίεση του αρχείου της CraFT όπου μπορεί να εγκατασταθεί μέσω της ιστοσελίδας <http://CraFT.lma.cnrs-mrs.fr/> και του αρχείου FFTW3 (fftw-3.3.9.tar.gz), όπου μπορεί να εγκατασταθεί από την ιστοσελίδα www.fftw.org. Στην συνέχεια αναγράφονται αναλυτικά το πώς θα μπορεί κάποιος να εγκαταστήσει το Ubuntu και ακριβώς οι εντολές που θα πρέπει να γραφτούν στο τερματικό Ubuntu ώστε να είναι κάποιος σε θέση να τρέξει τους κώδικες της CraFT.

4.1.1 Εγκατάσταση Ubuntu

1. Settings→Apps & Features→ Programms and features → Turn windows features on or off → ✓ Windows Subsystem for Linux → OK και Επανεκκίνηση του υπολογιστή
2. Microsoft Store → Κατέβασμα Ubuntu 18.04 LTS ή οποιοδήποτε Linux distros
3. Άνοιγμα του Ubuntu και ορισμός username και password

4.1.2 Εγκατάσταση CraFT

1. cd /

-
2. `/mnt/c/...` (όπου έχει αποσιωπητικά τοποθετείται το “path” ώστε να βρεθεί κάποιος μέσα στο αποσυμπιεσμένο αρχείο)
 3. (τοποθετείται ο κωδικός όπου ζητείται)
 4. `sudo apt update`
 5. `sudo apt upgrate`
 6. `sudo apt install gcc`
 7. `sudo apt install make`
 8. `sudo apt-get install gfortran`
 9. `cd` στο φάκελο του FFTW3 και παραμένουμε στο φάκελο αυτό για τα επόμενα 3 βήματα
 10. `./configure --enable-threads --enable-openmp --enable-avx` (μετά το `configure`, `threads`, `openmp` υπάρχει κενό πριν τη διπλή παύλα)
 11. `sudo make` (ίσως να πάρει λίγο χρόνο)
 12. `sudo make install`
 13. `cd` στο φάκελο του αποσυμπιεσμένου CraFT και παραμένουμε και για το επόμενο βήμα
 14. `make`

Με το πέρας των βημάτων αυτών κάποιος είναι έτοιμος να τρέξει τους κώδικες

4.2 Καθορισμός και εκτέλεση

Για να περιγραφεί το μηχανικό πρόβλημα στο πρόγραμμα επιθυμούνται τα εξής:

1. η περιγραφή της μικροδομής μέσω μιας εικόνας - κειμένου αναφέροντας τη φάση του υλικού που αντιστοιχεί σε κάθε pixel ή voxel
2. η περιγραφή της μηχανικής συμπεριφοράς της κάθε φάσης, μέσω δύο αρχείων
 - ενός αρχείου που θα αναφέρεται σε όλα τα υλικά της μικροδομής, το είδος του υλικού ως προς τη συμπεριφορά (γραμμικώς ελαστικό, ελαστικό τέλεια πλαστικό κ.ο.κ) μαζί με τις εκάστοτε σταθερές (αν για παράδειγμα είναι γραμμικώς ελαστικό θα χρειαστούν το μέτρο Ελαστικότητας E και ο λόγος Poisson)
 - και ενός που θα αναφέρεται στην αντιστοιχία φάσεων με τα υλικά και ο προσανατολισμός του κάθε υλικού στην κάθε φάση

-
3. η περιγραφή των συνθηκών φόρτισης
 4. ο προσδιορισμός των ειδών των αποτελεσμάτων και το όνομα στο που επιθυμείται στο αρχείο των αποτελεσμάτων
 5. περαιτέρω παραμέτρους που επηρεάζουν τον κώδικα
 - η επιλογή του υλικού αναφοράς $\mathbb{C}^{(0)}$
 - η ακρίβεια στη σύγκλιση της επαναληπτικής διαδικασίας

Τα αρχεία αυτά θα είναι γραμμένα σε αρχεία συγγραφής και θα έχουν τις ακόλουθες καταλήξεις. Η δομή στο εσωτερικό τους θα αναλυθεί σε επόμενο στάδιο :

1. Μικροδομή \rightarrow .vtk
2.
 - Προσδιορισμός συμπεριφοράς και σταθερών \rightarrow .mat
 - Αντιστοιχία φάσεων με υλικά και προσανατολισμός φάσεων \rightarrow .pha
3. Συνθήκες φόρτισης \rightarrow .load
4. Έξοδος Αποτελεσμάτων \rightarrow .output

Για να τρέξει ο κώδικας της CraFT αρκεί να γίνει μια αρχική είσοδος στο path όπου βρίσκεται όλο το πακέτο της μεθόδου, αρκεί δηλαδή να εισέλθει κάποιος στο φάκελο με όνομα **CraFT_1.0.12g** και να πατήσει Enter όπως ακολούθως.

```
csideris@DESKTOP-2TT751L:/
csideris@DESKTOP-2TT751L:~$ cd /
csideris@DESKTOP-2TT751L:/$ cd mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g/
```

Σχήμα 4.1: Εντολή επίκλησης της CraFT στο τερματικό Ubuntu

Σε ένα δεύτερο στάδιο θα πρέπει να γραφτεί η εντολή :

- bin\CraFT
- ή bin\CraFT -i
- ή bin\CraFT -f

Στην περίπτωση των δύο πρώτων, που είναι ολότητες, θα ζητηθεί από το τερματικό σαν είσοδος να δοθούν τα paths για κάθε ένα αρχείο με τα δεδομένα, όπως γενικά περιγράφηκαν προηγουμένως, ενώ στην τελευταία περίπτωση ζητείται μόνο ένα αρχείο με κατάληξη .in που τα έχει όλα τα paths ενσωματωμένα.

Για λόγους ευκολίας και ταχύτητας συνίσταται η τελευταία μέθοδος.


```
csideris@DESKTOP-2TT751L:/mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g
csideris@DESKTOP-2TT751L:~$ cd /
csideris@DESKTOP-2TT751L:/$ cd mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g/
csideris@DESKTOP-2TT751L:/mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g$ bin/craft -f Diploma_Thesis/f30N30/mu2_001mu1/f30N30.in
```

Σχήμα 4.2: Εντολή τρεξίματος του αρχείου δεδομένων προβλήματος

Είναι εφικτό να οριστεί και ο αριθμός των πυρήνων που θα χρειαστούν για να τρέξει ο κώδικας. Αυτό μπορεί να γίνει σε συνέχεια με την προηγούμενη εντολή και να προστεθεί η εντολή:

-n και μετά ο αριθμός των πυρήνων

```
csideris@DESKTOP-2TT751L:~$ cd /
csideris@DESKTOP-2TT751L:/$ cd mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g/
csideris@DESKTOP-2TT751L:/mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g$ bin/craft -f Diploma_Thesis/f10N30/mu2_2mu1/f10N30.in -n 8
```

Σχήμα 4.3: Εντολή τρεξίματος του αρχείου δεδομένων προβλήματος με τον έλεγχο των αριθμό των πυρήνων

4.2.1 Αρχείο .in

Το αρχείο .in θα πρέπει να έχει μια παρόμοια δομή όπως στο Σχήμα 4.4:

```
f30N30.in - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 16/12/2020
#
#-----
# name of the file of the image of the microstructure
microstructure=Diploma_Thesis/f30N30/mu2_100mu1/f30N30_270.vtk
#-----
# file in the which the constituents (aka the phases)
# of the material are described:
phases=Diploma_Thesis/f30N30/mu2_100mu1/f30N30.phases
#-----
# name of the file describing the materials the phases
# are made of:
materials=Diploma_Thesis/f30N30/mu2_100mu1/f30N30.mat
#-----
# file of the loading conditions:
loading=Diploma_Thesis/f30N30/mu2_100mu1/f30N30.load
#-----
# file telling the outputs one wants to obtain:
output=Diploma_Thesis/f30N30/mu2_100mu1/f30N30.output
#-----
# The parameter C0 has to be set by craft:
C0=auto
#-----
# required precision for equilibrium and for loading
# conditions:
precision=1.e-2, 1.e-4
#-----
```

Σχήμα 4.4: Δομή αρχείου περιγραφής των δεδομένων του προβλήματος με κατάληξη `.in`

Επειδή ο κώδικας που τρέχει στο πακέτο της CraFT είναι γραμμένος κυρίως σε γλώσσα προγραμματισμού C, όποια σειρά ξεκινάει με δίεση “#” στο Σχήμα 4.4 αποτελεί σχόλιο για να μπορεί να καταλάβει κάποιος ένα ένα τα βήματα και τα κόκκινα βέλη υποδηλώνουν ακριβώς τις εντολές που πρέπει να γραφούν. Περιγράψουν ουσιαστικά τα “μονοπάτια” για όλα τα απαραίτητα αρχεία εισόδου.

Προσοχή

Είναι προφανές ότι στον κάθε χρήστη τα “μονοπάτια” για κάθε μια παράμετρο θα είναι διαφορετικά από αυτά που αναγράφονται στην εικόνα άνωθεν. Σε κάθε περίπτωση θα πρέπει να δηλώνονται σωστά γιατί θα υπάρχει είτε συντακτικό είτε λογικό λάθος στον κώδικα.

Εν συνεχεία θα γίνει ανάλυση για ένα ένα αρχείο, από αυτά που υπάρχουν μέσα στο `.in`.

4.2.2 Αρχείο `.vtk`

Ένα από τα δύσκολα μέρη του προσδιορισμού του προβλήματος είναι ο προσδιορισμός της μικροδομής. Το αποδεκτό αρχείο περιγραφής της μικροδομής πρέπει να

είναι σε κατάληξη `.vtk` και σε dataset Structured Points. Για να επιτευχθεί κάτι τέτοιο έχουν δημιουργηθεί κάποια μικρά προγράμματα στην Matlab.

Γενικά το αρχείο αυτό θα πρέπει να αποτελείται από σύμβολα, συνήθως αριθμούς, όπου για κάθε voxel θα αντιστοιχεί ένα σύμβολο που θα υποδηλώνει τη φάση που υπάρχει στο αντίστοιχο voxel της τρισδιάστατης ή στο αντίστοιχο pixel διδιάστατης μικροδομής.

Ο λόγος που γίνεται αυτό είναι ώστε ο επαναληπτικός κώδικας να κάνει υπολογισμούς σε κάθε voxel γνωρίζοντας το υλικό που αντιστοιχεί στο κάθε voxel. Τα βήματα που ακολουθούν αποτελούν έναν απλό τρόπο για να γίνει μια τρισδιάστατη μικροδομή στην επιθυμητή μορφή.

Είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι το Αρχείο `.vtk` το οποίο περιγράφουμε αφορά για διφασική μικροδομή με μονοδιασπορά σφαιρών. Σε περίπτωση που τα σωματίδια είναι σφαιροειδή θα χρειαστεί η ίδια διαδικασία απλά θα είναι διαφορετικό το Βήμα 1. Σε άλλη περίπτωση όπου αναφερόμαστε σε πολυδιασπορά ή περισσότερες φάσεις θα πρέπει να τροποποιηθούν κατάλληλα τόσο το Βήμα 1, όσο και το Βήμα 4 που ακολουθούν.

• **Βήμα 1: Παραγωγή Μικροδομής και Εξαγωγή σε μορφή `.stl`**

Παράγουμε την τυχαία μικροδομή μέσω της μεθόδου RSA με κάποιο πρόγραμμα όπως η Mathematica, και επιθυμούμε η έξοδος αυτής να έχει κατάληξη `.stl`.

Συγκεκριμένα με τη Mathematica θα πρέπει να τρέξει ο κώδικας `RSA_3D_Algorithm_monodisperse.nb` και γίνει η έξοδος του αρχείου `.stl`, για μονοδιασπορά σφαιρών.

Θα πρέπει να υπάρξει προσοχή ότι οι εντολές "Sphere" ή "Ball" θα παράξουν μικροδομή όπου τα σωματίδια θα αποτελούνται μόνο από το κέλυφος τους και στο εσωτερικό θα είναι κενές, γεγονός που θα προκαλέσει σφάλμα στην εφαρμογή της μεθόδου.

Η εντολή `RegionMember` μας βοηθάει στην περίπτωση αυτή, για αυτό έχει προστεθεί στον κώδικα με την επιλογή του `PlotPoints` → 100 να είναι αυτή που προτείνουμε για την ακρίβεια στην επιφάνεια των σωματιδίων. Παράδειγμα της μικροδομής που εξάγεται παρουσιάζεται παρακάτω.

Σημαντικό είναι να μην υπάρχει χρώμα στο εσωτερικό της μήτρας, να είναι χρωματισμένα μόνο τα σωματίδια και να μην υπάρχει κάποιο "κουτί" (Box) γύρω από την μικροδομή. Οι λόγοι θα εξηγηθούν αργότερα.

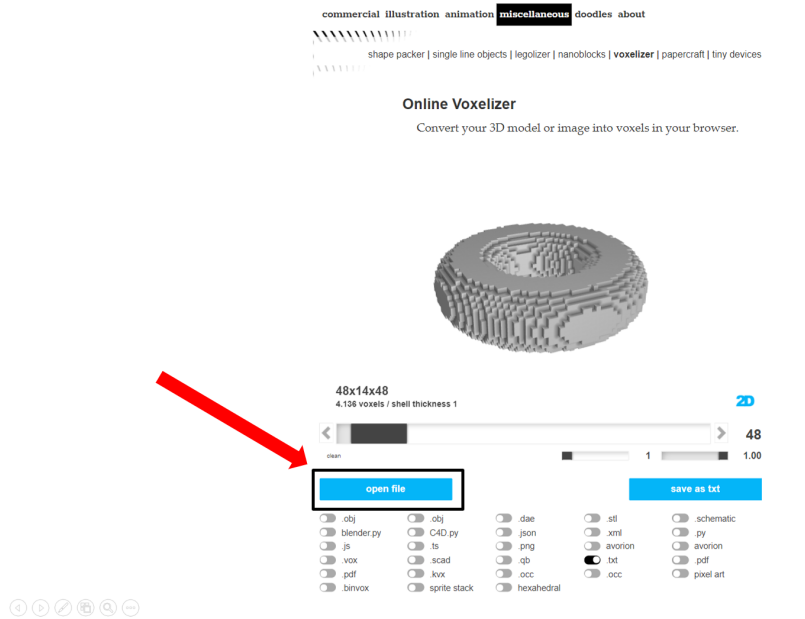
• **Βήμα 2: Διακριτοποίηση του `.stl` σε voxels**

Χρησιμοποιώντας τον διαδικτυακό μετατροπέα:

<https://drububu.com/miscellaneous/voxelizer/?out=txt>

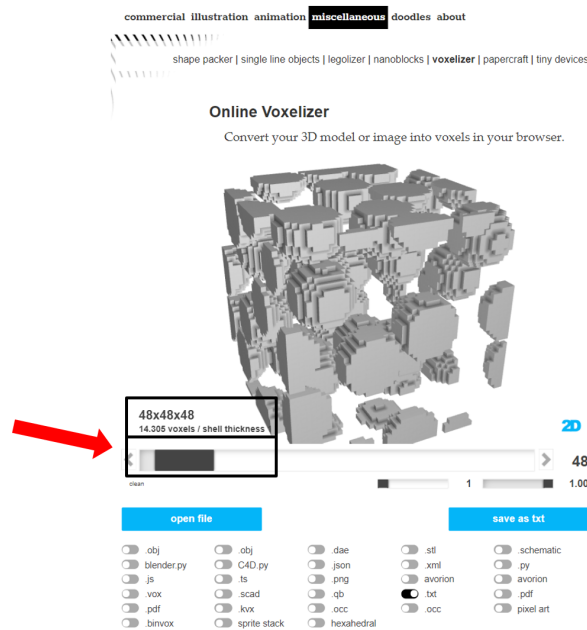
μπορούμε να μετατρέψουμε σε τριαδιάστατα voxels, τα λεγόμενα voxels.

Πατώντας το open file πρέπει να επιλεγθεί το αρχείο που εξήχθη από την Mathematica.



Σχήμα 4.5: Επεξήγηση γραφικού περιβάλλοντος διαδικτυακού μετατροπέα ανάλυσης της μικροδομής

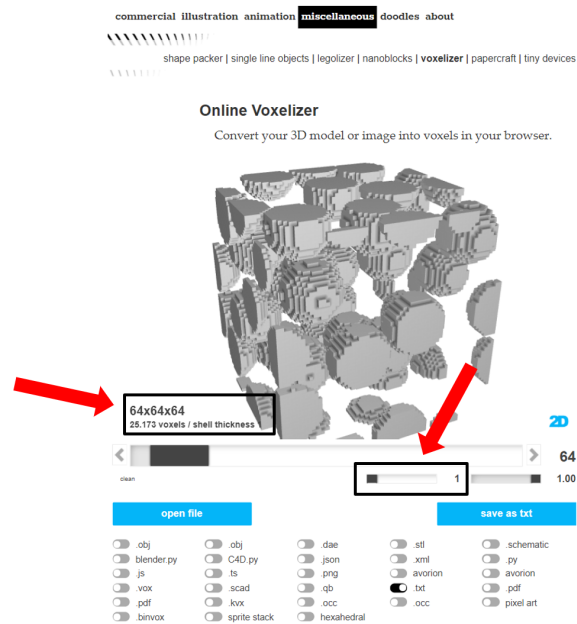
Κουνώντας δεξιά αριστερά την μπάρα κάτω από την εικόνα μπορεί να επιλεγεί ο αριθμός των voxels. Όσο μεγαλύτερος ο αριθμός αυτών τόσο πιο αναλυτικά θα περιγράφεται στη συνέχεια η μικροδομή.



Σχήμα 4.6: Τρόπος επεξεργασίας χωρικής ανάλυσης μικροδομής

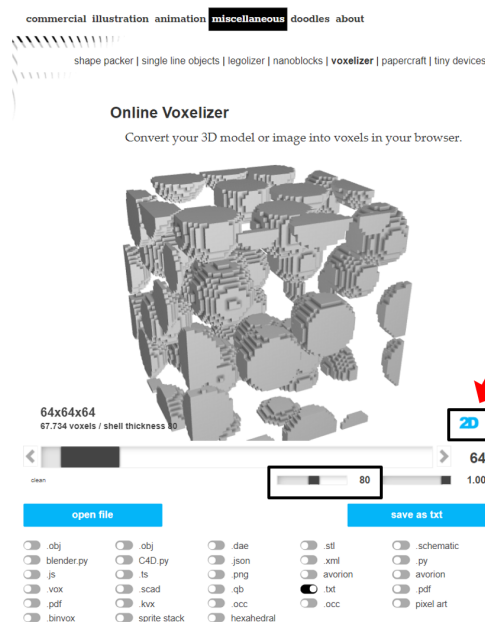
Σημαντικό είναι η πρώτη από τις δύο μικρές μπάρες να μετακινηθεί προς τα

δεξιά μέχρι ένα σχετικά μεγάλο αριθμό, ώστε να γεμίσουν στο εσωτερικό τους τα σωματίδια.



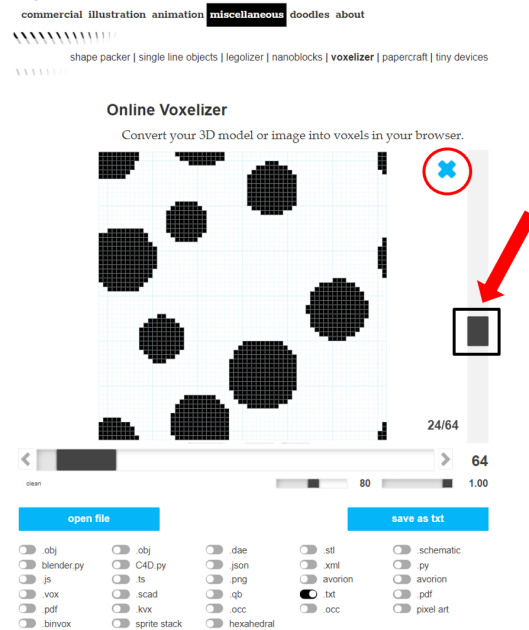
Σχήμα 4.7: Παραγωγή μικροδομής με συμπαγή σωματίδια

Ένας τρόπος να γίνει έλεγχος κατά πόσο έχουν γεμίσει στο εσωτερικό τα σωματίδια είναι να πατήσουμε το εικονίδιο με την επιγραφή **2D**



Σχήμα 4.8: Έλεγχος επίτευξης επιθυμητής μικροδομής

και εν συνεχεία να μετακινήσουμε τη μπάρα κατακόρυφα μέχρι τη μέση.



Σχήμα 4.9: Αναλυτικότερος Έλεγχος επίτευξης επιθυμητής μικροδομής

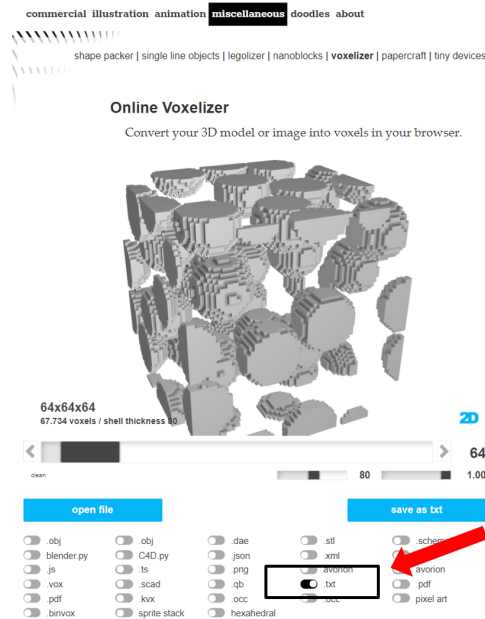
Αν οι κύκλοι δεν είναι γεμισμένοι τότε θα χρειαστεί να αυξήσουμε την τιμή στην προηγούμενη μπάρα. (Μια τιμή κοντά στο 300 είναι ασφαλής για τις περισσότερες περιπτώσεις)

Για να γίνει επιστροφή στην τρισδιάστατη μορφή αρκεί να πατηθεί το “X”.

Αν τυχόν η τρισδιάστατη μικροδομή περιείχε χρώμα στο φορέα, δε θα μπορούσε κάποιος να διακρίνει διαφορά στα σωματίδια και στο φορέα, θα ήταν όλα γκρι. Αντίστοιχα αν είχε τοποθετηθεί “κουτί” γύρω από τη μικροδομή θα είχε ως αποτέλεσμα να εμφανιστεί ένα ενιαίο γκρι “κουτί” χωρίς να είναι ευδιάκριτες οι επιμέρους φάσεις.

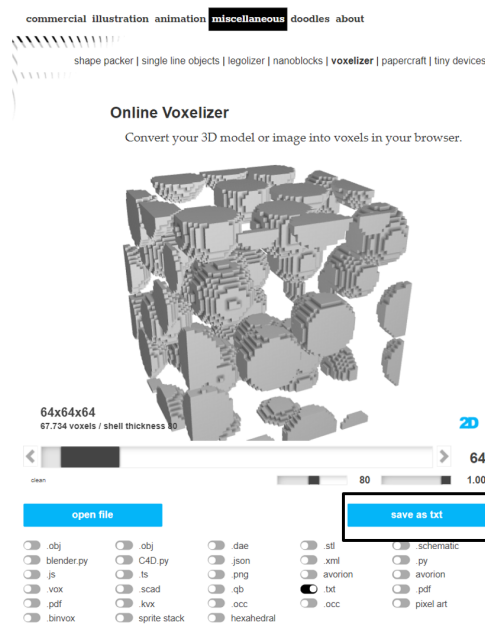
- **Βήμα 3: Έξοδος του αρχείου σε μορφή .txt**

Θα πρέπει να επιλεγεί η κατάληξη .txt από τις πολλές καταλήξεις που υπάρχουν



Σχήμα 4.10: Επιλογή επιθυμητής κατάληξης αρχείου

και να πατηθεί η επιλογή save as .txt.



Σχήμα 4.11: Τρόπος εξόδου επιθυμητού αρχείου σε κατάληξη .txt

Το αρχείο που έχει εξαχθεί αποτελείται από τις συντεταγμένες των voxels που αντιστοιχούν στα σωματίδια. Οπότε αυτό που επιθυμούμε σε επόμενο στάδιο είναι να μετατρέψουμε αυτό το αρχείο σε μορφή .vtk.

• **Βήμα 4: Μετατροπή αρχείου .txt σε αρχείο .vtk**

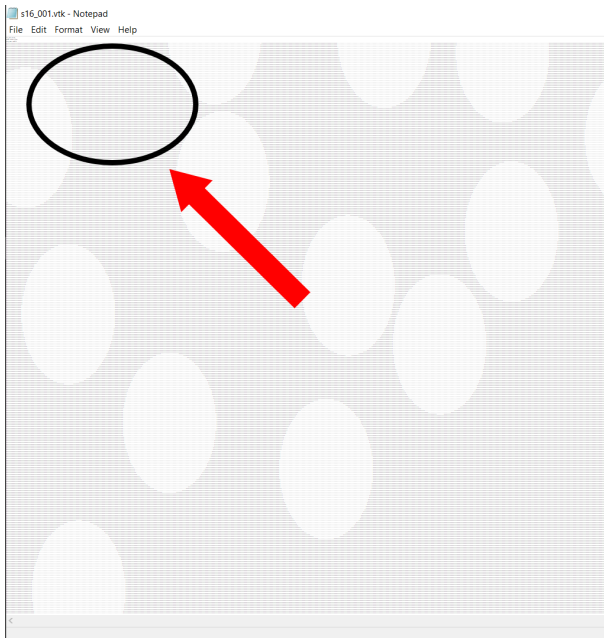
Με τη χρήση ενός κώδικα και μίας συνάρτησης της Matlab θα μπορέσει να

γίνει αυτή η μετατροπή.

Μέσω του αρχείου **visualisation3d.mlx** θα γίνει αυτή η μετατροπή. Ο κώδικας αυτός επικαλείται τη συνάρτηση **vtkwrite** η οποία παίρνει έναν πίνακα τιμών και τη μετατρέπει στο επιθυμητό αρχείο για την εκτέλεση της μεθόδου.

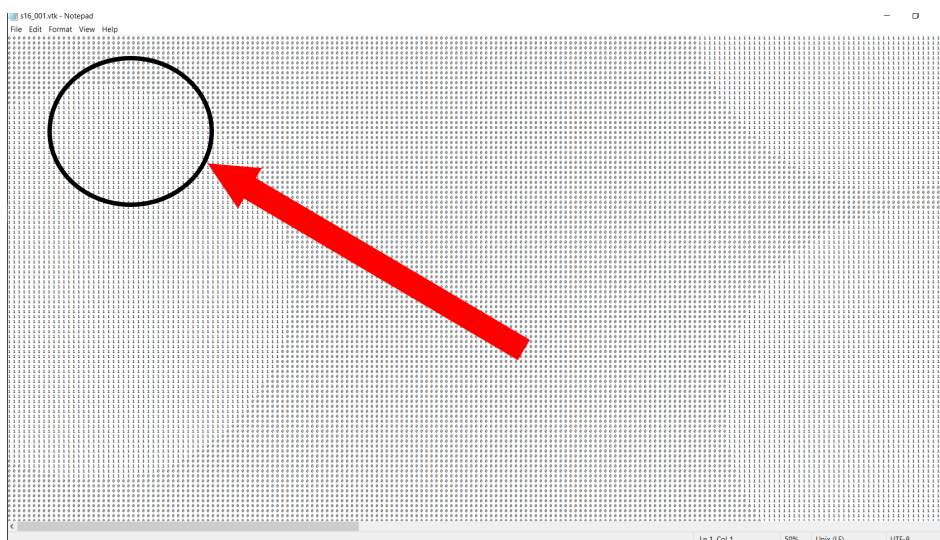
Η ιδέα πίσω από αυτόν τον κώδικα είναι να δημιουργηθεί ένας πίνακας τιμών με αριθμούς (0 και 1), όπου το 0 θα αναφέρεται στο φορέα και το 1 στα σωματίδια. Το προηγούμενο αρχείο .txt περιέχει τις συντεταγμένες των voxels που αντιστοιχούν στα σωματίδια. Άρα η ιδέα είναι ότι αυτές οι συνταγμένες να οδηγήσουν σε αντίστοιχες θέσεις ενός τρισδιάστατου αριθμητικού πίνακα και να τοποθετηθεί ο αριθμός 1 σε εκείνο το κελί. Για να γίνει πιο κατανοητό, είναι απλό να φανταστεί κάποιος την τρισδιάστατη μικροδομή, ως μη έναν πίνακα τριών διαστάσεων με κάθε voxel να αντιστοιχεί σε ένα κελί του πίνακα και να παίρνει την τιμή 1 αν είναι σωματίδιο ή την τιμή 0 αν είναι voxel που αντιστοιχεί σε φορέα.

