



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

بهرام بندشه¹، عبدالرحمان جامی الاحمدی^{2*}

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

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 316L

دانه بندی و رورونی

چکیده

ماهیت ناهمسان گرد دانه های موجود در بافت فلزات کریستالی سبب به وجود آمدن ناسازگاری بین دانه ها در هنگام تغییر شکل می شود. این پدیده با کوچکتر شدن مقیاس تا حد میکرو و مزو، تشدید می شود. ناهمگنی موجود در تغییر شکل در مقیاس میکرو را با قوانین بنیادی تئوری پیوسته پلاستیسیته نمی توان مورد بررسی قرار داد. در این مطالعه رفتار تغییر شکل لغزشی فولاد ضدزنگ آستنیتی 316L در مقیاس های یاد شده با استفاده از اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته مدل سازی شده است. فرمول بندی مدل ماده با استفاده از زیربرنامه UMAT به نرم افزار آباکوس معرفی شده است. اعتبار سنجی 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 می باشد. در بخش دوم مدل سازی 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 می دهد که رفتار تغییر شکل و موضعی شدن تک کریستال با روش پیشنهاد شده قابل پیش بینی بوده در حالیکه روش اجزاء محدود ماکرومکانیک از شناسایی این رفتارها ناتوان می باشد. 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 دانه بندی است. همچنین با تغییر جهات کریستالی نمودار تنش- کرنش ماده در بخش پلاستیک رفتارهای متفاوتی را نشان می دهد.

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

گستره وسیعی از فلزات مورد استفاده در کاربردهای مهندسی به صورت پلی کریستال می باشند. ناهمسان گردی الاستیک و پلاستیک دانه ها در مواد پلی کریستال باعث به وجود آمدن ناسازگاری بین دانه ها می شود. وجود این واقعیت در فرایند تغییر شکل فلزات بر این دارد که تغییر شکل در مقیاس ریزساختار ناهمگن می باشد. مواد پلی کریستال در مقیاس میکرو و

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:

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

از مطالعات انجام شده در این زمینه می توان 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 ساده ای را تولید نمودند. در پژوهش یاد شده، اندازه همه دانه ها یکسان و برابر با 50 میکرون در نظر گرفته شد. این مطالعه علی رغم اینکه رهیافت جدیدی محسوب می شود اما از مدل میکروساختار مشابه به حالت واقعی استفاده نکرده است. همچنین بدلیل استفاده از مدل میکروساختار دوبعدی به جای مدل سه بعدی و در نظر گرفتن اندازه دانه یکسان، نمی تواند اطلاعات دقیقی از وضعیت تغییر شکل در مقیاس میکروساختار و نحوه برهم کنش دانه ها ارائه دهد.

از دیگر مطالعات انجام شده در این زمینه می توان به مقاله رضایی بزاز و همکاران [6] در سال 2012 اشاره کرد. آن ها در مقاله خود با استفاده از تصویر برداری SEM¹⁰، میکروساختار دوبعدی فولاد دوفازی فریت - مارتزیت را تولید کردند و با تعریف مدل ماده وس¹¹ در نرم افزار آباکوس و وارد کردن مدل هندسی میکروساختار به دست آمده از SEM به نرم افزار آباکوس، منحنی تنش - کرنش و الگوی شکست فولاد دوفازی را شبیه سازی کردند. این تحقیق بدلیل عدم استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته قابلیت شناسایی پدیده های حاصل از لغزش کریستالی و همچنین تاثیرات بافت را دارا نمی باشد. در مطالعه [7] در سال 2005 آلیاژی مجازی از آهن و مس با هدف تعیین تنش بین گره ها در فازهای مختلف شبیه سازی شد. در این تحقیق هر دانه به 48 جزء¹² 10 گره ای تقسیم شده بود و دانه ها دارای اشکال ابتدائی بودند. در سال 2013 پال¹³ [8] مطالعه ای 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 شکل های 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 کریستال ها و تنش های پسماند در آن ها را در مقیاس میکروساختار مورد بررسی قرار داد. وی همچنین تاثیرات درصد فازها در آلومینا¹⁴ را مطالعه کرد. رهنما و فرهنگ دوست [10] در سال 2012 مدل سازی آماری رشد ترک در زمینه میکروساختاری در آلیاژ Ti-6Al-4V مورد مطالعه قرار دادند. آنها با استفاده از الگوریتم دانه بندی ورونوی¹⁵ 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 ضد زنگ باتوجه به خواص خوبی که دارند داری کاربردهای زیادی در صنعت می باشند. با توجه به کاربردهای فولاد ضد زنگ آستینیتی¹⁶ گرید 316L در محصولاتی با ابعاد کوچک مانند میکرولوله ها، تجهیزات

مزو¹ رفتار بسیار متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند از خود نشان می دهند. در نتیجه تنش های محلی، کرنش ها، و دوران های درون هر دانه به صورت غیر یکنواخت² و ناپیوسته خواهد بود. تنش ها، کرنش ها و دوران ها نه تنها به جهت دانه ها بستگی خواهند داشت بلکه از قیدها و محدودیت هایی که دانه های مجاور ایجاد می کنند، نیز تاثیر خواهند پذیرفت.

