



## مدل سازی میکرومکانیکی رفتار تغییر شکل در مقیاس میکروساختار فولاد ضدزنگ 316L بر پایه مدل مدل میکروساختاری با استفاده از روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته

بهرام بندشه<sup>1</sup>، عبدالرحمان جامی الاحمدی<sup>2\*</sup>

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

\* مشهد، کدپستی 9177948974، jaami-a@um.ac.ir

### چکیده

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 20 مهر 1393

پذیرش: 06 آذر 1393

ارائه در سایت: 03 دی 1393

کلید واژگان:

روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته

زیربرنامه UMAT

میکرومکانیک

فولاد ضدزنگ L316

دانه بندی ورونوی

ماهیت ناهمسان گرد دانه‌های موجود در بافت فلزات کریستالی سبب به وجود آمدن ناسازگاری بین دانه‌ها در هنگام تغییر شکل می‌شود. این پدیده با کوچکتر شدن مقیاس تا حد میکرو و مزو، تشدید می‌شود. ناهمگنی موجود در تغییر شکل در مقیاس میکرو را با قوانین بنیادی تئوری پیوسته پلاستیسیته نمی‌توان مورد بررسی قرار داد. در این مطالعه رفتار تغییر شکل لغزشی فولاد ضدزنگ آستنیتی 316L در مقیاس‌های یاد شده با استفاده از اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته مدل‌سازی شده است. فرمول‌بندی مدل ماده با استفاده از زیربرنامه UMAT به نرم افزار آباکوس معرفی شده است. اعتبارسنجی با استفاده از مقایسه نتایج حل به روش کریستال پلاستیسیته حاصل از آباکوس با نتایج تحلیلی حاصل نرم افزار متلب، انجام شده است. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق خوب نتایج عددی و تحلیلی می‌باشد. در بخش دوم مدل‌سازی آزمون کشش روی نمونه فولاد ضدزنگ حاوی یک دانه به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته انجام شده است و با نتایج تجربی مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که رفتار تغییر شکل و موضعی شدن تک‌کریستال با روش پیشنهاد شده قابل پیش بینی بوده در حالیکه روش اجزاء محدود ماکرومکانیک از شناسایی این رفتارها ناتوان می‌باشد. در بخش پایانی، مدل پلی کریستال میکروساختار با تعداد 10 دانه تولید شد. با تعریف جهات کریستالی متفاوت برای مدل میکروساختار تولید شده، تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته روی آن صورت گرفت. نتایج حاکی از غیریکنواخت بودن تغییر شکل در مقیاس دانه‌بندی است. همچنین با تغییر جهات کریستالی نمودار تنش- کرنش ماده در بخش پلاستیک رفتارهای متفاوتی را نشان می‌دهد.

## Microstructure based micromechanical modeling of microstructural scale deformation in stainless steel 316L using crystal plasticity FEM

Bahram Bandeshah, Abdolrahman Jaamialahmadi\*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University Of Mashhad, Mashhad, Iran

\* P.O.B. 9177948974 Mashhad, Iran, jaami-a@um.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 12 October 2014  
Accepted 27 November 2014  
Available Online 24 December 2014

### Keywords:

Crystal plasticity FE modeling, UMAT  
micro-mechanics modeling  
Voronoi tessellation  
representative volume element (RVE)

### ABSTRACT

Grains in polycrystalline texture have anisotropic deformation nature. This cause material to show completely different behavior at meso and micro scale than they do at macro scale. To be specific, deformation at these scales is heterogeneous and cannot be modeled using constitutive equation in continuum plasticity. In this paper, in order to investigate deformation behavior of 316L stainless steel at micro scale a crystal plasticity finite element (CPFE) modeling system has been developed. The crystal plasticity equations were implemented in the ABAQUS/Implicit FE code through a user-defined material subroutine, UMAT. Verification was done through comparing the CPFE result against those obtained through implementing crystal plasticity formulation in MATLAB software. Comparison show good agreement between the analytical and CPFE result. Afterward, three dimensional simulation of tensile test on Stainless Steel type 316L is carried out using CPFE method and continuum macro mechanic FE. Deformation characteristic and localization behavior of single grain specimen during tensile test has been captured and predicted using CPFE method; on the other hand, macro mechanic finite element is unable of predicting localization and evolution of lattice at micro and meso scale. At the last part, a set of CPFE analysis are conducted on representative volume elements with 10 Grain and 5 set of different grain orientations. Results show a scattering in plastic part of stress-strain response of material with switching from one set of grain orientation to another set. It has been found that the material behavior at these scales is highly direction dependent.

### 1- مقدمه

پلی کریستال باعث به وجود آمدن ناسازگاری بین دانه‌ها می‌شود. وجود این واقعیت در فرایند تغییر شکل فلزات دلالت بر این دارد که تغییر شکل در مقیاس ریزساختار ناهمگن می‌باشد. مواد پلی کریستال در مقیاس میکرو و

گستره وسیعی از فلزات مورد استفاده در کاربردهای مهندسی به صورت پلی کریستال می‌باشند. ناهمسان‌گردی الاستیک و پلاستیک دانه‌ها در مواد

Please cite this article using:

B. Bandeshah, A. Jaamialahmadi, Microstructure based micromechanical modeling of microstructural scale deformation in stainless steel 316L using crystal plasticity FEM, Modares Mechanical Engineering, Vol. 15, No. 2, pp. 113-123, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

می‌توان با تخصیص درصدهای فازی مختلف به آن، رفتار مکانیکی فولاد دو فازی را مطالعه نمود [3,4].

از مطالعات انجام شده در این زمینه می‌توان به پژوهش جعفری و همکاران [5] بر روی رفتار مکانیکی آهن معمولی به روش کریستال پلاستیسیته اشاره نمود. آنها در مطالعه خود مدل میکروساختار دوبعدی ساده‌ای را تولید نمودند. در پژوهش یاد شده، اندازه همه دانه‌ها یکسان و برابر با 50 میکرون در نظر گرفته شد. این مطالعه علی‌رغم اینکه رهیافت جدیدی محسوب می‌شود اما از مدل میکروساختار مشابه به حالت واقعی استفاده نکرده است. همچنین بدلیل استفاده از مدل میکروساختار دوبعدی به جای مدل سه‌بعدی و در نظر گرفتن اندازه دانه یکسان، نمی‌تواند اطلاعات دقیقی از وضعیت تغییر شکل در مقیاس میکروساختار و نحوه برهم کنش دانه‌ها ارائه دهد.

از دیگر مطالعات انجام شده در این زمینه می‌توان به مقاله رضایی‌بزاز و همکاران [6] در سال 2012 اشاره کرد. آن‌ها در مقاله خود با استفاده از تصویر برداری SEM<sup>10</sup>، میکروساختار دوبعدی فولاد دوفازی فریت - مارتزیت را تولید کردند و با تعریف مدل ماده وس<sup>11</sup> در نرم‌افزار آباکوس و وارد کردن مدل هندسی میکروساختار به دست آمده از SEM به نرم‌افزار آباکوس، منحنی تنش-کرنش و الگوی شکست فولاد دوفازی را شبیه‌سازی کردند. این تحقیق بدلیل عدم استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته قابلیت شناسایی پدیده‌های حاصل از لغزش کریستالی و همچنین تاثیرات بافت را دارا نمی‌باشد. در مطالعه [7] در سال 2005 آلیاژی مجازی از آهن و مس با هدف تعیین تنش بین‌گره‌ها در فازهای مختلف شبیه‌سازی شد. در این تحقیق هر دانه به 48 جزء<sup>12</sup> 10 گره‌ای تقسیم شده بود و دانه‌ها دارای اشکال ابتدایی بودند. در سال 2013 پال<sup>13</sup> [8] مطالعه‌ای میکرومکانیکی بر روی میکروساختار فولاد دوفازی DP590 با هدف مشاهده رفتار تغییر شکل، موضعی شدن کرنش پلاستیک و ناپایداری پلاستیک انجام داد. در تحقیق یاد شده موضعی شدن کرنش به خاطر تغییر شکل‌های ناسازگار بین فاز سخت مارتزیت و فاز نرم فریت، گزارش شد. همچنین الگوهای واماندگی متفاوت بر روی مدل اجزاء محدود مورد بررسی قرار گرفت. وی دریافت که الگوی واماندگی موضعی ارتباط تنگاتنگی با وضعیت تنش در ماده دارد. گزنالس [9] در سال 2012 در رساله دکتری خود تغییر شکل پلی کریستال‌ها و تنش‌های پسماند در آن‌ها را در مقیاس میکروساختار مورد بررسی قرار داد. وی همچنین تاثیرات درصد فازها در آلومینا<sup>14</sup> را مطالعه کرد. رهنما و فرهنگ‌دوست [10] در سال 2012 مدل‌سازی آماری رشد ترک در زمینه میکروساختاری در آلیاژ Ti-6Al-4V مورد مطالعه قرار دادند. آنها با استفاده از الگوریتم دانه‌بندی ورونوی<sup>15</sup> مدل دوبعدی میکروساختار را تولید نمودند و مسئله را تحت شرایط کرنش سطحی حل نمودند. عدم استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته و در نظر گرفتن مدل دو بعدی برای میکروساختار موجب محدودیت نتایج حاصل از تحقیق یاد شده خواهد شد.