Είναι δύσκολο να φανταστεί κάποιος πως θα μοιάζει αυτός ο τρισδιάστατος πίνακας για μια τρισδιάστατη μικροδομή που θα αποτελείται από 0 και 1, μιας και ο τρισδιάστατος πίνακας σε ένα αρχείο κειμένου όπως είναι το .vtk θα παρουσιάζεται σε δύο διαστάσεις, αλλά για δισδιάστατη μικροδομή κάτι τέτοιο είναι πολύ απλό. Όπως φαίνεται παρακάτω στα Σχήματα 4.12 4.13 δεν είναι εύκολο να καταλάβει κάποιος αν γίνεται αναφορά σε εικόνα ή σε αρχείο κειμένου μιας και φαίνονται ευκρινέστατα τόσο ο φορέας όσο και τα σωματίδια αλλά σε μια πρώτη μεγέθυνση είναι ξεκάθαρο ότι δεν αποτελεί εικόνα, παρά έναν πίνακα τιμών με 0 και 1.

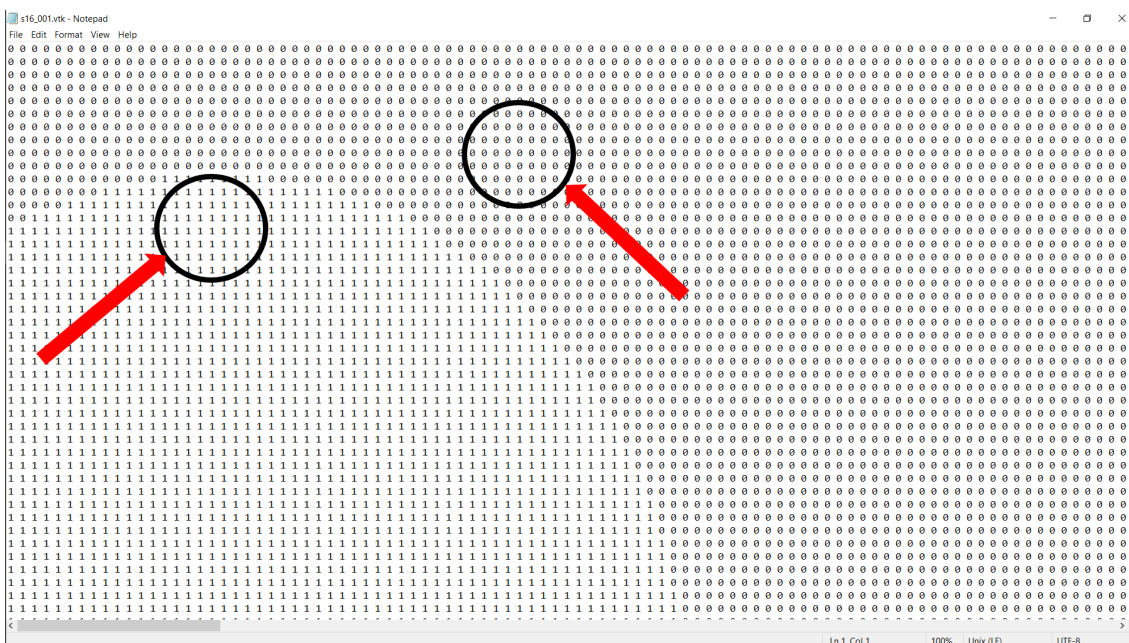


Σχήμα 4.12: Επιθυμητό αρχείου για την περιγραφή μικροδομής

Κάνοντας μία μεγέθυνση στον μαύρο κύκλο προκύπτει:



Σε μια μεγαλύτερη μεγέθυνση διακρίνονται τα 0 και 1:



Σχήμα 4.13: Επιθυμητό αρχείου για την περιγραφή μικροδομής σε μεγέθυνση

Ο κώδικας **visualisation3d.mlx** χρειάζεται προσοχή στον ορθό καθορισμό του φακέλου όπου βρίσκεται το αρχείο **.txt**, αλλά και στον αριθμό των voxels κάθε φορά που θα πρέπει να αλλάζουν ανάλογα με το παράδειγμα.

Στην τελευταία σειρά γίνεται η επίκληση της συνάρτησης **vtkwrite**, όπου έχοντας σα δεδομένο τις τιμές του πίνακα με τα 0 και 1 και το dataset Structured Points δίνει σαν αποτέλεσμα ακριβώς τη δομή του αρχείου που χρειάζεται το CraFT.

```

%%visualisation3d%%
%
% Εισάγω το .txt αρχείο που δημιουργήθηκε από τον online converter
% https://drububu.com/miscellaneous/voxelizer/?out=txt.
% Το αρχείο αυτό περιγράφει τις συντεταγμένες των voxel
% και εν συνεχεία γεμίζω τον τρισδιάστατο πίνακα με 1 στα κελιά που αντιστοιχούν
% στις παραπάνω συντεταγμένες και στον υπόλοιπο πίνακα τον γεμίζω με 0
% 1--> particle
% 0-->matrix
%
% Τέλος κάνω export του πίνακα σε μορφή .vtk μέσω της γνωστής συνάρτησης
%vtk write

```

```

clear all
clc
coordinates=dlmread('C:\Projects\Diploma_Thesis\My_Job\Craft\Matlab_VTK\30n30_100.txt',' ');
[m,~]=size(coordinates);
A(256,256,256)=0;
for i=1:m
    timh1=coordinates(i,1)+1;
    timh2=coordinates(i,2)+1;
    timh3=coordinates(i,3)+1;
    A(timh1,timh3,timh2)=1; % με ανάποδη σειρά γιατί έχει γίνει περιστροφή στον κώδικα της Mathematica
end
vtkwrite('30N30_256.vtk','structured_points','float',A)

```

Σχήμα 4.14: Κώδικας στην MATLAB για δημιουργία αρχείου .vtk

Άρα ακολουθώντας ένα ένα τα βήματα θα βγει το επιθυμητό αποτέλεσμα, με ιδιαίτερη προσοχή στον προσδιορισμό των σωστών φακέλων και των σωστών διαστάσεων που θα ισοδυναμούν με τον αριθμό voxels σε κάθε κατεύθυνση.

Προσοχή: Ένα τελευταίο βήμα είναι να οθηστούν τα περιττά μηδενικά στο αρχείο που δημιουργήθηκαν καθώς όπου κατοχυρώθηκε το “1” εν τέλει έχει αποθηκευτεί “1.00”. Το πιο απλό που μπορεί να γίνει είναι να πατηθούν “Ctrl + H” και να γίνει μετατροπή του “.00” σε κενό.

4.2.3 Αρχείο .phases

Σε αυτό το αρχείο δηλώνουμε την αντιστοιχία των συμβόλων (0 και 1) του .vtk αρχείου με την ονομασία που δίνουμε σε κάθε υλικό και η κατεύθυνση του υλικού εκφραζόμενο με τη γωνία που συμβολίζει με κάθε άξονα (γωνίες Euler).

```

#-----
# this file gives for each phase:
# * the material it is made of
# * its orientation (described by 3 Euler angles)
#
# This material comprises the constituents made of two
# different isotropic material (thus the Euler angles play no
# role and can be set to any value, e.g. 0,0,0)
#
#-----
# phase      material      phi1      Phi      phi2
#-----
0            0            0.        0.        0.
1            1            0.        0.        0.

```

Σχήμα 4.15: Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των φάσεων με κατάληξη `.pha`

Στην πρώτη στήλη αναγράφονται τα σύμβολα που υπάρχουν στο αρχείο της μικροδομής και στη δεύτερη την ονομασία που τους δίνεται από το χρήστη, ώστε να γίνεται αναφορά στα άλλα αρχεία με την νέα ονομασία.

Εδώ χρησιμοποιούμε την ίδια ονομασία καθώς τα σύμβολα στο `.vtk` αρχείο είναι 0 και 1, αλλά υπάρχει ενδεχόμενο να έχουν επιλεγεί άλλα σύμβολα με κάποια άλλη μέθοδο δημιουργίας του αρχείου. Αυτό το ενδεχόμενο είναι απίθανο αν ακολουθήσουμε ακριβώς τα βήματα, για αυτό η δεύτερη στήλη θα πρέπει να είναι ίδια με την πρώτη.

Αναφορικά με τις άλλες τρεις στήλες αν τα εκάστοτε υλικά είναι ισότροπα θα πρέπει αν είναι 0, αλλιώς θα πρέπει να δοθούν οι κατάλληλες γωνίες Euler.

4.2.4 Αρχείο `.mat`

Εδώ περιγράφεται η μηχανική συμπεριφορά του κάθε υλικού και οι σταθερές που περιγράφουν την κάθε περίπτωση.

```
f30N30.mat - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
#
# material 1 is isotropic linear elastic:
1 1
#
# Young's Modulus
14.9
# Poisson coefficient
0.49
#-----
#
# material 0 is elastic perfectly plastic:
0 2
#
# Young's Modulus
149.
# Poisson coefficient
0.49
# yield stress:
1.
#-----
Ln 1, Col 1 210% Unix (LF) UTF-8
```

Σχήμα 4.16: Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των ιδιοτήτων των υλικών με κατάληξη *.mat*

Και σε αυτήν την περίπτωση οι εντολές με # αποτελούν σχόλια οπότε οι απαραίτητες εντολές είναι αυτές χωρίς τη δίσωση μπροστά.

Ο πρώτος αριθμός αναφέρεται στο όνομα του υλικού που δόθηκε προηγουμένως (το 1 εξ αρχής έχει θεωρηθεί ότι αντιστοιχεί στα σωματίδια και το 0 στο φορέα) και δεύτερος αριθμός στην ίδια σειρά υποδηλώνει σε ποια κατηγορία υλικών ως προς τη μηχανική συμπεριφορά υπάγεται. Το 1 υποδηλώνει ισότροπα γραμμικά ελαστικό υλικό και το 2 ελαστικά τέλεια πλαστικό υλικό.

Γενικότερα οι κατηγορίες είναι οι εξής:

- 0 → Κενό υλικό, αναφέρεται σε οπές
- 1 → Ισότροπο γραμμικώς ελαστικό μέσο
- 2 → Ελαστικό Τέλεια Πλαστικό
- 3 → Ανισότροπα Ισότροπα Ελαστικό
- 4 → Ελαστο-Πλαστικό Von Mises

Για την κάθε περίπτωση θα πρέπει να δοθούν και οι σταθερές τιμές των παραμέτρων που την περιγράφουν μια προς μια στις επόμενες σειρές. Πιο συγκεκριμένα:

- Οπές → Δε χρειάζεται κάποια τιμή στις από κάτω γραμμές για το υλικό που αποτελεί οπή (αν επιλεγεί αυτή η περίπτωση ο κώδικας δε θα συγκλίνει)
- Ισότροπο γραμμικώς ελαστικό μέσο → Χρειάζεται στην πρώτη σειρά το μέτρο

Ελαστικότητας “E” και στην επόμενη το ο λόγος Poisson “ν”

- Ελαστικό Τέλεια Πλαστικό → Ίδια με την προηγούμενη περίπτωση αλλά στην επόμενη γραμμή χρειάζεται και το όριο ροής σ_y .
- Ανισότροπα Ισότροπα Ελαστικό → Θα πρέπει να γραφτεί η τανυστής ελαστικότητας \mathbb{C} του υλικού.
- Ελαστο-Πλαστικό Von Mises → Θα είναι όπως την περίπτωση του Ελαστικού Τέλεια Πλαστικού Υλικού με μια ακόμα πληροφορία, αυτή του μέτρου σκλήρυνσης H.

Στην προηγούμενη περίπτωση είναι ξεκάθαρο ότι γίνεται αναφορά για διφασικό σύνθετο υλικό με τη μια φάση να είναι ισότροπο γραμμικά ελαστικό υλικό με μέτρο Ελαστικότητας $E= 14.9$ GPa και λόγο Poisson $\nu= 0.49$ και την άλλη φάση να είναι ελαστικό και τέλεια πλαστικό υλικό με μέτρο Ελαστικότητας $E= 149.$ GPa και λόγο Poisson $\nu= 0.49$.

4.2.5 Αρχείο .load

Εδώ θα πρέπει να περιγραφούν τα γνωστά μεγέθη φόρτισης, είτε αυτά των τάσεων είτε αυτά των παραμορφώσεων. Υπάρχουν 3 περιπτώσεις:

- Γνωστές τάσεις
- Γνωστές παραμορφώσεις
- Γνωστή κατεύθυνση τάσεων

Στην περίπτωση των γνωστών τάσεων χρειάζεται μια παρακάτω δομή.

Αρχικά χρειάζεται να δηλωθεί το γράμμα S όπως φαίνεται που δηλώνει ότι θα γίνει αναφορά σε γνωστή κατεύθυνση τάσεων και εν συνεχεία στις παρακάτω γραμμές θα πρέπει να γίνει πλήρης περιγραφή για την πορεία της φόρτισης.

```

#-----
# HM 08/06/2011
#
# This file describes the loading conditions
#
#-----
# prescribed direction of stress
S
#-----
# time step      final time      direction of stress      xfactor
#               - - - - -      11 22 33 12 13 23
#-----
:1000:          1.          1. 0. 0. 0. 0. 0.          0.005
#
# one loads from t=0. to t=1 with 1000 steps.
# At the end of the loading, E11=0.005 (i.e. : 0.5%)
#-----

```

Σχήμα 4.17: Επιθυμητό αρχείο περιγραφής της πορείας φόρτισης με κατάληξη .load

Στην πρώτη στήλη αναφέρεται το χρονικό βήμα

```

#-----
# HM 08/06/2011
#
# This file describes the loading conditions
#
#-----
# prescribed direction of stress
S
#-----
# time step      final time      direction of stress      xfactor
#               - - - - -      11 22 33 12 13 23
#-----
:1000:          1.          1. 0. 0. 0. 0. 0.          0.005
#
# one loads from t=0. to t=1 with 1000 steps.
# At the end of the loading, E11=0.005 (i.e. : 0.5%)
#-----

```

Στη δεύτερη στήλη γίνεται αναφορά στην αρχική και στην τελική χρονική στιγμή

φόρτισης.

```
#-----  
# HM 08/06/2011  
#  
# This file describes the loading conditions  
#  
#-----  
# prescribed direction of stress  
S  
#-----  
# time step      final time      direction of stress      xfactor  
#-----  
# :1000:         1.              11 22 33 12 13 23      0.005  
#-----  
# one loads from t=0. to t=1 with 1000 steps.  
# At the end of the loading, E11=0.005 (i.e. : 0.5%)  
#-----
```

Στις επόμενες έξι στήλες γίνεται αναφορά στην κατεύθυνση των τάσεων

```
#-----  
# HM 08/06/2011  
#  
# This file describes the loading conditions  
#  
#-----  
# prescribed direction of stress  
S  
#-----  
# time step      final time      direction of stress      xfactor  
#-----  
# :1000:         1.              11 22 33 12 13 23      0.005  
#-----  
# one loads from t=0. to t=1 with 1000 steps.  
# At the end of the loading, E11=0.005 (i.e. : 0.5%)  
#-----
```

Και στην τελευταία αναφέρεται η επιθυμητή ισοδύναμη παραμόρφωση για κάθε

βήμα

```

#-----
# HM 08/06/2011
#
# This file describes the loading conditions
#
#-----
# prescribed direction of stress
S
#-----
# time step      final time      direction of stress      xfactor
#               11 22 33 12 13 23
#-----
:1000:          1.          1. 0. 0. 0. 0. 0.      0.005
#
# one loads from t=0. to t=1 with 1000 steps.
# At the end of the loading, E11=0.005 (i.e. : 0.5%)
#-----

```

Οπότε στο άνωθεν παράδειγμα γίνεται αναφορά για μονοαξονικό εφελκυσμό στον άξονα 1 μέχρι να φτάσει η παραμόρφωση στην αντίστοιχη κατεύθυνση ($\bar{\epsilon}_{11}$) στο 0.5%. Μέχρι να φτάσει σε εκείνο το σημείο θα έχουν γίνει 1000 βήματα, δηλαδή θα λύνεται το πρόβλημα ανά 0.0005% και θα υπολογίζονται τα αντίστοιχα μητρώα μέσω των τάσεων και μέσω των παραμορφώσεων.

Παρόμοια δομή υπάρχει και στην περίπτωση των γνωστών παραμορφώσεων με τη διαφορά ότι δηλώνεται με το γράμμα D και αντί για αναφορά στην κατεύθυνση των τάσεων και στην ισοδύναμη τάση γίνεται αναφορά στις κατευθύνσεις των παραμορφώσεων και στην ισοδύναμη παραμόρφωση. Στην περίπτωση των γνωστών τάσεων και όχι της κατεύθυνσης αυτών δηλώνεται με C.

4.2.6 Αρχείο .output

Σε αυτό το αρχείο δηλώνεται:

- το όνομα των αρχείων των αποτελεσμάτων
- το αν επιθυμούνται οι μέσες τιμές και οι τυπικές αποκλίσεις (first - second moments)
- οι χρονικές στιγμές που επιθυμούνται τα παραπάνω
- το αν επιθυμούνται οπτικά αποτελέσματα, κατανομής τάσεων ή παραμορφώσεων και οι επιθυμητές χρονικές στιγμές που επιθυμούνται

Το αρχείο με κατάληξη .output θα πρέπει να έχει μια παρόμοια δομή με την παρακάτω εικόνα. Όσες γραμμές ξεκινάνε με το σύμβολο της δίεσης για άλλη μια φορά αναφέρονται σε σχόλια ενώ οι υπόλοιπες γραμμές αποτελούν εντολές για να τρέξει ο κώδικας.


```
*ex02.output - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 18/03/2021
#
# File telling which outputs one wants to get
#-----
# generic name of all result files:
generic name=examples/results/ex02 ←
#-----
# stress moment has to be stored:
stress moment = yes ←
#
#-----
# an image of the equivalent strain field has to
# be stored at times 0.1 0.2 0.5 and 1.
equivalent strain image = yes 0.1,0.2,0.5,1. ←
#-----
# the image files in output has to be in vtk format:
im_format=vtk ←
```

Σχήμα 4.18: Επιθυμητό αρχείο περιγραφής των αποτελεσμάτων με κατάληξη .output

Στην πρώτη σειρά θα πρέπει να γραφεί η εντολή `generic name=` και εν συνεχεία το “μονοπάτι” που θα πρέπει να ακολουθηθεί με την τελευταία έκφραση στο μονοπάτι να σηματοδοτεί και την ονομασία των αρχείων των αποτελεσμάτων. Συνεπώς στην προκειμένη περίπτωση τα αποτελέσματα θα εμφανιστούν με το όνομα `ex02` και με κατάληξη που θα συζητηθεί στην επόμενη παράγραφο.

```
*ex02.output - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 18/03/2021
#
# File telling which outputs one wants to get
#-----
# generic name of all result files:
generic name=examples/results/ex02 ←
#-----
# stress moment has to be stored:
stress moment = yes
#
#-----
# an image of the equivalent strain field has to
# be stored at times 0.1 0.2 0.5 and 1.
equivalent strain image = yes 0.1,0.2,0.5,1.
#-----
# the image files in output has to be in vtk format:
im_format=vtk
```

Στη δεύτερη σειρά θα πρέπει να δοθεί η εντολή `stress moment=` και μετά `yes` ή `no` αναλόγως αν επιθυμούνται οι μέσες τιμές των τάσεων και οι τυπικές αποκλίσεις για κάθε φασή ή όχι αντίστοιχα. Στην περίπτωση του ναι, στην ίδια σειρά μπορεί να εκφραστούν και οι χρονικές στιγμές που επιθυμούνται οι τιμές αυτές. Στην παρούσα περίπτωση θα δοθούν μόνο για το τέλος της φόρτισης καθώς δεν έχει εκφραστεί

κάποια συγκεκριμένη χρονική στιγμή, δηλαδή κάποιο συγκεκριμένο βήμα φόρτισης για να εξαχθούν αυτές οι τιμές.

```
*ex02.output - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 18/03/2021
#
# File telling which outputs one wants to get
#-----
# generic name of all result files:
generic name=examples/results/ex02
#- - - - -
# stress moment has to be stored:
stress moment = yes
#
#- - - - -
# an image of the equivalent strain field has to
# be stored at times 0.1 0.2 0.5 and 1.
equivalent strain image = yes 0.1,0.2,0.5,1.
#- - - - -
# the image files in output has to be in vtk format:
im_format=vtk
```

Στην τρίτη σειρά θα πρέπει να εκφραστεί το αν επιθυμείται οπτικό αποτέλεσμα της ανάλυσης με την κατανομή των τάσεων ή των παραμορφώσεων πάνω στην μικροδομή και αν ναι, σε ποιες χρονικές στιγμές. Για να γίνει αυτό γράφεται η εντολή “equivalent strain image” ή “equivalent stress image” και στη συνέχεια “yes” ή “no”. Όπως και πριν αν επιθυμείται μια τέτοιους είδους εικόνα τότε θα πρέπει να εκφραστεί και η αντίστοιχη χρονική στιγμή που αντιστοιχεί σε συγκεκριμένη φόρτιση. Στον παρόν παράδειγμα επιθυμείται για τις χρονικές στιγμές 0.1, 0.2, 0.5 και 1 δευτερόλεπτο η έκδοση της εικόνας της μικροδομής που αντιστοιχεί στην ισοδυναμη παραμόρφωση.

```
*ex02.output - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 18/03/2021
#
# File telling which outputs one wants to get
#-----
# generic name of all result files:
generic name=examples/results/ex02
#- - - - -
# stress moment has to be stored:
stress moment = yes
#
#- - - - -
# an image of the equivalent strain field has to
# be stored at times 0.1 0.2 0.5 and 1.
equivalent strain image = yes 0.1,0.2,0.5,1.
#- - - - -
# the image files in output has to be in vtk format:
im_format=vtk
```

Τέλος, στην τελευταία γραμμή, αν έχει ζητηθεί η εικόνα απο την τρίτη γραμμή θα πρέπει να γραφτεί η εντολή im_format για να εκφραστεί η επιθυμητή κατάληξη της

εικόνας και εδώ συνιστάται να οριστεί η κατάληξη vtk γιατί οι άλλες επιλογές δεν είναι τόσο γνωστές και εύχρηστες, σε αντίθεση με την vtk που μπορεί να ανοίξει μέσω πλατφόρμων όπως το ParaView.

```
*ex02.output - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 18/03/2021
#
# File telling which outputs one wants to get
#-----
# generic name of all result files:
generic name=examples/results/ex02
#- - - - -
# stress moment has to be stored:
stress moment = yes
#
#- - - - -
# an image of the equivalent strain field has to
# be stored at times 0.1 0.2 0.5 and 1.
equivalent strain image = yes 0.1,0.2,0.5,1.
#- - - - -
# the image files in output has to be in vtk format:
im_format=vtk
```

4.2.7 Αρχεία Αποτελεσμάτων

Τα αρχεία που δίνει σαν αποτέλεσμα το CraFT είναι τρία :

1. Αρχείο με κατάληξη .res
2. Αρχείο με κατάληξη .mom
3. Αρχείο με κατάληξη .perf

Αρχείο .res

Σε αυτό το αρχείο δίνονται αποτελέσματα για τις μέσες τάσεις και παραμορφώσεις για όλες τις κατευθύνσεις, δίνονται δηλαδή οι τανυστές $\bar{\sigma}$ και $\bar{\epsilon}$ για κάθε βήμα φόρτισης που έχει οριστεί. Πέρα από τους τανυστές δίνονται και τα σφάλματα σε κάθε επανάληψη, τόσο το σφάλμα σύγκλισης όσο και το σφάλμα στις συνθήκες φόρτισης μαζί με τις επαναλήψεις που χρειάστηκαν για να συγκλίνει η μέθοδος.

Επειδή είναι ανακατεμένες οι τιμές και δύσκολο να εξαχθούν κάποια δεδομένα θα γίνει μετέπειτα κάποια μορφοποίηση του αρχείου αυτού μέσω κώδικα της Matlab.

Αρχείο .perf

Μιας και το αξιοσημείωτο της διαδικασίας είναι η χρονική διάρκεια επίλυσης, δε θα μπορούσε να λείπει και ένα αρχείο που να αναλύει τη χρονική διάρκεια επίλυσης μέσω του CraFT. Ο χρόνος επίλυσης δίνεται μέσω του αρχείου με κατάληξη .perf, περιγράφοντας αναλυτικά το χρόνο που χρειάστηκε σε διάφορα βήματα του κώδικα.

```
1 -----
2                                     time (s)    %age
3 -----
4 time spent in  behavior                : 1493.808    10.60
5 time spent in  FFT                     : 4293.480    30.46
6 time spent in  FFT-1                   : 3533.707    25.07
7 time spent in  lspp                    :  983.921     6.98
8 time spent in  update epsilon          : 1018.930     7.23
9 time spent in  extrapolate state variable:   71.194     0.51
10 time spent in  extrapol                :    0.475     0.00
11 time spent in  phase to image          : 1378.714     9.78
12 time spent in  image to phase         : 1321.135     9.37
13 time spent in  saving moments         :    0.177     0.00
14 time spent in  saving images          :    0.000     0.00
15 -----
16 total time                               : 14095.541
```

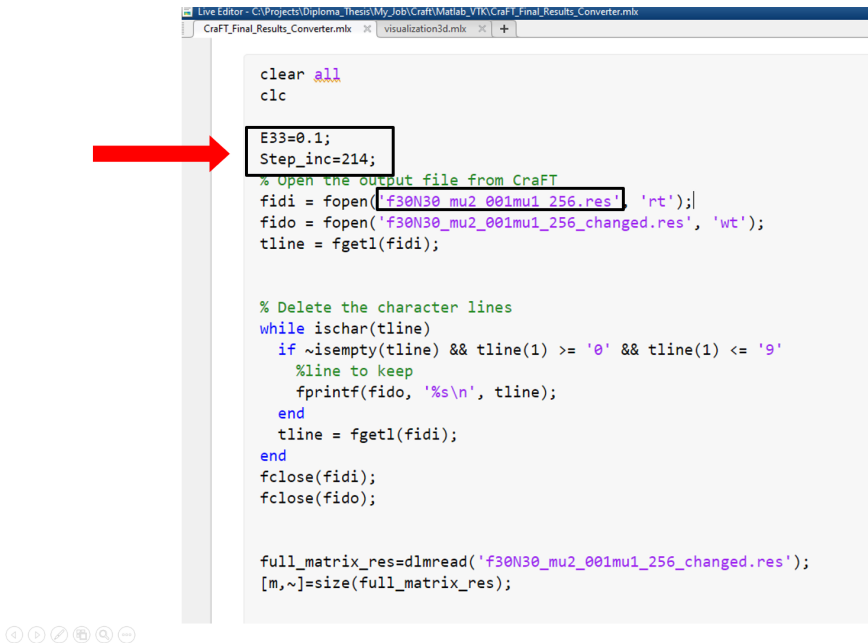
⏪ ⏩ 🔍 🔄 🗑

Σχήμα 4.21: Αρχείο περιγραφής απαιτούμενου χρονικού διαστήματος επίλυσης του προβλήματος με κατάληξη .perf

Τέλος, έχει δημιουργηθεί ένας κώδικας στην Matlab με όνομα **CraFT_Final_Results_Stress_Converter.mlx** όπου έχει ως σκοπό να εξαγάγει ένα μόνο αρχείο με όλες τις απαραίτητες τιμές με σκοπό να γίνουν τα διαγράμματα μετά με κάποιο πρόγραμμα όπως η Mathematica ή Matlab.

Θα πρέπει να δοθεί προσοχή στα “μονοπάτια” και στις τιμές που αντιστοιχούν στο κουτί με το κόκκινο βέλος. Θα πρέπει στην μεταβλητή “Step_inc” να εκχωρηθεί η τιμή των συνολικών βημάτων και στην μεταβλητή “E33” η μέγιστη παραμόρφωση.

