iMat
Conference 2014

3rd International Engineering Materials & Metallurgy Conference

هشتمین همایش مشترک و سومین کنفرانس بین المللی

مواد مهندسی و متالورژی

(انجمن مهندسین متالورژی ایران و انجمن علمی ریخته‌گری ایران)

۲۷ و ۲۸ آبان ۱۳۹۳ 18 - 19 Nov., 2014

مرکز همایش‌های بین‌المللی شهید بهشتی، تهران Shahid Beheshti Conference Center, Tehran, Iran

گواهی حضور در کنفرانس

شماره گواهی: ۹۳۰۸۱۸٤

بدینوسیله گواهی می گردد جناب آقای / سرکار خانم بهرام بندشه طی روزهای ۲۷ و ۲۸ آبان ماه ۱۳۹۳ در مرکز همایش های شهید بهشتی، تهران، به مدت ۱۸ ساعت در هشتمین همایش مشترک و سومین کنفرانس بین المللی مواد مهندسی و متالورژی حضور داشته و از مباحث آموزشی این کنفرانس استفاده نموده اند.

دکتر فرشید مالک

دبیر کنفرانس

www.imatconf.com

8th Congress & 3rd International
Engineering Materials & Metallurgy
Conference
Iranian Metallurgical Engineering Society & Iranian Foundrymen's Soci-
18-19 Nov., 2014 - Shahid Beheshti Conference Center, Tehran, Iran

iMat
Conference 2014

هشتمین همایش مشترک و
سومین کنفرانس بین المللی
مواد مهندسی و متالورژی
(انجمن مهندسین متالورژی ایران و انجمن علمی ریخته‌گری ایران)
۲۷ و ۲۸ آبان ۱۳۹۳ – مرکز همایش‌های بین المللی شهید بهشتی، تهران

Micro scale modeling of deformation behavior of austenite stainless steel using crystal plasticity finite element modeling

Bahram Bandeshah[1]

Abdolrahman Jaamialahmadi[2]**, Bahram Bandeshah**

Ferdowsi University Of Mashhad

jaami-a@um.ac.ir

Abstract

Anisotropic nature of grain in polycrystalline causes these materials to show completely different behavior at meso (0.01mm) and micro scale than they do at macro scale. This means that 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 CFFE result. Finally three dimensional simulation of tensile test on Stainless Steel type 316L is carried out using CPFE method and continuum macro mechanic FE. Deformation and localization behavior of single grain specimen at 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.

Keywords: crystal plasticity FE modeling, UMAT, micro-mechanics modeling, stainless steel 316L.

---

[1] M.Sc student in mechanical engineering, microstructural level deformation modeling

[2] Associate professor, analytical and numerical modeling of forming process, micro forming, forming limit diagrams(FLD), Manufacturing and production.

8th Congress & 3rd International
Engineering Materials & Metallurgy
Conference
Iranian Metallurgical Engineering Society & Iranian Foundrymen's Soci-
18-19 Nov., 2014 - Shahid Beheshti Conference Center, Tehran, Iran

iMat
Conference 2014

هشتمین همایش مشترک و
سومین کنفرانس بین المللی
مواد مهندسی و متالورژی
(انجمن مهندسین متالورژی ایران و انجمن علمی ریخته‌گری ایران)
۲۷ و ۲۸ آبان ۱۳۹۳ – مرکز همایش‌های بین المللی شهید بهشتی، تهران

مطالعه رفتار تغییر شکل فولاد ضدزنگ آستنیتی در مقیاس میکرو با استفاده از روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته

بهرام بندشه[۱]
عبدالرحمان جامی الاحمدی[۲]*، بهرام بندشه
دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه فردوسی مشهد

