



دانشگاه تهران
پردیس دانشکده های فنی
دانشکده مهندسی عمران



تحلیل مسائل فلکسوالکتریک در شرایط تغییر شکل های بزرگ به روش میکرومورفیک اصلاح شده

پایان نامه یا برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته مهندسی عمران گرایش سازه

صدف قدیمی چکوسری

استاد راهنما:
دکتر سهیل محمدی

مهر ۱۴۰۴

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



به نام خدا



گواهی اصالت اثر

اینجانب صدف قدیمی چکوسری دانشجوی مقطع کارشناسی ارشد رشته مهندسی عمران گرایش سازه

دانشکده مهندسی عمران دانشگاه تهران گواهی می‌دهم که:

۱- مطالب این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است؛

۲- محتوای این پایان‌نامه پیش از این برای دریافت هیچ مدرکی ارائه نشده است؛

۳- در انجام پژوهش و تهیه این پایان‌نامه، همه موازین اخلاق پژوهش رعایت شده است؛

۴- آرایه هرگونه دستاورد علمی یا صنعتی، همچون انتشار مقاله، چاپ کتاب، ثبت اختراع و مشابه آن،

که برگرفته از این پایان‌نامه باشد، منوط به تایید استاد راهنما، رعایت حقوق مالکیت مادی و

معنوی دانشگاه تهران (مطابق مقررات دانشگاه) و ذکر وابستگی به دانشگاه تهران است.

نام و نام خانوادگی دانشجو: صدف قدیمی چکوسری

تاریخ و امضاء:

تقدیم به آرزو خاوری،

دختری که تحصیل در افغانستان برای او ممنوع بود

و با فشارهای ناشی از تبعیض و محدودیت‌های اجتماعی در ایران روبه‌رو شد.

به آرزو و تمام دخترانی که حق یادگیری و رشد برابر دارند.

بدین وسیله مراتب سپاس و قدردانی صمیمانه خود را از

استاد فرهیخته، جناب آقای دکتر محمدی

ابراز می‌دارم.

راهنمایی‌ها، حمایت‌های علمی و آموزنده‌ی ایشان همواره چراغ راه این پژوهش بوده
و نقش بسزایی در شکل‌گیری و تکامل این پایان‌نامه ایفا نموده است.

چکیده

فلکسوالکتریسیته پدیده‌ای فراگیر در مواد دی‌الکتریک است که طی آن یک قطبش الکتریکی در اثر کرنش مکانیکی ناهمگن یا گرادیان کرنش القا می‌شود. برخلاف پیزوالکتریسیته که به بلورهای غیرمرکزمتقارن محدود است، فلکسوالکتریسیته می‌تواند در موادی با هر نوع تقارن وجود داشته باشد. این ویژگی دامنه‌ی کاربردهای آن را به‌ویژه در مقیاس‌های میکرو و نانو، که اثرات گرادیانی غالب می‌شوند، به‌طور چشمگیری گسترش می‌دهد. یکی از چالش‌های اساسی در مدل‌سازی عددی فلکسوالکتریسیته، ماهیت آن به عنوان یک برهم‌کنش میان گرادیان مرتبه دوم حرکت و میدان الکتریکی است که منجر به یک معادله دیفرانسیل جزئی با مشتقات جزئی مرتبه چهارم می‌شود.

تحقیق حاضر از رویکرد میکرومورفیک برای مدل‌سازی اثر فلکسوالکتریک کمک می‌گیرد. این چارچوب با معرفی درجات آزادی میکرومورفیک مستقل، نیاز محدودکننده به پیوستگی C^1 میدان جابجایی را برطرف می‌سازد. بدین ترتیب، اثرات گرادیان مرتبه بالاتر در قالب فرمول‌بندی اجزای محدود کلاسیک با پیوستگی C^0 قابل بیان می‌شوند. در نتیجه روش پیشنهادی از نظر پایداری محاسباتی مناسب‌تر خواهد بود. فرمول‌بندی پیشنهادی می‌تواند به‌طور کامل هر دو نوع غیرخطی مادی و هندسی را در نظر بگیرد و توانایی توصیف تغییرشکل‌های بزرگ، به‌ویژه در دی‌الکتریک‌های نرم، را داراست.

سامانه‌ی غیرخطی حاصل به صورت تقریبی و با بهره‌گیری از استراتژی نیوتن-رافسون برای خطی‌سازی حل شده است. فرمول‌بندی نظری ارائه‌شده برهم‌کنش میان میدان‌های مکانیکی، الکتریکی و میکرومورفیک را در نظر می‌گیرد. از مزیت‌های این چارچوب، انعطاف‌پذیری آن است؛ به گونه‌ای که با اعمال محدودیت‌های مناسب بر پارامترهای ماده، می‌توان طیفی از مسائل مرتبط از جمله الاستیسیته گرادیانی، الاستیسیته میکرومورفیک و الکتروالاستیسیته غیرخطی را نیز مدل‌سازی نمود.

نتایج عددی نشان می‌دهد که این مدل توانایی پیش‌بینی اثر مستقیم فلکسوالکتریک و میدان‌های قطبش ناشی از گرادیان کرنش را دارد. نتایج همچنین رفتار وابسته به اندازه را آشکار کرده و پایداری و کارایی محاسباتی مدل را تأیید می‌کنند. در نتیجه، فرمول‌بندی میکرومورفیک پیشنهادی ابزاری کارآمد و انعطاف‌پذیر برای تحلیل پدیده‌های کوپل الکترو-مکانیکی و طراحی سازه‌های فلکسوالکتریک در کاربردهای مهندسی پیشرفته فراهم می‌سازد.

کلیدواژه‌ها:

فلکسوالکتریسیته - کوپل الکترو-مکانیکی - نظریه میکرومورفیک - نظریه گرادیان کرنش - المان محدود

۱	فصل اول: کلیات تحقیق
۱	۱.۱. پیشینه تحقیق
۳	۲.۱. سؤالات پژوهش
۴	۳.۱. ضرورت انجام پژوهش
۵	۴.۱. معرفی اجمالی روش تحقیق
۵	۵.۱. مروری بر فصول پایان نامه
۶	۶.۱. تعاریف اصطلاحات کلیدی
۸	۷.۱. دامنه پژوهش و فرضیات اصلی
۸	۸.۱. جمع بندی فصل اول
۱۰	فصل دوم: مروری بر تحقیقات گذشته
۱۰	۱.۲. مبانی و اصول کوپلینگ الکترومکانیکی
۱۰	۱.۱.۲. پیزوالکتریسیته
۱۱	۲.۱.۲. فلکسوالکتریسیته
۱۳	۳.۱.۲. خاستگاه فیزیکی (تبیین جامعیت فلکسوالکتریسیته و وابستگی به مقیاس)
۱۵	۴.۱.۲. مقایسه پیزوالکتریسیته و فلکسوالکتریسیته
۱۶	۵.۱.۲. کاربردهای فلکسوالکتریسیته
۱۷	۲.۲. سیر تاریخی و مشارکت های کلیدی
۱۷	۱.۲.۲. بنیان های نظری اولیه
۱۸	۲.۲.۲. پیشرفت های تجربی
۱۹	۳.۲. نظریه های محیط پیوسته تعمیم یافته
۲۰	۱.۳.۲. الاستیسیته گرادیان - کرنش
۲۰	۲.۳.۲. نظریه های تنش - کوپل و میکروپلار
۲۱	۳.۳.۲. نظریه محیط پیوسته میکرومورفیک
۲۲	۴.۲. چالش ها در مدل سازی عددی فلکسوالکتریسیته
۲۳	۱.۴.۲. استراتژی های عددی خاص
۲۴	۲.۴.۲. کاربرد محیط پیوسته توسعه یافته در مسائل الکترومکانیکی
۲۶	۵.۲. شکاف های ادبیات و انگیزه پژوهش
۲۶	۱.۵.۲. شکاف های شناسایی شده در ادبیات
۲۷	۲.۵.۲. راه حل پیشنهادی: پیوند میکرومورفیک و گرادیان کرنش
۲۷	۳.۵.۲. انگیزه پژوهش

۲۹	فصل سوم: روش‌شناسی پژوهش
۲۹	۱.۳. مقدمه
۲۹	۱.۱.۳. نمادها و تعاریف اولیه
۳۱	۲.۳. مفروضات و چارچوب مدل‌سازی
۳۲	۱.۲.۳. مفروضات فیزیکی
۳۲	۲.۲.۳. مفروضات سینماتیکی و پیوستاری
۳۳	۳.۲.۳. چارچوب عددی
۳۴	۳.۳. سینماتیک مسأله
۳۴	۱.۳.۳. سینماتیک ماکروسکوپی (تغییر شکل ماکرو)
۳۶	۲.۳.۳. سینماتیک میکرومورفیک (تغییر شکل میکرو)
۴۰	۳.۳.۳. سینماتیک الکتریکی
۴۳	۴.۳. چگالی‌های انرژی کرنشی
۴۳	۱.۴.۳. چگالی انرژی داخلی مکانیکی-الکتریکی
۴۵	۲.۴.۳. چگالی انرژی داخلی الکتریکی
۴۶	۳.۴.۳. چگالی انرژی داخلی فلکسوالکتریک
۴۶	۵.۳. فرمول‌بندی تغییراتی و فرم ضعیف
۴۶	۱.۵.۳. مشتقات ساختاری و مزدوج‌های انرژی
۴۸	۲.۵.۳. معادلات حاکم و اصول تغییراتی
۴۹	۳.۵.۳. فرم ضعیف مسأله‌ی کوپل‌شده
۵۲	۶.۳. گسسته‌سازی به روش المان محدود
۵۲	۱.۶.۳. تقریب میدان‌های اولیه
۵۴	۲.۶.۳. خطی‌سازی و روش حل
۵۷	فصل چهارم: مدل‌سازی‌ها و تحلیل نتایج
۵۷	۰.۴. مشخصات مکانیکی مدل‌های تحت بررسی
۵۸	۱.۴. مطالعه‌ی رفتار مکانیکی-الکتریکی میکرومورفیک در غیاب اثرات فلکسوالکتریک
۵۹	۱.۱.۴. تحلیل حساسیت اندازه‌ی مش
۶۲	۲.۱.۴. اعتبارسنجی مدل میکرومورفیک و بررسی پارامتر مقیاس طول
۶۶	۲.۴. مطالعه ورق تحت جابجایی کششی (فعال‌سازی فلکسوالکتریسیته)
۶۶	۱.۲.۴. مطالعه ورق بدون حفره (بررسی نقش گرادیان کرنش)
۶۸	۲.۲.۴. مطالعه ورق حفره‌دار
۷۳	۳.۴. مطالعه ورق حفره‌دار با شرایط مرزی الکتریکی (فعال‌سازی فلکسوالکتریسیته)
۷۸	۱.۳.۴. تحلیل حساسیت نسبت به پارامتر شبه‌جریمه
۸۱	۴.۴. میکرو-تیر یک سر گیردار

۸۲	۱.۴.۴. بررسی حالت $M - Elasticity$
۸۲	۲.۴.۴. بررسی حالت $FM - Elasticity$
۸۴	۳.۴.۴. بررسی اعمال چگالی بار الکتریکی سطحی
۸۶	۵.۴. میکرو-تیر دو سر گیردار
۹۰	فصل پنجم: نتیجه گیری و چشم اندازهای آینده
۹۰	۱.۵. مقدمه
۹۰	۲.۵. نتیجه گیری برای هر پرسش تحقیق
۹۲	۳.۵. نتیجه گیری کلی درباره مسئله اصلی پژوهش
۹۳	۴.۵. دستاوردهای نظری و پژوهشی
۹۳	۵.۵. کاربردهای عملی
۹۴	۶.۵. پیشنهادهایی برای تحقیقات آینده

نماد	توضیح	پیکره / معنا
$\mathbf{X}$	بردار موقعیت در پیکره مرجع	توصیف مادی
$\mathbf{x}$	بردار موقعیت در پیکره کنونی	توصیف فضایی
$\varphi(\mathbf{X})$	نگاشت حرکت	نگاشت $\mathbf{X} \mapsto \mathbf{x}$
$\mathbf{F} = \text{Grad } \varphi$	گرادیان تغییر شکل	سینماتیک ماکروسکوپی
$J = \det \mathbf{F}$	دترمینان ژاکوبین	تغییر حجم
$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$	تانسور کوشی-گرین راست	معیار کرنش
$\mathbf{b} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T$	تانسور کوشی-گرین چپ	معیار کرنش
$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I})$	کرنش گرین-لاگرانژ	کرنش بزرگ
$\mathbf{e} = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{b}^{-1})$	کرنش اویلر-آلمانسی	کرنش بزرگ
$\bar{\mathbf{F}}$	تانسور ریز-تغییر شکل	سینماتیک میکرو
$\bar{\mathbf{x}}$	بردار موقعیت ریزساختاری	سینماتیک میکرو
$\bar{\mathbf{G}} = \text{Grad } \bar{\varphi}$	گرادیان ریز-تغییر شکل	تانسور درجه سوم
ϕ	پتانسیل الکتریکی	متغیر میدان الکتریکی
$\mathbf{E}_\epsilon = -\text{Grad } \phi$	میدان الکتریکی با توصیف مادی	پیکره مرجع
$\mathbf{e}_\epsilon = -\text{grad } \phi$	میدان الکتریکی با توصیف فضایی	پیکره کنونی
$\mathbf{I}$	تانسور واحد (درجه دوم)	عملگر واحد
$\mathcal{E}$	نماد لوی-چیویتا	تانسور جایگشت

۱۵	جدول ۱-۲: تفاوت فلکسوالکتریسیه و پیزوالکتریسیته
۲۲	جدول ۲-۲: دید کلی از نظریه‌های غیرکلاسیک مکانیک پیوسته برجسته
۲۵	جدول ۳-۲: برخی از تحقیقات شاخص در حوزه فلکسوالکتریسیته چاپ شده در سال ۲۰۲۵
۳۳	جدول ۱-۳: مفروضات و چارچوب مدل
۵۷	جدول ۱-۴: مشخصات فیزیکی ماده
۵۹	جدول ۲-۴: شبکه‌بندی‌های ساختارنیافته مختلف برای بررسی حساسیت اندازه مش
۶۹	جدول ۳-۴: حالت‌های بررسی ورق حفره‌دار در کل دامنه
۷۹	جدول ۴-۴: مقادیر باقیمانده به ازای مقادیر مختلف پارامتر شبه‌جریمه
۸۷	جدول ۵-۴: خیز حداکثر به ازای صفر در نظر گرفتن پارامترهای اساسی

۲	شکل ۱-۱: شماتیک از اثر فلکسوالکتریک (آ-پ) و پیزوالکتریک (ت و ث)
۱۱	شکل ۱-۲: قطبش تحت تاثیر تغییر شکل در ماده با تقارن مرکزی
۱۳	شکل ۲-۲: مواد با خاصیت فلکسوالکتریسیته
۱۴	شکل ۳-۲: فیزیک پدیده فلکسوالکتریسیته به واسطه گرادیان کرنش
۱۵	شکل ۴-۲: گسترده گرادیان کرنش ممکن
۱۶	شکل ۵-۲: تشکیل قطبش از طریق (آ) پیزوالکتریسیته و (ب) فلکسوالکتریسیته
۱۸	شکل ۶-۲: سیر تاریخی اولیه پدیده فلکسوالکتریسیته
۳۴	شکل ۱-۳: نگاشت بین پیکره مرجع و کنکونی
۳۶	شکل ۲-۳: نگاشت المان هندسی حجمی و سطحی
۳۷	شکل ۳-۳: تغییر شکل مستقل میکرومورفیک
۳۹	شکل ۴-۳: نمایش میدان‌های مستقل ماکرو و میکرو
۴۲	شکل ۵-۳: بردار قطبش تحت تغییر شکل یکنواخت و غیریکنواخت
۵۱	شکل ۶-۳: ارتباط بین مدل‌های مختلف کوپل‌شده‌ی الاستیسیته‌ی مکانیکی و الکتریکی
۵۸	شکل ۱-۴: ورق کششی دارای حفره
۵۹	شکل ۲-۴: شبکه‌های مختلف المان‌بندی
۶۱	شکل ۳-۴: تحلیل حساسیت مش در حالت الاستیک
۶۳	شکل ۴-۴: المان‌های انتخابی برای تحلیل عددی و درجات تقریب میدان‌های اجزای محدود
۶۳	شکل ۵-۴: بررسی اثر انتخاب درجات تقریب اجزای محدود متفاوت بر جابجایی
۶۴	شکل ۶-۴: تحلیل حساسیت مش در حالت الکترو-مکانیکی
۶۴	شکل ۷-۴: بررسی پارامتر طول مقیاس در مسأله $M - Elasticity$ تحت جابجایی کششی
۶۵	شکل ۸-۴: شکل اولیه و نهایی ورق تحت جابجایی اعمالی
۶۶	شکل ۹-۴: کانتور تنش در ورق حفره‌دار (تغییر یافته و تغییر نیافته)
۶۷	شکل ۱۰-۴: شکل تغییر یافته ورق بدون حفره
۶۷	شکل ۱۱-۴: کانتور مولفه‌های کرنش
۶۸	شکل ۱۲-۴: کانتور میدان الکتریکی ناشی از اعمال جابجایی در پیکره مرجع
۶۸	شکل ۱۳-۴: کانتور میدان الکتریکی ناشی از اعمال جابجایی در پیکره کنونی
۶۹	شکل ۱۴-۴: تغییر شکل ورق حفره‌دار تحت کوپل‌های مختلف

- شکل ۴-۱۵: شکل تغییر یافته تحت مدل پلاستیک ۷۰
- شکل ۴-۱۶: کانتور تنش افقی ورق حفره دار تحت کوپل های مختلف ۷۱
- شکل ۴-۱۷: کانتور تنش قائم ورق حفره دار تحت کوپل های مختلف ۷۲
- شکل ۴-۱۸: ورق حفره دار تحت اثر اختلاف پتانسیل بین دو وجه انتهایی ۷۳
- شکل ۴-۱۹: جابجایی در مدل «الکترو-الاستیسیته» و «فلکسو-میکرومورفیک-الاستیسیته» ۷۴
- شکل ۴-۲۰: کانتور میدان الکتریکی تحقیق حاضر ۷۵
- شکل ۴-۲۱: کانتور میدان الکتریکی از مرجع [۷۵] ۷۵
- شکل ۴-۲۲: میدان جابجایی افقی در شکل اولیه ۷۶
- شکل ۴-۲۳: میدان جابجایی افقی در شکل تغییر یافته ۷۶
- شکل ۴-۲۴: میدان جابجایی قائم در شکل اولیه ۷۷
- شکل ۴-۲۵: میدان جابجایی قائم در شکل تغییر یافته ۷۸
- شکل ۴-۲۶: همگرایی حلگر برای مقادیر مختلف پارامتر شبه جرم ۷۹
- شکل ۴-۲۷: تأثیر پارامتر شبه جرم بر شرطی شدن ماتریس ۸۰
- شکل ۴-۲۸: تیر یک سر گیردار ۸۱
- شکل ۴-۲۹: تغییر مکان عمودی برای تیر یک سر گیردار برای مقادیر مختلف مقیاس طولی ۸۲
- شکل ۴-۳۰: توزیع میدان الکتریکی در طول مسیر مشخص شده یک ۸۳
- شکل ۴-۳۱: توزیع میدان الکتریکی در طول مسیر مشخص شده دو ۸۳
- شکل ۴-۳۲: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف ۰.۳۶۰ کیلوولت ۸۴
- شکل ۴-۳۳: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف ۰.۷۵۳ کیلوولت ۸۵
- شکل ۴-۳۴: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف ۱.۰۹۷ کیلوولت ۸۵
- شکل ۴-۳۵: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف ولتاژهای مختلف ۸۶
- شکل ۴-۳۶: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - FM-Elasticity ۸۷
- شکل ۴-۳۷: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - EM-Elasticity ۸۷
- شکل ۴-۳۸: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - M-Elasticity ۸۸
- شکل ۴-۳۹: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - Elasticity ۸۸
- شکل ۴-۴۰: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - E-Elasticity ($\alpha = 0$) ۸۸
- شکل ۴-۴۱: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - E-Elasticity ($\beta = 0$) ۸۹
- شکل ۴-۴۲: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - E-Elasticity ($\gamma = 0$) ۸۹

فصل اول: کلیات تحقیق

۱.۱. پیشینه تحقیق

حوزه مواد هوشمند، به ویژه موادی که قادر به تبدیل انرژی مکانیکی به انرژی الکتریکی و بالعکس هستند، همواره مورد توجه گسترده پژوهشگران قرار داشته است. به طور سنتی، این حوزه عمدتاً تحت سلطه مواد پیزوالکتریک بوده است؛ موادی که در اثر اعمال کرنش یکنواخت دچار قطبش^۱ الکتریکی می‌شوند. با این حال، پدیده پیزوالکتریک به دلیل محدودیت‌های بلورشناختی نیاز به ساختار بلوری فاقد مرکز تقارن^۲ دارد. اگر بلور مرکز تقارن داشته باشد، اثر پیزوالکتریک خالص صفر خواهد بود و همین امر دامنه مواد قابل استفاده را محدود می‌سازد. در سال‌های اخیر، یک پدیده جایگزین و فراگیرتر با عنوان فلکسوالکتریسیته^۳ توجه قابل توجهی را به خود جلب کرده است.

فلکسوالکتریسیته خاصیتی در مواد دی‌الکتریک است که طی آن، ماده در پاسخ به تغییر شکل ناهمگن (گرادیان کرنش) دچار قطبش می‌شود. برخلاف پیزوالکتریسیته، این پدیده وابسته به تقارن ماده نیست و می‌تواند در تمامی مواد دی‌الکتریک، حتی بلورهای مرکزمتقارن نیز بروز کند. تغییر شکل ناهمگن موجب برهم خوردن تقارن طبیعی ماده شده و در نتیجه قطبش ایجاد می‌شود. این ویژگی فراگیر، دامنه انتخاب مواد را برای کاربردهایی نظیر حسگرها، محرک‌ها و برداشت‌کننده‌های انرژی^۴ به میزان چشمگیری گسترش می‌دهد. اثر فلکسوالکتریسیته به ویژه در مقیاس‌های میکرو و نانو برجسته‌تر است، زیرا در این ابعاد گرادیان‌های کرنش به مقادیر قابل توجهی می‌رسند. از این رو، این پدیده به عنوان گزینه‌ای امیدبخش برای به کارگیری در سامانه‌های میکروالکترومکانیکی (MEMS) و نانوالکترومکانیکی (NEMS)^۵ شناخته می‌شود.

شکل ۱-۱ شماتیکی از اثر فلکسوالکتریک (آ-پ) و پیزوالکتریک (ت و ث) بر پایه یک بلور یونی پرووسکایتی^۶ را نشان می‌دهد. شکل ۱-۱-آ وضعیت آزاد بدون قطبش می‌باشد. در شکل ۱-۱-ب تحت کرنش همگن، به دلیل همپوشانی مراکز بار مثبت و منفی، قطبش خالص صفر است. در شکل ۱-۱-پ زمانی که بلور دچار کرنش ناهمگن می‌شود، مراکز بار مثبت و منفی بر هم منطبق نبوده و این عدم تطابق به واسطه گرادیان کرنش موجب ایجاد قطبش غیرصفر (فلش قرمز) می‌گردد. در شکل ۱-۱-ت در بلورهای نامتقارن مرکز، حتی در وضعیت آزاد نیز مراکز بار مثبت و منفی بر هم منطبق نبوده و در

¹ electric polarization

² non-centrosymmetric systems

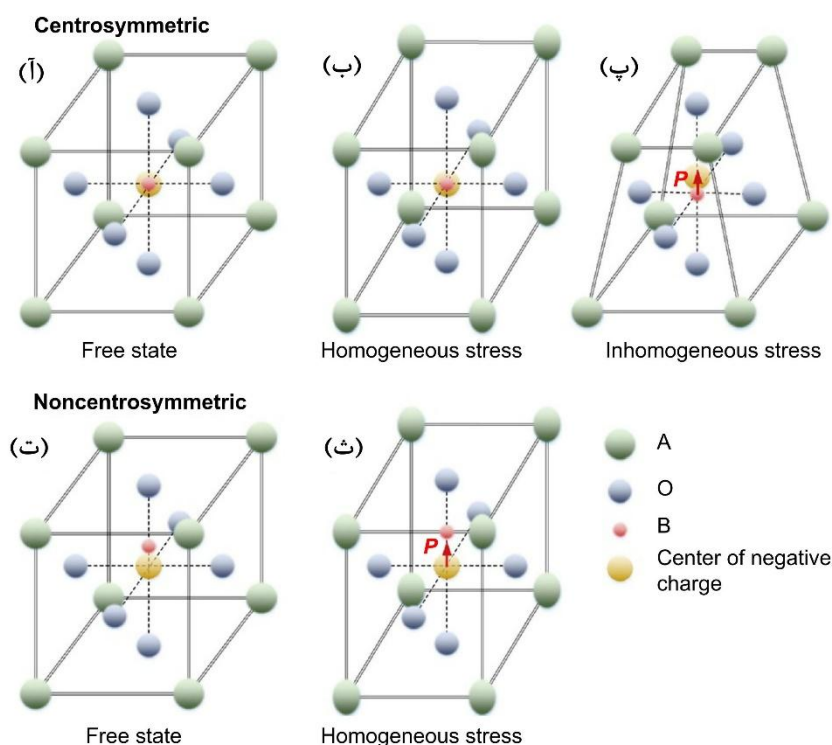
³ Flexoelectricity

⁴ sensors, actuators, and energy harvesters

⁵ microelectromechanical systems (MEMS) and nanoelectromechanical systems (NEMS)

⁶ perovskite ionic crystal

نتیجه قطبش ایجاد می‌شود. در شکل ۱-۱-ث در اثر اعمال کرنش همگن، فاصله بین مراکز بار مثبت و منفی تغییر کرده و این تغییر موجب دگرگونی گشتاور دوقطبی^۱ و القای بار در سطوح می‌گردد.



شکل ۱-۱: شماتیک از اثر فلکسوالکتریک (آ-پ) و پیزوالکتریک (ت و ث) [۱]

مدل‌سازی فلکسوالکتریسته با چالش‌های محاسباتی قابل توجهی همراه است. برهم‌کنش میان میدان الکتریکی و گرادیان مرتبه دوم حرکت منجر به یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی مرتبه چهارم می‌شود. روش‌های عددی متداول، مانند روش اجزای محدود استاندارد (FEM)، عموماً برای حل چنین معادلاتی نیازمند تقریب با پیوستگی C^1 در میدان جابجایی هستند. دستیابی به پیوستگی C^1 برای هندسه‌های سه‌بعدی دلخواه امری دشوار بوده و معمولاً مستلزم به‌کارگیری روش‌های عددی خاص و پیچیده‌ای همچون تحلیل ایزوژئومتریکی (IGA)^۲، روش اجزای محدود ترکیبی ($MFEM$)^۳، یا روش‌های بدون شبکه^۴ است.

در تحقیق حاضر، رویکردی نوین بر پایه پیوستار میکرومورفیک^۵ معرفی شده است که امکان در نظر گرفتن اثرات گرادیان مرتبه بالاتر را در قالب چارچوب اجزای محدود با پیوستگی C^0 فراهم می‌سازد.

^۱ altering the dipole moment

^۲ isogeometric analysis (IGA)

^۳ mixed finite element methods (MFEM)

^۴ meshless methods

^۵ micromorphic continuum

این هدف با افزودن درجات آزادی مستقل سینماتیکی در هر نقطه مادی، موسوم به میکرو-تغییر شکل^۱، محقق می‌شود؛ امری که مدل را قادر می‌سازد اثرات وابسته به اندازه را بدون نیاز به پیوستگی سراسری^۱ C^1 ثبت کند. این فرمول‌بندی علاوه بر آنکه غیرخطی‌های مادی و هندسی را در بر می‌گیرد، برای مدل‌سازی مواد دی‌الکتریک نرم با تغییر شکل‌های بزرگ نیز مناسب است. معادلات حاکم در این رویکرد بر اساس اصل دیریکله^۲ استخراج شده‌اند که مبنایی قوی و سازگار از دیدگاه تغییراتی برای حل مسأله کوپل‌شده فراهم می‌سازد.

پایان‌نامه حاضر بر آن است که با تکیه بر بنیان میکرومورفیک ارائه‌شده، به پیاده‌سازی مدل پرداخته، جزئیات آن را واکاوی نموده و جایگاه آن را در میان تحولات گسترده‌تر پژوهشی این حوزه روشن سازد.

۲.۱. سؤالات پژوهش

این پایان‌نامه در پی آن است که به بررسی مدل‌سازی میکرومورفیک فلکسوالکتریسیته بپردازد. سؤالات اصلی که این پژوهش درصدد پاسخ‌گویی به آن‌هاست عبارت‌اند از:

? مدل میکرومورفیک فلکسوالکتریسیته، چگونه می‌تواند به‌طور مؤثر در چارچوب اجزای محدود با پیوستگی C^0 پیاده‌سازی شود و پیش‌بینی‌های آن چگونه می‌تواند با مثال‌های عددی مبنا که در کار آنان ارائه شده‌اند، اعتبارسنجی گردد؟

? چه تفاوت‌های بنیادی در پاسخ الکترومکانیکی پیش‌بینی‌شده بین رویکرد میکرومورفیک و مدل‌های کلاسیک الاستیسیته گرادیانی وجود دارد؟

? پارامترهای اساسی سازنده در فرمول‌بندی میکرومورفیک، به‌ویژه پارامتر مقیاس طول (ℓ) و پارامتر مقیاس‌گذار، چه نقشی در شبیه‌سازی پاسخ‌های مکانیکی وابسته به اندازه و اثرات فلکسوالکتریسیته ایفا می‌کنند؟

? محدودیت‌های چارچوب میکرومورفیک پیشنهادی کدام‌اند و چگونه می‌توان آن را از نظر مفهومی توسعه داد تا پدیده‌هایی که به‌طور صریح مورد بررسی قرار نگرفته‌اند (نظیر اثر معکوس فلکسوالکتریسیته یا تأثیر فضای آزاد پیرامونی^۳) در بر گیرد؟

¹ micro-deformation

² Dirichlet principle

³ surrounding free space

۳.۱. ضرورت انجام پژوهش

ضرورت این پژوهش را می‌توان در چندین شکاف اساسی و چالش‌های موجود در فهم و مدل‌سازی فلکسوالکتریسیته جستجو کرد.

از منظر نظری، نظریه‌های کلاسیک پیوستار برای توصیف پاسخ‌های مکانیکی وابسته به اندازه که در سازه‌ها در مقیاس‌های کوچک مشاهده می‌شوند، ناکافی هستند. هرچند نظریه‌های الاستیسیته گرادیانی^۱ قادرند این اثرات را ثبت کنند، پیاده‌سازی عددی مستقیم آن‌ها به دلیل الزام سخت‌گیرانه پیوستگی C^1 با محدودیت‌های جدی روبه‌رو است. رویکرد میکرومورفیک ارائه‌شده، راهکاری عملی برای این مشکل فراهم می‌آورد، اما کاربرد آن در زمینه فلکسوالکتریسیته نسبتاً نوظهور بوده و نیازمند بررسی عمیق‌تر است. انجام این تحقیق برای واکاوی استحکام، کارایی و توان پیش‌بینی این روش به‌عنوان جایگزینی معتبر برای طرح‌های عددی پیچیده‌تر ضروری به نظر می‌رسد.

از منظر عملی و مهندسی، روند کوچک‌سازی اجزای ساخته‌شده^۲ علاقه‌مندی گسترده‌ای را به بهره‌گیری از فلکسوالکتریسیته در نسل آینده دستگاه‌ها برانگیخته است. مدل‌های محاسباتی دقیق و چندمنظوره برای طراحی و بهینه‌سازی این دستگاه‌ها که شامل حسگرهای نوین، محرک‌ها، برداشت‌کننده‌های انرژی، و حتی فراموادی^۳ هستند که می‌توانند بدون داشتن مؤلفه‌های پیزوالکتریک رفتار پیزوالکتریکی ظاهری از خود نشان دهند، کاملاً حیاتی‌اند. مدل حاضر، با قابلیت شبیه‌سازی تغییر شکل‌های بزرگ، ابزاری توانمند برای طراحی چنین سامانه‌های پیچیده‌ای فراهم می‌سازد. این پایان‌نامه در راستای اعتبارسنجی و تعمیق درک از این ابزار گام برمی‌دارد و بدین ترتیب بستر لازم برای به‌کارگیری آن در طراحی‌های مهندسی را فراهم خواهد کرد.

افزون بر این، شکاف مهمی در حوزه مدل‌سازی عددی وجود دارد. هرچند روش‌های پیشرفته‌ای همچون تحلیل ایزوژئومتری (IGA) و بدون شبکه برای برقراری پیوستگی C^1 در حال توسعه هستند، توانایی رویکرد میکرومورفیک در استفاده از چارچوب متداول اجزای محدود با پیوستگی C^0 ، آن را برای پیاده‌سازی در اجزای محدود دسترس‌پذیرتر می‌سازد. مطالعه پیرامون نحوه پیاده‌سازی این روش و حساسیت آن به پارامترها، برای جامعه مکانیک محاسباتی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. افزون بر این، با شناسایی محدودیت‌های مدل (مانند نادیده گرفتن اثرات فضای آزاد) این پژوهش زمینه‌ساز توسعه‌های آتی خواهد شد که برای شبیه‌سازی دقیق پلیمرهای الکتروفعال^۴ نرم و سایر مواد پیشرفته حیاتی هستند.

¹ gradient elasticity theories

² miniaturization of fabricated components

³ architected metamaterials

⁴ electro-active polymers

۴.۱. معرفی اجمالی روش تحقیق

این پایان نامه از یک رویکرد محاسباتی مبتنی بر چارچوب نظریه غیرکلاسیک بهره خواهد گرفت. هسته اصلی روش تحقیق بر نظریه پیوستار میکرومورفیک استوار است؛ نظریه‌ای که با افزودن درجات آزادی اضافی به مکانیک پیوستار کلاسیک، امکان در نظر گرفتن اثرات میکروساختاری و گرادیان‌های مرتبه بالاتر را فراهم می‌آورد.

معادلات حاکم بر مسأله کوپل شده الکترومکانیکی با استفاده از اصل دیریکله، که با عنوان اصل ماندگاری انرژی^۱ نیز شناخته می‌شود، استخراج خواهند شد. این رویکرد تغییراتی اطمینان می‌دهد که دستگاه معادلات و شرایط مرزی حاصل از نظر انرژی سازگار باشند. انرژی پتانسیل کل سامانه بر مبنای تجزیه جمعی چگالی‌های انرژی تعریف خواهد شد که شامل سهم‌های الاستیک، الکتریکی و فلکسوآلکتریسیته می‌باشند.

معادلات حاکم غیرخطی حاصل، به صورت تقریبی از طریق روش اجزای محدود (FEM) حل خواهند شد. یکی از جنبه‌های کلیدی این روش استفاده از تقریب با پیوستگی C^0 استاندارد برای تمامی میدان‌های اصلی است: حرکت ماکروسکوپی، میکرو-تغییر شکل و پتانسیل الکتریکی. دستگاه معادلات جبری غیرخطی حاصل به صورت یکپارچه^۲ و با به کارگیری راهبرد تکراری نیوتن-رافسون^۳ حل خواهد شد.

در این پژوهش، توسعه و اعتبارسنجی مدل عددی از طریق مجموعه‌ای از مسائل مبنا صورت خواهد گرفت و در ادامه، مطالعات پارامتری به منظور بررسی اثر پارامترهای کلیدی مدل بر پاسخ فلکسوآلکتریسیته انجام خواهد شد.

۵.۱. مروری بر فصول پایان نامه

این پایان نامه در قالب پنج فصل سازمان‌دهی شده است تا به صورت نظام‌مند به سؤالات پژوهش پاسخ دهد:

- فصل اول: مقدمه به ارائه پیشینه تحقیق، طرح سؤالات پژوهش، تبیین ضرورت انجام مطالعه و تشریح روش تحقیق و ساختار کلی پایان نامه اختصاص دارد.
- فصل دوم: مروری بر تحقیقات گذشته نگاهی به تحقیقات قبلی و شکاف موجود و چگونگی رفع شکاف فعلی دارد.

¹ stationary energy principle

² monolithic

³ Newton-Raphson iterative strategy

- فصل سوم: چارچوب نظری و پیاده‌سازی عددی به تشریح نظریه مکانیک پیوستار زیربنای مدل خواهد پرداخت. این فصل شامل مباحثی همچون سینماتیک، استخراج معادلات حاکم و شرایط مرزی و روابط سازنده ویژه برای چگالی‌های انرژی است. در ادامه تقریب اجزای محدود برای میدان‌های اصلی، گسسته‌سازی فرم ضعیف معادلات حاکم به‌منظور دستیابی به معادلات باقی‌مانده و استخراج ماتریس‌های مماسی برای الگوریتم تکراری نیوتن-رافسون تشریح خواهد شد.
- فصل چهارم: نتایج و بحث به ارائه یافته‌های حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی اختصاص خواهد یافت. این فصل شامل اعتبارسنجی مدل پیاده‌سازی شده در برابر مسائل مبنای، تحلیل پارامتری (مانند پارامتر مقیاس طول و پارامتر مقیاس‌گذار) و همچنین بحث پیرامون پیش‌بینی‌های مدل و پیامدهای فیزیکی آن خواهد بود.
- فصل پنجم: نتیجه‌گیری و کارهای آینده به جمع‌بندی یافته‌های اصلی پایان‌نامه، بازنگری سؤالات پژوهش و تبیین دستاوردهای تحقیق می‌پردازد. همچنین محدودیت‌های مطالعه حاضر بیان شده و مسیرهای تحقیقاتی آینده پیشنهاد خواهند شد.

۶.۱. تعاریف اصطلاحات کلیدی

- **فلکسوالکتریسیته:** خاصیتی در مواد دی‌الکتریک که به‌واسطه آن، کوپل میان قطبش الکتریکی و گرادیان کرنش (تغییر شکل ناهمگن) برقرار می‌شود. این پدیده اثری فراگیر است و در موادی با هر نوع تقارن قابل مشاهده می‌باشد.
 - **اثر مستقیم فلکسوالکتریسیته:** ایجاد قطبش الکتریکی در اثر اعمال گرادیان کرنش.
 - **اثر معکوس فلکسوالکتریسیته:** ایجاد تنش یا کرنش مکانیکی در پاسخ به اعمال گرادیان میدان الکتریکی.
- **پیزوالکتریسیته:** یک پدیده کوپل الکترومکانیکی که طی آن، کرنش یکنواخت موجب القای قطبش الکتریکی (و بالعکس) می‌شود. این خاصیت تنها در بلورهای غیرمرکزی بروز می‌کند.
- **پیوستار میکرومورفیک:** مدلی توسعه‌یافته از پیوستار که در آن هر نقطه مادی دارای درجات آزادی اضافی و مستقل سینماتیکی است که تغییرشکل میکروساختار را توصیف می‌کند. این رویکرد امکان مدل‌سازی اثرات وابسته به اندازه را فراهم می‌آورد.

- **گرادیان تغییر شکل (F) ^۱:** یک تانسور مرتبه دوم که یک المان خطی را از پیکربندی مرجع به پیکربندی کنونی در مکانیک پیوستار کلاسیک نگاشت می‌کند. این تانسور برابر با گرادیان نگاشت حرکت ماکروسکوپی (φ) است.
- **میکرو-تغییر شکل $(\bar{F})$:** یک تانسور مرتبه دوم که تغییر شکل مستقل پیوستار را در مقیاس میکرو توصیف می‌کند. این کمیت در نظریه میکرومورفیک یک متغیر حالت اضافی^۲ محسوب می‌شود و با گرادیان تغییر شکل ماکروسکوپی (F) متمایز است.
- **گرادیان میکرو-تغییر شکل $(\bar{G})$ ^۳:** یک تانسور مرتبه سوم که به عنوان گرادیان میکرو-تغییر شکل نسبت به مکان گذاری مادی ماکروسکوپی^۴ تعریف می‌شود.
- **پیوستگی C^0 و C^1 :** در روش اجزای محدود، پیوستگی C^0 بدین معناست که تقریب در مرز المان‌ها پیوسته باشد، در حالی که پیوستگی C^1 علاوه بر خود تقریب، تداوم مشتق اول آن را نیز الزامی می‌سازد. نظریه‌های کلاسیک الاستیسیته گرادیانی معمولاً به توابع پایه با پیوستگی C^1 نیاز دارند.
- **اصل دیریکله:** اصلی در انرژی‌های مانا^۵ که بیان می‌کند در حالت تعادل، انرژی پتانسیل کل یک سامانه پایستار باید نسبت به تغییرات دلخواه در میدان‌های اصلی، حالت مانا داشته باشد. این اصل برای استخراج معادلات حاکم و شرایط مرزی به کار گرفته می‌شود.
- **تغییر شکل آفین^۶:** نوعی از تغییر شکل است که می‌تواند به صورت ترکیبی از چرخش، کشش، برش و جابجایی خطی توصیف شود، به گونه‌ای که خطوط صاف و نسبت‌های بین نقاط حفظ می‌شوند، اگرچه طول‌ها و زوایا لزوماً ثابت نمی‌مانند. به عبارت دیگر، در این حالت، خطوط مستقیم پس از تغییر شکل همچنان مستقیم باقی می‌مانند و روابط نسبی بین نقاط حفظ می‌شود، اما طول‌ها و زوایا ممکن است تغییر کنند. بنابراین وقتی «توصیفگر مستقل تغییر شکل آفین» گفته می‌شود، منظور یک تانسور است که:
 - مستقل از گرادیان تغییر شکل ماکروسکوپی است.
 - تغییر شکل‌های داخلی در مقیاس میکرو را به شکل خطی و همگن بیان می‌کند.

¹ Deformation Gradient² additional state variable³ Gradient of the micro-deformation⁴ with respect to the macroscopic material placement⁵ stationary⁶ Affine

۷.۱. دامنه پژوهش و فرضیات اصلی

دامنه این پایان نامه بر مدل سازی محاسباتی و تحلیل اثر مستقیم فلکسوالکتریسیته در جامدات دی الکتریک نرم و همسانگرد^۱ که دچار تغییر شکل های بزرگ می شوند، متمرکز است. ابزار نظری اصلی در این پژوهش، رویکرد میکرومورفیک توسعه یافته است. چارچوب تحقیق به تحلیل عددی از طریق روش اجزای محدود (FEM) محدود می شود.

فرضیات کلیدی این تحقیق عبارتند از:

- سامانه مورد مطالعه پایستار در نظر گرفته شده و شرایط ایزوترمال برقرار است.^۲
- چگالی انرژی میکرومورفیک و چگالی انرژی مقیاس گذار به صورت توابع درجه دوم از معیارهای کرنش متناظرشان فرض می شوند.^۳ این امر یک ساده سازی متداول است و الزام نظریه ای محسوب نمی شود.
- تأثیر فضای آزاد پیرامون جسم دی الکتریک نادیده گرفته شده است. این ساده سازی متداول است، اما در مورد برخی پلیمرهای الکتروفعال که سهم فضای آزاد می تواند قابل توجه باشد، ممکن است معتبر نباشد.
- بارهای الکتریکی آزاد و نیروهای حجمی به منظور ساده سازی در مثال های عددی در نظر گرفته نخواهند شد.
- ماده به عنوان یک عایق کامل^۴ فرض شده است؛ به این معنا که هیچ گونه انتقال بار درون جامد وجود ندارد.

