http://mme.modares.ac.ir

مجله علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

آذر ۱۳۹۲، دوره ۱۳ شماره ۹ ص‌ص ۱۳۸-۱۴۸

مقاله پژوهشی کامل
تاریخ دریافت ۹۱/۸/۲۱
تاریخ پذیرش ۹۲/۱/۲۸
ارائه در سایت ۹۲/۶/۳۰

شبیه‌سازی رفتار مکانیکی پلی‌کریستال آهن به کمک روش کریستال پلاستیسیته و دینامیک مولکولی

محمد جعفری[۱]، محمد سعید طلائی[۲]، سعید ضیائی راد[۳*]

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
۲- دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
۳- استاد، ، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
* اصفهان، کدپستی ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱، szrad@cc.iut.ac.ir

چکیده- فلزات دارای ساختاری کریستالی می‌باشند و جریان پلاستیک در آنها، محدود به صفحات کریستالی خاص و در جهات خاصی واقع در این صفحات است. در این مکانیزم، ناهمگونی میکروساختار و اثرات تغییر در جهات کریستالی نقش اساسی را در رفتار ماده ایفا می‌کنند. در این مقاله برای بررسی اثر جهات کریستالی و بافت ماده، از معادلات ساختاری کریستال پلاستیسیته برای شبیه‌سازی استفاده شده است. ابتدا به‌کمک روش ورونی فضای شبیه‌سازی به دانه‌های کریستالی افراز می‌شود تا ناهمگونی ریزساختار به بهترین نحو ممکن در شبیه‌سازی اعمال شود.در ادامه،از روش دینامیک مولکولی برای استخراج ثوابت الاستیک مورد نیاز استفاده می‌شود.در انتها، رفتار فلز آهن تحت بارگذاری کشش ساده با روش کریستال پلاستیسیته در المان محدود بر روی مدل ورونی شبیه‌سازی و نتایج حاصل از آن با نتایج تجربی مقایسه می‌شود. تطابق خوب بین نتایج حاصل از روش عددی با نتایج تجربی موید مناسب بودن مدل عددی ارایه شده می باشد.

کلیدواژگان: کریستال پلاستیسیته، روش ورونی، دینامیک مولکولی، المان محدود.

Simulation the mechanical behavior of polycrystalline Fe by using crystal plasticity and Molecular dynamic methods

M. Jafari[1], M. Talaei[2], S. Ziaei-Rad[3*]

1- MSc. Student, Mech. Eng., Isfahan Univ. of Tech., Isfahan, Iran
2- PhD. Student, Mech. Eng., Isfahan Univ. of Tech., Isfahan, Iran
3- Prof., Mech. Eng., Isfahan Univ. of Tech., Isfahan, Iran
* P.O.B. 84156-83111 Isfahan, Iran. szrad@cc.iut.ac.ir

Abstract- Metals have a crystalline structure and the plastic flow in these materials occurred in special crystalline planes and directions. This mechanism is somehow resembles the metals plastic deformation in the microscopic level. In such mechanism, non-homogeneity of the microstructure and the effect of crystalline direction play a major rule of the material behavior. In this study, crystal plasticity constitutive equations are used to investigate the crystalline direction effect and material texture. Voronoi method is used for simulating the non-homogeneity of the microstructure in plastic deformation. In addition, the elastic modulus parameters for the model are obtained by molecular dynamic simulations. Finally, the plastic deformation of Fe metal is simulated with the finite element method and good agreement was observed with the available experimental data.

Keywords: Crystal Plasticity, Voronoi Method, Molecular Dynamic, Finite Element.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

۱- مقدمه

تئوری‌های ریاضی پلاستیسیته، بر اساس مشاهدات ماکروسکوپیک از جریان پلاستیک فلزات است که در آنها، فلز به‌صورت یک محیط پیوسته دیده می‌شود. درصورتی که در واقعیت، تغییر شکل پلاستیک در سرتاسر یک ماده به‌صورت غیریکنواخت است. فلزات ساختاری کریستالی دارند و جریان پلاستیک فلزات، محدود به صفحات کریستالی و در جهات خاصی واقع در این صفحات است. این جزئیات مربوط به جریان پلاستیک در یک سطح میکروسکوپیک است که در تئوری ریاضی پلاستیسیته در نظر گرفته نمی‌شود. دلیل اصلی لغزش اتم‌ها در ساختار کریستالی فلزات، وجود تنش‌های برشی است. تنش برشی تجزیه شده بر روی صفحه لغزش به عنوان دلیل اصلی برای لغزش اتم‌ها مطرح می‌شود.

معمولاً صفحه لغزش صفحه‌ای است که بالاترین تراکم اتمی را دارد و جهت لغزش جهتی است در صفحه لغزش که اتم‌ها روی آن به هم نزدیک‌ترند. بنابراین لغزش در فلزات مکعبی با وجوه مرکزدار (fcc) در صفحات {1 1 1} و در جهات ⟨1 1 0⟩ رخ می‌دهد و در فلزات مکعبی مرکزپر (bcc) جهت لغزش جهت متراکم ⟨1 1 1⟩ است. لذا جهات کریستالی در تغییرشکل پلاستیک فلزات نقش بسیار مهمی را برعهده دارند.

با این دیدگاه، قانون پایه کریستال پلاستیسیته می‌تواند برای مدل‌سازی موضعی شدن برش‌ها در شبیه‌سازی میکروسکوپیک اعمال شود. به علاوه، کریستال پلاستیسیته امکان بررسی تاثیرات بافت برروی مدل ریزساختاری را نیز فراهم می آورد.

۱-۱- معادلات ساختاری رفتار ماده در ابعاد میکرو

تئوری پلاستیسیته [۲،۱] بر این فرض استوار است که تغییرشکل پلاستیک مجموع لغزش‌های کریستالی در همه سیستم‌های لغزشی فعال شده می‌باشد. اشمیت [۳] متوجه شد که لغزش کریستالی هنگامی اتفاق می‌افتد که تنش برشی موجود در صفحه کریستالوگرافی در تک کریستالی راستای لغزش، به مقدار بحرانی برسد. تئوری به صورت دقیق‌تری بعداً توسط دیگران [۵،۴] فرمول‌بندی شد.

رابطه‌های مهم مدل‌های پایه به‌صورت مختصر در زیر ارائه شده‌اند. توضیحات کامل‌تر را می‌توان در مرجع [۶] یافت.

تنش برشی موجود $\tau^{(\alpha)}$ ، برروی سیستم لغزشی αام با استفاده از تانسور تنش σ^{ij} به صورت رابطه (۱) محاسبه می‌شود [۶].

$$\tau^{(\alpha)}=\sigma_{ij}\,\mu_{ij}^{(\alpha)} \qquad (۱)$$

که در آن $\mu_{ij}^{(\alpha)}$ تانسور اشمیت بوده و به شکل رابطه (۲) است [۶].

$$\mu_{ij}^{(\alpha)}=\frac{1}{2}(s_i^{(\alpha)}n_j^{(\alpha)}+s_j^{(\alpha)}n_i^{(\alpha)}) \qquad (۲)$$

در این رابطه $s^{(\alpha)}$ بردار مماس بر سیستم لغزشی α و $n^{(\alpha)}$ بردار عمود بر سیستم لغزشی α می‌باشد. نرخ کرنش پلاستیک عبارت است از [۶]:

$$\dot{\varepsilon}_{kl}^{p}=\sum_{\alpha}\mu_{ij}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)} \qquad (۳)$$

نرخ کرنش برشی در سیستم α، $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$است. به این ترتیب می توان نرخ تنش را به صورت رابطه (۴) تعریف نمود [۶].

$$\dot{\sigma}_{ij}=C_{ijkl}\,\dot{\varepsilon}_{kl}^{e}=C_{ijkl}\,(\dot{\varepsilon}_{kl}-\dot{\varepsilon}_{kl}^{p}) \qquad (۴)$$

$\dot{\varepsilon}^{e}$ و $\dot{\varepsilon}^{p}$ به ترتیب بیان‌گر نرخ کرنش الاستیک و پلاستیک هستند. در این تحقیق از یک مدل پایه ویسکوپلاستیک استفاده شد که به شکل قانون توانی به صورت رابطه (۵) بیان می‌شود [۶].