jaami-a@um.ac.ir

چکیده

مواد کریستالی درمقیاس میکرو و مزو (۰.۰۱میلیمتر) رفتار کاملا متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند ، نشان می‌دهند. ماهیت ناهمسانگرد دانه‌های موجود در بافت فلزات باعث به وجود آمدن ناسازگاری بین دانه‌ها در هنگام تغییرشکل می‌شود. این یعنی تغییرشکل در مقیاس میکرو به صورت ناهمگن می‌باشد و با قوانین بنیادی تئوری پلاستیسیته مواد پیوسته نمی‌توان آن را مورد بررسی قرار داد. در این مقاله جهت بررسی رفتار تغییرشکل فولاد ضدزنگ آستنیتی 316L در مقیاس میکرو یک رویه بر مبنای روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته انتخاب شده است. ابتدا فرمول‌بندی مدل ماده براساس روابط بنیادی ماده در کریستال پلاستیسیته در قالب زیربرنامه UMAT به نرم افزار آباکوس معرفی شده است. برای اعتبارسنجی، نتایج حل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته حاصل از آباکوس با نتایج حاصل از حل تحلیلی روابط موجود در کریستال پلاستیسیته و برنامه نوشته شده در نرم افزار متلب، مقایسه شده است. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق خوب نتایج عددی و تحلیلی می‌باشد. در پایان شبیه‌سازی آزمون کشش روی نمونه فولاد ضدزنگ حاوی یک دانه انجام شده است و با برخی نتایج تجربی مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج نشان داد رفتار تغییرشکل و موضعی شدن آن با روش پیشنهاد شده قابل پیش بینی بوده در حالیکه روش اجزاء محدود ماکرومکانیک ناتوان از شناسایی این رفتارها در مقیاس میکرو و مزو می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته، زیربرنامه UMAT، میکرومکانیک، فولاد ضدزنگ 316L

---

[۱] - دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی‌مکانیک،گرایش ساخت و تولید، دانشگاه فردوسی مشهد

[۲] - استادیار گروه مهندسی مکانیک ، مدل‌سازی تحلیلی و عددی فرآیندهای شکل‌دهی، میکروفرمینگ، نمودارهای حد شکلی‌دهی، ساخت و تولید

مقدمه

گستره وسیعی از فلزات مورد استفاده در کاربردهای مهندسی به صورت پلی‌کریستال می‌باشند. ناهمسانگردی الاستیک و پلاستیک دانه‌ها در مواد پلی کریستال باعث به وجود آمدن یک ناسازگاری بین دانه‌ها می‌شود. وجود این واقعیت در فرایند تغییر شکل فلزات دلالت براین دارد که تغییر شکل در مقیاس میکروساختار ناهمگن می‌باشد. مواد پلی‌کریستال در مقیاس میکرو (10^{-10} M-10^{-7}M) و مزو(10^{-5}M) رفتار بسیار متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند از خود نشان می‌دهند (Gonzalez, 2012). در نتیجه تنش‌های محلی، کرنش‌ها، و دوران‌های درون هر دانه به‌صورت غیریکنواخت و ناپیوسته خواهد بود. تنش‌ها، کرنش و دوران‌ها نه تنها به جهت دانه‌ها بستگی خواهند داشت بلکه از قیدها و محدودیت‌هایی که دانه‌های مجاور ایجاد می‌کنند، نیز تاثیر خواهند پذیرفت.

رهیافت‌های مرتبط با تعیین خواص ماکروسکوپیک مواد همانند مقاومت به تسلیم، خستگی و شکست سال‌هاست که شناخته شده می‌باشند. در این میان به دلیل مشکل بودن اندازه‌گیری تنش‌ها در درون دانه‌ها زمینه مدلسازی رفتار مواد در مقیاس‌های مختلف توجه محققان را به خود معطوف داشته است(Metallforschung, 2002). با مدلسازی قوانین فیزیکی حاکم در مقیاس مزو[1] 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 درمقیاس‌های متفاوت دارد و اینکه چگونه مقیاس‌های متفاوت به یکدیگر مرتبط هستند، با عنوان مدلسازی چند مقیاسی مواد[2] شناخته می‌شود. مثلا واماندگی در مقیاس ماکرو اغلب دلالت براین دارد که نواحی مشخصی از ماده در مقیاس میکرو دچار واماندگی شده‌اند یا ثابت شده که مشخصات مرزدانه‌ها در توضیح و کنترل پلاستیسیته مواد در دمای بالا، ابرپلاستیسیتی مواد[3] و شکنندگی[4] نقش بسزایی دارند(WATANABE, 1993). اساسا درک بهتر از اینکه چه ریزساختاری آسیپ پذیرتر می‌باشد، ما را قادر خواهد ساخت تا موادی بهتر از لحاظ کارایی و بهره‌وری در مقیاس ماکرو طراحی نماییم که مثال‌هایی از آن می‌توانند شامل تولید میکروساختار با رفتار الاستیک-پلاستک مطلوب در مقیاس ماکرو و یا تولید دوقلویی‌مقاوم به خوردگی باشد(Asaro & Lubarda, 2006).