Στον κώδικα αυτό χρειάζονται σαν είσοδοι τα αρχεία .res και .mom που εξήχθησαν από την CraFT. Είναι σημαντικό για να μην δημιουργηθούν προβλήματα να τοποθετηθούν με Αντιγραφή - Επικόλληση στον ίδιο φάκελο με τον κώδικα της Matlab. Για τα διαγράμματα θα χρειαστεί μόνο το αρχείο με κατάληξη “final.res” το οποίο αναγράφει όλες τις επιθυμητές τιμές.



```
clear all
clc

E33=0.1;
Step_inc=214;
% Open the output file from CraFT
fidi = fopen('f30N30_mu2_001mu1_256.res', 'rt');
fido = fopen('f30N30_mu2_001mu1_256_changed.res', 'wt');
tline = fgetl(fidi);

% Delete the character lines
while ischar(tline)
    if ~isempty(tline) && tline(1) >= '0' && tline(1) <= '9'
        %line to keep
        fprintf(fido, '%s\n', tline);
    end
    tline = fgetl(fidi);
end
fclose(fidi);
fclose(fido);

full_matrix_res=dlmread('f30N30_mu2_001mu1_256_changed.res');
[m,~]=size(full_matrix_res);
```

Σχήμα 4.22: Αρχείο Matlab μετατροπής των αποτελεσμάτων

4.2.8 Παράδειγμα Απόκρισης Ελαστοπλαστικού υλικού υπό κυκλική φόρτιση

Παρακάτω παραθέτουμε το παράδειγμα απόκρισης σύνθετου υλικού σωματιδιακού τύπου με 2 φάσεις, μια Ελαστική (σωματίδια) και μια Ελαστική - Τέλεια Πλαστική (φορέας) που υπόκειται σε κυκλική φόρτιση. Η μικροδομή είναι περιοδική με τυχαία μονοδιασπορά σωματιδίων, προσδιορισμένα μέσω της μεθόδου RSA, και ο αριθμός των σωματιδίων στο εσωτερικό της ανέρχονται στα 30 με αυτά να καταλαμβάνουν το 10 % της μοναδιαίας κυψελίδας.

Παραγωγή Μικροδομής

Δημιουργία Αρχείου .vtk

Με τη διαδικασία που περιγράφηκε αναλυτικά στο 4.2.2 προκύπτει το εξής αρχείο:

Σχήμα 4.23: Αρχείο μικροδομής παραδείγματος

Δημιουργία Αρχείου .mat

Το παρόν παράδειγμα αναφέρεται σε σύνθετο υλικό με 2 φάσεις που είναι ισότροπες και ασυμπίεστες με το φορέα να αποτελείται από Ελαστικό Τέλεια Πλαστικό Υλικό και τα σωματίδια από Γραμμικώς Ελαστικό Υλικό. Ο λόγος του μέτρου διάτμησης των σωματιδίων προς αυτό της μήτρας ισούται με 2, δηλαδή $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2$ άρα και $E^{(2)}/E^{(1)} = 2$ όπου E το μέτρο ελαστικότητας. Το μέτρο διάτμησης της μήτρας επιλέγεται να είναι 50 φορές μεγαλύτερο από το όριο διαρροής αυτής (σ_y), δλδ $\mu^{(1)}/\sigma_y = 50$ και θεωρώντας το όριο διαρροής 1(GPa) προκύπτει ότι:

- $\mu^{(1)} = 50\text{GPa}$
- $\mu^{(2)} = 100\text{GPa}$
- $E^{(1)} = 149\text{GPa}$
- $E^{(2)} = 298\text{GPa}$

Μιας και οι 2 φάσεις επιλέγονται να είναι τείνουν στην ασυμπίεστοτητα, θα ισχύει ότι για τους λόγους Poisson:

- $\nu^{(1)} = 0.49$
- $\nu^{(2)} = 0.49$

Με όσα περιγράφηκαν στο 4.2.4 το αρχείο που θα περιγράφει τα εκάστοτε υλικά θα είναι το παρακάτω:

```
FILED00.mat - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
#
# material 1 is isotropic linear elastic:
1 1
#
# Young's Modulus
298.
# Poisson coefficient
0.49
#-----
#
# material 0 is elastic perfectly plastic:
0 2
#
# Young's Modulus
149.
# Poisson coefficient
0.49
# yield stress:
1.
#-----
Ln 1, Col 1 210% Unix (LF) UTF-8
```

Σχήμα 4.24: Αρχείο χαρακτηριστικών σταθερών κάθε φάσης παραδείγματος

Δημιουργία Αρχείου .load

Έστω το πείραμα της αξονοσυμμετρικής διάτμησης που εφαρμόζεται κυκλικά στην προαναφερθείσα μικροδομή. Χωρίζοντας την κυκλική φόρτιση σε 8 κομμάτια, η μονάδα μέτρησης των δευτερολέπτων είναι πλασματική, και θεωρώντας ως γνωστές τις παραμορφώσεις και ψάχνοντας τις αντίστοιχες τάσεις μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

- Από 1 μέχρι 100 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από 0 μέχρι 0.015 σε 100 ισαπέχοντα βήματα
- Από 101 μέχρι 200 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από 0.015 μέχρι 0.03 σε 20 ισαπέχοντα βήματα
- Από 201 μέχρι 300 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από 0.03 μέχρι 0.015 σε 100 ισαπέχοντα βήματα
- Από 301 μέχρι 400 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από 0.015 μέχρι 0. σε 20 ισαπέχοντα βήματα
- Από 401 μέχρι 500 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από 0 μέχρι -0.015 σε 20 ισαπέχοντα βήματα
- Από 501 μέχρι 600 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από -0.015 μέχρι -0.03 σε 20 ισαπέχοντα βήματα
- Από 601 μέχρι 700 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από -0.03 μέχρι -0.015 σε 100 ισαπέχοντα βήματα
- Από 701 μέχρι 800 δευτερόλεπτα εφαρμόζεται παραμόρφωση από -0.015

μέχρι 0. σε 20 ισαπέχοντα βήματα

```
*110000.load - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 6/3/2021
#
# This file describes the loading conditions
#
#-----
# prescribed strain
D
#-----
# time step      final time      direction of strain|      xfactor
#               11 22 33 12 13 23
#-----
:100:           100.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.           0.015
:20:            200.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.           0.03
:100:           300.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.           0.015
:20:            400.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.           0
:20:            500.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.          -0.015
:20:            600.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.          -0.03
:100:           700.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.          -0.015
:20:            800.           1. -0.5 -0.5  0. 0. 0.           0
#-----
Ln 11, Col 55      170%  Unix (LF)  UTF-8
```

Σχήμα 4.25: Αρχείο περιγραφής βημάτων φόρτισης αξονοσυμμετρικής διατμητικής παραμόρφωσης παραδείγματος

Ο λόγος που γίνεται τέτοιου είδους διακριτοποίηση της φόρτισης είναι γιατί εκεί που έχουν επιλεγθεί περισσότερα βήματα έχει παρατηρηθεί αλλαγή στην καμπύλη τάσης παραμόρφωσης και απαιτούνται περισσότερα σημεία υπολογισμού.

Δημιουργία Αρχείου .phases

Στο αρχείο .vtk ο αριθμός 1 αντιστοιχεί στα σωματίδια και ο αριθμός 0 στο φορέα. Τόσο το ένα υλικό, όσο και το άλλο είναι ισότροπα για αυτό οι γωνίες Euler παίρνουν μηδενική τιμή και κατ' επέκτασιν η μορφή του αρχείου είναι η κάτωθι:

```

f10N30-phases - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# this file gives for each phase:
# * the material it is made of
# * its orientation (described by 3 Euler angles)
#
# This material comprises the constituents made of two
# different isotropic material (thus the Euler angles play no
# role and can be set to any value, e.g. 0,0,0)
#
#-----
# phase    material    phi1    Phi    phi2
#-----
0          0          0.      0.     0.
1          1          0.      0.     0.
#-----
Ln 1, Col 1      230%  Unix (LF)  UTF-8

```

Σχήμα 4.26: Αρχείο προσδιορισμού προσανατολισμών φάσεων παραδείγματος

Δημιουργία Αρχείου .output

Επιθυμείται η έξοδος των αποτελεσμάτων μακροσκοπικών τάσεων και μακροσκοπικών παραμορφώσεων για το σύνθετο υλικό αλλά και για τα επιμέρους υλικά. Για αυτό πέρα από το όνομα των επιθυμητών αρχείων ζητάτε να δοθούν και οι ταυσιές των τάσεων ($\bar{\sigma}$ και $\bar{\bar{\sigma}}$) για κάθε βήμα φόρτισης. Τέλος δεν επιθυμείται η έκδοση εικονικού αποτελέσματος, για αυτό και η εντολή “no”.

```

f10N30.output - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 6/03/2021
#
# File telling which outputs one wants to get
#-----
# generic name of all result files:
generic name=Diploma_Thesis/f10N30/mu2_2mu1/f10N30_mu2_2mu1_180
#-----
# stress moment has to be stored:
stress moment = yes 1:800
#
#-----
# no image of the equivalent strain field
equivalent strain image = no
#-----
Ln 7, Col 44      200%  Unix (LF)  UTF-8

```

Σχήμα 4.27: Αρχείο προσδιορισμού επιθυμητών αποτελεσμάτων του παραδείγματος

Δημιουργία Αρχείου .in

Τα “μονοπάτια” από τα παραπάνω αρχεία τοποθετούνται με τη σωστή σειρά που αναλύθηκε στο 4.2.1 στο ξεχωριστό αρχείο και δημιουργείται το ακόλουθο.

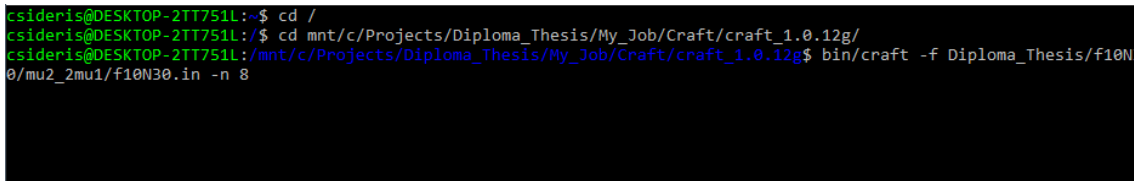


```
f10N30.in - Notepad
File Edit Format View Help
#-----
# HM 16/12/2020
#
#
#-----
# name of the file of the image of the microstructure
microstructure=Diploma_Thesis/f10N30/mu2_01mu1/f10N30_180.vtk
#
#-----
# file in the which the constituents (aka the pahses)
# of the material are described:
phases=Diploma_Thesis/f10N30/mu2_01mu1/f10N30.phases
#
# name of the file describing the materials the phases
# are made of:
materials=Diploma_Thesis/f10N30/mu2_01mu1/f10N30.mat
#
#-----
# file of the loading conditions:
loading=Diploma_Thesis/f10N30/mu2_01mu1/f10N30.load
#
# file telling the outputs one wants to obtain:
output=Diploma_Thesis/f10N30/mu2_01mu1/f10N30.output
#-----
# The parameter C0 has to be set by craft:
C0=auto
#
# required precision for equilibrium and for loading
# conditions:
precision=1.e-2, 1.e-4
#-----
Ln 1, Col 1 170% Unix (LF) UTF-8
```

Σχήμα 4.28: Αρχείο προσδιορισμού των προηγούμενων αρχείων του παραδείγματος

Τρέξιμο Κώδικα

Για να τρέξει ο κώδικας, μέσω τερματικό Linux και του Ubuntu δόθηκε η παρακάτω εντολή:



```
csideris@DESKTOP-2TT751L:~$ cd /
csideris@DESKTOP-2TT751L:/$ cd /mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g/
csideris@DESKTOP-2TT751L:~/mnt/c/Projects/Diploma_Thesis/My_Job/Craft/craft_1.0.12g$ bin/craft -f Diploma_Thesis/f10N30/mu2_2mu1/f10N30.in -n 8
```

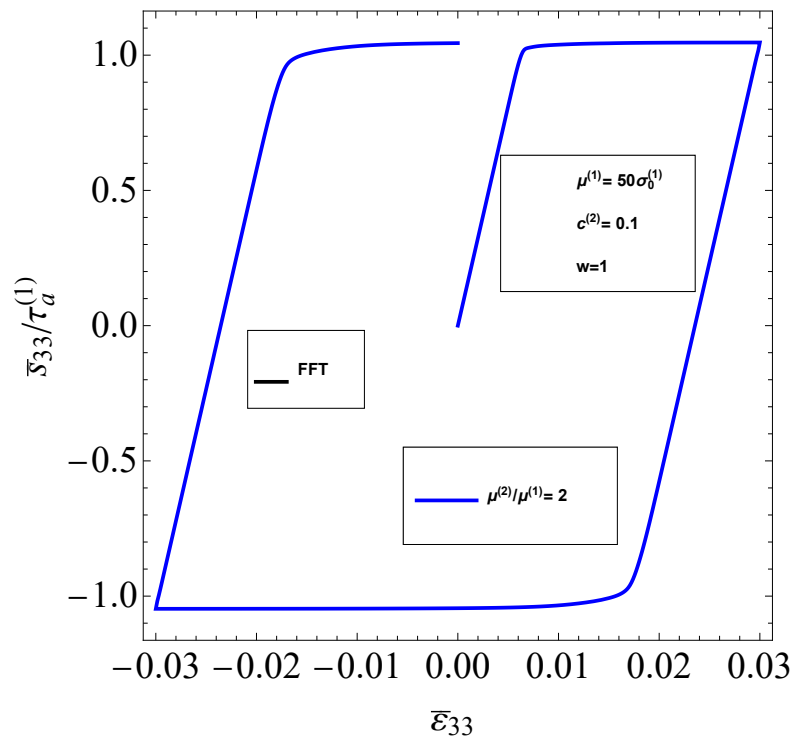
Σχήμα 4.29: Εντολή επίλυσης του προβλήματος σε τερματικό Ubuntu

Μορφοποίηση Αποτελεσμάτων

Με το πέρας του κώδικα, μεταφέρονται τα αρχεία αποτελεσμάτων .res και stress.mom στο φάκελο που είναι το αρχείο μορφοποίησης αποτελεσμάτων της Matlab και βάζοντας τις σωστές ονομασίες των αρχείων και των τιμών στις πρώτες γραμμές, εξάγεται το επιθυμητό αρχείο

Γραφική Παράσταση

Το παραπάνω αρχείο θα δώσει το εξής αποτέλεσμα, αν τοποθετηθούν τα ζεύγη τιμών τάσεων παραμορφώσεων σε άξονες.



Σχήμα 4.30: Γραφική παράσταση μακροσκοπικής απόκρισης παραδείγματος, με την αποκλίνουσα τάση να κανονικοποιείται με το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα σε συνάρτηση της μακροσκοπικής απόκρισης

Κεφάλαιο 5

Εφαρμογές

Όπως προαναφέρθηκε, το βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου FFT είναι ότι βρίσκει απευθείας εφαρμογή δίχως τη δημιουργία πλέγματος για τους υπολογισμούς με αποτέλεσμα να οδηγούμαστε στην επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης αρκετά γρήγορα. Υπάρχουν περιπτώσεις, όπου η μέθοδος είναι πολύ πιο γρήγορη από τη μέθοδο FEM και άλλες που η μέθοδος FEM είναι πιο αποδοτική. Στο παρόν Κεφάλαιο, θα εφαρμοστεί ο κώδικας της CRaFT για τη μακροσκοπική απόκριση τυχαίων μικροδομών σωματιδιακού τύπου με τη μέθοδο FFT και θα ελεγχθεί η αποδοτικότητα αυτής ως προς το χρόνο.

Για να είναι ακριβή τα αποτελέσματα θα πρέπει να γίνουν έλεγχοι σύγκλισης των αποτελεσμάτων. Σε ένα πρώτο βήμα, θα παρουσιαστεί η μακροσκοπική απόκριση για διάφορες χωρικές αναλύσεις (spatial resolution) της αρχικής μικροδομής, με σκοπό να επιλεγεί η κατάλληλη ανάλυση, όπου η λύση θα έχει συγκλίνει. Με τον όρο χωρική ανάλυση εννοούμε τον κατάλληλο αριθμό voxels. Εν συνεχεία, έχοντας ως σταθερή την χωρική ανάλυση της μικροδομής, θα ελεγχθεί η μακροσκοπική απόκριση με αλλαγή των αριθμών βημάτων φόρτισης. Όπως μπορεί να παρατηρηθεί από την Εξίσωση (3.16), η αρχικοποίηση του πεδίου των παραμορφώσεων επηρεάζεται από τις τιμές των παραμορφώσεων στα δύο προηγούμενα βήματα φόρτισης, οπότε είναι λογική και η εξάρτηση των τιμών των τάσεων και παραμορφώσεων από το πλήθος των αριθμών βημάτων φόρτισης. Για τον αριθμό voxels και το πλήθος βημάτων φόρτισης που παρατηρούμε σύγκλιση με τη χαμηλότερη χρονική διάρκεια, θα γίνουν περαιτέρω υπολογισμοί για την μακροσκοπική απόκριση.

Για να παρατηρήσουμε την αποδοτικότητα της μεθόδου θα συγκρίνουμε τους απαιτούμενους χρόνους που χρειάστηκε τόσο αυτή η μέθοδος όσο και η FEM, μέσω του προγράμματος της ABAQUS [19], για τα ίδιες περιπτώσεις μικροδομών και φορτίσεων.

Συνδέουμε την παρούσα εργασία με τις εφαρμογές που έκαναν σε τυχαίες μικροδομές σωματιδιακού τύπου στην έρευνά τους οι Agoras et. al. [7], για να μπορέσουμε να συγκρίνουμε την αποδοτικότητα ως προς το χρόνο για τις δύο μεθόδους. Γι' αυτό, επιλέγουμε τυχαίες μικροδομές που αναλύθηκαν και στην έρευνα αυτή και τις συνθήκες φόρτισης που επέλεξαν για τις εφαρμογές τους.

Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι οι υπολογισμοί έγιναν σε Υπολογιστή με τα εξής χαρακτηριστικά:

- Επεξεργαστής: Intel(R) Core (TM) i5-1035G1 CPU @ 1.00 GHz 1.19 GHz
- με 8 πυρήνες (cores)
- RAM: 8 GB
- OS: Windows 10 Home

5.1 Μικροδομή

Οι τυχαίες μικροδομές για τους υπολογισμούς θα παραχθούν μέσω της μεθόδου RSA που προτάθηκε από τους Rintoul και Torquato (1997) [3]. Χρησιμοποιώντας έναν τυχαίο αριθμό για την επιλογή των κέντρων των σωματιδίων, τοποθετούνται σωματίδια σφαιρικού σχήματος επαναληπτικά με το χρήστη να δίνει το ποσοστό αυτών $c^{(2)}$ στη μοναδιαία κυψελίδα μήκους L και το πλήθος αυτών N , σε κάθε επανάληψη προστίθεται ένα σωματίδιο. Εάν κάποιο σημείο του σωματιδίου συμπέσει με σημείο από σωματίδιο που έχει τοποθετηθεί από προηγούμενη επανάληψη, απορρίπτεται. Στην περίπτωση που δε χωράει όλο το σωματίδιο μέσα στον κύβο και υπερβαίνει τα όρια, τότε εμφανίζεται από την άλλη μεριά της κυψελίδας λόγω της περιοδικότητας αυτής. Στην περίπτωση που οι σφαίρες είναι ίδιου μεγέθους και δηλαδή γίνεται μονοδιασπορά σωματιδίων, για ακτίνα αυτών R ισχύει ότι,

$$R = \left(\frac{3L^3 c^{(2)}}{4N\pi} \right)^{1/3} \quad (5.1)$$

Για σφαιροειδή σωματίδια η διαδικασία είναι παρόμοια, ενώ για πολυδιασπορά διαφέρει εν μέρει ο κώδικος μιας και οι σφαίρες δεν έχουν ίδιο μέγεθος και ελέγχεται και η αλλαγή της ακτίνας κατάλληλα για να παραχθούν και άλλα σωματίδια. Τέτοιοι υπολογισμοί υπάρχουν στην έρευνα των Paradioti et. al. [8] για διαφασικό αλλά και υλικό περισσότερων φάσεων.

Οι υπολογισμοί που θα παρουσιαστούν στο παρόν κεφάλαιο αντιστοιχούν σε διαφασικό υλικό με ομογενείς ισότροπες φάσεις. Τα σωματίδια συμπεριφέρονται ως γραμμικά ελαστικά υλικά, ενώ ο φορέας ως γραμμικά ελαστικό τέλεια πλαστικό υλικό. Επιθυμούμε να είναι ασυμπίεστα τα υλικά, αλλά επειδή τα προγράμματα είναι αδύνατον να “τρέξουν” δίνοντας τιμή για το λόγο Poisson (ν) ίσο με 0.5, ορίζεται ως αντιπροσωπευτική τιμή το 0.49. Εξαιτίας της σχεδόν ασυμπίεστότητας των επιμέρους υλικών και δεδομένου ότι οι συνριακές συνθήκες είναι τύπου γραμμικών μετατοπίσεων, δε μπορεί να γνωρίζει κάποιος τι περιέχει ο υδροστατικός όρος του τανυστή των τάσεων $\bar{\sigma}$. Το αποκλίνον μέρος είναι αυτό που εμπεριέχεται στις καταστατικές εξισώσεις. Για το λόγο αυτό, τα διαγράμματα που θα ακολουθήσουν θα αναφέρονται στο αποκλίνον μέρος της τάσης στον άξονα 3, δηλαδή το \bar{s}_{33} και όχι στο $\bar{\sigma}_{33}$.

Στους υπολογισμούς με τη μέθοδο FFT η μικροδομή θα διακριτοποιηθεί σε N^3 voxels. Για το πλήθος αυτών που η λύση θα συγκλίνει θα κάνουμε περαιτέρω υπολογισμούς στη συνέχεια.

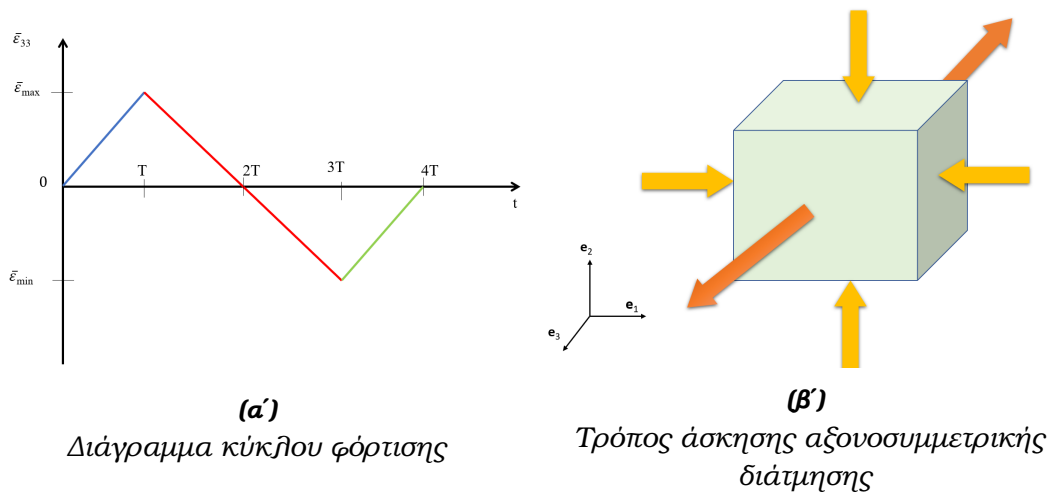
Σε πλήρη σύνδεση με την προαναφερθείσα έρευνα [7], για τη σύγκριση των απαιτούμενων χρόνων της μεθόδου με την FEM, επιλέγουμε τα πλέγματα των μικροδομών να χαρακτηρίζονται από τα στοιχεία που καταγράφονται στον Πίνακα 5.1. Το “N” αντιστοιχεί στο πλήθος των σφαιριδίων, “NN” στο πλήθος των κόμβων, “NEL” στο πλήθος των στοιχείων και “DOF” στο πλήθος των βαθμών ελευθερίας. Όπως και στο αναφερθέν άρθρο [7], έτσι και στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκαν μικροδομές που το πλέγμα τους έχει δημιουργηθεί μέσω του προγράμματος “NETGEN” [20] που είναι ικανό να παράγει περιοδικά πλέγματα όπως χρειάζονται στις παρούσες περιπτώσεις. Τα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν είναι τρισδιάστατα δεκα-κομβικά τετραεδρικά με 4 σημεία ολοκλήρωσης Gauss (C3D10H στην ABAQUS).

Πίνακας 5.1: Το ποσοστό φάσης των σωματιδίων, το πλήθος αυτών, ο αριθμός κόμβων και στοιχείων και οι βαθμοί ελευθερίας που χρησιμοποιήθηκαν σε κάθε περίπτωση στην Επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων

$c^{(2)}$	N	NN	NEL	DOF
10%	30	36,033	14,453	79,193
20%	30	44,005	17,344	97,327
30%	30	109,063	43,814	239,561

5.2 Συνθήκες Φόρτισης

Υπάρχουν διάφοροι τύποι φορτίσεων που μπορούν να επιβληθούν σε ένα δοκίμιο, μονοαξονικός εφελκυσμός, μονοαξονική θλίψη, καθαρή διάτμηση, καθαρή θλίψη κ.α. ή και συνδυασμός αυτών. Στην παρούσα εργασία, στο υπό εξέταση υλικό θα ασκηθεί αξονοσυμμετρική διάτμηση, που αποτελείται από εφελκυσμό στη διεύθυνση 3 και δύο ισόποσες θλίψεις στα επίπεδα κάθετα στις άλλες δύο κατευθύνσεις, όπως απεικονίζεται στην Εικόνα 5.1β'. Στο Σχήμα 5.1α' αποτυπώνεται ο κύκλος φόρτισης, όπου μέχρι τη θετική σταθερά T αυξάνεται μονοτονικά (μπλε γραμμή) η ϵ_{33} μέχρι το $\bar{\epsilon}_{max}$, στη συνέχεια αντιστρέφεται η φορά της φόρτισης (κόκκινη γραμμή) μέχρι το $\bar{\epsilon}_{min}$ και τέλος ξανά αντιστρέφεται η φορά της φόρτισης (πράσινη γραμμή) μέχρι που μηδενίζεται η παραμόρφωση και η μικροδομή επανέρχεται στην αρχική της γεωμετρία.



Σχήμα 5.1: Αξονοσυμμετρική διάτμηση

Δηλαδή για την επιβληθείσα μακροσκοπική παραμόρφωση ισχύει ότι $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \bar{\varepsilon}_0(t) \left[\mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1) \right] \quad (5.2)$$

όπου το $\bar{\varepsilon}_0(t)$ αποτελεί την περιοδική τρίκλαδη γραμμική συνάρτηση:

$$\bar{\varepsilon}_0(t) = \begin{cases} aT & \text{εάν } 0 \leq t \leq T, \\ a(2T - t) & \text{εάν } T < t \leq 3T \\ a(t - 4T) & \text{εάν } 3T < t \leq 4T \end{cases} \quad (5.3)$$

όπου $4T$ η χρονική διάρκεια του κύκλου φόρτισης και a μια θετική αυθαίρετη σταθερά, η τιμή της οποίας δεν επηρεάζει τον υπολογισμό της σχέσης μεταξύ τάσεων και παραμορφώσεων για το σύνθετο υλικό. Από τη στιγμή που επιλέγεται η παρούσα φόρτιση, η συνοριακή συνθήκη είναι τύπου γραμμικών μετατοπίσεων.

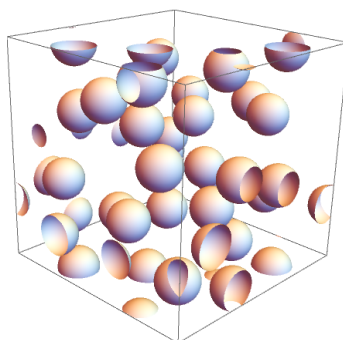
Για τους υπολογισμούς με τη μέθοδο FFT, θα κάνουμε έλεγχο για το πλήθος των βημάτων φόρτισης όπου χρειάζονται ώστε να συγκλίνει η καμπύλη της μακροσκοπικής απόκρισης. Επειδή η CRaFT δεν έχει τη δυνατότητα να ορίσει με “έξυπνο” τρόπο την απόσταση ανάμεσα στα βήματα φόρτισης όπως έχει η ABAQUS, θα επιλέξουμε διάφορες περιπτώσεις πλήθους ισαπέχοντων βημάτων φόρτισης και θα διαλέξουμε την κατάλληλη.

5.3 Εφαρμογές με μεταβολή των Ελαστικών Σταθερών των φάσεων

Στο πρώτο στάδιο των υπολογισμών με τη μέθοδο FFT θα παρουσιάσουμε τις καμπύλες τάσεων παραμορφώσεων με αλλαγή των ελαστικών σταθερών των επιμέρους υλικών και εν συνεχεία θα τις σχολιάσουμε κατάλληλα κατάλληλα. Οι συγκρίσεις αυτές θα γίνουν για τρεις διαφορετικές μικροδομές με διαφορετικό ποσοστό φάσεων, $c^{(2)} = 10\%$, $c^{(2)} = 20\%$ και $c^{(2)} = 30\%$.