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)}=\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}\,\mathrm{sgn}\,(\tau^{(\alpha)})\left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right|^{1/n} \qquad (۵)$$

در رابطه فوق $g^{(\alpha)}$ استحکام سیستم لغزشی α در زمان فعلی و γ_0 کرنش برشی مرجع (اولیه) و n پارامتر حساسیت نرخ کرنش می باشد. مقدار بالای n مانند n=۵۰، مستقل بودن نرخ را تضمین می کند. اگر $n\rightarrow\infty$، رابطه پایه‌ای پلاستیک عملاً مستقل از نرخ خواهد شد. معادله نمو سخت‌شوندگی $g^{(\alpha)}$ به‌صورت رابطه (۶) بیان می‌شود [۶].

$$\dot{g}^{(\alpha)}=\sum_{\beta=1}^{N}h_{\alpha\beta}\left|\dot{\gamma}^{(\beta)}\right| \qquad (۶)$$

المان‌های قطری ماتریس سخت‌شوندگی $h_{\alpha\beta}$، خود-سخت‌شوندگی[1] را توصیف می‌کنند و المان‌های غیر قطری معرف سخت‌شوندگی متأثر از دیگر سیستم‌های لغزش[2] هستند.

که $h_{\alpha\beta}$ مدول سختی لغزش است و بر روی همه سیستم‌های لغزش فعال جمع بسته می‌شود. و طبق رابطه پیرس، آسارو و نیدلمن از رابطه زیر برای بیان آن استفاده

1. Self Hardening
2. Latent Hardening

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

می‌شود [۷]:

$$h_{\alpha\alpha}=h(\gamma)=h_0\,\mathrm{sech}^2\left|\frac{h_0\gamma}{\tau_s-\tau_0}\right|$$

$$h_{\alpha\beta}=qh(\gamma)\ (\alpha\neq\beta) \qquad (۷)$$

در روابط بالا h_o مدول سخت شوندگی اولیه، τ_o تنش تسلیم اولیه، τ_s تنش اشباع (تنشی که به ازای آن تغییر شکل‌های پلاستیک بزرگ شروع می‌شود)، γ کرنش برشی کل سیستم‌های لغزش و q بیانگر نسبت سخت شوندگی متأثر از دیگر سیستم‌های لغزش به خود سخت شوندگی[1] است.

با توجه به مطالب و روابط ارائه شده در بالا می‌توان گفت که مدل‌سازی واقعی مواد میکروکریستال به روش کریستال پلاستیسیته نیاز به مدل‌سازی دقیق میکروساختار ماده و تعیین جهات کریستالی و ثوابت مورد نیاز همانند ثوابت الاستیک می‌باشد. لذا از این رو در بخش ۲ در مورد مدل‌سازی میکروساختار ماده که به روش ورونی انجام شده، توضیحاتی آورده می‌شود. در ادامه برای اختصاص دادن جهات کریستالی به هر یک از دانه‌های میکروساختار، نیاز به معرفی روش‌های تخصیص جهات کریستالی بوده که این کار در بخش ۳ انجام می شود. در بخش چهارم ثوابت الاستیک مورد نیاز برای شبیه‌سازی کریستال‌ها با روش دینامیک مولکولی محاسبه می‌شود. در انتها شبیه‌سازی المان محدود را برای ماده فریت با ساختار مرکزپر پیاده‌سازی و نتیجه به‌دست آمده با نتیجه تجربی موجود مقایسه می‌شود.

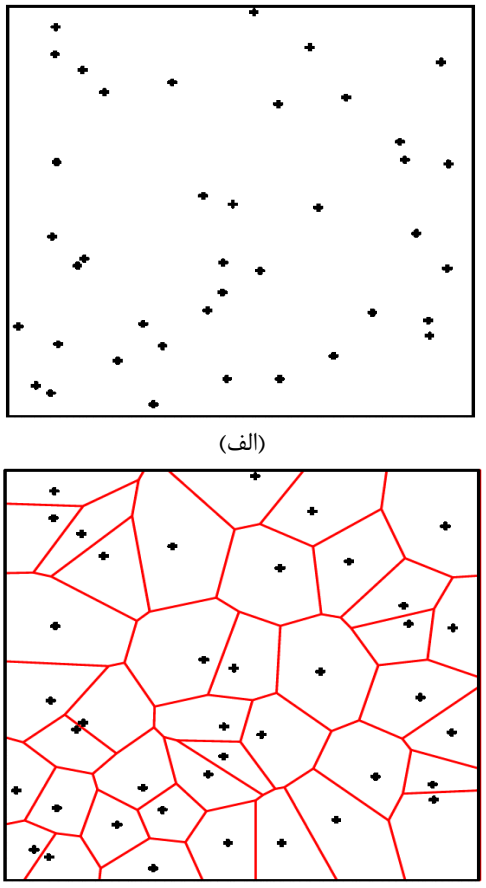
۲- ساختن مدل برای شبیه سازی میکرو ساختار ماده

۲-۱- روش ورونی[2] برای افراز حجم/سطح و ساختن میکروساختار

برای استفاده از مدل کریستال پلاستیسیته با فرمول‌بندی تک کریستالی باید که حجم/سطح هدف شبیه‌سازی به دانه‌های کریستالی افراز شود. ساختار تصادفی دانه‌ها (در یک حجم/صفحه) با استفاده از روش سنگفرش‌های ورونی[3] مدل می‌شود.

سنگفرش ورونی عبارت است از یک ساختار سلولی تشکیل شده از نقاط پواسون[4] (شکل ۱- الف) که در آن دیواره‌های صفحه‌ایی سلول‌ها عمود بر خطوط رابط نقاط مجاور هم قرار می‌گیرند. به این ترتیب مجموعه‌ای از چندضلعی‌ها/چندوجهی‌های محدب شکل می‌گیرد که تمامی نقاط به همراه دامنه کشش‌شان دربرگرفته و فضای میانی آنها را کاملاً می‌پوشاند (شکل ۱- ب). مروری اجمالی کاربری‌های متنوع این مسئله در زمینه های مختلف علمی را نشان می‌دهد. نماد (+) نشان داده شده در شکل ۱ بیان‌گر نقاط پواسون و همچنین خطوط نازک (کم‌رنگ) بیان گر مرزدانه‌ها بوده و خطوط پررنگ اطراف مرز مدل چند کریستالی را نشان می‌دهند.

اخیراً از مدل سنگفرش ورونی در علم مواد، بسیار زیاد استفاده شده است. از این جمله می‌توان به مدل‌سازی میکروساختارهای تصادفی مانند تجمعات دانه‌ها در چندکریستالی‌ها [۹،۸]، همچنین در الگوهای ترک‌های میان-دانه‌ای [۱۰] و کامپوزیت‌ها [۱۱] اشاره کرد. در این تحقیق، از یک روش ابداعی، برای ایجاد نقاط پواسون استفاده شده است که در زیر به شکلی خلاصه آورده شده است.