از مطالعات انجام شده در این زمینه می‌توان به مقاله (M. Marvi-Mashhadi, 2012) اشاره کرد. آن‌ها در مقاله خود با استفاده از تصویر برداری SEM [5]، میکروساختار دوبعدی فولاد دوفازی فریت-مارتنزیت را تولید کردند و با تعریف مدل ماده وس[6] در نرم‌افزار اباکوس و وارد کردن مدل هندسی میکروساختار به دست آمده از تصویر برداری SEM به نرم‌افزار اباکوس، منحنی تنش کرنش و الگوی شکست فولاد دوفازی را شبیه‌سازی کردند. (Han & P, 2005) آلیاژی مجازی از آهن و مس را با هدف تعیین تنش بین گره‌ها در فازهای مختلف شبیه سازی کردند. (Paul, 2013) مطالعه‌ای میکرومکانیکی بر روی میکروساختار فولاد دوفازی

---

[1] Meso
[2] Multi-scale material modeling
[3] Superplasticity
[4] fragility
[5] Scanning electron microscope
[6] Voce

DP590 با هدف مشاهده رفتار تغییرشکل، موضعی شدن کرنش پلاستیک و ناپایداری پلاستیک انجام داد. در تحقیق یاد شده موضعی شدن کرنش به خاطر تغییرشکل‌های ناسازگار بین فاز سخت مارتنزیت 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. (Gonzalez, 2012) در رساله دکتری خود تغییرشکل پلی‌کریستال‌ها و تنش‌های پسماند در آن‌ها را در مقیاس میکروساختار مورد بررسی قرار داد. وی در قسمتی از رساله خود حساسیت فولاد ضدزنگ 316L را نسبت به مسیر کرنش در مقیاس میکروساختار مورد بررسی قرار داد.

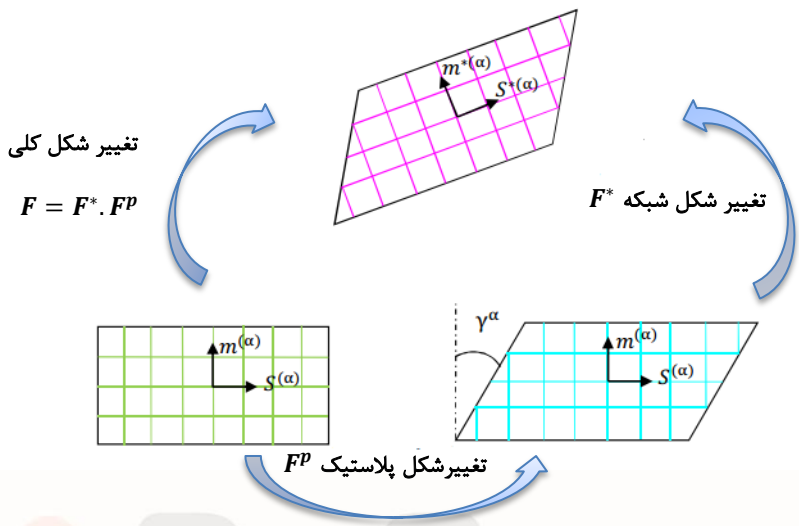
فولادهای ضدزنگ باتوجه به خواص خوبی که دارند داری کاربردهای زیادی در صنعت می‌باشند. در صنعت چهار گروه فولاد ضدزنگ موجود می‌باشد که عبارت‌اند از فولادهای ضدزنگ آستنیتی، فولادهای ضدزنگ فریتی، فولادهای ضدزنگ مارتنزیتی و فولادهای ضدزنگ دوفازی که متشکل از دوفاز آستنیت و فریت می‌باشند. توجه به کاربردهای فراوان فولادهای ضد زنگ آستنیتی در میان چهار گروه فولاد ضدزنگ یاد شده، فولاد ضدزنگ آستنیتی گرید 316L برای شبیه سازی در این تحقیق در نظرگرفته شد. از کاربردهای این نوع فولاد می‌توان به استفاده آن‌ها در تولید میکرولوله‌ها، تجهیزات پزشکی مانند استنت‌های[1] کرونری ، سرنگ‌های انسلین، سوزن‌های آنژیو گرافی اشاره کرد. باتوجه به اینکه ابعاد این محصولات و بخصوص استنت ها که برای بازکردن گرفتگی عروق کرونری مورد استفاده قرار می‌گیرند در مقیاس دهم میلیمتر (0.1mm) می‌باشند باید مطالعه رفتار مواد آن‌ها در مقیاس میکرو صورت گیرد تا بتوان پدیده‌های میکرومکانیکی را هم در نظر گرفت.(McGarry, O'Donnell, McHugh, & McGarry, 2004).