فولادهای ضدزنگ باتوجه به خواص خوبی که دارند داری کاربردهای زیادی در صنعت می‌باشند. با توجه به کاربردهای فولاد ضدزنگ آستنیتی<sup>16</sup> گرید 316L در محصولاتی با ابعاد کوچک مانند میکرولوله‌ها، تجهیزات

مزو<sup>1</sup> رفتار بسیار متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند از خود نشان می‌دهند. در نتیجه تنش‌های محلی، کرنش‌ها، و دوران‌های درون هر دانه به‌صورت غیریکنواخت<sup>2</sup> و ناپیوسته خواهد بود. تنش‌ها، کرنش‌ها و دوران‌ها نه تنها به جهت دانه‌ها بستگی خواهند داشت بلکه از قیدها و محدودیت‌هایی که دانه‌های مجاور ایجاد می‌کنند، نیز تاثیر خواهند پذیرفت.

تئوری پلاستیسیته مورد استفاده در ماکرومکانیک با استفاده از مشاهدات تجربی در مقیاس ماکرو پی‌ریزی شده است که به پدیده‌های تغییر شکل در فلزات با یک دید محیط پیوسته نگاه می‌کند. این تئوری که با عنوان پلاستیسیته پدیداری<sup>3</sup> نیز شناخته می‌شود، مکانیزم‌هایی که باعث ایجاد تغییر شکل پلاستیک می‌شوند را در نظر نمی‌گیرد و تغییر شکل را بصورت یکنواخت فرض می‌کند. در حالی که تغییر شکل در فلزات ناشی از لغزش در روی صفحاتی خاص و در جهاتی خاص می‌باشد که این باعث غیریکنواختی تغییر شکل در مقیاس میکروساختار می‌شود. به همین دلیل این تئوری در پیش‌بینی تغییر شکل در مقیاس میکروساختار و همچنین مطالعه تاثیرات مشخصات دانه‌ها و بافت فلز بر روی روند تغییر شکل ناتوان است. بنا بر آنچه گفته شد اخیراً استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته<sup>4</sup> که با یک رویکرد فیزیکی تغییر شکل در فلزات کریستالی را مورد مطالعه قرار می‌دهد، مورد توجه محققان زمینه علم مواد و مکانیک قرار گرفته است.

با مدل‌سازی قوانین فیزیکی حاکم در مقیاس مزو یا همان مقیاس دانه، استخراج خواص مواد در مقیاس ماکرو امکان پذیر خواهد بود. این زمینه از مطالعات بین رشته‌ای مهندسی مواد و مکانیک که سعی در بررسی روش‌های مناسب برای مدل‌سازی مواد در مقیاس‌های متفاوت و ارتباط این مقیاس‌ها با یکدیگر دارد، با عنوان مدل‌سازی چند مقیاسی مواد<sup>5</sup> شناخته می‌شود. مثلاً واماندگی در مقیاس ماکرو اغلب دلالت بر این دارد که نواحی مشخصی از ماده در مقیاس میکرو دچار واماندگی شده‌اند. به علاوه، ثابت شده که مشخصات مرز دانه‌ها در توضیح و کنترل پلاستیسیته مواد در دمای بالا، ابرپلاستیسیته مواد<sup>6</sup> و شکنندگی<sup>7</sup> نقش بسزایی دارند [1]. اساساً درک بهتر از اینکه چه ریزساختاری آسیب پذیرتر می‌باشد، ما را به تولید موادی بهتر از لحاظ کارایی و بهره‌وری در مقیاس ماکرو قادر خواهد ساخت که مثال‌هایی از آن می‌توانند شامل تولید میکروساختار با رفتار الاستیک-پلاستیک مطلوب در مقیاس ماکرو و یا تولید دوقلویی<sup>8</sup> مقاوم به خوردگی باشد [2].

هدف زمینه مطالعاتی مدل‌سازی چند مقیاسی، توسعه امکانی برای انجام مطالعه بر روی میکروساختارهای متفاوت بدون نیاز به انجام عملیات هزینه بر آزمایشگاهی نظیر سیکل‌های عملیات حرارتی برای به‌دست آوردن میکروساختار مورد نظر، می‌باشد. برای مثال جهت مطالعه تاثیر بافت بر روی شکل‌پذیری ورق‌ها به تولید بافت مورد نظر از لحاظ اندازه دانه و چینش جهات کریستالی دانه‌ها از طریق عملیات حرارتی نیاز است. یا جهت بررسی تاثیر درصد فازها بر روی رفتار فولادهای دوفازی تولید این نوع فولادها با درصد عناصر فازی مختلف ضروری است. مدل‌سازی چند مقیاسی بخش اعظمی از نیاز به این نوع عملیات آزمایشگاهی برای تولید میکروساختارها را از روی دوش محققان بر می‌دارد. مثلاً با داشتن یک المان حجمی نماینده<sup>9</sup>

- 1- Meso(10-5m)
- 2- Heterogeneous
- 3- Phenomenological plasticity
- 4- Crystal plasticity
- 5- Multi-scale material modeling
- 6- Superplasticity
- 7- fragility
- 8- Twinning
- 9- Representative volume element

10- Scanning electron microscope  
11- Voce  
12- Element  
13- Paul  
14- Alumina  
15- Voronoi  
16- Austenite stainless steel

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a} \operatorname{sgn}\left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right)^n \quad (2)$$

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad \beta = 1, 2, \dots, 12 \rightarrow (\text{FCC}) \quad (3)$$

$$\ddot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) = C_{ijkl} \left( \dot{\epsilon}_{kl} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mu_{ij}^{(\alpha)} \right) \quad (4)$$

$$\mu_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (s_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + s_l^{(\alpha)} m_k^{(\alpha)}) \quad (5)$$

در این روابط  $\alpha$  نمایانگر سیستم لغزشی می باشد که توسط  $s_k^{(\alpha)}$  و  $m_l^{(\alpha)}$  مشخص می شود. تعداد سیستم های لغزشی به نوع ساختار شبکه کریستالی بستگی دارد. برای مثال ساختار کریستالی FCC دارای چهار صفحه لغزشی مستقل،  $\langle 111 \rangle$ ، می باشد که در هر کدام سه جهت لغزش مستقل،  $\{110\}$ ، وجود دارد که مجموعاً 12 سیستم لغزشی را تشکیل خواهند داد ( $\alpha = 1, 2, \dots, 12$ ). در ابتدای تغییر شکل در همه سیستم های لغزشی  $\tau^\alpha = 0$  می باشد و جهت لغزش  $S^{(\alpha)}$  و نرمال بر صفحه لغزش  $m^{(\alpha)}$  برای همه ی جزء های درون یک دانه خاص یکسان است. هنگامی که تغییر شکل پلاستیک رخ می دهد مقادیر بردار نرمال و جهت لغزش (در صورت استفاده از فرمول بندی کرنش محدود که در این مقاله از آن استفاده شده است)، حتی در درون یک دانه نیز ممکن است دارای مقادیر مختلف برای هر کدام از 12 سیستم لغزش باشند.  $C_{ijkl}$  تانسور مرتبه چهار سفتی می باشد و اندیس های  $ijkl$  مقادیر بین 1 تا 3 را به خود می گیرند. در حالت اولیه ( $t=0$ )  $\dot{\sigma}_{ij} = 0$ ،  $\dot{\gamma}^\alpha = 0$ ،  $g^\alpha = g_0$ ،  $\epsilon_{kl} = 0$  می باشند.

کرنش سختی مواد ماده مورد مطالعه با استفاده از مقاومت سیستم لغزشی نسبت به لغزش،  $g^\alpha$ ، تعریف می شود. در شبکه کریستالی دو نوع سخت شوندگی تعریف می شود، اول خودسخت شوندگی  $h_{\alpha\alpha}^{12}$  و دوم سخت شوندگی نهان  $h_{\alpha\beta}^{13}$ ، که بصورت مستقیم به کرنش برشی  $\gamma$  تجمعی تیلور مرتبط می شود [16]. این دو نوع سخت شوندگی به صورت رابطه (6) تعریف می شوند. کرنش برشی تجمعی نیز در قالب رابطه (7) معرفی می شود.

$$\begin{cases} h_{\alpha\beta} = h(\gamma) = h_0 \sec h^2 \left| h_0 \gamma / (\tau_s - \tau_0) \right| & \alpha = \beta \\ qh(\gamma) & \alpha \neq \beta \end{cases} \quad (6)$$

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (7)$$

در این روابط  $h_0$  مدول سخت شوندگی اولیه،  $\tau_0$  استحکام برشی اولیه،  $\tau_s$  تنش شروع تغییر شکل پلاستیک بزرگ و  $q$  فاکتور سخت شوندگی می باشد. در مدل سخت شوندگی همسانگرد تیلور، مدول سخت شوندگی نهان و خودسخت شوندگی، یکسان در نظر گرفته می شوند. بنابراین مقدار  $q$  برای مدول سخت شوندگی همسانگرد برابر یک در نظر گرفته می شود. برای جلوگیری از اثرات وابستگی به نرخ (ویسکوپلاستیک) بر روی همگرایی تحلیل، باید مقدار نسبتاً بالایی برای  $n$  در نظر گرفته شود که در اینجا مقدار 55 در نظر گرفته شده است.

پزشکی، استنت های  $^1$  کروئری [11]، سرنگ های انسلین و سوزن های آنژیوگرافی، مطالعه میکرومکانیکی بر روی رفتار این ماده از ارزش بالایی برخوردار خواهد بود. این امر کمک خواهد کرد تا تاثیرات پارامترهای میکروساختاری نظیر جهات کریستالی دانه ها بر روی عملکرد محصولات یاد شده در مقیاس کاری، مورد بررسی قرار گیرد.