(الف)

(ب)

شکل ۱ الف- نقطه پواسون برای افراز سطح ب- کریستال ایجاد شده به روش ورونی

1.Latent Hardening/Self Hardening
2. Voroni-Tesselation Method
3. Voronoi Tessellation
4. Poisson Point

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

۲-۲- توزیع تصادفی دانه‌ها و مرزدانه در فضای هندسی

در این مرحله، تعداد مشخصی از ذرات (مثلاً شامل ۱۰۰ دانه)، با توجه به درصد حضور آنها در ماده (برای یک ماده چند فازی)، به صورت تصادفی، در یک فضای بسته، ریخته می‌شوند. برای این منظور، فرض می‌شود، تعدادی دانه به شکل دایره و با قطرهای مختلف موجود است. مسأله، به این گونه است که تعداد مشخصی از دانه با قطرهای متفاوت را چگونه به طور کاملاً تصادفی، می‌توان توزیع کرد.

این روش ساخت مدل بر اساس روش المان گسسته[1] است. ایده کلی این روش جدید نیست، بلکه سال‌ها پیش ایده استفاده از این روش مطرح شد. اما اشکال اصلی این روش، هزینه محاسباتی زیاد آن بود که در گذشته به دلیل سرعت پایین پردازنده‌ها این روش آن‌قدر مورد توجه قرار نگرفت. امروزه با افزایش سرعت پردازنده‌ها و ظهور پردازنده‌های چند هسته‌ای و همچنین تکنیک‌های موازی‌سازی با استفاده از کارت گرافیکی[2] به راحتی می‌توان رفتار دینامیکی سیستم‌هایی با تعداد زیادی ذرات را با استفاده از روش المان‌های گسسته مدل کرد.

ایده ارائه شده به این گونه است، ظرفی که ابعادش بر اساس حجم تجمعی برای هر نوع دانه و درصد حجم فرضی برای مرزها است تعریف می شود. حال، جعبه‌ای که طول و عرضش شبیه ظرف مورد نظر، اما ارتفاعش n مرتبه بزرگتر از آن است، در نظر گرفته می‌شود. سپس چندین نقطه به طور تصادفی در جعبه به عنوان مرکز هر دایره ایجاد و این روند تا زمانی که تعداد مورد نیاز برای انواع دوایر تولید شود، ادامه پیدا می‌کند.

سپس به دایره‌های ایجاد شده اجازه داده می‌شود تا از طریق نیروی تماسی هوک و نیروهای گرانشی متقابلاً بر هم اثر کنند. به دلیل گرانش، ذرات از بالای جعبه به پایین می‌افتند. به علاوه، نیروی تماسی هوک به عنوان یک نیروی ثابت بین دایره‌ها در مواردی که دو یا تعداد بیشتری از آن‌ها با هم برخورد دارند، عمل می‌کند. در نتیجه، حالت قرارگیری دوایر به دلیل این دو نوع نیروی تعریف شده مرتباً تغییر می‌کند [۱۲].

نیروی تماسی هوک می‌تواند از طریق معادله (۸) مشخص شود [۱۲]:

$$\mathrm{F}_{hk} = \left(K_n \delta \overrightarrow{\mathrm{n}_{ij}} \gamma_n \overrightarrow{\mathrm{v}_n}\right) - \left(k_t \Delta \overrightarrow{\mathrm{s}_t} + m_{\mathrm{eff}} \gamma_t \overrightarrow{\mathrm{v}_t}\right) \qquad (۸)$$

که در آن i,j شاخص‌های ذرات برخورد کننده هستند k_n, k_t و مقادیر ثابت الاستیک برای تماس‌های مماسی و نرمال هستند. پارامترهای γ_t و γ_n ثابت‌های استهلاک ویسکوالاستیک است. در ادامه، δ پارامتری مشترک است که می‌تواند از فرمول (۹) به‌دست آید [۱۲].

$$\delta = R_i + R_j - \|\vec{r}\| \qquad (۹)$$

که در آن R_i, R_j شعاع ذرات است و r فاصله برداری بین دو دایره که در تماس با یکدیگرند می‌باشد. بردار n_{ij} یک بردار واحد r است که برای محاسبه سرعت نسبی (V_n, V_t) استفاده شده است. در معادلهٔ (۸)، m می‌تواند از طریق معادلهٔ (۱۰) محاسبه شود [۱۲].

$$m_{\mathrm{eff}} = \frac{M_i M_j}{M_i + M_j} \qquad (۱۰)$$

که در آن، M_i, M_j جرم دو کرهٔ در تماس با هم در نظر گرفته شده است.

دوایر تا زمانی که همهٔ آنها در ته جعبه تجمع کنند بر هم متقابلاً اثر می‌کنند. این پایان پروسه برای تکنیک مبتنی بر روش المان گسسته می‌باشد.

نتیجه حاصل شده از این مرحله، با استفاده از تکنیک ذکر شده روش المان گسسته، تجمع ذراتی است که مختصات مراکز دایره‌ها در ظرف شبیه‌سازی شده، واقع شده است. مختصات-های بدست آمده برای مراکز که تجزیه مکانی[3] نامیده می‌شود به عنوان دادهٔ ورودی برای تولید چند ضلعی به عنوان ریزساختار فولاد در مراحل بعدی مورد استفاده خواهد شد.

قابل توجه است که تکنیک معرفی شده قادر به تولید هندسهٔ تکرارپذیر برای مدل‌های بزرگ است. پر واضح است که شبکه تکرارشونده ایجاد شده به یک هندسهٔ متناوب به عنوان داده‌ی ورودی نیازمند است. در روش‌های معرفی شده، تجمع ذرات می‌تواند به راحتی به شکل دوره‌ای منجر شود. در ابتدا، ماتریس‌های مجاور که در آن برای هر دایره که فاصله‌اش با ذرات دیگر مشخص شده باید ایجاد شود. سپس، به منظور اجرای شرایط مرزی هندسی تکرارشونده، معادله (۱۱) که به فاصله‌های بین ذرات مربوط است باید درنظر گرفته شود [۱۲].

$$dx = X_j - X_i$$
$$if\ dx > \frac{X_{\mathrm{cell}}}{2}\ then\ dx = dx - X_{\mathrm{cell}} \qquad (۱۱)$$

1. Discrete Element Method (DEM)
2. Cuda
3. Space Decomposition

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

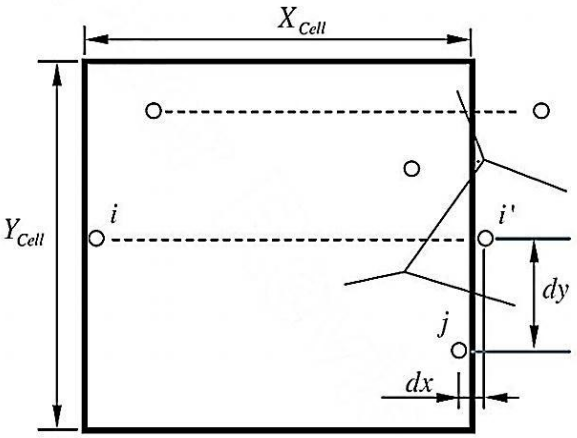
در نتیجه، شرایط مرزی تکرارشونده در راستای x فراهم خواهد شد. پروسه‌های مشابه می‌توانند در مسیر y دنبال شود. پارامترهای استفاده شده در معادلهٔ (۱۱) در شکل ۲ مشخص شده است.