تئوری پلاستیسیته مورد استفاده در ماکرومکانیک با استفاده از مشاهدات تجربی در مقیاس ماکرو پی ریزی شده است که به پدیده های تغییر شکل در فلزات با یک دید محیط پیوسته نگاه می کند. این تئوری که با عنوان پلاستیسیته پدیداری³ نیز شناخته می شود، مکانیزم هایی که باعث ایجاد تغییر شکل پلاستیک می شوند را در نظر نمی گیرد و تغییر شکل را بصورت یکنواخت فرض می کند. در حالی که تغییر شکل در فلزات ناشی از لغزش در روی صفحاتی خاص و در جهاتی خاص می باشد که این باعث غیر یکنواختی تغییر شکل در مقیاس میکروساختار می شود. به همین دلیل این تئوری در پیش بینی تغییر شکل در مقیاس میکروساختار و همچنین مطالعه تاثیرات مشخصات دانه ها و بافت فلز بر روی روند تغییر شکل ناتوان است. بنا بر آنچه گفته شد اخیرا استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته⁴ که با یک رویکرد فیزیکی تغییر شکل در فلزات کریستالی را مورد مطالعه قرار می دهد، مورد توجه محققان زمینه علم مواد و مکانیک قرار گرفته است.

با مدل سازی 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 رشته ای مهندسی مواد و مکانیک که سعی در بررسی روش های مناسب برای مدل سازی مواد در مقیاس های متفاوت و ارتباط این مقیاس ها با یکدیگر دارد، با عنوان مدل سازی چند مقیاسی مواد⁵ شناخته می شود. مثلا واماندگی در مقیاس ماکرو اغلب دلالت بر این دارد که نواحی مشخصی از ماده در مقیاس میکرو دچار واماندگی شده اند. به علاوه، ثابت شده که مشخصات مرز دانه ها در توضیح و کنترل پلاستیسیته مواد در دمای بالا، ابر پلاستیسیته مواد⁶ و شکنندگی⁷ نقش بسزایی دارند [1]. اساسا درک بهتر از اینکه چه ریز ساختاری آسیب پذیرتر می باشد، ما را به تولید موادی بهتر از لحاظ کارایی و بهره وری در مقیاس ماکرو قادر خواهد ساخت که مثال هایی از آن می توانند شامل تولید میکروساختار با رفتار الاستیک - پلاستیک مطلوب در مقیاس ماکرو و یا تولید دوقلویی⁸ مقاوم به خوردگی باشد [2].

هدف زمینه مطالعاتی مدل سازی چند مقیاسی، توسعه امکانی برای انجام مطالعه بر روی میکروساختارهای متفاوت بدون نیاز به انجام عملیات هزینه بر آزمایشگاهی نظیر سیکل های عملیات حرارتی برای به دست آوردن میکروساختار مورد نظر، می باشد. برای مثال جهت مطالعه تاثیر بافت بر روی شکل پذیری ورق ها به تولید بافت مورد نظر از لحاظ اندازه دانه و چینش جهات کریستالی دانه ها 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. مدل سازی چند مقیاسی بخش اعظمی از نیاز به این نوع عملیات آزمایشگاهی برای تولید میکروساختارها را از روی دوش محققان بر می دارد. مثلا با داشتن یک المان حجمی نماینده⁹

- 1- Meso(10-5m)
- 2- Heterogeneous
- 3- Phenomenological plasticity
- 4- Crystal plasticity
- 5- Multi-scale material modeling
- 6- Superplasticity
- 7- fragility
- 8- Twining
- 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 α 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 $\tau = 0$ 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 ($t=0$) $\epsilon_{kl} = 0$ ، $g^{\alpha} = g_0$ ، $\gamma^{\alpha} = 0$ ، $\dot{\sigma}_{ij} = 0$ می باشند.

کرنش سختی مواد ماده مورد مطالعه با استفاده از مقاومت سیستم لغزشی نسبت به لغزش، g^{α} ، 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 γ 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.

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

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

در این روابط h_0 مدول سخت شوندگی اولیه، τ_0 استحکام برشی اولیه، τ_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 کروتری [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 تأثیرات پارامترهای میکروساختاری نظیر جهت 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 ضد زنگ 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 تأثیر جهت کریستالی بر روی رفتار تغییر شکل فولاد ضد زنگ 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 α به تنش برشی τ^{α} 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

همان‌طور که عنوان شده ماده مورد استفاده در این تحقیق فولاد ضدزنگ 316L می‌باشد. 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 می‌شوند. خواص الاستیک از مرجع [17] استخراج شدند. آستنیت نسبت به دیگر فازات دارای ساختار مکعبی مانند آلومینیوم، نیکل و فریت، ناهمسان‌گردی الاستیک بالایی دارد. آستنیت دارای سفت‌ترین جهت در راستای جهت قطری $\langle 111 \rangle$ می‌باشد. در حالی که نرم‌ترین جهت در راستای $\langle 100 \rangle$ قرار می‌گیرد (شکل 1).

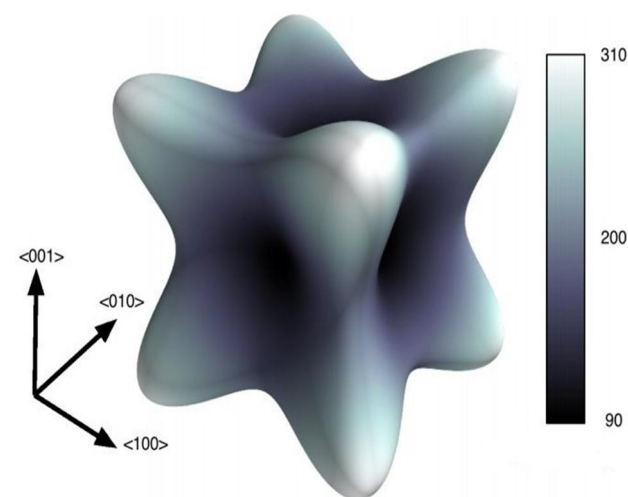
خواص پلاستیک تک‌کریستال برای ماده مستقیماً از طریق آزمایش تجربی بدست نمی‌آیند. روش استاندارد در تحقیقات برای کالیبره کردن پارامترهای مورد نیاز در قانون بنیادی¹ مدل ماده کریستال پلاستیسیته، انطباق تغییر شکل پیش‌بینی شده توسط مدل با نمودار تنش-کرنش تجربی ماده در حالت ماکرو می‌باشد [9]. پارامترهای مورد نیاز در مدل ماده در جدول 1 آورده شده‌اند. 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