در این مقاله جهت بررسی رفتار تغییرشکل فولاد ضدزنگ آستنیتی 316L در مقیاس میکرو یک رویه بر مبنای پلاستیسیته کریستال‌ها انتخاب شده است، که در بخش مبانی نظری پژوهش روابط موجود در کریستال پلاستیسیته اجمالا از نظر گذرانده خواهند شد. در بخش بعد برای انجام سنجش قابلیت استناد نتایج، روابط تحلیلی موجود در کریستال پلاستیسیته در نرم‌افزار متلب به کار گرفته می‌شود و مسئله تغییر شکل یک تک‌کریستال با استفاده از آن حل می‌شود. در ادامه نتایج حاصل از شبیه سازی اجزاء محدود با نتایج حاصل از حل تحلیلی مورد مقایسه قرار گرفت. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق نتایج حل تحلیلی و نتایج حاصل از به‌کارگیری روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسته در نرم‌افزار اباکوس بود. در گام بعدی و در بخش پایانی مقاله به شبیه‌سازی آزمون کشش روی یک مدل با یک دانه پرداخته شده است.

- **سینماتیک پایه تغییر شکل در کریستال‌ها**

در جامد کریستالی فرض می‌شودکه نمو تغییرشکل در دو مرحله اتفاق می‌افتد. در مرحله اول ماده از حالت مرجع توسط برش ساده روی یک سیستم لغزشی دچار تغییر شکل پلاستیک می‌شود. در مرحله دوم اتساع و چرخش شبکه اتفاق می‌افتد. که این موضوع در شکل ۲ نمایش داده شده است. بنابراین گرادیان تغییرشکل را می‌توان به دو بخش به صورت زیر تجزیه نمود(Asaro & Lubarda, 2006)

[1] Stent



شکل ۱- گرادیان تغیرشکل F و تجزیه آن با استفاده از رابطه $F = F^*.F^p$

$$F = F^*.F^p \qquad (۱)$$

که در آن F^p، گرادیان تغییر شکل حاصل از لغزش پلاستیک بر روی سیستم‌های لغزش و F^*، حاصل اتساع و چرخش شبکه کریستالی است.با معرفی گرادیان تغییر شکل می‌توان جهت و بردار عمود بر سطح سیستم لغزشی را بعد از تغییرشکل به دست آورد.

$$S^{*(\alpha)} = F^*.S^{(\alpha)} \qquad (۲)$$

$$m^{*(\alpha)} = m^{(\alpha)}.F^{*-1} \qquad (۳)$$

که در آن $m^{(\alpha)}$ و $S^{(\alpha)}$ به ترتیب بردار نرمال بر صفحه لغزش و بردار جهت لغزش قبل از تغییر شکل می‌باشند. با دیفرانسیل گیری از رابطه ۲ گرادیان سرعت برابر خواهد بود با:

$$L = \dot{F}.F^{-1} = \dot{F}^*.F^{*-1} + F^*.\dot{F}^p.(F^p)^{-1}.(F^*)^{-1} \qquad (٤)$$

که گرادیان سرعت را می‌توان به دو مولفه زیر تجزیه نمود

$$L = D + \Omega \qquad (٥)$$

که در آن Ω و D به ترتیب نرخ تانسور چرخش پادمتقارن و نرخ تانسور اتساع متقارن می‌باشند. با توجه به آنچه در شکل ۲ بیان شده است این دو پارامتر را می‌توان به دو قسمت تغییر شکل پلاستیک و تغییر شکل شبکه تجزیه نمود.

$$D = D^* + D^p\,, \qquad \Omega = \Omega^* + \Omega^p \qquad (٦)$$

در این صورت گرادیان سرعت مربوط به لغزش پلاستیک برابر است با:

$$D^* + \Omega^* = \dot{F}^*.F^{*-1}\,, \qquad D^p + \Omega^p = F^*.\dot{F}^p.(F^p)^{-1}.(F^*)^{-1} \tag{۷}$$

برش روی سیستم‌های لغزش سبب تغییر شکل پلاستیک می‌شود، از این‌رو با تعیین $\dot{\gamma}^{\alpha}$ که به معنای نرخ برش روی سیستم α می‌باشد داریم:

$$D^p + \Omega^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha}\, S^{*(\alpha)}\, m^{*(\alpha)} \tag{۸}$$

که در آن اندیس α بیانگر سیستم‌های لغزشی فعال و $\dot{\gamma}^{\alpha}$ نرخ کرنش سیستم α می‌باشد که نسبت به شبکه اندازه‌گیری می‌شود.