حال با ساخت میکروساختار ماده به روش ورونی باید به هر یک از دانه‌های ساخته شده جهات کریستالی اختصاص یابد، در بخش بعدی سعی بر آن شده است تا به‌صورت دقیق‌تر به نحوه توزیع جهات کریستالی پرداخته شود.

۳- جهت گیری کریستال‌ها (آنالیز بافت)

جهت‌گیری کریستالوگرافی یا بافت پارامتر مهمی است که نمایش‌دهنده ریزساختار یک ماده بلوری می‌باشد. عمدتاً بافت توسط پراش پرتو ایکس اندازه‌گیری شده و توسط تصاویر قطبی[1] نمایش داده می‌شود. تصویر قطبی، یک طرح استریوگرافیگ است که توزیع یک جهت کریستالوگرافیکی خاص نمونه را در مجموعه دانه‌های تشکیل دهنده آن نشان می‌دهد. برای معنی‌دار شدن این تصویر، لازم است که تصویر قطبی حاوی یک سری جهات مرجع مربوط به خود ماده نیز باشد. معمولاً این جهات به نوع فرایند شکل‌دهی باز می‌گردند، مثلاً جهت نورد در ورق‌های نورد شده [۱۳].

نشان دادن بافت توسط تصاویر قطبی کامل نیست. اطلاعات به‌دست آمده صرفاً مربوط به توزیع آماری یک جهت انفرادی بوده و راهی برای استفاده از این اطلاعات به منظور حصول جهت کامل دانه‌های انفرادی یا عناصر حجمی وجود ندارد.



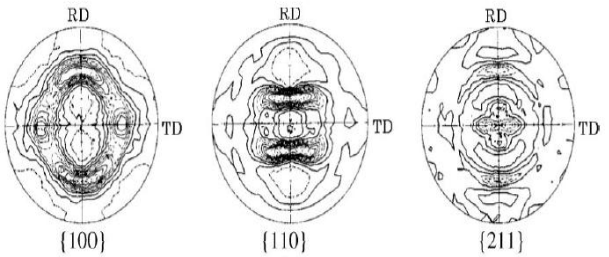
شکل ۲ شرایط مرزی تکرارپذیر [۱۲]

1. Pole Figure

نمایش بهتر بافت، توسط توابع توزیع جهت[2] انجام می‌شود که جهت تمامی حجم‌های جزئی در مجموعه را ارائه می‌کنند. بنابراین به منظور مشخص کردن جهات کریستالی، داده‌های حاصل از تصاویر قطبی باید به داده‌های مورد نیاز برای توابع توزیع جهت تبدیل شوند.

هدف اولیه از مدل‌کردن المان محدود در کریستال پلاستیسیته اختصاص دادن جهات کریستالی در ترم‌هایی از زاویه اویلر به دانه‌هاست. در این مقاله، بافت فولاد نرم با ساختار فریت مورد بررسی قرار گرفت. تصاویر قطبی {۱۰۰}، {۱۱۰} و {۲۱۱} حاصل از ورق فولادی با ساختار فریت مرکزپر که به روش انتقال و انعکاس و با آنالیز اشعه ایکس به‌دست آمده از مرجع [۱۴] انتخاب شده و در شکل ۳ نشان داده شده است. بر مبنای این تصاویر قطبی، پارامترهای توابع توزیع جهت می‌توانند توسط آنالیز کمی بانگ و با روش هارمونیک تعیین شوند [۱۵]. مشخصات توابع توزیع جهت بدست آمده از این تصاویر قطبی توسط خطوط‌های کانتوری‌شکل در بخش‌های $\varphi_2 = 0^\circ, 5^\circ, \ldots, 90^\circ$ میان فضای مختصاتی زاویه اویلر در شکل ۴ نشان داده شده است [۱۴].

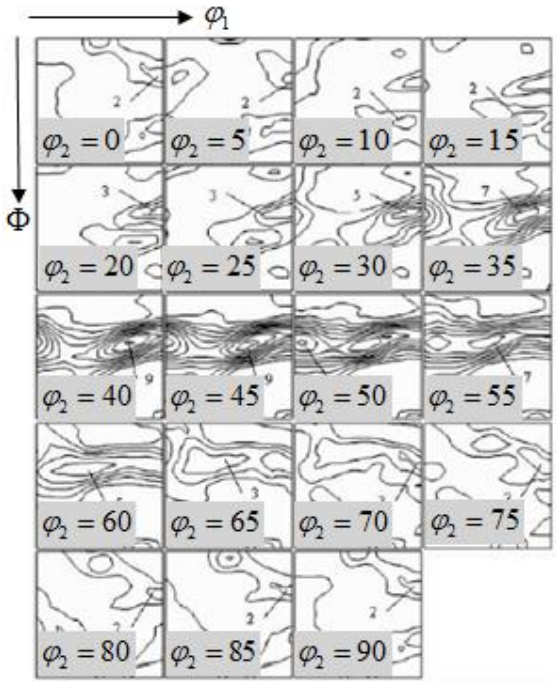
با توجه به تصاویر توابع توزیع جهت موجود در شکل ۴ می‌توان فهیمد که بیشتر جهات کریستالی تحت یک زاویه خاص می‌باشند، مثلاً محدوده اندازه زاویه φ_2 اکثراً بین ۴۰ تا ۵۵ درجه می‌باشد و محدوده اندازه φ_1 بین ۲۵ تا ۴۵ درجه می‌باشد. لذا برای تخصیص جهات کریستالی در این مقاله، از توابع توزیع گوسی محدود به این بازه‌ها استفاده می‌شود. حال برای شبیه‌سازی یک میکروساختار با روش المان محدود، پارامترهای مختلفی همانند مدول یانگ و سخت شوندگی نیاز است.



شکل ۳ تصاویر قطبی استفاده شده برای تخصیص جهات کریستالی طبق مرجع [۱۴]

2. Orientation Distribution Function(ODF)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]



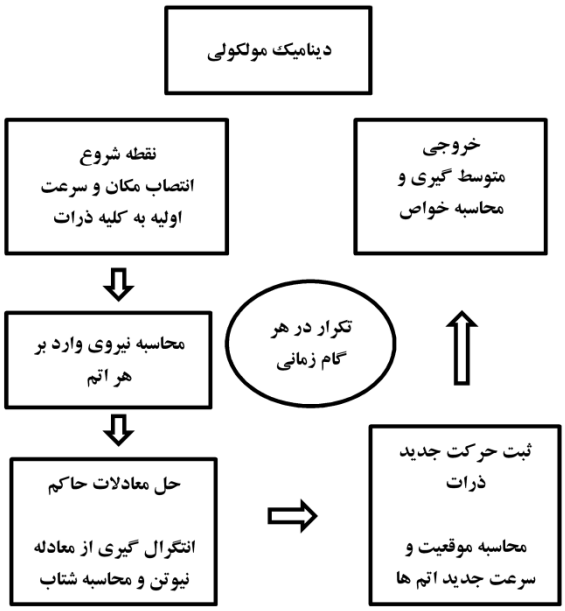
شکل ۴ داده‌های توابع توزیع جهت به‌دست آمده طبق تصاویر قطبی شکل ۳ [۱۴].

پارامترهای مربوط به سخت‌شوندگی، h_o، τ_o و τ_s باید از طریق تطابق دادن نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی موجود به‌دست آیند، درحالی‌که ضرایب مدول الاستیک را می‌توان با توجه به ساختار ماده مورد نظر از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دست آورد که اطلاعات مختصری در مورد آن در بخش زیر داده شده است.