مدل‌سازی میکرومکانیک به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته شامل سه بخش می‌باشد: 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 مدل‌سازی چند مقیاسی خواص هندسی دانه‌ها در ماده باید تا حد امکان نزدیک به حالت واقعی مدل شود. این خواص عبارت‌اند از اندازه دانه، جهت دانه‌ها و شکل

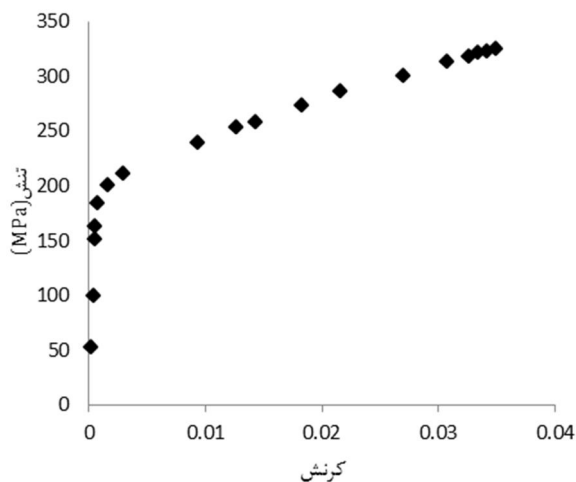


شکل 1 رویه مدول الاستیک وابسته به جهت آستنیت، نمایانگر وابستگی سفتی به جهت اعمال بار

جدول 1 مقادیر پارامترهای کریستال پلاستیسیته

C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	n	$\dot{\alpha}$	h_0	τ_s	τ_0
204/6	137/7	126/2	55	0/001	675	175	90

1- Constitutive law



شکل 2 نمودار تجربی تنش-کرنش فولاد ضدزنگ 316L

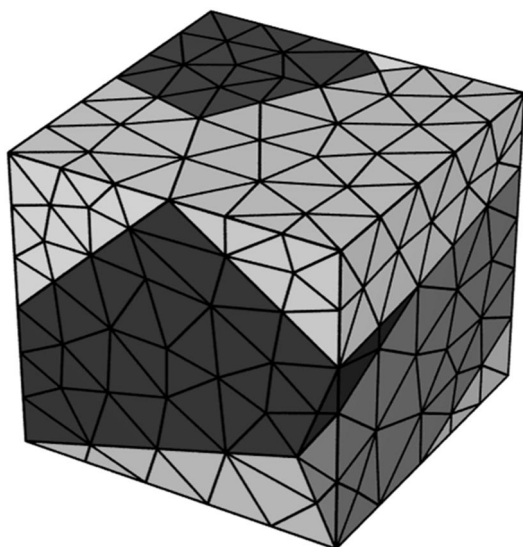
هندسی دانه‌ها. یکی از روش‌های تولید مدل میکروساختار، استفاده از روش تصویربرداری اشعه ایکس میکروتوموگرافی² می‌باشد که بعد از تصویربرداری از میکروساختار ماده، عکس گرفته شده باید در نرم افزارهای پردازش تصویر مورد پردازش قرار گیرد. برای نمونه می‌توان به پژوهش [18] مراجعه کرد. روشی که به آن اشاره شد دارای مشکلات و پیچیدگی‌هایی از قبیل گرانی تجهیزات و هزینه بر بودن انجام آزمایشات تصویربرداری و هم چنین نیاز به پردازش تصاویر، می‌باشد. همچنین اگر از دید مطالعه تاثیرات بافت و وضعیت دانه‌ها بر روی رفتار ماده به موضوع نگریسته شود، نیاز به تولید میکروساختارها با مشخصات گوناگون از طریق تصویر برداری از نمونه‌های 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 گسترده‌ای پیدا کرده است، استفاده از روش توصیف ریاضی برای یک میکرو ساختار که به اندازه کافی نزدیک به حالت واقعی ماده است می‌باشد. به نحوی که با استفاده از این توصیف یک تحلیل قابل استناد و معنی دار روی رفتار ماده بتوان انجام داد. در بین این روش‌های تقریبی استفاده از روش دانه‌بندی ورونوی³ بسیار مرسوم می‌باشد. دانه‌بندی ورونوی شامل تقسیم بندی یک ناحیه در فضا $D \in R^d$ به تعداد مشخصی ناحیه R_i در D می‌باشد، که هر کدام از این نواحی بر یکی از نقاط دانه‌ای P_i که دارای مکانی تعیین شده هستند، منطبق می‌باشند. این نواحی مجموعه‌ای از همه‌ی نقاطی را تشکیل می‌دهند که به یک نقطه‌ی دانه‌ای خاص (یا به مفهوم آشناتر نقطه جوانه‌ای) نزدیک‌تر از بقیه نقاط جوانه‌ای می‌باشند [19]. به عبارتی نرم ارائه شده در رابطه (8) این که هر نقطه به چه دانه‌ای تعلق دارد را، تعیین می‌کند.