۸.۱. جمع بندی فصل اول

این فصل مقدماتی، زمینه و انگیزه انجام پژوهش حاضر را تبیین نمود. در آغاز، فلکسوالکتریسیته به عنوان یک پدیده کوپل الکترومکانیکی فراگیر و دارای اهمیت ویژه در کاربردهای مقیاس نانو معرفی شد، در حالی که چالش های عددی مرتبط با مدل سازی آن، به ویژه الزام پیوستگی C^1 ، مورد توجه قرار گرفت. در ادامه، با ارائه رویکرد میکرومورفیک، این چالش را از طریق بهره گیری از چارچوب اجزای محدود با پیوستگی C^0 مرتفع می سازد.

¹ direct flexoelectric effect in soft, isotropic dielectric solids

² conservative and under isothermal conditions

³ The micromorphic energy density and the scale-bridging energy density are chosen to be quadratic functions of their respective strain measures

⁴ perfect insulator

ضرورت انجام این تحقیق با شناسایی شکاف‌های موجود در ادبیات پژوهشی توجیه گردید. سؤالات اصلی تحقیق به‌منظور هدایت فرآیند پیاده‌سازی، اعتبارسنجی و تحلیل پارامتری مدل میکرومورفیک تدوین شدند. همچنین روش تحقیق تشریح گردید، ساختار کلی پایان‌نامه ترسیم شد، اصطلاحات کلیدی تعریف گردیدند و دامنه و فرضیات بنیادین مطالعه مشخص شدند.

بدین ترتیب، این فصل بنیانی جامع برای بررسی‌های نظری و محاسباتی تفصیلی که در فصول بعدی ارائه خواهند شد، فراهم آورد.

فصل دوم: مروری بر تحقیقات گذشته

این فصل به مرور جامع ادبیات مرتبط با پدیده فلکسوالکتریسیته و مدل سازی عددی آن می پردازد. ابتدا اصول فیزیکی این پدیده معرفی شده، تفاوت های آن با پدیده شناخته شده تر پیزوالکتریسیته برجسته می شود و سیر تاریخی آن مورد بررسی قرار می گیرد. در ادامه، نظریه های پیوستار تعمیم یافته^۱ شامل نظریه گرادیان کرنش^۲، تنش کوپل^۳ و به ویژه نظریه میکرومورفیک که چارچوب لازم برای مدل سازی این اثر وابسته به مقیاس را فراهم می سازند، تشریح می گردند. در پایان، مطالعات کلیدی در زمینه مدل سازی عددی فلکسوالکتریسیته مرور شده و چالش های ناشی از الزامات گرادیان های مرتبه بالا مورد بحث قرار می گیرند. همچنین، رویکردهای مختلف اجزای محدود در این حوزه خلاصه شده و بدین ترتیب بستر و انگیزه لازم برای پژوهش حاضر فراهم می شود.

۱.۲. مبانی و اصول کوپلینگ الکترومکانیکی

کوپلینگ الکترومکانیکی در مواد دی الکتریک از طریق چندین پدیده متمایز بروز می یابد که برجسته ترین آن ها پیزوالکتریسیته و فلکسوالکتریسیته هستند [۲]. علاوه بر این، مکانیزم هایی نظیر الکتروستریکشن^۴ و اثر تنش مکسول^۵ نیز در این حوزه مطرح می باشند. در حالی که پیزوالکتریسیته به طور گسترده توسعه یافته و در کاربردهای مهندسی مورد بهره برداری قرار گرفته است، فلکسوالکتریسیته تنها در سال های اخیر به دلیل حضور فراگیر آن در تمامی مواد دی الکتریک و همچنین وابستگی شدید آن به اندازه (مقیاس ابعادی) مورد توجه قرار گرفته است [۲-۳]. این بخش به معرفی اصول بنیادی فیزیکی پیزوالکتریسیته و فلکسوالکتریسیته، برجسته سازی شباهت ها و تفاوت های آن ها و ایجاد زمینه ای برای مباحث بعدی می پردازد.

۱.۱.۲. پیزوالکتریسیته

پیزوالکتریسیته کوپلینگ خطی میان حالات مکانیکی و الکتریکی یک ماده را توصیف می کند. تحت یک کرنش یکنواخت مکانیکی، یک بلور غیرمرکزی دچار قطبش الکتریکی می شود و برعکس، اعمال یک میدان الکتریکی یکنواخت می تواند موجب تغییر شکل مکانیکی گردد [۲-۴-۵]. رابطه سازگاری این پدیده به صورت زیر بیان می شود [۲]:

$$P_i^{\phi} \propto d_{ijk} \varepsilon_{jk} \quad (1-2)$$

¹ Generalized Continuum Theories

² Strain-Gradient Elasticity

³ Couple-Stress Theory

⁴ electrostriction

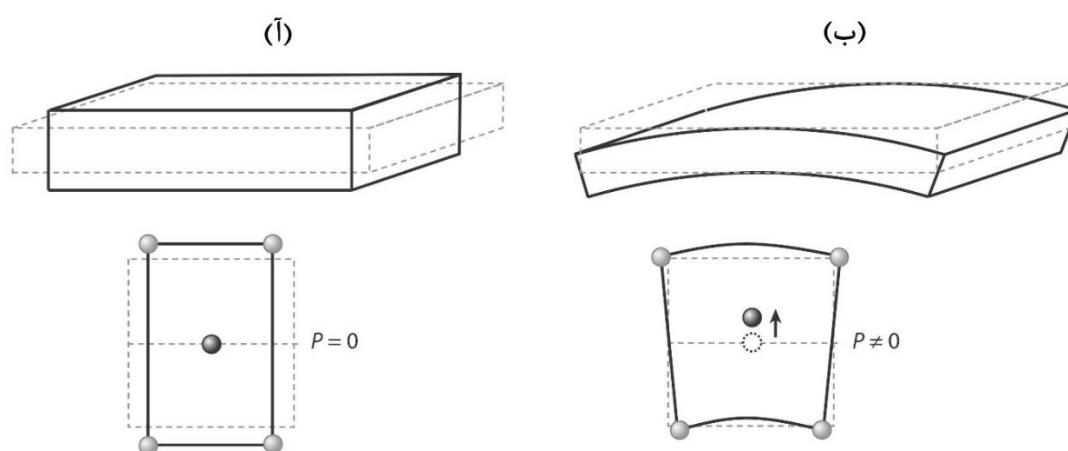
⁵ Maxwell stress effect

که در آن P_i^ϕ بردار قطبش، ε_{jk} تانسور کرنش مرتبه دوم، و d_{ijk} تانسور پیزوالکتریک مرتبه سوم است. ویژگی اصلی پیزوالکتریسیته، محدودیت تقارنی بلور^۱ است. بر اساس نظریه گروه‌ها^۲، تانسورهای مرتبه سوم در بلورهای مرکزمتقارن ناپدید می‌شوند [۴-۵]؛ بنابراین پیزوالکتریسیته صرفاً در مواد ناتقارن مرکزی وجود دارد [۲-۴-۵-۶]. از جمله نمونه‌ها می‌توان به باریم تیتانات^۳ (BaTiO_3)، سرب زیرکونات تیتانات^۴ (PZT) و کوارتز اشاره کرد، در حالی که بلورهای مرکزمتقارنی مانند سیلیکون و NaCl فاقد این خاصیت هستند [۷-۵-۲].

برای چندین دهه، پیزوالکتریسیته مکانیزم غالب در تبدیل الکترومکانیکی بوده است و به کاربردهای متنوعی همچون حسگرها، محرک‌ها، تشدیدگرها^۵، مبدل‌های فراصوت^۶، برداشت انرژی و میکروسکوپ‌های پیمایشگر^۷ منجر شده است [۳-۲].

۲.۱.۲. فلکسوالکتریسیته

فلکسوالکتریسیته کوپلینگ قطبش با گرادیان کرنش (در مقابل کرنش یکنواخت) را توصیف می‌کند. تغییر شکل‌های ناهمگن می‌توانند تقارن وارونگی محلی^۸ را حتی در مواد به‌طور کلی مرکزمتقارن بشکنند و منجر به ایجاد قطبش خالص شوند که در شکل ۱-۲ نمایش داده شده است.



شکل ۱-۲: قطبش تحت تاثیر تغییر شکل در ماده با تقارن مرکزی
(آ) تغییر شکل یکنواخت (ب) تغییر شکل غیریکنواخت [۸]

¹ crystal symmetry restriction

² Group theory

³ barium titanate

⁴ lead zirconate titanate (PZT)

⁵ resonators

⁶ ultrasonic transducers

⁷ scanning probe microscopes

⁸ local inversion symmetry

اثر مستقیم فلکسوالکتریک به صورت زیر بیان می‌شود [۲]:

$$P_i^{\phi} \propto \mu_{ijkl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_j} \quad (2-2)$$

که در آن μ_{ijkl} تانسور فلکسوالکتریک مرتبه چهارم است.

از آن‌جا که تانسورهای مرتبه چهارم در تمامی کلاس‌های بلوری مجاز هستند، فلکسوالکتریسیته خاصیتی جامع و همگانی^۱ در مواد دی‌الکتریک به شمار می‌رود. این ویژگی آن را به‌طور بنیادی از پیزوالکتریسیته متمایز می‌سازد که صرفاً به مواد غیرمرکزی محدود است. مشابه پیزوالکتریسیته، فلوکسوالکتریسیته نیز دارای اثرات مستقیم و معکوس است [۲-۵-۶]:

- مستقیم: گرادیان کرنش مکانیکی منجر به ایجاد قطبش یا جابجایی الکتریکی می‌شود.
- معکوس: گرادیان میدان الکتریکی (یا تحریک الکتریکی ناهمگن) توزیع تنش مکانیکی ایجاد می‌کند.

این پدیده در طیف وسیعی از سیستم‌ها مشاهده شده است که از جمله می‌توان به موارد زیر اشاره کرد [۹-۱۰-۱۱]:

- دی‌الکتریک‌های بلوری (مانند نمک‌ها، تیتانات‌ها^۲، SrTiO_3 و BaTiO_3)
- سرامیک‌هایی با ثابت دی‌الکتریک^۳ بالا مانند PMN و BST
- پلیمرها نظیر PVDF و پلکسی‌گلاس^۴
- غشاهای زیستی
- پروسکایت‌ها^۵ و حتی کریستال‌های مایع

می‌توان دید پدیده فلکسوالکتریسیته به جامدات محدود نمی‌شود. نخستین بار در سال ۱۹۶۹ در کریستال‌های مایع گزارش گردید [۱۲]. با این حال، نکته قابل توجه آن است که نظریه‌ای جامع برای توصیف فلکسوالکتریسیته در کریستال‌های مایع الاستومری^۶ تاکنون به‌طور آشکار ارائه نشده است [۹].

¹ universal property

² titanates

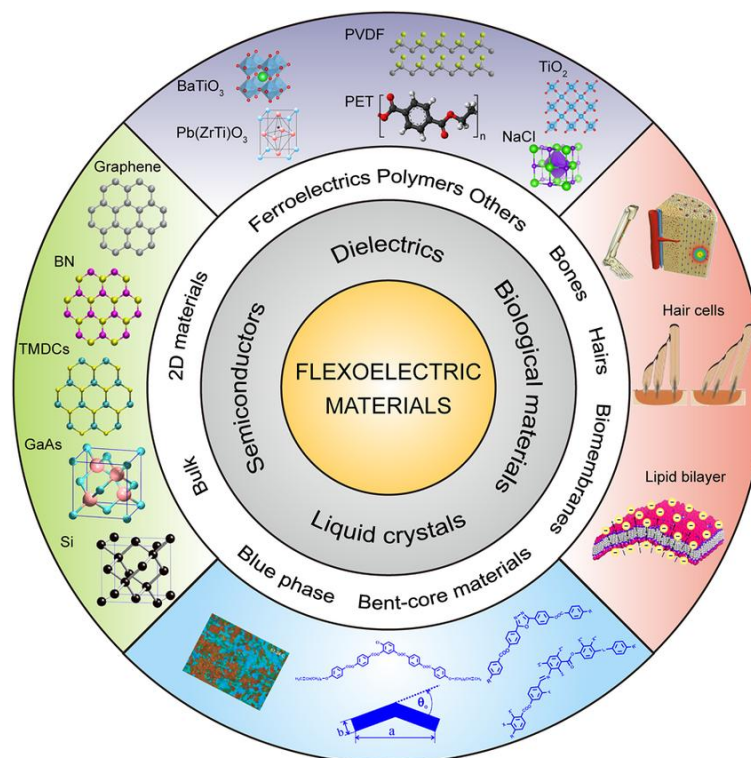
³ permittivity

⁴ polyvinylidene fluoride (PVDF) and plexiglass

⁵ Perovskites

⁶ Liquid crystal elastomers (LCEs)

دسته‌بندی مواد با خاصیت فلکسوالکتریسیته در شکل ۲-۲ نمایش داده شده است.



شکل ۲-۲: مواد با خاصیت فلکسوالکتریسیته [۱۳]

۳.۱.۲. خاستگاه فیزیکی (تبیین جامعیت فلکسوالکتریسیته و وابستگی به مقیاس)

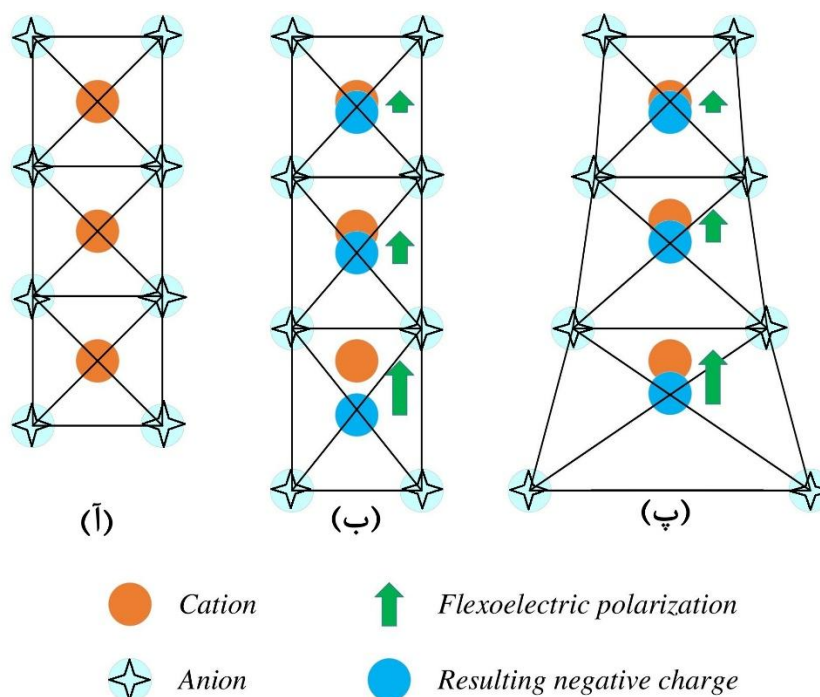
دو مکانیزم میکروسکوپی اصلی باعث بروز پدیده فلکسوالکتریک هستند [۲-۳-۵]:

- سهم یونی: در بلورهای یونی، کرنش ناهمگن منجر به جابه‌جایی‌های غیرآفاین کاتیون‌ها و آنیون‌ها شده و یک ممان دوقطبی ایجاد می‌کند.
- سهم الکترونی: حتی در شبکه‌های تک‌اتمی^۱ مانند گرافن، خمش موجب اختلال در توزیع ابر الکترونی در جایگاه‌های اتمی شده و قطبش ایجاد می‌کند.

هر دو مکانیزم نشان می‌دهند که گرادیان کرنش می‌تواند به‌طور محلی و موضعی تقارن وارونگی را بشکند و بدین ترتیب اثرات فلکسوالکتریسیته را در مواد دی‌الکتریک اجتناب‌ناپذیر می‌سازد.

شکل ۲-۳ فیزیک پدیده فلکسوالکتریسیته در گرادیان کرنش (در طول یک ساختار یا بین ساختارها) را نشان می‌دهد.

^۱ monoatomic lattices



شکل ۲-۳: فیزیک پدیده فلکسوالکتریسیته به واسطه گرادیان کرنش

(آ) حالت بدون ممان قطبی (ب) در بین ساختارها (پ) و یا در طول یک ساختار [۱۴]

یکی از جنبه‌های اساسی فلکسوالکتریسیته، وابستگی آن به اندازه است. گرادیان‌های کرنش با طول مشخصه^۱ به صورت معکوس مقیاس می‌شوند، به این معنا که اثرات فلکسوالکتریک در ابعاد کوچک به طور چشمگیری تقویت می‌گردند. در حالی که در مواد حجیم^۲ این اثرات قابل چشم‌پوشی است، در مقیاس‌های میکرو و نانو به‌ویژه در نزدیکی عیوب شبکه‌ای^۳ مانند نوک ترک‌ها و هسته نابجایی‌ها^۴ که گرادیان‌های کرنشی شدید وجود دارد اثرات فلکسوالکتریسیته می‌تواند قابل ملاحظه باشد. این وابستگی به مقیاس، به روشنی نشان می‌دهد که برای درک و پیش‌بینی درست این پدیده، چارچوب‌های تحلیلی باید قادر به درون‌سازی طول مشخصه باشند.

وابستگی پدیده فلکسوالکتریسیته به مقیاس اندازه، آن را به یک مکانیزم کلیدی در رفتار الکترومکانیکی سامانه‌های نانومقیاس بدل ساخته و زمینه‌ساز ادغام آن در سامانه‌های میکرو/نانوالکترومکانیکی (MEMS/NEMS) شده است.

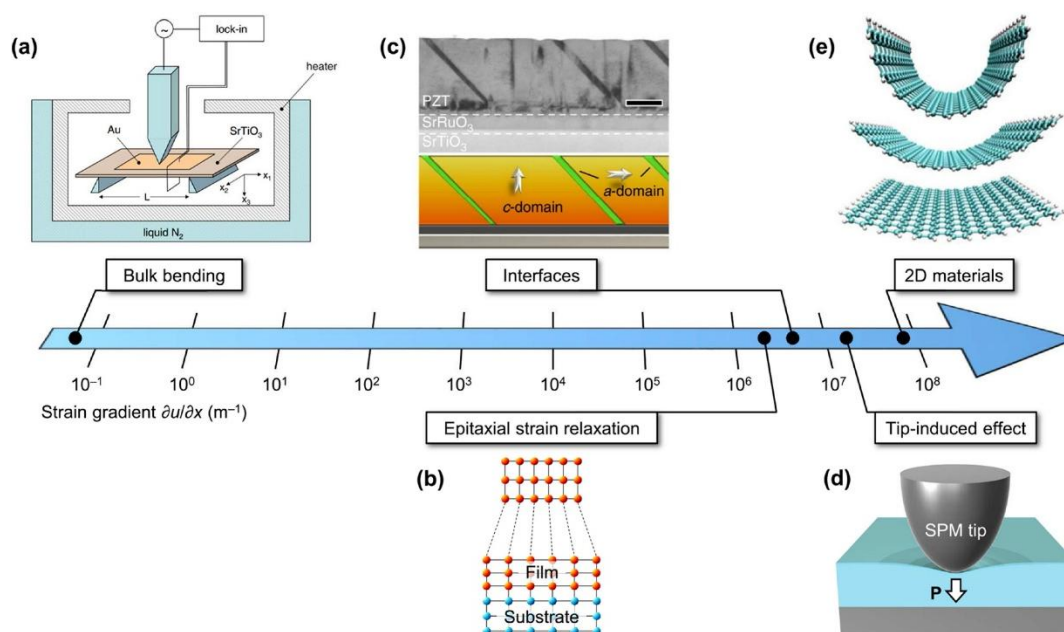
شکل ۲-۴ گسترده گرادیان کرنش ممکن تعدادی از پدیده‌های رایج را نشان می‌دهد.

¹ characteristic length

² bulk materials

³ lattice defects

⁴ dislocation cores



شکل ۲-۴: گسترده گرادیان کرنش ممکن [۱۵]

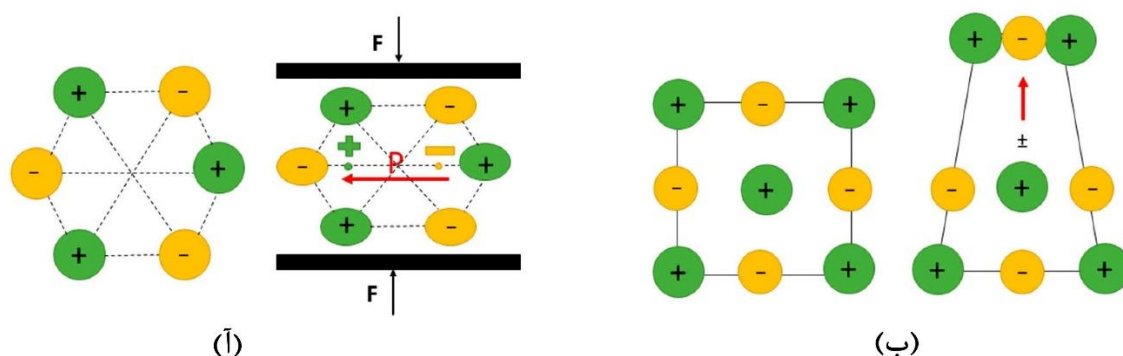
۴.۱.۲. مقایسه پیزوالکتریسیته و فلکسوالکتریسیته

در جدول ۲-۱ تفاوت‌های دو پدیده فلکسوالکتریسیته و پیزوالکتریسیته دسته‌بندی شده‌اند. این تمایز پیامدهای عمیقی در طراحی مواد دارد. فلکسوالکتریسیته امکان کوپلینگ الکترومکانیکی را در دامنه وسیع‌تری از مواد نسبت به پیزوالکتریسیته فراهم می‌کند و قابلیت‌های نوینی را در مقیاس‌های میکرو و نانو به همراه دارد.

جدول ۲-۱: تفاوت فلکسوالکتریسیته و پیزوالکتریسیته

پیزوالکتریسیته	فلکسوالکتریسیته	جنبه
قطبش $\leftrightarrow$ کرنش یکنواخت	قطبش $\leftrightarrow$ گرادیان کرنش	مکانیزم کوپلینگ
فقط در بلورهای غیرمرکزی (۲۰ گروه از ۳۲ گروه نقطه‌ای)	همگانی در تمام دی‌الکتریک‌ها	نیازمندی‌های تقارن
مستقل از اندازه	به شدت وابسته به مقیاس (غالب در ابعاد نانو)	وابستگی به مقیاس
غالب در مقیاس ماکروسکوپی	عموماً ضعیف در ابعاد بزرگ، اما قوی‌تر در مقیاس‌های کوچک‌تر	قدرت نسبی

شکل ۲-۵ تشکیل قطبش از طریق پیزوالکتریسیته و فلکسوالکتریسیته را نمایش می‌دهد.



شکل ۲-۵: تشکیل قطبش از طریق (آ) پیزوالکتریسیته و (ب) فلکسوالکتریسیته [۱۶]

۵.۱.۲. کاربردهای فلکسوالکتریسیته

وابستگی به مقیاس، جامعیت و همگانی بودن فلکسوالکتریسیته الهام‌بخش طیف وسیعی از کاربردهای نوظهور است، از جمله:

- حسگرها و محرک‌ها: بهره‌برداری از اثرات مستقیم و معکوس فلکسوالکتریک برای آشکارسازی با حساسیت بالا و تحریک در مقیاس نانو. [۹-۱۷]
- برداشت انرژی: تبدیل خم‌شدگی یا تا شدن لایه‌های نازک به انرژی الکتریکی [۳-۱۸].
- فلکسوالکترونیک^۱: مهندسی گرادیان‌های کرنش برای کنترل خواص انتقال الکترونی حتی در نیمه‌هادی‌های مرکزمتقارن نظیر سیلیکون [۱۹].
- پیزوالکتریسیته ظاهری: طراحی کامپوزیت‌های میکروساختار از مواد غیرپیزوالکتریک که از طریق کوپلینگ فلکسوالکتریک رفتاری مشابه مواد پیزوالکتریک از خود نشان می‌دهند [۲۰].
- سامانه‌های زیست‌پزشکی: درک و شبیه‌سازی فرآیندهای زیستی همچون بازسازی استخوان یا مکانوترانسداکشن (تبدیل تحریک مکانیکی به پاسخ زیستی) در حلزون گوش^۲ [۲-۳].

^۱ Flexoelectronics

^۲ cochlear mechanotransduction

اندام کُرتی (Organ of Corti) بخشی از گوش داخلی است که با داشتن سلول‌های مویی (Hair cells) به‌عنوان گیرنده‌های حسی اصلی، ارتعاشات مکانیکی ناشی از صوت را به سیگنال‌های الکتریکی قابل ادراک تبدیل می‌کند.

۲.۲. سیر تاریخی و مشارکتهای کلیدی

مفهوم فلکسوالکتریسیته، هرچند در سالهای اخیر به طور گسترده مورد بحث قرار گرفته است، پیشینه‌ای بیش از شش دهه دارد. مسیر تکامل این حوزه بازتاب‌دهنده گذار تدریجی از پیش‌بینی‌های نظری اولیه به سمت تأییدهای تجربی مدرن و کاربردهای عملی آن است. در این بخش، نقاط عطف کلیدی در درک و مدل‌سازی فلکسوالکتریسیته مرور می‌شود و چارچوب‌های نظری بنیادین، دستاوردهای تجربی مهم و تحول توصیف این پدیده برجسته می‌گردد.

۱.۲.۲. بنیان‌های نظری اولیه

خاستگاه‌های نظری فلکسوالکتریسیته به کارهای *ماشکویچ* و *تولپیگو*^۱ در سال‌های ۱۹۵۷ و ۱۹۶۳ بازمی‌گردد که نخستین بار کوپلینگ میان گرادیان‌های کرنش و قطبش در دی‌الکتریک‌های بلوری را شناسایی کردند [۲۱-۲۲]. پس از آن، *کوغان*^۲ در سال ۱۹۶۴ نخستین چارچوب پدیدارشناسانه و روابط سازگاری را ارائه داد که قطبش الکتریکی را به گرادیان کرنش پیوند می‌داد [۲۳].

اصطلاح فلکسوالکتریسیته، بعدها توسط *یندنبوم*^۳ و همکاران در سال ۱۹۸۱ معرفی شد و به تفکیک روشن آن از پیزوالکتریسیته و سایر اثرات الکترومکانیکی کمک کرد [۲۴].

در همان دوره (۱۹۷۲)، *مایندلین*^۴ نظریه‌ای تعمیم‌یافته برای دی‌الکتریک‌های الاستیک توسعه داد که گرادیان‌های قطبش را در تابع انرژی وارد می‌کرد و چارچوبی قدرتمند برای توصیف اثر معکوس فلکسوالکتریک ارائه داد [۲۵].

در ادامه، نظریه میکروسکوپی فلکسوالکتریسیته توسط *تاگانسف*^۵ گسترش یافت [۲۶-۲۷]. او نشان داد که این اثر ناشی از سهم‌های حجمی استاتیکی و دینامیکی^۶ و همچنین اثرات سطحی همچون پیزوالکتریسیته سطحی و فلکسوالکتریسیته سطحی است. *تاگانسف* بر تناسب میان ضرایب فلکسوالکتریک و حساسیت دی‌الکتریک تأکید نمود و نتیجه گرفت که مواد با ثابت دی‌الکتریک بالا (نظیر فروالکتریک‌ها^۷) باید پاسخ‌های فلکسوالکتریک قوی‌تری از خود نشان دهند. این پیش‌بینی نظری بعدها به طور تجربی تأیید شد و نقش راهبردی در هدایت طراحی مواد ایفا کرد [۲۸-۲۹-۶].

¹ Mashkevich and Tolpygo

² S.M. Kogan

³ Indenbom

⁴ Mindlin

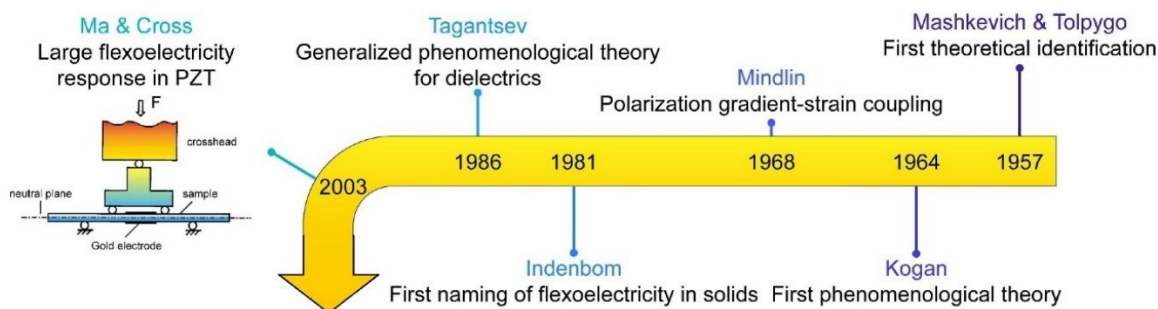
⁵ Tagantsev

⁶ static and dynamic bulk contributions

⁷ ferroelectrics

برآوردهای اولیه مقدار ضریب فلکسوالکتریک را در حدود $e/a \approx 10^{-10} - 10^{-11} [C/m]$ گزارش کردند که در آن e بار الکترون و a پارامتر شبکه^۱ است [۳۱-۳۰-۸]. در آن زمان، این اثر آن قدر کوچک تلقی می‌شد که پیامدهای عملی چندانی نداشت؛ موضوعی که تا حدی بی‌توجهی به این حوزه را در نیمه دوم قرن بیستم توضیح می‌دهد.

شکل ۶-۲ سیر تاریخی اولیه مربوط به پدیده فلکسوالکتریسیته را نمایش می‌دهد.



شکل ۶-۲ سیر تاریخی اولیه پدیده فلکسوالکتریسیته [۱۳]

۲.۲.۲. پیشرفت‌های تجربی

نخستین شواهد تجربی فلکسوالکتریسیته در دهه ۱۹۶۰، توسط *بورسیان* و *زایکوسکی*^۲ در آزمایش‌های خمش صفحات بلوری نازک گزارش شد [۳۳]. با این حال، این نتایج توجه چندانی برنینگیخت و حوزه مذکور برای چندین دهه به دلیل درک غالب مبنی بر ناچیز بودن این اثر در مواد حجیم، نسبتاً خاموش باقی ماند.

به‌طور تجربی، مطالعات *ما* و *کراس*^۳ فلکسوالکتریسیته در فروالکتریک‌ها [۳۴-۳۵] و مطالعات *هریس*^۴ فلکسوالکتریسیته در مواد با تقارن مرکزی، مانند NaCl [۳۶] را نشان داده است. اما تجدید علاقه به موضوع فلکسوالکتریسیته در اوایل دهه ۲۰۰۰ و با آزمایش‌های پیشگامانه *ما* و *کراس* رقم خورد. آن‌ها ضرایب فلکسوالکتریک بسیار بزرگی را در سرامیک‌های فروالکتریک با ثابت دی‌الکتریک بالا، مانند باریم استرانسیم تیتانات^۵ (BST) و سرب منیزیم نیوبات^۶ (PMN) اندازه‌گیری کردند. مقادیر گزارش‌شده چندین مرتبه بزرگ‌تر از پیش‌بینی‌های نظری اولیه بودند که فرضیه *تاگانتسف* را تأیید و فلکسوالکتریسیته را به‌عنوان پدیده‌ای الکترومکانیکی با اهمیت بالقوه معرفی کرد.

^۱ lattice parameter

^۲ Bursian and Zaikovskii

^۳ Ma and Cross

^۴ Harris

^۵ barium strontium titanate

^۶ lead magnesium niobate

از یافته‌های شاخص تجربی می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- سرامیک‌های $\text{Ba}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{TiO}_3$ (BST) ضرایب فلکسوالکتریک رکورد داری (مانند $\mu_{1122} \approx 100 \mu\text{C}/\text{m}$) نشان دادند و این رکورد برای نزدیک به دو دهه دست‌نخورده باقی ماند [۳۷-۱۷].
- کار اخیر کی^۱ و همکاران (۲۰۲۳) ضریب بسیار بزرگ $\mu_{1122} \approx 140 \mu\text{C}/\text{m}$ را در $\text{BaTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$ (BT-xZr) گزارش کرد [۳۷]. راهبرد آن‌ها مبتنی بر تنظیم ماده در نزدیکی گذار فاز پاروالکتریک-فروالکتریک^۲ به منظور تقویت پاسخ فلکسوالکتریک بود که مسیری نوین برای طراحی مواد فراهم ساخت.

آزمون‌های رایج عبارت‌اند از:

- آزمایش خمش یک‌سویه^۳ (برای اندازه‌گیری ضرایب عرضی مانند μ_{12}) [۶-۲۹-۳۸]
- آزمون فشار هرمی^۴ (برای بررسی ضرایب طولی مانند μ_{11}) [۶-۲۹-۳۸-۳۹]
- آزمون‌های خمش سه‌نقطه‌ای و چهارنقطه‌ای (روش‌های تکمیلی برای شناسایی ویژگی‌های فلکسوالکتریک) [۶-۱۵-۲۹]

تضاد آشکار میان برآوردهای نظری اولیه و اندازه‌گیری‌های تجربی مدرن، درک فلکسوالکتریسیته را به‌طور بنیادین دگرگون ساخت. پدیده‌ای که زمانی در نمونه‌های حجیم ناچیز قلمداد می‌شد، اکنون به‌عنوان اثری غالب در مقیاس نانو شناخته می‌شود که پیامدهای عملی مهمی در مهندسی مدرن دارد.

این ناهماهنگی میان نظریه و آزمایش همچنان یک حوزه فعال پژوهشی باقی مانده و انگیزه‌ای برای اصلاح مدل‌های میکروسکوپی و فرمول‌بندی‌های پیوسته فراهم کرده است. پژوهش‌های اخیر نه تنها بر فلکسوالکتریسیته ذاتی بلورهای حجیم، بلکه بر نقش کلیدی ویژگی‌های میکروساختاری، سطوح و عیوب در تقویت این اثر تأکید دارند.

۳.۲. نظریه‌های محیط پیوسته تعمیم‌یافته

از آن‌جا که فلکسوالکتریسیته ذاتاً یک پدیده وابسته به اندازه است، چارچوب‌های کلاسیک مکانیک محیط پیوسته که فاقد مقیاس طول ذاتی هستند، به‌طور بنیادین برای توصیف آن ناکافی‌اند. در نظریه

¹ Ke

² paraelectric-ferroelectric phase transition

³ Cantilever bending

⁴ Pyramid compression

کلاسیک، تنش صرفاً به کرنش محلی مرتبط می‌شود. در نتیجه، اثرات ناشی از گرادیان کرنش که اساس فلکسوالکتریسیته را شکل می‌دهند قابل بازنمایی نیستند. برای رفع این محدودیت‌ها، خانواده‌ای از نظریه‌های محیط پیوسته تعمیم‌یافته توسعه یافته‌اند. این نظریه‌ها یا با افزودن گرادیان‌های مرتبه بالاتر میدان جابه‌جایی و یا با معرفی درجات آزادی میکروسکوپی مستقل، توصیف سینماتیکی محیط پیوسته را غنی‌تر می‌سازند و بدین ترتیب بستر نظری لازم برای مدل‌سازی اثرات الکترومکانیکی وابسته به اندازه مانند فلکسوالکتریسیته را فراهم می‌کنند.

۱.۳.۲. الاستیسیته گرادیان-کرنش

مستقیم‌ترین بسط الاستیسیته کلاسیک، نظریه الاستیسیته گرادیان-کرنش است که نخستین بار توسط مایندلین^۱ (۱۹۶۴) پایه‌گذاری شد [۴۰] و بعدها با همکاری اشل^۲ توسعه یافت [۴۱]. در این چارچوب، چگالی انرژی کرنشی نه تنها به تانسور کرنش، بلکه به گرادیان‌های مکانی آن نیز وابسته است. به عنوان نمونه، در نظریه الاستیسیته با گرادیان مرتبه دوم، چگالی انرژی شامل ترم‌هایی وابسته به گرادیان کرنش یا گرادیان دوم جابه‌جایی می‌گردد.

گنجاندن مشتقات مرتبه بالاتر منجر به روابط حاکم به صورت معادلات دیفرانسیل جزئی مرتبه چهارم می‌شود. این ویژگی امکان مدل‌سازی طبیعی کوپل کرنش-گرادیان با قطبش که اساس فلکسوالکتریسیته است را فراهم می‌سازد. بسیاری از مدل‌های فلکسوالکتریسیته برای توصیف رفتارهای وابسته به اندازه از این چارچوب بهره برده‌اند.

مزیت اصلی این رویکرد در سادگی تعریف آن نهفته است: قوانین سازگاری فلکسوالکتریسیته را می‌توان با افزودن گزاره‌های گرادیان-کرنش به تابع انرژی تعریف کرد. با این حال، ماهیت مرتبه بالاتر معادلات، پیاده‌سازی عددی آن را دشوار می‌سازد. استفاده از این نظریه در روش اجزای محدود نیازمند توابع درون‌یابی با پیوستگی C^1 است، که به‌طور عملی تحلیل را سخت‌تر می‌کند.

۲.۳.۲. نظریه‌های تنش-کوپل و میکروپلار

شاخه‌ای دیگر از محیط‌های تعمیم‌یافته، نظریه تنش-کوپل است که نخستین بار توسط وُیگت^۳ در سال ۱۸۸۷ مطرح شد [۴۲] و بعدها در سال ۱۹۰۹، توسط برادران کاسرات^۴ توسعه یافت [۴۳]. در این رویکرد، توصیفگرهای سینماتیکی اضافی همچون میکروچرخش‌ها و گرادیان‌های آن‌ها مورد توجه قرار

¹ Mindlin

² Eshel

³ Voigt

⁴ Cosserat

می‌گیرند. برخلاف نظریه گرادیان-کرنش که بر گرادیان‌های جابه‌جایی متمرکز است، نظریه تنش-کوپل اثرات چرخشی درونی و ممان‌های منتقل‌شده بین نقاط ماده را مدنظر قرار می‌دهد.

نشان داده شده است که در دی‌الکتریک‌های ایزوتروپ بخش پادمقارن گرادیان چرخش می‌تواند قطبش ایجاد کند، در حالی که بخش مقارن چنین اثری ندارد [۶]. این موضوع مسیر مناسبی برای مدل‌سازی کوپل‌های الکترومکانیکی وابسته به اندازه فراهم می‌آورد که در آن اثرات چرخشی نقش مهمی ایفا می‌کنند.

نظریه تنش-کوپل را می‌توان به‌عنوان حالت خاصی از نظریه میکروپلار دانست که در آن نقاط ماده دارای درجات آزادی میکروچرخشی مستقل هستند. هنگامی که این میکروچرخش‌ها به چرخش ماکروسکوپی محدود شوند، نظریه میکروپلار به الاستیسیته تنش-کوپل تقلیل می‌یابد.

نشان داده شده است که برخی از مسائل دینامیکی خارج از صفحه در فلکسوالکتریسیته^۱ را می‌توان به‌صورت معادل به مسائل دینامیکی الاستیسیته تنش-کوپل بازنویسی کرد که حاکی از نزدیکی این دو چارچوب نظری است [۱۰].

۳.۳.۲. نظریه محیط پیوسته میکرومورفیک

بسط عمومی‌تر و همه‌جانبه‌تر را می‌توان در نظریه میکرومورفیک مشاهده کرد که نخستین بار توسط ارینگن، مایندلین و توپین^۲ ارائه شد [۴۰-۴۴-۴۵]. برخلاف نظریه‌های گرادیان-کرنش که مرتبه مشتقات میدان جابه‌جایی را افزایش می‌دهند، نظریه میکرومورفیک با انتساب میدان‌های تغییرشکل میکروسکوپی مستقل به هر نقطه مادی، محیط پیوسته را غنی‌تر می‌سازد. این تغییرشکل میکروسکوپی معمولاً با یک تانسور آفاین ($\bar{F}$) نمایش داده می‌شود که مستقل از گرادیان تغییرشکل ماکروسکوپی (F) است.

با این وجود، استفاده از مدل میکرومورفیک در تحلیل پدیده‌های فلکسوالکتریک بدون چالش نیست. از یک‌سو، تعریف و کالیبراسیون پارامترهای مادی مستقل دشوار است و از سوی دیگر، ارتباط مستقیم این نظریه با ماهیت گرادیان‌محور فلکسوالکتریسیته همواره شفاف نیست. به بیان دیگر، اگرچه میکرومورفیک بستری انعطاف‌پذیر برای فرمول‌بندی فراهم می‌کند، اما برای بازنمایی دقیق کوپلینگ ذاتی بین گرادیان کرنش و قطبش نیاز به اصلاح یا بسط ویژه دارد.

گونه‌های متنوعی از رویکرد میکرومورفیک معرفی شده‌اند:

¹ antiplane dynamic flexoelectric problems

² Eringen, Mindlin and Toupin

- مدل‌های میکرومورفیک کاهش‌یافته^۱ (RMM): برای نمونه، عاطف و الضحبا^۲ تانسور کرنش میکروسکوپی مستقلی (s_{ij}) را معرفی کردند که در آن فلکسوالکتریسیته ناشی از کوپل قطبش با گرادیان آن ($\eta_{ijk} = s_{ij,k}$) است [۴۶]. این روش هزینه محاسباتی را کاهش می‌دهد، در حالی که اثرات گرادیانی همچنان لحاظ می‌شوند.
 - نظریه میکروپلار: حالت محدودشده‌ای از مدل میکرومورفیک که در آن میکروساختار صلب فرض شده و تنها درجات آزادی چرخشی در نظر گرفته می‌شوند.
 - نظریه تنش-کوپل به عنوان حالت حدی: با اعمال محدودیت‌های بیشتر، نظریه میکروپلار به الاستیسیته تنش-کوپل تقلیل می‌یابد.
- به منظور درک تفاوت‌ها و کاربردهای نظریه‌های غیرکلاسیک، جدول ۲-۲ ویژگی‌های کلیدی هر نظریه‌های غیرکلاسیک را ارائه می‌کند.