در این مقاله جهت بررسی رفتار تغییر شکل فولاد ضدزنگ آستنیتی 316L در مقیاس میکرو از روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته  $^2$  استفاده شده است. ابتدا روابط موجود در کریستال پلاستیسیته اجمالاً از نظر گذرانده خواهند شد. در بخش بعد برای انجام سنجش قابلیت استناد نتایج، روابط تحلیلی موجود در نرم افزار متلب در قالب برنامه ای پیاده سازی شده و مسئله تغییر شکل یک تک کریستال با استفاده از آن حل می شود. در ادامه نتایج حاصل از شبیه سازی اجزاء محدود با نتایج حاصل از حل تحلیلی مورد مقایسه قرار می گیرند. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق نتایج حل تحلیلی و نتایج حاصل از روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته است. در گام بعدی با هدف اثبات عدم توانایی روش اجزاء محدود ماکرومکانیک در شناسایی و پیش بینی رفتار تغییر شکل در مقیاس میکروساختار و همچنین بررسی رفتار نازک شدگی  $^3$  تک کریستال، شبیه سازی آزمون کشش روی مدلی با یک دانه به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته انجام می شود و نتایج حاصل با نتایج بدست آمده از روش اجزاء محدود ماکرومکانیک (پیوسته)  $^4$  مقایسه می شوند. در نهایت برای بررسی تاثیر جهات کریستالی بر روی رفتار تغییر شکل فولاد ضدزنگ یاد شده، شبیه سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته بر روی المان حجمی نماینده  $^5$  با تعداد 10 دانه که با استفاده از روش ورونوی بصورت سه بعدی تولید شده، انجام گرفته است.

## 2- معادلات ساختاری کریستال پلاستیسیته

تئوری کریستال پلاستیسیته برای نمایش جریان نابجایی ها در راستای سیستم های لغزشی در فلزات کریستالی بر حسب تنش برشی مولفه شده  $^6$  استفاده می شود. در این تئوری فرض بر این است که تغییر شکل پلاستیک متشکل از مجموعه ای از لغزش های کریستالی در کل سیستم های لغزشی فعال می باشد [2]. آشمید [12] دریافت که لغزش پلاستیک زمانی اتفاق می افتد که تنش برشی مولفه شده روی صفحه ای کریستالوگرافی موسوم به صفحه لغزش و در جهت لغزش به یک حد بحرانی رسیده باشد. از همین رو نرخ لغزش  $\dot{\gamma}^\alpha$  در هر سیستم لغزشی  $\alpha$  به تنش برشی  $\tau^\alpha$  که بر روی سیستم لغزشی مذکور عمل می کند، مرتبط می شود. در این مقاله از مطالعات تیلور  $^7$  [13] هیل  $^8$  و رایس  $^9$  [14]، آسارو  $^{10}$  [15] پیروی شده که در زمینه تئوری کریستال پلاستیسیته پیش قدم می باشند. گزیده ای از معادلات بنیادی رفتار پلاستیک وابسته به نرخ (ویسکوپلاستیک)  $^{11}$  کریستال در روابط (1) تا (4) آورده شده اند.

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma_{ij} \mu_{ij}^{(\alpha)} \quad (1)$$

- 1- Stent
- 2- Crystal plasticity finite element method (CPFEM)
- 3- Necking
- 4- Macro-mechanics (continuum) finite element
- 5- Representative volume element
- 6- Resolved shear stress
- 7- Taylor
- 8- Hill
- 9- Rice
- 10- Asaro
- 11- Visco-plasticity

12- Self-hardening  
13- Latent hardening  
14- Taylor cumulative shear strain

## 3- خواص ماده

همان طور که عنوان شده ماده مورد استفاده در این تحقیق فولاد ضد زنگ 316L می باشد. در خواص الاستیک ماده مورد نظر بدلیل تقارن سیستم مکعبی FCC سه ثابت الاستیک  $C_{11}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$  برای معرفی خواص الاستیک ماده استفاده می شوند. خواص الاستیک از مرجع [17] استخراج شدند. آستنیت نسبت به دیگر فازات دارای ساختار مکعبی مانند آلومینیوم، نیکل و فریت، ناهمسان گردی الاستیک بالایی دارد. آستنیت دارای سفت ترین جهت در راستای جهت قطری  $\langle 111 \rangle$  می باشد. در حالی که نرم ترین جهت در راستای  $\langle 100 \rangle$  قرار می گیرد (شکل 1).

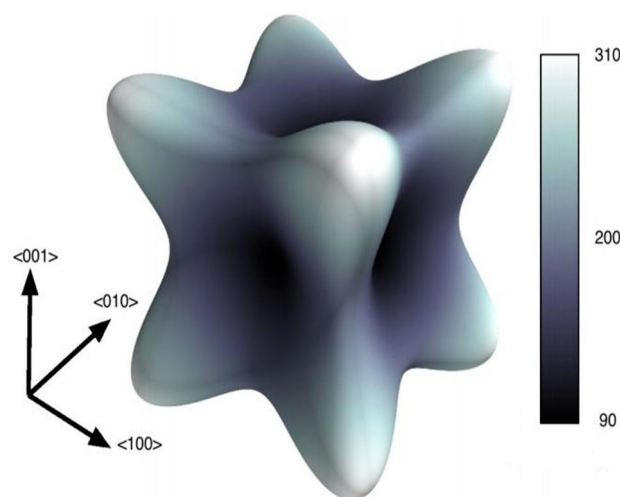
خواص پلاستیک تک کریستال برای ماده مستقیماً از طریق آزمایش تجربی بدست نمی آیند. روش استاندارد در تحقیقات برای کالیبره کردن پارامترهای مورد نیاز در قانون بنیادی<sup>1</sup> مدل ماده کریستال پلاستیسیته، انطباق تغییر شکل پیش بینی شده توسط مدل با نمودار تنش- کرنش تجربی ماده در حالت ماکرو می باشد [9]. پارامترهای مورد نیاز در مدل ماده در جدول 1 آورده شده اند. در بدست آوردن این پارامترها از روش شرح داده شده استفاده شده است. نمودار تنش- کرنش تجربی ماده نیز در شکل 2 آورده شده است.

## 4- روند محاسباتی مورد استفاده در تحقیق

مدل سازی میکرو مکانیک به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته شامل سه بخش می باشد: تولید میکروساختار - پیش پردازش - آنالیز اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته به همراه پس پردازش.

## 4-1- تولید میکروساختار

جهت تحلیل عددی مواد با ساختار کریستالی در مدل سازی چند مقیاسی خواص هندسی دانه ها در ماده باید تا حد امکان نزدیک به حالت واقعی مدل شود. این خواص عبارتند از اندازه دانه، جهت دانه ها و شکل

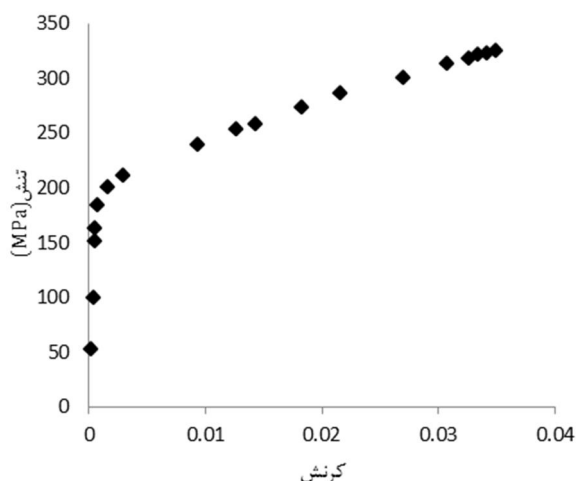


شکل 1 رویه مدول الاستیک وابسته به جهت آستنیت، نمایانگر وابستگی سفتی به جهت اعمال بار

جدول 1 مقادیر پارامترهای کریستال پلاستیسیته

$C_{11}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$C_{44}$ (GPa)	$n$	$\dot{\alpha}$	$h_0$	$\tau_s$	$\tau_0$
204/6	137/7	126/2	55	0/001	675	175	90

1- Constitutive law



شکل 2 نمودار تجربی تنش- کرنش فولاد ضد زنگ 316L

هندسی دانه ها. یکی از روش های تولید مدل میکروساختار، استفاده از روش تصویربرداری اشعه ایکس میکروتوموگرافی<sup>2</sup> می باشد که بعد از تصویربرداری از میکروساختار ماده، عکس گرفته شده باید در نرم افزارهای پردازش تصویر مورد پردازش قرار گیرد. برای نمونه می توان به پژوهش [18] مراجعه کرد. روشی که به آن اشاره شد دارای مشکلات و پیچیدگی هایی از قبیل گرانی تجهیزات و هزینه بر بودن انجام آزمایشات تصویربرداری و هم چنین نیاز به پردازش تصاویر، می باشد. همچنین اگر از دید مطالعه تاثیرات بافت و وضعیت دانه ها بر روی رفتار ماده به موضوع نگریسته شود، نیاز به تولید میکروساختارها با مشخصات گوناگون از طریق تصویر برداری از نمونه های مختلف، وجود دارد. این امر دلالت بر این دارد که عملیات حرارتی و تصویربرداری زیادی مورد نیاز است. موارد برشمرده شده به معنای محدودیت محققان در انجام مطالعات میکروساختاری خواهد بود.