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

در این مقاله از نرم اقلیدسی استفاده گردیده است و دانه بندی در یک فضای سه بعدی و در ناحیه استوانه‌ای شکل انجام شده است. در این صورت نواحی حاصل به صورت محدب چند وجهی خواهند بود که معرف دانه‌های فولاد ضدزنگ مورد نظر می‌باشند. شایان ذکر است که این نوع ساختار دانه

2- X-ray microtomography
3- Voronoi tessellation
4- Seed point



شکل 4 نمونه میکروساختار سه بعدی تولید شده و مش زده شده با استفاده از دانه بندی ورونوی با تعداد دانه 10

دستور اول فایلی با فرمت tess که خروجی ماژول دانه بندی⁵ است، ایجاد می کند. این فایل حاوی موقعیت فضایی دانه ها و شکل هندسی آنها می باشد. در دستور دوم که پس از فراخوانی بخش مش بندی در ترمینال، وارد می شود، فایل ایجاد شده در بخش دانه بندی را به بخش مش بندی فرا می خواند و عمل مش زنی روی آن را انجام می دهد. در ادامه از این میکروساختار تولید شده به عنوان المان حجمی نماینده جهت مطالعه تاثیر جهت کریستالی بر روی رفتار ماده، استفاده شده است.

2-4- 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 می شود. سپس مراحل پیش پردازش از قبیل اضافه کردن شرایط مرزی، اعمال بار و غیره روی مدل و تعریف مشخصات جهت کریستالوگرافی دانه ها قبل از انجام تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته، انجام می گیرد.

جهت کریستالوگرافی به صورت اتفاقی در قالب زوایای اولر⁶ که معمول ترین روش برای بیان جهت کریستالوگرافی می باشند 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 شاخص های میلر⁷ $[hkl][uvw]$ ، در بیان جهت کریستالی شوند. این تبدیلات با استفاده از روابط (10) تا (15) انجام می گردند [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

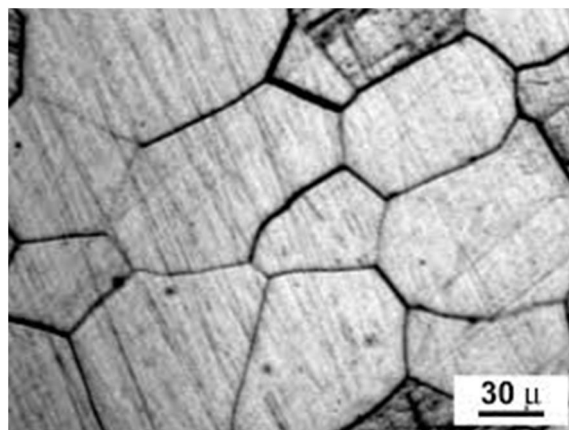
در موادی در شرایط زیر شکل می گیرند وجود خواهد داشت که این شرایط عبارتند از:

- دانه ها همزمان در نقاط جوانه زنی شروع به جوانه زنی می کنند.
- دانه ها در تمامی جهات و با یک نرخ یکسان رشد می کنند.
- مرز دانه ها در جایی است که دانه ها به هم می رسند.

در شکل 3- (الف) و (ب) مقایسه میکروساختار واقعی و میکروساختار تولید شده توسط دانه بندی ورونوی ملاحظه می شود.