۴-تعیین ثوابت الاستیک فریت مرکزپر به روش دینامیک مولکولی

۴-۱- روش دینامیک مولکولی

در چند دهه اخیر تمایل به شبیه‌سازی در مقیاس‌های بسیار ریز افزایش چشم‌گیری یافته است. به‌طوری‌که با افزایش قدرت محاسباتی رایانه‌های موجود و قابلیت موازی کردن کدهای عددی، پتانسیل محاسباتی مربوط به این زمینه رشد زیادی داشته است، به‌گونه‌ای که می‌توان برای شبیه‌سازی سیستم‌ها، تک‌تک مولکول‌های آن را بررسی کرد. این روش امروزه در بسیاری حوزه‌ها کاربرد داشته و می‌توان دینامیک مولکولی را به جرات دقیق‌ترین روش در میان شبیه‌سازی‌های مولکولی موجود دانست. نمودار گردش کار این روش به‌صورت شکل ۵ است.



شکل ۵ نمودار گردش‌کار مراحل یک شبیه سازی دینامیک مولکولی

۴-۲- روابط مورد استفاده

در دمای صفر درجه کلوین مدول حجمی و تابع پتانسیل طبق رابطه زیر به یکدیگر وابسته می‌باشند [۱۶]:

$$B = \frac{{a_0}^2}{9\Omega}\frac{d^2U}{da^2} \qquad (۱۲)$$

که رابطه مدول حجمی با ثوابت الاستیک ماده به صورت رابطه (۱۳) است.

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \qquad (۱۳)$$

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{{C_{11}}^2 + C_{11}C_{12} - 2{C_{12}}^2}$$

$$S_{12} = \frac{-C_{12}}{{C_{11}}^2 + C_{11}C_{12} - 2{C_{12}}^2}$$

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}} \qquad (۱۴)$$

به کمک این روابط ثوابت ماده در دمای صفر درجه کلوین بدست آورده می‌شود. برای محاسبه این ثوابت در دماهای بالاتر می‌توان از رابطه نوسانی که ری و رحمان [۱۶-۱۸] پیشنهاد نمودند، استفاده کرد. در نتیجه ثوابت الاستیک در دماهای غیر صفر طبق رابطه نوسان تنش[1] (۱۵) به‌دست می‌آید.

$$C_{ijkl} = {C_{ijkl}}^o + {C_{ijkl}}^k$$

1. Stress Fluctuation Method

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

$$-\frac{V}{K_BT}\left(<\sigma_{ij}\sigma_{kl}> - <\sigma_{ij}><\sigma_{kl}>\right) \qquad (۱۵)$$

در معادله بالا، ترم اول، $C_{ijkl}{}^{o}$، بیان‌گر ثوابت الاستیک در دمای صفر درجه کلوین است، و ترم دوم، $C_{ijkl}{}^{k}$، طبق رابطه (۱۶) محاسبه می‌شود.

$$C_{ijkl}{}^{k} = \frac{2NK_BT}{V}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \qquad (۱۶)$$

که در آن δ تابع دلتای کرونیکر، N تعداد اتم‌ها، K_B ثابت بولتزمن، V حجم سلول شبیه‌سازی و T دمای مطلق می‌باشند. علامت $<\ >$ متوسط مقدار در ناحیه‌ای است که سیستم به تعادل رسیده است.

۴-۳- روش شبیه‌سازی

برای محاسبه ثوابت الاستیک در دمای صفر درجه باید انرژی پتانسیل بر حسب پارامتر شبکه رسم شود. در ادامه منحنی درجه دومی بر مقادیر پتانسیل برازش شده و مقدار کمینه تابع محاسبه می‌شود. این مقدار کمینه، پارامتر شبکه تعادلی نام دارد. برای این منظور مقادیر متفاوتی به پارامتر شبکه تخصیص داده شده و انرژی پتانسیل در هر مقدار محاسبه می‌شود. پتانسیل مورد استفاده شده در این مطالعه از نوع اتم جانمائی شده[1] است. محاسبات بر روی نرم‌افزار پردازشگر گرافیکی سیستم‌های دینامیکی[2] [۱۹] پیاده‌سازی شد. مزیت استفاده از این برنامه نسبت به سایر برنامه های دینامیک مولکولی استفاده از پردازش‌گر گرافیکی بجای پردازش‌گر مرکزی بعنوان واحد محاسباتی است که سرعت شبیه‌سازی را به‌صورت قابل توجهی افزایش می دهد.

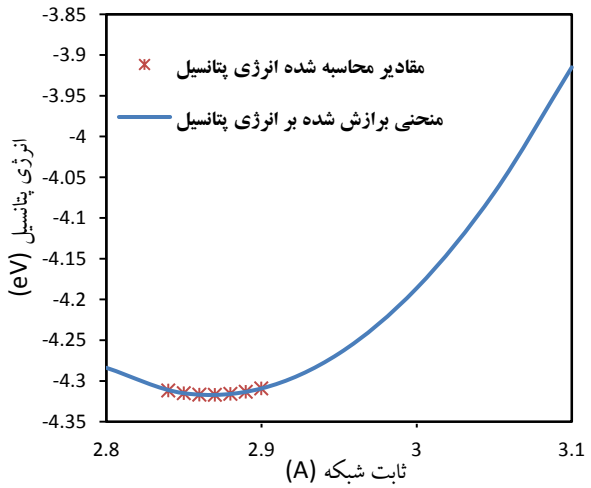
برای شبیه‌سازی، ابتدا یک تک کریستال آهن با ساختار مرکزپر که موقعیت اتم‌ها در آن مشخص است، به طول ۱۱/۴۶۶ نانومتر ایجاد می‌شود. مدل ایجاد شده حاوی ۱۲۸۰۰۰ اتم می‌باشد که دارای شرایط مرزی متناوب در هر سه جهت است. تغییر طول مشخصی به کریستال در جهت محور X اعمال نموده و با استفاده از انتگرال گیر حجم ثابت و دما ثابت نوز-هور موقعیت جدید اتم‌ها در حین شبیه‌سازی محاسبه می‌شود. در حین شبیه‌سازی طول کریستال در دو جهت دیگر ثابت می‌ماند. جهت‌های اصلی کریستال بر جهات اصلی محور مختصات منطبق است (جهات <۱۰۰> و <۰۱۰> و <۰۰۱> کریستال به ترتیب در جهات محورهای مختصات X و Y و Z می‌باشند). در ادامه با برازش منحنی بر روی قسمت خطی نمودار تنش-کرنش ثابت الاستیک محاسبه شده و برای تعیین ثوابت الاستیک در دماهای بالاتر از رابطه نوسانی تنش (۱۶) استفاده می‌شود.

۴-۴- نتایج

با توجه به شکل ۶ مقدار تعادلی پارامتر شبکه $۲/۸۶۶۷A^{\circ}$ محاسبه شد، که این نتیجه با اندازه شبکه گزارش شده در مرجع [۲۰] تطابق خوبی دارد.

با استفاده از رابطه (۱۲) مقدار ۱۸۲GPa برای مدول حجمی محاسبه شد که با مقداری که در ادامه با استفاده از ثوابت الاستیک محاسبه خواهد شد تطابق مناسبی دارد. حال با استفاده از روش ذکر شده در مرحله قبل نمودار تنش کرنش را رسم و با برازش یک منحنی خطی بر آن، ثوابت الاستیک استخراج می‌شود.