معادلات ساختاری کریستال پلاستیسیته

تئوری کریستال پلاستیسیته برای نمایش جریان نابجایی‌ها در راستای سیستم‌های لغزشی در فلزات کریستالی برحسب تنش برشی مولفه شده[1] استفاده می‌شود. در این تئوری فرض بر این است که تغییر شکل پلاستیک متشکل از مجموعه‌ای از لغزش‌های کریستالی درکل سیستم‌های لغزشی فعال می‌باشد.(Asaro & Lubarda, 2006). ((Erich, 1924)) دریافت که لغزش پلاستیک زمانی اتفاق می‌افتد که تنش برشی مولفه شده روی صفحه کریستالوگرافی 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 می‌کند، مرتبط می‌شود. گزیده‌ای از روابط بنیادی ویسکوپلاستیک کریستال که در این مقاله استفاده شده در زیر آمده است.

$$\tau^{\alpha} = \sigma_{ij}\mu^{\alpha}{}_{ij} \tag{۹}$$

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{a}sgn(\tau^{\alpha})(|\tau^{\alpha}/g^{\alpha}|)^{n} \tag{۱۰}$$

$$\dot{g}^{\alpha} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{\beta} \qquad \beta = 1, 2, \dots 12 \quad (\text{کریستال } FCC) \tag{۱۱}$$

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}^{p}{}_{kl}) = C_{ijkl}\left(\dot{\varepsilon}_{kl} - \sum_{\alpha}\frac{1}{2}\dot{\gamma}^{\alpha}(S^{\alpha}{}_{k}M^{\alpha}{}_{l} + S^{\alpha}{}_{l}M^{\alpha}{}_{k})\right) \tag{۱۲}$$

تعداد سیستم‌های لغزش به نوع شبکه کریستالی بستگی دارد، برای مثال شبکه کریستالی FCC داری چهار صفحه لغزش مستقل می‌باشد که در هر صفحه سه جهت لغزش مستقل از هم وجود دارد. در این صورت این نوع ساختار کریستالی داری ۱۲سیستم لغزشی می‌باشد. در ابتدای تغییرشکل در همه‌ی سیستم‌های لغزشی، $\tau^{\alpha} = 0$ می‌باشد و جهت لغزش $S^{(\alpha)}$ و نرمال بر صفحه لغزش $m^{(\alpha)}$ برای همه‌ی المان‌های درون یک دانه خاص یکسان است. هنگامی که تغییر شکل پلاستیک رخ می‌دهد مقادیر بردار نرمال و جهت لغزش در صورت استفاده از فرمول‌بندی کرنش محدود، حتی در درون یک دانه نیز ممکن است دارای مقادیر مختلف برای هر کدام از ۱۲سیستم لغزش باشند. C_{ijkl} تانسور مرتبه چهار سفتی می‌باشد و اندیس‌های $ijkl$ مقادیر بین ۱تا ۳ را به خود می‌گیرند. در حالت اولیه (t=0) $\dot{\sigma}_{ij} = 0$، $\gamma^{\alpha} = 0$، $g^{\alpha} = g_0$، $\varepsilon_{kl} = 0$ می‌باشند.

---

[1] Resolved shear stress

کرنش سختی مواد ماده مورد مطالعه با استفاده از مقاومت سیستم لغزشی نسبت به لغزش، g^{α} ، تعریف می‌شود. در شبکه کریستالی دو نوع سخت شوندگی تعریف می‌شود، اول خودسخت شوندگی[1] $h_{\alpha\alpha}$ و دوم سخت شوندگی نهان[2] $h_{\alpha\beta}$ (**Peirce D., 1982**) که به‌صورت مستقیم به کرنش برشی γ مرتبط می‌شود.