برای بکارگیری الگوریتم ورونوی از نرم افزار متن باز¹ نپر² [20] برای تولید میکروساختار استفاده شده است. از نقاط قوت این نرم افزار این است که دارای بخش جداگانه برای مش زنی میکروساختار تولید شده می باشد که از کتابخانه الحاقی جی مش³ بهره می برد. این نرم افزار تنها قابل اجرا شدن روی سیستم های متن باز می باشد و فاقد رابط گرافیکی کاربر⁴ است. دستورات مربوط به تولید میکروساختار مورد نظر در این نرم افزار باید از طریق ترمینال اجرای دستورات در محیط لینوکس به نرم افزار وارد شوند. برای مثال دو دستور زیر برای تولید میکروساختار ارائه شده در شکل 4 بکار می رود.

```
$ 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	[412]	(021)
2	[314]	(111)
3	[131]	(013)
4	[531]	(013)
5	[011]	(211)
6	[111]	(110)
7	[233]	(313)
8	[211]	(111)
9	[122]	(411)
10	[201]	(162)

جدول 3 مقایسه حل تحلیلی اجزاء محدود تنش برشی

خطای مطلق	حل اجزاء محدود (MPa)	حل تحلیلی (MPa)	سیستم لغزشی
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 $[021] \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ می‌باشد که در بیان زوایای اولر⁴ معادل $(3/283^\circ, 5/115^\circ, 1/37^\circ)$ قرار می‌گیرد. مدول یانگ فولاد ضد زنگ 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 تک کریستال فولاد ضد زنگ L316 در ناحیه گلویی شدن مورد مطالعه قرار گیرد و با الگوی تغییر شکل 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 تغییر شکل 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 نیمه‌ای بالایی

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

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

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 ماده کریستال پلاستیسیته در نرم افزار آباکوس تعریف نشده این مدل ماده باید در قالب کد زیر برنامه UMAT¹ که از قابلیت‌های نرم افزار آباکوس برای تعریف مدل مواد جدید می‌باشد، بکار گرفته شود. این کد قابلیت انجام تحلیل‌های تغییر شکل‌های کوچک، تغییر شکل‌های بزرگ با کارگیری تئوری کرنش محدود² و چرخش محدود³ 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

5-1- اعتبار سنجی مدل مورد استفاده

جهت اعتبار سنجی مدل روابط سینماتیک تغییر شکل 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 اشمید و تنش برشی مولفه شده در هر سیستم لغزشی که جزو پارامترهای تعیین کننده در نوع رفتار ماده می‌باشند را استخراج نمود. تغییر شکل یک تک کریستال 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 زیر برنامه UMAT در آباکوس مورد تحلیل کریستال پلاستیسیته قرار گرفت. ادامه نتایج مربوط به مقدار تنش برشی مولفه شده τ_{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).