جدول ۲-۲: دید کلی از نظریه‌های غیرکلاسیک مکانیک پیوسته برجسته

نظریه	ایده‌ی اصلی	رابطه با سایر مدل‌ها
تنش کوپل	گسترش مکانیک کلاسیک با افزودن ممان تنش برای لحاظ کردن اندازه اثرها در مقیاس میکرو.	
میکروپولار (کاسرات)	هر نقطه علاوه بر جابجایی، دوران مستقل دارد.	گسترش‌یافته نسبت به تنش کوپل و قابل تقلیل به آن
میکرومورفیک	هر نقطه دارای یک میدان میکروسکوپی داخلی است که می‌تواند کشیده یا چرخیده شود.	در حالت‌های خاص: شامل micropolar و microstretch
گرادیان کرنش	انرژی کرنشی به گرادیان‌های کرنش وابسته است تا اندازه اثرها لحاظ شوند.	نسخه ساده‌تر از میکرومورفیک

۴.۲. چالش‌ها در مدل‌سازی عددی فلکسوالکتریسیته

با وجود پتانسیل قابل توجه پدیده فلکسوالکتریسیته، شبیه‌سازی عددی آن چالش‌های قابل ملاحظه‌ای را به همراه دارد. روابط ساختاری فلکسوالکتریسیته به‌طور ذاتی قطبش را به گرادیان کرنش متصل می‌کنند، که این امر معادلات حاکم را از مرتبه دوم (در الاستیسیته و الکترواستاتیک کلاسیک) به معادلات دیفرانسیل جزئی مرتبه چهارم ارتقا می‌دهد. در چارچوب الاستیسیته گرادیان-کرنش، میدان جابه‌جایی (u) باید معادلاتی را ارضا کند که نیازمند توابع درون‌یابی با پیوستگی سراسری C^1 برای تقریب عددی هستند. بسیاری از فرمول‌بندی‌های استاندارد اجزای محدود مبتنی بر چندجمله‌ای‌های

¹ Reduced Micromorphic Models (RMM)

² Atef and El-Dhaba

لاگرانژ که تنها پیوستگی C^0 جابجایی را تضمین می کنند و مشتقات آن در مرز عناصر پیوسته نیست، نمی توانند پاسخ دقیق را ارائه دهند.

اگرچه المان های محدود C^1 پیوسته وجود دارند (مانند المان های مثلثی آرگیرس^۱ [۴۷])، اما بکارگیری آن ها بصورت عمومی کمتر توسعه یافته است. از این رو، الزامات پیوستگی، یکی از بزرگ ترین موانع در کاربردهای سنتی FEM برای مدل سازی فلکسوالکتریسیته محسوب می شود.

۱.۴.۲. استراتژی های عددی خاص

در این راستا، به منظور حذف پیوستگی C^1 ، مجموعه ای از روش های عددی پیشرفته توسعه یافته است که می توان آن ها را به دسته های زیر تقسیم کرد:

- تحلیل ایزوژئومتریک (IGA): در IGA از توابع پایه چند-قطعه ای^۲ مانند نرِبز^۳ استفاده می شود. این توابع پیوستگی مرتبه بالا دارند و برای حل مستقیم معادلات با مشتقات جزئی (PDE) فلکسوالکتریسیته مناسب اند. با این حال، چالش هایی در مدیریت هندسه های چندتکه ای، اعمال شرایط مرزی و کنترل هزینه محاسباتی باقی می ماند [۴۸-۴۹].

- روش های میدان-فاز^۴ (PFM): در مکانیک شکست، PFM برای مواد فلکسوالکتریسیته به منظور توصیف قطبش ناشی از گرادیان کرنش در نوک ترک ها به کار رفته است. ترکیب این روش با IGA شرایط پیوستگی مورد نیاز را برآورده کرده و مدل سازی فلکسوالکتریسیته را به مسائل خرابی و آسیب گسترش می دهد [۲۰-۵۰-۵۱-۵۲].

- فرمول بندی های اجزای محدود ترکیبی (MFEM): در این رویکرد، متغیرهای میدانی کمکی (مانند کرنش یا گرادیان کرنش) به عنوان متغیرهای مستقل معرفی می شوند. این کار معادلات مرتبه چهارم اصلی را به یک سیستم معادلات مرتبه دوم هم بسته تبدیل می کند که می تواند با استفاده از المان های استاندارد C^0 پیوسته حل شود.

- MFEM سنتی اغلب از ضریب لاگرانژ برای اعمال سازگاری بین میدان های اصلی و کمکی استفاده می کند [۵۳-۵۴].

- MFEM همایند^۵ با اعمال قیود در نقاط خاص (مانند نقاط انتگرال گیری گاوسی^۶) از ضرایب لاگرانژ صرف نظر می کند و بهره وری محاسباتی را افزایش می دهد [۵۵-۵۶].

¹ Argyris triangular elements

² spline-based basis functions

³ Non-Uniform Rational B-Splines (NURBS)

⁴ Phase-Field Methods (PFM)

⁵ Collocation MFEM (CMFEM)

⁶ Gaussian quadrature points

- روش‌های گلرکین ناپیوسته^۱ (DG): در DG، امکان وجود ناپیوستگی در مرز عناصر وجود دارد و پیوستگی ضعیف^۲ از طریق ترم‌های جریمه اعمال می‌شود. این روش وقتی با IGA ترکیب شود، در هندسه‌های چندتکه‌ای که پیوستگی سراسری^۱ C^1 قابل تضمین نیست، بسیار مفید است [۵۷].
- روش‌های بدون شبکه^۳: روش‌هایی مانند گلرکین بدون المان (EFG)^۴ و بیشینه آنروپی موضعی^۵ از توابع شکلی استفاده می‌کنند که به‌طور طبیعی پیوستگی مرتبه بالا را بدون شبکه پیش تعریف شده فراهم می‌کنند. هرچند این روش‌ها قدرتمندند، هزینه محاسباتی آن‌ها نسبت به FEM بالاتر است [۵۸-۵۹].

۲.۴.۲. کاربرد محیط پیوسته توسعه یافته در مسائل الکترومکانیکی

در میان راهبردهای مختلف، رویکرد محیط پیوسته توسعه یافته (به‌ویژه گرادیان-کرنش و میکرومورفیک) راهکار بسیار امیدوارکننده‌ای ارائه می‌دهد. نظریه‌های محیط پیوسته تعمیم یافته به‌طور گسترده در مدل سازی الکترومکانیکی به کار گرفته شده‌اند:

- مدل‌های گرادیان-کرنش برای توصیف کوپل‌های خطی و غیرخطی فلکسوالکتریسیته، شامل اثرات ناشی از گرادیان‌های قطبش [۱۹-۳۸-۶۰].
- فرمول‌بندی‌های تنش-کوپل برای بررسی قطبش ناشی از گرادیان‌های چرخش و مدل سازی وابستگی به اندازه در مواد پیزوالکتریک و فلکسوالکتریسیته [۶۱].
- چارچوب‌های میکرومورفیک جهت در نظر گرفتن چگالی‌های دو قطبی و چهارقطبی الکتریکی^۶ گسترش یافته و قادر به مدل سازی مستقیم اثرات پیزوالکتریک و فلکسوالکتریسیته در مقیاس ریز هستند [۴۶-۶۲].

جدول ۲-۳ شاخص‌ترین کارهای تحقیقاتی منتشرشده در سال ۲۰۲۵ را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، اکثر مطالعات به هندسه‌های دو-بعدی و تغییرشکل‌های کوچک متمرکز شده‌اند، اگرچه برخی تحقیقات تحلیل‌های سه-بعدی را نیز شامل می‌شوند.

¹ Discontinuous Galerkin (DG) Methods

² weak continuity

³ Meshfree Methods

⁴ Element-Free Galerkin (EFG)

⁵ Local Maximum Entropy (LME) method

⁶ electric dipole and quadrupole densities

جدول ۲-۳: برخی از تحقیقات شاخص در حوزه پدیده فلکسوالکتریسته چاپ شده در سال ۲۰۲۵

نکات کلیدی / مشاهدات	نوع تغییر شکل	بُعد مسئله	روش عددی / مدل سازی	محیط پیوسته	مرجع
در این پژوهش، یک روش $CMEEM$ سه‌بعدی پیشنهاد شده است که از آلمان ۲۰ گره‌ای با دقت مرتبه دوم بهره می‌برد و به بررسی اثرات فلکسوالکتریک در جامدات سه‌بعدی، با تمرکز بر اثرات خارج از صفحه، می‌پردازد.	کوچک	3D	روش اجزای محدود ترکیبی همایند ($CMEEM$)	کلاسیک	[۶۳]
در این مطالعه، چارچوب‌های ریاضی و عددی برای مدل سازی اثرات سطحی در مواد فلکسوالکتریک توسعه داده شده و مدل‌های تحلیلی تیر اویلر-برنولی ارائه گردیده‌اند که با شبیه‌سازی‌های عددی سه‌بعدی مورد اعتبارسنجی قرار گرفته‌اند.	کوچک	1D / 3D	روش عددی (گسترده‌سازی ضعیف سه‌بعدی)، روش تحلیلی (مدل تیر اویلر-برنولی)	کلاسیک (+ اثرات سطحی)	[۶۴]
در این پژوهش، یک چارچوب همگن سازی میکرومکانیکی پیشنهاد شده است تا خواص مؤثر الاستیسیته گرادیان کرنش و فلکسوالکتریک مواد کامپوزیتی همسانگرد حاوی ذرات کروی تعیین شود.	کوچک	به صورت ضمنی 3D (تحلیل ذرات کروی)	همگن سازی میکرومکانیکی	غیر کلاسیک (گرادیان کرنش)	[۶۵]
در این پژوهش، یک روش اجزای محدود ترکیبی برای تحلیل کوپل‌شده‌ی حرارتی-الکتریکی-مکانیکی صفحات فلکسوالکتریک توسعه داده شده و رفتار همگرایی آن تأیید گردیده است. در این روش پیوستگی توابع تقریب $C0$ است.	کوچک	2D (صفحه)	روش اجزای محدود ترکیبی ($MEEM$)	غیر کلاسیک (گرادیان کرنش)	[۶۶]
از IGA برای همگن سازی مرتبه دوم کامپوزیت‌های فلکسوالکتریک استفاده شده است تا پیوستگی $C1$ مورد نیاز نظریه‌های مرتبه بالاتر برآورده شود. بررسی شده است که کاهش اندازه میکروساختار چگونه باعث افزایش ضرایب پیزوالکتریک همگن می‌شود.	کوچک	2D	همگن سازی محاسباتی، تحلیل ایزوژئومتریک (IGA)	غیر کلاسیک (گرادیان کرنش)	[۶۷]
یک PFM تطبیقی در چارچوب IGA چند-مسیره با استفاده از $PHT - splines$ توسعه داده شده است تا پیوستگی $C1$ مورد نیاز معادلات دیفرانسیل مرتبه چهارم در مسائل فلکسوالکتریک رعایت شود.	کوچک (شکست ترد)	2D	میدان فاز (PFM)، تحلیل ایزوژئومتری (IGA) با $PHT - splines$	غیر کلاسیک (گرادیان کرنش)	[۶۸]

۵.۲. شکاف‌های ادبیات و انگیزه پژوهش

مرور ادبیات نشان می‌دهد که طی دهه‌های اخیر، پیشرفت قابل توجهی در درک نظری و تجربی پدیده‌ی فلکسوالکتریسیته حاصل شده است؛ با این حال، چالش‌ها و شکاف‌های اساسی همچنان وجود دارند. این بخش به‌طور خلاصه مهم‌ترین خلأهای موجود و مبانی نظری پژوهش حاضر را بیان می‌کند.

۱.۵.۲. شکاف‌های شناسایی شده در ادبیات

۱. تعارض میان پیش‌بینی‌های نظری و اندازه‌گیری‌های تجربی: در حالی که مدل‌های کلاسیک ضرایب فلکسوالکتریک بسیار کوچک (در حدود $10^{-10} - 10^{-8} \text{ C/m}$) را پیش‌بینی می‌کردند، اندازه‌گیری‌های مدرن مقادیر چند مرتبه بزرگ‌تر گزارش کرده‌اند [۶-۲۸-۳۷]. این اختلاف بیانگر آن است که مدل‌های موجود سهم ساختارهای میکروسکوپی، اثرات سطحی و نقص‌های شبکه‌ای را به‌درستی در نظر نمی‌گیرند.

۲. محدودیت نظریه‌های کلاسیک محیط پیوسته: نظریه‌های کلاسیک فاقد پارامتر طول ذاتی هستند و قادر به بازنمایی کوپل‌های وابسته به اندازه نیستند. نظریه‌های تعمیم‌یافته نظیر گرادیان-کرنش، تنش-کوپل، میکروپلار و میکرومورفیک این ضعف را جبران می‌کنند، اما اجرای عددی آن‌ها به‌ویژه در مقیاس سه‌بعدی همچنان دشوار است [۴۰-۴۶].

۳. پیچیدگی عددی در حل معادلات مرتبه بالا: مدل‌های گرادیان-کرنش منجر به معادلات چهارم‌مرتبه‌ای می‌شوند که نیازمند پیوستگی C^1 هستند. روش‌های جایگزینی مانند تحلیل ایزوژئومتریک یا فرمول‌بندی‌های مخلوط این مشکل را تا حدی برطرف می‌کنند، ولی اغلب با هزینه‌ی محاسباتی زیاد و دشواری اعمال شرایط مرزی همراه‌اند [۴۷-۵۹].

۴. تمرکز بیش از حد بر مدل‌های خطی و دوبعدی: بیشتر پژوهش‌های عددی موجود محدود به هندسه‌های ساده (تیر، صفحه یا پوسته) و تغییرشکل‌های کوچک بوده‌اند. درحالی‌که رفتار واقعی مواد فلکسوالکتریک در سامانه‌های مهندسی، اغلب سه‌بعدی، چندمیدانی و غیرخطی است [۱۹-۳۸-۶۰].

۵. بررسی ناکافی اثرات کوپل‌شده‌ی پیچیده: تعامل فلکسوالکتریسیته با سایر پدیده‌های الکترومکانیکی مانند پیزوالکتریک سطحی، شکست یا اثرات حرارتی هنوز به‌طور جامع مدل‌سازی نشده است، در حالی‌که چنین تعاملاتی در مقیاس نانو اهمیت زیادی دارند [۵۰-۶۱-۵۲].

۲.۵.۲. راه حل پیشنهادی: پیوند میکرومورفیک و گرادیان کرنش

اگرچه نظریه‌های گرادیان کرنش و میکرومورفیک در ظاهر متفاوت هستند، پژوهش حاضر نشان می‌دهد که می‌توان آن‌ها را در یک چارچوب مفهومی واحد به هم پیوند داد. نوآوری اصلی این کار در طراحی یک تابع انرژی جریمه‌مانند است که اتصال میان تانسور گرادیان تغییرشکل (F) در مقیاس ماکروسکوپی و تانسور میکرو-تغییرشکل ($\bar{F}$) در مقیاس میکروسکوپی را برقرار می‌کند

- از منظر عددی، چارچوب میکرومورفیک همچنان با المان‌های C^0 استاندارد قابل پیاده‌سازی است و بنابراین مشکلات پیچیدگی محاسباتی در روش گرادیان کرنش برطرف می‌شود.
- از منظر فیزیکی، مدل حاصل در حد مناسب به رفتار نظریه‌های گرادیان کرنش همگرا می‌شود و توصیفی دقیق از اثرات وابسته به اندازه و پدیده‌ی فلکسوالکتریک ارائه می‌دهد.

به این ترتیب، رویکرد پیشنهادی هم دقت فیزیکی نظریه‌های گرادیان کرنش و هم سهولت عددی مدل میکرومورفیک را توأمان فراهم می‌کند. این نوآوری یکی از دستاوردهای اصلی تحقیق حاضر است که امکان مدل‌سازی دقیق و کارآمد پدیده‌ی فلکسوالکتریسیته با تأکید بر تعامل پیچیده میان گرادیان کرنش و قطبش را فراهم می‌سازد.

۳.۵.۲. انگیزه پژوهش

پرداختن به شکاف‌های موجود انگیزه اصلی این پژوهش است. به‌طور مشخص رویکرد محیط پیوسته میکرومورفیک چارچوبی امیدوارکننده برای غلبه بر دشواری‌های نظریه‌های مرتبه بالا ارائه می‌دهد. با معرفی درجات آزادی میکروساختاری مستقل، مسئله را به یک سیستم معادلات PDE مرتبه دوم چندمیدانی بازفرموله می‌کند.

✓ یک فرمول‌بندی کاملاً کوپل‌شده ارائه می‌دهد که امکان استفاده از طیف وسیعی از روابط ساختاری الکترومکانیکی را فراهم می‌کند. در نتیجه توانایی تحلیل گسترده وسیعی از سیستم‌های غیرخطی الکترومکانیکی را دارد.

✓ به‌طور پایدار تغییرشکل‌های بزرگ را در نظر می‌گیرد و از تغییرشکل‌های بزرگ در دی‌الکتریک‌های سخت کریستالی و سیستم‌های نرم پلیمری، پشتیبانی خواهد کرد. بدین ترتیب محدودیت‌های ناشی از فرمول‌بندی‌های مبتنی بر کرنش کوچک در ادبیات را برطرف می‌سازد.

✓ نیاز به پیوستگی مرتبه بالا را کاهش داده و استفاده از المان‌های استاندارد C^0 را ممکن می‌سازد؛ در نتیجه، دشواری‌های عددی مرتبط با نظریه‌های گرادیانی مرتبه بالا برطرف می‌گردد.

✓ به صورت طبیعی یک پارامتر طول ذاتی را در بر می گیرد که آن را برای مدل سازی سامانه های میکرو و نانو که اثرات فلکسوالکتریسیته برجسته تر می باشند، مناسب می سازد.

به طور خلاصه، وضعیت فعلی پتانسیل فلکسوالکتریسیته و چالش های عملی در مدل سازی عددی آن را آشکار می سازد. فرمول بندی اجزای محدود میکرومورفیک مسیر مناسبی برای غلبه بر موانع موجود ارائه می دهد و فرصت هایی برای بررسی رفتار غنی الکترومکانیکی مواد فلکسوالکتریسیته در مقیاس های مختلف فراهم می کند. در نهایت، چنین چارچوب محاسباتی نه تنها به درک عمیق تر مبانی فلکسوالکتریسیته کمک می کند، بلکه امکان طراحی منطقی دستگاه های نوین میکرو و نانو برای حسگرها، عملگرها، برداشت انرژی و کاربردهای الهام گرفته از زیست شناسی را فراهم می آورد.

فصل سوم: روش‌شناسی پژوهش

۱.۳. مقدمه

این فصل به تبیین چارچوب نظری و روش‌شناختی که در پایان‌نامه حاضر برای مدل‌سازی اثر فلکسوالکتریک در بستر مکانیک محیط‌های پیوسته تعمیم‌یافته اتخاذ شده است، اختصاص دارد. همان‌گونه که در فصل پیشین بحث شد، فلکسوالکتریسیته یک پدیده‌ی کوپل‌شدگی الکترومکانیکی است که هنگامی که یک ماده‌ی دی‌الکتریک تحت تغییرشکل ناهمگن قرار گیرد رخ می‌دهد؛ به بیان دیگر، زمانی که گرادیان‌های کرنش موجب قطبش الکتریکی شوند. مدل‌سازی دقیق این اثر به‌ویژه در ساختارهای میکرو و نانو، که پاسخ‌های وابسته به اندازه برجسته هستند، از اهمیت خاصی برخوردار است. مکانیک کلاسیک محیط‌های پیوسته که ذاتاً مستقل از مقیاس است، توانایی بازنمایی مناسب این اثرات را ندارد؛ بنابراین استفاده از نظریه‌های توسعه‌یافته نظیر نظریه میکرومورفیک ضرورت می‌یابد.

در ادامه‌ی این فصل، ابتدا چارچوب سینماتیکی لازم برای توصیف همزمان متغیرهای ماکروسکوپی، میکرومورفیک و الکتریکی ارائه می‌شود. سپس توابع انرژی پتانسیل و اجزای مختلف انرژی شامل انرژی الاستیک، انرژی الکتریکی و مشارکت فلکسوالکتریک معرفی می‌گردند. بر مبنای این توابع، معادلات حاکم از طریق اصول تغییرات استخراج شده و فرم ضعیف مناسب برای تحلیل عددی به دست می‌آید. در گام بعدی، گسسته‌سازی معادلات به روش اجزای محدود و جزئیات مربوط به تقریب میدان‌ها، خطی‌سازی، عملگرهای مماسی سازگار^۱ و راهبرد پیاده‌سازی عددی مورد بررسی قرار می‌گیرد. در پایان، فرض‌های مدل‌سازی، محدودیت‌های فرمول‌بندی حاضر و نوآوری‌های پژوهش معرفی شده و فصل با یک جمع‌بندی خاتمه می‌یابد.

۱.۱.۳. نمادها و تعاریف اولیه

پیش از ارائه چارچوب سینماتیکی، لازم است مجموعه‌ای از قراردادهای نمادگذاری تعیین شود. این فرمول‌بندی شامل میدان‌های ماکروسکوپی و میکرومورفیک و همچنین کمیت‌های الکتریکی است که در همه آن‌ها تمایز دقیق بین توصیف مکانی^۲ و فضایی^۳ ضروری است.

^۱ Consistent Tangent Operator

^۲ Spatial description

^۳ Material description

۱.۱.۱.۳. قراردادهای شاخص و تانسور

شاخص‌ها به شکل زیر تعریف می‌شوند:

- شاخص‌های لاتین بزرگ $I, J, K, \dots$ اجزای مادی مرتبط با پیکره مرجع را نشان می‌دهند.
- شاخص‌های لاتین کوچک $i, j, k, \dots$ اجزای مکانی مرتبط با پیکره کنونی را نشان می‌دهند.
- شاخص‌های تکراری به معنی جمع‌بندی طبق قرارداد جمع‌بندی اینشتین^۱ هستند.

سامانه‌های مختصات به شکل زیر تعریف می‌شوند:

- یک نقطه ماده در پیکره مرجع با بردار موقعیت خود $\mathbf{X} = X_I \mathbf{E}_I$ نمایش داده می‌شود، که در آن $\mathbf{E}_I$ بردارهای پایه عمود بر هم پیکره مرجع هستند.
- همان نقطه ماده در پیکره کنونی با $\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i$ نمایش داده می‌شود، که در آن $\mathbf{e}_i$ بردارهای پایه عمود بر هم پیکره کنونی هستند.

عملگرهای مشتق به شکل زیر تعریف می‌شوند:

- گرادیان مادی^۲ تابع $f(\mathbf{X})$ با $\text{Grad } f$ نشان داده می‌شود و شکل مؤلفه‌ای آن به صورت $(\text{Grad } f)_I = \partial f / \partial X_I$ بیان می‌شود.
- گرادیان فضایی^۳ تابع $g(\mathbf{x})$ با $\text{grad } g$ نشان داده می‌شود و شکل مؤلفه‌ای آن به صورت $(\text{grad } g)_i = \partial g / \partial x_i$ بیان می‌شود.
- عملگرهای دیورژانس در پیکره مرجع و پیکره کنونی به ترتیب به صورت $\text{Div}(\bullet)$ و $\text{div}(\bullet)$ نشان داده می‌شوند.

تانسور همانی مرتبه دوم، تانسوری است که ضرب آن با هر تانسور مرتبه دوم دیگری تغییری ایجاد نمی‌کند و به شکل $\mathbf{I} = \delta_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j)$ تعریف می‌شود.

تانسور جایگشت^۴ یک تانسور مرتبه سوم است که در محاسبات ضرب خارجی و تعیین بردارهای چرخشی کاربرد دارد و با $\mathcal{E}_{ijk}$ نمایش داده می‌شود.

¹ Einstein summation convention

² material gradient

³ spatial gradient

⁴ permutation tensor (Levi-Civita tensor)

۲.۱.۱.۳. ضرب‌های تانسوری

در این بخش، انواع ضرب‌های بین تانسورها که در تحلیل‌های مکانیک و الکترومکانیک استفاده می‌شوند معرفی می‌گردند.

ضرب داخلی دو بردار $\mathbf{a}$ و $\mathbf{b}$ ، دو تانسور مرتبه دوم $\mathbf{A}$ و $\mathbf{B}$ و دو تانسور مرتبه سوم $\mathbf{M}$ و $\mathbf{N}$ به ترتیب به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i \quad (۱-۳)$$

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij} \quad (۲-۳)$$

$$\mathbf{M} \cdot : \mathbf{N} = M_{ijk} N_{ijk} \quad (۳-۳)$$

ضرب دوگانی^۱ دو تانسور مرتبه یک (بردار) و دو تانسور مرتبه دو به ترتیب به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = a_i b_j (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \quad (۴-۳)$$

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = A_{ij} B_{kl} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) \quad (۵-۳)$$

در تحقیق حاضر، به عنوان قراردادی مشخص، ضرب دوگانی بالایی و پایینی^۲ دو تانسور مرتبه دوم به ترتیب به صورت زیر معرفی می‌شوند:

$$\mathbf{A} \bar{\otimes} \mathbf{B} = A_{ik} B_{jl} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) \quad (۶-۳)$$

$$\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B} = A_{il} B_{jk} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) \quad (۷-۳)$$

۲.۳. مفروضات و چارچوب مدل‌سازی

توسعه‌ی فرمول‌بندی اجزای محدود میکرومورفیک برای پدیده‌ی فلکسوالکتریسیته بر پایه‌ی چندین فرض ساده‌کننده و انتخاب‌های مدل‌سازی بنا شده است. این مفروضات دامن‌های کاربرپذیری مدل را مشخص می‌سازند و ضمن حفظ فیزیک اساسی کوپل‌شدگی الکترومکانیکی، امکان ایجاد یک چارچوب عددی قابل حل را فراهم می‌کنند. در این بخش، مفروضات فیزیکی، سینماتیکی و چارچوب عددی مدل ارائه شده شرح داده می‌شوند تا پایه‌ای شفاف برای تحلیل‌های بعدی فراهم گردد.

^۱ dyadic product

^۲ upper and lower dyadic products

۱.۲.۳. مفروضات فیزیکی

- شرایط ایزوترمال^۱: فرض می‌شود که سیستم در دمای ثابت تکامل می‌یابد. اثرات حرارتی نظیر پیروالکتریسیته‌ی حرارتی یا کوپل‌شدگی ترمومکانیکی در نظر گرفته نمی‌شوند.
- پایستاری^۲: تنها نیروهای پایستار وارد مدل می‌شوند. اثرات اتلافی نظیر ویسکوالاستیسیته، تلفات دی‌الکتریک یا تغییر فاز دامنه‌ای^۳ نادیده گرفته شده‌اند.
- بار آزاد کوچک: چگالی بار خارجی در نظر گرفته می‌شود، اما تجمع بار فضایی و پدیده‌های شکست دی‌الکتریک غیرخطی لحاظ نمی‌گردند.
- همگنی ماده در مقیاس ماکرو^۴: ماده در مقیاس پیوسته همگن و همسانگرد در نظر گرفته می‌شود. ناهمسانگردی ریزساختاری به‌صورت ضمنی از طریق پارامترهای کوپل‌شدگی فلکسوالکتریک بازنمایی می‌گردد.
- بازگشت‌پذیری^۵: مدل ماده بر پایه‌ی چگالی انرژی آزاد فرموله می‌شود، که دلالت بر پاسخ الکترومکانیکی بازگشت‌پذیر و فاقد هیستریزیس^۶ (پسماند) است.

۲.۲.۳. مفروضات سینماتیکی و پیوستاری

- چارچوب میکرومورفیک: هر نقطه‌ی پیوسته به درجات آزادی اضافی مجهز می‌گردد که میکرو-تغییرشکل آفین را بازنمایی می‌کند.
- کوپل ماکرو-میکرو: یک جمله‌ی انرژی میانجی مقیاس شبیه به جریمه، سازگاری بین گرادیان‌های تغییرشکل ماکروسکوپی و میکرومورفیک را تضمین می‌کند. در حد جریمه‌ی بی‌نهایت، مدل میکرومورفیک به فرمول‌بندی الاستیسیته‌ی گرادینانی بازمی‌گردد.
- سینماتیک بزرگ^۷: مدل تغییرشکل‌های بزرگ (غیرخطی‌های هندسی) را دقیق در نظر می‌گیرد.

¹ Isothermal conditions

² Conservativity

³ domain switching

⁴ Material homogeneity at the macroscale

⁵ Reversibility

⁶ hysteresis

⁷ Finite kinematics

- تقریب الکترواستاتیک^۱: اثرات دینامیکی میدان‌های الکترومغناطیسی نادیده گرفته می‌شوند؛ تنها پتانسیل الکتریکی ϕ و میدان مشتق‌شده‌ی آن $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ لحاظ می‌گردد. اثرات مغناطیسی کنار گذاشته شده‌اند.

۳.۲.۳. چارچوب عددی

- گسسته‌سازی اجزای محدود: تمامی میدان‌های اولیه $(\phi, \bar{\mathbf{F}}, \varphi)$ با استفاده از توابع پایه‌ی پیوسته‌ی C^0 در روش اجزای محدود تقریب زده می‌شوند. این انتخاب از مشکلات ناشی از تقریب‌های پیوسته‌ی C^1 که در نظریه‌های گرادیانی مورد نیاز است، جلوگیری می‌کند.
 - استراتژی حل یکپارچه: زیرمسائل مکانیکی، میکرومورفیک و الکتریکی به‌طور هم‌زمان و در قالب یک طرح نیوتن-رافسون کاملاً کوپل‌شده حل می‌شوند که کوپلینگ قوی میدان‌ها را تضمین می‌کند.
- این استراتژی مدل‌سازی، ابزاری جامع و انعطاف‌پذیر فراهم می‌کند که قادر به بازنمایی کوپل‌شدگی غیرخطی الکترومکانیکی در مواد دی‌الکتریک بوده و در عین حال، امکان‌پذیری محاسباتی را برای هندسه‌های پیچیده و مسائل سه‌بعدی حفظ می‌نماید. جدول ۱-۳ مفروضات و چارچوب مدل را دسته‌بندی شده ارائه می‌دهد.

جدول ۱-۳: مفروضات و چارچوب مدل

چارچوب عددی	مفروضات سینماتیکی و پیوستاری	مفروضات فیزیکی
☐	☐	☐
گسسته‌سازی اجزای محدود	چارچوب میکرومورفیک	ایزوترمال
☐	☐	☐
استراتژی حل یکپارچه	کوپل ماکرو-میکرو	پایستاری
	☐	☐
	سینماتیک بزرگ	بار آزاد کوچک
	☐	☐
	تقریب الکترواستاتیک	همگنی ماده در مقیاس ماکرو
		☐
		بازگشت‌پذیری

¹ Electrostatic approximation

۳.۳. سینماتیک مسأله

در ادامه، توصیف کامل سینماتیک مسأله ارائه می‌شود. ابتدا سینماتیک ماکرو که بیانگر رفتار مکانیکی متداول است معرفی می‌گردد. سپس، با تکیه بر نظریه‌ی میکرومورفیک، میدان‌های میکروسکوپییک تشریح می‌شوند و در پایان، میدان‌های الکتریکی مطرح می‌گردند.

۱.۳.۳. سینماتیک ماکروسکوپی (تغییر شکل ماکرو)

توصیف ماکروسکوپی تغییر شکل در مکانیک پیوسته اهمیت محوری دارد. این توصیف رابطه بین پیکره مرجع (بدون تغییر شکل) و پیکره کنونی (دارای تغییر شکل) جسم را برقرار می‌کند و معیارهای کرنش لازم برای مدل ساختاری را ارائه می‌دهد. در ادامه، سینماتیک تغییر شکل متناهی استاندارد که مرتبط با چارچوب الکترومکانیکی میکرومورفیک حاضر است، خلاصه می‌شود.

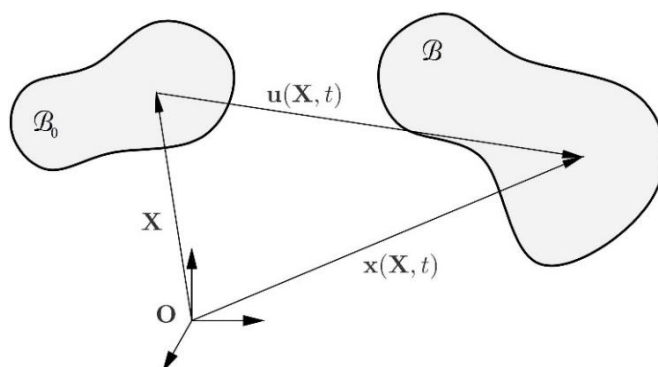
فرض کنید $\mathcal{B}_0$ جسم را در پیکره مرجع (مادی) در زمان $t = 0$ نشان دهد و $\mathcal{B}$ همان جسم را در پیکره کنونی (فضایی) در زمان t نشان دهد. یک نقطه ماده با بردار موقعیت خود $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_0$ شناسایی می‌شود. همان نقطه در زمان t در موقعیت $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$ قرار دارد. نگاشت حرکت یک تابع یک‌به‌یک به شکل زیر است:

$$\varphi: \mathcal{B}_0 \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t) \quad (۸-۳)$$

بردار جابجایی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \varphi(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} \quad (۹-۳)$$

این نگاشت پایه‌ای برای تعریف معیارهای کرنش و پاسخ تنش در مکانیک تغییر شکل متناهی فراهم می‌کند. پیکره‌های مرجع و کنونی و نگاشت بین‌شان در شکل ۱-۳ نمایش داده شده‌اند.



شکل ۱-۳: نگاشت بین پیکره مرجع و کنونی [۶۹]

گرادیان تغییر شکل توصیفگر سینماتیکی بنیادی است. نمایش تانسوری و مؤلفه‌ای گرادیان تغییر شکل به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \text{Grad } \varphi(\mathbf{X}, t) \quad (3-10)$$

$$F_{il} = \frac{\partial x_i}{\partial X_l} \quad (3-10 \text{ ب})$$

گرادیان تغییر شکل، چرخش و کشش المان‌های خطی کوچک^۱ را در بر می‌گیرد.

گرادیان تغییر شکل، المان‌های خطی دیفرانسیلی را به شکل زیر بین پیکره‌ها نگاشت می‌کند.

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{X} \quad (3-11)$$

دترمینان تانسور تغییر شکل با نام ژاکوبین به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$J = \det \mathbf{F} \quad (3-12)$$

ژاکوبین تغییر حجم موضعی تحت تغییر شکل را نشان می‌دهد.

$$dv = J dV \quad (3-13)$$

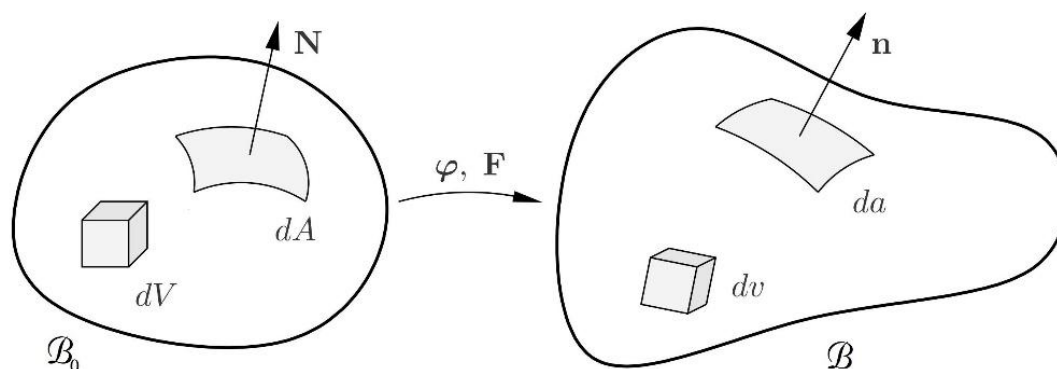
که در آن dV یک حجم نامتناهی در پیکره مرجع و dv تصویر آن در پیکره کنونی است. شرط لازم برای تغییر شکل‌های فیزیکی مجاز $J > 0$ است. همچنین، $J = 1$ به تغییر شکل هم‌حجم (حفظ‌کننده حجم) مربوط می‌شود.

برای المان‌های سطحی داریم:

$$\mathbf{n} d\mathbf{a} = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} dA, \quad n_i da = J F_{ii}^{-1} N_i dA \quad (3-14)$$

نمایش هندسی روابط (3-13) و (3-14) در شکل ۳-۲ ارائه شده‌اند.

^۱ infinitesimal line elements



شکل ۲-۳: نگاشت المان هندسی حجمی و سطحی [۶۹]

دو تانسور مرتبه دوم مهم که از $\mathbf{F}$ ساخته می‌شوند، تانسورهای راست و چپ کوشی-گرین^۱ می‌باشند.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad (3-15\text{A})$$

$$C_{IJ} = F_{iI} F_{iJ} \quad (3-15\text{B})$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T \quad (3-16\text{A})$$

$$b_{ij} = F_{iI} F_{jI} \quad (3-16\text{B})$$

تانسور راست و تانسور چپ، هر دو تانسورهای متقارن هستند که کشش ناشی از تغییر شکل را توصیف می‌کنند و به ترتیب در پیکره مرجع و پیکره کنونی تعریف می‌شوند.

تنش اول و دوم پیولا-کیرشهف^۲ به ترتیب، به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$P_{iJ} = J \sigma_{ij} F_{jJ}^{-1} \quad \mathbf{P} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T} \quad (3-17)$$

$$S_{IJ} = F_{iI}^{-1} P_{iJ}, \quad \mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P} \quad (3-18)$$

تنش کوشی ($\boldsymbol{\sigma}$)، تنش اول پیولا-کیرشهف ($\mathbf{P}$) و تنش دوم پیولا-کیرشهف ($\mathbf{S}$) به ترتیب یک تانسور مرتبه دوم با توصیف فضایی، دو-نقطه‌ای^۳ و مادی می‌باشند.

۲.۳.۳. سینماتیک میکرومورفیک (تغییر شکل میکرو)

¹ right and left Cauchy-Green tensor

² First and second Piola-Kirchhoff stress tensor

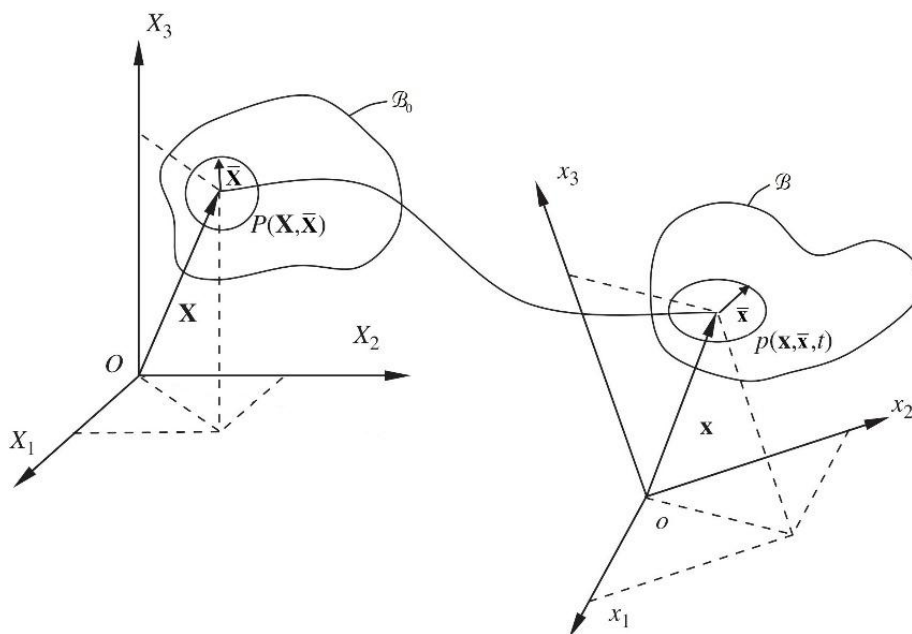
³ Two-point

مکانیک پیوسته کلاسیک فرض می‌کند که تغییر شکل یک جسم به‌طور کامل با گرادیان تغییر شکل ماکروسکوپی $\mathbf{F}$ توصیف می‌شود. با این حال، در نظریه‌های میکرومورفیک، توصیفگرهای سینماتیکی اضافی معرفی می‌شوند تا تغییر شکل میکرو-ساختار موجود در ماده را، مستقل از حرکت ماکروسکوپی، نمایان کنند. این توصیفگرها امکان می‌دهند اثر اندازه، مقیاس‌های طول داخلی و تعاملات غیرمحلی، مانند آنچه در مدل‌های فلوکسوالکتریک رخ می‌دهد، در تحلیل لحاظ شوند.

در ادامه، درجات آزادی میکرومورفیک و گرادیان آن به تفصیل شرح داده می‌شوند.

۱.۲.۳.۳. درجات آزادی میکرومورفیک

در نظریه میکرومورفیک، درجه آزادی اضافی کلیدی، تانسور میکرو-تغییر شکل $\bar{\mathbf{F}}$ است. $\bar{\mathbf{F}}$ یک تانسور مرتبه دوم است که در هر نقطه ماده تعریف می‌شود و به عنوان یک توصیفگر مستقل تغییر شکل آفین در مقیاس میکرو عمل می‌کند و الزامی برای هم‌راستایی با گرادیان تغییر شکل ماکروسکوپی $\mathbf{F}$ ندارد. شکل ۳-۳ میکرو-ساختار میکرومورفیک را به تصویر کشیده است.



شکل ۳-۳: تغییر شکل مستقل میکرومورفیک [۷۰]

از منظر فیزیکی، $\bar{\mathbf{F}}$ نشان می‌دهد که یک المان داخلی ماده چگونه نسبت به پیکربندی مرجع تغییر شکل می‌دهد. در غیاب اثرات میکرومورفیک، حالت کلاسیک با اعمال شرط $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$ بازیابی می‌شود.

ویژگی کلیدی نظریه میکرومورفیک در استقلال سینماتیکی $\bar{\mathbf{F}}$ از $\mathbf{F}$ نهفته است. این استقلال اجازه می‌دهد تا تغییر شکل‌های میکروسکوپی به‌صورت آزادانه و مستقل از تغییر شکل‌های ماکروسکوپی رخ

دهند. در برخی مدل‌ها، به منظور کنترل سازگاری بین این دو میدان، از روش‌های جریمه‌ای^۱ استفاده می‌شود تا اختلاف بین $\bar{F}$ و F محدود گردد. این توازن، امکان نمایش صریح اثرات میکروساختاری را فراهم می‌سازد، در حالی که رفتار کلاسیک نیز به عنوان حالت حدی قابل بازیابی است.

۲.۲.۳.۳. حرکت در مقیاس میکرو و نگاشت میکرو

در چارچوب سینماتیک میکرومورفیک، برای هر نقطه‌ی ماده، علاوه بر حرکت ماکروسکوپی، یک حرکت در مقیاس میکرو نیز تعریف می‌شود:

$$\bar{x} = \bar{F} \bar{X} \quad (۱۹-۳)$$

میدان میکرومورفیک نشان‌دهنده‌ی یک نگاشت آفین داخلی برای یک نقطه‌ی ماده است. به عبارت دیگر، هر نقطه‌ی ماده می‌تواند به طور هم‌زمان دارای یک موقعیت کلی در میدان ماکروسکوپی و یک موقعیت داخلی مستقل در مقیاس میکرو باشد.