$$\begin{cases} h_{\alpha\beta} = h(\gamma) = h_0 sech^2|h_0\gamma/(\tau_s - \tau_0)| & \alpha = \beta \\ qh(\gamma) & \alpha \neq \beta \end{cases} \quad (۱۳)$$

$$\gamma = \sum_{\alpha=1}^{12} |\gamma^{\alpha}| \quad (۱۴)$$

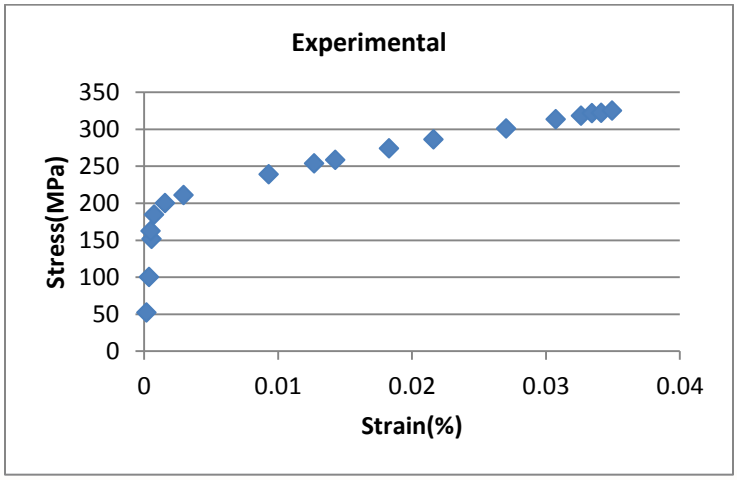
در این روابط h_0 مدول سخت شوندگی اولیه، τ_0 استحکام برشی اولیه، τ_s تنش جاری شدن و q فاکتور سخت‌شوندگی می‌باشد. در مدل سخت شوندگی ایزوتروپیک تیلور مدول سخت شوندگی نهان و خودسخت شوندگی، یکسان در نظر گرفته می‌شوند. بنابراین مقدار q برای مدول سخت‌شوندگی ایزوترپیک برابر یک در نظر گرفته می‌شود. مقادیر پارامترهای ماده مورد استفاده از طریق انطباق پاسخ کریستال به نمودار تنش-کرنش تجربی بدست آمده‌اند و در جدول ۱ قید شده‌اند. برای جلوگیری از اثر ویسکوپلاستیک باید مقدار نسبتا بالایی برای **n** در نظر گرفته شود که در اینجا مقدار ۵۵ در نظر گرفته شده است(**Gonzalez, 2012**).

جدول ۱-مقادیر ثوابت کریستال پلاستیسیته برای فولاد ضدزنگ 316L

C_{11} (GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)	n	$\dot{a}$	h_0(MPa)	τ_s(MPa)	τ_0(MPa)
204.6	**137.7**	**126.2**	**55**	**0.001**	**675**	**175**	90

نمودار تنش-کرنش تجربی فولاد یاد شده در شکل زیر آورده شده است.

[1] Self-hardening
[2] Latent hardening

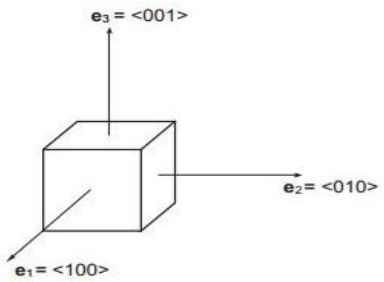


شکل ۲- نمودار تنش=کرنش فولاد ضدزنگ 316L

- **تحلیل تغییر شکل تک‌کریستال فولاد ضدزنگ316L**
- **حل تحلیلی تغییرشکل تک‌کریستال در متلب**

خلاصه روابط بیان شده در بخش سینماتیک تغییرشکل در قالب کدی در نرم‌افزار متلب به کار گرفته شد. در این کد می‌توان برای دوساختار 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 براین، چرخش دستگاه مختصات چسبیده به کریستال نسبت به دستگاه مختصات مرجع هم می‌باید در محاسبه تنش برشی مولفه شده توسط کد در نظر گرفته می‌شود. جدول شماره ۲ نتایج حاصل از بارگذاری یک تک‌کریستال FCC را تحت بار 200Mpa در راستای جهت <100> را نشان می‌دهد. فرض شده است که جهت‌گیری کریستال به نحوی است که مختصات محلی که منطبق بر کریستال می‌باشد، و مختصات مرجع بر یکدیگر منطبق می‌باشند. در این حالت تانسور تنش به شکل زیر خواهد بود:

$$\begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (۱۵)$$



شکل ۳ –نمونه کریستال FCC برای حل تحلیلی، دستگاه مختصات کریستال و دستگاه مختصات مرجع منطبق بریکدیگر فرض شده‌اند.