5-2- شبیه‌سازی سه بعدی آزمون کشش تک کریستال

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 تک کریستال شبیه‌سازی می‌شود. شکل مدل مورد استفاده به صورت استوانه با قطر و طول به ترتیب 1 و 4 میلی‌متر می‌باشند. شرایط مرزی به گونه ای 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

4- Euler angles

صفحات لغزش می باشد.

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

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 دانه های بیشتر) در دمای پایین استحکام بالاتری دارند صحه می گذارند [24].

در شکل 10 مقایسه بین منحنی های تنش- کرنش حاصل از دو مدل فوق الذکر با منحنی تجربی انجام شده است. همان طور که پیش بینی می شد، منحنی های حاصل از آزمون تجربی و روش اجزاء محدود میکرومکانیک بر یکدیگر منطبق هستند. ولی منحنی بدست آمده از شبیه سازی آزمون کشش تک کریستال به مراتب مقادیر کمتری را نشان می دهد. این بدین معنی می باشد که بار مورد نیاز برای تغییر شکل تک کریستال به مراتب کمتر از بار مورد نیاز برای تغییر شکل پلی کریستال ها می باشد. در واقع با افزایش تعداد دانه ها نواحی مرز دانه های افزایش پیدا می کنند و نواحی مرز دانه های بیشتر یعنی ایجاد موانع بیشتر در سر راه حرکت نابجایی هایی که با حرکت خود تغییر شکل پلاستیک را بوجود می آورند. وجه اهمیت این نتیجه از آن جهت است که قادر بوده ایم این نتیجه را بدون انجام آزمون تجربی کشش روی یک تک کریستال، و صرفا با روش اجزاء محدود ارائه شده پیش بینی کنیم.

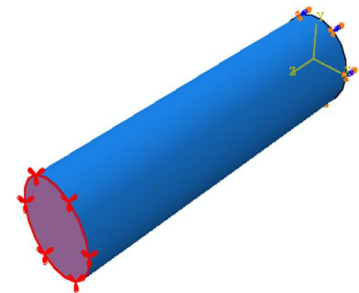
3-5- مدل سازی تغییر شکل پلی کریستال بر روی المان حجمی نماینده (RVE)

در این بخش با هدف بررسی تاثیر جهات کریستالی دانه ها 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 ضد زنگ 316L می باشد. بارگذاری و شرایط مرزی روی RVE مطابق شکل 11 تنظیم شده اند. جابجایی گره های قرار گرفته در سطح بالایی مدل میکروساختار در راستای y برابر با $0/05$ میلی متر می باشد. در مقابل، گره های قرار گرفته روی سطح کف مدل در راستای y مقید شده اند. بعلاوه، گره های روی لبه های سطح کف مدل، در راستای x و z مقید شده اند (شکل 11).

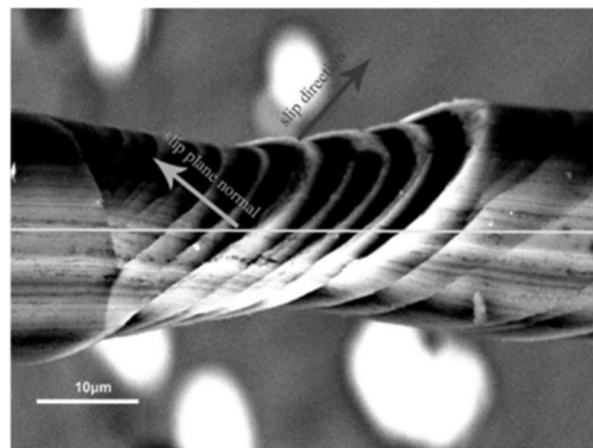
تحلیل اجزاء محدود مدل های میکروساختاری، RVE، به روش کریستال پلاستیسیته نیازمند این است که برای هر جزء خواص مکانیکی و فیزیکی را که تعیین کننده رفتار آن می باشد را تعریف نماییم. در واقع باید بتوان بسته به این که هر جزء متعلق به کدام دانه است، برای آن خواص مورد نظر را تعریف کرد. هر دانه در مدل RVE، متشکل از مجموعه ای از جزء ها می باشد، پس می توان به جای اینکه برای هر جزء خواص جداگانه تعریف کرد، جزء های تشکیل دهنده هر دانه را درون یک دسته¹ (مجموعه جزء ها با شماره مشخص در آباکوس)، جداگانه قرار داد. سپس خواص هر دانه را به دسته ای که نمایانگر دانه مورد نظر می باشد اختصاص داد.