این ساختار، امکان می‌دهد تا درجه‌های آزادی میکروساختاری بدون محدودیت نسبت به تغییرشکل‌های ماکروسکوپی، به صورت مستقل تغییر کنند و در نتیجه، سینماتیک سیستم با انعطاف‌پذیری بیشتری غنی گردد. از دید هندسی، $\bar{X}$ را می‌توان به عنوان بردار موقعیت میکرو-نقطه‌ای در نظر گرفت که به نقطه‌ی ماده‌ی X وابسته بوده و تغییرشکل‌های داخلی آن را توصیف می‌کند. این میکرو-نقطه نمایانگر رفتار درونی ماده است؛ مانند تغییرشکل یک سلول شبکه‌ای یا یک بخش کوچک از میکروساختار، بدون آن‌که حرکت کلی ماکروسکوپی مختل شود.

در این چارچوب، بردارهای X و x به مختصات ماکروسکوپی کلاسیک اشاره دارند. در مکانیک کلاسیک، X مکان نقطه‌ی مادی در پیکربندی مرجع است، در حالی که x مکان متناظر همان نقطه در پیکربندی کنونی را نمایش می‌دهد. در نظریه‌ی میکرومورفیک، هر نقطه‌ی مادی به‌گونه‌ای مدل می‌شود که دارای یک ناحیه‌ی محدود و تغییرشکل‌پذیر میکرو است.

به‌طور خاص، در رابطه‌ی (۱۹-۳) بردار $\bar{X}$ موقعیت نسبی یک جزء میکرو یا دایرکتور^۲ نسبت به مرکز نقطه‌ی مادی در حالت مرجع را مشخص می‌کند، در حالی که موقعیت کنونی آن جزء پس از اعمال تانسور میکرو-تغییرشکل $\bar{X}$ به دست می‌آید.

این توصیف سینماتیکی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا حرکت اجزای میکرو تعیین‌کننده‌ی درجات آزادی اضافی میکرومورفیک است؛ امری که نظریه‌ی میکرومورفیک را از نظریه‌ی محیط‌های

^۱ Penalty Methods

^۲ director

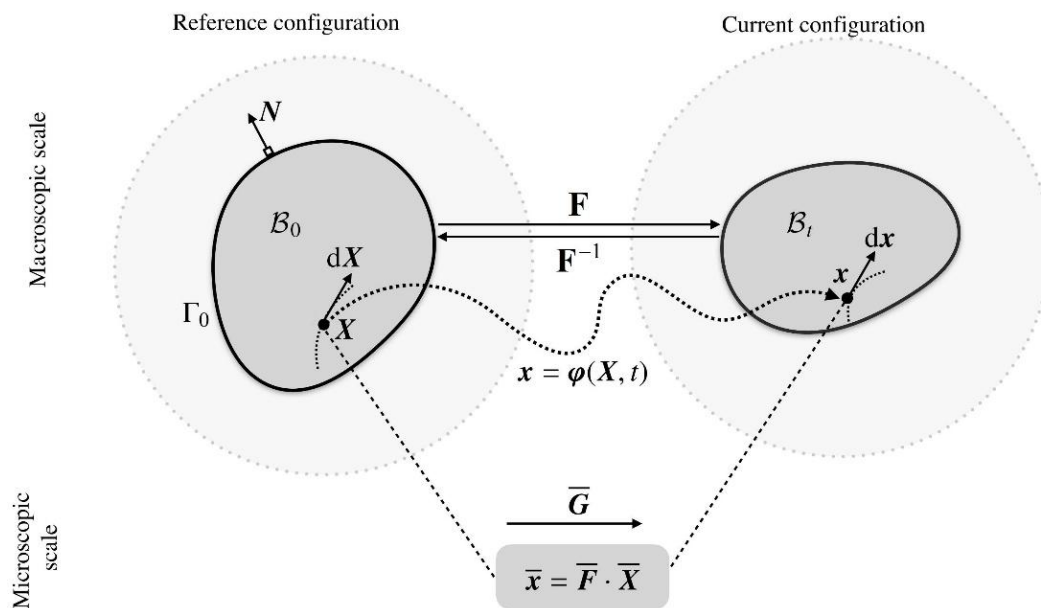
پیوسته‌ی کلاسیک متمایز می‌سازد و امکان بازنمایی هندسی مکانیزم‌های تغییرشکل ریزساختاری را فراهم می‌کند.

۳.۲.۳.۳. گرادیان میکرو-تغییر شکل

تغییرات فضایی تانسور میکرو-تغییر شکل با تانسور گرادیان میکرو-تغییر شکل توصیف می‌شود:

$$\bar{\mathbf{G}} = \text{Grad } \bar{\mathbf{F}} = \frac{\partial \bar{F}_{il}}{\partial X_j} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}_I \otimes \mathbf{E}_J \quad (۲۰-۳)$$

$\bar{\mathbf{G}}$ یک تانسور مرتبه سوم است که میزان ناهمگنی^۱ میکرو-تغییرشکل در سراسر ماده را کمی‌سازی می‌کند. از منظر فیزیکی، $\bar{\mathbf{G}}$ اثراتی مشابه گرادیان کرنش دارد و امکان مدل‌سازی پاسخ‌های سازنده غیرمحل^۲ ماده را فراهم می‌سازد، به این معنا که پاسخ ماده در یک نقطه نه تنها به تغییرشکل‌های همان نقطه، بلکه به وضعیت نقاط اطراف آن نیز وابسته است. چنین ویژگی‌ای برای توصیف پدیده‌هایی مانند فلکسوالکتریک که اثرات میکروسکوپی ریزساختار نقش کلیدی در رفتار ماکروسکوپی ماده ایفا می‌کنند، اهمیت دارد. شکل ۳-۴ میدان میکروسکوپی را نمایش می‌دهد.



شکل ۳-۴: نمایش میدان‌های مستقل ماکرو و میکرو [۶۲]

¹ non-uniformity

² non-local constitutive responses

معرفی $\bar{F}$ و $\bar{x}$ سینماتیک مسأله را به چند طریق غنی می‌کند:

- نمایش مقیاس: $\bar{F}$ تغییر شکل‌ها در میکرو-مقیاس پیوستار (مانند اعوجاج شبکه یا کشش سلول ریز) را ثبت می‌کند.
- تغییر شکل آفین محلی: $\bar{F}$ به عنوان نگاشت آفین محلی عمل می‌کند و تقریب مرتبه اول حرکت میکروساختاری را ارائه می‌دهد.
- فیزیک میکروساختار: امکان مدل‌سازی چرخش، کشش و برش که در مقیاس ماکروسکوپی مشاهده نمی‌شوند را فراهم می‌کند.
- کوپل‌شدگی: از طریق جملات انرژی، $\bar{F}$ با F کوپل می‌شود و اجازه می‌دهد مدل پدیده‌های پل-مقیاس^۱ مانند فلوکسوالکتریک را لحاظ کند.

به طور خلاصه، $\bar{F}$ و گرادیان آن $\bar{G}$ به عنوان کمیت‌های پیونددهنده میان سازوکارهای میکروسکوپی و متغیرهای قابل مشاهده در مقیاس ماکروسکوپی ایفای نقش می‌کنند.

۳.۳.۳. سینماتیک الکتریکی

علاوه بر میدان‌های مکانیکی و میکرومورفیک، پیوستارهای الکترومکانیکی^۲ نیازمند توصیف وضعیت الکتریکی جسم هستند. کمّیات سینماتیکی مرتبط شامل پتانسیل الکتریکی، میدان‌های الکتریکی متناظر در پیکره‌های فضایی و مادی و همچنین متغیرهای قطبش هستند. این کمّیات برای فرموله کردن کوپل‌شدگی بین تغییر شکل و اثرات الکتریکی مانند پیزوالکتریسیته و فلوکسوالکتریسیته ضروری‌اند.

۱.۳.۳.۳. پتانسیل الکتریکی

پتانسیل الکتریکی ϕ یک میدان اسکالر است که می‌تواند در پیکره کنونی و یا مرجع تعریف گردد. گرادیان آن میدان الکتریکی را تعیین می‌کند و لاپلاسیان آن به توزیع بار آزاد از طریق قانون گاوس^۳ مرتبط است. پتانسیل الکتریکی به عنوان میدان اسکالر بنیادی عمل می‌کند که سایر کمّیات الکتریکی از آن استخراج می‌شوند.

^۱ scale-bridging phenomena

^۲ electromechanical continua

^۳ Gauss' law

۲.۳.۳.۳. میدان الکتریکی

دو شکل از میدان الکتریکی معرفی می‌شود که بستگی به پیکره انتخابی دارند. میدان الکتریکی فضایی و مادی به ترتیب به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathbf{e} = -\text{grad}\phi \quad (\text{آ}-۲۱-۳)$$

$$\mathbf{E} = -\text{Grad}\phi \quad (\text{ب}-۲۱-۳)$$

هر دو میدان یک پدیده فیزیکی را نمایش می‌دهند اما نسبت به سیستم مختصات متفاوت بیان شده‌اند. میدان الکتریکی فضایی ($\mathbf{e}$) و میدان الکتریکی مادی ($\mathbf{E}$) از طریق گرادیان تغییر شکل $\mathbf{F}$ به یکدیگر مرتبط هستند. بر اساس رابطه پیش‌روی^۱ (نگاشب به جلو) داریم:

$$\mathbf{e} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \quad (\text{آ}-۲۲-۳)$$

و مطابق رابطه پس‌روی^۲ (نگاشت به عقب):

$$\mathbf{E} = \mathbf{F}^T \mathbf{e} \quad (\text{ب}-۲۲-۳)$$

روابط (۲۲-۳) نتیجه مستقیم قاعده زنجیره‌ای مشتق‌گیری تحت نگاشت تغییر شکل ϕ هستند و امکان می‌دهند که قوانین موازنه الکتریکی به صورت سازگار در پیکره مرجع و کنونی بیان شوند.

از آنجا که میدان الکتریکی در هر دو انرژی مکانیکی و الکتریکی نقش دارد، دقت در استفاده از این تبدیلات در تدوین انرژی‌های کوپل‌شده و معادلات تغییراتی ضروری است.

۳.۳.۳.۳. قطبش و جابجایی دی‌الکتریک

به طور کلی، در مواد دی‌الکتریک هنگامی که یک میدان الکتریکی خارجی اعمال می‌شود، بارهای مثبت و منفی درون مولکول‌ها یا اتم‌ها کمی از هم جابجا می‌شوند و این جابجایی منجر به تشکیل یک گشتاور دوقطبی در هر مولکول می‌گردد. اگر تمامی این گشتاورهای دوقطبی در یک حجم واحد جمع شوند، برداری به نام بردار قطبش حاصل می‌شود که نشان‌دهنده‌ی چگالی گشتاورهای دوقطبی در یک نقطه از ماده است. قطبش با توصیف فضایی و مادی به ترتیب به صورت زیر نمایش داده می‌شود:

¹ Push-Forward

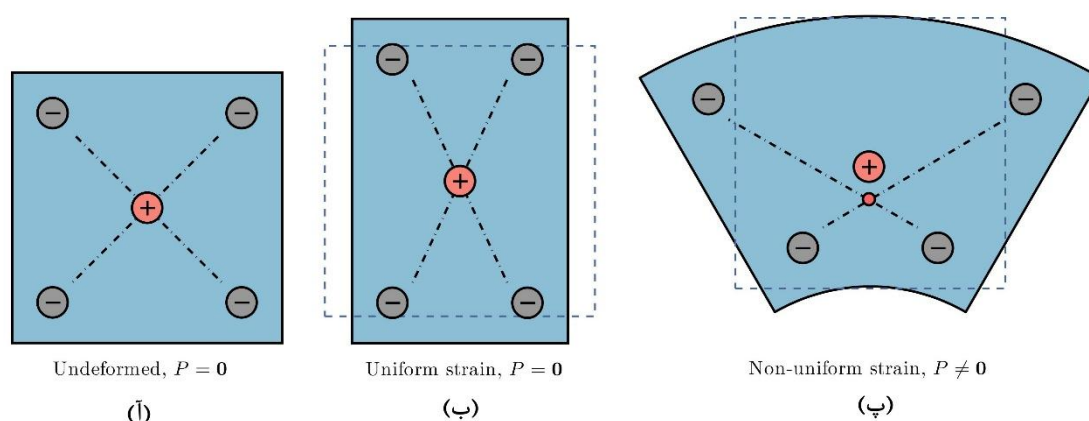
² Pull-Back

$$\mathbf{p}^\phi(\mathbf{x}, t) \quad [C/m^2] \quad (3-23-1)$$

$$\mathbf{P}^\phi(\mathbf{X}, t) = J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{p} \quad (3-23-2)$$

که در آن $\mathbf{F}$ تانسور گرادیان تغییر شکل و J دترمینان گرادیان تغییر شکل است.

بردار قطبش در تغییر شکل یکنواخت و غیریکنواخت در شکل ۳-۵ نمایش داده شده است.



شکل ۳-۵: بردار قطبش تحت تغییر شکل (ب) بکنواخت (پ) غیریکنواخت [۷۱]

برای بیان اثرات الکتریکی در مواد، علاوه بر میدان الکتریکی $\mathbf{E}$ ، میدان دیگری به نام میدان جابجایی دی‌الکتریک $\mathbf{D}$ معرفی می‌شود. این کمیت به صورت ترکیبی از میدان الکتریکی آزاد و قطبش ماده تعریف می‌گردد:

$$\mathbf{D} = \mathbf{P}^\phi + \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (3-24)$$

که در آن ε_0 ثابت دی‌الکتریک خلأ است. اهمیت میدان جابجایی دی‌الکتریک در این است که قوانین ماکسول در حضور مواد دی‌الکتریک به شکل ساده‌تری بیان شوند؛ به گونه‌ای که تنها به بارهای آزاد وابسته باشند و اثر بارهای القایی ناشی از قطبش در آن مستتر گردد.

در غیاب جریان آزاد بار، میدان $\mathbf{D}$ قانون گاوس را ارضا می‌کند:

$$\text{div } \mathbf{D} = \rho_0^{\text{free}} \quad (3-25)$$

که در آن ρ_0^{free} چگالی بار آزاد بر واحد حجم است.

۴.۳.۳.۳. نقش سینماتیک الکتریکی در کوپل‌شدگی الکترومکانیکی

سینماتیک الکتریکی، پل بین تغییر شکل و پاسخ الکتریکی را فراهم می‌کند:

- کوپل‌شدگی پیزوالکتریک: میدان الکتریکی E با کمّیات کرنشی به صورت خطی درگیر شده و قطبش ناشی از کرنش مکانیکی را ایجاد می‌کند.
 - کوپل‌شدگی فلوکسوالکتریک: میدان الکتریکی با گرادیان‌های کرنش (یا به طور معادل با میدان‌های میکرومورفیک نظیر $\bar{F}$ و $\bar{G}$) کوپل می‌شود و امکان ایجاد قطبش حتی در مواد مرکزمتقارن با وجود کرنش‌های ناهمگن را فراهم می‌سازد.
 - پلی بین مقیاس‌ها: تبدیل‌های پیش‌روی و پس‌روی سازگاری میان توصیف‌های میکروساختاری (مادی) و پاسخ الکتریکی ماکروسکوپی (فضایی) را تضمین می‌کنند.
- سینماتیک الکتریکی بنیان کوپل‌شوندگی چندفیزیکی را تشکیل داده و امکان توصیف مواد الکترومکانیکی در مقیاس‌های طولی مختلف را فراهم می‌سازد.

۴.۳. چگالی‌های انرژی کرنشی

در فرمول‌بندی حاضر، چگالی انرژی داخلی U_0 به صورت جمعی از سه مؤلفه اصلی در نظر گرفته می‌شود: چگالی انرژی داخلی مکانیکی-الکتریکی (ψ_0^{mech}) ، چگالی انرژی داخلی کاملاً الکتریکی (ψ_0^{elec}) و چگالی انرژی داخلی فلکسوالکتریک (ψ_0^{flexo}) . به طور معادل [۶۲]:

$$U_0(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) = \psi_0^{mech}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) + \psi_0^{elec}(\mathbf{F}, \mathbf{E}) + \psi_0^{flexo}(\{\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{F}}\}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) \quad (۲۶-۳)$$

۱.۴.۳. چگالی انرژی داخلی مکانیکی-الکتریکی

بخش مکانیکی به سه مؤلفه تقسیم می‌شود: سهم ماکروسکوپی، سهم میکرومورفیک و سهم پیونددهنده مقیاس‌ها:

$$\psi_0^{elast}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) = \psi_0^{macro}(\mathbf{F}, \mathbf{E}) + \psi_0^{micro}(\bar{\mathbf{G}}) + \psi_0^{scale}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}) \quad (۲۷-۳)$$

یک انتخاب مناسب عبارت است از:

سهم ماکروسکوپی (کوپلینگ نئوهوکنین تراکم‌پذیر^۱ به همراه الکتروالاستیک):

$$\begin{aligned} \psi_0^{macro}(\mathbf{F}, \mathbf{E}) = & \frac{1}{2} \lambda \ln^2 J + \frac{1}{2} \mu [\mathbf{F} : \mathbf{F} - n^{\dim} - 2 \ln J] \\ & + \varepsilon_0 [\alpha \mathbf{I} + \beta \mathbf{C} + \gamma \mathbf{C}^{-1}] : \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \end{aligned} \quad (28-3)$$

که در آن λ و μ ثوابت لامه^۲، ε_0 ثابت گذردهی خلأ، و α ، β و γ پارامترهای کوپلینگ الکتروالاستیسیته هستند.

سهم میکرومورفیک:

$$\psi_0^{micro}(\bar{\mathbf{G}}) = \frac{1}{2} \mu \ell \bar{\mathbf{G}} : \bar{\mathbf{G}} \quad (29-3)$$

که در آن ℓ مقیاس طول ذاتی^۳ است. این جمله موجب وابستگی به اندازه در پاسخ مکانیکی می‌شود.

سهم پیونددهنده مقیاس‌ها (کوپلینگ ماکرو $\leftrightarrow$ میکرو):

$$\psi_0^{scale}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}) = \frac{1}{2} p (\mathbf{F} - \bar{\mathbf{F}}) : (\mathbf{F} - \bar{\mathbf{F}}) \quad (30-3)$$

که در آن $p \geq 0$ یک پارامتر جریمه‌مانند است که سازگاری بین تغییر شکل‌های ماکروسکوپی و میکرومورفیک را تضمین می‌کند.

رابطه (۳۰-۳) در واقع به‌عنوان یک عبارت پنالتی^۴ در تابع پتانسیل کلی در نظر گرفته شده است. هدف از افزودن این جمله، وادار کردن تانسور تغییر شکل میکروسکوپی ($\bar{\mathbf{F}}$) به همگرایی با تانسور تغییر شکل ماکروسکوپی ($\mathbf{F}$) است، به‌گونه‌ای که در حد مناسب دو میدان یکسان شوند. p یک پارامتر شبه‌جریمه^۵ است که بزرگی آن میزان سخت‌گیری در تحمیل شرط $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$ را کنترل می‌کند. بدین ترتیب، هرچه مقدار p افزایش یابد، اختلاف بین دو میدان تغییر شکل انرژی بیشتری در سیستم ایجاد کرده و در نتیجه حل عددی تمایل دارد تا $\bar{\mathbf{F}}$ را به $\mathbf{F}$ نزدیک کند.

¹ compressible neo-Hookean

² Lamé constants

³ intrinsic length-scale

⁴ penalty term

⁵ penalty parameter

از دیدگاه محاسباتی، افزودن چنین جمله‌ای یک روش ضعیف^۱ برای اعمال قیود هم‌ارزی بین میدان‌های ماکروسکوپی و میکروسکوپی است. برخلاف روش‌های مقیدسازی صریح (مانند روش لاگرانژ)، در این روش قید به صورت تدریجی و وابسته به مقدار پارامتر p اعمال می‌شود. در نتیجه، با انتخاب مناسب p ، می‌توان ضمن حفظ پایداری عددی، همگرایی کافی بین $\mathbf{F}$ و $\bar{\mathbf{F}}$ را تضمین نمود.

شکل‌های جایگزین متعددی برای کوپلینگ مقیاس (رابطه ۳-۳۰) مانند $\psi_0^{scale}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}) = \frac{1}{2} p [\bar{\mathbf{F}}^T \cdot \bar{\mathbf{F}} - C]^2$ یا $\psi_0^{scale}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}) = \frac{1}{2} p [\mathbf{F}^{-1} \cdot \bar{\mathbf{F}} - I]^2$ وجود دارند [۶۲].

۲.۴.۳. چگالی انرژی داخلی الکتریکی

چگالی انرژی الکتریک (دی‌الکتریک) مورد استفاده، فرم مرجع استاندارد وابسته به $\mathbf{F}$ و میدان الکتریک با توصیف مادی $\mathbf{E}$ است:

$$\psi_0^{elec}(\mathbf{F}, \mathbf{E}) = -\frac{1}{2} \varepsilon_0 J \mathbf{C}^{-1} : (\mathbf{E} \otimes \mathbf{E}) \quad (۳-۳۱)$$

رابطه‌ی اخیر تأثیر تغییر شکل را بر انرژی الکتریک ذخیره‌شده در دی‌الکتریک بازتاب می‌دهد.

رابطه‌ای که در اینجا برای انرژی الکتریک نوشته شد، در واقع همان چگالی انرژی الکترواستاتیکی ماکسول^۲ است؛ اما برخلاف حالت رایج که در پیکره کنونی (فضایی) توصیف می‌شود در در پیکره مرجع (مادی) بیان شده است. در الکترومغناطیس کلاسیک، چگالی انرژی الکتریک در پیکره فضایی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$w = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} \quad (۳-۳۲)$$

هنگام انتقال از پیکره کنونی به پیکره مرجع، نداشت بین دو فضا وارد شده و منجر به حضور ژاکوبین و تانسور $\mathbf{C}^{-1}$ می‌گردد. به دلیل انتخاب نوع تابع انرژی پتانسیل (فرمول‌بندی از نوع آنتالپی) و تعریف میدان الکتریک به صورت $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ در اصل تغییرات، علامت منفی در رابط (۳-۳۱) ظاهر می‌شود.

از آنجا که رابطه (۳-۳۱) در واقع نداشت به جلو چگالی انرژی کلاسیک ماکسول به دستگاه مرجع به شمار می‌رود و در میدان الکتریک از اهمیت بالایی برخوردار است، مشارکت آن در چگالی انرژی کرنشی به طور جداگانه بیان شده و سهم آن با نماد ψ_0^{elec} نشان داده می‌شود.

^۱ weak enforcement

^۲ classical Maxwell energy density of an electric field in a dielectric

۳.۴.۳. چگالی انرژی داخلی فلکسوالکتریک

انرژی فلکسوالکتریک، $\bar{G}$ (یا معادل آن $\text{Grad } \mathbf{F}$) را با میدان الکتریکی کوپل کرده و مسئول قطبش ناشی از گرا دیان کرنش است. یک شکل پرکاربرد عبارت است از:

$$\psi_0^{flexo}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) = \nu (\mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{E}) \cdot (\bar{\mathbf{G}} : \mathbf{I}) = \nu \epsilon \cdot (\bar{\mathbf{G}} : \mathbf{I}) \quad (3-33)$$

که در آن ν پارامتر واقعی ماده فلکسوالکتریک^۱ است که از رابطه $\nu := \epsilon_0 \ell \nu'$ تعریف می‌شود که ν' یک پارامتر بدون بعد^۲ محسوب می‌گردد. شایان ذکر است که در نگارش تحقیق حاضر از ثابت پواسون استفاده نشده و نماد ν صرفاً برای پارامتر ماده‌ی فلکسوالکتریک به کار رفته است.

در نتیجه، چگالی انرژی داخلی کل مورد استفاده در مدل به صورت زیر است:

$$U_0(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) = \psi_0^{macro}(\mathbf{F}, \mathbf{E}) + \psi_0^{micro}(\bar{\mathbf{G}}) + \psi_0^{scale}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}) + \psi_0^{flexo}(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E}) + \psi_0^{elec}(\mathbf{F}, \mathbf{E}) \quad (3-34)$$

۵.۳. فرمول‌بندی تغییراتی و فرم ضعیف

در ابتدا زوج‌های انرژی تعریف شده و سپس فرم ضعیف مسئله ارائه می‌شود. لازم به ذکر است که تمامی روابط از معادله (۳-۳۵) به بعد مستقیماً استخراج شده و مبتنی بر منبع مستقلى نیستند.

۱.۵.۳. مشتقات ساختاری و مزدوج‌های انرژی^۳

کمیت‌های تنش مزدوج-انرژی مستقیماً به کمک مشتق‌گیری از چگالی‌های انرژی معرفی شده $\psi_0(\mathbf{F}, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{G}}, \mathbf{E})$ در بخش ۳.۳ نسبت به کمیت‌های سینماتیکی به دست می‌آیند. کمیت‌ها به ترتیب تنش پیولا ماکروسکوپی $(\mathbf{P})$ ، تنش پیولا میکرومورفیک $(\bar{\mathbf{P}})$ ، تنش دوگانه میکرومورفیک^۴ $(\bar{\mathbf{Q}})$ و جابجایی دی‌الکتریک $(\mathbf{D})$ خوانده می‌شوند:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial U_0}{\partial \mathbf{F}} \quad (3-35)$$

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{\partial U_0}{\partial \bar{\mathbf{F}}} \quad (3-36)$$

¹ flexoelectric material parameter

² a dimensionless material constant

³ Constitutive Derivatives and Energetic Conjugates

⁴ Double micromorphic stress

$$\bar{\mathbf{Q}} = \frac{\partial U_0}{\partial \bar{\mathbf{G}}} \quad (37-3)$$

$$\mathbf{D} = \frac{\partial U_0}{\partial \mathbf{E}_t} \quad (38-3)$$

۲.۵.۳. معادلات حاکم و اصول تغییراتی

معادلات حاکم بر سامانه‌ی کوپل الکترو-میکرومکانیکی از یک فرم تغییراتی ناشی می‌شوند. به‌طور خاص، از اصل دیریکله^۱ (اصل انرژی ساکن) برای استخراج روابط تعادل و شرایط مرزی به‌صورت یکپارچه استفاده شده است.

برای یک سامانه‌ی پایستار^۲، انرژی پتانسیل کل^۳ در پیکره مرجع به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\Pi^{\text{int}} = \int_{\mathcal{B}_0} U_0 dV + \int_{\Gamma_0} u_0 dA \quad (40-3)$$

که در آن U_0 و u_0 به ترتیب چگالی انرژی کرنش بر واحد حجم و سطح می‌باشند.

در حالت تعادل، انرژی پتانسیل کل سیستم باید نسبت به تغییرات دلخواه میدان‌های اولیه، ثابت باشد؛ به عبارت دیگر

$$\delta \Pi = \delta (\Pi^{\text{int}} - \Pi^{\text{ext}}) = 0 \quad (41-3)$$

کمینه کردن تغییرات انرژی پتانسیل کل منجر به معادلات تعادل خواهد شد.

$$\text{Div } \mathbf{P} + \mathbf{b}_0 = \mathbf{0} \quad (42-3)$$

$$\text{Div } \bar{\mathbf{Q}} - \bar{\mathbf{P}} = \mathbf{0} \quad (43-3)$$

$$\text{Div } \mathbf{D} - \rho_0^{\text{free}} = 0 \quad (44-3)$$

قابل توجه است که در محدوده‌ی تئوری محیط پیوسته کلاسیک، یعنی زمانی که اثرات میکرومورفیک و الکترومغناطیس نادیده گرفته شوند، معادله‌ی تعادل (۴۲-۳) به شکل مشابه $\text{Div } \mathbf{P} + \mathbf{b}_0 = \mathbf{0}$

¹ Dirichlet Principle

² conservative system

³ total potential energy

بازمی‌گردد. با این حال، $\mathbf{P}$ در این حالت همان $\mathbf{P}$ کلاسیک نیست؛ با در نظر گرفتن اثرات میکرومورفیک و الکترومغناطیس، اثرات توأمان تنش قطبش و مکسول در $\mathbf{P}$ لحاظ می‌شوند.

۳.۵.۳ فرم ضعیف مسأله‌ی کوپل شده

برای تغییرات مجاز دلخواه، فرم ضعیف معادلات حاکم به دست می‌آید.

$$\int_{\mathcal{B}_0} (\mathbf{P} : \text{Grad} \delta \mathbf{u}) dV - \int_{\mathcal{B}_0} (\mathbf{b}_0 \cdot \delta \mathbf{u}) dV - \int_{\Gamma} (\mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{u}) dA = 0 \quad (۴۵-۳)$$

$$\int_{\mathcal{B}_0} (\bar{\mathbf{P}} : \delta \bar{\mathbf{F}} + \bar{\mathbf{Q}} : \text{Grad} \delta \bar{\mathbf{F}}) dV - \int_{\Gamma} (\bar{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{u}) dA = 0 \quad (۴۶-۳)$$

$$\int_{\mathcal{B}_0} (\mathbf{D} \cdot \text{Grad} \delta \phi - \rho_0^{\text{free}} \delta \phi) dV - \int_{\Gamma} (\hat{\rho}_0^{\text{free}} \delta \phi) dA = 0 \quad (۴۷-۳)$$

که تحت شرایط مرزی بر بخش‌های جداگانه Γ اعمال می‌شوند. $\mathbf{T}$ ، $\bar{\mathbf{T}}$ و $\hat{\rho}_0^{\text{free}}$ به ترتیب ترکشن پیولا ماکروسکپی^۱ با توصیف مادی، ترکشن پیولا میکرومورفیک^۲ با توصیف مادی، چگالی بار آزاد بر واحد سطح^۳ با توصیف مادی و نیروی حجمی می‌باشند. معمولاً دو دسته شرایط مرزی از یکدیگر تمایز داده می‌شوند.

- شرایط ضروری: جابجایی $(\mathbf{u})$ ، تغییرشکل میکرومورفیک $(\bar{\mathbf{F}})$ و پتانسیل الکتریکی (ϕ) داده می‌شوند.

- شرایط طبیعی: تنش‌ها، تنش‌های میکرومورفیک و چگالی بار سطحی داده می‌شوند.

۱.۳.۵.۳ شرایط مرزی سینماتیکی

شرایط مرزی ضروری، که شامل جابجایی یا حرکت مشخص شده است، به عنوان مثال:

$$u = \underline{u}^{\text{pre}} \quad \text{on } \Gamma^{\varphi} \quad (\bar{A}-۴۸-۳)$$

در مقابل، شرایط مرزی طبیعی شامل تنش‌های سطحی مشخص شده است که از طریق معیارهای تنش بیان می‌شوند، برای مثال:

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{N} = \underline{\mathbf{T}}^{\text{pre}} \quad \text{on } \Gamma^{\mathbf{T}} \quad (\text{ب}-۴۸-۳)$$

^۱ macroscopic Piola traction

^۲ micromorphic Piola traction

^۳ density of free charge per unit area

۲.۳.۵.۳. شرایط مرزی میکرومورفیک

در شرایط ضروری و طبیعی، به ترتیب مقدار میدان میکرومورفیک و مشتق آن روی مرز مشخص می‌گردد، به‌طور نمونه

$$\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}^{pre} \quad \text{on } \Gamma^{\bar{\mathbf{F}}} \quad (\bar{\mathbf{A}}-۴۹-۳)$$

$$\bar{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{N} = \bar{\mathbf{T}}^{pre} \quad \text{on } \Gamma^{\bar{\mathbf{T}}} \quad (\bar{\mathbf{B}}-۴۹-۳)$$

در شرایط طبیعی، تراکشن‌های مرتبه بالاتر که مزدوج با $\bar{\mathbf{F}}$ یا $\bar{\mathbf{G}}$ هستند و از اصل تغییرات ناشی می‌شوند، تجویز می‌گردند.

علاوه بر این، شرایط اولیه وضعیت تغییرشکل میکروسکوپی را در زمان $t = 0$ مشخص می‌کنند. در حالت مرجع میکرو^۱، فرض بر این است که ماده فاقد هرگونه تغییرشکل (اعوجاج) داخلی است. این حالت با رابطه زیر توصیف می‌شود.

$$\bar{\mathbf{F}}(t = 0) \equiv \mathbf{I} \quad (\bar{\mathbf{P}}-۴۹-۳)$$

به عبارت دیگر، نشان می‌دهد که میکروساختار ماده در ابتدا تغییرشکل نیافته و با پیکربندی مرجع منطبق است. هر گونه انحراف از این هویت بیانگر کشیدگی، برش یا چرخش میکروسکوپی در هر نقطه ماده است و تغییرشکل‌های داخلی را نسبت به حالت اولیه مشخص می‌کند.

۳.۳.۵.۳. شرایط مرزی الکتریکی

مسائل الکترواستاتیک نیازمند شرایط مرزی مناسب هستند. در شرایط ضروری، پتانسیل الکتریکی بر روی بخشی از مرز تجویز می‌شود:

$$\phi = \phi^{pre} \quad \text{on } \Gamma^{\phi} \quad (\bar{\mathbf{A}}-۵۰-۳)$$

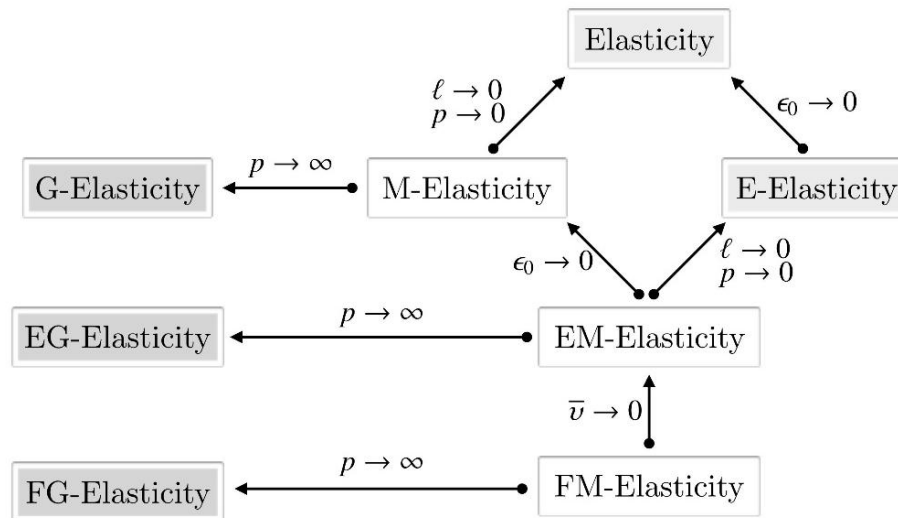
در شرایط طبیعی، چگالی بار سطحی تجویز شده و به صورت شار نرمال میدان $\mathbf{D}$ بیان می‌گردد:

$$-\mathbf{D} \cdot \mathbf{N} = \bar{\rho}^{pre} \quad \text{on } \Gamma^{\mathbf{D}} \quad (\bar{\mathbf{B}}-۵۱-۳)$$

¹ reference micro-state

این شرایط مکمل معادلات ماکسول بوده و تضمین می کنند که مسأله مقدار مرزی به طور مناسب تعریف گردد.^۱

پیش از گسسته سازی مسأله، می توان دید با جایگذاری روابط (۲۸-۳)، (۲۹-۳)، (۳۰-۳)، (۳۱-۳) و (۳۳-۳) در رابطه (۳۴-۳) چند پارامتر کلیدی نوع کوپلینگ را مشخص می کنند. مدل میکرومورفیک در فلکسوالکتریسیته این امکان را فراهم می کند تا با تغییر پارامترهای مختلف، مسائل گوناگونی مورد بررسی قرار گیرند؛ همان گونه که در شکل ۳-۶ نشان داده شده است. این نمودار شماتیک، ساختاری مناسب برای طبقه بندی مدل های مختلف ارائه می دهد.



شکل ۳-۶: ارتباط بین مدل های مختلف کوپل شده ی الاستیسیته ی مکانیکی و الکتریکی در چارچوب میکرومورفیک [۶۲]

مدل FM-Elasticity بیانگر مسئله ی کوپل شده ی فلکسوالکتریسیته و الاستیسیته ی میکرومورفیک است. هنگامی که پارامتر جریمه مانند $p \rightarrow \infty$ میل کند، مدل به FG-Elasticity، یعنی الاستیسیته ی گرادیانی کوپل شده با فلکسوالکتریسیته، تبدیل می شود. با در نظر گرفتن پارامتر فلکسوالکتریسیته $\nu \rightarrow 0$ ، مسئله ی EM-Elasticity یا الکترو-میکرومورفیک حاصل می شود. لازم به ذکر است که در این تعریف، اثرات فلکسوالکتریسته در مدل EM-Elasticity حذف می شوند.

مسئله ی الکترو-الاستیسیته ی گرادیانی از مدل EM-Elasticity و در حالت $p \rightarrow \infty$ به دست می آید. علاوه بر این، دو مدل الاستیسیته ی میکرومورفیک (M-Elasticity) و الاستیسیته ی الکتریکی (E-Elasticity) از EM-Elasticity به ترتیب در حالتی که $\epsilon_0 \rightarrow 0$ و برقراری همزمان دو شرط

^۱ well-posed boundary value problem

$p \rightarrow 0$ و $\ell \rightarrow 0$ حاصل می‌شوند. به همین ترتیب، با میل کردن $p \rightarrow \infty$ از مدل M-Elasticity، مدل الاستیسیته‌ی گرادیانی (G-Elasticity) به‌دست می‌آید.

در نهایت، مسئله‌ی استاندارد الاستیسیته‌ی غیرخطی از M-Elasticity در حالت $p \rightarrow 0$ و $\ell \rightarrow 0$ و از E-Elasticity در حالت $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ حاصل می‌شود.

به‌طور کلی، هرگاه مقدار $\ell \equiv 0$ در نظر گرفته شود، فرض بر این است که $p \equiv 0$ نیز می‌باشد؛ این انتخاب موجب می‌شود تا پاسخ ماکروسکوپی و میکرومورفیک از یکدیگر جدا و بدون کوپل باقی بمانند.

۶.۳. گسسته‌سازی به روش المان محدود

فرموله‌سازی میکرومورفیک غیرخطی فلکسوالکتریسیته نیازمند یک روش عددی پایدار برای تقریب معادلات حاکم استخراج‌شده در بخش ۴.۳ می‌باشد. روش المان محدود چارچوب مناسبی را فراهم می‌کند، به‌طوری که فرم ضعیف معادلات تغییراتی^۱ به مجموعه‌ای از معادلات جبری گسسته می‌شود. در این بخش، گسسته‌سازی میدان‌های اولیه ارائه شده و روش خطی‌سازی و حل سیستم غیرخطی حاصل توضیح داده می‌شود.

۱.۶.۳. تقریب میدان‌های اولیه

هندسه‌ی مرجع $\mathcal{B}_0$ به المان‌های غیرهم‌پوشان^۲ تقسیم شده است. میدان‌های اولیه مسئله‌ی کوپل شده عبارتند از:

- حرکت ماکروسکوپی (u)
- تغییرشکل میکرومورفیک ($\bar{F}$)
- پتانسیل الکتریکی (ϕ)

هر یک از این میدان‌ها با استفاده از توابع پایه چندجمله‌ای پیوسته و قطعه‌قطعه^۳ تقریب زده می‌شوند که می‌توانند درجات مختلفی از درونیابی داشته باشند:

$$u^h = \sum_{I=1}^{nu} u_I N_I^u \quad (۵۲-۳)$$

$$\bar{F}^h = \sum_{I=1}^{n\bar{F}} \bar{F}_I N_I^{\bar{F}} \quad (۵۳-۳)$$

^۱ weak form of the variational equations

^۲ non-overlapping elements

^۳ continuous, piecewise polynomial basis functions

$$\phi^h = \sum_{I \in \phi} \phi_I N_I^\phi \quad (54-3)$$

که در آن N^ϕ ، $N^{\bar{F}}$ و N^φ به ترتیب توابع پایه مربوط به جابجایی، تغییر شکل میکرومورفیک و میدان الکتریکی هستند و $n\phi$ ، $n\bar{F}$ و $n\varphi$ تعداد درجات آزادی متناظر برای هر المان را مشخص می‌کنند.

میدان‌های مرتبه بالاتر به شکل زیر تقریب زده می‌شوند:

$$F^h = \sum \varphi_I \text{Grad} N_I^u \quad (55-3)$$

$$\bar{G}^h = \sum \bar{F}_I \text{Grad} N_I^{\bar{F}} \quad (56-3)$$

$$\mathbf{E}_I^h = \sum \phi_I \text{Grad} N_I^\phi \quad (57-3)$$

با جایگذاری تقریب میدان‌های جابجایی (φ)، میکرو گرادیان تغییر شکل ($\bar{F}$) و میدان پتانسیل الکتریکی (ϕ) در معادلات حاکم (بخش ۴.۳)، سه مجموعه معادله‌ی باقیمانده غیرخطی^۱ (R) برای هر یک از میدان‌ها حاصل می‌شود:

برای باقی‌مانده مکانیکی (جابجایی)، با فرض یک تغییر مجازی دلخواه $\delta\varphi$ داریم:

$$R_I^u := \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{P} : \text{Grad} N_I^u \, dV - \int_{\mathcal{B}_0} b_0 \cdot N_I^u \, dV - \int_{\Gamma_0} T \cdot N_I^u \, dA \doteq 0 \quad (58-3)$$

برای باقی‌مانده میکرومورفیک، با فرض یک تغییر مجازی دلخواه $\delta\bar{F}$ داریم:

$$R_I^{\bar{F}} := \int_{\mathcal{B}_0} \bar{\mathbf{P}} : N_I^{\bar{F}} \, dV - \int_{\mathcal{B}_0} \bar{\mathbf{Q}} : \text{Grad} N_I^{\bar{F}} \, dV - \int_{\Gamma_0} \bar{T} : N_I^{\bar{F}} \, dA \doteq 0 \quad (59-3)$$

برای باقی‌مانده الکتریکی، با فرض یک تغییر مجازی دلخواه $\delta\phi$ داریم:

$$R_I^\phi := \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{D} \cdot \text{Grad} N_I^\phi \, dV + \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0^{\text{free}} N_I^\phi \, dV - \int_{\Gamma_0} \hat{\rho}_0^{\text{free}} N_I^\phi \, dA \doteq 0 \quad (60-3)$$

روابط () گسترش یافته و به بردار باقی‌مانده کلی (R) و بردار جابجایی کلی (d) منجر خواهند شد.

$$R = [R^u, \quad R^{\bar{F}}, \quad R^\phi]^T \quad (61-3)$$

¹ nonlinear residual equation

$$d = [d^u, d^{\bar{F}}, d^{\phi}]^T \quad (۶۲-۳)$$

بردار جابجایی کلی شامل d^u ، $d^{\bar{F}}$ و d^{ϕ} است که بردارهای درجات آزادی متناظر با سه مجهول میدانی $(\phi, \bar{F}, u)$ هستند.

۲.۶.۳. خطی‌سازی و روش حل

سیستم گسسته‌شده به دلیل وجود غیرخطی بودن مادی و هندسی و همچنین ماهیت کوپل‌شده‌ی میدان‌های مکانیکی و الکتریکی، ذاتاً یک سامانه‌ی غیرخطی محسوب می‌شود. در چنین مسائلی، پاسخ سازه نه تنها تابع تغییرشکل‌های بزرگ و اثرات تغییر پیکربندی است، بلکه رفتار مادی نیز می‌تواند وابسته به کرنش، نرخ کرنش، و در مدل‌های پیشرفته، وابسته به قطبش و گرادیان‌های میکروسکوپی باشد. این عوامل باعث می‌شوند که روابط تنش-کرنش و همچنین معادلات تعادل به صورت غیرخطی درآیند و حل مستقیم آن‌ها امکان‌پذیر نباشد. افزون بر این، وجود درجات آزادی مرتبط با میدان‌های میکروسکوپی و پتانسیل الکتریکی، باعث ایجاد یک دستگاه معادلات چندمیدانی با اندرکنش شدید میان متغیرها می‌شود.