در جدول ۱ ثوابت الاستیک استخراج شده در دمای صفر درجه کلوین نمایش داده شده که تطابق خوبی با نتایج موجود دارد [۲۰]. در ادامه، تمامی ثوابت الاستیک در دماهای مختلف تا ۳۰۰ درجه کلوین با روش شبیه‌سازی، محاسبه شد. در هر دما با استفاده از انتگرال‌گیر فشار ثابت و دما ثابت نوز- هور، سیستم به دمای مورد نظر و فشار محیط رسانده می‌شود.



شکل ۶ انرژی پتانسیل بر حسب پارامتر شبکه

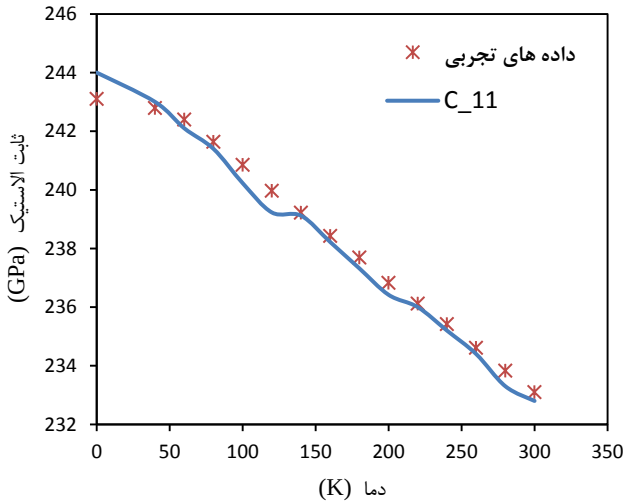
1. Embedded Atom Method (EAM)
2. GPIUTMD

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

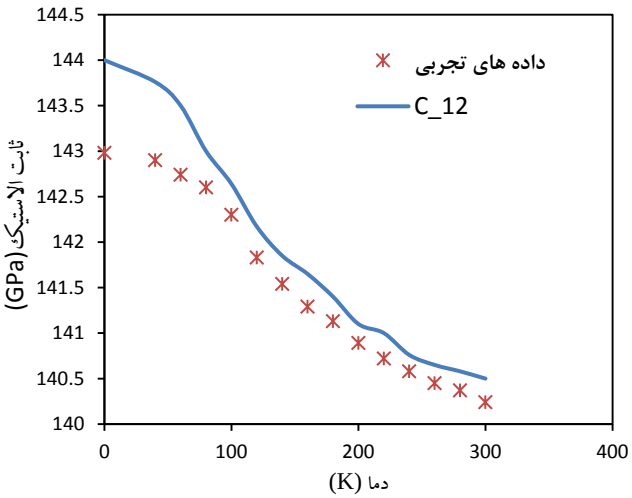
جدول ۱ ثوابت الاستیک تک کریستال آهن در دمای صفر درجه کلوین

ثوابت الاستیک	شبیه سازی دینامیک مولکولی	مرجع [۲۰]
C_{11}	۲۴۴	۲۴۳/۴
C_{12}	۱۴۴/۸	۱۴۵
C_{44}	۱۱۶/۸	۱۱۶
مدول حجمی	۱۷۷/۹	۱۷۷/۸

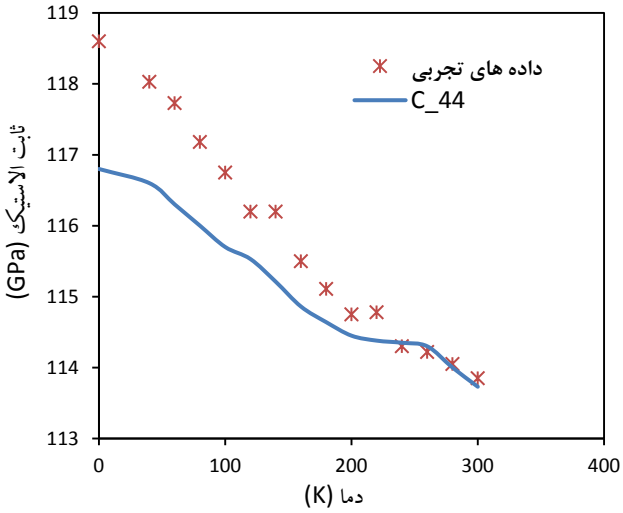
پس از رسیدن سیستم به حالت تعادل، بارگذاری کششی یا برشی به کریستال اعمال می‌شود. در شکل‌های ۷ تا ۹ ضرایب الاستیک ماده در هر دما گزارش شده است و با مقادیر تجربی موجود در مرجع [۲۱] مقایسه شده است.



شکل ۷ نمودار تغییرات ضریب الاستیک C_{11} با دما و مقایسه آن با مقادیر تجربی برای تک کریستال آهن [۲۱]



شکل ۸ نمودار تغییرات ضریب الاستیک C_{12} با دما و مقایسه آن با مقادیر تجربی برای تک کریستال آهن [۲۱]



شکل ۹ نمودار تغییرات ضریب الاستیک برشی C_{44} با دما و مقایسه با مقادیر تجربی برای تک کریستال آهن [۲۱]

همان‌طور که مورد انتظار است ضریب الاستیک با افزایش دما کاهش می‌یابد که همان پدیده نرم شدن ماده در اثر دما است. از شکل‌های بالا قابل مشاهده است که در دماهای پایین بیشینه اختلافی حدود ۱/۶٪ بین نتایج شبیه‌سازی و تجربی وجود دارد. علت این امر وجود خطاهای عددی یا استفاده از روش برون‌یابی جهت محاسبه مقادیر تجربی در در دماهای پایین می‌باشد [۲۱].

۵- آنالیز المان محدود کریستال پلاستیسته

۵-۱- مدل پلی‌کریستال

برای اعتبارسنجی مدل موردنظر با درنظر گرفتن جهات کریستالی، مدلی ورونی از میکروساختار حاوی ۱۰۰ دانه با اندازه دانه ۵۰ میکرومتر ساخته شد. با پیاده‌سازی خواص فولاد با ساختار فریت مرکزپر بر روی آن، نتیجه تنش و کرنش حاصل از آن محاسبه و با نتیجه تجربی موجود در مقالات مقایسه شد. شکل ۱۰ مدل ورونی ساخته شده را نشان می‌دهد. وجود رنگ‌های مختلف برای دانه‌ها، بیان‌گر جهات کریستالی مختلف اختصاص داده شده به آنها می‌باشد. برای تخصیص دادن جهات کریستالی از داده‌های توابع توزیع جهت موجود در شکل ۴ استفاده شد. شرایط مرزی و بارگذاری وارد بر نمونه در این مطالعه در شکل ۱۱ نشان داده شده است، که بیان‌گر بارگذاری کشش ساده می‌باشد. یکی از نکات مهم در شبیه‌سازی مواد

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

پلی‌کریستال با المان محدود، نوع شکل و تعداد المان مورد استفاده شده است که باید استقلال نتایج از تعداد المان‌ها در پلی‌کریستال مورد بررسی قرار بگیرد. شکل ۱۲ شبکه المان‌بندی مورد استفاده شده در این مقاله را نشان می‌دهد که شامل ۵۰۰۰ المان مثلثی کرنش صفحه‌ای غیرخطی ۴ گرهی است.