نمونه نسبت به نیمه ی پایینی خواهند شد. ولی از آنجا که در حالت واقعی آزمون کشش و همین طور در هنگام شبیه سازی هر دو سر نمونه مقید می شوند، جابجایی نیمه بالایی نسبت به نیمه پایینی محدود می شود. در عوض این محدودیت با چرخش صفحات کریستالی در حین تغییر شکل جبران می گردد (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 پله ای شدن در اثر چرخش، که همان نقش بافت در حین تغییر شکل را ایفا می کند، مشاهده نمی شود. اما مشاهده می شود که در شکل 7- (ب) این چرخش در شبکه و پله ای شدن در رفتار میکروساختار، که مطابق با الگوی تغییر شکل تک کریستال است (شکل 6)، با استفاده از تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته قابل پیش بینی 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 می افتد، متفاوت است. در حالتی که مدل سازی 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 می افتد، مطابقت دارد. اما در حالت میکرو و استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته وضعیت متفاوتی وجود دارد و سطح مقطع به شکل یک بیضی می باشد. 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 کریستال ها در امتداد



شکل 5 مدل استفاده شده برای شبیه سازی آزمون کشش



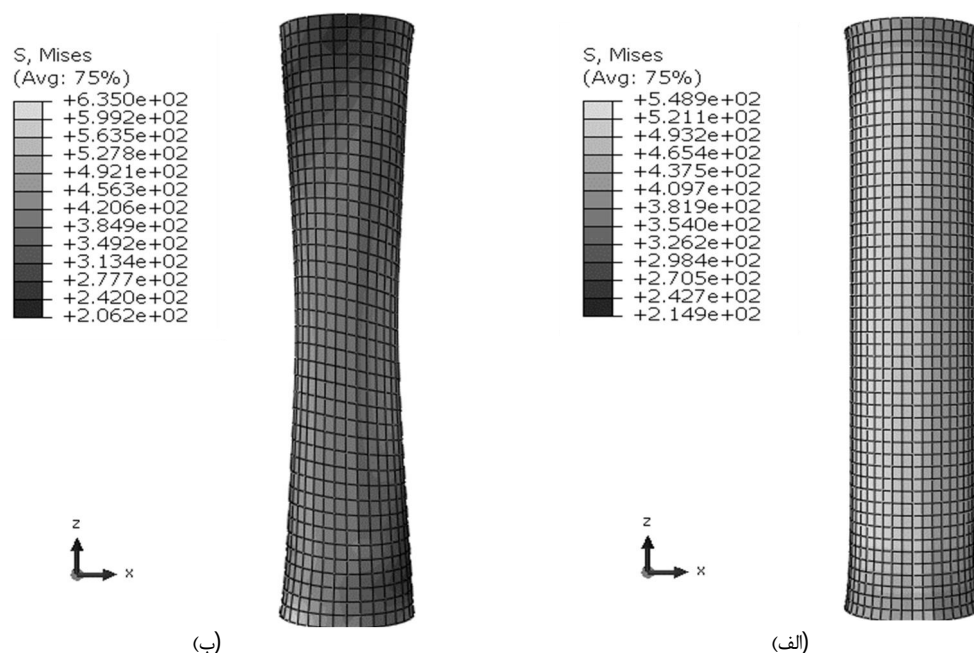
شکل 6 لغزش در آزمون کشش نمونه تک کریستال [23]

دانه‌ها می‌شود که مدلل 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، τ_{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.

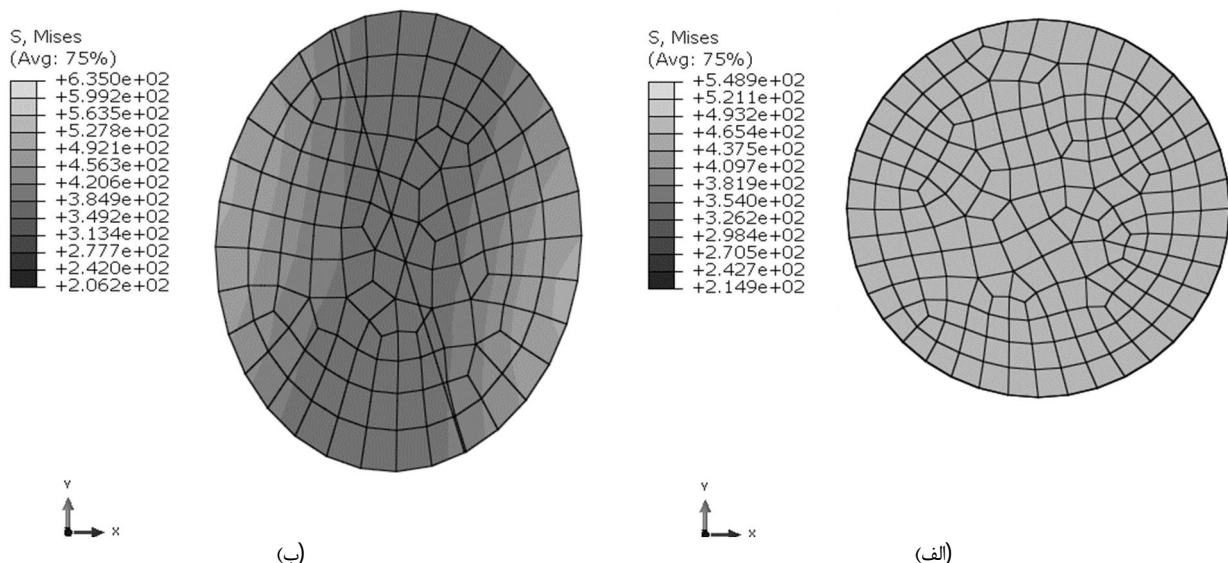
به منظور مطالعه تاثیر جهات کریستالی بر روی پاسخ تنش-کرنش ماده، پنج گروه جهات کریستالی برای مدل با تعداد 10 دانه در نظر گرفته شد که در هر تحلیل یک گروه از این جهات مورد استفاده قرار گرفت.

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

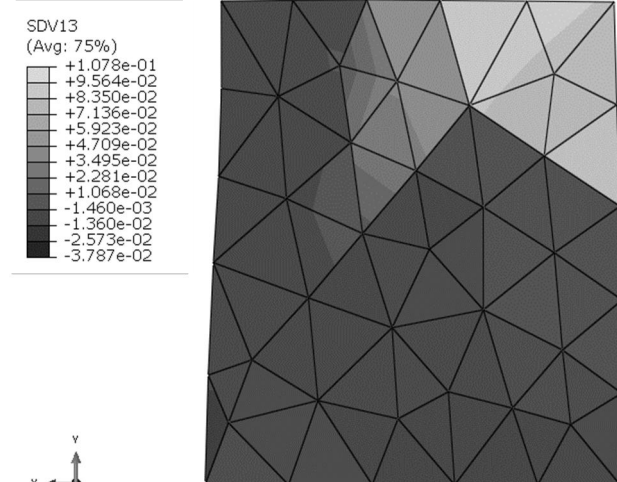


شکل 7 نمای تغییر شکل یافته مدل؛ (الف) مدل کلاسیک، (ب) مدل المان محدود کریستال پلاستیسیته

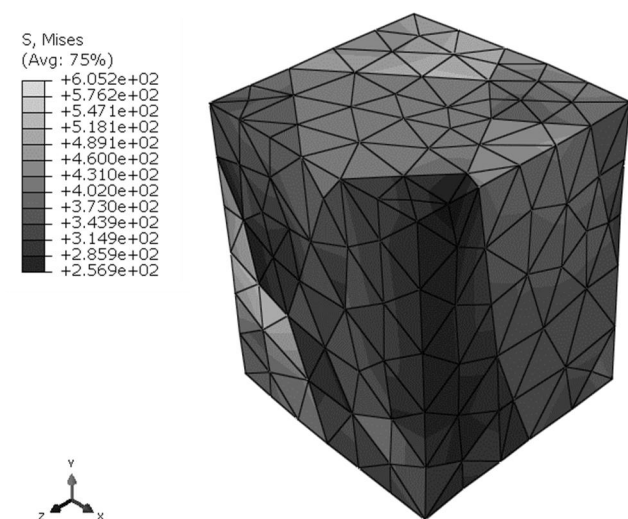


شکل 8 سطح مقطع ناحیه موضعی شدن تغییر شکل، (الف): مدل سازی معمولی، (ب): مدل سازی تک کریستال با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته (CPFEM)

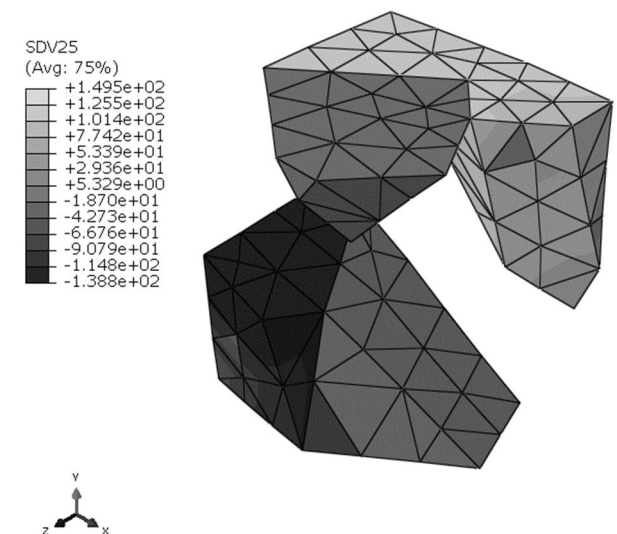
تنش-کرنش ماده نیز پراکندگی بوجود می‌آید (شکل 15). در این شکل نمودارهای تنش-کرنش مربوط به تحلیل‌ها با گروه‌های جهات کریستالوگرافی مجزا به همراه نمودار تنش-کرنش تجربی آورده شده است. با توجه به این



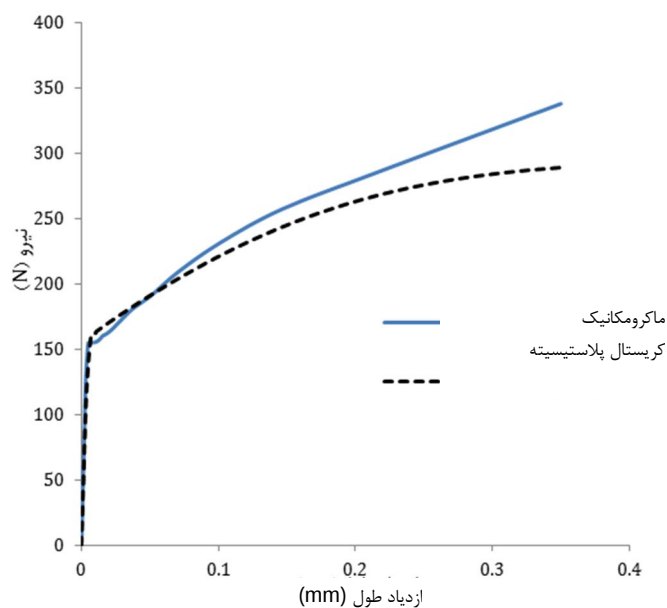
شکل 12 تغییر شکل ناهمگن



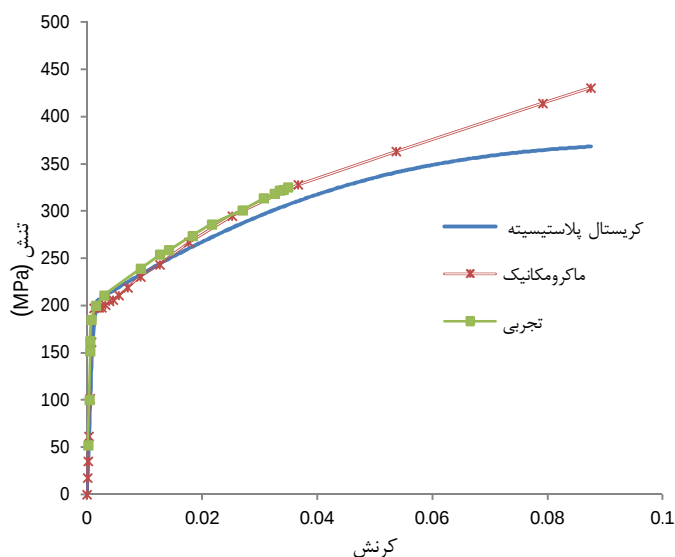