برای غلبه بر این چالش‌ها، از روش تکراری نیوتن-رافسون استفاده می‌شود که یکی از پایدارترین و قدرتمندترین روش‌های حل معادلات غیرخطی در تحلیل‌های اجزای محدود است. در این روش، در هر گام بارگذاری، حل به صورت افزایشی-تکراری انجام شده و میدان جابه‌جایی، متغیرهای میکروسکوپی، و بارهای الکتریکی تا همگرایی به‌روزرسانی می‌شوند. الگوریتم نیوتن-رافسون بر پایه تقریب خطی از دستگاه معادلات غیرخطی در اطراف نقطه حدس زده‌شده استوار است و با تشکیل ماتریس سختی مماسی، امکان دستیابی به نرخ همگرایی درجه دوم را فراهم می‌کند. به‌ویژه در تحلیل‌های کوپل‌شده، این روش با تشکیل ماتریس سختی بلوکی که شامل اثرات متقابل میان میدان‌ها است، نقش مهمی در پایداری عددی فرآیند حل دارد.

در هر تکرار، دستگاه معادلات غیرخطی $R(X) = 0$ حول مقدار جاری متغیرها خطی‌سازی می‌شود تا معادلات باقیمانده به صورت خطی تقریب زده شوند. حاصل این خطی‌سازی، رابطه‌ی استاندارد زیر است که مبنای الگوریتم نیوتن-رافسون محسوب می‌شود:

$$K^{(i)} \Delta d^{(i)} = -R^{(i)} \quad (۶۳-۳)$$

که در آن $\Delta d = [\Delta d^u, \Delta d^{\bar{F}}, \Delta d^{\phi}]^T$ نمو درجات آزادی و K ماتریس مماسی است که به صورت بلوکی و مطابق با کوپل بین زیرمسأله‌های مکانیکی، میکرومورفیک و الکتریکی تعریف می‌شود:

$$K = \begin{bmatrix} [K^{uu}] & [K^{u\bar{F}}] & [K^{u\phi}] \\ [K^{\bar{F}u}] & [K^{\bar{F}\bar{F}}] & [K^{\bar{F}\phi}] \\ [K^{\phi u}] & [K^{\phi\bar{F}}] & [K^{\phi\phi}] \end{bmatrix} \quad (۶۴-۳)$$

هر بلوک از مشتق‌گیری معادلات باقیمانده نسبت به درجات آزادی متناظر به دست می‌آید.

$$K_{IJ}^{uu} = \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^u)^T : \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{F}} : (\text{Grad } N_J^u) dV \quad (۶۵-۳)$$

$$K_{IJ}^{u\bar{F}} = \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^u)^T : \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \bar{\mathbf{F}}} : (N_J^{\bar{F}}) dV \quad (۶۶-۳)$$

$$K_{IJ}^{u\phi} = - \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^u)^T : \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{E}_t} \cdot (\text{Grad } N_J^\phi) dV \quad (۶۷-۳)$$

$$K_{IJ}^{\bar{F}u} = \int_{\mathcal{B}_0} (N_I^{\bar{F}})^T : \frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial \mathbf{F}} : (\text{Grad } N_J^u) dV + \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^{\bar{F}})^T : \frac{\partial \bar{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{F}} : (\text{Grad } N_J^u) dV \quad (۶۸-۳)$$

$$K_{IJ}^{\bar{F}\bar{F}} = \int_{\mathcal{B}_0} (N_I^{\bar{F}})^T : \frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial \bar{\mathbf{F}}} : (N_J^{\bar{F}}) dV + \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^{\bar{F}})^T : \frac{\partial \bar{\mathbf{Q}}}{\partial \bar{\mathbf{F}}} : (N_J^{\bar{F}}) dV \quad (۶۹-۳)$$

$$K_{IJ}^{\bar{F}\phi} = - \int_{\mathcal{B}_0} (N_I^{\bar{F}})^T : \frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial \mathbf{E}_t} \cdot (\text{Grad } N_J^\phi) dV - \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^{\bar{F}})^T : \frac{\partial \bar{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{E}_t} \cdot (\text{Grad } N_J^\phi) dV \quad (۷۰-۳)$$

$$K_{IJ}^{\phi u} = \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^\phi)^T : \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial \mathbf{F}} : (\text{Grad } N_J^u) dV \quad (۷۱-۳)$$

$$K_{IJ}^{\phi\bar{F}} = \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^\phi)^T : \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial \bar{\mathbf{F}}} : (N_J^{\bar{F}}) dV \quad (۷۲-۳)$$

$$K_{IJ}^{\phi\phi} = \int_{\mathcal{B}_0} (\text{Grad } N_I^\phi)^T : \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial \mathbf{E}_t} \cdot (\text{Grad } N_J^\phi) dV \quad (۷۳-۳)$$

روش حل تکراری به ترتیب زیر انجام می‌شود:

- مونتاژ^۱ بردار باقیمانده R و ماتریس مماسی K
- حل سیستم خطی شده برای به دست آوردن نمودار آزادی (Δd)

^۱ Assemble

- به‌روزرسانی درجات آزادی کلی $d^{(i+1)} = d^{(i)} + \Delta d$
 - بررسی همگرایی با استفاده از معیارهای نرم باقیمانده و افزایش‌های جابجایی، میکرومورفیک و الکتریکی. در صورت عدم برقراری شرایط همگرایی، مراحل قبل تکرار می‌شوند.
- استراتژی حل یکپارچه^۱ ضمن اطمینان از پایداری^۲، کوپل قوی بین پاسخ‌های مکانیکی، میکرومورفیک و الکتریکی را به خوبی لحاظ می‌کند.

^۱ monolithic

^۲ robustness

الگوریتم حل برای مسأله‌ی سه‌میدانی فلکسوالکتریسته به شکل زیر می‌باشد:

• برای هر گام بارگذاری: $n = 1 \dots N_{incr}$

- شمارنده‌ی تکرار را برابر $i = 0$ قرار دهید.
- میدان‌ها را مقداردهی کنید: $d_i = d^{n-1}$ که در آن $d = [d^u; d^{\bar{F}}; d^{\phi}]$ است.
- متغیرهای درونی و تاریخچه‌ای را در حالت فعلی d_i محاسبه کنید.
- تا زمانی که $i < \max_it$

▪ بردار باقی‌مانده کلی را مونتاژ کنید: $R(d_i) = [R^u; R^{\bar{F}}; R^{\phi}]$

▪ ماتریس سختی مماسی کلی را به صورت بلوکی تشکیل دهید:

$$K = \begin{bmatrix} K^{uu} & K^{u\bar{F}} & K^{u\phi} \\ K^{\bar{F}u} & K^{\bar{F}\bar{F}} & K^{\bar{F}\phi} \\ K^{\phi u} & K^{\phi\bar{F}} & K^{\phi\phi} \end{bmatrix}$$

▪ شرایط مرزی اساسی را بر K و R اعمال کنید (با روش‌هایی مثل حذف

سطر و ستون‌ها و یا به روش تراکم ایستا)

▪ دستگاه معادلات خطی $K\Delta d = -R$ را برای به‌دست آوردن نمو

$$\Delta d = [\Delta d^u; \Delta d^{\bar{F}}; \Delta d^{\phi}]$$

حل کنید:

▪ به‌روزرسانی میدان‌ها: $d_{i+1} = d_i + \Delta d$

▪ به‌روزرسانی متغیرهای درونی (تنش، گرادیان میکرو-تغییرشکل، جابجایی

الکتریکی و سایر متغیرهای لازم) در حالت جدید d_{i+1}

▪ بررسی همگرایی:

▪ اگر $\|R(d_{i+1})\| \leq \varepsilon_res$ و $\|\Delta d\| \leq \varepsilon_ \Delta d$ آنگاه همگرا شده است و مقدار

$d^n = d_{i+1}$ پذیرفته شده و حلقه خاتمه می‌یابد.

▪ $d_i = d_{i+1}$ و $i = i + 1$

○ پایان حلقه‌ی داخلی

○ اگر همگرایی حاصل نشد، گزارش خطا داده یا گام بارگذاری را کاهش دهید و مجدداً تکرار کنید.

• پایان حلقه‌ی بارگذاری.

• پردازش پس‌از حل: استخراج میدان‌ها، انرژی‌ها و کمیت‌های مشتق‌شده.

فصل چهارم: مدل سازی ها و تحلیل نتایج

در این فصل دو سیستم سازه ای برای بررسی در نظر گرفته شده اند: ورق حفره دار و تیر. انتخاب این دو سیستم بر این اساس صورت گرفته است که در ورق حفره دار تحت کشش یکنواخت (کشش دوطرفه)، در نواحی مجاور حفره مقادیر تنش و کرنش به طور قابل ملاحظه ای بیشتر از سایر نقاط بوده، در حالی که در نواحی دور از حفره میدان تنش و کرنش یکنواخت باقی می ماند. این ویژگی، مدل مذکور را به گزینه ای مناسب برای نشان دادن تفاوت میان نواحی دارای گرادیان کرنش و نواحی فاقد آن تبدیل می کند. همچنین، در این مثال اثر پارامتر مقیاس طول و نقش آن در پاسخ سازه مورد مطالعه قرار می گیرد. ورق و تیر تحت تغییر شکل های بزرگ تحلیل شده و بدین ترتیب توانایی مدل در شبیه سازی تغییر شکل های بزرگ نیز مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت.

در تحقیق حاضر، دو حالت متداول از شرایط مرزی تیر شامل تیر یک سر گیردار (طره) و تیر دوسر گیردار مورد بررسی قرار گرفته اند. این دو نوع شرط در مقیاس های میکرو و نانو به طور گسترده در طراحی حسگرها و عملگرها مورد استفاده قرار می گیرند. از آنجا که نوع شرط مرزی تأثیر قابل توجهی بر رفتار مکانیکی و توزیع تغییر شکل تیر دارد، تحلیل دقیق این شرایط از اهمیت ویژه ای برخوردار است. در واقع، بررسی رفتار تیر تحت این شرایط می تواند در شناسایی نواحی بحرانی، پیش بینی و پیشگیری از خرابی، و همچنین بهینه سازی عملکرد سیستم های مبتنی بر میکرو و نانوسازه ها نقش مؤثری ایفا کند. تحلیل شرایط مرزی را می توان بخش جدایی ناپذیر از مطالعه ی رفتار میکروتیرها و نانوتیرها دانست.

۰.۴ مشخصات مکانیکی مدل های تحت بررسی

مشخصات مکانیکی و الکتریکی مدل ورق برای بخش های ۱.۴، ۲.۴ و ۳.۴ در جدول ۴-۱ ارائه شده اند. شایان ذکر است که پارامترهای ارائه شده در جدول ۴-۱ بر اساس داده های موجود از تحقیق هیرشبرگر و همکاران [۷۲] و مک براید و همکاران [۶۲] انتخاب شده اند. این مراجع مبنایی برای مقایسه نتایج عددی به دست آمده در ادامه بخش خواهند بود.

جدول ۴-۱: مشخصات فیزیکی ماده [۷۲]

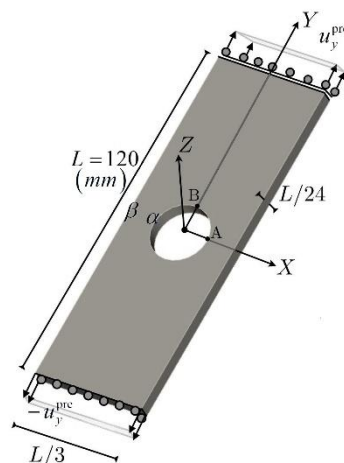
پارامتر	نماد	مقدار
مدول برشی	μ	$0.05 (MPa)$
پارامتر اول لامه	λ	$0.06 (Mpa)$
	α	0.2
	β	2
	γ	-2

در تمامی مثال‌ها واحد کمیت‌های طول، نیرو و پتانسیل الکتریکی به ترتیب بر حسب میلی‌متر (mm)، نیوتن (N) و کیلوولت (kV) در نظر گرفته شده‌اند. سایر کمیت‌ها نیز بر اساس این واحدها تعریف و تنظیم شده‌اند.

۱.۴ مطالعه‌ی رفتار مکانیکی-الکتریکی میکرومورفیک در غیاب اثرات فلکسوالکتریک

در این بخش، هندسه‌ی ورق حفره‌دار و مشخصات مکانیکی ماده معرفی می‌شوند (شکل ۴-۱). ورق مورد بررسی دارای ابعاد $L \times L/3 \times L/24$ بوده و شامل یک حفره‌ی دایره‌ای شکل با شعاع $r = L/12$ در مرکز تقارن خود می‌باشد. با توجه به اینکه ضخامت ورق نسبت به طول و عرض آن بسیار کوچک است، تغییرات میدان جابجایی و تنش در راستای ضخامت قابل اغماض می‌باشد. بنابراین بعد سوم حذف شده و تحلیل به صورت دوبعدی انجام می‌شود.

با توجه به اینکه بارگذاری (یا جابجایی) صرفاً در صفحه‌ی ورق اعمال می‌شود، فرض «تنش صفحه‌ای» برای این مسئله مناسب است. تحلیل با استفاده از امان‌های چهارضلعی انجام می‌گیرد. ابعاد و نواحی مرزی مسأله تحت جابجایی کششی در شکل ۴-۱ ارائه شده‌اند.



شکل ۴-۱: ورق کششی دارای حفره [۶۲]

ورق تحت جابجایی یکنواخت (کشش دوطرفه) قرار می‌گیرد. با توجه به تقارن هندسی و شرایط بارگذاری، تنها یک‌چهارم از ورق برای تحلیل مدل‌سازی می‌شود و شرایط مرزی مناسب بر روی لبه‌های تقارن اعمال می‌گردد. پارامتر شبه‌جریمه (p) برابر ۲.۵ در نظر گرفته می‌شود [۷۲]. از آن‌جا که تحقیق هیرشبرگر و همکاران [۷۲] مسئله را صرفاً در حالت الکتروالاستیسیته بررسی کرده است، در این حالت مقدار پارامتر شبه‌جریمه کوچک انتخاب می‌شود تا رفتار سیستم با نتایج الکتروالاستیسیته مطابقت داشته باشد (مطابق شکل ۳-۶). در مقابل، هنگامی که اثرات میکرومورفیک یا میکرو-فلکسوالکتریک نیز در تحلیل منظور شوند، مقدار این پارامتر به صورت $p = 250$ در نظر گرفته می‌شود.

تا پایداری عددی و دقت نتایج حفظ گردد. انتخاب این مقدار مطابق با کار مک براید و همکاران [۶۲] انجام شده است تا امکان مقایسه مستقیم نتایج با آن مطالعه فراهم گردد.

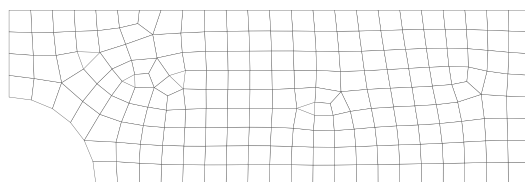
۱.۱.۴. تحلیل حساسیت اندازه مش

به منظور تعیین اندازه‌ی بهینه‌ی المان، ابتدا یک تحلیل حساسیت نسبت به مش در حالت الاستیک خطی انجام می‌شود. بدین منظور، چندین شبکه با تراکم‌های مختلف در نرم‌افزار *Abaqus* ایجاد گردید که در شکل ۲-۴ قابل مشاهده هستند. اطلاعات مربوط به این شبکه‌ها در جدول ۲-۴ ارائه شده است. برای بررسی حساسیت مش، چهار مدل اولیه (۱ تا ۴) از نوع نامنظم^۱ و سایر مدل‌ها (۵ تا ۷) از نوع منظم تولید شدند. در تمامی مدل‌ها، اندازه‌ی المان‌ها در کل دامنه تقریباً یکنواخت در نظر گرفته شد.

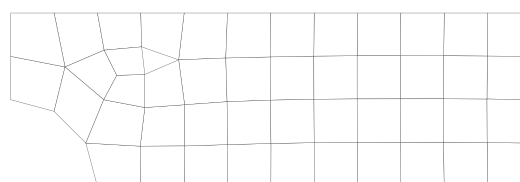
به طور کلی، در مش بهینه می‌توان در نواحی دور از حفره و یا مناطقی که گرادیان جابجایی کمتر است، ابعاد المان را افزایش داد تا زمان محاسبات کاهش یابد. با این حال، از آنجا که در این پژوهش کاهش زمان محاسبات در اولویت نبوده است، از این روش استفاده نشد و اندازه المان‌ها در کل دامنه تقریباً یکسان در نظر گرفته شد.

جدول ۲-۴: شبکه‌بندی‌های ساختارنیافته مختلف برای بررسی حساسیت اندازه مش

شماره شبکه	اندازه ضلع المان چهار گرهی	تعداد المان‌ها	تعداد گره‌ها
شبکه ۱	۵	۴۶	۶۳
شبکه ۲	۲.۵	۱۹۷	۲۳۱
شبکه ۳	۱.۲۵	۸۳۴	۹۰۶
شبکه ۴	۱	۱۳۳۵	۱۴۳۳
شبکه ۵	۱	۱۰۴۹	۱۱۲۸
شبکه ۶	۰.۵	۴۳۰۹	۴۴۶۶
شبکه ۷	۰.۲۵	۱۷۲۰۳	۱۷۵۱۶

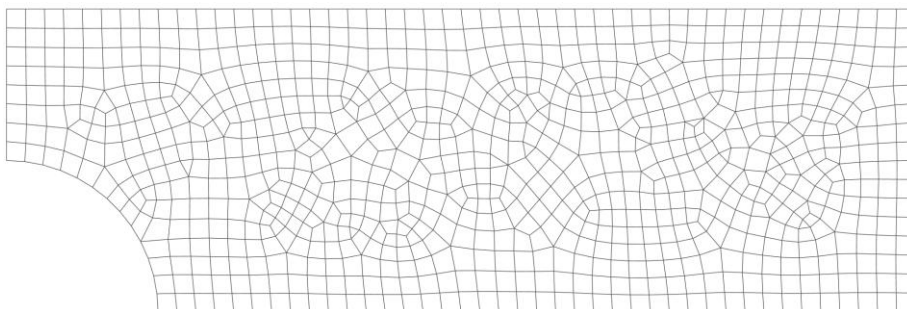


شکل (۲-۴-ب): شبکه با ۱۹۷ المان

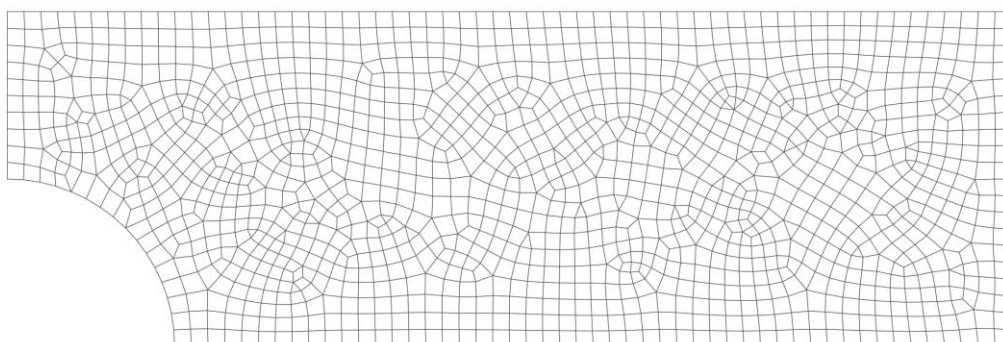


شکل (۲-۴-آ): شبکه با ۴۶ المان

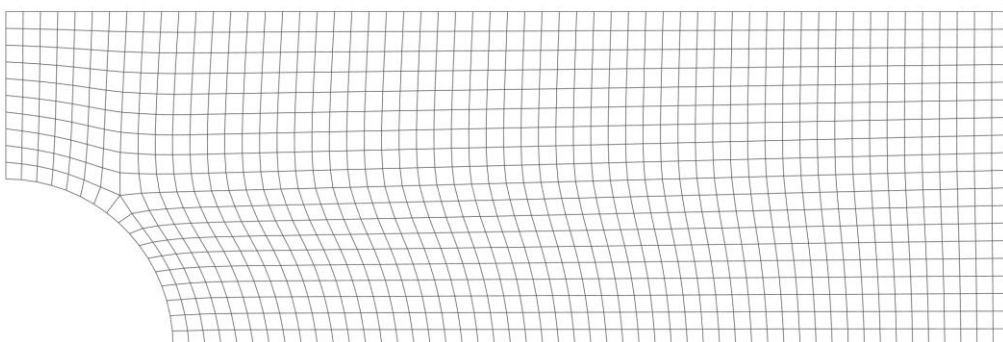
^۱ Unstructured



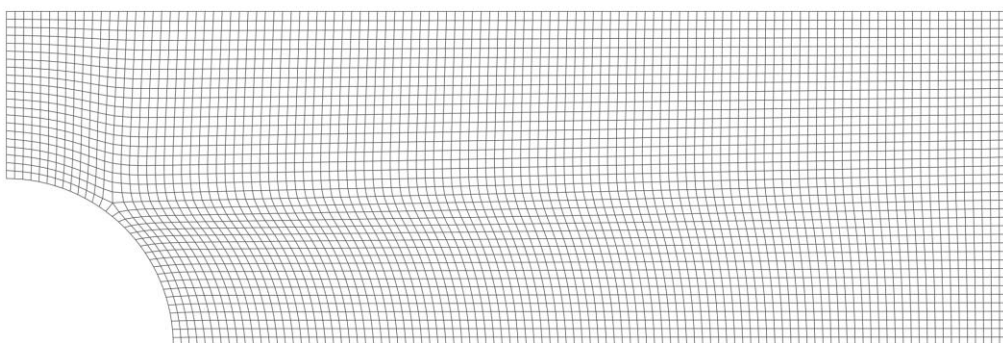
شکل (۴-۲-پ): شبکه با ۸۳۴ المان



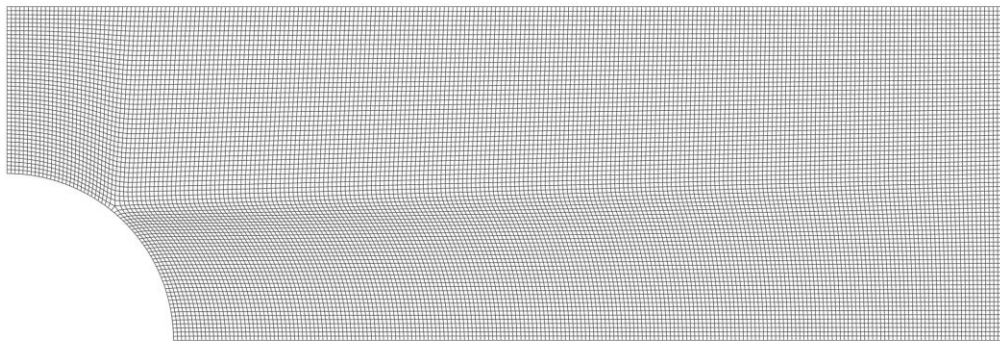
شکل (۴-۲-ت): شبکه با ۱۳۳۵ المان



شکل (۴-۲-ث): شبکه با ۱۰۴۹ المان



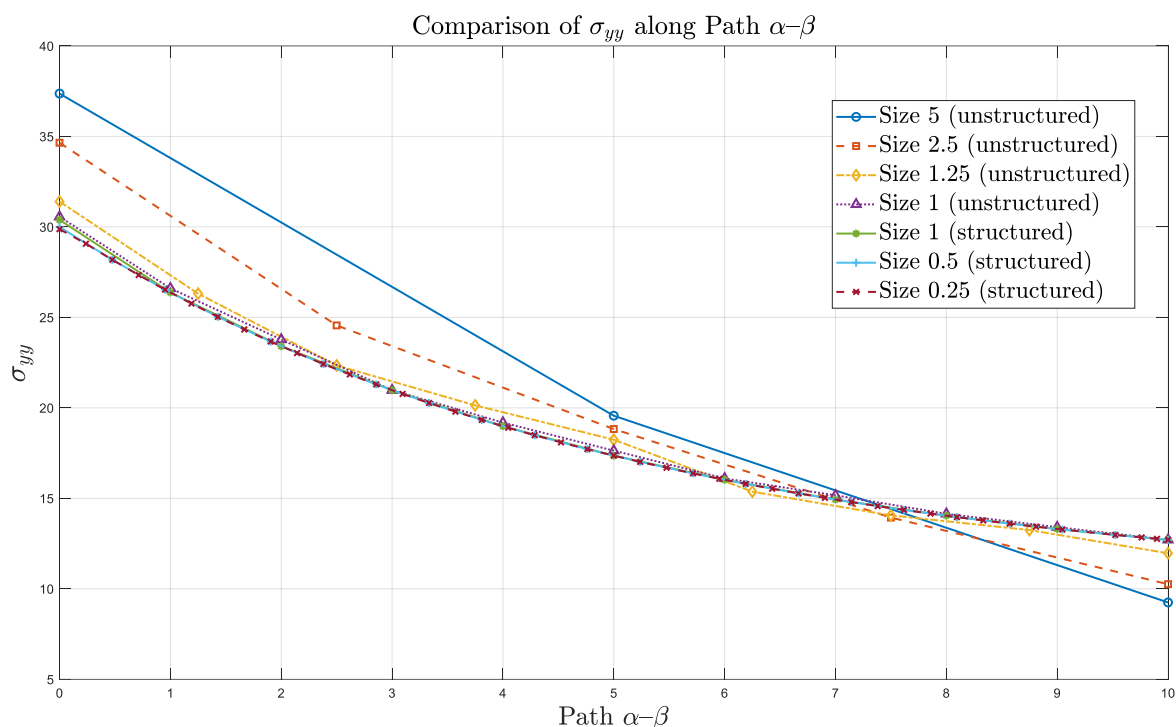
شکل (۴-۲-ج): شبکه با ۴۳۰۹ المان



شکل (۴-۲): شبکه با ۱۷۲۰۳ المان

نتایج حاصل بر اساس همگرایی توزیع تنش در شکل ۳-۴ ترسیم شده‌اند. محور افقی فاصله از لبه حفره (α) در مسیر $\alpha - \beta$ به میلی‌متر (mm) و محور قائم تنش σ_{yy} بر حسب مگاپاسکال (MPa) می‌باشد.

معیار اصلی برای انتخاب مش مناسب، انطباق رفتار مدل عددی با تقریب تحلیلی تمرکز تنش در اطراف حفره دایره‌ای است؛ به‌گونه‌ای که تنش در لبه‌ی حفره (σ_{yy}^{α}) تقریباً سه برابر تنش در نواحی دور از آن (σ_{yy}^{β}) باشد. مطابق شکل ۴-۱، از آنجا که مسیر بررسی توزیع تنش $\alpha - \beta$ ، برابر با شعاع حفره در نظر گرفته شده است، انتظار می‌رود مقدار تنش در لبه‌ی ورق اندکی بیش از یک‌سوم مقدار باشد.



شکل ۴-۳: تحلیل حساسیت مش در حالت الاستیک

بر اساس همگرایی مقدار تنش و همچنین اندازه‌گیری خطا نسبت به رفتار انتظاری، مش نهایی به اندازه تقریبی یک واحد با ساختار منظم انتخاب می‌شود.

۲.۱.۴. اعتبارسنجی مدل میکرومورفیک و بررسی پارامتر مقیاس طول

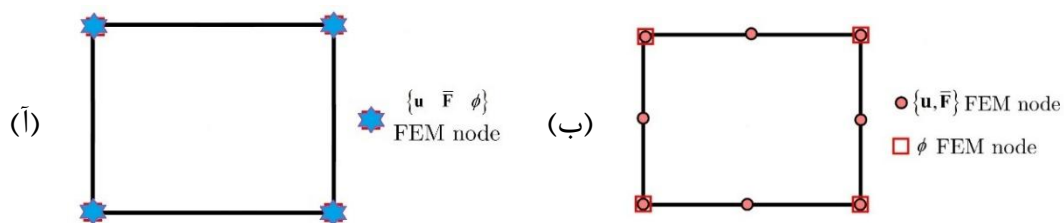
برای صحت‌سنجی مدل میکرومورفیک و اطمینان از سازگاری نتایج، در ابتدا پارامتر فلکسوالکتریسیته برابر صفر در نظر گرفته می‌شود ($\nu = \nu' = 0$). در این حالت، مسئله به یک مسئله کوپل مکانیکی-الکتریکی مبتنی بر تئوری میکرومورفیک ($M - Elasticity$) تبدیل می‌شود.

بارگذاری به‌صورت جابجایی کنترل‌شده اعمال می‌گردد. جابجایی‌های متقارن روی وجه بالایی و پایینی نوار اعمال می‌شوند و سایر شرایط مرزی از نوع طبیعی همگن هستند. طول ورق در پایان تحلیل $3L/2$ در نظر گرفته شده است که یک تغییرشکل بزرگ محسوب می‌شود. این بارگذاری در پنج گام افزایشی برابر اعمال می‌شود تا پاسخ غیرخطی و رفتار تحت تغییرشکل بزرگ رصد شود.

انتظار می‌رود اثرات میکرومورفیک در نواحی نزدیک حفره، جایی که تغییر شکل غیرهمگن رخ می‌دهد، کاملاً مشهود باشد. در مقابل، در نواحی دور از حفره، تغییر شکل تقریباً یکنواخت است و پاسخ سازه با تئوری کلاسیک الاستیسیته همخوانی دارد و مشابه مسأله الاستیسیته ($Elasticity$) باشد. به همین دلیل، برای تحلیل میکرومورفیک، تمرکز بر نقاط نزدیک حفره است و نقاط دورتر در نظر گرفته نشده‌اند. بر این اساس، نقطه A و B در پیرامون حفره، مطابق شکل ۴-۱ برای تحلیل در نظر گرفته می‌شوند.

انتظار می‌رود که برای هماهنگی بین میدان‌های ماکروسکوپی و میکرومورفیک، از تقریب درجه دوم برای جابجایی‌ها ($\mathbf{u}$) و میکرو-تغییر شکل ($\bar{\mathbf{F}}$) استفاده شود. در حالی که میدان پتانسیل الکتریکی (ϕ) به صورت خطی تقریب زده می‌شود. در تحلیل‌های کلاسیک الکترو-الاستیسیته معمولاً از تقریب هم‌رتبه برای جابجایی و پتانسیل الکتریکی استفاده می‌شود. اما انتخاب حاضر، تضمین می‌کند که سهم انرژی فلکسوالکتریک شامل مؤلفه‌های الکتریکی و میکرومورفیک، از چندجمله‌ای‌های هم‌درجه ساخته شود و سازگاری بین میدان‌ها حفظ شود.

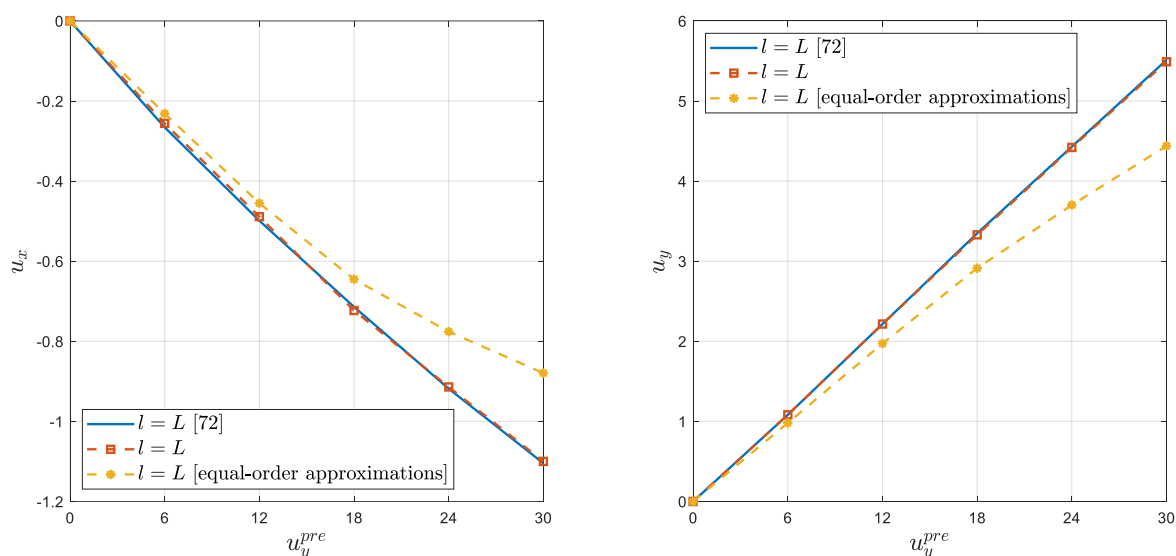
پیش از انجام تحلیل اصلی، لازم است درجه تقریب اجزای محدود برای میدان‌های مجهول ($\mathbf{u}, \bar{\mathbf{F}}, \phi$) نهایی شود. شکل ۴-۴ دو نوع توزیع گره در هر المان را نشان می‌دهد که مورد بررسی قرار می‌گیرند تا توزیع مناسب برای تحلیل تعیین شود و و دقت مدل مطابق با انتظار ما سنجیده شود.



شکل ۴-۴: المان های انتخابی برای تحلیل عددی و درجات تقریب میدان های اجزای محدود:

(آ) حالت «یک-یک-یک»، (ب) حالت «دو-دو-یک»

جابجایی در راستای محور x نقطه A (u_x^A) و جابجایی در راستای y نقطه B (u_y^B)، دو نقطه نزدیک به حفره که در شکل ۴-۱ مشخص شده اند، برای طول مقیاس $l = L$ با تقریب اجزای محدود درجه «یک-یک-یک» و درجه «دو-دو-یک» به ترتیب برای میدان های جابجایی، میکرومورفیک و الکتریکی استخراج شده و در قالب نمودار در برابر نتایج تحلیلی [۷۲] در شکل ۴-۵ مقایسه می گردد.

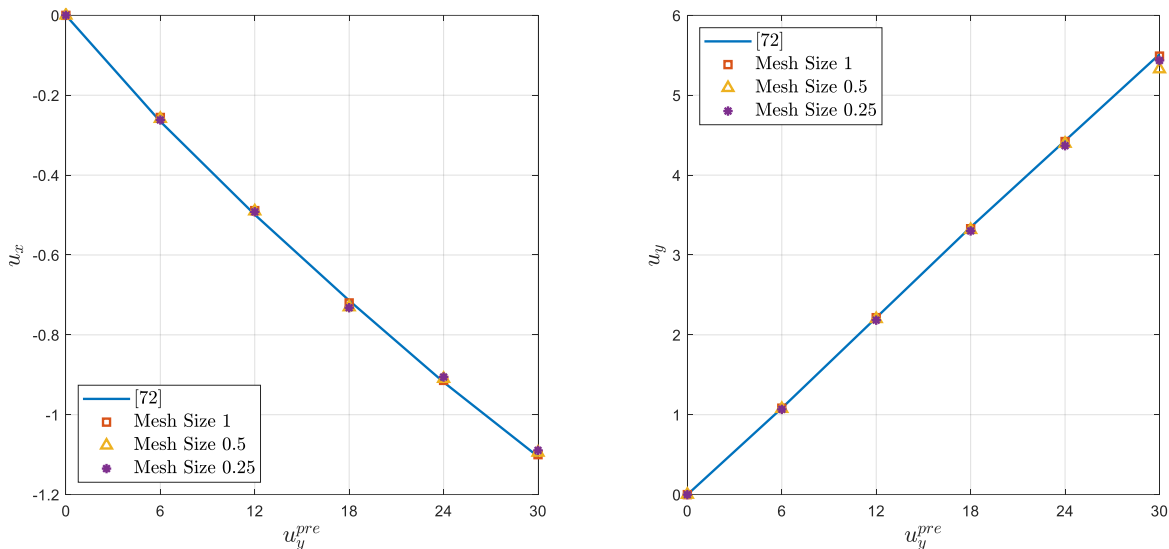


شکل ۴-۵: بررسی اثر انتخاب درجات تقریب اجزای محدود متفاوت بر جابجایی نقاط A و B

نتایج حاصل از انتخاب تقریب درجه یک اجزای محدود برای میدان ها نشان می دهد که دقت کافی تأمین نمی شود و مطابق انتظار، لازم است مطابق شکل ۴-۴ ب- میدان های مجهول اجزای محدود u ، $\bar{F}$ و ϕ به ترتیب از درجه ی «دو، دو و یک» تقریب زده شوند.

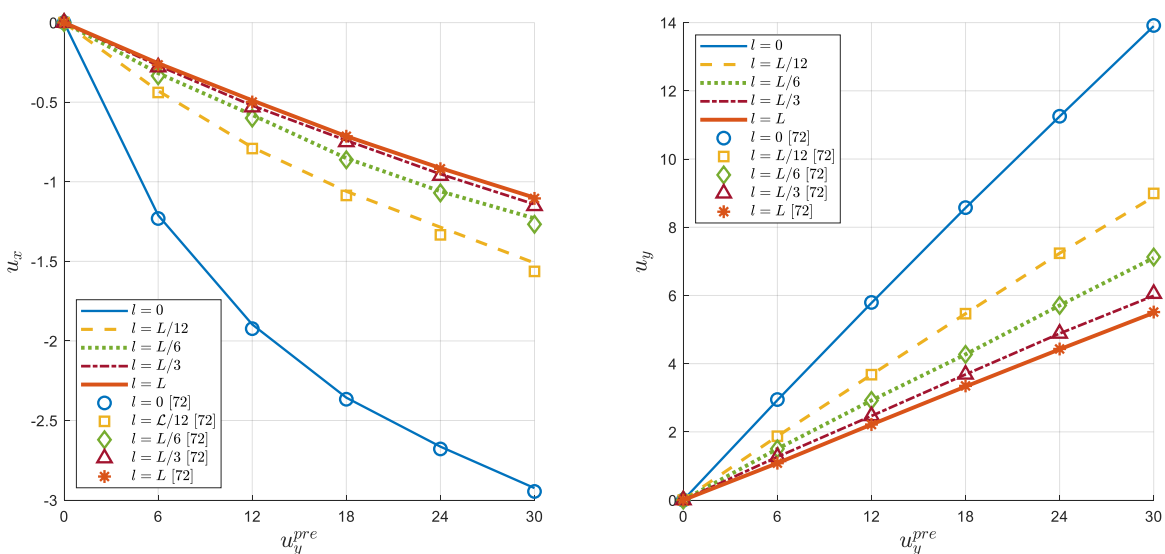
پیش از بررسی پارامتر مقیاس طول، مسئله مذکور بار دیگر برای شبکه های (۵)، (۶) و (۷) از جدول ۴-۲ حل می شود تا صحت انتخاب مش در حالت الکترو-الاستیکی (E -Elasticity) نیز مورد تأیید قرار گیرد.

مطابق نتایج نشان داده شده در شکل ۴-۶، کاهش اندازه المان‌ها موجب می‌شود پاسخ عددی اندکی به نتایج مرجع نزدیک‌تر گردد. با این حال، حتی مش با اندازه تقریباً یک (مدل ۵) نیز دقت مناسبی فراهم می‌آورد و استفاده از مش‌های با تفکیک بالاتر ضرورتی ندارد. هرچند کاهش بیشتر اندازه المان‌ها بهبود جزئی در نتایج ایجاد می‌کند، این بهبود بسیار ناچیز بوده و از منظر هزینه محاسباتی توجیه‌پذیر نیست.



شکل ۴-۶: تحلیل حساسیت مش در حالت الکترو-مکانیکی

برای بررسی اثرات میکرومورفیک، طول مقیاس میکرومورفیک (ℓ) در پنج مقدار مختلف $\ell \in \{0; L/12; L/6; L/3; L\}$ بررسی می‌شود؛ مقدار صفر متناظر با پاسخ الاستیسیته غیرخطی کلاسیک (*Elasticity*) است. نتایج ارائه شده در شکل ۴-۷، انطباق مناسب بین منحنی‌ها و اعتبار مدل عددی بدون در نظر گرفتن اثرات فلکسوالکتریسیته را تأیید می‌کند.

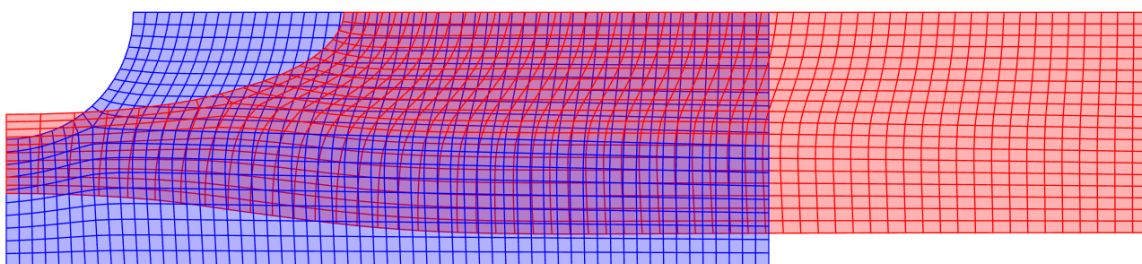


شکل ۴-۷: بررسی پارامتر طول مقیاس در مسأله $M - Elasticity$ تحت جابجایی کششی

مشاهده می شود افزایش طول مقیاس یا کاهش اندازه نمونه منجر به پاسخ سخت تر و افزایش مقاومت موثر می شود.