در زیر مراحل اجرای شبیه‌سازی شبکه پلی‌کریستال در نرم‌افزار تجاری آباکوس به صورت خلاصه اورده شده است:

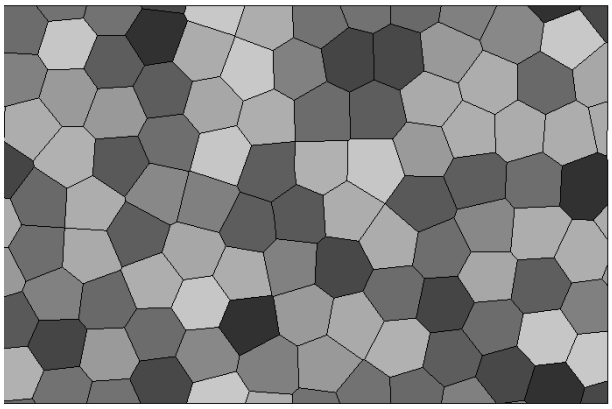
۱- تولید نمونه پلی‌کریستال مورد نظر بر اساس کد پایتون

۲- تولید جهات کریستالی بر اساس تصاویر توابع توزیع جهت

۳- اختصاص دادن زیربرنامه نوشته شده به تک‌تک کریستال‌ها و با درنظر گرفتن جهات کریستالی مورد نظر.

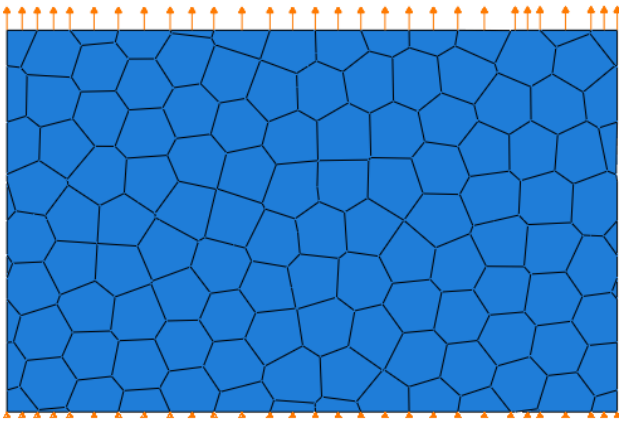
۵-۲- نتایج شبیه‌سازی

ضرایب مدول الاستیک فولاد با ساختار فریت مرکزپر برای شبیه‌سازی در دمای محیط از نمودارهای ۷ تا ۹ استخراج شده است. دیگر داده‌های مورد نیاز جهت شبیه‌سازی مدل ورونی با روش کریستال پلاستیسته در جدول ۲ آورده شده‌است. پارامترهای مربوط به سخت‌شوندگی، h_o، τ_o و τ_s باید از طریق منطبق کردن نتایج تنش-کرنش حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی موجود از مرجع [۱۴] به‌دست آیند.

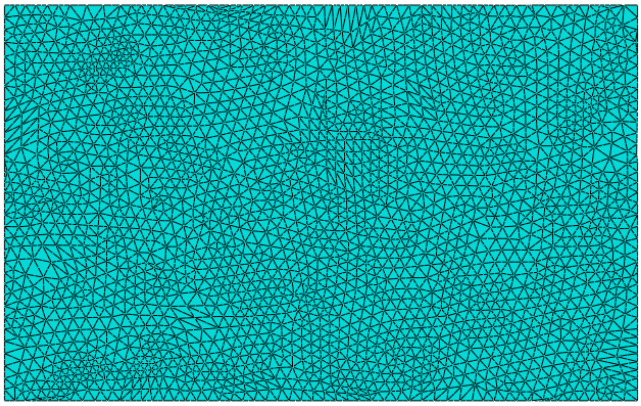


شکل ۱۰ نمونه‌ای از پلی‌کریستال شبیه‌سازی شده، (هر رنگ مبین یک تک کریستال با جهت‌گیری مختلف است)

منحنی تنش حقیقی برحسب کرنش حقیقی بدست آمده از طریق شبیه‌سازی در شکل ۱۳ نشان داده شده است. برای بررسی نتایج شبیه‌سازی، این نتایج با نتایج تجربی موجود در مقاله [۱۴] که با تست کشش ساده بر روی ورق فولادی با ساختار فریت مرکزپر حاصل شد، مقایسه گردید.



شکل ۱۱ اعمال شرایط مرزی و بارگذاری به نمونه



شکل ۱۲ شبکه مثلثی تولید شده

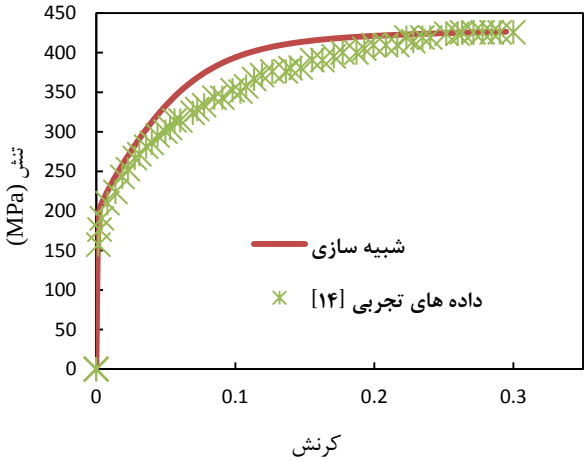
جدول ۲ پارامترهای مورد استفاده برای شبیه‌سازی المان محدود

پارامترهای سخت شوندگی	۱۷۰	h_o
	۸۰	τ_s
	۴۰	τ_o
چگالی	۷۸۰۰ kg/m^3	ρ

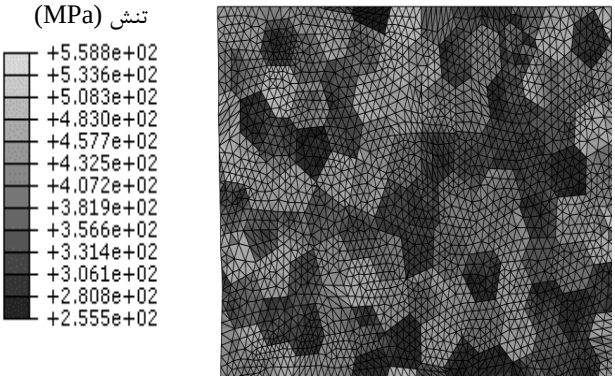
با مقایسهٔ بین منحنی حاصل از شبیه‌سازی و نتیجه تجربی موجود، می‌توان تطابق نسبتاً خوبی را بین آنها در ترم‌های سخت شوندگی و تنش تسلیم مشاهده کرد. اختلاف ناچیز بین دو منحنی را می‌توان به خطاهای محاسباتی حاصل از روش المان محدود و مدل کریستال پلاستیسته نسبت داد. تنش فون میزز معادل و کرنش پلاستیک معادل حاصل از شبیه‌سازی در شکل ۱۴ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱۴- الف می‌توان متوجه شد، چون هر تک کریستال جهت‌گیری مخصوص به خود را دارا می‌باشد، تنش جریان در آن طبق

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

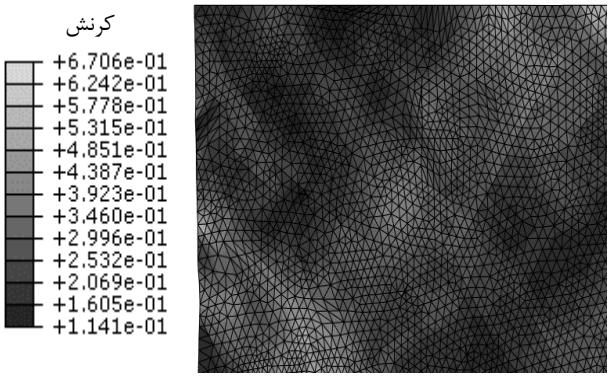
روابط ارائه شده در بخش ۱-۱ با یکدیگر متمایز می‌باشد که همین امر با متفاوت بودن تنش در دانه‌های میکروساختار قابل تشخیص است، و این موضوع باعث ایجاد شکل‌گیری باند برش در طول تغیرشکل پلاستیک ماده می‌باشد.