شکل 13 توزیع غیریکنواخت تنش فون میزز



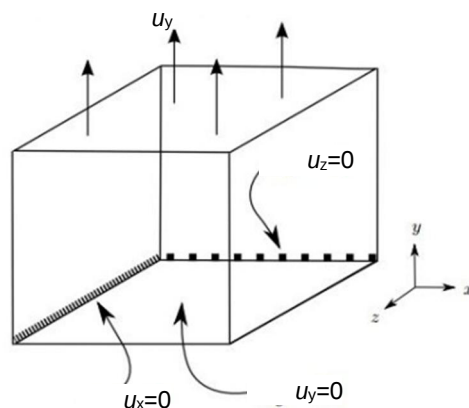
شکل 14 توزیع تنش برشی مولفه شده τ_{RSS} در میکروساختار



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

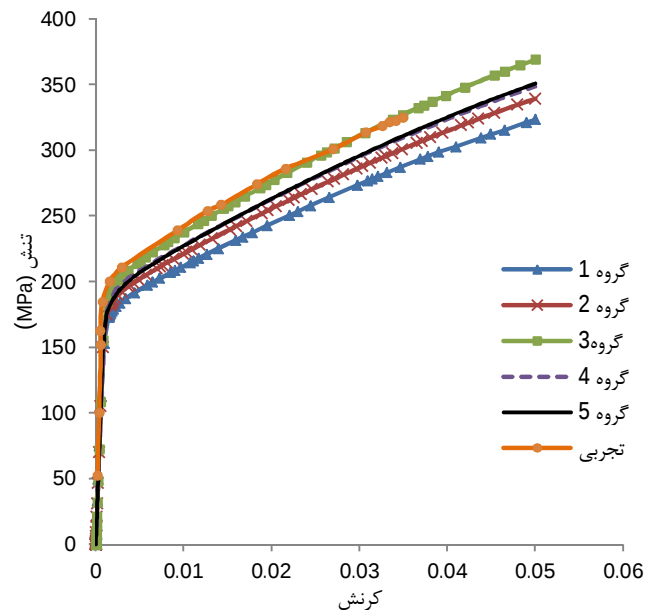
جهت می باشد. در مقیاس ماکرو وابستگی به جهت در رفتار تنش-کرنش ماده به ناهمسان گردی تعبیر می شود. پس نتیجه گرفته می شود که هر دانه، تغییر شکل کاملاً ناهمسان گرد دارد. این ناهمسان گردی به همراه کنش بین دانه های مختلف در بافت فلز منشا رفتار غیریکنواخت فلز در تغییر شکل در مقیاس مزو می باشد.

7- تقدیر و تشکر

در پایان مولفین وظیفه خود می دانند تا از دکتر رومین کوئی² عضو بخش تحقیقات مواد موسسه ایکول فرانسه که از راهنمایی ها و مشورت های ایشان در طول انجام این تحقیق جهت ایجاد مدل هندسی میکروساختار و جهات کریستالی بهره مند شده اند، 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. Latice 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 پیاداست که به ازای هر گروه از جهات کریستالی ماده پاسخ تنش-کرنش متفاوتی از خود نشان می دهد. در واقع تاثیر پارامتر میکروساختاری جهات کریستالوگرافی بر روی رفتار در مقیاس ماکرو کاملاً مشهود است. همان طور که از شکل پیاداست در قسمت الاستیک پاسخ هر پنج مدل یکسان است. این مسئله از آنجا که فرض می شود تنش الاستیک تنها از قسمت الاستیک گرادیان تغییر شکل تاثیر می پذیرد، قابل پیش بینی بود [2].

6- نتیجه گیری

در این مقاله رفتار تغییر شکل فولاد ضد زنگ L316 در مقیاس میکرو و مزو مدل سازی شد. ابتدا اعتبارسنجی مدل مورد استفاده از طریق برنامه نویسی و رابط تحلیلی در متلب انجام شد. سپس با ارائه دو نوع مدل سازی به روش کریستال پلاستیسیته و روش اجزاء محدود ماکرومکانیک که از روابط پلاستیسیته کلاسیک سود می برد، اثبات شد که روش اجزاء محدود ماکرومکانیک ابزار توانمندی در مدل سازی رفتار ماده در مقیاس های مزو و میکرو نمی باشد. 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 می باشد. این توانایی ها در بسیاری از تحلیل های میکرومکانیک حائز اهمیت فراوان می باشند. در ادامه یک مدل دانه بندی 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 می شود. نتایج این بخش حاکی از اهمیت تاثیر بافت و وضعیت کریستالوگرافی دانه ها بر روی پاسخ ماده در حالت ماکرو می باشد. به نحوی که می توان با انجام طراحی حساس به میکروساختار بهترین کارایی را از ماده در مقیاس ماکرو بدست آورد. همچنین با مطالعه نمودارهای تراز¹ تغییر شکل حاصل از شبیه سازی 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- Etienne, France, pp. 2008.
- [22] B. L. Adams, S. R. Kalidindi, D. T. Fullwood, *Microstructure Sensitive*