5.3.1 Περιοδική Μικροδομή με τυχαία Μονοδιασπορά 30 Σφαιριδίων που καταλαμβάνουν το 10% του RVE

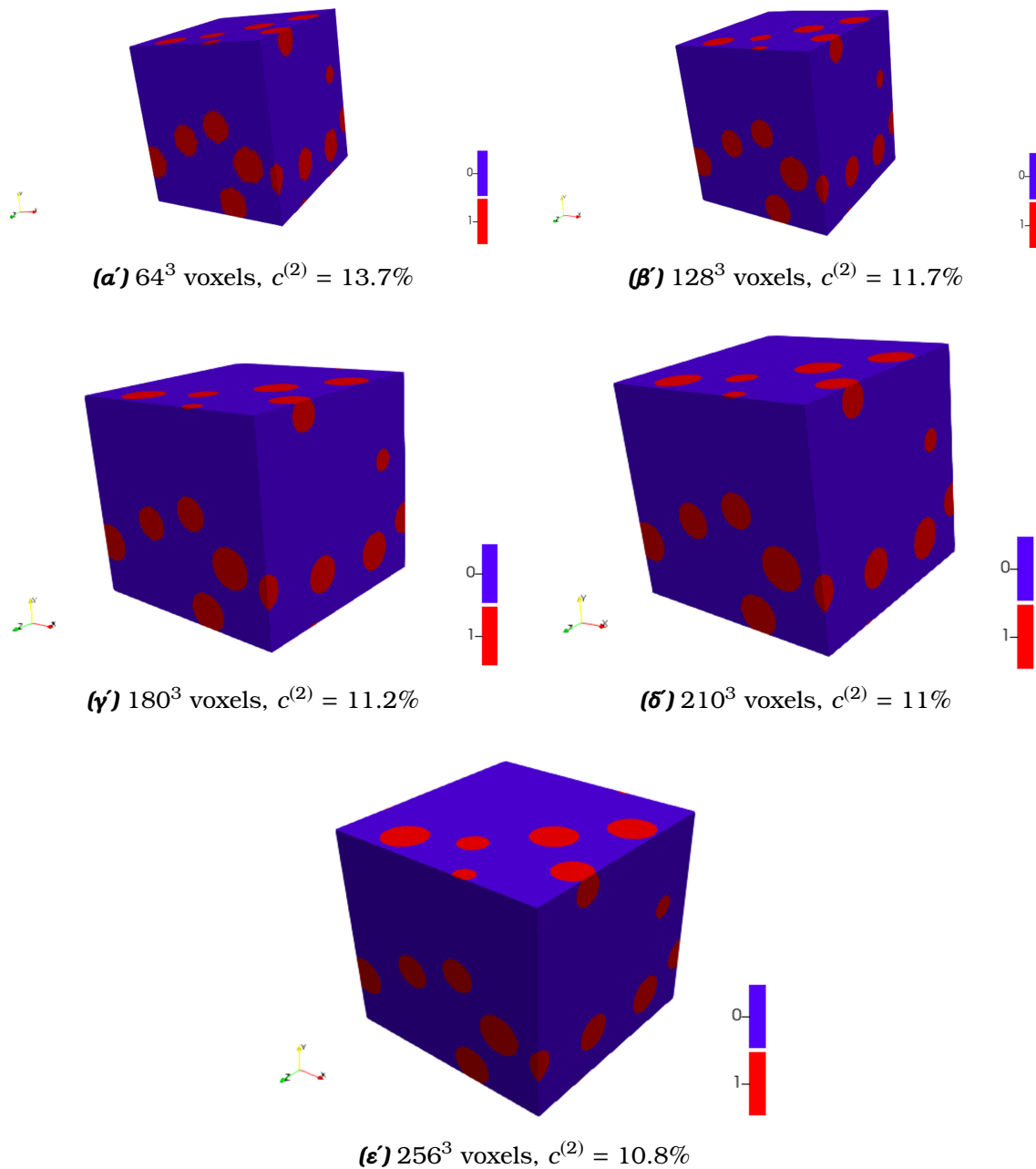
Θεωρώντας την περιοδική μικροδομή του Σχήματος 5.2 αποτελούμενη από 30 σφαίρες οι οποίες διατάσσονται τυχαία μέσω της μεθόδου RSA και καταλαμβάνουν το 10% της μοναδιαίας κυψελίδας θα τεθεί ο στόχος να εξαχθεί ένα διάγραμμα που να αποτυπώνει τη σχέση της μακροσκοπικής τάσης του υλικού συναρτήσει της μακροσκοπικής παραμόρφωσης με τη μέθοδο FFT. Ο έλεγχος συγκλίσεων, τόσο για τον απαιτούμενο αριθμό voxels όσο και για τον απαιτούμενο αριθμό βημάτων, προέχουν.



Σχήμα 5.2: Σύνθετο υλικό με περιοδική μικροδομή αποτελούμενο από 30 σφαίρες ίδιας ακτίνας R που καταλαμβάνουν το 10%

Σύγκριση Χωρικής Ανάλυσης

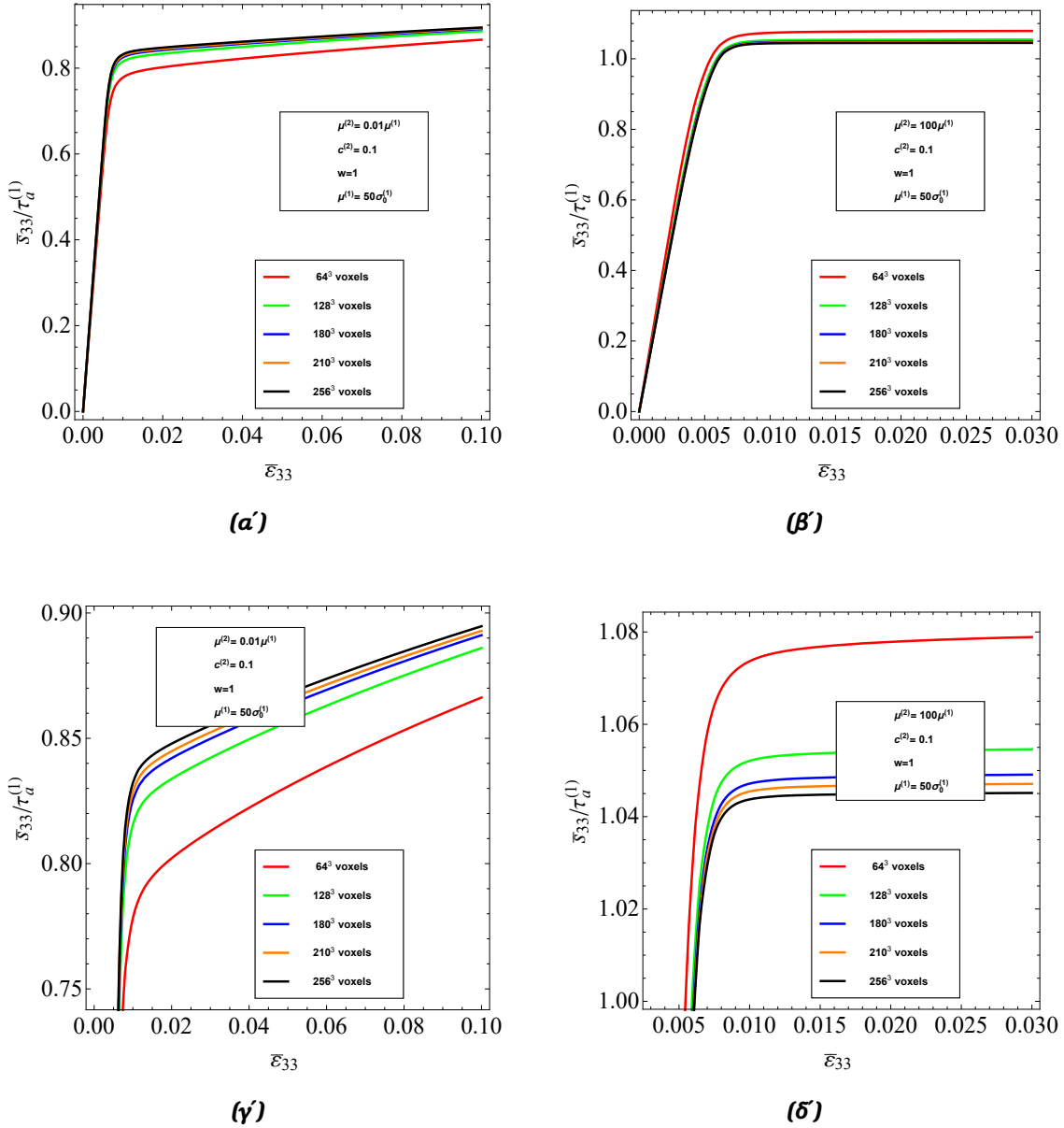
Όπως προαναφέρθηκε, η μικροδομή του Σχήματος 5.2 σε ένα πρώτο στάδιο θα μετατραπεί σε μικροδομές με διαφορετική χωρική ανάλυση, διαφορετικό αριθμό voxels. Οι αναλύσεις που προτιμήθηκαν είναι οι 64^3 , 128^3 , 180^3 , 210^3 , 256^3 voxels όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.3. Είναι εμφανές ότι για τη μικρότερη ανάλυση, 64^3 voxels, οι σφαίρες παρουσιάζουν ατέλειες με τα voxels να είναι εμφανή και με το μάτι, γεγονός που θα φανεί στη συνέχεια κατά πόσο θα επηρεάσει στην ακρίβεια της λύσης. Καθώς αυξάνεται ο αριθμός των voxels φαίνεται να υπάρχει μεγαλύτερη ακρίβεια της μικροδομής και αδυναμία να ξεχωρίσει κάποιος εποπτικά ποια μικροδομή αποτελείται από μεγαλύτερο αριθμό voxels. Η μεγαλύτερη ακρίβεια στη γεωμετρία μπορεί να παρατηρηθεί και μέσω του ποσοστού φάσης $c^{(2)}$ το οποίο μεταβάλλεται με την αλλαγή των αριθμό voxels της μικροδομής. Όπως θα δούμε και στο Σχήμα 5.3 με την αύξηση της χωρικής ανάλυσης το ποσοστό φάσεων τείνει στο 10% που έχουμε ορίσει εξ αρχή ως το επιθυμητό ποσοστό σωματιδίων. Οι εικόνες των μικροδομών έχουν εξαχθεί μέσω του Προγράμματος ParaView [21].



Σχήμα 5.3: Διαφορετικές χωρικές αναλύσεις σε voxels της 3D μικροδομής του Σχήματος 5.2, μέσω του προγράμματος ParaView. Κάθε διαφορετική περίπτωση χωρικής ανάλυσης αντιστοιχεί σε διαφορετικό ποσοστό φάσεων. Όσο αυξάνεται το πλήθος των voxels, τόσο το $c^{(2)}$ τείνει στο 10%.

Η φόρτιση που ασκείται στο RVE είναι τύπου αξονοσυμμετρικής διάτμησης, όπως περιγράφηκε στην Ενότητα 5.2 μόνο που αντί να γίνει κύκλος φόρτισης, ασκείται μόνο το κομμάτι της φόρτισης χωρίς το κομμάτι της αντίστροφης φόρτισης και της επαναφόρτισης. Για να επιλεγθεί ο ελάχιστος αριθμός voxels που η καμπύλη συγκλίνει αρκεί ακόμα και ένα μέρος του κύκλου φορτίσεως, για αυτό γίνεται και η απλοποίηση αυτή στη φόρτιση. Ένας άλλος λόγος είναι ότι περιορίζοντας τη φόρτιση μόνο στο πρώτο μέρος θα είναι πιο εμφανείς διαγραμματικά η διαφορά της μακροσκοπικής συμπεριφοράς για κάθε περίπτωση.

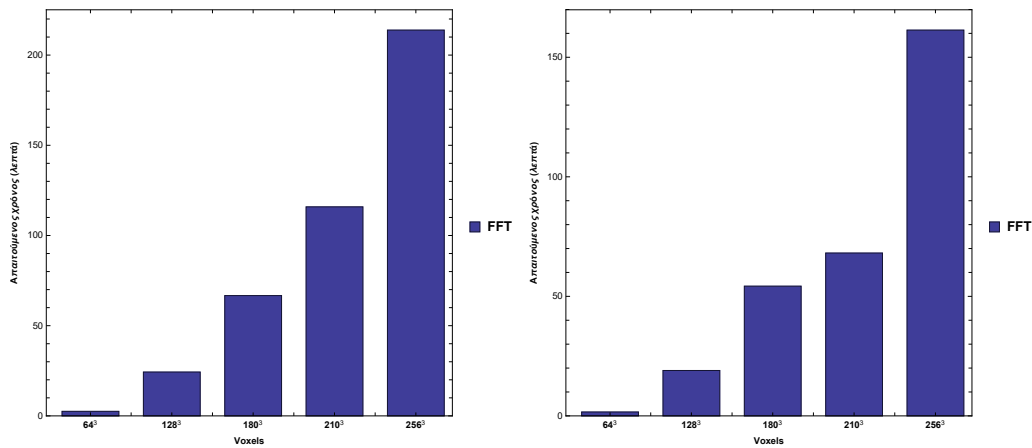
Στο Σχήμα 5.4 αποτυπώνεται στα πάνω διαγράμματα η καμπύλη της μακροσκοπικής αποκλίνουσας τάσης \bar{s}_{33} κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα ως συνάρτηση της μακροσκοπικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$ για τη μακροσκοπική φόρτιση που προαναφέρθηκε για κάθε περίπτωση αριθμών voxels που προαναφέρθηκαν. Το αριστερό διάγραμμα αποτελεί την ακραία περίπτωση όπου το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι πολύ μικρότερο από το μέτρο διάτμησης του φορέα ενώ το δεξί, το αντίστροφο. Τα από κάτω διαγράμματα στο ίδιο Σχήμα αποτελούν μεγέθυνση των από πάνω τους, με σκοπό να είναι πιο εμφανείς η διαφορά στις καμπύλες.



Σχήμα 5.4: Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 10% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διατμητικής παραμόρφωσης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ ενώ δεξιά τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την \bar{S}_{33} , μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης \bar{E}_{33} . Και οι 2 περιπτώσεις χωρικής σύγκλισης αφορούν ανάλυση 64^3 , 128^3 , 180^3 , 210^3 , και 256^3 voxels. Οι εικόνες 5.4γ' και 5.4δ' είναι μεγέθυνση των 5.4α' και 5.4β' αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν 200 βήματα φόρτισης για τα αριστερά διαγράμματα και 120 για τα δεξιά.

Όπως μπορεί να παρατηρηθεί από τα πάνω διαγράμματα είναι ότι εξαιρουμένης της περίπτωσης των 64^3 voxels, υπάρχει σχεδόν ταύτιση αποτελεσμάτων, που σημαίνει ότι η λύση καθώς αυξάνεται η χωρική ανάλυση της μικροδομής συγκλίνει σε

κάποια τιμή. Στην Εικόνα 5.4γ' που μπορεί να φανεί πιο ξεκάθαρα η διαφορά στις καμπύλες, με την υπόθεση ότι επιθυμείται απόκλιση μικρότερη του 1% επιλέγονται η πορτοκαλί και η μπλε καμπύλη που αντιστοιχούν στην περίπτωση των 210^3 και 180^3 voxels αντίστοιχα. Λαμβάνοντας υπόψη και τους χρόνους από το αριστερό Ραβδόγραμμα και την αριστερή στήλη του Σχήματος 5.5 η περίπτωση των 210^3 voxels χρειάζεται σχεδόν το διπλάσιο χρόνο για να ολοκληρωθούν οι απαραίτητοι υπολογισμοί σε σχέση με αυτούς για την περίπτωση των 180^3 voxels. Αντίστοιχα στην περίπτωση όπου ο λόγος των μέτρων διατμήσεων ισούται με μεγάλο αριθμό, στην προκειμένη περίπτωση 100, στην Εικόνα 5.4δ' και σε μεγέθυνση στην Εικόνα 5.4δ', οι καμπύλες για 210^3 και 180^3 voxels έχουν απόκλιση με την καμπύλη των 256^3 voxels μικρότερη του 1%. Παρατηρώντας το δεξί ραβδόγραμμα του Σχήματος 5.5 και τη δεξιά στήλη στον Πίνακα 5.2, παρατηρείται ότι η επίλυση με τη χρήση της μικροδομής αποτελούμενη από 180^3 voxels, $c^{(2)} = 11.2\%$, γίνεται πιο γρήγορα από αυτή την περίπτωση που αποτελείται από 210^3 voxels.



Σχήμα 5.5: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.4 για κάθε διαφορετική περίπτωση αριθμών voxels. Το αριστερό Ραβδοδιάγραμμα αντιστοιχεί σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$

Πίνακας 5.2: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.5

Απαιτούμενος χρόνος (λεπτά)			
voxels	$\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$	voxels	$\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$
64^3	2.518	64^3	1.63
128^3	24.304	128^3	18.99
180^3	66.69	180^3	54.26
210^3	115.87	210^3	68.12
256^3	213.85	256^3	161.36

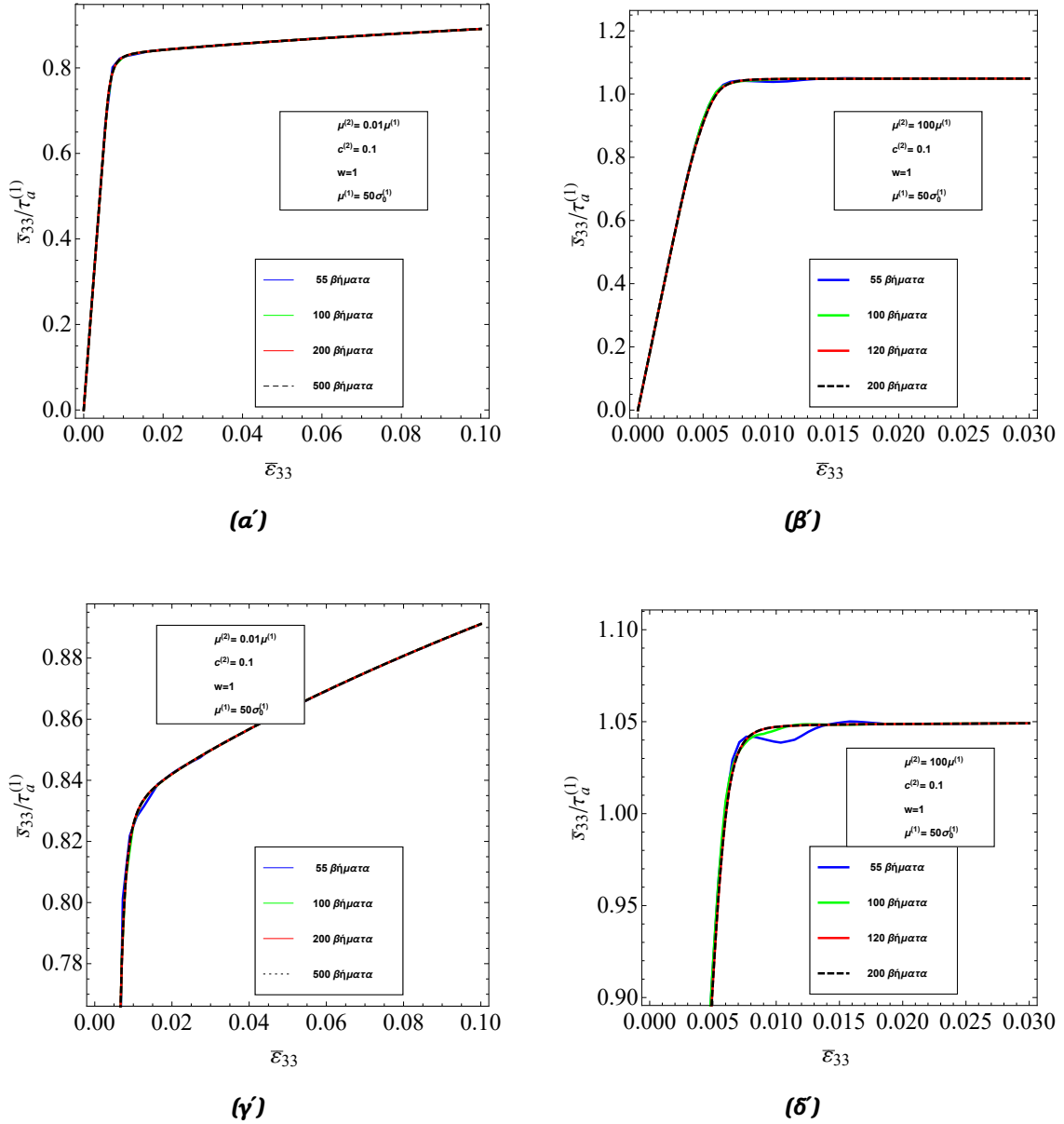
Σύγκριση Πλήθους Βημάτων Φόρτισης

Σε ένα δεύτερο στάδιο, θα πρέπει να βρεθεί ο κατάλληλος αριθμός βημάτων όπου η λύση με τη μέθοδο FFT συγκλίνει, όπως έγινε αναφορά και νωρίτερα. Η μικροδομή του Σχήματος 5.3γ' υπόκειται σε φόρτιση όμοια με αυτή της προηγούμενης ενότητας, μόνο που στην προκειμένη περίπτωση αλλάζει σε κάθε περίπτωση το πλήθος των βημάτων φόρτισης. Τα πλήθη των βημάτων φόρτισης είναι τα εξής

- Για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$
 1. 55 ισαπέχοντα βήματα
 2. 100 ισαπέχοντα βήματα
 3. 200 βήματα (150 ισαπέχοντα βήματα για τη μισή φόρτιση και άλλα 50 ισαπέχοντα μέχρι το τέλος)
 4. 500 ισαπέχοντα βήματα
- Για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$
 1. 55 ισαπέχοντα βήματα
 2. 100 ισαπέχοντα βήματα
 3. 120 βήματα (100 ισαπέχοντα βήματα για τη μισή φόρτιση και άλλα 20 ισαπέχοντα μέχρι το τέλος)
 4. 200 βήματα (150 ισαπέχοντα βήματα για τη μισή φόρτιση και άλλα 50 ισαπέχοντα μέχρι το τέλος)

Επιλέγουμε για την περίπτωση όπου $\mu^{(2)} < \mu^{(1)}$ η παραμόρφωση να φτάνει μέχρι

0.1, σε αντίθεση με την περίπτωση όπου $\mu^{(2)} > \mu^{(1)}$ που φτάνει μέχρι 0.03. Ο λόγος που έχουμε επιλέξει στην πρώτη περίπτωση να είναι μεγάλη η παραμόρφωση είναι επειδή θέλουμε να παρατηρήσουμε τη συμπεριφορά και στην πλαστική περιοχή. Αν επιλέγαμε μικρότερη δε θα μπορούσαμε να εξάγουμε συμπεράσματα για την πλαστική περιοχή. Η διαφορά στο πλήθος βημάτων στις δύο αυτές περιπτώσεις θα μας κάνει να επιλέξουμε περισσότερα βήματα όταν $\mu^{(2)} < \mu^{(1)}$ από την περίπτωση $\mu^{(2)} > \mu^{(1)}$, όπως θα αποδειχθεί και στη συνέχεια.



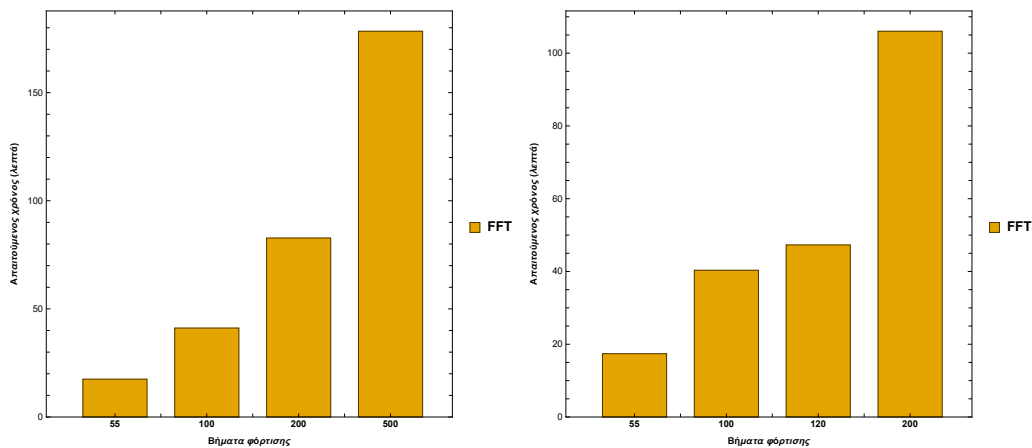
Σχήμα 5.6: Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 10% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και δεξιά $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την $\bar{\epsilon}_{33}$, μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, να αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην 5.6α περίπτωση έγινε ανάλυση για 55, 100, 200, και 500 βήματα φόρτισης, ενώ στη 5.6β για 55, 100, 120, και 200. Οι 5.6γ και 5.6δ αποτελούν μεγέθυνση των προηγούμενων αντίστοιχα. Η μικροδομή αποτελείται από 180^3 voxels

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.6α, όπου το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι αρκετά μικρότερο από αυτό του φορέα, για όλες τις περιπτώσεις οι καμπύλες φαίνονται να ταυτίζονται. Λαμβάνοντας, όμως, υπόψη το διάγραμμα του Σχήματος 5.6γ και τους χρόνους που χρειάζεται η κάθε περίπτωση από το αριστερό ραβδόγραμμα

του Σχήματος 5.7 η καμπύλη των 200 βημάτων πρόκρισης ταυτίζεται με αυτή των 500 βημάτων και ο χρόνος είναι λίγο παραπάνω από μισός, ενώ οι άλλες δύο περιπτώσεις των λιγότερων βημάτων φαίνεται πως στο Σχήμα 5.6γ' υπάρχει μια μικρή απόκλιση σε σύγκριση με αυτή των 500 βημάτων για αυτό η περίπτωση των 200 βημάτων θα αποτελέσει την ιδανική περίπτωση.

Αναφορικά με την περίπτωση, όπου το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι αρκετά μεγαλύτερο από αυτό του φορέα από τα Σχήματα 5.6β' και 5.6δ' είναι εμφανές ότι με την επιλογή των 55 και 100 βημάτων η λύση αποκλίνει από αυτή των περισσότερων βημάτων. Γι' αυτό επιλέχθηκε να γίνουν πολλές επαναλήψεις στο πρώτο μισό μέρος της φόρτισης, μέχρι η μακροσκοπική παραμόρφωση $\bar{\epsilon}_{33}$ να φτάσει στο 0.015, όπου παρουσιάζεται η απόκλιση τις προηγούμενες περιπτώσεις και στο άλλο μισό να γίνουν λίγες επαναλήψεις. Με την επιλογή των 120 συνολικών βημάτων επιτυγχάνεται ίδια απόκριση με αυτή των 200 βημάτων και λαμβάνοντας υπόψη το δεξί ραβδόγραμμα του Σχήματος 5.7 η περίπτωση των 120 βημάτων δίνει αποτέλεσμα σε πολύ μικρότερο χρονικό διάστημα από αυτή των 200 βημάτων.

Λαμβάνοντας υπόψιν τα όσα παρατηρήσαμε για τις 2 ακραίες περιπτώσεις διαφασικού σύνθετου υλικού, για την περίπτωση όπου το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από αυτό του φορέα η φόρτιση θα χωριστεί σε 200 βήματα, ενώ όταν είναι μεγαλύτερο σε 120 βήματα.