شکل ۱۳ نتیجه شبیه‌سازی برای فریت با اندازه دانه $50\mu m$



الف- تنش معادل فون میزز (Mpa)



ب- کرنش پلاستیک حاصل از شبیه‌سازی

شکل ۱۴ تنش و کرنش معادل در قسمتی از ساختار میکروکریستال شکل ۱۱

در نتیجه برای شبیه‌سازی رفتار فلزات با ساختارهای پیچیده با روش کریستال پلاستیسته، می‌توان با انتخاب پارامترهای دقیق برای ماده و رسم میکروساختار واقعی برای آن، تغییرشکل پلاستیک آنها را تا حد خوبی پیش‌بینی کرد، و مناطق تاثیرگذار بر رفتار ماده را شناسایی کرد. علاوه بر این موارد، با این روش نیز می‌توان اثر پارامترهای مختلف را بر رفتار ماده بررسی نمود و یک محدوده ایده‌ال برای هر کدام به‌دست آورد.

۶- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله از معادلات کریستال پلاستیسیته برای بررسی تغییرشکل پلاستیک فلزات میکروساختار استفاده شد. ابتدا به کمک روش ورونی فضای شبیه‌سازی به دانه‌های کریستالی افراز گردید و با کمک تصاویر قطبی جهات کریستالی به آنها تخصیص داده شد، تا ناهمگونی ریزساختار به بهترین نحو ممکن در شبیه‌سازی اعمال شود. در ادامه، از روش دینامیک مولکولی برای استخراج ثوابت الاستیک مورد نیاز استفاده شد. استفاده از پردازش‌گر گرافیکی بجای پردازش‌گر مرکزی بعنوان واحد محاسباتی باعث شد تا سرعت شبیه‌سازی به‌صورت قابل توجهی افزایش یابد. نتایج مربوط به ثوابت الاستیک از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با نتایج تجربی ارائه شده در مرجع [۲۰] مقایسه و نشان داده شد که با دقت خوبی با نتایج شبیه‌سازی منطبق می‌باشند. در ادامه، با روش کریستال پلاستیسیته رفتار فلز آهن تحت بارگذاری کشش ساده بر روی مدل ورونی شبیه‌سازی و نتایج حاصل از آن با نتایج تجربی ارائه شده در مرجع [۱۴] برای فریت با اندازه دانه ۵۰ میکرومتر مقایسه شد. تطابق خوب بین نتایج حاصل از روش عددی با نتایج تجربی موید مناسب بودن مدل عددی ارائه شده می‌باشد. با توجه به نتایج می‌توان اظهار نمود که ناهمگونی ریزساختار به خوبی توسط روش کریستال پلاستیسیته مدل شده است. نوآوری‌های این پژوهش نسبت به پژهش‌های موجود را می‌توان در سه مورد استخراج ثوابت الاستیک مورد نظر با پردازش‌گر گرافیکی، تولید مدل هندسه موردنظر با روش ورونی و تخصیص جهات کریستالی با تصاویر قطبی دانست.

۷- مراجع

[1] Asaro R.J., “Crystal plasticity”, *J. Appl. Mech.*, Vol.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]

50, 1983, pp. 921-934.

[2] Asaro R.J., "Micromechanics of Crystals and Polycrystals", *Adv. Appl. Mech.*, Vol. 23, 1983, pp. 1-115.

[3] Schmidt E., "Uber Die Schubverfestigung von Einkristallen bei Plastischer Deformation", *Z. Phys.*, Vol. 40, 1931, pp. 54–60.

[4] Rice J.R. and Tracey D.M., "On the Ductile Enlargement of Voids in Triaxial Stress Fields", *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 17, 1969, pp. 201-217.

[5] Rice J.R., "Inelastic Constitutive Relations for Solids: An Internal-Variable Theory and Its application to Metal Plasticity", *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 19, 1971, pp. 433-455.

[6] Huang, Y., *A User-material Subroutine Incorporating Single Crystal Plasticity in the ABAQUS Finite Element Program*, Mech. Report 178, Division of Applied Sciences, Harvard University, Cambridge, MA., 1991.

[7] Peirce D., Asaro R.J., Needleman A., "Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids", *Acta Metallurgical*, Vol. 31, 1983, pp.1951.

[8] Riesch-Oppermann and VorTess H., *Generation of 2-D Random Poisson-Voronoi Mosaics as Framework for the Micromechanical Modelling of Polycristalline Materials*, Karlsruhe, Germany: Forschungszentrum Karlsruhe, Report FZKA 6325, 1999.

[9] Kanit T., "Determination of the Size of the Representative Volume Element for Random Composites: Statistical and Numerical Approach", *Int. J. of Solids and Structures*, Vol. 40, 2003, pp. 3647-3679.

[10] Cizelj L. and Riesch-Oppermann H., "Modeling the Early Development of Secondary Side Stress Corrosion Cracks in Steam Generator Tubes Using Incomplete andom Tessellation", *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 212, 2002, pp. 21-29.

[11] Johansson T., *Analytische Beschreibung von Experimenten an fäserverstärkten Keramiken zur Bestimmung von Grenzflächenparametern* Düsseldorf, Germany: VDI Verlag, 1995.

[12] Nouri N., Ziaei-Rad V., Ziaei-Rad S., "An Approach for Simulating Microstructures of Polycrystalline Materials", *Comput Mech*, 2012.

[13] Hamphoiz, F.J., Hatherly, M., *"Recrystallization and related phenomena",* Ferdosi mashhad university publication, 2010.(In Persian)

[14] Nakamachi E., Xie C. L., Harimoto M., "Drawability Assessment of BCC Steel by Using Elastic/Crystalline Viscoplastic Finite Element Analyse", *Int. J. of Mechanical Sciences*, Vol. 43, 2001, pp. 631-652.

[15] Bunge H.J., *Texture Analysis in Material Science*, London, Butterworths, 1982.

[16] Ray J.R., "Elastic Constants and Statistical Ensembles in Molecular Dynamics", *Comput. Phys. Rep.*, Vol. 8, 1988, pp. 109-51.

[17] Ray J.R. and Rahman A., "Statistical Ensembles and Molecular Dynamics Studies of Anisotropic Solids", *J. Chem. Phys*, Vol. 80, 1984, pp. 4423-8.

[18] Ray J.R. and Rahman A., "Statistical Ensembles and Molecular Dynamics Studies of Anisotropic Solids II", *J. Chem. Phys*, Vol. 82, 1985, pp. 4243-4247.

[19] http://gpiutmd.iut.ac.ir/

[20] Ackland G.J., Bacon D.J., Calder A.F., Harry T., "Computer simulation of Point Defect Properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential", *Phil. Mag.*, Vol. A 75, 1997, pp. 713-732.

[21] Rayne J.A. and Chandrasekhar B.S., "Elastic Constants of Iron from 4.2 to 300", *Phys. Rev.*, 1961.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-05-13]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.9.10.8]