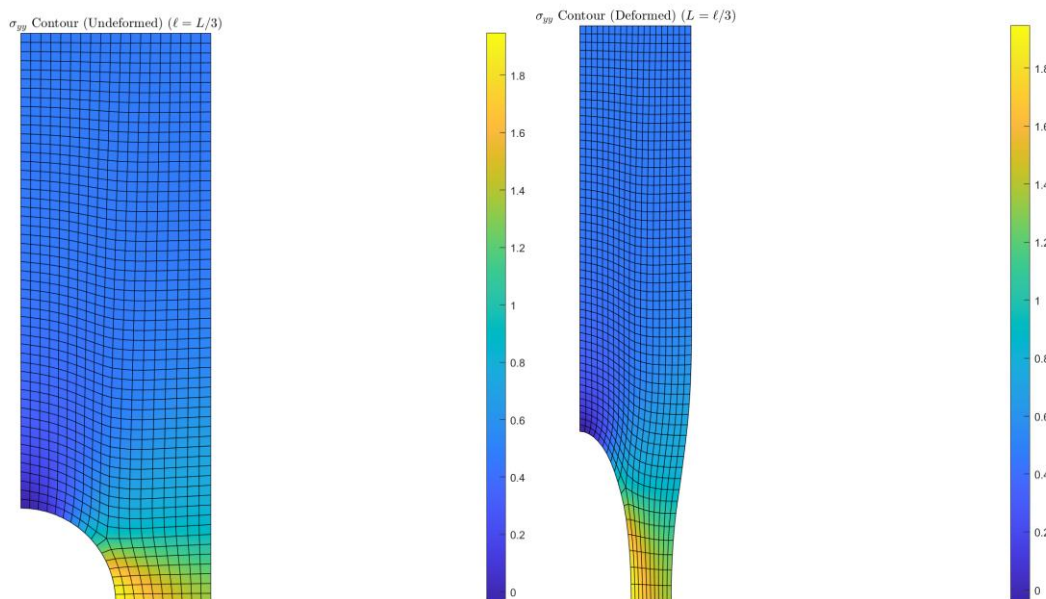
با به کارگیری چارچوب میکرومورفیک و وارد کردن پارامتر طول مقیاس داخلی (ℓ)، می توان اثرات اندازه را (که در مدل های کلاسیک نادیده گرفته می شوند) در نظر گرفت. به ویژه در مسائل فلکسوالکتریکی که پاسخ وابسته به گرادیان کرنش است، افزایش طول مقیاس یا کاهش ابعاد نمونه موجب افزایش سهم انرژی گرادیانی و در نتیجه پاسخ سخت تر (افزایش مقاومت موثر) می گردد. در مقابل، مدل های مبتنی بر تئوری پیوسته ی کلاسیک (معادل حالت $\ell = 0$) قادر به بازتولید این رفتار وابسته به اندازه نیستند و در مقیاس نانو احتمالاً نتایج آنها از واقعیت دور خواهد بود. بنابراین، برای تحلیل های دقیق فلکسوالکتریک در نانوساختارها و برای دستیابی به پیش بینی های قابل اعتماد در طراحی و تفسیر تجربی، وارد کردن و تعیین مناسب پارامتر طول مقیاس داخلی در مدل ضروری است.

برای پارامتر مقیاس طول $\ell = L/3$ ، وضعیت های تغییر شکل نیافته و تغییر شکل یافته در شکل ۴-۸ ارائه شده است.



شکل ۴-۸: شکل اولیه و نهایی ورق تحت جابجایی اعمالی

کانتورهای تنش قائم (σ_{yy}) برای پیکره ی ابتدایی و نهایی در شکل ۴-۹ نشان داده شده اند. لازم به ذکر است که در فرمول بندی عددی، ابتدا تنش پیولا محاسبه گردیده و سپس برای ترسیم کانتورها، به کمک رابطه (۳-۱۷) تبدیل مناسب به تنش کوشی ($\sigma = J \mathbf{P} \mathbf{F}^T$) انجام گرفته است.



شکل ۴-۹: کانتور تنش در ورق حفره‌دار (تغییر یافته و تغییر نیافته)

توجه شود که مقدار تنش σ_{yy} ثبت شده در شکل ۴-۹ بسیار ناچیز است. برای درک مهندسی بهتر، به کمک ثوابت لامه در جدول ۴-۱ مدول یانگ ماده برابر با $E = 0.1273 (MPa)$ می‌باشد که به‌طور چشمگیری کوچک‌تر از مقادیر رایج در مواد مهندسی است. این مقدار بیشتر با رفتار مواد بسیار نرم (مانند ژل‌ها یا فوم‌های نرم) سازگار است. لذا مقادیر پایین تنش نه به دلیل خطا در محاسبات، بلکه ناشی از ویژگی‌های ذاتی ماده است. به همین علت، حتی در حضور کرنش و گرادیان کرنش قابل توجه، تنش ایجاد شده در این ماده بسیار محدود باقی می‌ماند.

۲.۴ مطالعه ورق تحت جابجایی کششی (فعال سازی فلکسوالکتریسیته)

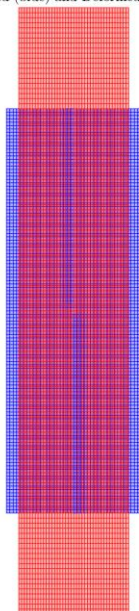
در این بخش، اثرات فلکسوالکتریسیته در رفتار مکانیکی-الکتریکی ورق حفره‌دار مورد بررسی قرار می‌گیرد. بدین منظور، پارامتر فلکسوالکتریسیته از مقدار صفر خارج شده و مقدار غیر صفر $\nu = 0.5$ برای آن در نظر گرفته می‌شود تا میدان الکتریکی القاشده ناشی از گرادیان کرنش در نواحی دارای ناهمگنی کرنش مورد ارزیابی قرار گیرد. سایر مشخصات مطابق جدول ۴-۱ می‌باشد.

۱.۲.۴ مطالعه ورق بدون حفره (بررسی نقش گرادیان کرنش)

در این بخش، به منظور بررسی نقش گرادیان کرنش در ایجاد پاسخ فلکسوالکتریک، حالتی از مدل در نظر گرفته شده است که ورق بدون حفره مورد تحلیل قرار می‌گیرد. با توجه به نبود ناپیوستگی هندسی و در نتیجه یکنواختی میدان کرنش، انتظار می‌رود که گرادیان کرنش در این حالت ناچیز باشد و در نتیجه هیچ میدان الکتریکی قابل توجهی در ماده القا نگردد.

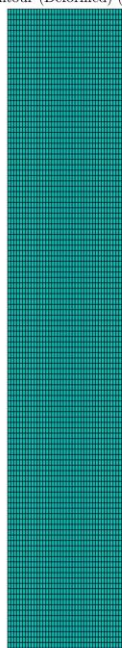
در ادامه، شکل های ۱۰-۴ و ۱۱-۴، ورق تغییر شکل یافته و کانتور کرنش مؤلفه های مختلف آن را نشان می دهند. هرچند مقادیر مولفه های کرنش متفاوت است، اما تمامی آن ها در طول ورق ثابت باقی می مانند. شایان ذکر است که در این حالت، به دلیل عدم وجود گرادیان های کرنش، میدان الکتریکی ناشی از اثر فلکسوالکتریسیته صفر است.

Undeformed (blue) and Deformed (red) Mesh

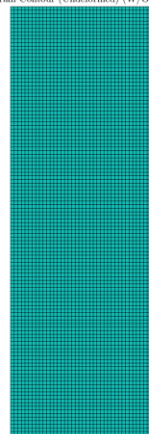


شکل ۱۰-۴: شکل تغییر یافته ورق بدون حفره

strain Contour (Deformed) (W/O hole)



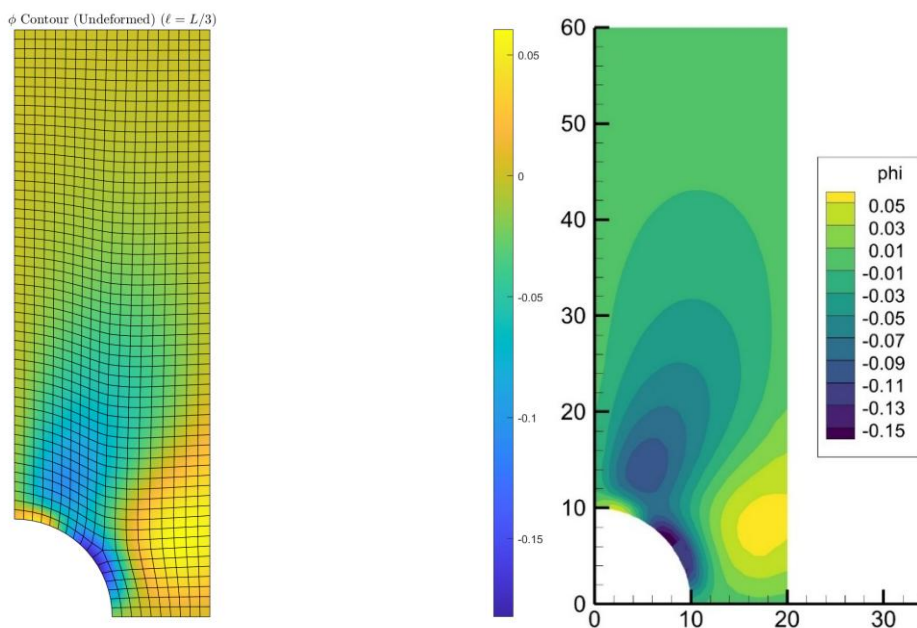
strain Contour (Undeformed) (W/O hole)



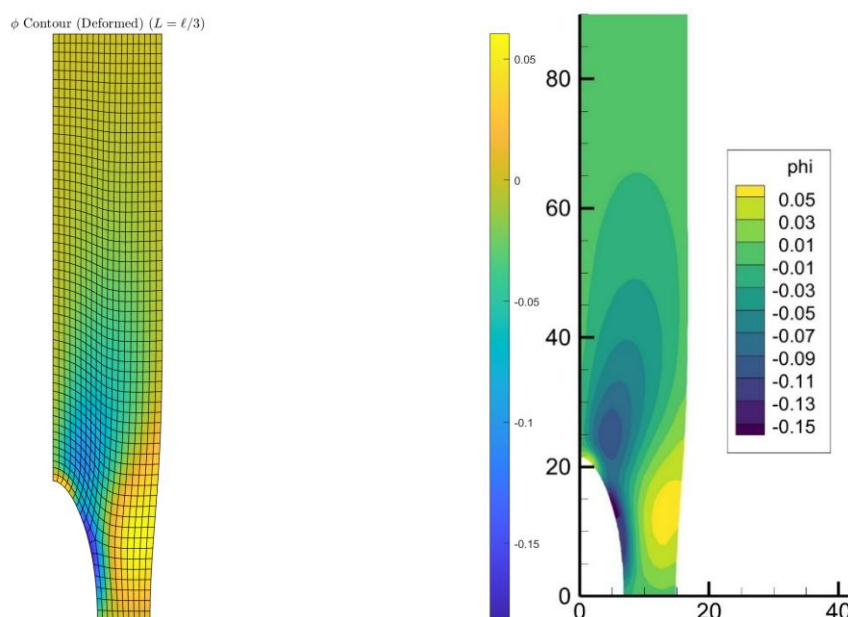
شکل ۱۱-۴: کانتور مولفه های کرنش

۲.۲.۴. مطالعه ورق حفره‌دار

میدان الکتریکی تولیدشده در اثر تغییرشکل مکانیکی محاسبه شده و کانتور شدت میدان الکتریکی در نواحی پیرامون حفره ترسیم می‌گردد (شکل ۴-۱۲ و ۴-۱۳). این تحلیل امکان مشاهده‌ی نحوه‌ی تمرکز میدان الکتریکی در نواحی با گرادیان کرنش بالا را فراهم می‌سازد و نقش مستقیم اثر فلکسوالکتریسیته در القای پاسخ‌های الکتریکی را نمایان می‌کند.



شکل ۴-۱۲: کانتور میدان الکتریکی ناشی از اعمال جابجایی در پیکره مرجع



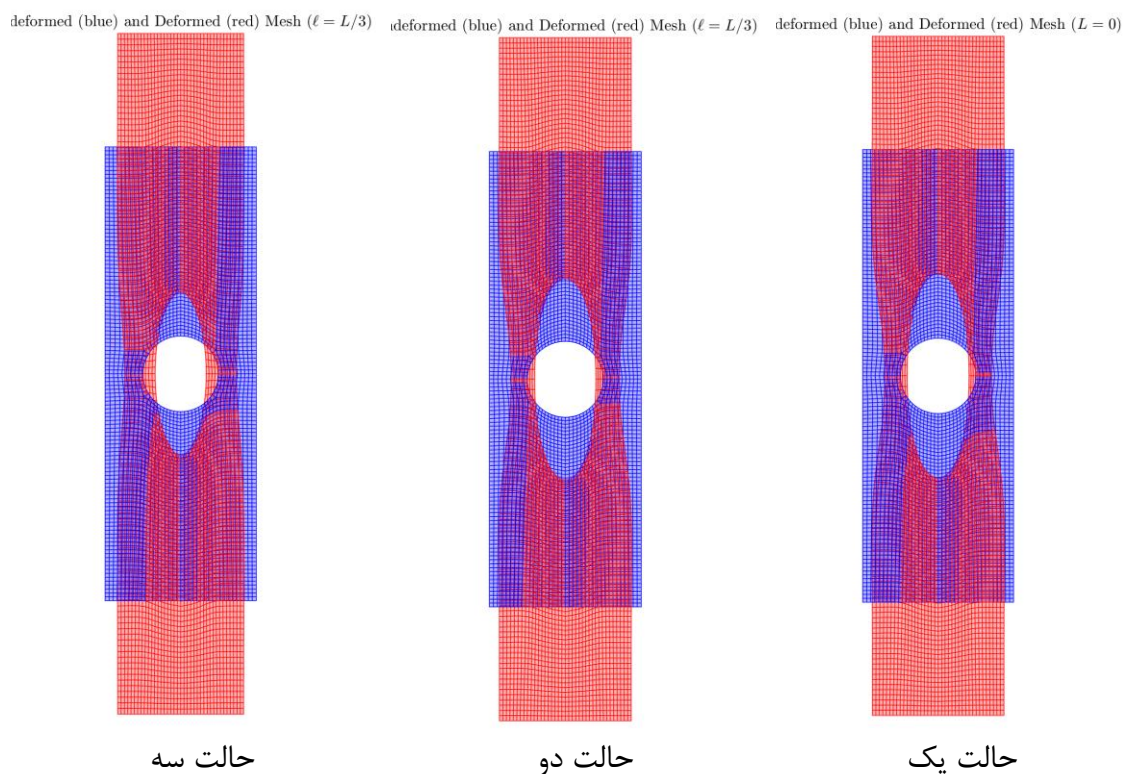
شکل ۴-۱۳: کانتور میدان الکتریکی ناشی از اعمال جابجایی در پیکره کنونی

در گام بعد، به منظور مقایسه‌ی جامع بین مدل‌های مختلف کوپل فیزیکی، سه حالت متمایز مورد تحلیل قرار می‌گیرند که در جدول ۳-۴ ارائه شده‌اند.

جدول ۳-۴: حالت‌های بررسی ورق حفره‌دار در کل دامنه

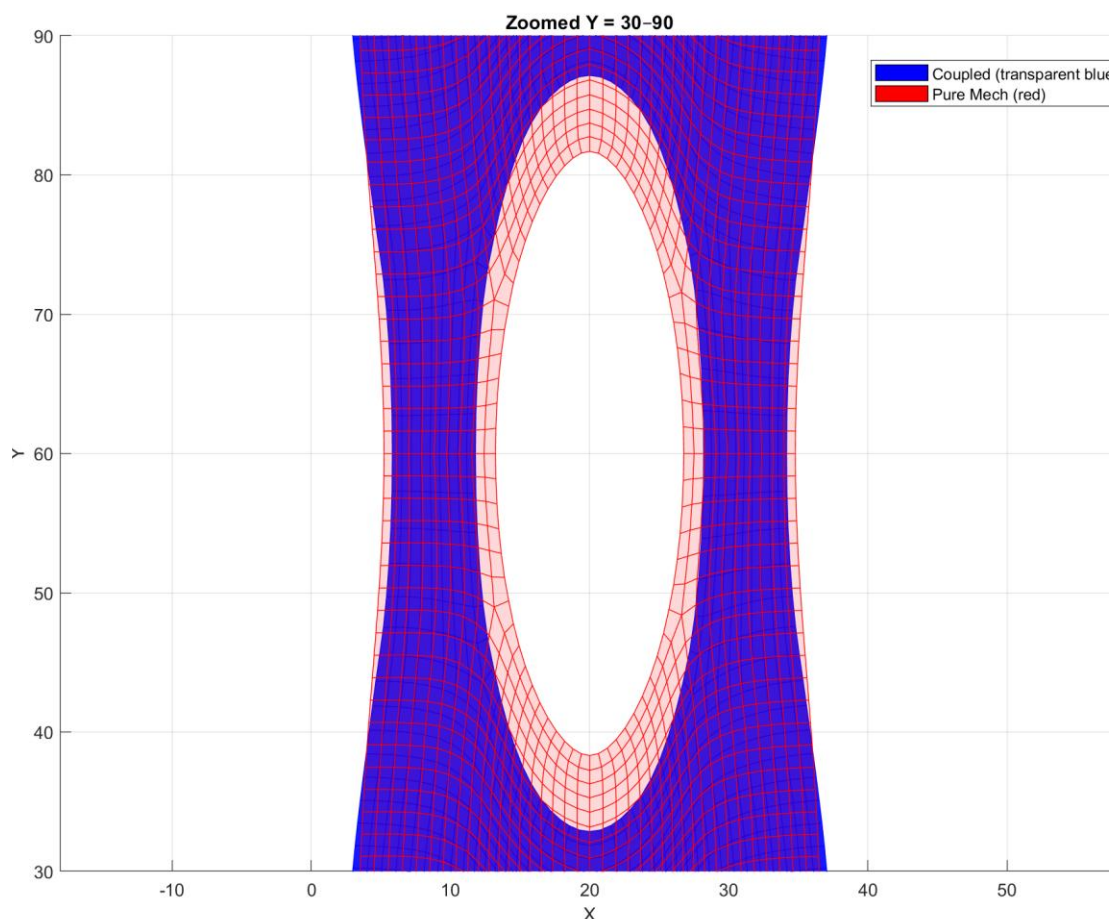
حالت	نوع کوپل		
یک	کوپل مکانیکی خالص (الاستیسیته غیر خطی)	$\ell = 0$	$\nu = 0$
دو	کوپل مکانیکی-الکتریکی (الکتروالاستیسیته میکرومورفیک)	$\ell = L/3$	$\nu = 0$
سه	کوپل مکانیکی-الکتریکی همراه با اثر فلکسو الکتریسیته (فلکسو الکتروالاستیسیته میکرومورفیک)	$\ell = L/3$	$\nu = 0.5$

برای افزایش دقت در نمایش رفتار کلی ورق و حذف اثرات ناشی از تقارن‌های عددی، تحلیل در این بخش بر روی هندسه‌ی کامل ورق (بدون استفاده از تقارن هندسی) انجام می‌شود. این رویکرد علاوه بر نمایش پاسخ واقعی‌تر سازه در شرایط بارگذاری متقارن، امکان مشاهده‌ی توزیع کامل تنش‌ها و تغییر شکل‌ها در کل دامنه‌ی ورق را فراهم می‌سازد. برای هر یک از سه حالت، شکل تغییر یافته‌ی ورق در شکل ۴-۱۴ ارائه شده‌اند



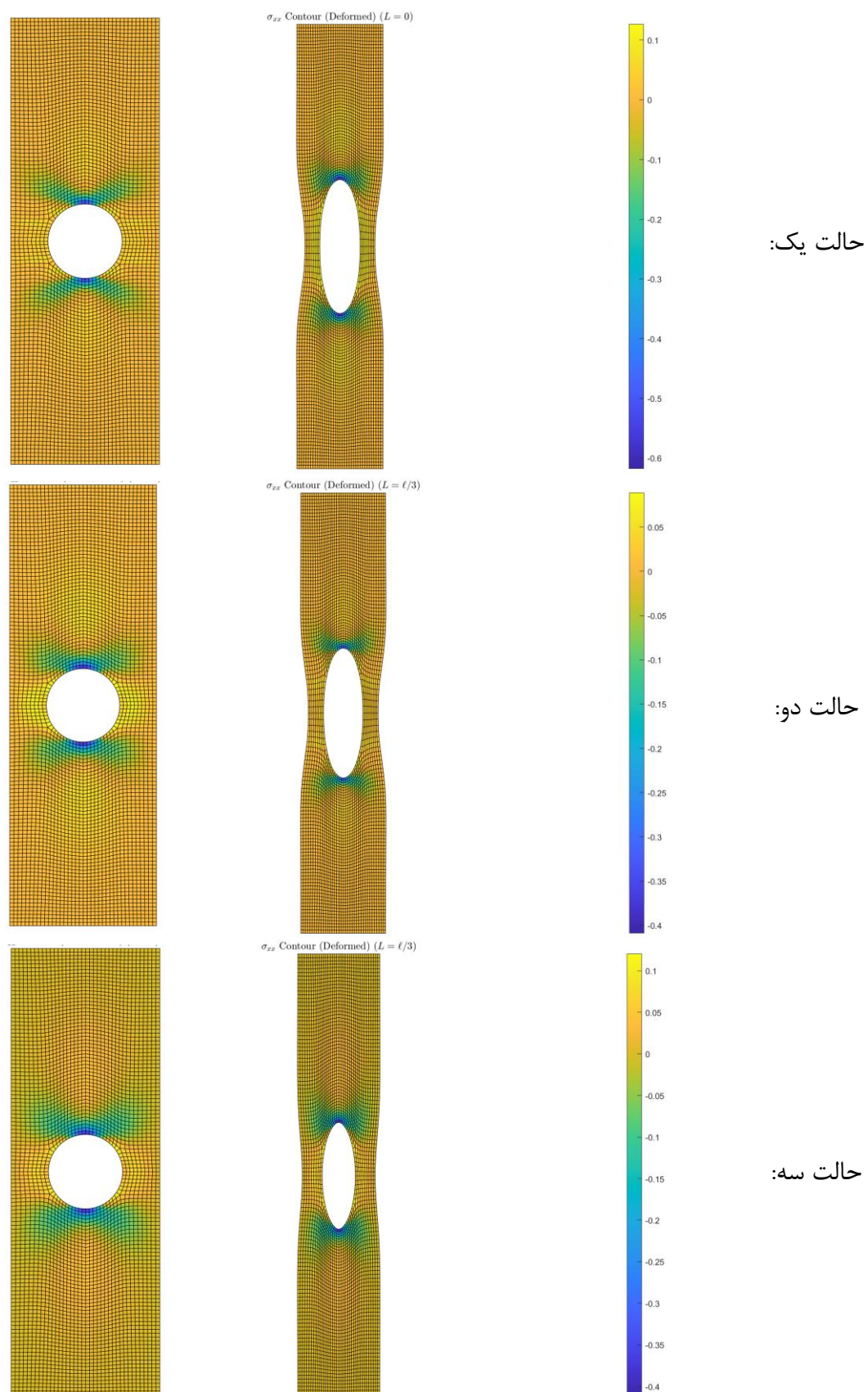
شکل ۴-۱۴: تغییر شکل ورق حفره‌دار تحت کوپل‌های مختلف

در ادامه، به منظور مقایسه‌ی بهتر حالت یک و سه، شکل تغییر یافته قسمت میانی ورق در دو حالت در شکل ۱۵-۴ نمایش داده می‌شود.

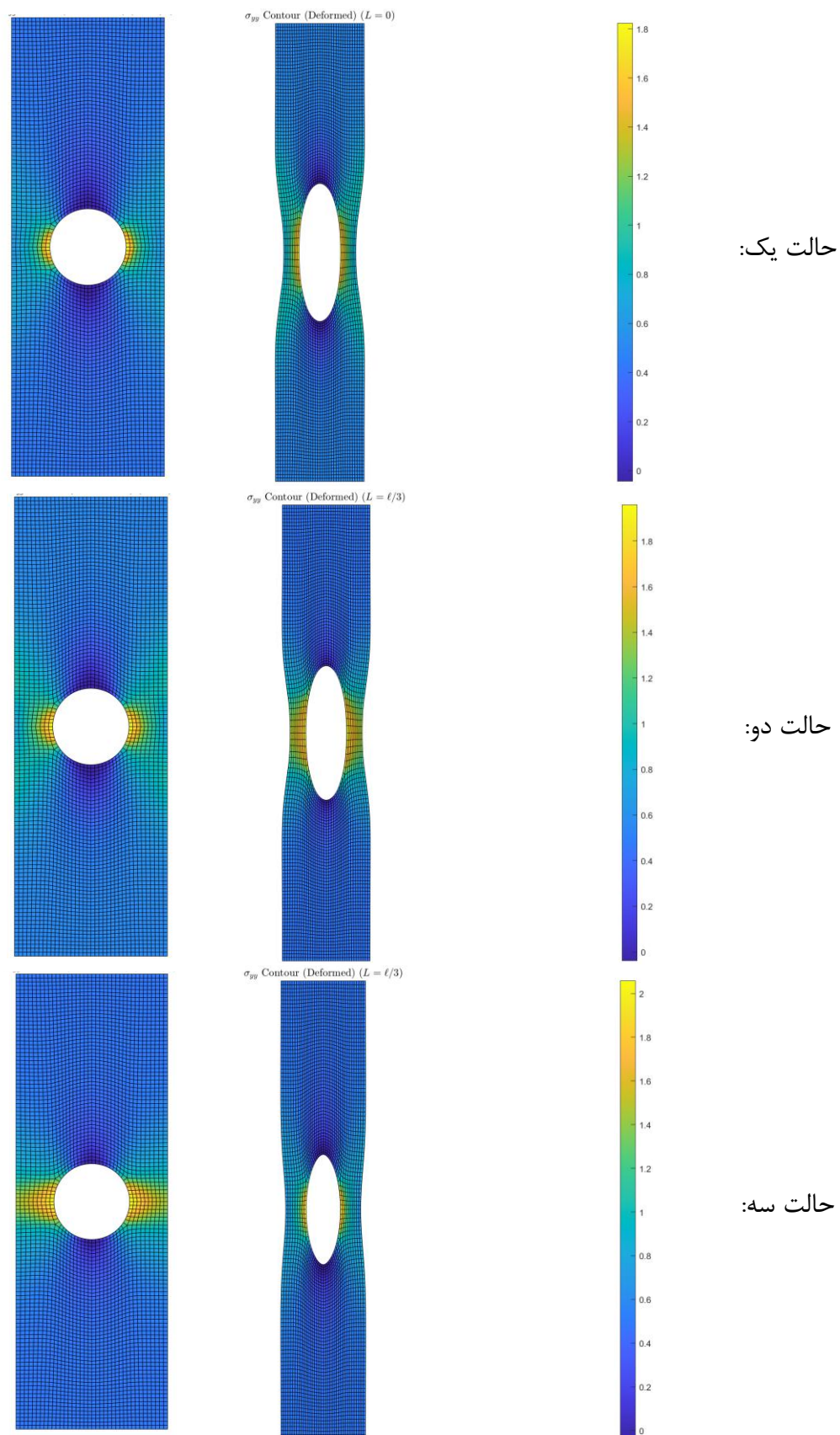


شکل ۱۵-۴: شکل تغییر یافته در میانه ورق برای حالت یک و سه

برای هر یک از سه حالت جدول ۳-۴، به ترتیب شکل‌های کانتورهای تنش افقی (σ_{xx}) و تنش قائم (σ_{yy}) در شکل‌های ۱۶-۴ و ۱۷-۴ ارائه شده‌اند. مقایسه‌ی این نتایج، تأثیر کوپل‌های مختلف بر میدان‌های تنش و جابجایی را آشکار می‌سازد و نقش اثر فلکسوالکتریسیته در تغییر توزیع تنش‌ها و سختی مؤثر سازه را نشان می‌دهد.



شکل ۴-۱۶: کانتور تنش افقی ورق حفره دار تحت کوپل های مختلف



شکل ۴-۱۷: کانتور تنش قائم ورق حفره دار تحت کوپل های مختلف

بررسی نتایج حاصل از سه حالت کوپل نشان می دهد که در مدل مکانیکی (الاستیسیته غیرخطی)، تغییرشکل کلی ورق نسبتاً بیشتر بوده و حفره ی مرکزی تغییرشکل قابل ملاحظه تری را تجربه می کند. این امر بیانگر آن است که در غیاب برهم کنش های الکتریکی و گرادیانی، کل انرژی ورودی صرف تغییرشکل مکانیکی شده و در نتیجه جابجایی ها و تغییرشکل های موضعی افزایش می یابد.

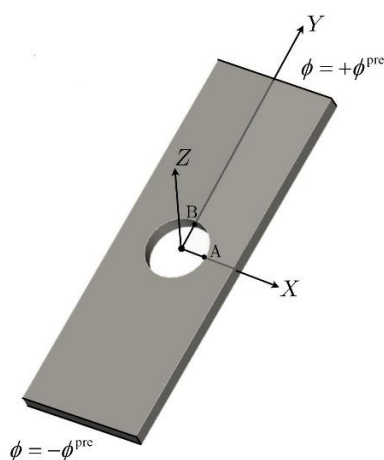
در حالت الکتروالاستیسیته، به دلیل حضور میدان الکتریکی و تبادل انرژی میان میدان های مکانیکی و الکتریکی، میزان کشیدگی حفره اندکی کاهش می یابد و پاسخ کلی ورق کمی سخت تر می شود. این روند مطابق با نتایج گزارش شده در مرجع [۷۲] است.

در حالت فلکسو الکتروالاستیسیته، این روند با شدت بیشتری مشاهده می شود؛ به گونه ای که توزیع میدان های مکانیکی و الکتریکی مشابه حالت الکتروالاستیسیته است اما تغییرات آن ها محسوس تر و متمرکزتر است. این رفتار ناشی از آن است که در حضور اثر فلکسو الکتریسیته، بخشی از انرژی مکانیکی به صورت انرژی گرادیانی نیز در ساختار ذخیره می شود، در نتیجه سهم انرژی خالص مکانیکی کاهش یافته و پاسخ مؤثر ورق سخت تر می گردد.

به طور کلی، نتایج نشان می دهد که تفاوت بین حالت های دوم و سوم اندک است، اما حالت سوم (فلکسو الکتروالاستیسیته) نسخه ی تقویت شده و شدیدتر حالت دوم بوده و موجب کاهش بیشتر تغییرشکل کلی و افزایش جزئی تنش های موضعی در اطراف حفره می شود.

۳.۴. مطالعه ورق حفره دار با شرایط مرزی الکتریکی (فعال سازی فلکسو الکتریسیته)

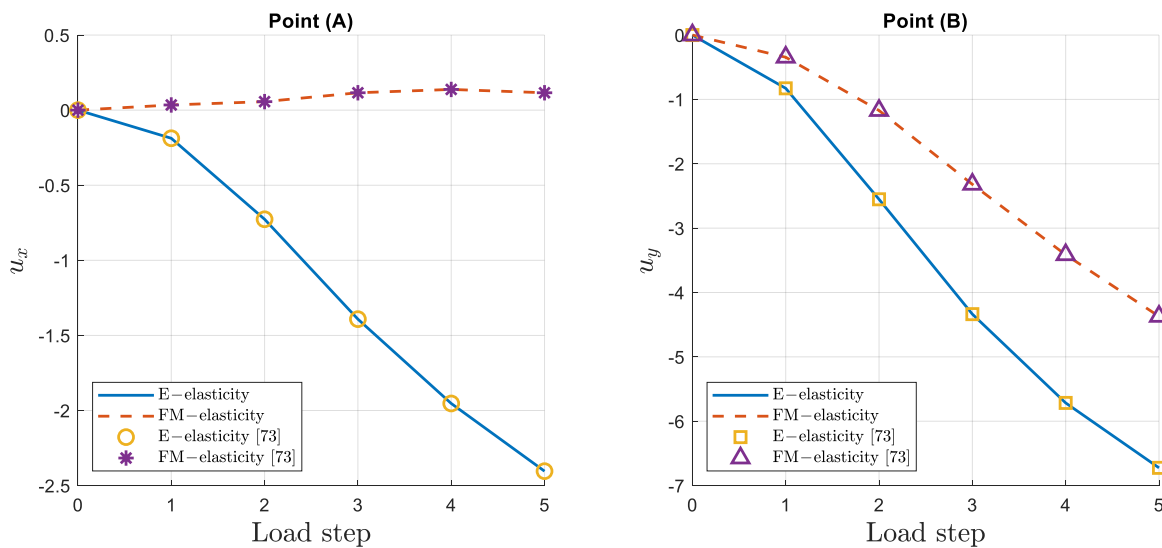
مسئله ورق حفره دار با شرایط مرزی جدید حل می شود. هدف در اینجا نشان دادن تفاوت های میان مدل کوپل الکترو-الاستیسیته ($E - Elasticity$) و مدل کوپل فلکسو-میکرومورفیک-الاستیسیته ($FM - Elasticity$) است (شکل ۴-۱۸).



شکل ۴-۱۸: ورق حفره دار تحت اثر اختلاف پتانسیل بین دو وجه انتهایی

در این حالت اختلاف پتانسیل الکتریکی بین دو وجه انتهایی ورق اعمال می‌گردد که منجر به تغییر شکل‌های بزرگ می‌شود. شرایط مرزی در شکل ۴-۱۵ نمایش داده شده‌اند. اختلاف پتانسیل به مقدار $\phi^{\text{pre}} \equiv \pm 0.1 (kV)$ بین دو وجه انتهایی در پنج گام مساوی اعمال شده است و هیچ نوع شرط مرزی از نوع جابجایی وجود ندارد. همانند بخش ۱.۱.۴، از تقارن مسأله در شبکه‌بندی استفاده گردیده است. مشخصات فیزیکی ماده مطابق جدول ۴-۱ می‌باشد. پارامتر شبه-جریمه برابر 5000μ در نظر گرفته می‌شود و سایر مشخصات فعال در این حالت، مقیاس طول $\ell = L/3$ و $\nu = 0.5$ می‌باشد [۷۵].

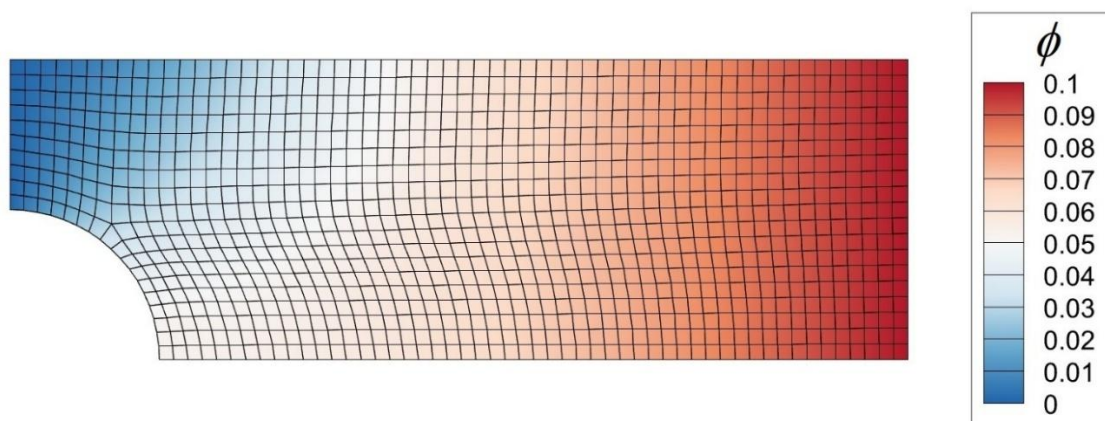
برای راستی‌آزمایی مدل، جابجایی در راستای محور x نقطه A (u_x^A) و جابجایی در راستای y نقطه B (u_y^B)، در شکل ۴-۱۷ در برابر نتایج تحلیلی [۷۵] مقایسه می‌گردد.



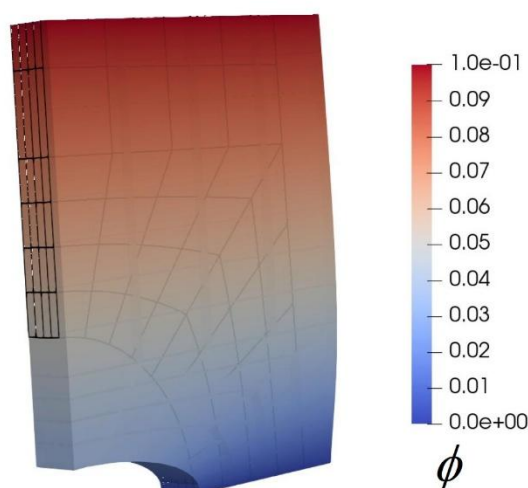
شکل ۴-۱۹: جابجایی در مدل «الکترو-الاستیسیته» و «فلکسو-میکرومورفیک-الاستیسیته»

حل مسئله با دو سیستم کوپل‌شده‌ی متفاوت، تفاوت‌های میان مدل‌ها را برجسته می‌سازد. تغییر شکل مکانیکی در ناحیه‌ی مجاور حفره به طور قابل توجهی متفاوت است. این امر ناشی از این است که در این ناحیه تغییر شکل ناهمگن رخ می‌دهد. تفاوت میان این تئوری‌ها به وضوح در نمودار جابه‌جایی افقی و عمودی نقاط A و B در برابر گام بارگذاری (زمان) که در شکل ۴-۱۷ ارائه شده است، قابل مشاهده می‌باشد.

کانتور میدان الکتریکی (ϕ) در شکل ۴-۲۰ رسم شده است. برای مقایسه کانتور میدان الکتریکی (ϕ) مرجع [۷۵] نیز در شکل ۴-۲۱ ارائه شده است که تطابق خوبی بین دو پاسخ مشاهده می‌گردد.

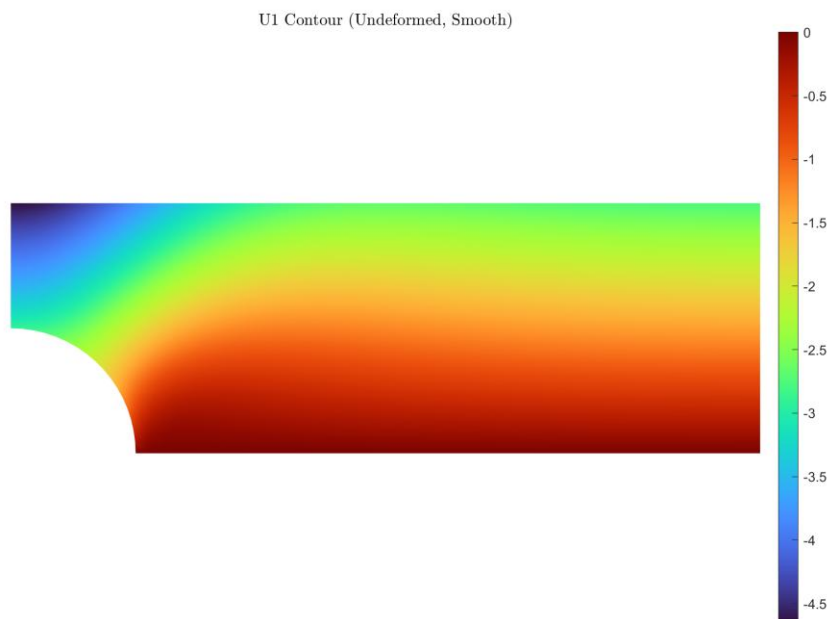


شکل ۴-۲۰: کانتور میدان الکتریکی تحقیق حاضر

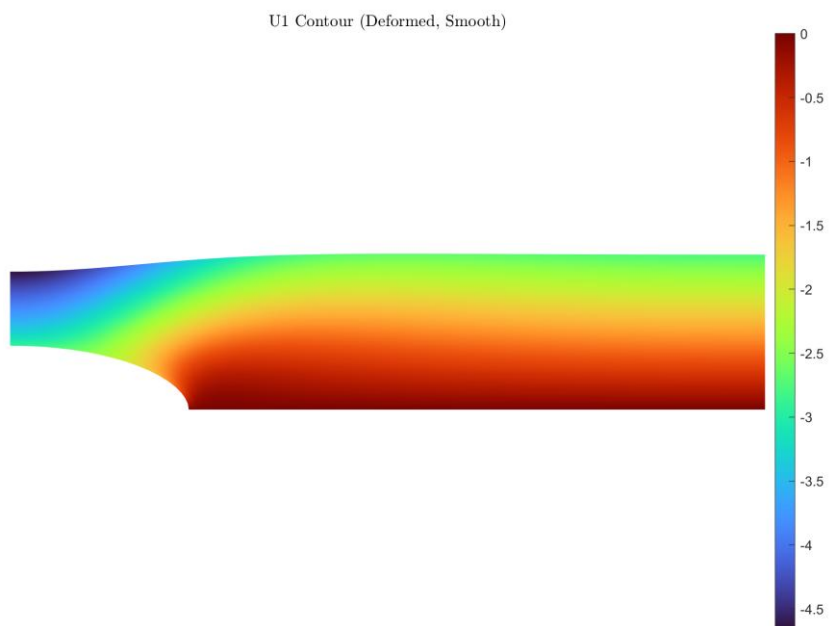


شکل ۴-۲۱: کانتور میدان الکتریکی از مرجع [۷۵]

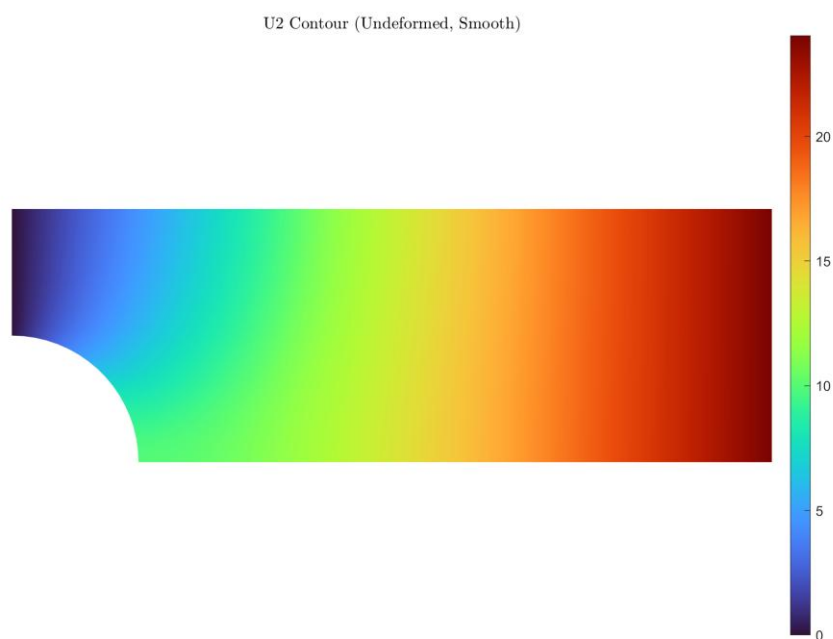
در شکل های ۴-۲۲ تا ۴-۲۵ توزیع جابجایی های افقی و قائم در حالت اولیه و شکل تغییر یافته نشان داده شده اند. همان گونه که مشاهده می شود، با اعمال بارگذاری و در نتیجه تغییر شکل نمونه، میزان جابجایی ها در نواحی مجاور حفره افزایش یافته و الگوی آن نسبت به حالت اولیه تغییر قابل توجهی دارد. در شکل تغییر یافته تمرکز جابجایی در اطراف مرز حفره و لبه های ورق بیشتر است. این موضوع بیانگر آن است که در اثر تغییر شکل، پاسخ سازه از حالت خطی فاصله گرفته و نواحی با کرنش بالاتر به صورت موضعی ظاهر می شوند.