Σχήμα 5.7: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.6 για κάθε διαφορετική περίπτωση πλήθους βημάτων φόρτισης. Το αριστερό Ραβδόγραμμα αντιστοιχεί σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$

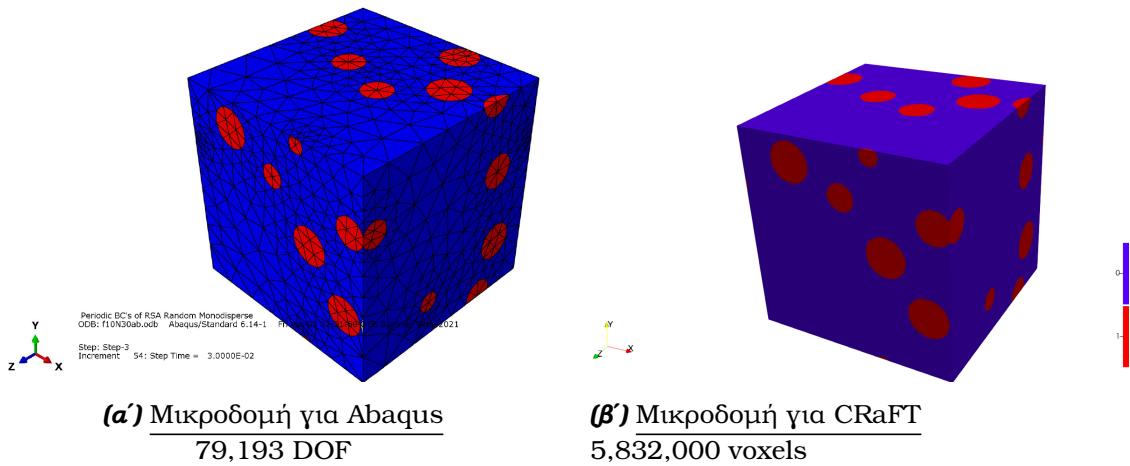
Πίνακας 5.3: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.7

Απαιτούμενος χρόνος της CRaFT (λεπτά) με αλλαγή των βημάτων φόρτισης			
Βήματα	Χρόνος για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$	Βήματα	Χρόνος για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$
55	17.5	55	17.4
100	41.14	100	40.34
200	82.77	120	47.3
500	178.39	200	106.03

Σύγκριση Απαιτούμενων Χρόνων FFT - FEM

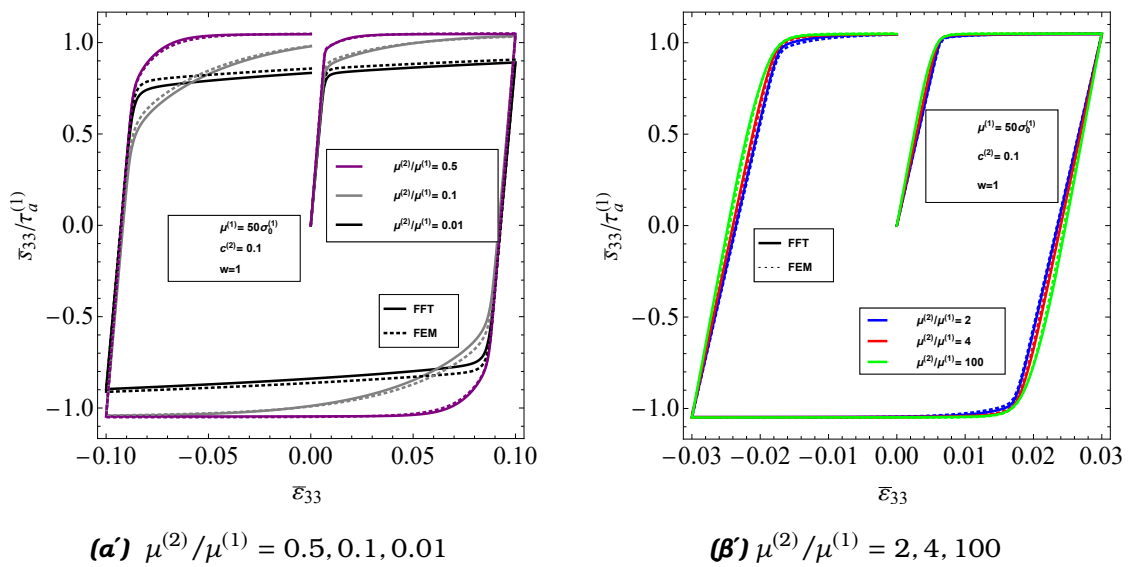
Σύμφωνα με τους δύο προηγούμενους ελέγχους ο υπολογισμός της μακροσκοπικής αποκλίνουσας τάσης του σύνθετου υλικού της Εικόνας 5.2 που υποβάλλεται σε κύκλο αξονοσυμμετρικής διατμητικής παραμόρφωσης θα γίνει για χωρική ανάλυση ίση με 180^3 voxels ($c^{(2)} = 11.2\%$) με τον αριθμό βημάτων να είναι συνολικά περίπου ο τετραπλάσιος από αυτόν που αποφασίστηκε στην Ενότητα 5.3.1. Καθώς το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από του φορέα θα επιλεγούν *700 βήματα φόρτισης* και *400 βήματα φόρτισης* όταν είναι μεγαλύτερο. Ο σχεδόν τετραπλασιασμός αυτός οφείλεται στο ότι οι ακόλουθοι υπολογισμοί αφορούν σε κύκλο φόρτισης όπου αποτελείται από τρία στάδια (φόρτισης, αντίστροφης φόρτισης και επαναφόρτιση) όπου ο συνολικός χρόνος είναι τετραπλάσιος της απλής φόρτισης που εξετάστηκε στους ελέγχους στις Εικόνες 5.4 και 5.6. Ο λόγος που δεν επιλέγεται ακριβώς το τετραπλάσιο πλήθος είναι γιατί κατά την αποφόρτιση, όπως θα παρατηρηθεί στη συνέχεια, σε ένα μεγάλο μέρος αυτής, παρουσιάζεται μια τέλεια πλαστική συμπεριφορά. Από τη στιγμή που αρχίσει να παραμορφώνεται πλαστικά το υλικό, στο διάγραμμα τάσης - παραμόρφωσης χαράσσεται μια ευθεία και αντί για 400 βήματα στην μια περίπτωση και 240 στην άλλη αρκούν λιγότερα. Επιλέγονται 300 και 160, για την ελαχιστοποίηση του χρόνου.

Για τη λύση του Προβλήματος μέσω της FEM χρησιμοποιούμε μικροδομή που όπως βλέπουμε και από τον Πίνακα 5.1 αποτελείται από 36,033 κόμβους, 14,453 στοιχεία και 79,193 βαθμούς ελευθερίας. Αναφορικά με τα βήματα φόρτισης, επιλέγουμε καθώς το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από του φορέα να ισούνται με *682 βήματα φόρτισης* και *214 βήματα φόρτισης* όταν είναι μεγαλύτερο. Οι τιμές αυτές έχουν επιλεγεί σύμφωνα με την έρευνα των Agoras et. al. [7], όπου για να βρουν τη σχέση μεταξύ μακροσκοπικών τάσεων και παραμορφώσεων έλεγξαν ότι για τις τιμές αυτές η καμπύλη της μακροσκοπικής απόκρισης συγκλίνει.



Σχήμα 5.8: Η διφασική μικροδομή σωματιδιακού τύπου αποτελείόμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 10 % του RVE για την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με την μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εικόνα (α') και με τη μέθοδο FFT, Εικόνα (β').

Αφού εκχωρήσαμε με κατάλληλο τρόπο την κάθε μικροδομή όπως φαίνεται στο σχήμα 5.8 στο αντίστοιχο πρόγραμμα, ABAQUS για την FEM και CRaFT για την FFT μέθοδο, οδηγηθήκαμε στα διαγράμματα μακροσκοπικής απόκρισης του σχήματος 5.9.



Σχήμα 5.9: Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μονοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 10% υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5, 0.1, 0.01$ αριστερά και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2, 4, 100$ δεξιά. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}$, κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην FFT χρησιμοποιήθηκε η μικροδομή με ανάλυση 180^3 voxels.

Κάθε καμπύλη της FFT του Σχήματος 5.9 χαρακτηρίζεται από :

- γραμμικά ελαστική περιοχή
- μεταβατική ελαστοπλαστική περιοχή
- σταθερή τέλεια πλαστική περιοχή

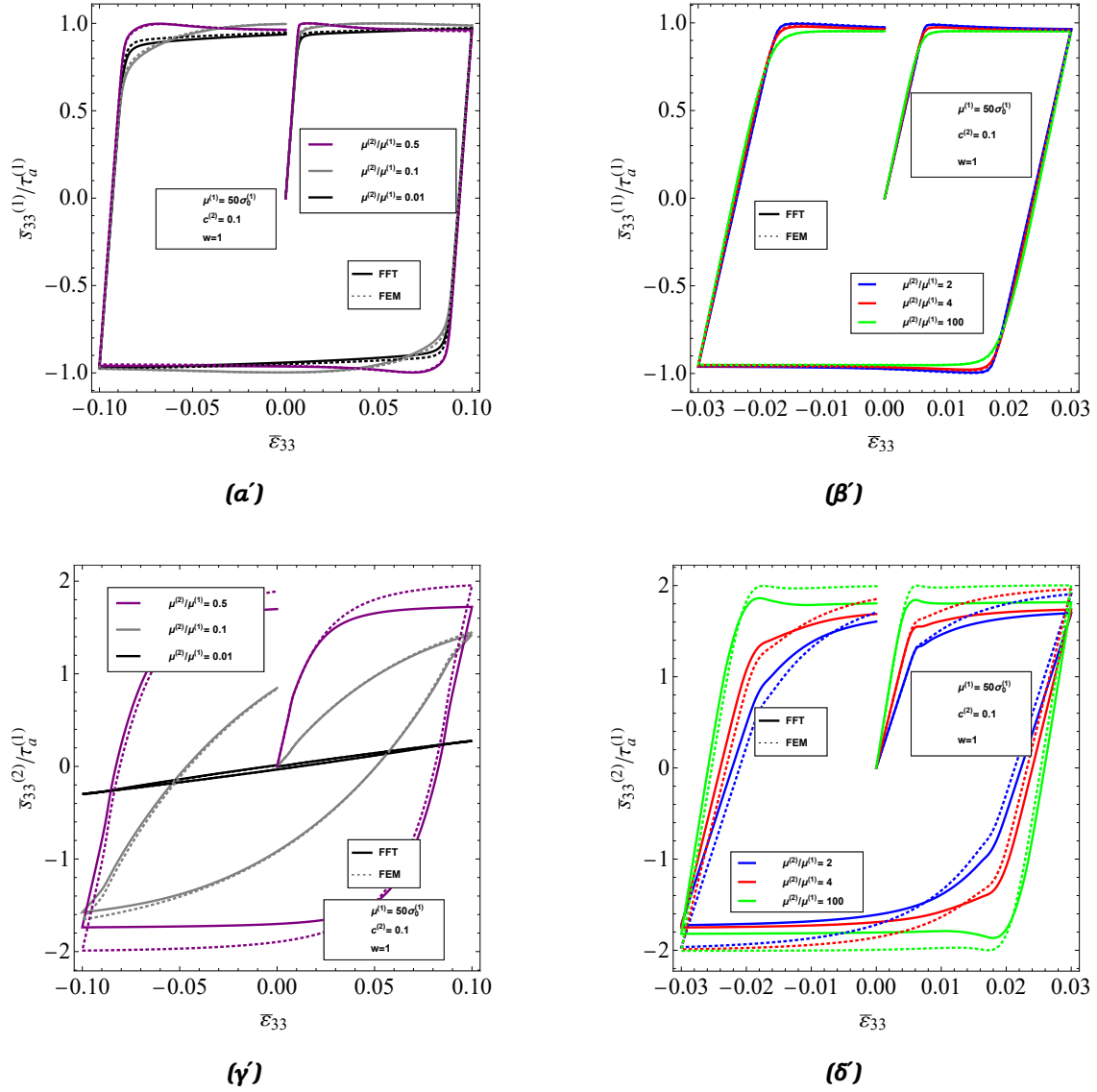
Στην περίπτωση όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$, το μεταβατικό μέρος δεν παρουσιάζεται σχεδόν καθόλου και στην περίπτωση όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.1$ παρουσιάζεται μερικώς παρ' όλο που ασκούνται μεγάλες παραμορφώσεις. Οι μεγάλες αυτές παραμορφώσεις μέχρι 0.1 έχουν χρησιμοποιηθεί μόνο και μόνο για τους υπολογισμούς με σκοπό να φανερωθεί η σταθερή κατάσταση που οδηγείται το υλικό κατά την φόρτιση όταν ο φορέας είναι πιο σκληρός από τα σωματίδια, ενώ για την αντίθετη περίπτωση δε χρειάζεται να γίνει υπολογισμός για τόσο μεγάλες παραμορφώσεις, καθώς η σταθερή κατάσταση έρχεται για μικρότερες παραμορφώσεις. Μπορεί επίσης να παρατηρηθεί το φαινόμενο Bauschinger κυρίως στις περιπτώσεις, όπου το $\mu^{(2)}$ είναι μικρότερο του $\mu^{(1)}$. Αυτό συμβαίνει, λόγω της ασυμβατότητας των πεδίων των τάσεων και των παραμορφώσεων κατά την αποφόρτιση, καθώς υπάρχουν παραμένουσες τάσεις. Ως αποτέλεσμα, χρειάζεται να ασκηθεί λιγότερη τάση στο υλικό για να παραμορφωθεί πλαστικά το υλικό.

Καθώς ο λόγος $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ μεγαλώνει, το σύνθετο υλικό συμπεριφέρεται όλο και περισσότερο σαν δύσκαμπτο υλικό στην ελαστική και στη μεταβατική περιοχή, χωρίς όμως να επηρεάζεται η συμπεριφορά του στην τέλεια πλαστική περιοχή, καθώς στην περιοχή αυτή ο φορέας επιδέχεται μόνο πλαστικές παραμορφώσεις, ενώ τα σωματίδια δεν μπορούν να παραλάβουν τέτοιες παραμορφώσεις και συμπεριφέρονται ως άκαμπτα υλικά. Συνεπώς όσο μεγαλύτερες και να είναι οι ελαστικές σταθερές αυτών δε θα επιφέρουν αλλαγές στη μακροσκοπική συμπεριφορά του υλικού και θα συμπεριφέρονται όπως και ένα σύνθετο υλικό με άκαμπτο φορέα με άκαμπτα σωματίδια.

Αναφορικά με τις μέσες τιμές του φορέα, παρουσιάζονται κάποια σημεία, όπου αλλάζει η κλίση της καμπύλης μακροσκοπικής αποκλίνουσας τάσης ($\bar{s}_{33}^{(1)}$), που όσο μεγαλώνει ο λόγος των μέτρων διατιμήσεων τείνουν να εξαλειφθούν, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.10β'. Τα σημεία αυτά αντιστοιχούν στην αρχή της μεταβατικής περιοχής και όπως είναι λογικό στην περίπτωση όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ δεν παρουσιάζονται τέτοια σημεία, καθώς δεν εμφανίζεται σχεδόν καθόλου η μεταβατική περιοχή αυτή. Στα σημεία αυτά παρουσιάζεται η αλλαγή της φοράς τη καμπύλης με την τάση να μειώνεται με την αύξηση της παραμόρφωσης και να τείνει ασυμπτωτικά σε κάποια τιμή, μείωση που οδηγεί σε μια χαλάρωση αναφορικά με τις τάσεις που επιδέχεται ο φορέας.

Από την άλλη για τις μέσες τιμές τάσεων των σωματιδίων $\bar{s}_{33}^{(2)}$ αυξάνονται συνεχώς μέχρι που σταθεροποιούνται σε κάποια τιμή μην μπορώντας να παραλάβουν επιπρόσθετες παραμορφώσεις και να συμπεριφέρονται ως δύσκαμπτα. Η αλλαγή αυτή στην κλίση μέχρι τη σταθεροποίηση της τάσης δεν εμφανίζεται στο Σχήμα 5.10γ' για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.1$ λόγω της μη ύπαρξης της μεταβατικής ελαστοπλαστικής περιοχής.

Στα διαγράμματα του Σχήματος 5.9 οι τάσεις στο φορέα είναι μικρότερες από τις τάσεις των σωματιδίων στην πλαστική περιοχή καθώς ο φορέας είναι παραμορφώσιμος ενώ τα σωματίδια μη παραμορφώσιμα για πλαστικές παραμορφώσεις.



Σχήμα 5.10: Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για τις μέσες τιμές των τασικών πεδίων της κάθε φάσης του σύνθετου υλικού υπό κύκλιο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης του σχήματος 5.9. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $s_{33}^{(r)}$ ($r = 1, 2$), κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$

Η αποτελεσματικότητα της μεθόδου FFT έχει αποδειχθεί σε πολλές έρευνες [1] [4] [5] και επιβεβαιώνεται και εδώ με τη χρήση της CRaFT. Όπως παρατηρούμε στο Σχήμα 5.9 οι διακεκομμένες καμπύλες που αντιστοιχούν στην επίλυση με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων σχεδόν ταυτίζονται με τις συνεχείς καμπύλες που αντιστοιχούν στην επίλυση με τη Μέθοδο FFT για κάθε περίπτωση λόγω των μέτρων διατμήσεων $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$. Ακόμα και για την ακραία περίπτωση καθώς ο λόγος

αυτός ισούται με 0.01, η καμπύλες δεν ταυτίζονται σε όλο τον κύκλο φόρτισης, η απόκλιση όμως αυτή είναι της τάξεως του 5%, που να μην είναι αμελητέα αλλά το γεγονός που παρατηρείται μόνο σε ακραία περίπτωση δείχνει ότι οι δύο μέθοδοι βγάζουν εξαιρετικά παρόμοια αποτελέσματα.

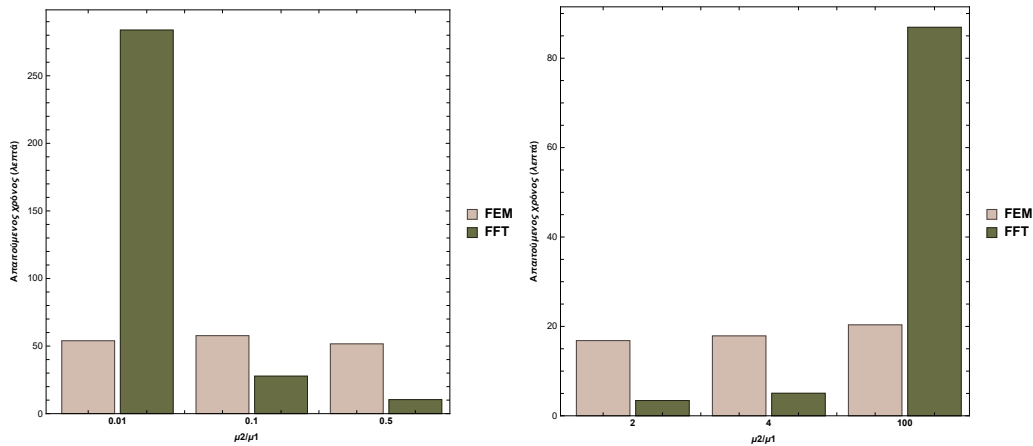
Παρατηρώντας τις μέσες αποκλίνουσες τάσεις που παραλαμβάνουν ο φορέας και τα σωματίδια, αξίζει να σημειωθεί ότι οι δύο μέθοδοι παρουσιάζουν ίδια αποτελέσματα αναφορικά με το φορέα, εν αντιθέσει με τα σωματίδια που αποτυπώνεται σημαντική απόκλιση. Η απόκλιση αυτή οφείλεται στο διαφορετικό τρόπο επίλυσης του προβλήματος και επηρεάζεται τόσο από τον αριθμό των voxels όσο και από τον αριθμό των κόμβων. Στα διαγράμματα αυτά αποτυπώνεται το σφάλμα που οφείλεται στο ότι η μικροδομή για την FFT αποτελείται από σωματίδια με $c^{(2)}$ λίγο μεγαλύτερο από 10%, πιο συγκεκριμένα 11.2%. Όπως μπορεί να παρατηρηθεί ενώ για τις καμπύλες της FEM στην περίπτωση όπου το $\mu^{(2)}$ είναι μεγαλύτερο από το $\mu^{(1)}$ οι καμπύλες συγκλίνουν στην ίδια τιμή, γεγονός που συμβαδίζει με τη θεωρία ότι το όριο αντοχής των σωματιδίων είναι ανεπηρέαστο από το λόγο των μέτρων διατήσεων, στις καμπύλες της FFT δε φαίνεται να επιβεβαιώνεται κάτι τέτοιο. Συνεπώς τα αποτελέσματα για την FEM, σύμφωνα με τους υπολογισμούς μας, τα θεωρούμε πιο αξιόπιστα αναφορικά με τις μέσες τάσεις των σωματιδίων στις ακραίες περιπτώσεις. Επειδή όμως η ιδέα πίσω από την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης είναι ο υπολογισμός της μακροσκοπικής συμπεριφοράς του σύνθετου, τα μακροσκοπικά διαγράμματα του σύνθετου υλικού είναι αυτά που θα δώσουν τα αποτελέσματα αυτά, διαγράμματα πως όπως συζητήθηκε και προηγουμένως σχεδόν ταυτίζονται και από τις δύο μεθόδους.

Στις έρευνες αυτές επισημαίνεται η μεγάλη ταχύτητα που έχει η μέθοδος αυτή. Για το λόγο αυτό συγκρίνουμε τη χρονική διάρκεια που χρειάζεται κάθε μέθοδος. Σύμφωνα με το αριστερό Ραβδόγραμμα του Σχήματος 5.11 η χρονική διάρκεια που απαιτείται για την επίλυση του προβλήματος με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM) δεν επηρεάζεται ιδιαίτερα με την αλλαγή του μέτρου διάτμησης των σωματιδίων. Η FFT αντιθέτως, όσο μικραίνει το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων υπό σταθερό μέτρο διάτμησης του φορέα, χρειάζεται περισσότερα λεπτά για να εξάγει αποτέλεσμα. Ο λόγος που επηρεάζεται η μέθοδος ως προς το χρόνο από τις τιμές των ελαστικών σταθερών θα συζητηθεί στα Σχόλια στο Κεφάλαιο 6.

Συγκρίνοντας τις 2 μεθόδους για τις ακραίες περιπτώσεις $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ ο χρόνος που χρειάζεται η FFT είναι σχεδόν πενταπλάσιος από το χρόνο που χρειάζεται η FEM, για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.1$ η FFT είναι 2 φορές γρηγορότερη, για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 4$ είναι 3.5 φορές γρηγορότερη και τέλος για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5$ και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2$ είναι 5 φορές γρηγορότερη. Στη σύγκριση αυτή θα πρέπει να συνυπολογιστεί ότι για τη μέθοδο FEM η μικροδομή αποτελείται από 36,003 κόμβους και σχεδόν 80,000 βαθμούς ελευθερίας, ενώ για την FFT η μικροδομή αποτελείται από 180^3 voxels, δηλαδή 5,832,000 τρισδιάστατα pixels. Γίνονται δηλαδή υπολογισμοί για πολλά παραπάνω σημεία και συνυπολογίζοντας ότι σε κάθε επανάληψη του αλγόριθμου υπολογίζονται κατευθείαν οι παραμορφώσεις, οι βαθμοί ελευθερίας με την FFT μέθοδο είναι πολλοί παραπάνω.

Αξίζει να σημειωθεί ότι και για τις 2 μεθόδους οι υπολογισμοί όταν το $\mu^{(2)}$ είναι μεγαλύτερο του $\mu^{(1)}$ έχουν γίνει σε λιγότερα βήματα από τους υπολογισμούς όταν το

$\mu^{(2)}$ είναι μικρότερο του $\mu^{(1)}$ για αυτό δε θα ήταν σωστό να συγκριθούν δύο τέτοιες περιπτώσεις μεταξύ τους. Αυτός είναι και ο λόγος που έχουν γίνει δύο Ραβδογράμματα και ο πίνακας του Σχήματος 5.11 έχει χωριστεί στη μέση.



Σχήμα 5.11: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT και FEM για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.9 για τις μικροδομές του Σχήματος 5.8. Για τη μέθοδο FEM χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 79,193 βαθμούς ελευθερίας και για τη μέθοδο FFT μικροδομή με 5,832,000 voxels.

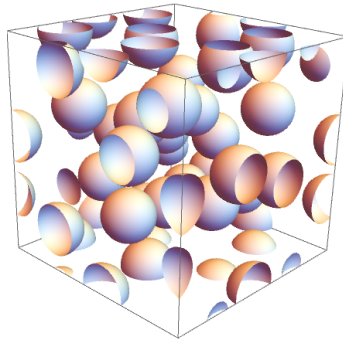
Πίνακας 5.4: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.11

Απαιτούμενος χρόνος (λεπτά)		
$\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$	μέσω FEM (Abaqus)	μέσω FFT (CRaFT)
0.01	53.93	283.827
0.1	57.7	27.75
0.5	51.63	10.39
2	16.82	3.42
4	17.88	5.05
100	20.35	86.92

5.3.2 Περιοδική Μικροδομή με τυχαία Μονοδιασπορά 30 Σφαιριδίων που καταλαμβάνουν το 20% του RVE

Αλλάζοντας τη μικροδομή, αυξάνοντας το ποσοστό των σωματιδίων σε σύγκριση με την Υποενότητα 5.3.1 και εξετάζοντας την περιοδική μικροδομή του Σχήματος 5.12

Θα τεθεί ο στόχος να λυθεί το Πρόβλημα της Ομογενοποίησης με τη μέθοδο FFT. Θα γίνει αρχικά η σύγκριση διάφορων χωρικών αναλύσεων της μικροδομής για να επιλεγεί η κατάλληλη, δε θα γίνει όμως η σύγκριση για διαφορετικούς αριθμούς βημάτων καθώς το πλήθος των βημάτων που επιλέχθηκε μέσω της Υποενότητας 5.3.1 δίνει και στην προκειμένη περίπτωση πολύ καλό αποτέλεσμα.