روش جایگزین روش فوق که امروزه در بین محققان زمینه علم مواد کاربرد گسترده ای پیدا کرده است، استفاده از روش توصیف ریاضی برای یک میکرو ساختار که به اندازه کافی نزدیک به حالت واقعی ماده است می باشد. به نحوی که با استفاده از این توصیف یک تحلیل قابل استناد و معنی دار روی رفتار ماده بتوان انجام داد. در بین این روش های تقریبی استفاده از روش دانه بندی ورونوی<sup>3</sup> بسیار مرسوم می باشد. دانه بندی ورونوی شامل تقسیم بندی یک ناحیه در فضا  $D \in R^d$  به تعداد مشخصی ناحیه  $R_i$  در  $D$  می باشد، که هر کدام از این نواحی بر یکی از نقاط دانه ای  $P_i^4$  که دارای مکانی تعیین شده هستند، منطبق می باشند. این نواحی مجموعه ای از همه ی نقاطی را تشکیل می دهند که به یک نقطه ی دانه ای خاص (یا به مفهوم آشنا تر نقطه جوانه ای) نزدیک تر از بقیه نقاط جوانه ای می باشند [19]. به عبارتی نرم ارائه شده در رابطه (8) این که هر نقطه به چه دانه ای تعلق دارد را، تعیین می کند.

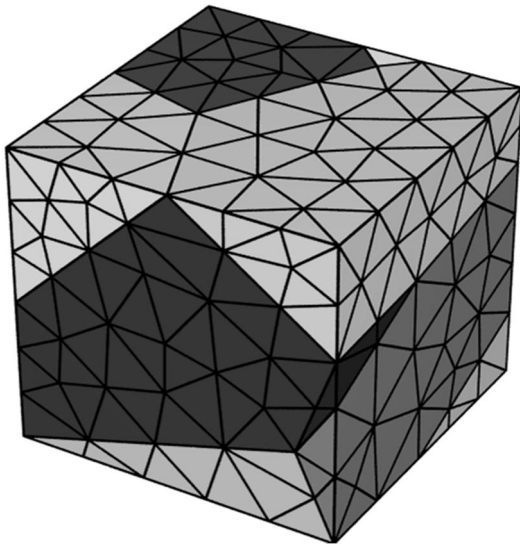
$$R_i = \left\{ \underline{X} \in D : \left\| \underline{p}_i - \underline{X} \right\| < \left\| \underline{p}_j - \underline{X} \right\| \forall i \neq j, i, j = 1, 2, \dots, n \right\} \quad (8)$$

در این مقاله از نرم اقلیدسی استفاده گردیده است و دانه بندی در یک فضای سه بعدی و در ناحیه استوانه ای شکل انجام شده است. در این صورت نواحی حاصل به صورت محدب چند وجهی خواهند بود که معرف دانه های فولاد ضد زنگ مورد نظر می باشند. شایان ذکر است که این نوع ساختار دانه

2- X-ray microtomography

3- Voronoi tessellation

4- Seed point



شکل 4 نمونه میکروساختار سه‌بعدی تولید شده و مش زده شده با استفاده از دانه‌بندی ورونوی با تعداد دانه 10

دستور اول فایل با فرمت tess که خروجی ماژول دانه‌بندی<sup>5</sup> است، ایجاد می‌کند. این فایل حاوی موقعیت فضایی دانه‌ها و شکل هندسی آنها می‌باشد. در دستور دوم که پس از فراخوانی بخش مش‌بندی در ترمینال، وارد می‌شود، فایل ایجاد شده در بخش دانه‌بندی را به بخش مش‌بندی فرا می‌خواند و عمل مش‌زنی روی آن را انجام می‌دهد. در ادامه از این میکروساختار تولید شده به عنوان المان حجمی نماینده جهت مطالعه تاثیر جهت کریستالی بر روی رفتار ماده، استفاده شده است.

#### 4-2- پیش پردازش مدل میکروساختار

بعد از تولید مدل هندسی میکروساختار با تعداد دانه مشخص، در قالب فایل ورودی این میکروساختار به نرم افزار آباکوس معرفی می‌شود. سپس مراحل پیش پردازش از قبیل اضافه کردن شرایط مرزی، اعمال بار و غیره روی مدل و تعریف مشخصات جهت کریستالوگرافی دانه‌ها قبل از انجام تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته، انجام می‌گیرد.

جهت کریستالوگرافی به صورت اتفاقی در قالب زوایای اولر<sup>6</sup> که معمول‌ترین روش برای بیان جهت کریستالوگرافی می‌باشند تولید شد. این زوایا از طریق معرفی سه عدد  $n_1$ ،  $n_2$  و  $n_3$  در بازه صفر تا یک در رابطه (9)، بدست آمدند [21].

$$\begin{cases} \varphi_1 = 360n_1 \\ \varphi = a \cos(2n_2 - 1) \\ \varphi_2 = 360n_3 \end{cases} \quad (9)$$

بعد از اینکه زوایای اولر برحسب توزیع عنوان شده محاسبه شدند، به جهت دارا بودن قابلیت بکارگیری در روابط کریستال پلاستیسیته، باید تبدیل به قالب شاخص‌های میلر<sup>7</sup>  $[hkl]$ ، در بیان جهت کریستالی شوند. این تبدیلات با استفاده از روابط (10) تا (15) انجام می‌گردند [21].

$$h = n \sin \varphi \sin \varphi_2 \quad (10)$$

$$k = n \sin \varphi \cos \varphi_2 \quad (11)$$

$$l = n \cos \varphi \quad (12)$$

$$u = n' (\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \varphi) \quad (13)$$

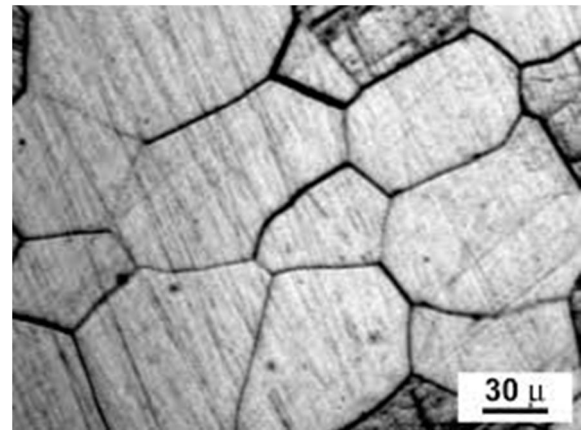
5- Tessellation  
6- Euler angles  
7- Miller indices

در موادی در شرایط زیر شکل می‌گیرند وجود خواهد داشت که این شرایط عبارتند از:

- دانه‌ها همزمان در نقاط جوانه‌زنی شروع به جوانه‌زنی می‌کنند.
  - دانه‌ها در تمامی جهات و با یک نرخ یکسان رشد می‌کنند.
  - مرز دانه‌ها در جایی است که دانه‌ها به هم می‌رسند.
- در شکل 3- (الف) و (ب) مقایسه میکروساختار واقعی و میکروساختار تولید شده توسط دانه بندی ورونوی ملاحظه می‌شود.

برای بکارگیری الگوریتم ورونوی از نرم‌افزار متن باز<sup>1</sup> نپر<sup>2</sup> [20] برای تولید میکروساختار استفاده شده است. از نقاط قوت این نرم‌افزار این است که دارای بخش جداگانه برای مش‌زنی میکروساختار تولید شده می‌باشد که از کتابخانه الحاقی جی‌مش<sup>3</sup> بهره می‌برد. این نرم‌افزار تنها قابل اجرا شدن روی سیستم‌های متن باز می‌باشد و فاقد رابط گرافیکی کاربر<sup>4</sup> است. دستورات مربوط به تولید میکروساختار مورد نظر در این نرم‌افزار باید از طریق ترمینال اجرای دستورات در محیط لینوکس به نرم‌افزار وارد شوند. برای مثال دو دستور زیر برای تولید میکروساختار ارائه شده در شکل 4 بکار می‌رود.

```
$ neper -T -n 100 -id 1 -reg 1
$ neper -M -n 100 -id1 -format inp
```



(الف)



(ب)

شکل 3 الف؛ میکروساختار واقعی یک فلز پلی کریستال، (ب) میکروساختار تولید شده توسط الگوریتم ورونوی

1- Open source  
2- Neper  
3- Z-mesh  
4- Graphical user interface

جدول 2 جهات کریستالوگرافی دانه‌ها در قالب شاخص‌های میلر

دانه / شاخص میلر	$[uvw]$	$(hkl)$
1	$\bar{4}12$	(021)
2	$\bar{3}14$	(111)
3	[131]	(013)
4	$\bar{5}31$	(013)
5	$\bar{0}11$	(211)
6	[111]	(110)
7	$\bar{2}33$	(313)
8	$\bar{2}11$	(111)
9	$\bar{1}22$	(411)
10	[201]	(162)

$$v = n'(-\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi) \quad (14)$$

$$v = n' \sin \phi \sin \phi_1 \quad (15)$$

در این روابط  $n$  و  $n'$  ضرایب صحیح می‌باشند که برای بدست آوردن اعداد صحیح در روابط ضرب می‌شوند. جهات کریستالوگرافی اختصاص یافته به دانه‌ها در قالب شاخص‌های میلر در جدول 2 آورده شده‌اند.