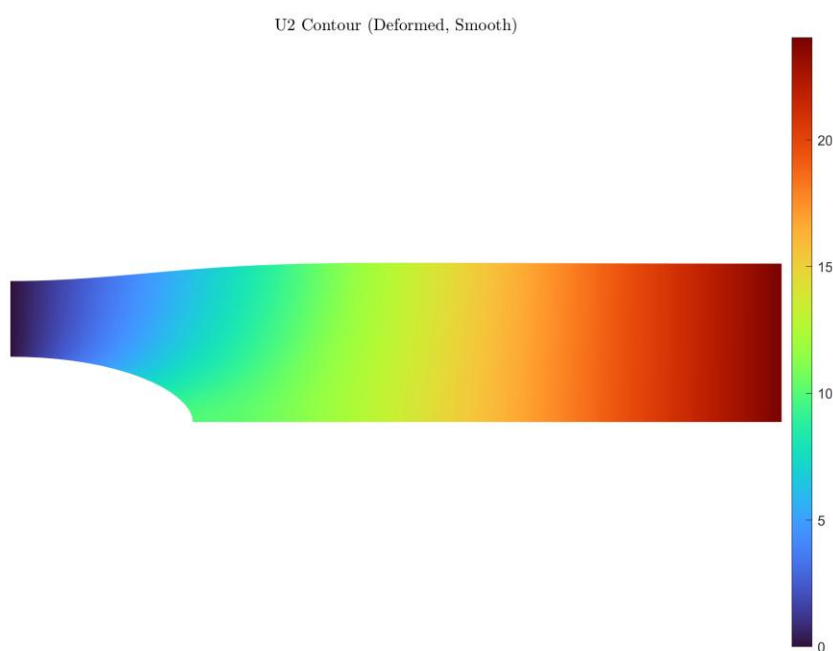
شکل ۴-۲۲: میدان جابجایی افقی در شکل اولیه



شکل ۴-۲۳: میدان جابجایی افقی در شکل تغییر یافته



شکل ۴-۲۴: میدان جابجایی قائم در شکل اولیه



شکل ۴-۲۵: میدان جابجایی قائم در شکل تغییر یافته

۱.۳.۴. تحلیل حساسیت نسبت به پارامتر شبه جریمه

در ادامه نتایج بررسی تأثیر مقدار پارامتر شبه جریمه (p) بر رفتار عددی مدل ارائه می‌شود. در شبیه‌سازی پایه، مقدار ($p = 250$) انتخاب شده بود که پاسخ عددی پایدار و همگرا به دست آمد. برای ارزیابی حساسیت مدل نسبت به این پارامتر، دو مقدار دیگر یعنی $p = 500$ و $p = 2500$ نیز مورد بررسی قرار گرفتند.

در حالت $p = 500$ ، حل عددی بدون مشکل خاصی همگرا شد و نتایج به دست آمده از نظر روند تغییرات میدان جابجایی و توزیع تنش بسیار مشابه حالت پایه بودند. با این حال، به دلیل افزایش سختی مؤثر ناشی از تقویت قید در روش شبه جریمه، میزان جابجایی‌ها اندکی کاهش یافت. به بیان دیگر، افزایش مقدار p از ۲۵۰ به ۵۰۰ موجب شد تا پاسخ سیستم کمی سفت‌تر شود، اما تفاوت قابل توجهی در شکل کلی پاسخ مشاهده نگردید.

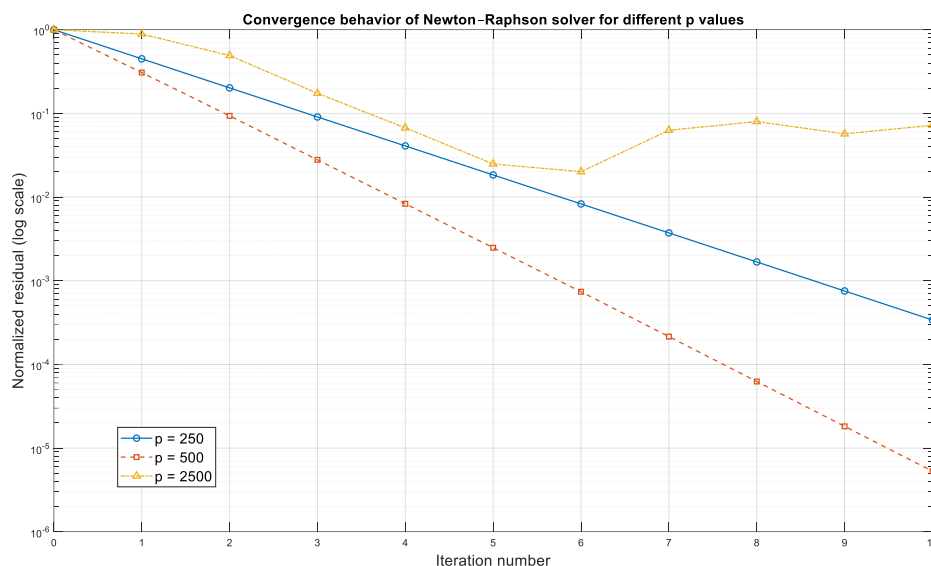
در مقابل، با افزایش پارامتر شبه جریمه به $p = 2500$ ، مسئله دچار مشکلات عددی^۱ جدی شد و روند همگرایی متوقف گردید. مقدار بزرگ p منجر به بدشرط شدن^۲ ماتریس سختی و ناپایداری در حل تکراری گردید، به طوری که حلگر نتوانست همگرایی مناسبی حاصل کند. بنابراین، مقدار بسیار بزرگ پارامتر شبه جریمه نه تنها موجب بهبود دقت نمی‌شود، بلکه می‌تواند پایداری عددی سیستم را مختل کند.

نمودار نرخ همگرایی حل عددی: به منظور بررسی پایداری و کارایی عددی روش پیشنهادی، روند همگرایی حلگر نیوتن-رافسون برای سه مقدار مختلف پارامتر شبه جریمه ($p = 250, 500, 2500$) مورد مطالعه قرار گرفت. در شکل ۴-۲۶، تغییرات باقیمانده نرمال شده بر حسب تعداد تکرارها^۳ نمایش داده شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود، برای مقادیر $p = 250$ و $p = 500$ ، حلگر رفتار پایداری از خود نشان داده و با نرخ مناسبی همگرا می‌شود. در این دو حالت، شیب نزولی منحنی‌های همگرایی تقریباً یکنواخت بوده و کاهش باقیمانده در چند گام تکرار حاصل شده است. در مقابل، با افزایش مقدار پارامتر شبه جریمه به $p = 2500$ ، حلگر دچار نوسان در روند کاهش باقیمانده شده و در نهایت از همگرایی بازمانده است. این رفتار بیانگر آن است که افزایش بیش از حد پارامتر شبه جریمه منجر به بروز ناپایداری عددی و اختلال در فرآیند همگرایی می‌شود.

^۱ convergence issues

^۲ ill-conditioned

^۳ the evolution of the normalized residual versus the iteration number



شکل ۴-۲۶: همگرایی حلگر برای مقادیر مختلف پارامتر شبه جریمة

به منظور ارائه‌ی شفاف داده‌ها، مقادیر باقیمانده‌ای که در کد محاسبه شده‌اند، در جدول ۴-۴ ارائه می‌شوند. شایان ذکر است که تمامی مقادیر با مقدار اولیه نرمال شده به یک مقایسه شده‌اند.

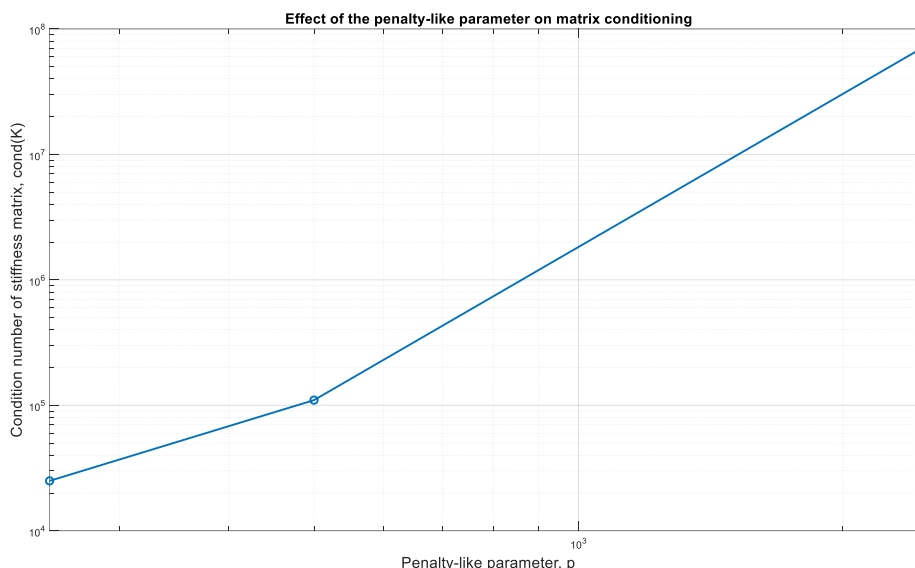
جدول ۴-۴: مقادیر باقیمانده به ازای مقادیر مختلف پارامتر شبه جریمة

تکرار	$p = 250$	$p = 500$	$p = 2500$
۰	1.000000000	1.000000000	1.000000000
۱	0.88918580	0.30767612	0.44932896
۲	0.49212395	0.09343833	0.20189652
۳	0.17376033	0.02787741	0.09071795
۴	0.06715897	0.00831407	0.04083336
۵	0.02487318	0.00247985	0.01837956
۶	0.02010427	0.00073860	0.00827954
۷	0.06284827	0.00021476	0.00372773
۸	0.07988861	6.24225e-05	0.00167722
۹	0.05694758	1.81607e-05	0.00075418
۱۰	0.07211241	5.28836e-06	0.00033940

مشاهده می‌شود مقادیر باقیمانده برای $p = 500$ عمداً پایین‌تر از $p = 250$ می‌باشند، در نتیجه سرعت همگرایی $p = 500$ کمی بهتر نسبت به حالت $p = 250$ است. افزایش متعادل پارامتر شبه جریمة

می‌تواند باعث سفت‌تر شدن پاسخ شود ولی لزوماً همگرایی را خراب نمی‌کند؛ در حالی که افزایش خیلی زیاد $p = 2500$ همگرایی را تخریب می‌کند.

نمودار شرط عددی ماتریس سختی^۱: برای درک دقیق‌تر منشأ ناپایداری عددی در مقادیر بالای پارامتر شبه‌جریمه، شرط عددی ماتریس سختی کلی نیز برای هر مقدار از p محاسبه و در شکل ۴-۲۷، ترسیم شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش مقدار p ، شرط عددی ماتریس سختی به‌صورت چشمگیری افزایش می‌یابد، به‌طوری‌که برای $p = 2500$ مقدار آن چندین مرتبه بزرگ‌تر از حالت پایه است. این افزایش شدید در مقدار شرط عددی نشان‌دهنده‌ی بدشرط شدن سیستم معادلات و کاهش دقت محاسبات عددی است. در چنین شرایطی، کوچک‌ترین خطاهای عددی در طی فرآیند تکرار و تجزیه ماتریس می‌توانند تقویت شده و مانع از همگرایی حلگر شوند. بنابراین، نتایج این بخش به‌وضوح بیان می‌کند که انتخاب مقدار بهینه برای پارامتر شبه‌جریمه نه‌تنها بر دقت اعمال قید، بلکه بر پایداری عددی کل فرمول‌بندی نیز تأثیر تعیین‌کننده دارد.



شکل ۴-۲۷: تأثیر پارامتر شبه‌جریمه بر شرطی شدن ماتریس

شکل ۴-۲۷ نشان می‌دهد که با افزایش پارامتر شبه‌جریمه p ، مقدار شرط عددی $\text{cond}(K)$ افزایش می‌یابد. افزایش p از ۲۵۰ به ۵۰۰ تنها باعث حدود یک مرتبه افزایش در $\text{cond}(K)$ می‌شود، اما در $p = 2500$ مقدار آن به چندین مرتبه بزرگ‌تر می‌رسد که نشان‌دهنده‌ی بدشرط شدن ماتریس سختی و حساسیت عددی حلگر است.

به‌طور کلی، نتایج نشان می‌دهد که انتخاب مقدار مناسب برای p اهمیت زیادی دارد؛ مقادیر خیلی کوچک ممکن است قید را به‌درستی اعمال نکنند، در حالی که مقادیر بسیار بزرگ موجب مشکلات

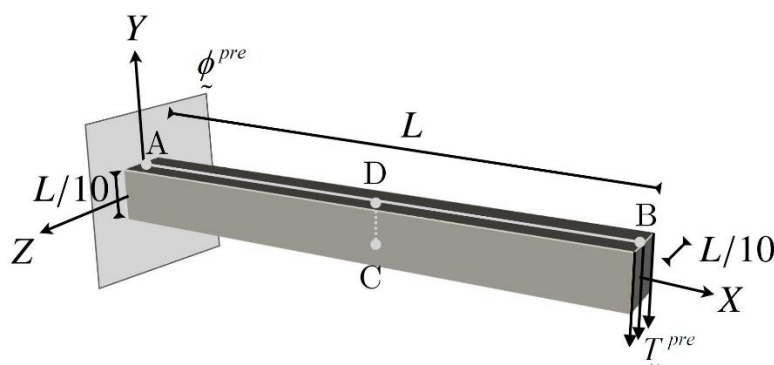
^۱ Condition number of the stiffness matrix

همگرایی و شرط عددی می شوند. لازم به ذکر است که در این پژوهش تمرکز اصلی بر مطالعه حساسیت نسبت به پارامتر p نبوده و بررسی دقیق تأثیر آن در محدوده های مختلف از اهداف تحقیق محسوب نمی شود. در اینجا تنها بر اساس یافته های موجود در منابع پیشین و گزارش های عددی مشابه، محدوده های متعارف برای این پارامتر مورد اشاره قرار گرفته است تا چارچوب کلی انتخاب آن مشخص شود.

۴.۴ میکرو-تیر یک سر گیردار

در این بخش، مسئله ی خمش یک تیر یک سر گیردار در مقیاس میکرو بررسی می شود.

تیر مورد نظر دارای ابعاد $L \times L/10 \times L/10$ است (شکل ۴-۲۸) که در آن $L = 100(mm)$ در نظر گرفته شده است. سطح چپ تیر در $X = 0$ کاملاً مقید بوده و جابجایی ماکروسکوپی $\mathbf{u} = 0$ بر آن اعمال می شود. در سطح راست تیر در $X = L$ ، یک تنش کششی با مقدار $T^{pre} = -0.2 E_2 (MPa)$ در یک گام بارگذاری واحد اعمال می گردد. همچنین، پتانسیل الکتریکی در سمت چپ تیر در $X = 0$ برابر $\phi = \phi^{pre} = 0$ قرار داده شده است.



شکل ۴-۲۸: تیر یک سر گیردار

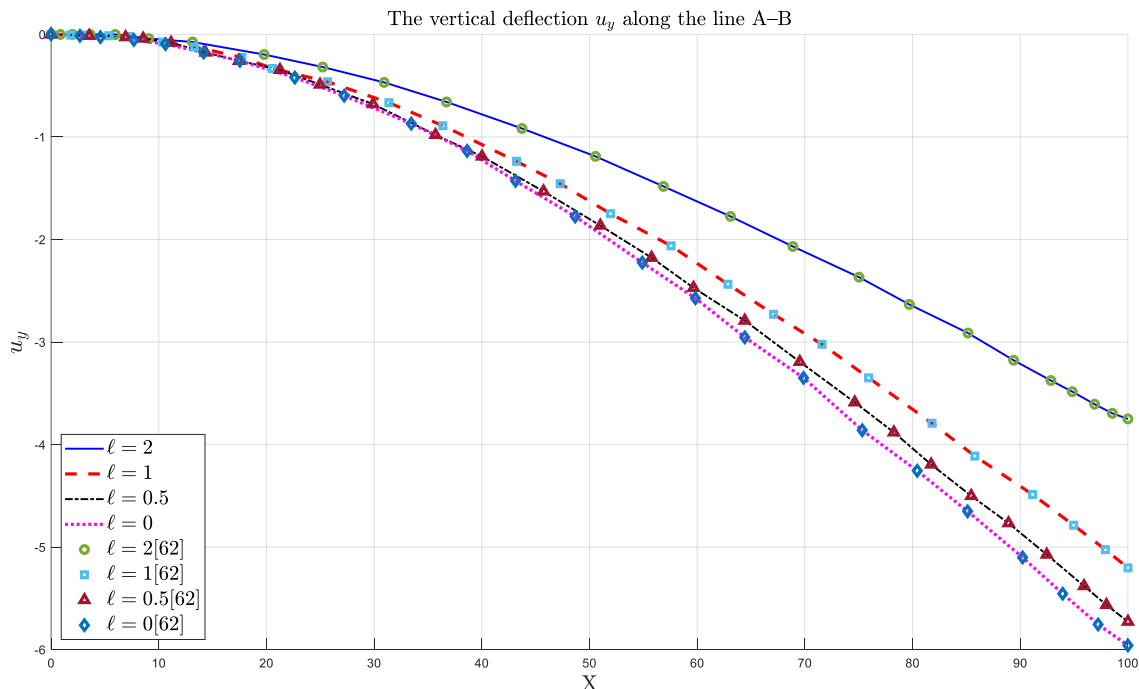
این پیکربندی یکی از آزمایش های متداول برای اندازه گیری پاسخ فلوکسوالکتریک مواد محسوب می شود. بار مکانیکی اعمال شده موجب خم شدن تیر شده و به دنبال آن، گرادیان کرنش عرضی در ساختار ایجاد می گردد. در اثر این گرادیان کرنش، قطبش القایی ناشی از پدیده ی فلوکسوالکتریسیته شکل می گیرد. میزان این قطبش از طریق اندازه گیری اختلاف پتانسیل الکتریکی میان دو صفحه ی فلزی نصب شده بر سطوح فوقانی و تحتانی تیر (نقاط C و D در شکل ۴-۲۶) به دست می آید.

در پژوهش حاضر، این مسأله به عنوان یک مطالعه ی راستی آزمایی مورد استفاده قرار گرفته است تا صحت پیاده سازی مدل میکرومورفیک اصلاح شده، با نتایج گزارش شده توسط مک براید و همکاران [۶۲]

مقایسه و تأیید شود. به این ترتیب، داده‌ها و شرایط مرزی تعریف‌شده در این بخش مستقیماً از کار آن‌ها اقتباس شده است.

۱.۴.۴. بررسی حالت $M - Elasticity$

تأثیر مقیاس طولی (ℓ) بر خیز تیر (u_y) ناشی از نیروی کششی اعمال‌شده، برای مسئله‌ی $M - Elasticity$ بررسی شده است تا نقش مؤلفه‌ی میکرومورفیک در غیاب اثرات فلکسوالکتریک مشخص گردد. تغییر مکان عمودی در راستای خط $A - B$ برای مقادیر مختلف $\ell \in \{0, 0.5, 1, 2\}$ در شکل ۴-۲۹ نشان داده شده است. انتخاب $\ell = 0$ متناظر با حالت الاستیسیته‌ی غیرخطی کلاسیک است.



شکل ۴-۲۹: تغییر مکان عمودی در امتداد خط $A - B$

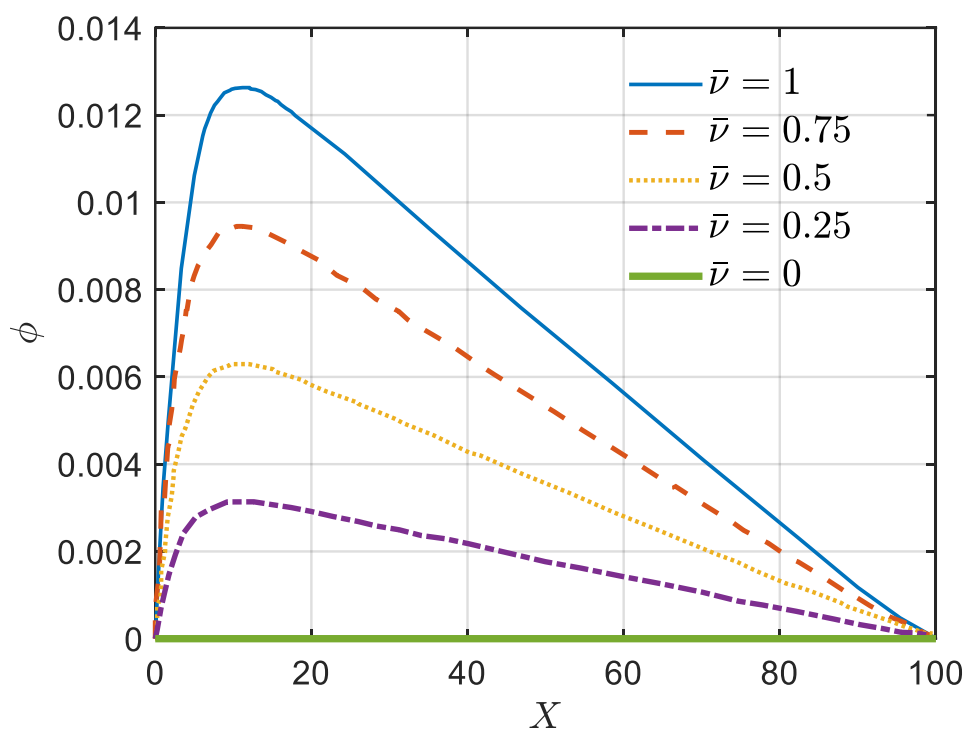
برای تیر یک‌سرگیردار برای مقادیر مختلف مقیاس طولی

مشابه بررسی بخش ۳.۱.۴، با افزایش مقدار مقیاس طولی (یا معادل آن، کاهش اندازه‌ی نمونه پاسخ سیستم صلب‌تر می‌شود).

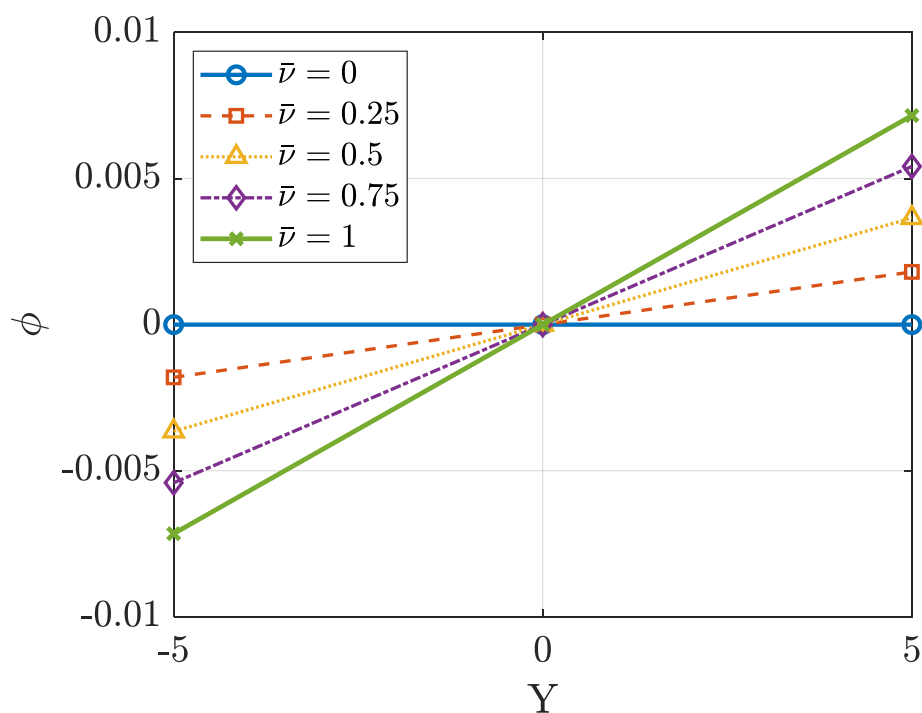
۲.۴.۴. بررسی حالت $FM - Elasticity$

در این بخش، مقیاس طول ثابت و برابر $\ell = 1$ در نظر گرفته شده است و تأثیر ضریب فلکسوالکتریک $\bar{\nu} \in \{0; 0.25; 0.5; 0.75; 1\}$ بر پاسخ سیستم مورد بررسی قرار گرفته است. توزیع پتانسیل در امتداد

خط افقی $A-B$ و خط عمودی $C-D$ ، مطابق شکل ۴-۱۵ به ترتیب در شکل های ۴-۳۰ و ۴-۳۱ نشان داده شده است.



شکل ۴-۳۰: توزیع میدان الکتریکی ϕ در مسیر $A-B$



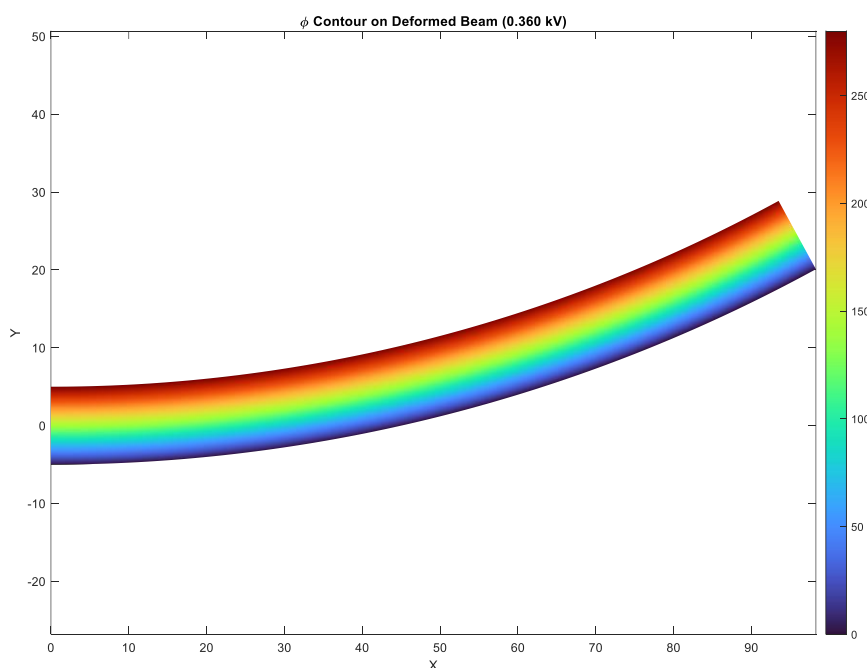
شکل ۴-۳۱: توزیع میدان الکتریکی ϕ در مسیر $C-D$

انتخاب $\bar{\nu} = 0$ متناظر با کوپل الکترو-میکرومورفیک-الاستیسیته ($EM - Elasticity$) است. در حالت $\bar{\nu} = 0$ و با توجه به شرایط مرزی الکتریکی فعلی ($\phi = \phi^{pre} = 0$)، پتانسیل در تیر برابر صفر است. با انتخاب $\bar{\nu} > 0$ ، اثر فلکسوالکتریسیته فعال می‌شود و افزایش $\bar{\nu}$ باعث افزایش خطی بزرگی توزیع پتانسیل^۱ در طول تیر می‌شود.

۳.۴.۴. بررسی اعمال چگالی بار الکتریکی سطحی

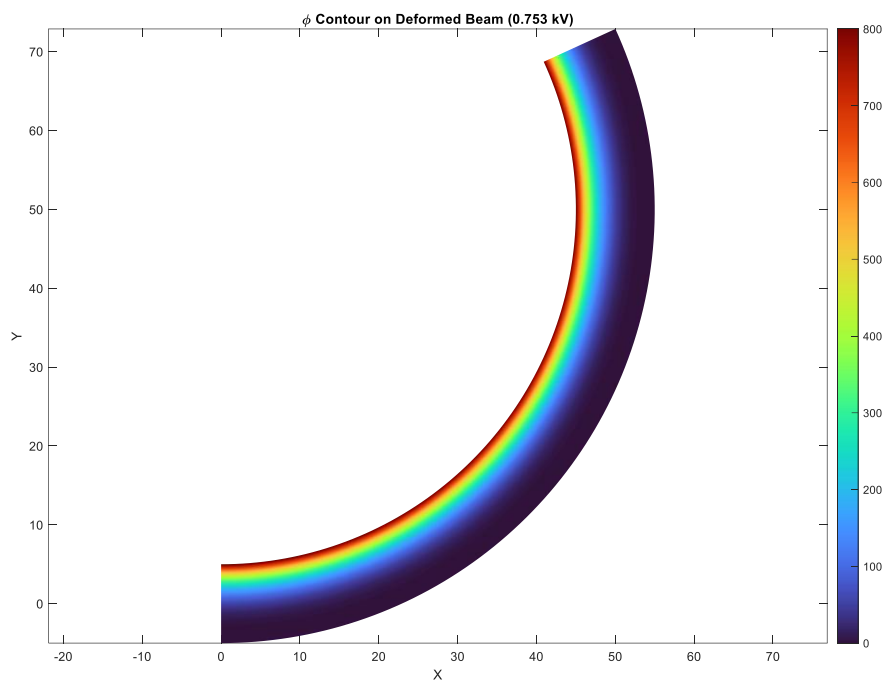
ما بین نقاط C و D در شکل ۴-۲۸ یک اختلاف پتانسیل به کمک چگالی بار الکتریکی سطحی اعمال می‌گردد. چگالی بار الکتریکی سطحی با توجه به توضیحات بخش «شرایط مرزی الکتریکی» و روابط ۳-۴۷ و ۳-۵۱-ب، به شکل شرط مرزی اعمال می‌شود و متفاوت از پدیده فلکسوالکتریسیته معکوس می‌باشد. مطابق تحقیق کودونی و همکاران [۷۶] و ژانگ و همکاران [۷۷] انتظار توزیع پتانسیل به شکل غیرخطی در ضخامت تیر (مسیر $C-D$) می‌رود.

توزیع میدان پتانسیل الکتریکی برای شرایط مرزی $0.360(kV)$ ، $0.753(kV)$ و $1.097(kV)$ در شکل‌های ۴-۳۲ تا ۴-۳۴ نشان داده شده است. نتایج ژانگ و همکاران [۷۵] برای مقایسه با تحقیق حاضر در شکل ۴-۳۵ نمایش داده شده است. تمامی شکل‌ها در پیکره کنونی (تغییر شکل یافته) ترسیم شده‌اند.

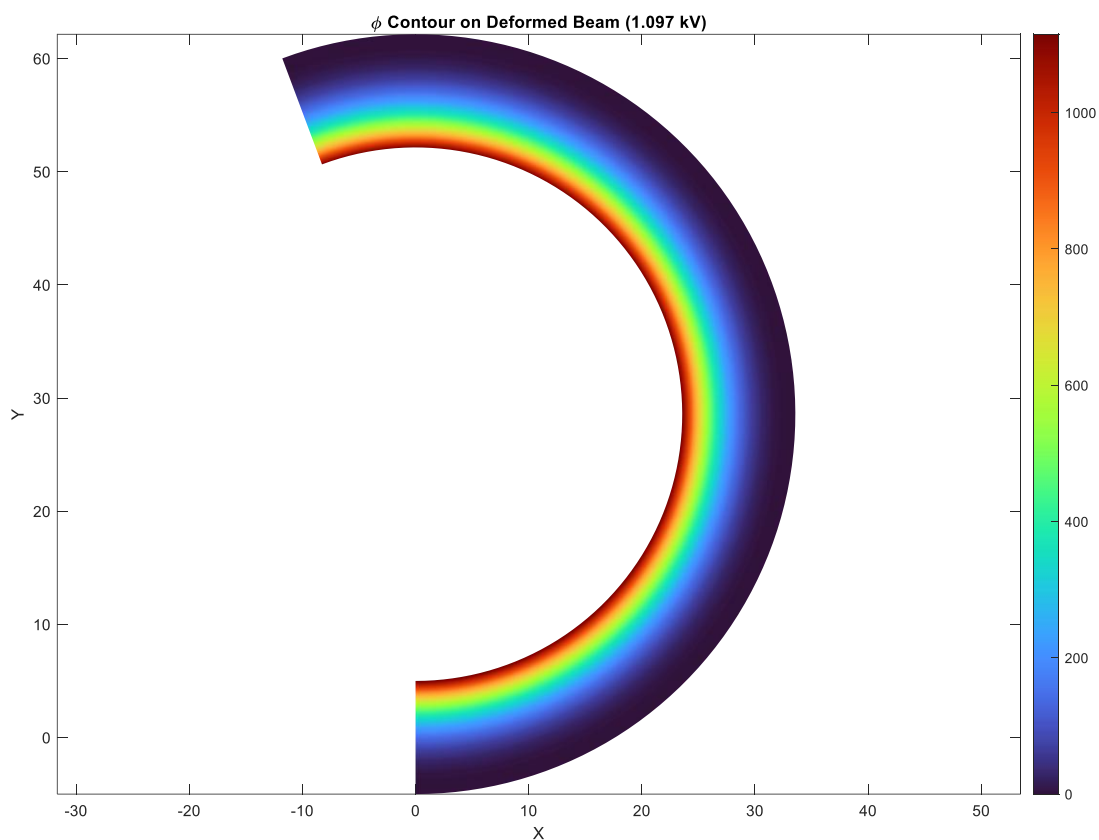


شکل ۴-۳۲: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف $0.360(kV)$

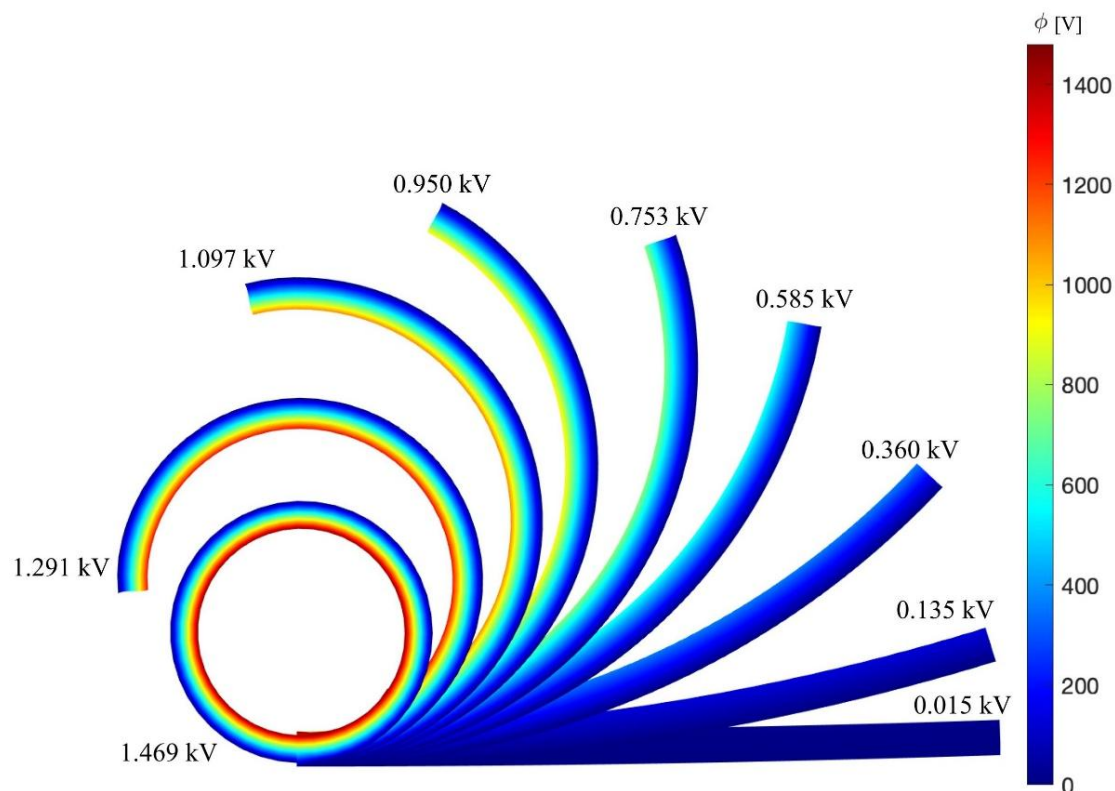
¹ linearly scales the magnitude of the distribution of the potential



شکل ۴-۳۳: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف $0.753(kV)$



شکل ۴-۳۴: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف $1.097(kV)$



شکل ۴-۳۵: توزیع میدان پتانسیل الکتریکی تحت اختلاف ولتاژهای مختلف [۷۵]

نتایج نشان می‌دهند توزیع میدان الکتریکی یکنواخت و خطی نمی‌باشد و با افزایش گرادیان کرنش اختلاف توزیع میدان الکتریکی افزایش می‌یابد که تطابق خوبی با نتایج منتشر شده دارد.

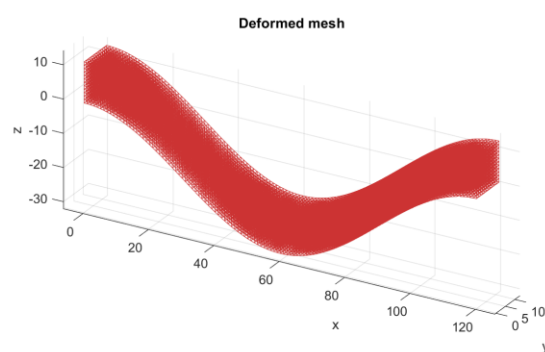
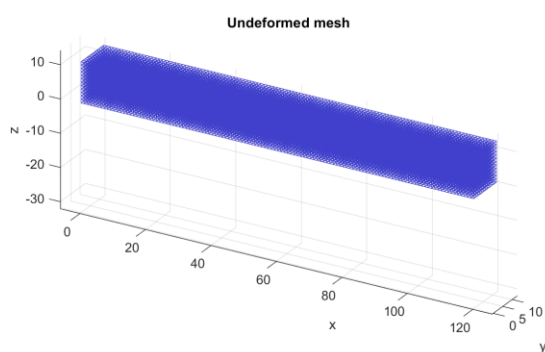
۵.۴ میکرو-تیر دو سر گیردار

در این بخش، تاثیر پارامترهای مختلف در خیز نهایی بررسی می‌شود. طبق دسته‌بندی شکل ۳-۶ برخی از این پارامترها نماد یک کوپل خاص از مسأله می‌باشد. بار گسترده با مقدار $25(N)$ روی وجه بالایی تیر اعمال می‌شود. مشخصات مکانیکی و الکتریکی تیر مشابه حالت قبل می‌باشد.

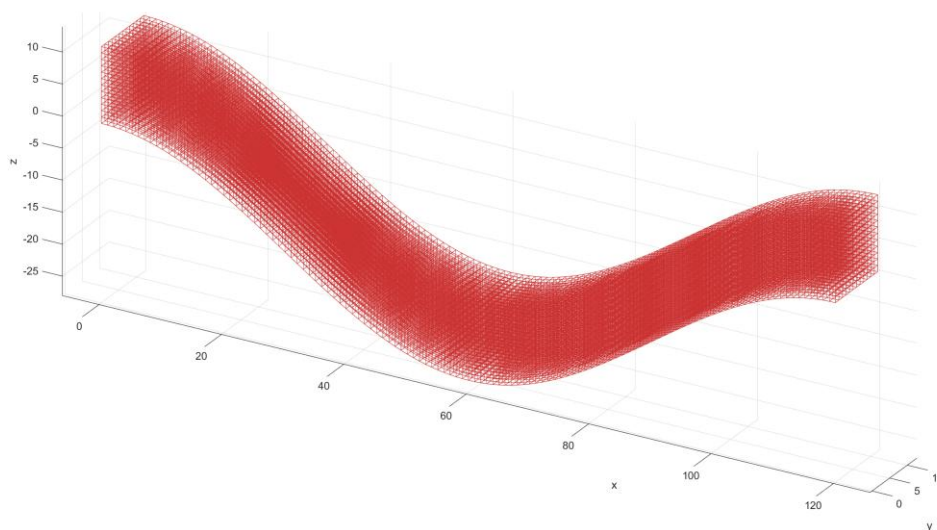
جدول ۴-۵، خیز حداکثر در میانه تیر ($X = L/2$) را به ازای صفر در نظر گرفتن پارامترهای مختلف ارائه می‌دهد. به ترتیب شکل تغییر یافته هر کدام در شکل‌های ۴-۳۶ تا ۴-۴۲ نمایش داده شده است.