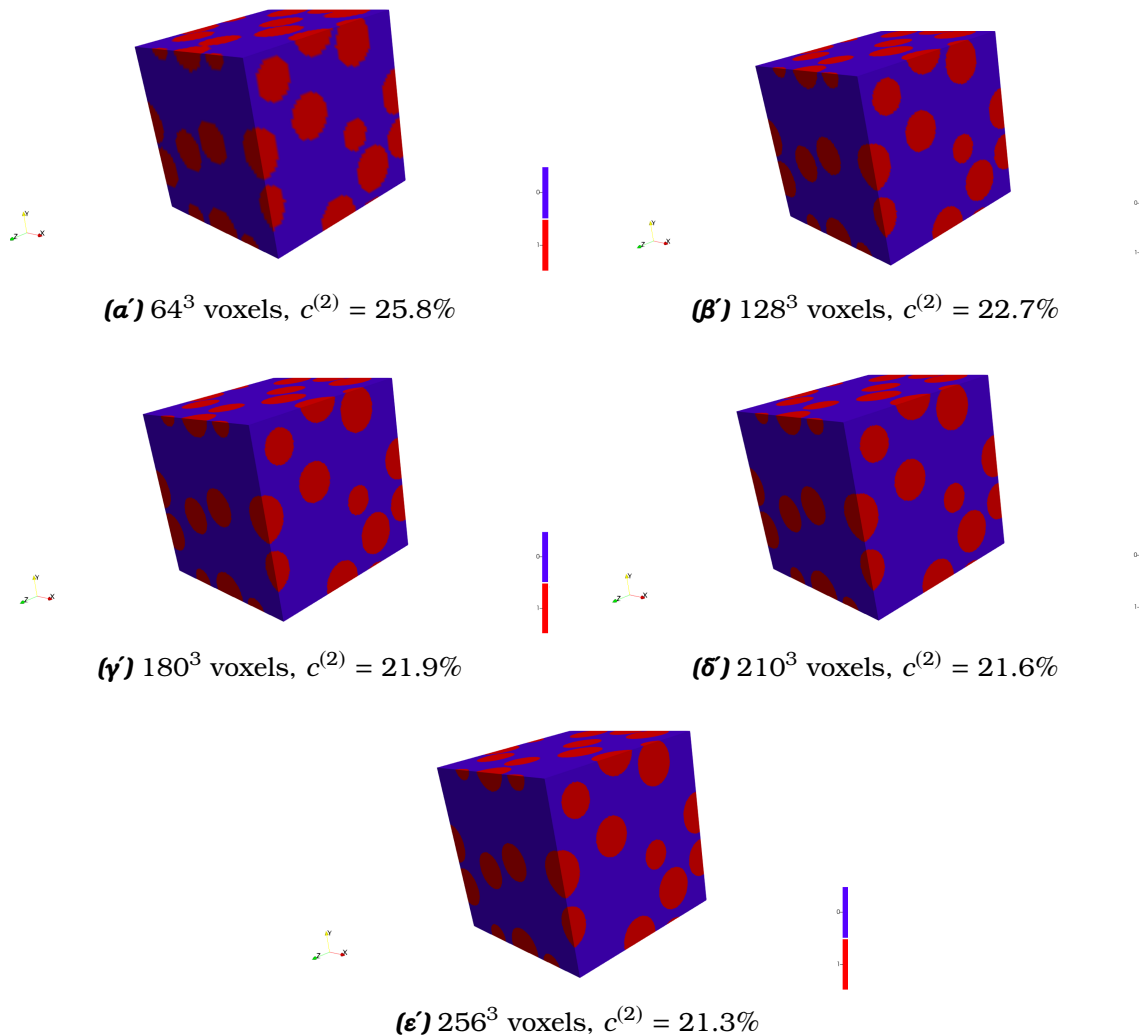


Σχήμα 5.12: Σύνθετο υλικό με περιοδική μικροδομή αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 20%

Σύγκριση Χωρικής Ανάλυσης

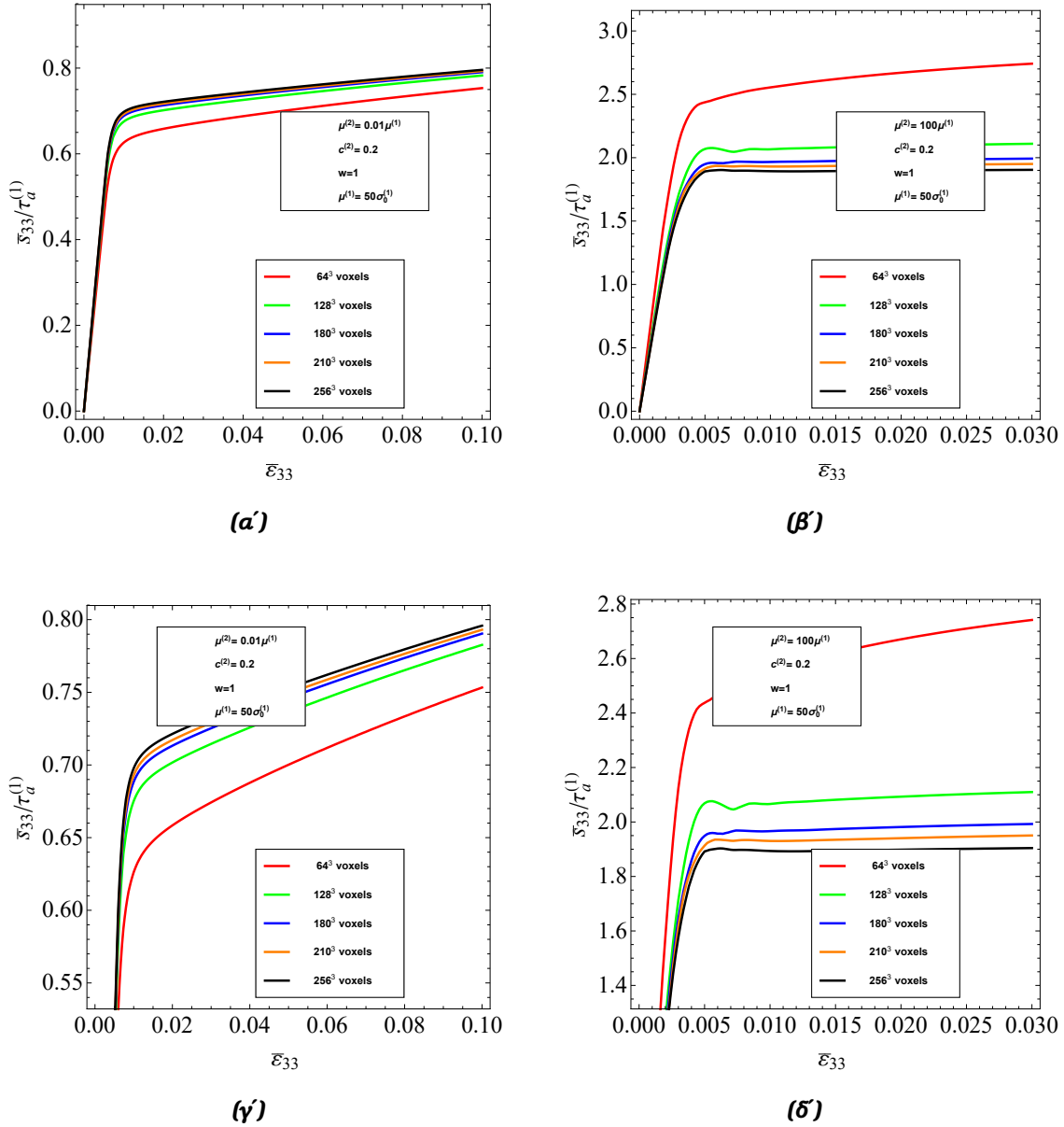
Όπως προαναφέρθηκε η μικροδομή του Σχήματος 5.12 σε ένα πρώτο στάδιο θα μετατραπεί σε μικροδομές με διαφορετική χωρική ανάλυση, διαφορετικό αριθμό voxels. Οι αναλύσεις που προτιμήθηκαν είναι οι 64^3 , 128^3 , 180^3 , 210^3 , 256^3 voxels όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.13. Όπως θα δούμε και στο Σχήμα 5.13 με την αύξηση της χωρικής ανάλυσης το ποσοστό φάσης $c^{(2)}$, τείνει στο 20% που έχουμε ορίσει εξ αρχή ως το επιθυμητό ποσοστό σωματιδίων.

Όπως και πριν, έτσι και τώρα η περίπτωση των 64^3 voxels δίνει εποπτικά μια μικροδομή με ατελείς σφαίρες σε αντίθεση με τις άλλες που φαίνεται να δίνουν σχεδόν τέλεια γεωμετρία.

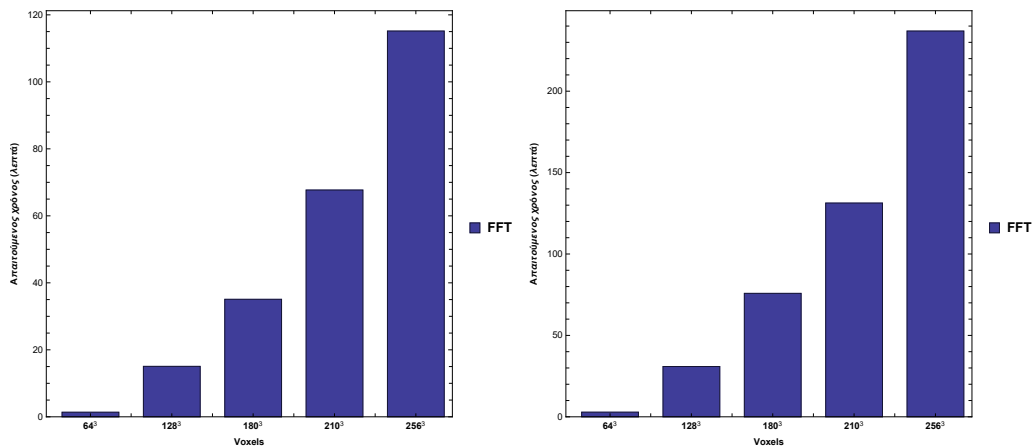


Σχήμα 5.13: Διαφορετικές χωρικές αναλύσεις σε voxels της 3D μικροδομής του Σχήματος 5.12, μέσω του προγράμματος ParaView. Κάθε διαφορετική περίπτωση χωρικής ανάλυσης αντιστοιχεί σε διαφορετικό ποσοστό φάσεων. Όσο αυξάνεται το πλήθος των voxels, τόσο το $c^{(2)}$ τείνει στο 20%.

Η ομοιότητα αυτή εποπτικά στις 4 από τις 5 διαφορετικές περιπτώσεις διαφορετικών αριθμών voxels της μικροδομής αποτυπώνεται και στο διάγραμμα μακροσκοπικής τάσης παραμόρφωσης 5.14. Εξετάζοντας και πάλι τις ακραίες περιπτώσεις και επιθυμώντας απόκλιση μικρότερη του 1% από την καμπύλη που αντιστοιχεί στη μικροδομή με το μεγαλύτερο αριθμό voxels, η μπλε καμπύλη των 180^3 voxels, $c^{(2)} = 21.9\%$, θα επιλεγεί για την μικρή απόκλιση από αυτή των 256^3 voxels και για το μικρό χρονικό διάστημα που χρειάζεται για να ολοκληρωθούν οι υπολογισμοί όπως φαίνεται τόσο στα Ραβδογράμματα, όσο και στους Πίνακες της Σχήματος 5.15.



Σχήμα 5.14: Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 20% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και δεξιά $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την $\bar{\epsilon}_{33}$, μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, να αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Και οι 2 περιπτώσεις χωρικής σύγκλισης αφορούν ανάλυση 64^3 , 128^3 , 180^3 , 210^3 , και 256^3 voxels. Οι εικόνες 5.14γ' και 5.14δ' είναι μεγέθυνση των 5.14α' και 5.14β' αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν 200 βήματα φόρτισης για τα αριστερά διαγράμματα και 100 για τα δεξιά.



Σχήμα 5.15: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.14 για κάθε διαφορετική περίπτωση αριθμών voxels. Το αριστερό Ραβδοδιάγραμμα αντιστοιχεί $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ σε ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$

Πίνακας 5.5: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.15

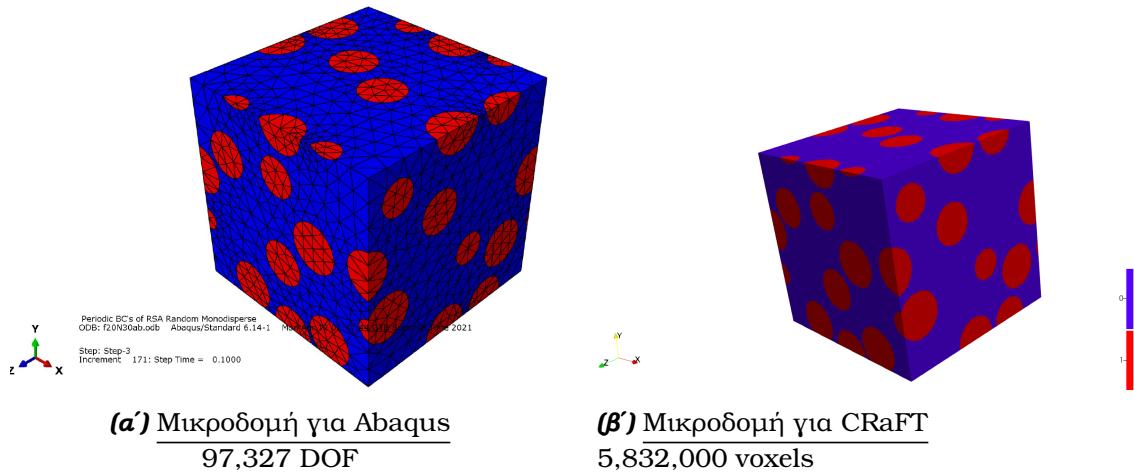
Απαιτούμενος χρόνος (λεπτά)			
voxels	$\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$	voxels	$\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$
64^3	2.518	64^3	1.63
128^3	24.304	128^3	18.99
180^3	66.69	180^3	54.26
210^3	115.87	210^3	68.12
256^3	213.85	256^3	161.36

Σύγκριση Απαιτούμενων Χρόνων FFT - FEM

Σύμφωνα με τους προηγούμενους ελέγχους ο υπολογισμός της μακροσκοπικής αποκλίνουσας τάσης του σύνθετου υλικού της Εικόνας 5.12 που υποβάλλεται σε κύκλο αξονοσυμμετρικής διατμητικής παραμόρφωσης. Θα γίνει για χωρική ανάλυση ίση με 180^3 voxels ($c^{(2)} = 21.9\%$) με 700 βήματα φόρτισης, καθώς το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από του φορέα και 400 βήματα φόρτισης όταν είναι μεγαλύτερο.

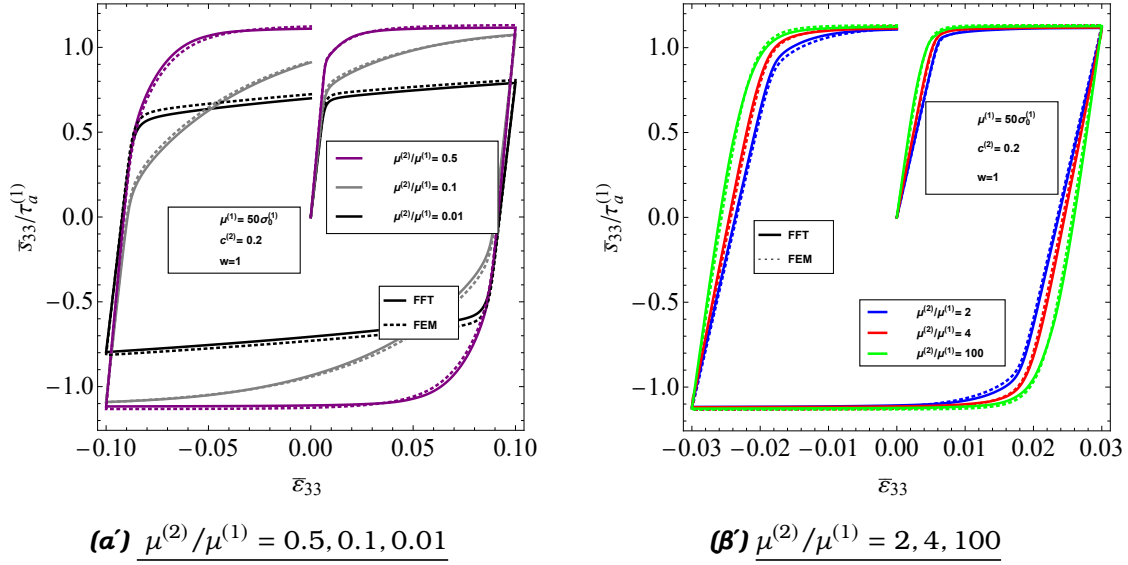
Για τη λύση του Προβλήματος μέσω της FEM χρησιμοποιούμε μικροδομή που όπως βλέπουμε και από τον Πίνακα 5.1 αποτελείται από 44,005 κόμβους, 17,344 στοιχεία και 97,327 βαθμούς ελευθερίας. Αναφορικά με τα βήματα φόρτισης, επι-

λέγουμε καθώς το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από του φορέα να ισούνται με *682 βήματα φόρτισης* και *214 βήματα φόρτισης* όταν είναι μεγαλύτερο. Οι τιμές αυτές έχουν επιλεγθεί σύμφωνα με την έρευνα των Agoras et. al. [7], όπου για να βρουν τη σχέση μεταξύ μακροσκοπικών τάσεων και παραμορφώσεων έλεγξαν ότι για τις τιμές αυτές η καμπύλη της μακροσκοπικής απόκρισης συγκλίνει.



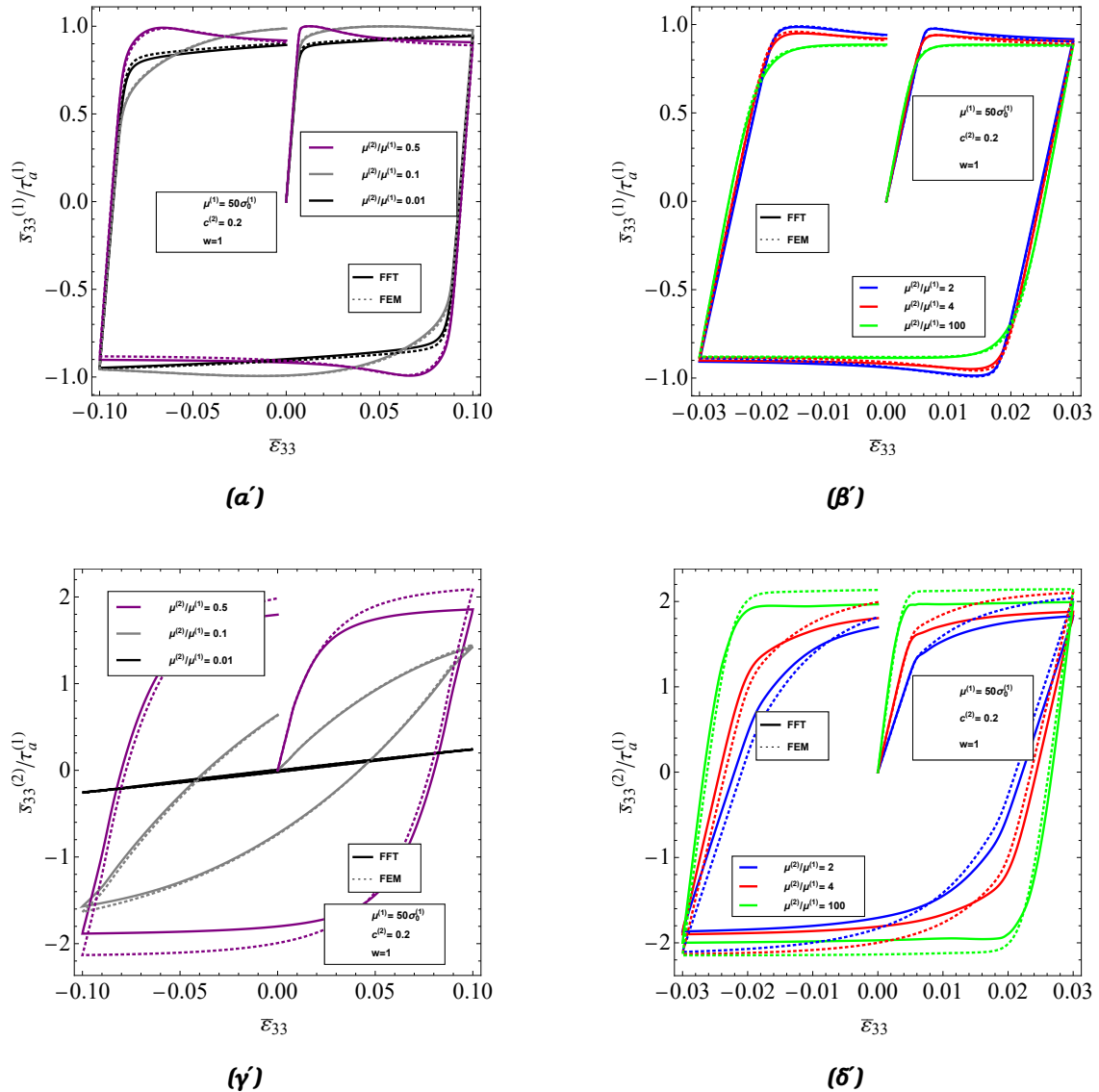
Σχήμα 5.16: Η διφασική μικροδομή σωματιδιακού τύπου αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 20 % του RVE για την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με την μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εικόνα (α') και με τη μέθοδο FFT, Εικόνα (β').

Αφού εκχωρήσαμε με κατάλληλο τρόπο την κάθε μικροδομή 5.16 στο αντίστοιχο πρόγραμμα, ABAQUS για την FEM και CRaFT για την FFT μέθοδο, οδηγηθήκαμε στα παρακάτω διαγράμματα μακροσκοπικής απόκρισης.



Σχήμα 5.17: Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 20% υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5, 0.1, 0.01$ αριστερά και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2, 4, 100$ δεξιά. Η μακροσκοπική αξονική τάση, \bar{S}_{33} , κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην FFT χρησιμοποιήθηκε η μικροδομή με ανάλυση 180^3 voxels.

Τα διαγράμματα μακροσκοπικής τάσης παραμόρφωσης για το σύνθετο υλικό δίνουν πανομοιότυπα αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις ακόμα και στις ακραίες, όπου το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων ή είναι πολύ μεγαλύτερο ή πολύ μικρότερο μιας και διακεκομμένη και συνεχής γραμμή σχεδόν ταυτίζονται με την απόκλιση των 2 καμπυλών σε όλες τις περιπτώσεις να είναι μικρότερο του 1%. Επιβεβαιώνεται για άλλη μια φορά η αποτελεσματικότητα της FFT μεθόδου

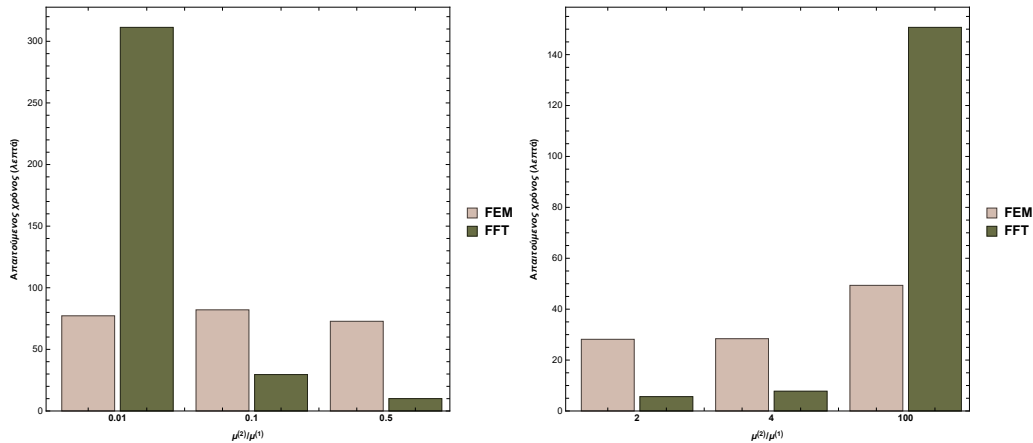


Σχήμα 5.18: Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για τις μέσες τιμές των τασικών πεδίων της κάθε φάσης του σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης του σχήματος 5.17. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\epsilon}_{33}^{(n)}$ ($n = 1, 2$), κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$

Οι μέσες αποκλίνουσες τάσεις που παραλαμβάνουν οι φάσεις δείχνουν και σε αυτή την περίπτωση ότι οι 2 μέθοδοι δίνουν λύσεις που ταυτίζονται μόνο στις τάσεις για το φορέα, ενώ αποκλίνουν στις περισσότερες περιπτώσεις στις τάσεις που παραλαμβάνουν τα σωματίδια, γεγονός που συζητήθηκε προηγουμένως.

Αναφορικά με τους χρόνους, που μας ενδιαφέρει στις συγκρίσεις αυτές, στις ακραίες περιπτώσεις η FFT και πάλι είναι 4 με 5 φορές πιο αργή στις περιπτώσεις, όπου ο λόγος των μέτρων διατμήσεων είναι 0.1 και 4 η FFT είναι 3 με 4 φορές πιο γρήγορη, ενώ όταν είναι 0.5 και 2 η FFT είναι 6-7 φορές πιο γρήγορη. Στη σύγκριση αυτή θα πρέπει να συνοψολογιστεί ότι για τη μέθοδο FEM η μικροδομή αποτελείται

από 44,005 κόμβους και σχεδόν 97,327 βαθμούς ελευθερίας, ενώ για την FFT η μικροδομή αποτελείται από 180^3 voxels, δηλαδή 5,832,000 τρισδιάστατα pixels. Γίνονται δηλαδή υπολογισμοί για πολλά παραπάνω σημεία και συνυπολογίζοντας ότι σε κάθε επανάληψη του αλγόριθμου υπολογίζονται κατευθείαν οι παραμορφώσεις, οι βαθμοί ελευθερίας με την FFT μέθοδο είναι πολλοί παραπάνω.



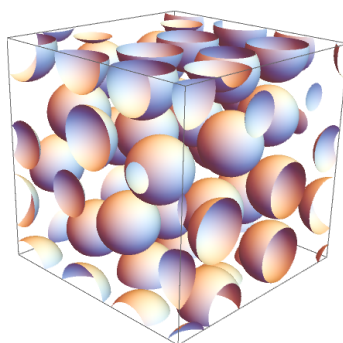
Σχήμα 5.19: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT και FEM για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.17 για τις μικροδομές του Σχήματος 5.16. Για τη μέθοδο FEM χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 97,327 βαθμούς ελευθερίας και για τη μέθοδο FFT μικροδομή με 5,832,000 voxels.

Πίνακας 5.6: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.19

Απαιτούμενος χρόνος (λεπτά)		
$\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$	μέσω FEM (Abaqus)	μέσω FFT (CraFT)
0.01	77.23	311.3
0.1	82.07	29.56
0.5	72.77	10.06
2	28.15	5.64
4	28.4	7.76
100	49.35	150.7

5.3.3 Περιοδική Μικροδομή με τυχαία Μονοδιασπορά 30 Σφαιριδίων που καταλαμβάνουν το 30% του RVE

Τέλος, θεωρώντας την περιοδική μικροδομή του Σχήματος 5.20 επιθυμούμε να εξάγουμε ένα διάγραμμα που να αποτυπώνει τη σχέση της μακροσκοπικής τάσης του υλικού συναρτήσει της μακροσκοπικής παραμόρφωσης. Για άλλη μια φορά προέχει να κάνουμε έλεγχο συγκλίσεων τόσο για τον απαιτούμενο αριθμό voxels όσο και για τον απαιτούμενο αριθμό βημάτων. Το 30 % αποτελεί κοντά στο ανώτατο όριο ποσοστού σωματιδίων τύπου σφαιρικού σχήματος για μονοδιασπορά αυτών, να έχουν δηλαδή όλες οι σφαίρες το ίδιο μέγεθος. Ανάλυση για μικροδομές με πολυδιασπορά σφαιρών και για περισσότερα του ενός υλικού σωματιδίων έχει γίνει στην έρευνα των οι Papadioti et. al. [8].

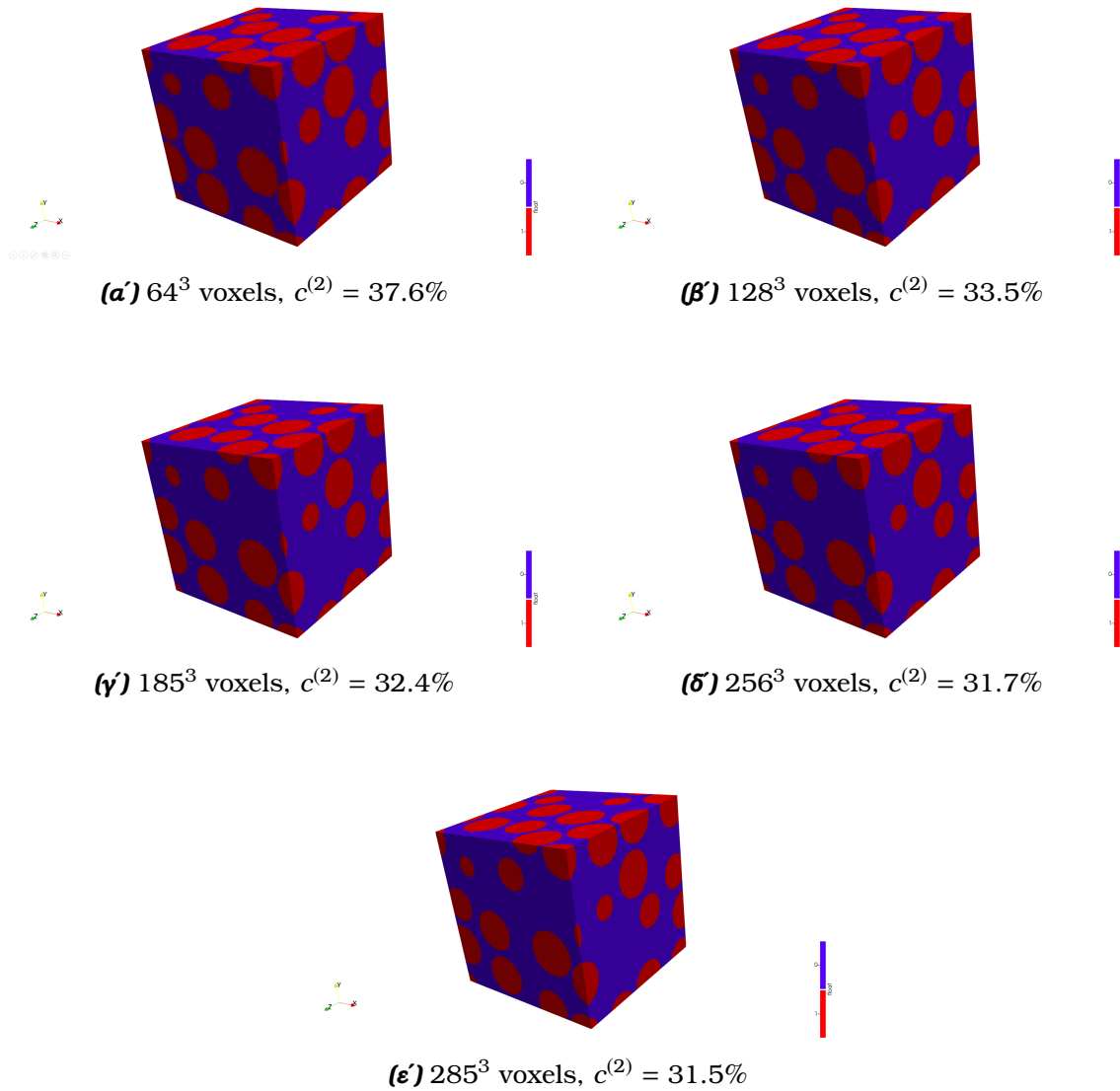


Σχήμα 5.20: *Σύνθετο υλικό με περιοδική μικροδομή αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 30%*

Σύγκριση Χωρικής Ανάλυσης

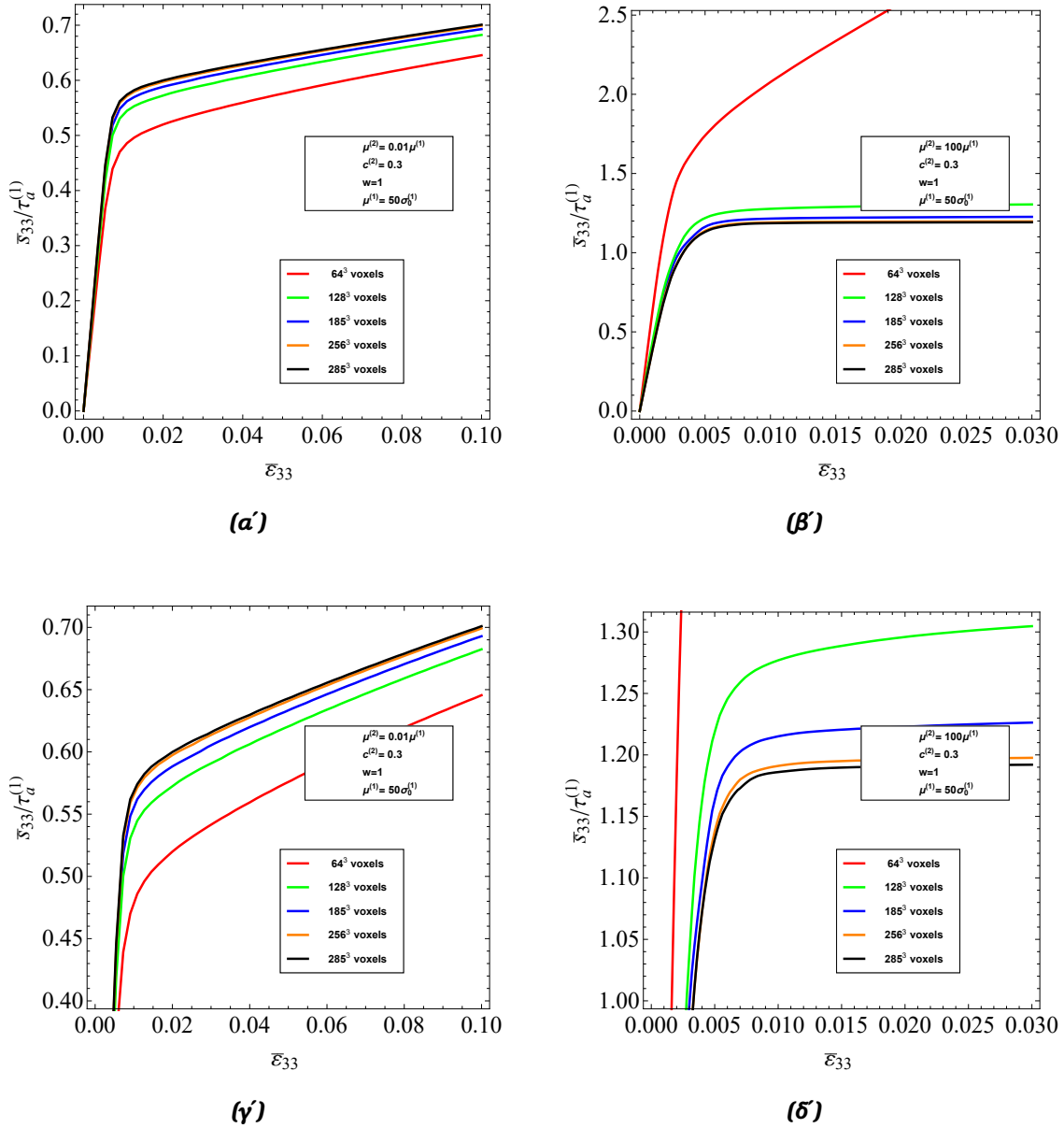
Όπως προαναφέρθηκε, η περιοδική μικροδομή του Σχήματος 5.20 σε ένα πρώτο στάδιο θα μετατραπεί σε μικροδομές με διαφορετική χωρική ανάλυση. Οι αναλύσεις που προτιμήθηκαν είναι οι 64^3 , 128^3 , 185^3 , 256^3 , 285^3 voxels όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.21. Όπως θα δούμε και στο Σχήμα 5.21 με την αύξηση της χωρικής ανάλυσης το ποσοστό φάσης $c^{(2)}$ τείνει στο 30% που έχουμε ορίσει εξ αρχή ως το επιθυμητό ποσοστό σωματιδίων

Και σε αυτή την περίπτωση εποπτικά η μικροδομή των 64^3 voxels αποτελείται από σφαίρες που εμπεριέχουν ατέλειες σε αντίθεση με τις υπόλοιπες που εποπτικά φαίνεται να ταυτίζονται.