#### 3-4- تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته

از آنجا که مدل ماده‌ی کریستال پلاستیسیته در نرم افزار آباکوس تعریف نشده این مدل ماده باید در قالب کد زیر برنامه UMAT<sup>1</sup> که از قابلیت‌های نرم افزار آباکوس برای تعریف مدل مواد جدید می‌باشد، بکار گرفته شود. این کد قابلیت انجام تحلیل‌های تغییرشکل‌های کوچک، تغییرشکل‌های بزرگ با کارگیری تئوری کرنش محدود<sup>2</sup> و چرخش محدود<sup>3</sup> را دارا می‌باشد. این کد امکان انجام تحلیل‌های تنش کریستال‌ها را در نرم افزار آباکوس را فراهم می‌کند. در این کد استحکام جاری، کرنش‌های برشی، بردار عمود بر صفحات لغزش، جهات لغزش و کرنش برشی کل به عنوان متغیرهای حالت وابسته به حل در نظر گرفته شده‌اند.

#### 5- نتایج و بحث و بررسی

##### 1-5- اعتبارسنجی مدل مورد استفاده

جهت اعتبارسنجی مدل روابط سینماتیک تغییرشکل کریستال‌ها که در منابع [22] موجود می‌باشند در قالب کدی در نرم‌افزار متلب به کار گرفته شد. در این کد می‌توان برای دو ساختار مکعبی FCC و BCC در ماده‌ای مشخص، با وارد کردن مقدار تنش برشی بحرانی مولفه شده و تانسور تنش وارد بر کریستال تنش برشی موثر در هر سیستم لغزشی را بدست آورد. علاوه بر این، چرخش دستگاه مختصات چسبیده به کریستال نسبت به دستگاه مختصات مرجع هم می‌باید در محاسبه تنش برشی مولفه شده توسط کد در نظر گرفته شود. با وارد کردن اطلاعات ذکر شده به کد متلب می‌توان اطلاعات مربوط به تانسور آشمید و تنش برشی مولفه شده در هر سیستم لغزشی که جزو پارامترهای تعیین کننده در نوع رفتار ماده می‌باشند را استخراج نمود. تغییرشکل یک تک‌کریستال مکعبی در حالتی که تنشی در راستای جهت  $\langle 100 \rangle$  به آن اعمال می‌شود با استفاده از این کد حل شد. از طرفی همین تغییر شکل نیز با استفاده از زیربرنامه UMAT در آباکوس مورد تحلیل کریستال پلاستیسیته قرار گرفت. ادامه نتایج مربوط به مقدار تنش برشی مولفه شده  $\tau_{RSS}$  حاصل از مدل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته با نتایج حاصل از برنامه متلب مقایسه می‌شوند. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق خوب نتایج تحلیل و نتایج اجزاء محدود است که صحت روند اجزاء محدود استفاده شده را تایید می‌کند (جدول 3).

##### 2-5- شبیه‌سازی سه‌بعدی آزمون کشش تک‌کریستال

در این بخش آزمون کشش تک محوره به عنوان یکی از پایه‌ای‌ترین آزمون‌ها جهت شناسایی خواص مواد، به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته (CPFEM) بر روی یک مدل تک‌کریستال شبیه‌سازی می‌شود. شکل مدل مورد استفاده به صورت استوانه با قطر و طول به ترتیب 1 و 4 میلی‌متر می‌باشند. شرایط مرزی به گونه‌ای می‌باشند که مدل از یک انتها در تمام جهات ثابت شده است و از هر گونه چرخش آن ممانعت به عمل آمده است. و

1- User defined material subroutine  
2- Finite strain  
3- Finite rotation

جدول 3 مقایسه حل تحلیلی اجزاء محدود تنش برشی

خطای	حل $\tau_{RSS}$ - حل اجزاء	حل $\tau_{RSS}$ - حل تحلیلی (MPa)	$\alpha$ -سیستم لغزشی
مطلق	محدود (MPa)		
0/0009	0/0009	0/0000	1
0/0103	81/66	81/6497	2
0/0103	-81/66	-81/6497	3
0/0103	-81/66	-81/6497	4
0/0103	-81/66	-81/6497	5
0/0009	0/0009	0/0000	6
0/0009	0/0009	0/0000	7
0/0103	81.66	81/6497	8
0/0103	81.66	81/6497	9
0/0009	0/0009	0/0000	10
0/0103	81/66	81/6497	11
0/0103	-81/66	-81/6497	12

در انتهای دیگر مدل، جابجایی فقط در راستای محور Z اعمال شده است و در مابقی جهات مقید شده است (شکل 5). جهت‌گیری اولیه کریستال در قالب شاخص‌های میلر به صورت  $[021] \bar{4}12$  می‌باشد که در بیان زوایای اولر<sup>4</sup> معادل  $(3/283^\circ, 5/115^\circ, 1/37^\circ)$  قرار می‌گیرد. مدول یانگ فولاد ضدزنگ L316 برابر  $E = 200 \text{ GPa}$  و ضریب پواسون برابر با  $\nu = 0.3$  می‌باشد. در این بخش هدف این است تا با استفاده از تحلیل (CPFEM) رفتار تک‌کریستال فولاد ضد زنگ L316 در ناحیه گلویی شدن مورد مطالعه قرار گیرد و با الگوی تغییرشکل ارائه شده در شکل 6 مقایسه شود. همچنین برای اثبات عدم توانایی روش اجزاء محدود ماکرومکانیک (پیوسته) که از پلاستیسیته کلاسیک سود می‌برد، در پیش‌بینی رفتار ماده در میکرومکانیک، نتایج مدل‌سازی به روش اجزاء محدود ماکرومکانیک با نتایج حاصل از CPFEM مقایسه شده است.

صفحات لغزش یک ساختار پله‌ای را در حین تغییرشکل ایجاد می‌کنند (شکل 6). هر پله نمایانگر نوارهای لغزشی می‌باشد که در حالت ماکرو این نوارها و خطوط لغزش مفهومی آشنا دارند. لبه جزء‌ها دارای جهتی مشابه با جهت خطوط لغزش می‌باشند. هنگامی که صفحات کریستالی در حین آزمون کشش روی هم می‌لغزند، منجر به بوجود آمدن جابجایی نسبی نیمه‌ی بالایی

4- Euler angles

صفحات لغزش می‌باشد.

تفاوت مشهود دیگر در رفتار تغییر شکل تک کریستال و مدل کلاسیک در منحنی بار- ازدیاد طول آنها می‌باشد. بار مورد نیاز برای تغییر شکل در مدل کلاسیک (ماده همگن)، بیشتر از بار مورد نیاز یک تک کریستال می‌باشد. دلیل این مسئله را می‌توان در وجود مرزدهانه‌ها به عنوان موانعی در سر راه حرکت نابجایی‌ها در ماده همگن، جستجو کرد. پس می‌توان نتیجه گرفت که هرچه تعداد دانه در فلز بیشتر باشد نیروی بیشتری برای تغییر شکل نیاز می‌باشد.

شکل 9 نمایانگر منحنی بار/زدیاد طول حاصل از تحلیل المان محدود آزمون کشش مدل تک کریستال با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته و هم چنین نمودار حاصل از تحلیل اجزا محدود مدل کلاسیک است.

نتیجه حاصل شده در این قسمت در تطابق با فیزیک تغییر شکل مواد کریستالی است که بر این واقعیت که مواد ریزدانه (ماده با تعداد دانه‌های بیشتر) در دمای پایین استحکام بالاتری دارند صحه می‌گذارند [24].

در شکل 10 مقایسه بین منحنی‌های تنش- کرنش حاصل از دو مدل فوق‌الذکر با منحنی تجربی انجام شده است. همان‌طور که پیش‌بینی می‌شد، منحنی‌های حاصل از آزمون تجربی و روش اجزاء محدود میکرومکانیک بر یکدیگر منطبق هستند. ولی منحنی بدست آمده از شبیه‌سازی آزمون کشش تک کریستال به مراتب مقادیر کمتری را نشان می‌دهد. این بدین معنی می‌باشد که بار مورد نیاز برای تغییر شکل تک کریستال به مراتب کمتر از بار مورد نیاز برای تغییر شکل پلی کریستال‌ها می‌باشد. در واقع با افزایش تعداد دانه‌ها نواحی مرزدهانه‌ای افزایش پیدا می‌کند و نواحی مرزدهانه‌ای بیشتر یعنی ایجاد موانع بیشتر در سر راه حرکت نابجایی‌هایی که با حرکت خود تغییر شکل پلاستیک را بوجود می‌آورند. وجه اهمیت این نتیجه از آن جهت است که قادر بوده‌ایم این نتیجه را بدون انجام آزمون تجربی کشش روی یک تک کریستال، و صرفاً با روش اجزاء محدود ارائه شده پیش‌بینی کنیم.

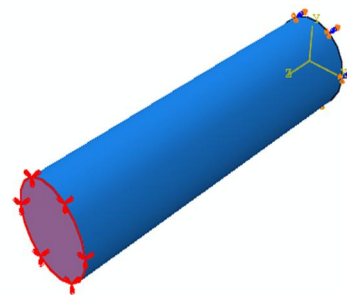
### 3-5- مدل‌سازی تغییر شکل پلی کریستال بر روی المان حجمی نماینده (RVE)

در این بخش با هدف بررسی تاثیر جهات کریستالی دانه‌ها بر روی رفتار تغییر شکل ماده، تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته بر روی یک مدل پلی کریستالی انجام شده است. این مدل متشکل از ده دانه فولاد ضدزنگ 316L می‌باشد. بارگذاری و شرایط مرزی روی RVE مطابق شکل 11 تنظیم شده‌اند. جابجایی گره‌های قرار گرفته در سطح بالایی مدل میکروساختار در راستای  $y$  برابر با  $0/05$  میلی‌متر می‌باشد. در مقابل، گره‌های قرار گرفته روی سطح کف مدل در راستای  $y$  مقید شده‌اند. بعلاوه، گره‌های روی لبه‌های سطح کف مدل، در راستای  $x$  و  $z$  مقید شده‌اند (شکل 11).