جدول ۴-۵: خیز حداکثر به ازای صفر در نظر گرفتن پارامترهای اساسی

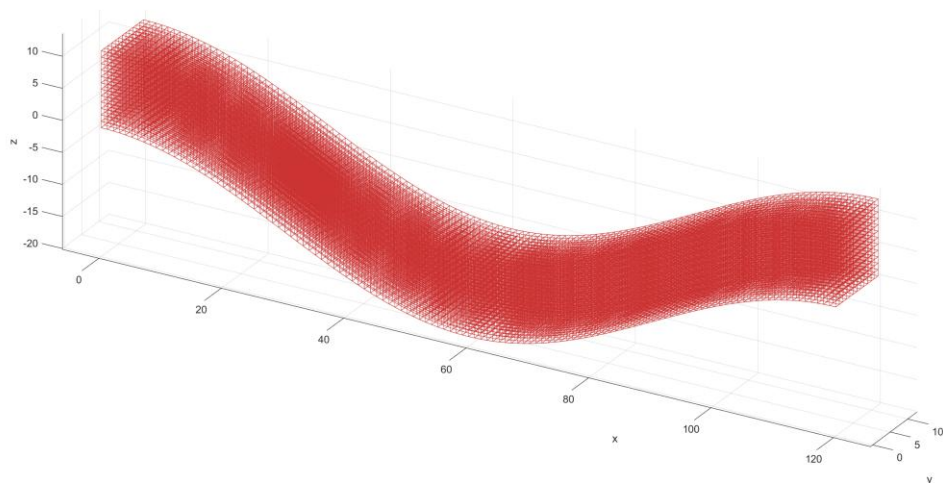
پارامتر فرض صفر	نوع کوپل	خیز حداکثر (mm)	درصد نسبت به FM-Elasticity
	FM-Elasticity	31.67	
$\bar{\nu} = 0$	EM-Elasticity	27.56	~ 87
$\varepsilon_0 = 0$	M-Elasticity	19.74	~ 62
$\ell, p = 0$	Elasticity	12.98	~ 41
$\alpha = 0$		12.03	~ 38
$\beta = 0$		11.08	~ 35
$\gamma = 0$		7.28	~ 23



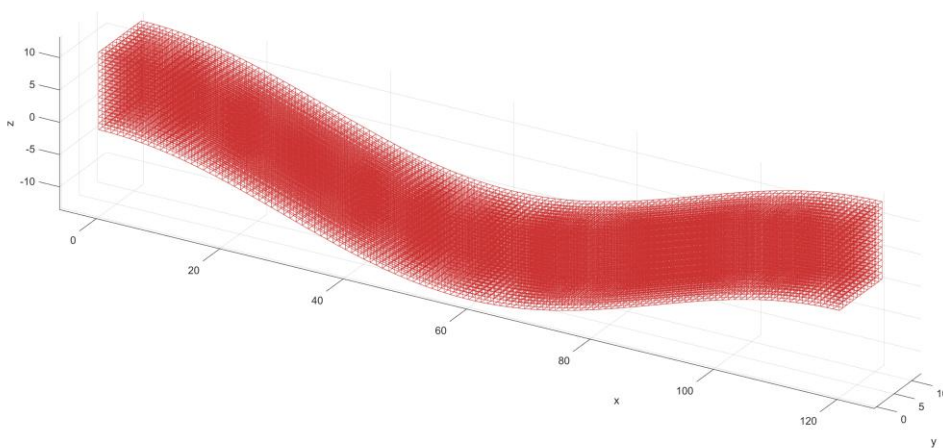
شکل ۴-۳۶: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - FM-Elasticity



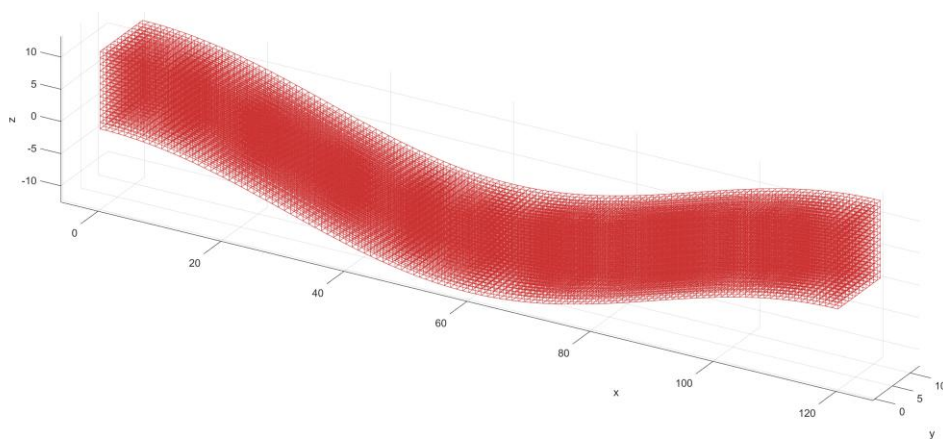
شکل ۴-۳۷: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - EM-Elasticity



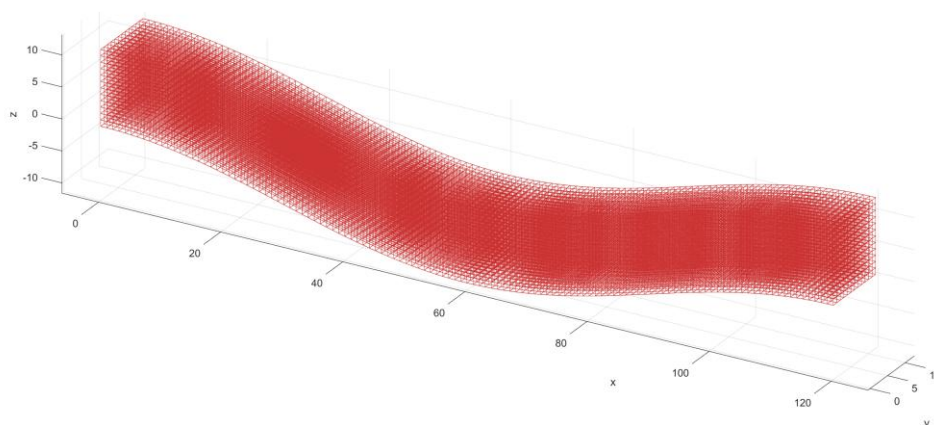
شکل ۴-۳۸: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار – M-Elasticity



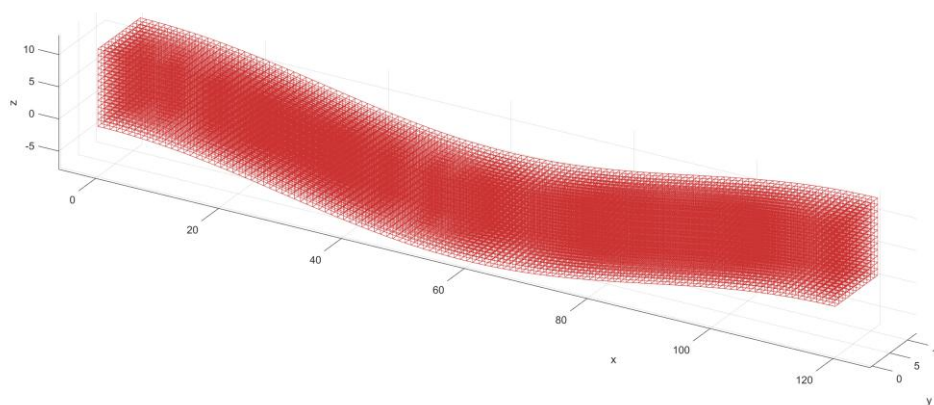
شکل ۴-۳۹: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار – Elasticity



شکل ۴-۴۰: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار – E-Elasticity ($\alpha = 0$)



شکل ۴-۴۱: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - E-Elasticity ($\beta = 0$)



شکل ۴-۴۲: شکل تغییر یافته تیر دو سر گیردار - E-Elasticity ($\gamma = 0$)

می توان نتیجه گرفت بین ضرایب α ، β و γ ، ضریب γ که مرتبط با C^{-1} می باشد نقش مهم تری در رسیدن به پاسخ درست دارد و پیشنهاد می شود از چگالی انرژی هایی استفاده شود که نقش C^{-1} را در نظر می گیرند.

تحلیل های عددی انجام شده در این فصل نشان داد که در ساختارهای دارای گرادیان کرنش بالا، نظیر ورق های حفره دار و تیرهای میکرو، اثر فلکسو الکتریک نقشی اساسی در توزیع تنش و میدان الکتریکی دارد. در مقابل، در ساختارهای یکنواخت بدون حفره، میدان های القایی ناچیز هستند. همچنین مشخص شد که انتخاب مناسب پارامتر مقیاس طول و پارامتر شبه جریمه برای پایداری عددی مدل اهمیت ویژه ای دارد. نتایج کلی این فصل بیانگر توانایی مدل میکرومورفیک اصلاح شده در پیش بینی رفتار سازه های هوشمند در ابعاد میکرو و نانو است.

فصل پنجم: نتیجه‌گیری و چشم‌اندازهای آینده

۱.۵. مقدمه

این پایان‌نامه به بررسی مدل‌سازی محاسباتی فلکسوالکتریسیته با تمرکز اصلی بر چارچوب میکرومورفیک پرداخته است. هدف اصلی این پژوهش، پیاده‌سازی، اعتبارسنجی و تحلیل این مدل محیط پیوسته توسعه‌یافته بوده است. فصل پایانی، یافته‌های کلیدی پژوهش را جمع‌بندی کرده، به پرسش‌های تحقیق مطرح‌شده در فصل نخست به‌صورت مستقیم پاسخ می‌دهد و سهم‌های نظری و عملی حاصل از این کار را مورد بحث قرار می‌دهد. در نهایت، محدودیت‌های مطالعه حاضر بیان شده و مسیرهای پژوهشی امیدبخش برای تحقیقات آینده پیشنهاد می‌گردد.

۲.۵. نتیجه‌گیری برای هر پرسش تحقیق

پژوهش حاضر، بر اساس چهار پرسش اصلی تحقیق هدایت شد. یافته‌های حاصل از پیاده‌سازی و تحلیل مدل منجر به نتیجه‌گیری‌های زیر گردید.

۱. چگونه می‌توان مدل میکرومورفیک فلکسوالکتریسیته را در چارچوب اجزای محدود با پیوستگی C^0 به‌طور مؤثر پیاده‌سازی کرد و پیش‌بینی‌های آن را مورد اعتبارسنجی قرار داد؟

این پایان‌نامه نشان داده است که مدل میکرومورفیک فلکسوالکتریسیته را می‌توان با موفقیت در بستر متعارف اجزای محدود با پیوستگی C^0 پیاده‌سازی نمود. روند پیاده‌سازی بر اساس رویکرد تغییراتی است، به‌گونه‌ای که معادلات حاکم غیرخطی از اصل دیریکله استخراج گردیدند تا سازگاری انرژی تضمین شود. برای حل دستگاه معادلات کوپل‌شده شامل حرکت ماکروسکوپی، تغییرشکل‌های میکروسکوپی و پتانسیل الکتریکی، از یک طرح حل یکپارچه مبتنی بر الگوریتم تکراری نیوتن-رافسون استفاده شد.

اعتبارسنجی پیش‌بینی‌های مدل از طریق بازتولید مثال‌های عددی معیار ارائه‌شده در منابع انجام گرفت، نتایج شبیه‌سازی برای هر دو مثال هندسی تطابق خوبی با یافته‌های منتشرشده نشان داد. این امر تأیید می‌کند که کد پیاده‌سازی‌شده، فیزیک بنیادی مکانیک وابسته به اندازه و کوپلینگ الکترو-الاستیک در تغییر شکل‌های بزرگ را به‌درستی بازنمایی می‌کند. همچنین، اعتبارسنجی موفق مدل، استحکام و دقت فرمول‌بندی میکرومورفیک را به‌عنوان ابزاری پیش‌بینی‌گر برجسته می‌سازد.

۲. تفاوت‌های بنیادی در پاسخ الکترومکانیکی پیش‌بینی‌شده هنگام مقایسه رویکرد میکرومورفیک با مدل‌های سنتی الاستیسیته گرادانی چیست؟

تفاوت اصلی در نحوه‌ی برخورد سینماتیکی با گرادیان کرنش نهفته است. در مدل‌های سنتی الاستیسیته گرادانی، گرادیان‌های مرتبه بالاتر میدان جابجایی اولیه به‌طور مستقیم وارد فرمول‌بندی می‌شوند، به‌طوری که کمیت سینماتیکی به صورت گرادیان تانسور تغییر شکل تعریف می‌گردد ($G = \text{Grad}F$).

این رویکرد منجر به معادله حاکم مرتبه چهارم می‌شود که نیازمند تقریب با پیوستگی C^1 برای میدان جابجایی است؛ الزامی که مانعی جدی در حل عددی ایجاد می‌کند.

در مقابل، رویکرد میکرومورفیک یک میدان تغییرشکل میکروسکوپی مستقل ($\bar{F}$) را به‌عنوان متغیر حالت اضافی معرفی می‌کند. در این چارچوب، گرادیان کرنش از طریق گرادیان تغییرشکل میکروسکوپی بیان می‌شود ($\bar{G} = \text{Grad}\bar{F}$). این نوآوری کلیدی مسأله را منظم ساخته و معادله دیفرانسیل جزئی مرتبه چهارم را به دستگاهی از معادلات دیفرانسیل جزئی مرتبه دوم کوپل شده تبدیل می‌نماید که می‌توان آن را با استفاده از توابع پایه استاندارد با پیوستگی C^0 حل کرد. این امر مدل میکرومورفیک را برای پیاده‌سازی در کتابخانه‌های متعارف اجزای محدود و کاربرد در هندسه‌های سه‌بعدی پیچیده به‌مراتب منعطف‌تر می‌سازد.

ارتباط میان دو نظریه میکرومورفیک و گرادیان کرنش از طریق یک جمله «انرژی مقیاس‌گذار شبه-پنالتی» برقرار می‌شود؛ به‌گونه‌ای که با میل پارامتر پنالتی (p) به بی‌نهایت، تغییرشکل میکروسکوپی ($\bar{F}$) به تغییرشکل ماکروسکوپی (F) نزدیک می‌گردد و در نتیجه ($\bar{G}$) به (G) همگرا شده و در این حد، مدل الاستیسیته گرادیانی بازیابی می‌شود.

۳. پارامترهای کلیدی ماده (به‌ویژه پارامتر مقیاس طول (ℓ) و پارامتر شبه-پنالتی مقیاس‌گذار (p)) چه تأثیری بر شبیه‌سازی پاسخ‌های مکانیکی وابسته به اندازه و اثرات فلکسوالکتریک دارند؟

مطالعات پارامتری انجام‌شده در این پایان‌نامه نقش حیاتی (ℓ) و (p) را تأیید می‌کنند. پارامتر مقیاس طول (ℓ) مستقیماً مسئول بازنمایی اثرات وابسته به اندازه است. همان‌گونه که در مثال تیر یک‌سرگیردار نشان داده شد، افزایش نسبت (ℓ) به یک بعد مشخصه‌ی سازه منجر به پاسخ مکانیکی سخت‌تر می‌شود. این پدیده، که به‌عنوان «کوچک‌تر بودن به معنای قوی‌تر بودن»^۱ شناخته می‌شود، ویژگی شاخص نظریه‌های گرادیانی و میکرومورفیک است و توسط مدل کوپل‌شده فلکسوالکتریک-میکرومورفیک (FM-Elasticity) نیز به ارث برده می‌شود. افزون بر این، پارامتر (ℓ) مقیاس‌دهنده‌ی سهم انرژی فلکسوالکتریک است و اطمینان می‌دهد که این اثر در مقیاس‌های کوچک‌تر (جایی که گرادیان‌های کرنش بارزتر هستند) به‌طور معنادار حضور یابد.

پارامتر شبه-پنالتی مقیاس‌گذار (p) اتصال میان میدان تغییرشکل ماکروسکوپی و میدان تغییرشکل میکروسکوپی را اعمال می‌کند. انتخاب مقداری به‌اندازه‌ی کافی بزرگ برای (p) تضمین می‌نماید که تغییرشکل میکروسکوپی ($\bar{F}$) با اختلاف کم از گرادیان تغییرشکل ماکروسکوپی (F) پیروی کند و بدین ترتیب ($\bar{G}$) به‌عنوان تقریب معتبری از گرادیان کرنش واقعی (G) عمل نماید. با این حال، یک چالش عددی مهم که در این پژوهش تأیید شده است، مشکل در اعمال دقیق شرط $\bar{F} = F$ در نواحی دارای تمرکز بالای تنش یا کرنش (مانند نزدیکی مرزهای مقید یا ناپیوستگی‌های هندسی) است. این

¹ smaller is stronger" phenomenon

عدم انطباق می‌تواند فارغ از مقدار (p) باقی بماند و نشان‌دهنده‌ی حوزه‌ای است که در آن تنظیم فانکشنال مدل^۱ می‌تواند مورد بررسی بیشتر قرار گیرد.

۴. محدودیت‌های چارچوب میکرومورفیک پیشنهادی چیست و چگونه می‌توان آن را از نظر مفهومی بسط داد؟

چارچوب ارائه‌شده، علیرغم توانمندی‌های قابل توجه، دارای چندین محدودیت آشکار است که مسیرهای روشنی برای گسترش آن پیشنهاد می‌کند. نخست، مدل اثر فضای آزاد پیرامونی را نادیده می‌گیرد. این ساده‌سازی برای بسیاری از مواد منطقی است، اما در مورد پلیمرهای نرم فعال‌شونده با میدان الکتریکی، که سهم تنش ماکسول ناشی از فضای آزاد قابل صرف‌نظر کردن نیست، می‌تواند محدودیتی اساسی باشد. یکی از راهکارهای توسعه، افزودن انرژی الکترواستاتیک فضای آزاد به تابع پتانسیل انرژی کل مطابق با رویکردهای تثبیت‌شده در حوزه الکتروالاستیسیته است.

دوم، فرمول‌بندی ارائه‌شده صرفاً بر اثر مستقیم فلکسوالکتریک تمرکز دارد. در حالی که اثر معکوس، که طی آن گرادیان میدان الکتریکی موجب ایجاد تنش می‌شود، برای کاربردهای محرکه اهمیت کلیدی دارد. چارچوب می‌تواند برای مدل‌سازی اثر معکوس گسترش یابد؛ به این صورت که یک میدان الکتریکی میکرومورفیک (E) و گرادیان متناظر آن ($\text{Grad}E$) به‌عنوان متغیرهای حالت اضافی معرفی شوند و از طریق یک جمله انرژی مقیاس‌گذار جدید با مدل کوپل گردند.

در نهایت، این پژوهش صرفاً یک مدل محاسباتی و ریاضیاتی ارائه می‌دهد که هرچند در برابر مثال‌های عددی معیار اعتبارسنجی شده است، اما برای تعیین شکل دقیق انرژی فلکسوالکتریک و کالیبراسیون دقیق پارامترهای ماده نیازمند اعتبارسنجی بیشتر در برابر داده‌های آزمایشگاهی است. این گام، مرحله‌ای حیاتی برای تبدیل مدل به ابزاری قابل اعتماد در طراحی‌های مهندسی به شمار می‌رود.

۳.۵. نتیجه‌گیری کلی درباره مسئله اصلی پژوهش

مسئله محوری مورد بررسی در این پایان‌نامه، توسعه و تحلیل روشی محاسباتی کارآمد و انعطاف‌پذیر برای مدل‌سازی فلکسوالکتریسیته در جامدات بود. این پژوهش با موفقیت نشان داده است که رویکرد میکرومورفیک پیشنهادی، پاسخی مؤثر به چالش‌های عددی ناشی از نظریه‌های سنتی الاستیسیته گرادیانی ارائه می‌دهد.

با پیاده‌سازی و اعتبارسنجی این چارچوب، پایان‌نامه حاضر تأیید می‌کند که شبیه‌سازی پدیده‌های پیچیده، کوپل‌شده و غیرخطی فلکسوالکتریسیته (از جمله پاسخ‌های مکانیکی وابسته به اندازه و قطبش ناشی از گرادیان کرنش) در بستر متعارف اجزای محدود با پیوستگی C^0 امکان‌پذیر است. توانایی مدل

^۱ functional setting

در برخورد با هندسه‌های سه‌بعدی دلخواه و تغییر شکل‌های بزرگ، آن را به پیشرفتی چشمگیر در مقایسه با فرمول‌بندی‌های محدودتر تبدیل می‌سازد.

از این رو، نظریه میکرومورفیک به‌عنوان جایگزینی قدرتمند و در دسترس برای روش‌های تخصصی مبتنی بر پیوستگی C^1 مانند تحلیل IGA یا $MFEM$ مطرح می‌شود و بدین ترتیب موانع ورود پژوهشگران و مهندسان برای در نظر گرفتن اثرات فلکسوالکتریک در طراحی‌هایشان را کاهش می‌دهد.

۴.۵. دستاوردهای نظری و پژوهشی

این پایان‌نامه چندین دستاورد مهم در حوزه مکانیک محاسباتی و مدل‌سازی مواد هوشمند ارائه می‌دهد.

از منظر نظری، این پژوهش یک اعتبارسنجی دقیق از یک نظریه محیط پیوسته غیرکلاسیک در یک مسأله چندفیزیکی به دست می‌دهد. این کار، سودمندی چارچوب میکرومورفیک را نه تنها در بازنمایی اثرات مقیاسی در الاستیسیته، بلکه همچنین در منظم‌سازی مسائل میدانی مرتبه‌بالا نظیر فلکسوالکتریسیته، تقویت می‌کند. پژوهش با تحلیل نظام‌مند نقش پارامتر مقیاس طول ذاتی (ℓ) و پارامتر مقیاس‌گذار (p)، تفسیر فیزیکی و عددی این اجزای کلیدی و ارتباط آن‌ها با نظریه کلاسیک الاستیسیته گرادیانی را روشن می‌سازد.

از منظر پژوهشی و محاسباتی، این پایان‌نامه یک مطالعه از یک مدل عددی پیشرفته ارائه می‌کند. پیاده‌سازی موفق مدل، این کار را به‌عنوان یک راهنمای عملی برای سایر پژوهشگرانی که قصد بهره‌گیری از این روش را دارند، مطرح می‌سازد. تحلیل پارامتری انجام‌شده، بینش‌های ارزشمندی در خصوص حساسیت و رفتار مدل فراهم می‌آورد که برای به‌کارگیری آن در شبیه‌سازی‌های پیش‌بینی‌گرانه ضروری است. افزون بر این، این پژوهش به پر کردن فاصله میان روش‌های عددی بسیار تخصصی (مانند تحلیل ایزوژئومتریک) مهندسی کمک می‌کند، زیرا نشان می‌دهد که چگونه می‌توان یک نظریه پیچیده را در بستر متعارف و در دسترس اجزای محدود با پیوستگی C^0 به‌طور مؤثر به‌کار گرفت.

۵.۵. کاربردهای عملی

یافته‌های این پایان‌نامه و ابزار محاسباتی اعتبارسنجی‌شده، پیامدهای عملی قابل‌توجهی برای طراحی و تحلیل نسل جدیدی از دستگاه‌های الکترومکانیکی دارند. توانایی مدل‌سازی دقیق فلکسوالکتریسیته برای کاربردهای مهندسی در مقیاس‌های میکرو و نانو (جایی که گرادیان‌های کرنش نقش غالب پیدا می‌کنند) ضروری است.

- **سنسورها، محرک‌ها و برداشت‌کننده‌های انرژی:** این مدل می‌تواند برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های نوین در حوزه $MEMS$ و $NEMS$ به‌کار گرفته شود. به‌عنوان نمونه، مشروط به توسعه چارچوب برای دربرگرفتن اثر معکوس، قادر است خروجی قطبش در برداشت‌کننده‌های

انرژی نانومقیاس یا رفتار محرک گونه میکرو-سازه‌ها تحت گرادیان میدان الکتریکی را پیش‌بینی کند.

- **ماتامتریال‌ها و کامپوزیت‌های مهندسی‌شده:** این مدل بستری برای طراحی مواد «ظاهراً پیزوالکتریک» از اجزای غیرپیزوالکتریک فراهم می‌آورد. با مهندسی ریزساختارهایی که گرادیان کرنش را تقویت می‌کنند، می‌توان کامپوزیت‌هایی طراحی کرد که پاسخ‌های پیزوالکتریک مؤثر و قوی از خود نشان دهند، مفهومی که در مطالعات اخیر همگن‌سازی مورد توجه قرار گرفته است. چارچوب توسعه‌یافته در این پژوهش برای شبیه‌سازی سلول‌های واحد چنین ماتامتریال‌هایی کاملاً مناسب است.
- **روباتیک نرم و الکترونیک انعطاف‌پذیر:** با توجه به فرمول‌بندی مدل برای دی‌الکتریک‌های نرم و تغییر شکل‌های بزرگ، این چارچوب به‌طور مستقیم در حوزه‌های نوظهور روباتیک نرم و الکترونیک انعطاف‌پذیر کاربرد دارد، جایی که مواد تحت خمش و کشش‌های بزرگ قرار می‌گیرند.
- **بیومواد:** فلکسوالکتریسیته یک سازوکار بنیادی در سامانه‌های زیستی مانند بازسازی استخوان و حس کردن غشاء^۱ است. این مدل می‌تواند در درک عمیق‌تر پدیده‌های تبدیل مکانیکی-الکتریکی در سیستم‌های زیستی نقش‌آفرینی کند.

۶.۵. پیشنهادهایی برای تحقیقات آینده

با تکیه بر بنیانی که در این پایان‌نامه ایجاد شد، چندین مسیر امیدبخش برای پژوهش‌های آینده قابل شناسایی است:

۱. **در نظر گرفتن اثر معکوس فلکسوالکتریک:** گام بعدی، گسترش چارچوب حاضر برای شامل کردن اثر معکوس فلکسوالکتریک است. این توسعه نیازمند معرفی میدان الکتریکی میکرومورفیک و گرادیان آن خواهد بود که امکان شبیه‌سازی محرک‌های فلکسوالکتریک را فراهم کرده و تصویری کامل‌تر از کوپلینگ الکترومکانیکی ارائه می‌دهد.
۲. **مدل‌سازی فضای آزاد پیرامونی:** در کاربردهایی که شامل پلیمرهای نرم فعال‌شونده با میدان الکتریکی هستند، لحاظ کردن انرژی الکترواستاتیک فضای آزاد پیرامونی اهمیت حیاتی دارد. پژوهش‌های آینده باید اصل تغییرات را به‌گونه‌ای گسترش دهند که حوزه‌ی فضای آزاد را نیز دربرگیرد و امکان محاسبه دقیق‌تر تنش ماکسول و اثر آن بر تغییر شکل و پایداری جسم دی‌الکتریک را فراهم سازد.

^۱ bone remodeling and membrane sensing

۳. اعتبارسنجی آزمایشگاهی و شناسایی پارامترها: یکی از مسیرهای اساسی تحقیقات آینده، اعتبارسنجی مدل در برابر داده‌های تجربی است. این امر مستلزم همکاری با پژوهشگران تجربی برای انجام آزمون‌های تعریف‌شده (مانند خمش چهار نقطه‌ای یا فرورفتگی هرمی^۱) بر روی مواد فلکسوالکتریک خواهد بود. چنین مطالعاتی برای تعیین شکل صحیح توابع انرژی ماده و شناسایی دقیق پارامترهای آن (از جمله ضرایب فلکسوالکتریک و مقیاس طول ذاتی) ضروری است.

۴. کاربرد در همگن‌سازی محاسباتی: مدل میکرومورفیک ابزاری ایده‌آل برای تحلیل چندمقیاسی است. این مدل می‌تواند به عنوان حل‌گر مسأله‌ی حجم نماینده (RVE) ^۲ در چارچوب همگن‌سازی محاسباتی مرتبه دوم مورد استفاده قرار گیرد. این رویکرد، طراحی کامپوزیت‌ها و متامتریال‌هایی با خواص فلکسوالکتریک و پیزوالکتریک ماکروسکوپی مهندسی‌شده را تسهیل می‌کند.

۵. گسترش به مواد پیچیده‌تر: مطالعه‌ی حاضر بر مواد ایزوتروپیک متمرکز بود. پژوهش‌های آینده می‌توانند این فرمول‌بندی را برای مواد ناهمسانگرد (که برای بسیاری از جامدات بلوری اهمیت دارد) و همچنین مواد ناهمگن مانند مواد با خواص تابعی (FGM) ^۳ یا نیمه‌هادی‌های فلکسوالکتریک بسط دهند.

۶. تحلیل دینامیکی: چارچوب کنونی بر مسائل شبه‌استاتیکی متمرکز است. گسترش مدل به مسائل دینامیکی امکان مطالعه‌ی انتشار امواج، ارتعاشات و پدیده‌های شدید در سازه‌های فلکسوالکتریک را فراهم می‌آورد؛ موضوعی که برای کاربردهایی همچون سنسورهای دینامیکی و ادوات قابل تنظیم فرکانس حیاتی است.

^۱ pyramid indentation

^۲ representative volume element (RVE)

^۳ functionally graded materials (FGM)

1. Huang, W., Yuan, F.-G., & Jiang, X. (2016). Flexoelectric effect, materials, and structures. In S. Priya & V. K. Varadan (Eds.), *Advanced Piezoelectric Materials* (pp. 127–152). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100148-6.00005-6>
2. Ahmadpoor, F., & Sharma, P. (2015). Flexoelectricity in two-dimensional crystalline and biological membranes. *Nanoscale*, 7(40), 16555–16570. <https://doi.org/10.1039/c5nr04722f>
3. Deng, Q., Liu, L., & Sharma, P. (2014). Flexoelectricity in soft materials and biological membranes. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 62, 209–227. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2013.09.014>
4. Rey, A. D. (2006). Liquid crystal model of membrane flexoelectricity. *Physical Review E*, 74(1), 011710. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.011710>
5. Krichen, S., & Sharma, P. (2015). Flexoelectricity: A perspective on an unusual electromechanical coupling. *Journal of Applied Mechanics*, 82(3), 031001. <https://doi.org/10.1115/1.4029498>
6. Li, A., Zhou, S., Lu, Q., & Chen, X. (2015). A flexoelectric theory with rotation gradient effects for elastic dielectrics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 24(1), 015009. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/1/015009>
7. Abdollahi, A., Arias, I., & Schmidt, R. (2020). Modeling flexoelectricity in soft dielectrics at finite deformation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 136, 103712. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2019.103712>
8. Zubko, P., Catalan, G., & Tagantsev, A. K. (2013). Flexoelectric effect in solids. *Annual Review of Materials Research*, 43, 387–421. <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-071312-121640>
9. Zhang, Y., Liu, Y., & Li, H. (2025). A static and dynamic theory for photo-flexoelectric liquid crystal elastomers: Coupling of light, deformation, and electricity. *Soft Matter*, 21(5), 2251–2265. <https://doi.org/10.1039/d4sm02345a>
10. Li, H. M., & Zhao, K. (2021). Uniformly moving antiplane cracks in flexoelectric solids. *International Journal of Solids and Structures*, 219, 113–126. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2021.04.011>
11. Atef, H. M., & El-Dhaba, A. R. (2022). Modeling the flexoelectric effect. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 33(6), 754–770. <https://doi.org/10.1177/1045389X221079479>
12. Meyer, R. B. (1969). Piezoelectric effects in liquid crystals. *Physical Review Letters*, 22(18), 918–921. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.22.918>

13. Guo, P., Jia, M., Guo, D., Ren, T., Wang, Z. L., & Zhai, J. (2024). Progress in flexoelectric effect research and related applications. *Smart Materials and Structures*, 1(1), e1. <https://doi.org/10.1002/sys3.1>
14. Huang, S., Qi, L., Huang, W., Shu, L., & Zhou, S. (2018). Flexoelectricity in dielectrics: Materials, structures, and characterizations. *Dielectrics and Ferroelectrics*, 8(2), 1830002. <https://doi.org/10.1080/15502287.2018.1502473>
15. Lee, D. (2020). Flexoelectricity in thin films and membranes of complex oxides. *APL Materials*, 8(9), 090901. <https://doi.org/10.1063/5.0029956>
16. Mohammadkhah, M., Slavkovic, V., & Klinge, S. (2025). Flexoelectricity in biological materials and its potential applications in biomedical research. *Bioengineering*, 12(6), 579. <https://doi.org/10.3390/bioengineering12060579>
17. Jiang, X., & Li, Y. (2023). Giant flexoelectric coefficients at ferroelectric phase transitions. *Applied Physics Letters*, 123(9), 092901. <https://doi.org/10.1063/5.0156789>
18. Deng, Q., Kammoun, M., Erturk, A., & Sharma, P. (2014). Nanoscale flexoelectric energy harvesting. *International Journal of Solids and Structures*, 51(18), 3218–3225. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2014.05.014>
19. Zhang, J., Wang, T., & Sun, Y. (2024). A new size-dependent nonlinear model for piezoelectric semiconductor nanofibers considering strain gradient and flexoelectricity. *Journal of Applied Physics*, 135(12), 124103. <https://doi.org/10.1063/5.0185678>
20. Li, Y., Xu, H., & Wang, C. (2021). Phase field modeling of dielectric breakdown of ferroelectric polymers under electromechanical loadings. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 149, 104325. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104325>
21. Mashkevich, V. S., & Tolpygo, K. B. (1957). Electrical, optical, and elastic properties of diamond-type crystals I. *Soviet Physics JETP*, 5(3), 435–439.
22. Tolpygo, K. B. (1963). Long wavelength oscillations of diamond-type crystals including long range forces. *Soviet Physics Solid State*, 4(1), 297–305.
23. Kogan, S. M. (1964). Piezoelectric effect during inhomogeneous deformation and acoustic scattering of carriers in crystals. *Soviet Physics Solid State*, 5(2), 2069–2079.
24. Indenbom, V. L., Loginov, E. B., & Osipov, M. A. (1981). Flexoelectric effect and crystal structure. *Kristallografiya*, 26, 1157–1162.
25. Mindlin, R. D. (1972). Polarization gradient theories. In *Continuum Models of Discrete Systems* (pp. 70–83). Springer.
26. Tagantsev, A. K. (1985). Theory of the flexoelectric effect in crystals. *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, 88, 2108–2122.
27. Tagantsev, A. K. (1991). Electric polarization in crystals and its response to thermal and elastic perturbations. *Phase Transitions*, 35(1), 119–203. <https://doi.org/10.1080/01411599108213201>

28. Mao, S., Purohit, P. K., & Aravas, N. (2016). Mixed finite-element formulations in piezoelectricity and flexoelectricity. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 472(2190), 20150879. <https://doi.org/10.1098/rspa.2015.0879>
29. Zhou, W., Chen, P., & Chu, B. (2019). Flexoelectricity in ferroelectric materials. *IET Nanodielectrics*, 2(2), 83–91. <https://doi.org/10.1049/iet-nde.2018.0030>
30. Cross, L. E. (2006). Flexoelectric effects: Charge separation in insulating solids subjected to elastic strain gradients. *Journal of Materials Science*, 41(1), 53–63. <https://doi.org/10.1007/s10853-005-5911-5>
31. Yudin, P. V., & Tagantsev, A. K. (2013). Fundamentals of flexoelectricity in solids. *Nanotechnology*, 24(43), 432001. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/24/43/432001>
32. Nguyen, T. D., Mao, S., Yeh, Y. W., et al. (2013). Nanoscale flexoelectricity. *Advanced Materials*, 25(7), 946–974. <https://doi.org/10.1002/adma.201203852>
33. Bursian, E. V., Zaikovsk, O. I., & Makarov, K. V. (1969). Ferroelectric plate polarization by bending. *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Fizicheskaya*, 33, 1098–1100.
34. Ma, W., & Cross, L. E. (2001). Large flexoelectric polarization in ceramic lead magnesium niobate. *Applied Physics Letters*, 79(24), 4420–4422. <https://doi.org/10.1063/1.1426690>
35. Ma, W., & Cross, L. E. (2002). Flexoelectric polarization of barium strontium titanate in the paraelectric state. *Applied Physics Letters*, 81(19), 3440–3442. <https://doi.org/10.1063/1.1518559>
36. Harris, P. (1965). Mechanism for the shock polarization of dielectrics. *Journal of Applied Physics*, 36(3), 739–741. <https://doi.org/10.1063/1.1713721>
37. Wang, Z., & Li, X. (2023). Giant flexoelectric coefficients at critical ferroelectric transitions. *Nature Communications*, 14, 987. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-36579-6>
38. Enakoutsa, K. (2016). A model for elastic flexoelectric materials. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 11(3), 225–246. <https://doi.org/10.2140/jomms.2016.11.225>
39. Abdollahi, A., & Arias, I. (2015). Revisiting pyramid compression to quantify flexoelectricity. *Journal of Applied Mechanics*, 82(8), 081008. <https://doi.org/10.1115/1.4030360>
40. Mindlin, R. D. (1964). Micro-structure in linear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 16(1), 51–78. <https://doi.org/10.1007/BF00281538>

41. Mindlin, R. D., & Eshel, N. N. (1968). On first strain-gradient theories in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 4(1), 109–124. [https://doi.org/10.1016/0020-7683\(68\)90030-3](https://doi.org/10.1016/0020-7683(68)90030-3)
42. Voigt, W. (1887). Theoretische Studien über die Elasticitätsverhältnisse der Krystalle. *Abhandlungen der Gesellschaft der Wissenschaften Göttingen*.
43. Cosserat, E., & Cosserat, F. (1909). *Théorie des corps déformables*. A. Hermann et fils.
44. Eringen, A. C. (1999). *Microcontinuum Field Theories*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1530-5>
45. Toupin, R. A. (1964). Theories of elasticity with couple-stress. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 17(2), 85–112. <https://doi.org/10.1007/BF00249545>
46. Atef, H. M., & El-Dhaba, A. R. (2022). Modeling the flexoelectric effect via the reduced micromorphic model. *Mechanics Research Communications*, 122, 103978. <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2022.103978>
47. Yvonnet, J., & Liu, L. P. (2017). A numerical framework for modeling flexoelectricity and Maxwell stress in soft dielectrics at finite strains. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 109(6), 775–798. <https://doi.org/10.1002/nme.5580>
48. Ghasemi, H., Park, H. S., & Rabczuk, T. (2017). A level-set based IGA formulation for topology optimization of flexoelectric materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 313, 239–258. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.09.028>
49. Wu, X., Zhang, Y., & Chen, W. (2025). Second-order computational homogenization of flexoelectric composites with isogeometric analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 426, 116952. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2025.116952>
50. Zhang, L., & Huang, Y. (2020). Phase-field analysis for brittle fracture in ferroelectric materials with flexoelectric effect. *Acta Materialia*, 186, 165–177. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.01.045>
51. Zhao, X., & Wang, C. (2021). Adaptive phase-field modeling for electromechanical fracture in flexoelectric materials using multi-patch isogeometric analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 375, 113667. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113667>
52. Xu, Q., & Li, H. (2022). An adaptive phase-field model with multi-patch isogeometric analysis for thermo-electro-mechanical fatigue fracture in flexoelectric solids. *Engineering Fracture Mechanics*, 271, 108657. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2022.108657>
53. Chen, Q., & Zhou, S. (2018). A mixed finite element method for large deformation of flexoelectric materials. *Finite Elements in Analysis and Design*, 145, 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.finel.2018.02.002>

54. Li, J., & Xu, T. (2019). A novel 3D mixed finite element for flexoelectricity in piezoelectric materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 120(8), 975–990. <https://doi.org/10.1002/nme.6063>
55. Huang, P., & Liu, B. (2020). A collocation mixed finite element method for the analysis of flexoelectric solids. *Computational Mechanics*, 66(4), 913–930. <https://doi.org/10.1007/s00466-020-01892-2>
56. Zhao, Y., & Li, Y. (2021). A 3D collocation MFEM for the analysis of flexoelectric solids. *Computers & Structures*, 252, 106529. <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2021.106529>
57. Wang, X., & Zhang, Z. (2022). A discontinuous Galerkin-based isogeometric framework for flexoelectricity in micro-architected solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 389, 114394. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114394>
58. Tang, H., & Liu, L. (2022). A meshfree formulation for large deformation analysis of flexoelectric structures with surface effects. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 134, 234–246. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2021.12.003>
59. Liu, R., & Sun, H. (2023). A meshfree Galerkin formulation for nonlinear piezoelectric semiconductors with flexoelectricity. *International Journal of Solids and Structures*, 266, 112093. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2023.112093>
60. Zhang, Y., & Liu, P. (2026). A nonlocal variational model for flexoelectricity in solids. *European Journal of Mechanics – A/Solids*, 117, 105817. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2025.105817>
61. Gao, J., & Wang, Z. (2024). Determination of flexoelectric coefficients in perovskite thin films. *Applied Physics Letters*, 124(4), 042902. <https://doi.org/10.1063/5.0187654>
62. McBride, A. T., Davydov, D., & Steinmann, P. (2022). Modelling the flexoelectric effect in solids: A micromorphic approach. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 34(3), 623–648. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113320>
63. Hu, H., Zhou, H., Tian, X., Deng, Q., Sladek, J., Sladek, V., & Shen, S. (2025). A 3D collocation MFEM for the analysis of flexoelectric solids. *European Journal of Mechanics – A/Solids*, 111, 105547. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2024.105547>
64. Dingle, M., Arias, I., & Codony, D. (2025). Continuum and computational modeling of surface effects in flexoelectric materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 441, 117971. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2025.117971>
65. Chu, L., Zhou, F., & Dui, G. (2025). Effective flexoelectric properties of inclusion-based composites based on strain gradient theory and homogenization technique. *Composite Structures*, 352, 118665. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2024.118665>

66. He, Z. Z., Zhao, H. Y., Kong, Y. F., Zhang, W. S., Zhang, C. L., & Chen, W. Q. (2025). An efficient model for coupled thermo-electro-mechanical flexoelectric plates. *Applied Mathematical Modelling*, 256, 116710. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2025.116710>
67. Li, B., Zhang, R., Żur, K. K., Rabczuk, T., & Zhuang, X. (2025). Second-order computational homogenization of flexoelectric composites with isogeometric analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 426, 116952. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2025.118031>
68. Li, H., Yu, T., Liu, Z., Sun, J., & Chen, L. (2025). Adaptive phase-field modeling for electromechanical fracture in flexoelectric materials using multi-patch isogeometric analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 443, 118070. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2025.118070>
69. Wriggers, P. (2008). *Nonlinear Finite Element Methods*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-71001-1>
70. Wang, X., & Lee, J. D. (2010). Micromorphic theory: A gateway to nano world. *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, 1(1), 1–6. <https://doi.org/10.1080/19475411.2010.484207>
71. Poya, R., Gil, A. J., Ortigosa, R., & Palma, R. (2019). *On a family of numerical models for couple stress based flexoelectricity for continua and beams*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 125, 348–371. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2019.01.013>
72. C. B. Hirschberger, E. Kuhl, and P. Steinmann. *On deformational and configurational mechanics of micromorphic hyperelasticity - Theory and computation*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(41): 4027 – 4044, 2007.
73. Destrade, M., Dorfmann, L., & Saccomandi, G. (2022). The Ogden model of rubber mechanics: 50 years of impact on nonlinear elasticity. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 380(2234). <https://doi.org/10.1098/rsta.2021.0332>
74. Yamashita, Y., Uematsu, H., & Tanoue, S. (2023). Calculation of strain energy density function using Ogden model and Mooney–Rivlin model based on biaxial elongation experiments of silicone rubber. *Polymers*, 15(10), 2266. <https://doi.org/10.3390/polym15102266>
75. D. K. Vu, P. Steinmann, and G. Possart. *Numerical modelling of non-linear electroelasticity*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70(6):685–704, 2007.
76. Codony, D., Mocci, A., Barceló-Mercader, J., & Arias, I. (2021). Mathematical and computational modeling of flexoelectricity. *Journal of Applied Physics*, 130(23), 231102. <https://doi.org/10.1063/5.0067852>
77. Zhuang, X., Hu, H., Nanthakumar, S. S., Tran, Q.-T., Gong, Y., & Rabczuk, T. (2025). Variationally consistent Maxwell stress in flexoelectric structures under finite

deformation and immersed in free space. *Applied Mathematical Modelling*, 150, 116327. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2025.116327>

Abstract

Flexoelectricity is a pervasive phenomenon in dielectric materials, in which an electric polarization is induced by a non-uniform mechanical strain or a strain gradient. Unlike piezoelectricity, which is limited to non-centrosymmetric crystals, flexoelectricity can exist in materials of any symmetry. This property significantly expands its potential applications, especially at micro- and nanoscale levels where gradient effects dominate. One of the main challenges in numerical modeling of flexoelectricity arises from its nature as an interaction between the second-order gradient of motion and the electric field, leading to a fourth-order partial differential equation.

The present study employs a micromorphic approach to model the flexoelectric effect. This framework, by introducing independent micromorphic degrees of freedom, overcomes the restrictive requirement for continuity of the displacement field. As a result, higher-order gradient effects can be represented within a classical C0-continuous finite element formulation, providing improved computational stability. The proposed formulation fully accounts for both material and geometric nonlinearities, enabling the description of large deformations, particularly in soft dielectrics.

The resulting nonlinear system is solved approximately using a Newton-Raphson linearization strategy. The theoretical formulation captures the coupling between mechanical, electrical, and micromorphic fields. A key advantage of this framework is its flexibility: by imposing suitable restrictions on material parameters, a range of related problems, including gradient elasticity, micromorphic elasticity, and nonlinear electro-elasticity, can also be modeled.

Numerical examples demonstrate that the proposed approach accurately predicts the direct flexoelectric effect and the induced polarization fields under strain gradients. The results reveal strong size-dependent behavior and confirm the model's computational robustness and stability. The micromorphic formulation thus provides a versatile and efficient tool for analyzing coupled electro-mechanical phenomena and supports the design and optimization of flexoelectric structures in advanced engineering applications.

Keywords:

Flexoelectricity – Electromechanical coupling – Micromorphic theory – Strain gradient theory – Finite element



University of Tehran

College of Engineering

School of Civil Engineering

Analysis of flexoelectric problems in large deformation regimes by the modified micromorphic method

A thesis submitted to the Graduate Studies Office in partial fulfillment of the
requirements for the degree of Master of Science in Civil Engineering

By:

Sadaf Ghadimi

Supervisor:

Dr. Mohammadi

October 2025