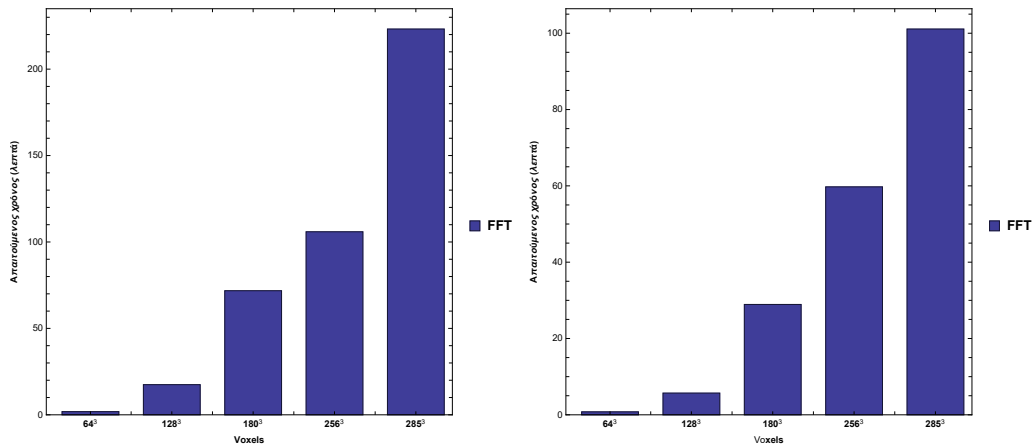
Σχήμα 5.21: Διαφορετικές χωρικές αναλύσεις σε voxels της 3D μικροδομής του Σχήματος 5.20, μέσω του προγράμματος ParaView. Κάθε διαφορετική περίπτωση χωρικής ανάλυσης αντιστοιχεί σε διαφορετικό ποσοστό φάσεων. Όσο αυξάνεται το πλήθος των voxels, τόσο το $c^{(2)}$ τείνει στο 30%.

Σύμφωνα με τους υπολογισμούς για φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης οι καμπύλες για 185^3 , 256^3 , 285^3 voxels σχεδόν ταυτίζονται όσον αφορά στην ακραία περίπτωση όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$, αλλά η περίπτωση των 185^3 έχει απόκλιση μεγαλύτερη του 1% στο διάγραμμα που αναφέρεται στις τάσεις που παραλαμβάνουν τα σωματίδια στην περίπτωση όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$.



Σχήμα 5.22: Αποτελέσματα μέσω FFT για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μονοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 30% φόρτιση αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αριστερά αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και δεξιά $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$ με την $\bar{\epsilon}_{33}$, μακροσκοπική αξονική τάση του σύνθετου υλικού κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$, να αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Και οι 2 περιπτώσεις χωρικής σύγκλισης αφορούν ανάλυση 64^3 , 128^3 , 185^3 , 256^3 , και 285^3 voxels. Οι εικόνες 5.22γ και 5.22δ είναι μεγέθυνση των 5.22α και 5.22β αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν 55 βήματα φόρτισης για τα αριστερά διαγράμματα και 100 για τα δεξιά.

Εξαιτίας αυτού και δεδομένου ότι ο χρόνος για τη μικροδομή που αναλύεται σε 256^3 voxels είναι σχεδόν ο μισός από αυτόν για τα 285^3 voxels, θα επιλέξουμε τη μικροδομή με 256^3 voxels ($c^{(2)} = 31.7\%$) για τη συγκλίνουσα λύση της παρούσας μικροδομής με η μέθοδο FFT.



Σχήμα 5.23: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.22 για κάθε διαφορετική περίπτωση αριθμών voxels. Το αριστερό Ραβδοδιάγραμμα αντιστοιχεί σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ σε ενώ το δεξιά σε $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$

Πίνακας 5.7: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.23

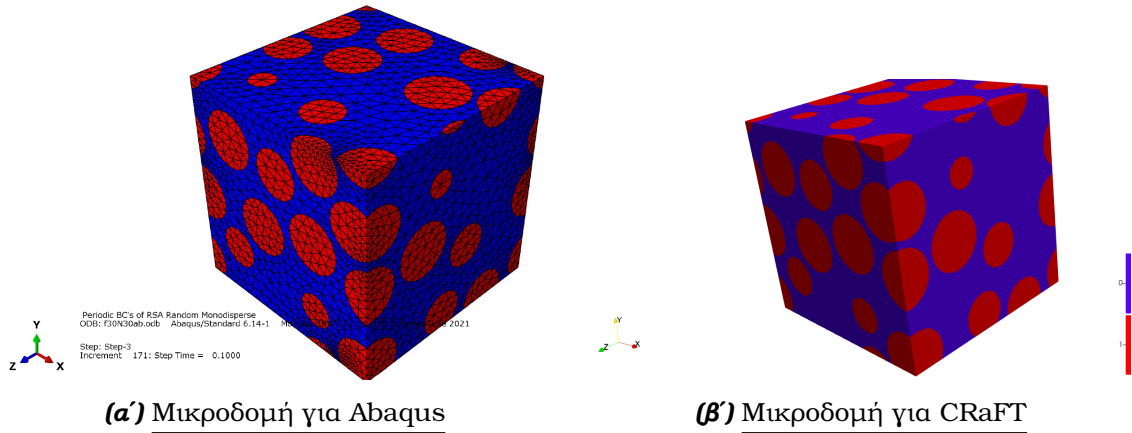
Απαιτούμενος χρόνος (λεπτά)			
voxels	$\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$	voxels	$\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$
64 ³	0.78	64 ³	1.84
128 ³	5.69	128 ³	17.45
185 ³	28.92	185 ³	71.8
256 ³	59.74	256 ³	105.9
285 ³	101.1	285 ³	223.2

Σύγκριση Απαιτούμενων Χρόνων FFT - FEM

Μετά τον έλεγχο για τον κατάλληλο αριθμό voxels που θα πρέπει να αναλυθεί η μικροδομή για την εξαγωγή ακριβών αποτελεσμάτων, θα υπολογιστεί η μακροσκοπική απόκριση για τον κύκλο αξονοσυμμετρικής διάτμησης με τη μέθοδο FFT. Ο αριθμός βημάτων που χρησιμοποιήθηκαν και στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις δίνουν αποτελέσματα που συγκλίνουν. Επιλέγουμε δηλαδή 256³ voxels ($c^{(2)} = 31.7\%$) για τη μικροδομή και 700 βήματα φόρτισης, καθώς το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από του φορέα και 400 βήματα φόρτισης όταν είναι μεγαλύτερο.

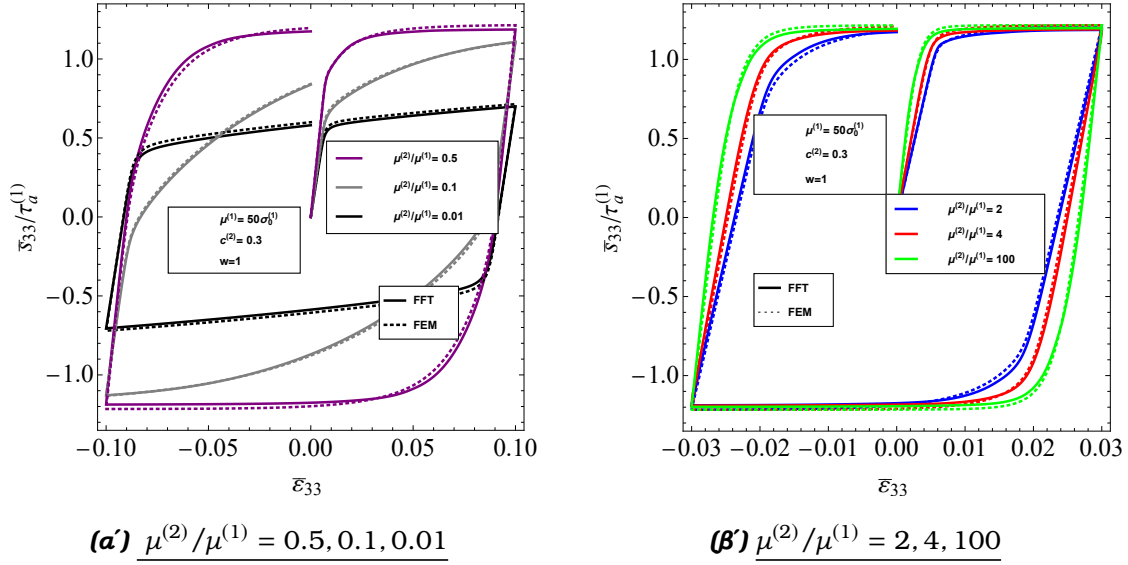
Για τη λύση του Προβλήματος μέσω της FEM χρησιμοποιούμε μικροδομή που όπως βλέπουμε και από τον Πίνακα 5.1 αποτελείται από 109,063 κόμβους, 43,814

στοιχεία και 239,561 βαθμούς ελευθερίας. Αναφορικά με τα βήματα φόρτισης, επιλέγουμε καθώς το μέτρο διάτμησης των σωματιδίων είναι μικρότερο από του φορέα να ισούνται με *682 βήματα φόρτισης* και *214 βήματα φόρτισης* όταν είναι μεγαλύτερο. Οι τιμές αυτές έχουν επιλεγεί σύμφωνα με την έρευνα των Agoras et. al. [7], όπου για να βρουν τη σχέση μεταξύ μακροσκοπικών τάσεων και παραμορφώσεων έλεγξαν ότι για τις τιμές αυτές η καμπύλη της μακροσκοπικής απόκρισης συγκλίνει.



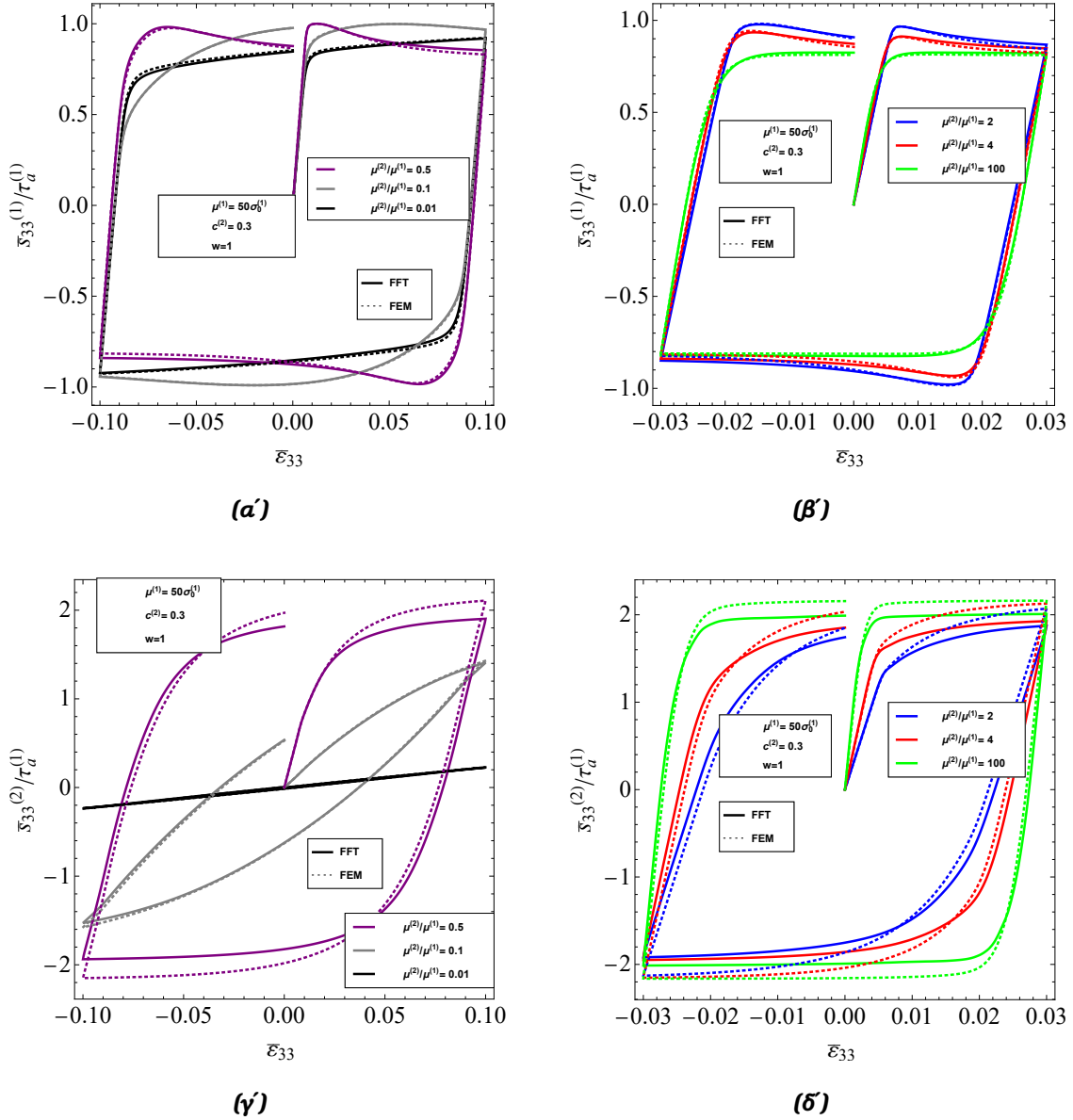
Σχήμα 5.24: Η διφασική μικροδομή σωματιδιακού τύπου αποτελούμενο από 30 σφαίρες που καταλαμβάνουν το 30 % του RVE για την επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης με την μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εικόνα (α') και με τη μέθοδο FFT, Εικόνα (β').

Χρησιμοποιώντας τις μικροδομές του Σχήματος 5.24 κάθε μια για την αντίστοιχη μέθοδο επίλυσης προκύπτουν οι καμπύλες τάσεων παραμορφώσεων υπό κυκλική αξονοσυμμετρική διατμητική παραμόρφωση, με την ταύτιση για όλες τις περιπτώσεις $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ να είναι εμφανείς με την απόκλιση των καμπυλών να είναι μικρότερη του 1%.



Σχήμα 5.25: Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με ισότροπη μόνοδιασπορά 30 σφαιρικών σωματιδίων με ποσοστό φάσεων 30% υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμησης. Τα αποτελέσματα αφορούν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5, 0.1, 0.01$ αριστερά και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2, 4, 100$ δεξιά. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}$, κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$. Στην FFT χρησιμοποιήθηκε η μικροδομή με ανάλυση 256^3 voxels.

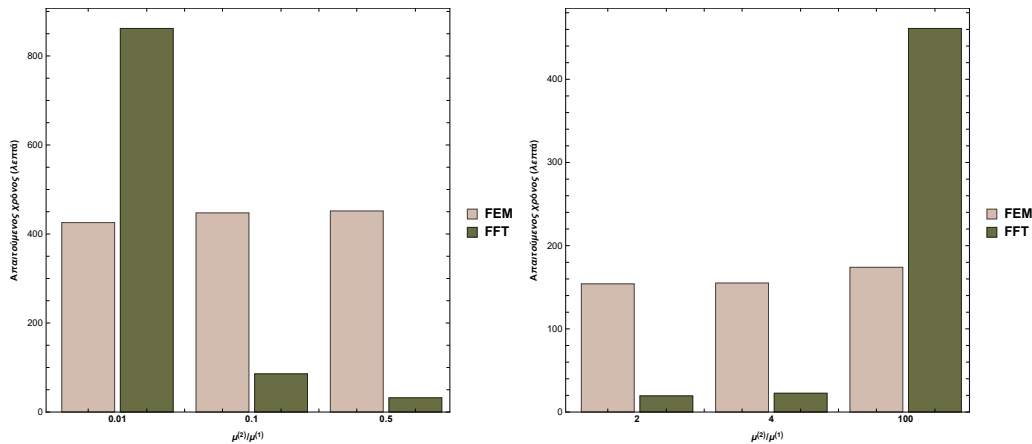
Για τις μέσες τάσεις παρατηρείται στο Σχήμα 5.26 όπως και πριν, υπάρχει πλήρη ταύτιση των 2 μεθόδων για τις μέσες τάσεις του φορέα, ενώ σημαντική απόκλιση για τις μέσες τάσεις των σωματιδίων, με το λόγο της απόκλισης αυτής να έχει συζητηθεί προηγουμένως.



Σχήμα 5.26: Αποτελέσματα μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για τις μέσες τιμές των τασιακών πεδίων της κάθε φάσης του σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης του σχήματος 5.25. Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}^{(r)}$ ($r = 1, 2$), κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$

Αφού επιβεβαιώσαμε την ταύτιση των μακροσκοπικών αποτελεσμάτων, αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η σύγκριση της αποδοτικότητας των μεθόδων ως προς το χρόνο. Για τις ακραίες περιπτώσεις, όπως φαίνεται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.27 η FFT είναι 2 με 3 φορές πιο αργή από την FEM, για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.1$ η FFT είναι περίπου 6 φορές πιο γρήγορη, για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 4$ η FFT είναι περίπου 8 φορές πιο γρήγορη, για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2$ η FFT είναι περίπου 9 φορές πιο γρήγορη ενώ για $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5$ η FFT είναι περίπου 15 φορές πιο γρήγορη.

Στη σύγκριση αυτή θα πρέπει να συνυπολογιστεί ότι για τη μέθοδο FEM η μικροδομή αποτελείται από 109,063 κόμβους και σχεδόν 239,561 βαθμούς ελευθερίας, ενώ για την FFT η μικροδομή αποτελείται από 256^3 voxels, δηλαδή 16,777,216 τρισδιάστατα pixels. Γίνονται δηλαδή υπολογισμοί για πολλά παραπάνω σημεία και συνυπολογίζοντας ότι σε κάθε επανάληψη του αλγόριθμου υπολογίζονται κατευθείαν οι παραμορφώσεις, οι βαθμοί ελευθερίας με την FFT μέθοδο είναι πολλοί παραπάνω.



Σχήμα 5.27: Απαιτούμενος χρόνος σε λεπτά για επίλυση μέσω FFT και FEM για την μακροσκοπική απόκριση του σχήματος 5.25 για τις μικροδομές του Σχήματος 5.16. Για τη μέθοδο FEM χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 239,561 βαθμούς ελευθερίας και για τη μέθοδο FFT μικροδομή με 16,777,216 voxels.

Πίνακας 5.8: Οι απαιτούμενοι χρόνοι που παρουσιάζονται στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.27

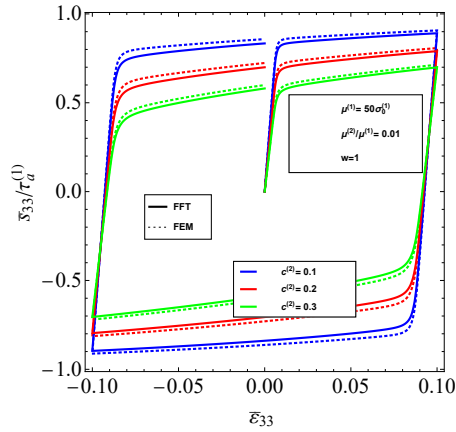
$\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$	μέσω FEM (Abaqus)	μέσω FFT (CRaFT)
0.01	425.6	861.8
0.1	447.4	85.8
0.5	451.7	31.97
2	154.1	19.42
4	155.1	22.6
100	174	461.14

5.4 Εφαρμογές με αλλαγή του ποσοστού φάσεων

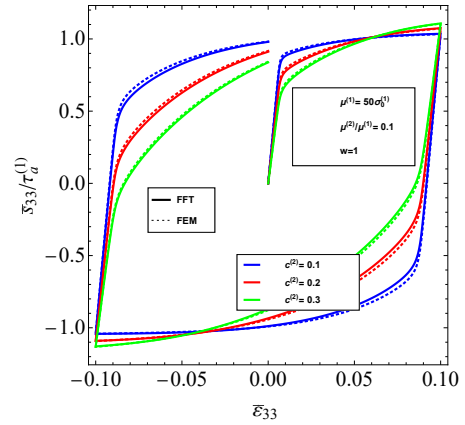
Στους παρόντες υπολογισμούς συγκρίνονται οι μακροσκοπικές αποκρίσεις υπό σταθερές ιδιότητες φάσεων με αλλαγή του ποσοστού φάσεων των σωματιδίων $c^{(2)}$ για

κάθε περίπτωση $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ που αναφέρθηκε στους προηγούμενους υπολογισμούς. Σκοπός είναι να φανερωθεί η επιρροή της αλλαγής της γεωμετρίας στους χρόνους για τη μέθοδο FFT, συγκρίνοντάς τους παράλληλα με τους χρόνους με τη μέθοδο FEM.

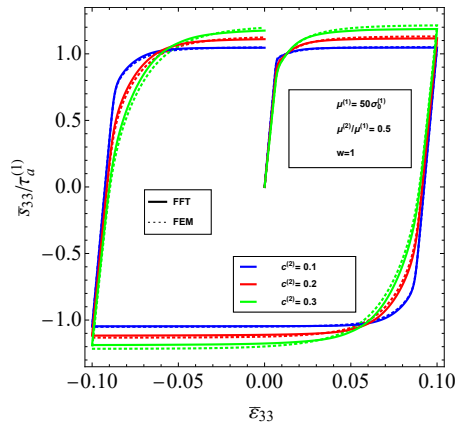
Καθώς το $c^{(2)}$ μεγαλώνει, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.28 για την ελαστική περιοχή γίνεται πιο μαλακό για τις περιπτώσεις όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01, 0.1, 0.5$, ενώ για τις άλλες τρεις περιπτώσεις γίνεται πιο σκληρό. Για όλες τις περιπτώσεις, εκτός από τη $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$, στην τέλεια πλαστική περιοχή γίνεται πιο σκληρό, μιας και τέτοιου είδους σύνθετα υλικά συμπεριφέρονται όπως άκαμπτος φορέας με άκαμπτα σωματίδια με αποτέλεσμα οι ελαστικές σταθερές να μην επηρεάζουν το μακροσκοπικό όριο διαρροής. Στο Σχήμα όπου $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ όσο το $c^{(2)}$ μεγαλώνει γίνεται πιο μαλακό στην πλαστική περιοχή, μιας και το μεγάλο ποσοστό μαλακής φάσης, σωματιδίων, οδηγεί σε όλο και χαμηλότερο όριο διαρροής.