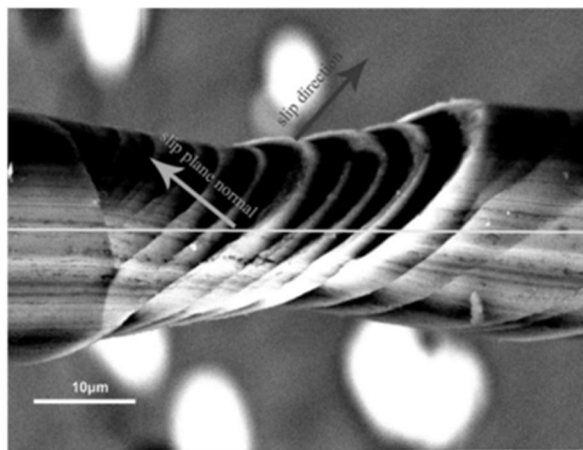
تحلیل اجزاء محدود مدل‌های میکروساختاری، RVE، به روش کریستال پلاستیسیته نیازمند این است که برای هر جزء خواص مکانیکی و فیزیکی را که تعیین کننده رفتار آن می‌باشد را تعریف نماییم. در واقع باید بتوان بسته به این‌که هر جزء متعلق به کدام دانه است، برای آن خواص مورد نظر را تعریف کرد. هر دانه در مدل RVE، متشکل از مجموعه‌ای از جزء‌ها می‌باشد، پس می‌توان به جای اینکه برای هر جزء خواص جداگانه تعریف کرد، جزء‌های تشکیل دهنده هر دانه را درون یک دسته<sup>1</sup> (مجموعه جزء‌ها با شماره مشخص در آباکوس)، جداگانه قرار داد. سپس خواص هر دانه را به دسته‌ای که نمایانگر دانه مورد نظر می‌باشد اختصاص داد.

نمونه نسبت به نیمه‌ی پایینی خواهند شد. ولی از آنجا که در حالت واقعی آزمون کشش و همین‌طور در هنگام شبیه‌سازی هر دو سر نمونه مقید می‌شوند، جابجایی نیمه بالایی نسبت به نیمه پایینی محدود می‌شود. در عوض این محدودیت با چرخش صفحات کریستالی در حین تغییر شکل جبران می‌گردد (شکل 6 و 7). در شکل 7-الف) که فرآیند با استفاده از روش اجزاء محدود میکرومکانیک مدل شده است، اثری از چرخش و تحول شبکه و حالت پله‌ای شدن در اثر چرخش، که همان نقش بافت در حین تغییر شکل را ایفا می‌کند، مشاهده نمی‌شود. اما مشاهده می‌شود که در شکل 7-ب) این چرخش در شبکه و پله‌ای شدن در رفتار میکروساختار، که مطابق با الگوی تغییر شکل تک کریستال است (شکل 6)، با استفاده از تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته قابل پیش‌بینی بوده است.

نکته قابل توجه دیگر در رفتار تغییر شکل تک کریستال این است که رفتار موضعی شدن تغییر شکل در تک کریستال هم از آنچه در حالت ماکرو اتفاق می‌افتد، متفاوت است. در حالتی که مدل‌سازی میکرومکانیک با استفاده از تئوری کلاسیک پلاستیسیته و مدل ماده پدیداری انجام شود، سطح مقطع در ناحیه گلویی شدن به صورت یک دایره کامل است که با آنچه در آزمون کشش یک نمونه در حالت ماکرو اتفاق می‌افتد، مطابقت دارد. اما در حالت میکرو و استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته وضعیت متفاوتی وجود دارد و سطح مقطع به شکل یک بیضی می‌باشد. این پدیده در شکل 8 به نمایش گذاشته شده است. دلیل بیضی شدن سطح مقطع در منطقه موضعی شدن تغییر شکل، چرخش شبکه و محدودیت تغییر شکل کریستال‌ها در امتداد



شکل 5 مدل استفاده شده برای شبیه‌سازی آزمون کشش



شکل 6 لغزش در آزمون کشش نمونه تک کریستال [23]

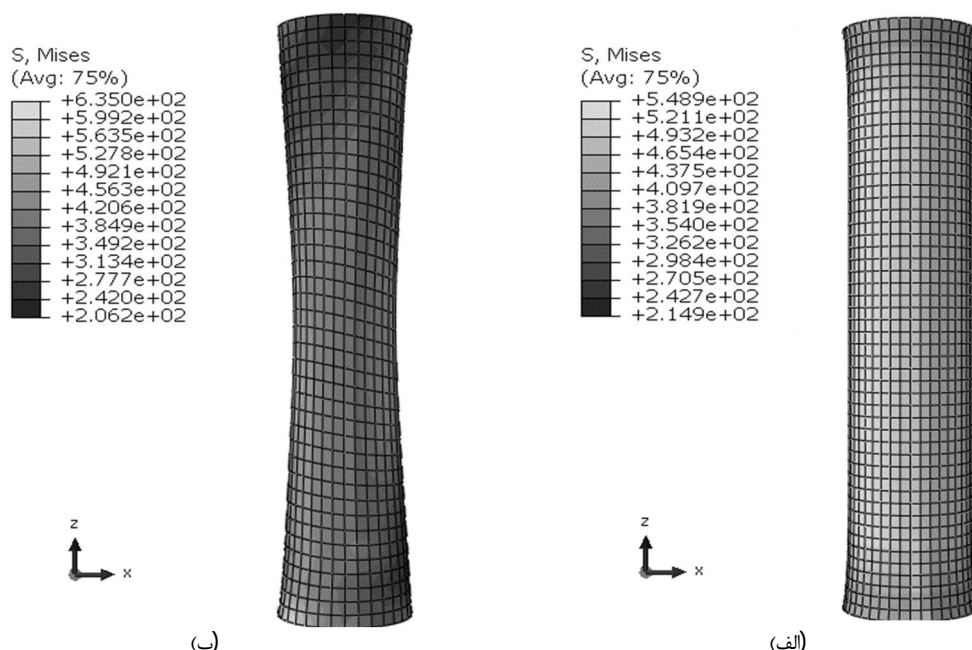


دانه‌ها می‌شود که مدل این واقعیت است که توزیع تنش در مقیاس میکروساختار غیریکنواخت می‌باشد. این پدیده در شکل 13 به نمایش گذاشته شده است. اشکال ذکر شده قبلی نمایانگر این واقعیت است که دانه‌هایی که دارای مقدار تنش برشی مولفه شده،  $\tau_{RSS}$ ، بزرگتری روی صفحات لغزشی خود می‌باشند، تغییر شکل در آنها زودتر از مابقی دانه‌ها اتفاق می‌افتد. در عوض دانه‌هایی وجود دارند که امکان دارد در آنها هنوز مقدار تنش برشی روی صفحات لغزش به حد بحرانی نرسیده باشد و به تبع آن تغییر شکل پلاستیک اتفاق نیفتد. همین امر سبب بوجود آمدن تغییر شکل ناهمگن در RVE می‌شود که با توجه به مدل‌های ارائه شده این واقعیت مشهود می‌باشد. در شکل 14، نمای تفکیک شده دانه‌ها در میکروساختار و حالت تنش برشی مولفه شده در هر یک از آنها، ملاحظه می‌شود. بعضی از دانه‌ها در حالت بیشترین تنش برشی مولفه شده و برخی در حالت کمترین قرار دارند.

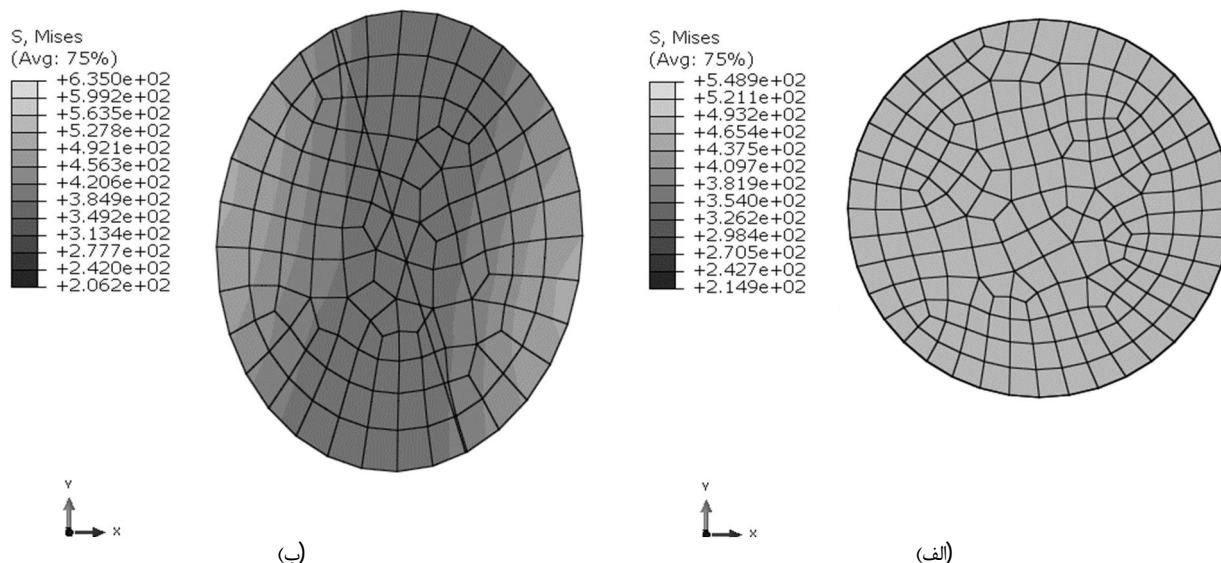
به منظور مطالعه تاثیر جهات کریستالی بر روی پاسخ تنش- کرنش ماده، پنج گروه جهات کریستالی برای مدل با تعداد 10 دانه در نظر گرفته شد که در هر تحلیل یک گروه از این جهات مورد استفاده قرار گرفت.

هر دانه به صورت جداگانه در بافت فلز دارای ماهیت رفتار تغییر شکل ناهمسان‌گرد و غیریکنواخت می‌باشد. در حالت ماکرو وقتی تعداد دانه‌های فلز خیلی زیاد است، این رفتار ناهمسان‌گرد تک‌تک دانه‌ها در رفتار توده فلز تاثیر چندانی نشان نمی‌دهد. ولی هنگامی که ابعاد ماده کاهش پیدا می‌کند تعداد دانه‌ها نیز در بافت فلز به شدت کاهش می‌یابد، کم بودن تعداد دانه‌ها باعث می‌شود که رفتار ماده کاملاً وابسته به رفتار تک‌تک دانه‌ها شود. بنابراین وابستگی به جهت در رفتار ماده نمایانگر می‌شود. در این حالت رفتار تغییر شکل ماده کاملاً غیریکنواخت می‌باشد (شکل 12).

در بافت فلز هر دانه دارای جهت کریستالوگرافی معینی می‌باشد که متمایز از سایر دانه‌ها است. همین امر سبب توزیع غیریکنواخت تنش در بین



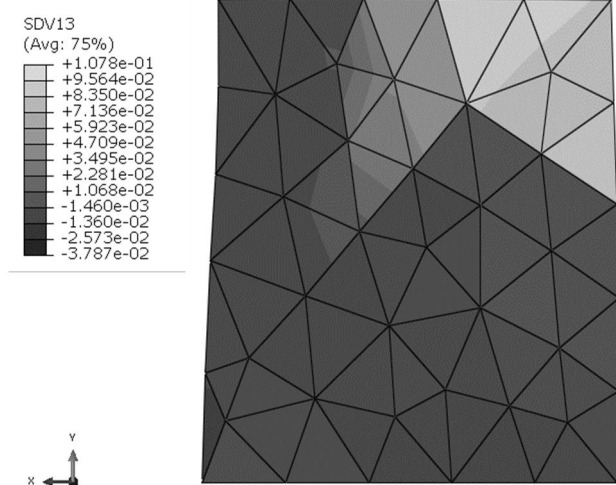
شکل 7 نمای تغییر شکل یافته مدل؛ (الف) مدل کلاسیک، (ب) مدل المان محدود کریستال پلاستیسیته



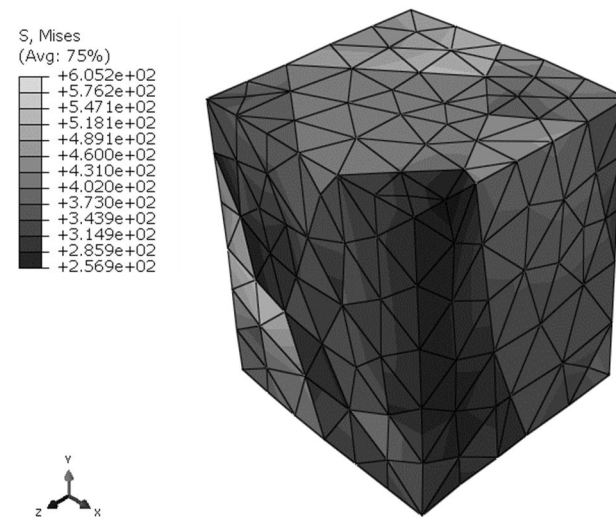
شکل 8 سطح مقطع ناحیه موضعی شدن تغییر شکل، (الف) مدل‌سازی معمولی، (ب): مدل‌سازی تک کریستال با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته (CPFEM)



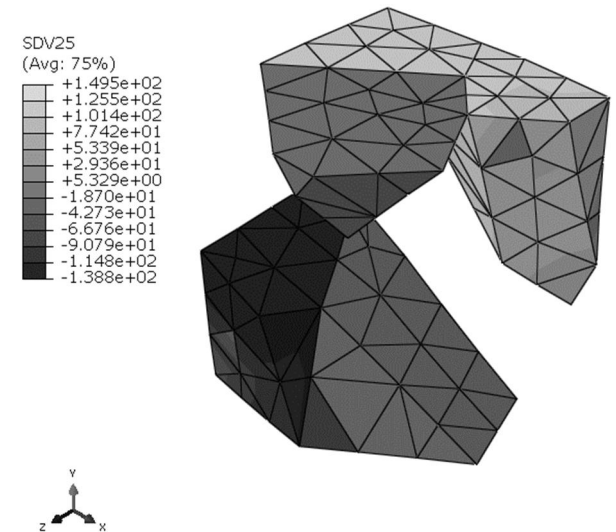
تنش-کرنش ماده نیز پراکندگی بوجود می‌آید (شکل 15). در این شکل نمودارهای تنش-کرنش مربوط به تحلیل‌ها با گروه‌های جهات کریستالوگرافی مجزا به همراه نمودار تنش-کرنش تجربی آورده شده است. با توجه به این



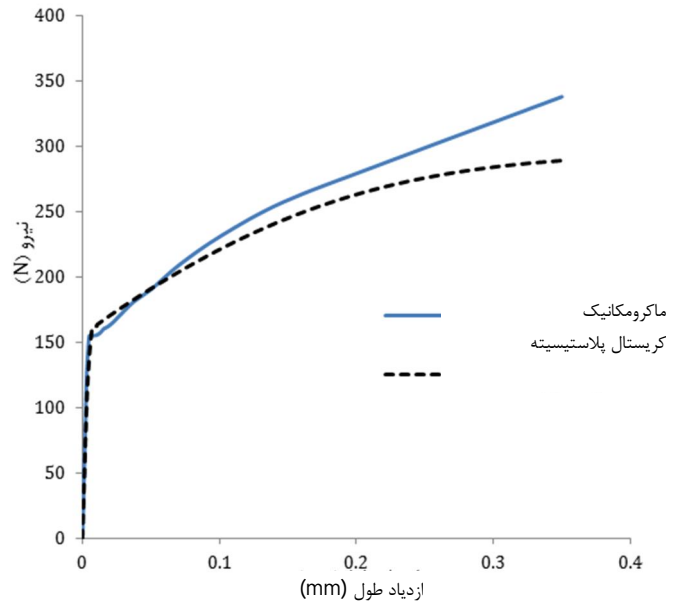
شکل 12 تغییر شکل ناهمگن



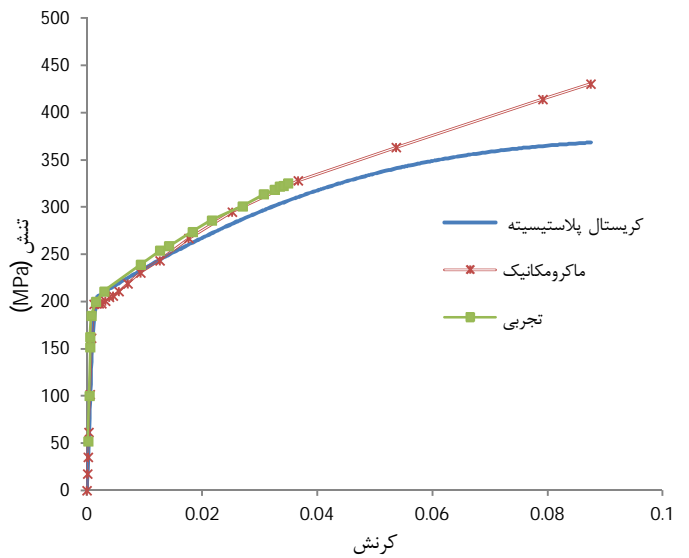
شکل 13 توزیع غیریکنواخت تنش فون میزز



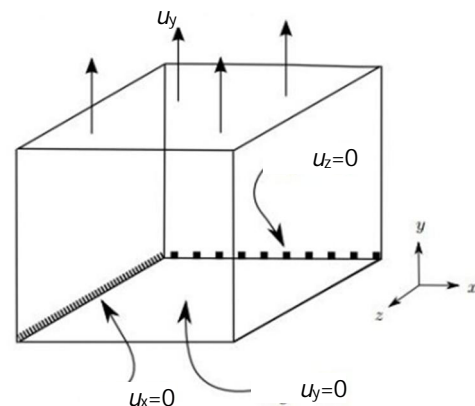
شکل 14 توزیع تنش برشی مولفه شده  $\tau_{RSS}$  در میکروساختار



شکل 9 منحنی بار-ازدیاد طول حاصل از دو روش



شکل 10 مقایسه نمودار تنش کرنش برای مقادیر تجربی، تحلیل کلاسیک، و تحلیل کریستال پلاستیسیته (CPFEM)



شکل 11 شرایط مرزی اعمال شده روی المان حجمی نماینده (RVE)

نتایج مربوط به نمودارهای تنش-کرنش حاصل از تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته نشان می‌دهند که با تغییر جهات کریستالی در نمودار