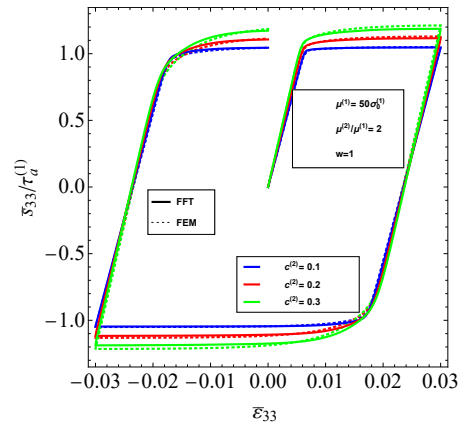
(α') $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$



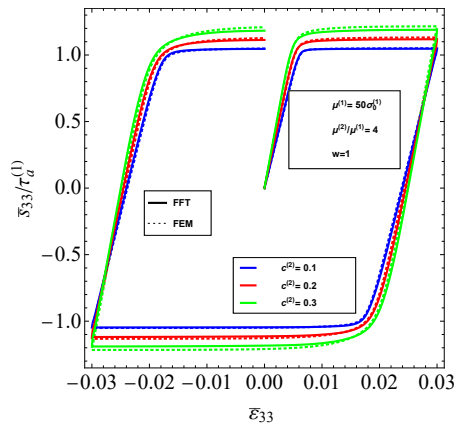
(β') $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.1$



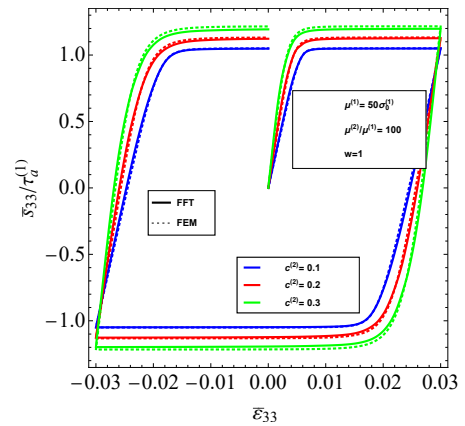
(γ') $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.5$



(δ') $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 2$

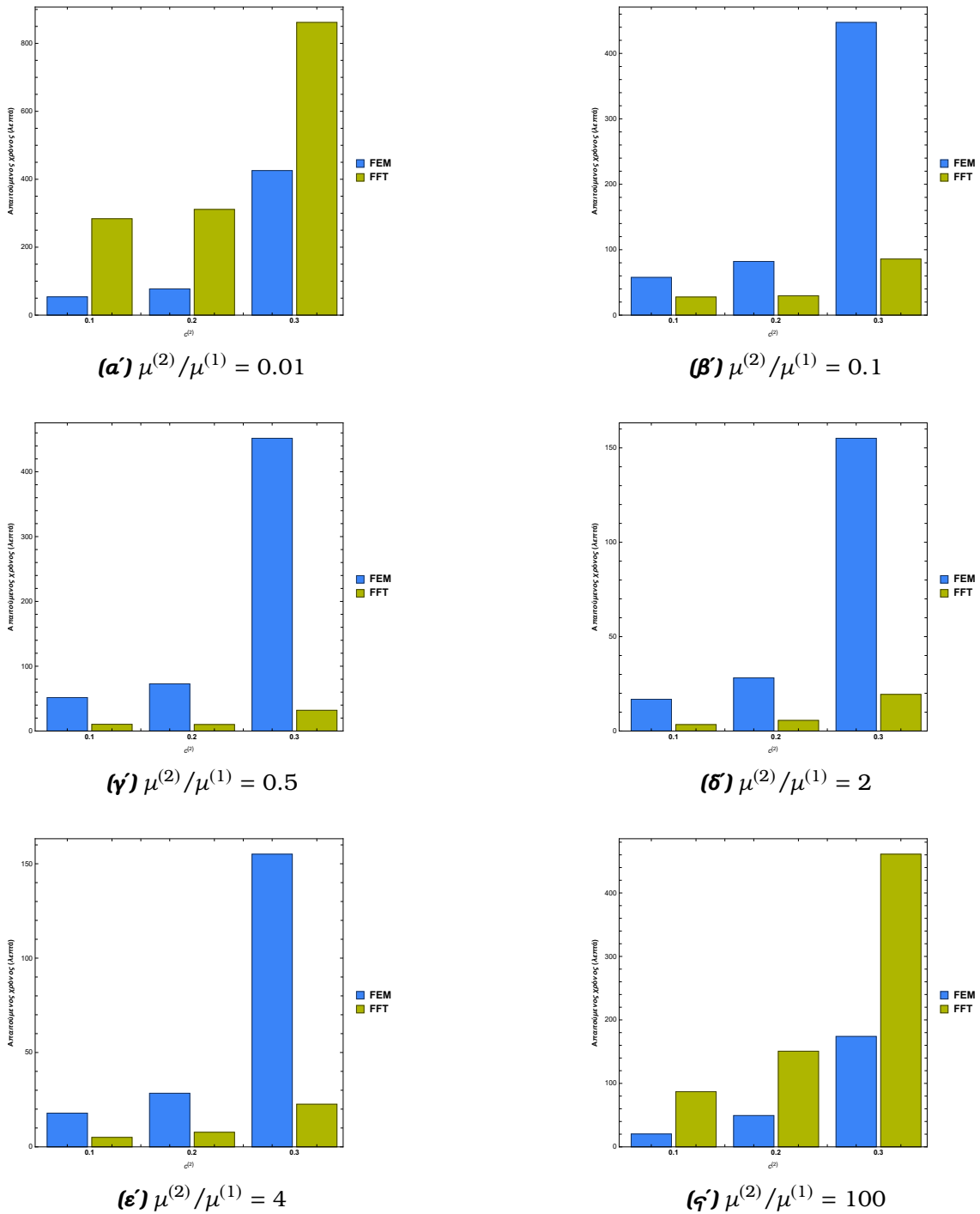


(ε') $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 4$



(ζ') $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$

Σχήμα 5.28: Σύγκριση αποτελεσμάτων μέσω FFT (συνεχής) σε σύγκριση με FEM (διακεκομμένη) για μακροσκοπική απόκριση ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού υπό κύκλο φόρτισης αξονοσυμμετρικής διάτμητικής παραμόρφωσης για διάφορες περιπτώσεις $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ και διαφορετικό ποσοστό φάσης των 30 σωματιδίων c^2 . Η μακροσκοπική αξονική τάση, $\bar{\sigma}_{33}$, κανονικοποιημένη ως προς το αξονοσυμμετρικό όριο διαρροής του φορέα $\tau_a^{(1)} = 2\sigma_0^{(1)}/3$ αποτυπώνεται ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης αξονικής παραμόρφωσης $\bar{\epsilon}_{33}$



Σχήμα 5.29: Απαιτούμενοι χρόνοι σε λεπτά για κάθε περίπτωση που εξετάστηκε στο Σχήμα 5.28

Αναφορικά με τους χρόνους, στο Σχήμα 5.29 παρουσιάζεται ότι η αύξηση του ποσοστού φάσης οδηγεί σε αύξηση του απαιτούμενου χρόνου επίλυσης του προβλήματος. Όσο μεγαλώνει η φάση, όπως παρατηρούμε επιθυμείται η μικροδομή να έχει μεγαλύτερο αριθμό voxels για να είναι πιο ακριβή η λύση. Για $c^{(2)} = 0.1$ και $c^{(2)} = 0.2$ χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 180^3 voxels για αυτό και η χρονική διαφορά είναι μικρή, εν αντιθέσει με την περίπτωση όπου $c^{(2)} = 0.3$ όπου χρησιμοποιήσαμε μικροδομή με 256^3 voxels. Μιας και όπως αναφέρθηκε στους αλγόριθμους

οι πράξεις με την FFT γίνονται για κάθε voxel, η αύξηση αυτή είναι φυσιολογικό να οδηγεί σε μεγάλες χρονικές διαφορές. Πιο συγκεκριμένα για $c^{(2)} = 0.3$ ο χρόνος που χρειάζεται είναι σχεδόν τριπλάσιος από αυτόν για τις άλλες δύο περιπτώσεις. Η FEM επηρεάζεται χρονικά και αυτή από την αλλαγή του ποσοστού φάσεων, γιατί, καθώς αυξάνεται το ποσοστό φάσεων χρησιμοποιούνται περισσότεροι κόμβοι, γεγονός που οδηγεί σε αύξηση των πράξεων. Στην περίπτωση όπου $c^{(2)} = 0.3$ το πλήθος των κόμβων ανέρχονται περίπου στους 110,000 σε σύγκριση με τις περιπτώσεις όπου $c^{(2)} = 0.1$ και $c^{(2)} = 0.2$, όπου έχουν χρησιμοποιηθεί περίπου 17,500 και 35,000 κόμβοι αντίστοιχα, με τη διαφορά αυτή να οδηγεί στη διαφορά όπως φαίνεται και στα Ραβδογράμματα του Σχήματος 5.29.

Συγκριτικά, παρατηρούμε ότι η FEM καθώς αυξάνεται το ποσοστό φάσης αυξάνεται αρκετά ο απαιτούμενος χρόνος σε αντίθεση με την FFT που ναι μεν αυξάνεται, αλλά σε μικρότερο βαθμό. Η μέθοδος FFT, δηλαδή, κρίνεται αποδοτικότερη της μεθόδου καθώς το ποσοστό φάσης $c^{(2)}$ αυξάνεται καθώς η πύκνωση πλέγματος για τη μέθοδο FEM οδηγεί σε πολύ μεγάλους απαιτούμενους χρόνους. Αντίθετα, η FFT με την αύξηση των σημείων δεν οδηγεί σε τόσο μεγάλη αύξηση των απαιτούμενων χρόνων.

Κεφάλαιο 6

Συμπεράσματα και Σχόλια

Η παρούσα εργασία αναφέρεται στην επίλυση του Προβλήματος Ομογενοποίησης των Σύνθετων Υλικών με τη μέθοδο FFT, τη μέθοδο που πρότειναν οι Moulinec και Suquet [1]. Αφού κάναμε μια βιβλιογραφική ανασκόπηση στη θεωρία πίσω από τη μέθοδο αυτή, εφαρμόσαμε τη μέθοδο μέσω του πακέτου CraFT και συγκρίναμε την αποδοτικότητα της ως προς το χρόνο με ίδια αποτελέσματα που προήλθαν μέσω της FEM.

Όπως παρατηρήθηκε για τις μικροδομές σωματιδίων σφαιρικού σχήματος η FFT παρουσιάζεται γρηγορότερη από την FEM για ένα σημαντικό εύρος τιμών του λόγου των μέτρων διατμήσεων των σωματιδίων προς του φορέα $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$. Επίσης η μέθοδος είναι αποδοτικότερη καθώς το ποσοστό φάσης των σωματιδίων αυξάνεται. Η αύξηση αυτή έχει ως αποτέλεσμα στην αύξηση των voxels για να έχει συγκλίνει η λύση, η οποία όμως οδηγεί σε καλύτερους χρόνους από την αντίστοιχη απαιτούμενη αύξηση των κόμβων για την FEM. Η αύξηση των κόμβων οδηγεί σε πύκνωση του πλέγματος και ως αποτέλεσμα στην αύξηση του πλήθους των υπολογισμών. Αν συνυπολογίσουμε ότι η μέθοδος FFT κάνει υπολογισμούς σε πολλά παραπάνω σημεία και έχει πολλούς περισσότερους βαθμούς ελευθερίας, συμπεραίνουμε πόσο αποδοτικότερη είναι η μέθοδος FFT από τη μέθοδο FEM.

Όταν, όμως, $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} \rightarrow 0$ ή όταν $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} \rightarrow \infty$ η μέθοδος δε μπορεί να θεωρηθεί πιο αποδοτική από θέμα χρόνου από την FEM, η οποία δεν επηρεάζεται χρονικά σχεδόν καθόλου από το $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$, όπως φαίνεται και από τα Ραβδογράμματα στο Κεφάλαιο 5. Η FFT, όπως είδαμε, επηρεάζεται από το $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ και αυτό γιατί στην Εξίσωση Lippmann - Schwinger (3.12) στον Επαναληπτικό Αλγόριθμο ο Τελεστής Green $\Gamma^{(0)}$ εξαρτάται από τα $\hat{\mu}^{(0)}$ και $\mu^{(0)}$.

Οι Moulinec και Suquet (1995) προτείνουν ως ιδανική έκφραση την παράμετρο Lamé, $\hat{\mu}^{(0)}$, και το μέτρο διατμήσεως του υλικού αναφοράς, $\mu^{(0)}$, να παίρνουν ως τιμή τη μέση τιμή των επιμέρους μέτρων, δηλαδή:

$$\hat{\mu}^{(0)} = \frac{\hat{\mu}^{(1)} + \hat{\mu}^{(2)}}{2}, \quad \mu^{(0)} = \frac{\mu^{(1)} + \mu^{(2)}}{2} \quad (6.1)$$

Αυτό σημαίνει ότι αν τα $\mu^{(1)}$ και $\mu^{(2)}$ διαφέρουν κατά πολύ μεταξύ τους, και το $\mu^{(0)}$ θα διαφέρει αρκετά με τα $\mu^{(1)}$ και $\mu^{(2)}$. Ως αποτέλεσμα, η εκτίμηση της παραμόρφωσης

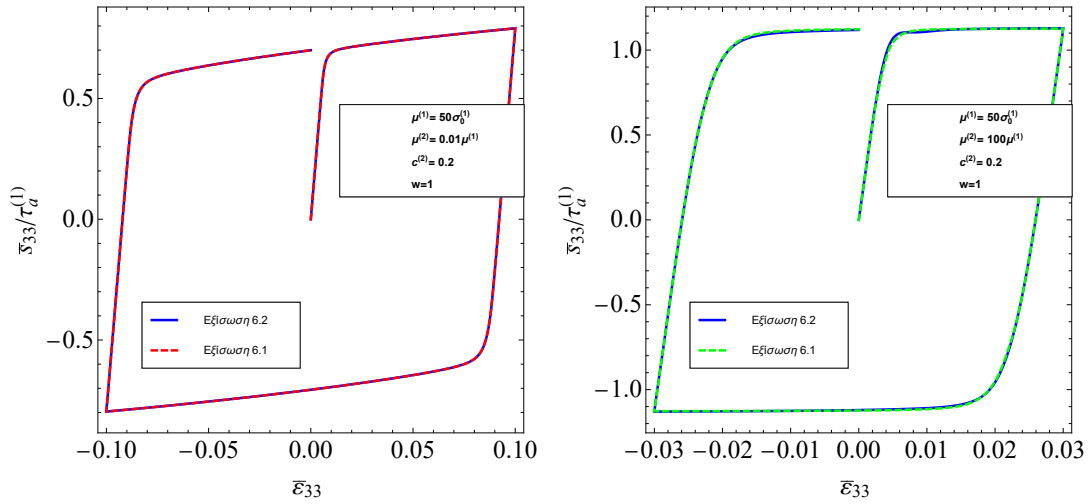
μέσω της εξίσωσης Lippman Schwinger θα απέχει από την ακριβή τιμή της παραμόρφωσης και θα χρειάζονται αρκετές επαναλήψεις για να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης της μεθόδου.

Στην προσπάθεια μείωσης του απαιτούμενου χρόνου που χρειάζεται το CraFT για να ολοκληρώσει τους υπολογισμούς για τις περιπτώσεις $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 0.01$ και $\mu^{(2)}/\mu^{(1)} = 100$, η αύξηση των βημάτων φόρτισης δεν οδήγησε στη μείωση των επιμέρους επαναλήψεων. Αντιθέτως, η αύξηση αυτή οδηγούσε σε ίδιο αριθμό επαναλήψεων και συνεπώς στο σύνολο περισσότερο χρόνο. Ο αριθμός των επαναλήψεων, δηλαδή, δεν επηρεάζεται τόσο από το πλήθος των βημάτων φόρτισης στις ακραίες περιπτώσεις, αλλά από τις ελαστικές σταθερές του υλικού αναφοράς.

Δοκιμάσαμε και άλλες εκφράσεις στην προσπάθειά μας να αυξήσουμε την απόδοση της μεθόδου για τις ακραίες περιπτώσεις $\hat{\mu}^{(0)}$ και $\mu^{(0)}$, όπως:

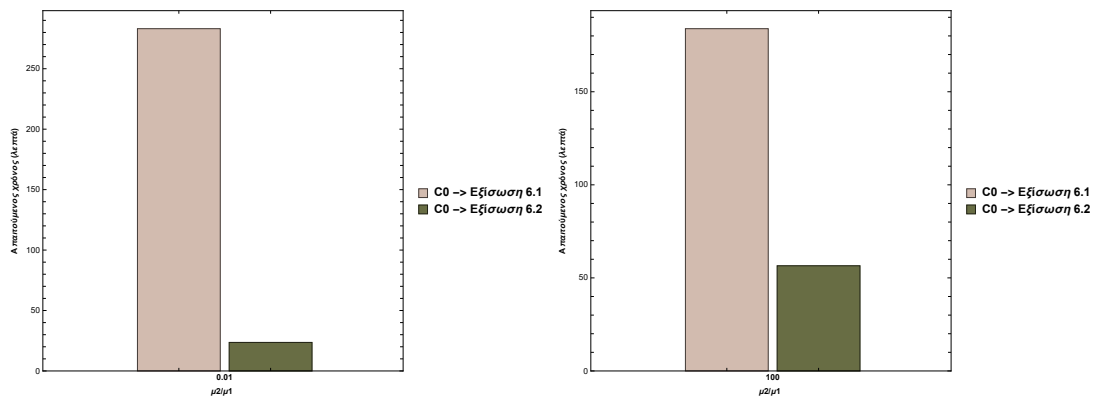
$$\hat{\mu}^{(0)} = \max(\hat{\mu}^{(1)}, \hat{\mu}^{(2)}), \quad \mu^{(0)} = \max(\mu^{(1)}, \mu^{(2)}) \quad (6.2)$$

Τα αποτελέσματα για τις περιπτώσεις όπου τα $\hat{\mu}^{(0)}$ και $\mu^{(0)}$ παίρνουν τιμές μέσω της Εξίσωσης (6.1) και της Εξίσωσης (6.2) στο Σχήμα 6.1 να ταυτίζονται.



Σχήμα 6.1: Σύγκριση της μακροσκοπικής απόκρισης ελαστοπλαστικού σύνθετου υλικού με 30 σφαίρες που πιάνουν το 20% της μοναδιαίας κυψελίδας για διαφορετική περίπτωση ελαστικών σταθερών του υλικού αναφοράς όπως περιγράφονται από τις Εξισώσεις (6.1) και (6.2)

Το αξιοσημείωτο, όμως, είναι ότι με την αλλαγή αυτή ο απαιτούμενος χρόνος μειώνεται κατά πολύ όπως φαίνεται και στο Σχήμα 6.2. Συνεπώς στους υπολογισμούς στις ακραίες περιπτώσεις $\mu^{(2)}/\mu^{(1)}$ του Κεφαλαίου 5 θα μπορούσαν με παρόμοιες αλλαγές στο υλικό αναφοράς να επιτευχθούν καλύτερα χρονικά αποτελέσματα για την επίλυση μέσω της μεθόδου FFT.



Σχήμα 6.2: Σύγκριση απαιτούμενης χρονικής διάρκειας για τους υπολογισμούς του Σχήματος 6.1

Οι Moulinec και Silva [22] προσπάθησαν να συγκρίνουν τις προτάσεις των Eyre και Milton [23], Michel et. al. [24] και Monchiet και Bonnet [25] για αλλαγές στον αλγόριθμο. Ακόμα και αν τα $\mu^{(1)}$ και $\mu^{(2)}$ διαφέρουν κατά πολύ μεταξύ τους, με τις αλλαγές αυτές, η μέθοδος αφενός θα δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα και αφετέρου η απαιτούμενη χρονική διάρκεια θα είναι κατά πολύ μικρότερη από τον αλγόριθμο που πρότειναν οι Suquet και Moulinec (1995). Στην νέα έκδοση της CraFT υπάρχει επιλογή να διαλέξουμε τους επιταχυνόμενους αλγορίθμους αυτούς και ως αποτέλεσμα, ακόμα και αν τα $\mu^{(1)}$ και $\mu^{(2)}$ διαφέρουν κατά πολύ, η μέθοδος FFT να είναι εξαιρετικά αποδοτική.

Πέρα όμως από την αποτελεσματικότητα και αποδοτικότητα της μεθόδου για τις παρούσες περιπτώσεις που συζητήθηκαν, παρατηρήσαμε την αδυναμία υπολογισμού μακροσκοπικής απόκρισης πορώδους υλικού μέσω της CraFT κάτι το οποίο επιβεβαιώθηκε και με αφορμή τους υπολογισμούς της παρούσας εργασίας.

Καλύτερα χρονικά αποτελέσματα θα μπορούσαμε να πετύχουμε και αν επιλέγαμε μικροδομή με μικρότερη χωρική ανάλυση, με λιγότερο αριθμό voxels. Επιλέγοντας μια απόκλιση από τη συγκλίνουσα καμπύλη μεγαλύτερη από το 1% που επιλέχθηκε, π.χ. 5%, θα μπορούσε να επιλεγεί μικροδομή με 128^3 voxels αντί για 180^3 voxels που επιλέχθηκαν στις περιπτώσεις όπου $c^{(2)} = 10\%$ και $c^{(2)} = 20\%$, γεγονός που θα οδηγούσε σε υποδιπλασιασμό του απαιτούμενου χρόνου. Αν επιλεγόταν ένα κριτήριο σύγκλισης μεγαλύτερο του 0.0001, που είναι αυτό που προτείνουν οι δημιουργοί, και πάλι θα πετυχαίναμε μικρότερους χρόνους, αλλά θα τεθόταν θέμα ακρίβειας με τέτοιες αλλαγές.

Σε ένα **επόμενο στάδιο**, η παρούσα εργασία θα μπορούσε να εξελιχθεί στον υπολογισμό μακροσκοπικής απόκριση οποιασδήποτε περιοδικής μικροδομής σύνθετου υλικού με τη μέθοδο της FFT, όπως σωματιδιακού τύπου ελλειψοειδούς σχήματος και η σύγκριση ως προς τους χρόνους που χρειάζονται οι 2 μέθοδοι. Πέρα από μικροδομές με μονοδιασπορά θα ήταν αξιοσημείωτη και η χρονική σύγκριση των 2 μεθόδων για πολυδιασπορά και για ποσοστό φάσεων που να ανέρχεται πάνω από το 30% που εξετάστηκε στην παρούσα εργασία. Το πακέτο της CraFT έχει δυνατότητα για την μακροσκοπική απόκριση υλικών που υπακούουν και σε κριτήρια διαρροής διαφορετικά από αυτά του Von Mises, όπως αυτό του Gurson και διάφορα άλλα

στη νέα έκδοση που παρέχεται από τους δημιουργούς, γεγονός που γεννά αρκετό ενδιαφέρον για την αποδοτικότητα της μεθόδου σε σύγκριση με την FEM. Ένα χαρακτηριστικό της μεθόδου είναι ότι μπορεί οι υπολογισμοί αυτοί να αφορούν μικροδομές που έχουν εξαχθεί μέσα από φωτογραφίες από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο SEM, θεωρώντας τη μικροδομή της φωτογραφίας ως το RVE του υλικού και με κατάλληλο τρόπο να προγραμματιστεί η μετατροπή της φωτογραφία σε αρχείο που μπορεί να διαβαστεί για να αναγνωριστεί από το CraFT. Συνεπώς, θα μπορέσουν οι υπολογισμοί για το ίδιο υλικό να εξαχθούν πειραματικά και υπολογιστικά. Τέλος, η εξαγωγή αποτελεσμάτων για πολυκρυσταλλικά υλικά αποτελεί ένα ευρύ ερευνητικό θέμα. Σύμφωνα με την έρευνα των Lucarinni και Segurado [26] που εξέτασαν την αντοχή του υλικού σε κόπωση τα αποτελέσματα με τη μέθοδο της FFT, πέρα από την αποτελεσματικότητα της μεθόδου, παρατήρησαν ότι η FFT είναι αποδοτικότερη από την FEM και για τέτοια υλικά. Παρόμοια θα μπορούσε να γίνει ως συνέχεια της παρούσας εργασίας.

Chapter 7

Bibliography

- [1] H. Moulinec and P. Suquet, “A fft-based numerical method for computing the mechanical properties of composites from images of their microstructures,” in *IUTAM symposium on microstructure-property interactions in composite materials*. Springer, 1995, pp. 235–246.
- [2] H. Moulinec, *CraFT user’s guide*, 2014.
- [3] M. D. Rintoul and S. Torquato, “Reconstruction of the structure of dispersions,” *Journal of colloid and interface science*, vol. 186, no. 2, pp. 467–476, 1997.
- [4] H. Moulinec and P. Suquet, “A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure,” *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 157, no. 1-2, pp. 69–94, 1998.
- [5] J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet, “Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach,” *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 172, no. 1-4, pp. 109–143, 1999.
- [6] N. Lahellec and P. Suquet, “Effective response and field statistics in elasto-plastic and elasto-viscoplastic composites under radial and non-radial loadings,” *International Journal of Plasticity*, vol. 42, pp. 1–30, 2013.
- [7] M. Agoras, K. Garyfallogiannis, and N. Aravas, “On the macroscopic response and field statistics in particulate composites with elasto-plastic phases and random microstructures,” *Journal of Applied Mechanics*, pp. 1–27, 2021.
- [8] I. Papadioti, K. Danas, and N. Aravas, “A methodology for the estimation of the effective yield function of isotropic composites,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 87, pp. 120–138, 2016.
- [9] K. Anoukou, R. Brenner, F. Hong, M. Pellerin, and K. Danas, “Random distribution of polydisperse ellipsoidal inclusions and homogenization estimates

-
- for porous elastic materials,” *Computers & Structures*, vol. 210, pp. 87–101, 2018.
- [10] C. González, J. Segurado, and J. Llorca, “Numerical simulation of elasto-plastic deformation of composites: evolution of stress microfields and implications for homogenization models,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 52, no. 7, pp. 1573–1593, 2004.
- [11] J. Willis, *Mechanics of composites*. Ecole polytechnique, Département de mécanique, 2002.
- [12] R. Zeller and P. Dederichs, “Elastic constants of polycrystals,” *Physica status solidi (b)*, vol. 55, no. 2, pp. 831–842, 1973.
- [13] B. A. Lippmann and J. Schwinger, “Variational principles for scattering processes. i,” *Physical Review*, vol. 79, no. 3, p. 469, 1950.
- [14] M. Hlawitschka, J. Ebling, and G. Scheuermann, “Convolution and fourier transform of second order tensor fields,” *Proceedings of IASTED VIIP 2004*, pp. 78–83, 2004.
- [15] M. Frigo and S. G. Johnson, “The design and implementation of fftw3,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 93, no. 2, pp. 216–231, 2005.
- [16] J. W. Cooley and J. W. Tukey, “An algorithm for the machine calculation of complex fourier series,” *Mathematics of computation*, vol. 19, no. 90, pp. 297–301, 1965.
- [17] C. M. Rader, “Discrete fourier transforms when the number of data samples is prime,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 56, no. 6, pp. 1107–1108, 1968.
- [18] L. Bluestein, “A linear filtering approach to the computation of discrete fourier transform,” *IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics*, vol. 18, no. 4, pp. 451–455, 1970.
- [19] ©Abaqus 6.14. Abaqus theory guide, simulia. [Online]. Available: <http://abaqus.software.polimi.it/v6.14/books/stm/default.htm>
- [20] J. Schöberl, “Netgen an advancing front 2d/3d-mesh generator based on abstract rules,” *Computing and visualization in science*, vol. 1, no. 1, pp. 41–52, 1997.
- [21] J. Ahrens, B. Geveci, and C. Law, “Paraview: An end-user tool for large data visualization,” *The visualization handbook*, vol. 717, no. 8, 2005.
- [22] H. Moulinec and F. Silva, “Comparison of three accelerated fft-based schemes for computing the mechanical response of composite materials,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 97, no. 13, pp. 960–985, 2014.
- [23] D. J. Eyre and G. W. Milton, “A fast numerical scheme for computing the re-
-

sponse of composites using grid refinement,” *The European Physical Journal Applied Physics*, vol. 6, no. 1, pp. 41–47, 1999.

- [24] J. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet, “A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 52, no. 1-2, pp. 139–160, 2001.
- [25] V. Monchiet and G. Bonnet, “A polarization-based fft iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 89, no. 11, pp. 1419–1436, 2012.
- [26] S. Lucarini and J. Segurado, “On the accuracy of spectral solvers for micromechanics based fatigue modeling,” *Computational Mechanics*, vol. 63, no. 2, pp. 365–382, 2019.
- [27] F. Willot, “Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields,” *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 343, no. 3, pp. 232–245, 2015.

Παράρτημα Α΄

Ο Μετασχηματισμός Fourier

(Α΄.1)

Η εξίσωση Lippman Schwinger στο χώρο Fourier περιλαμβάνει τον ταυισμό των παραμορφώσεων στο χώρο Fourier, που, όπως αναφέρει και ο Willot [27] στην ερευνά του μπορεί να υπολογιστεί με το Διακριτό Μετασχηματισμό Fourier (DFT) ως εξής:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) e^{-2\pi i(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})} \xleftrightarrow[\mathcal{F}]{\mathcal{F}^{-1}} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N^3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Omega_{\mathcal{F}}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})} \quad (\text{Α΄.2})$$

με τα \mathbf{x} και $\boldsymbol{\xi}$ να ορίζονται σύμφωνα με τους Moulinec και Suquet(1995):

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(i_1, i_2, i_3) &= \left((i_1 - 1) \frac{T_1}{N_1}, (i_2 - 1) \frac{T_2}{N_2}, (i_3 - 1) \frac{T_3}{N_3} \right), \\ i_1 &= 1, \dots, N_1, \\ i_2 &= 1, \dots, N_2, \\ i_3 &= 1, \dots, N_3 \end{aligned} \quad (\text{Α΄.3})$$

και

$$\boldsymbol{\xi}_j = \begin{cases} \frac{1-(N_j/2)}{T_j}, \dots, \frac{N_j/2}{T_j}, & N_j \text{ ζυγός} \\ \frac{-(N_j-1)/2}{T_j}, \dots, \frac{(N_j-1)/2}{T_j}, & N_j \text{ μονός} \end{cases} \quad (\text{Α΄.4})$$

Αντίστοιχα ο ταυιστής τάσεων και ο ταυιστής πόλωσης θα μπορούν να υπολογιστούν μέσω των εξής εκφράσεων:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) e^{-2\pi i(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})} \xleftrightarrow[\mathcal{F}]{\mathcal{F}^{-1}} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N^3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Omega_{\mathcal{F}}} \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})} \quad (\text{Α΄.5})$$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) e^{-2\pi i(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})} \xleftrightarrow[\mathcal{F}]{\mathcal{F}^{-1}} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N^3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Omega_{\mathcal{F}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})} \quad (\text{Α΄.6})$$