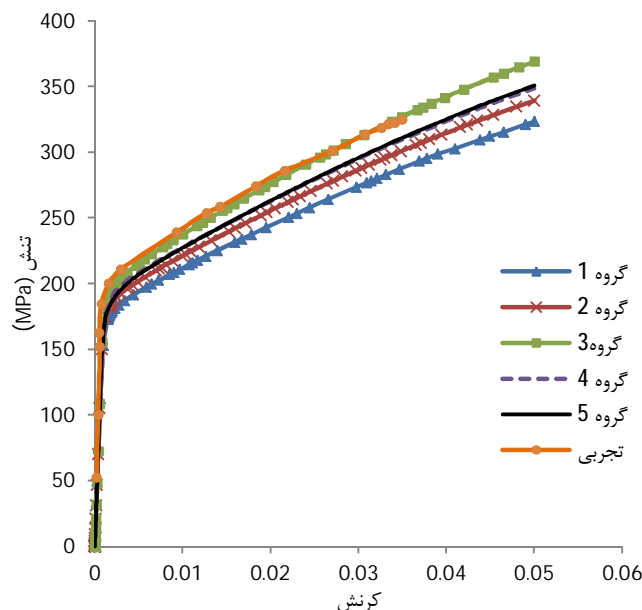
جهت می‌باشد. در مقیاس ماکرو وابستگی به جهت در رفتار تنش-کرنش ماده به ناهمسان‌گردی تعبیر می‌شود. پس نتیجه گرفته می‌شود که هر دانه، تغییر شکل کاملاً ناهمسان‌گرد دارد. این ناهمسان‌گردی به همراه کنش بین دانه‌های مختلف در بافت فلز منشا رفتار غیریکنواخت فلز در تغییر شکل در مقیاس مزو می‌باشد.

### 7- تقدیر و تشکر

در پایان مولفین وظیفه خود می‌دانند تا از دکتر رومین کوئی<sup>2</sup> عضو بخش تحقیقات مواد موسسه ایکول فرانسه که از راهنمایی‌ها و مشورت‌های ایشان در طول انجام این تحقیق جهت ایجاد مدل هندسی میکروساختار و جهت کریستالی بهره‌مند شده‌اند، تشکر نمایند.

### 8- مراجع

- [1] T. Watanabe, Grain boundary design and control for high temperature materials, *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 166, No. 1, pp. 11-28, 1993.
- [2] R. J. Asaro, V. A. Lubarda, *Mechanics of Solid and material* United States of America Cambridge University Press, 2006.
- [3] F. Franklin, J. Garnham, D. Fletcher, C. Davis, A. Kapoor, Modelling rail steel microstructure and its effect on crack initiation, *Wear*, Vol. 265, No. 9, pp. 1332-1341, 2008.
- [4] P. Evrard, I. Alvarez-Armas, V. Aubin, S. Degallaix, Polycrystalline modeling of the cyclic hardening/softening behavior of an austenitic-ferritic stainless steel, *Mechanics of Materials*, Vol. 42, No. 4, pp. 395-403, 2010.
- [5] M. Jafari, M. Talaee, S. Ziaei-Rad, Simulation the mechanical behavior of polycrystalline Fe by using crystal plasticity and Molecular dynamic methods, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 9, pp. 138-148, 2013. In Persian
- [6] M. Marvi-Mashhadi, M. Mazinani, A. Rezaee-Bazzaz, FEM modeling of the flow curves and failure modes of dual phase steels with different martensite volume fractions using actual microstructure as the representative volume, *Computational Materials Science*, Vol. 65, pp. 197-202, 2012.
- [7] T. Han, D. P. Lattice Strain Partitioning in a Two-phase Alloy and its Redistribution upon Yielding *Materials Sci. and Eng.*, Vol. 405, pp. 18-33, 2005.
- [8] S. K. Paul, Real microstructure based micromechanical model to simulate microstructural level deformation behavior and failure initiation in DP 590 steel, *Materials and Design* pp. 397-406, 2013.
- [9] D. Gonzalez, *A contribution on modelling deformation and residual stress in 3D polycrystals*, PhD Thesis, Faculty of Engineering and Physical Sciences, Faculty of Engineering and Physical Sciences, UK, 2012. English
- [10] S. Rahnama, k. farhangdoost, *Development of Statistical Modeling of crack Growth in Ti-6Al-4V microstructure*, PhD Thesis, department of mechanical engineering, Ferdowsi University Of Mashhad, Iran, 2012.
- [11] M. Imani, A. M. Goudarzi, J. Mahdinejad, Assessing the influence of stent geometry and material properties on the outcome after coronary stenting using finite element method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 4, pp. 45-53, 2014. In Persian
- [12] E. Schmid, Über die Schubverfestigung von Einkristallen bei plastischer Deformation, *Zeitschrift für Physik*, Vol. 40, No. 1-2, pp. 54-74, 1926.
- [13] G. I. Taylor, Analysis of plastic strain in a cubic crystal, *Stephen Timoshenko 60th Anniversary Volume*, pp. 218-224, 1938.
- [14] R. Hill, J. R. Rice, Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 20, pp. 401, 1972.
- [15] R. J. Asaro, Micromechanics of crystals and polycrystals, *Advances in applied mechanics*, Vol. 23, pp. 1-115, 1983.
- [16] D. Peirce, R. Asaro, A. Needleman, An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals, *Acta metallurgica*, Vol. 30, No. 6, pp. 1087-1119, 1982.
- [17] H. M. Ledbetter, Monocrystal-polycrystal elastic constants of a stainless steel, *Physica Status Solidi (a)*, Vol. 85, No. 98, pp. 89-96 1984.
- [18] Y. Bhandari, S. Sarkar, M. Groeber, M. Uchic, D. Dimiduk, S. Ghosh, 3D polycrystalline microstructure reconstruction from FIB generated serial sections for FE analysis, *Computational Materials Science*, Vol. 41, No. 2, pp. 222-235, 2007.
- [19] S. N. Chiu, D. Stoyan, W. S. Kendall, J. Mecke, *Stochastic geometry and its applications*: John Wiley & Sons, 2013.
- [20] R. Quey, P. Dawson, F. Barbe, Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing, *Computer*



شکل 15 نمودار تنش-کرنش به ازای جهات کریستالی مختلف

شکل پیداست که به ازای هر گروه از جهات کریستالی ماده پاسخ تنش-کرنش متفاوتی از خود نشان می‌دهد. در واقع تاثیر پارامتر میکروساختاری جهات کریستالوگرافی بر روی رفتار در مقیاس ماکرو کاملاً مشهود است. همان‌طور که از شکل پیداست در قسمت الاستیک پاسخ هر پنج مدل یکسان است. این مسئله از آنجا که فرض می‌شود تنش الاستیک تنها از قسمت الاستیک گرادین تغییر شکل تاثیر می‌پذیرد، قابل پیش‌بینی بود [2].

### 6- نتیجه گیری

در این مقاله رفتار تغییر شکل فولاد ضد زنگ L316 در مقیاس میکرو و مزو مدل‌سازی شد. ابتدا اعتبارسنجی مدل مورد استفاده از طریق برنامه نویسی و رابط تحلیلی در متلب انجام شد. سپس با ارائه دو نوع مدل‌سازی به روش کریستال پلاستیسیته و روش اجزاء محدود ماکرومکانیک که از روابط پلاستیسیته کلاسیک سود می‌برد، اثبات شد که روش اجزاء محدود ماکرومکانیک ابزار توانمندی در مدل‌سازی رفتار ماده در مقیاس‌های مزو و میکرو نمی‌باشد. در عوض کارآمدی روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته نشان داده شد. به نحوی که این روش توانایی مطالعه تاثیر پارامترهای میکروساختاری نظیر اندازه دانه و جهات کریستالوگرافی بر روی پاسخ تنش-کرنش ماده و مدل کردن تغییرات بافت در حین تغییر شکل و الگوهای توزیع تنش و کرنش در میکروساختار را دارا می‌باشد. این توانایی‌ها در بسیاری از تحلیل‌های میکرومکانیک حائز اهمیت فراوان می‌باشند. در ادامه یک مدل دانه‌بندی میکروساختار با تعداد 10 دانه ایجاد شد. برای این مدل جهات کریستالی متفاوتی تخصیص داده شد و تاثیرات جهات کریستالی بر روی رفتار ماده گزارش شد. مشخص شد که با تغییر جهات، در نمودار تنش-کرنش ماده پراکندگی ایجاد می‌شود. نتایج این بخش حاکی از اهمیت تاثیر بافت و وضعیت کریستالوگرافی دانه‌ها بر روی پاسخ ماده در حالت ماکرو می‌باشد. به نحوی که می‌توان با انجام طراحی حساس به میکروساختار بهترین کارایی را از ماده در مقیاس ماکرو بدست آورد. همچنین با مطالعه نمودارهای تراز<sup>1</sup> تغییر شکل حاصل از شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته مشخص است که تغییر شکل در مقیاس مزو کاملاً غیریکنواخت و وابسته به

2- Romain quey

1- Contours

- Design for Performance Optimization*, US: Butterworth Heinemann, 2012.
- [23] I. Robertson, A. Beaudoin. *In-Situ TEM Straining of Pre-Deformed Materials to Determine Constraints of Dislocation-Boundary Interactions*, Accessed.
- [24] G. E. Dieter, D. Bacon, *Mechanical metallurgy*: McGraw-Hill New York, 1986.

- Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 200, pp. 1729-1745, 2011.
- [21] R. Quey, *The documentation for Orientation Library 2.0 A collection of routines for orientation manipulation*, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne, France, pp. 2008.
- [22] B. L. Adams, S. R. Kalidindi, D. T. Fullwood, *Microstructure Sensitive*