با وارد کردن اطلاعات داده 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. در جدول ۲ این اطلاعات مستخرج از کد متلب آورده شده است.

جدول ۲- مقادیر تانسور اشمید و تنش برشی مولفه شده برای ۱۲ سیستم لغزشی حاصل از حل با متلب

α	Slip system	P^{α}	τ_{RSS}	α	Slip system	P^{α}	τ_{RSS}
1	$(111)[0\bar{1}1]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 1 \\ -1/2 & -1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	0	7	$(1\bar{1}1)[01\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & -1 \end{pmatrix}$	**0**
2	$(111)[10\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1 \end{pmatrix}$	81.64	8	$(1\bar{1}1)[110]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	**81.64**
3	$(111)[\bar{1}10]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$	-81.64	9	$(1\bar{1}1)[10\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$	**81.64**
4	$(\bar{1}11)[101]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -1 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}$	-81.64	10	$(11\bar{1})[011]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & -1 \end{pmatrix}$	**0**
5	$(\bar{1}11)[110]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	-81.64	11	$(11\bar{1})[101]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & -1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix}$	**81.64**
6	$(\bar{1}11)[0\bar{1}1]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$	0	12	$(11\bar{1})[\bar{1}10]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	**-81.64**

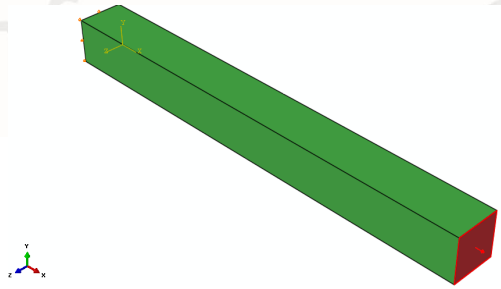
ملاحضه می‌شود بر روی سیستم‌هایی، برای مثال سیستم لغزشی شماره یک، تنش برشی مولفه شده برابر صفر می‌باشد. با یادآوری ضریب اشمید و بدست آوردن زاویه بین جهت اعمال بار و جهت لغزش و نرمال صفحه لغزش در سیستم لغزشی شماره ۱ درستی این تحلیل اثبات می‌شود، داریم :

$$\cos\varphi = \frac{(1)(0)+0+0}{\sqrt{1^2+0+0}\sqrt{0+1^2+1^2}} = 0 \Rightarrow \varphi = 90 \qquad (۱۶)$$

مشاهده می‌شود که جهت اعمال بار و جهت لغزش بر یکدیگر عمود می‌باشند. بنابراین در این جهت مقدار تنش برشی صفر می‌باشد و تغییر شکلی در این جهت اتفاق نمی‌افتد.

- **شبیه سازی المان محدود کریستال پلاستیسیته(CPFEM) تغییرشکل تک‌کریستال**

از آنجا که مدل ماده‌ی کریستال پلاستیسیته در نرم افزار اباکوس تعریف نشده این مدل ماده در قالب زیربرنامه UMAT[1] که از قابلیت‌های نرم افزار آباکوس برای تعریف مدل مواد جدید می‌باشد، بکار گرفته شد. این کد امکان تحلیل تنش کریستال‌ها را در آباکوس فراهم می‌کند. در این کد استحکام فعلی[2]، کرنش‌های برشی، بردار عمود بر صفحات لغزش، جهات لغزش و کرنش برشی کل به عنوان متغیرهای حالت وابسته به حل در نظر گرفته شده‌اند(Huang, 1991). نتایج حاصل از شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته روی یک مدل تک‌کریستال در این بخش ارائه می‌شود. برای انجام این مدلسازی یک المان مکعبی به ابعاد ۱۰*۱۰*۱۰۰ به عنوان تک‌کریستال فولاد ضدزنگ 316L در نظر گرفته شده است. ساختار این تک کریستال FCC و با ثوابت الاستیک و پارامترهای سخت شوندگی داده شده در جدول ۱ و دارای سیستم لغزشی {۱۱۰}<۱۱۱> است. در شکل ۴ مسئله تک‌کریستال مدل شده در نرم‌افزار آباکوس ملاحظه می‌شود. المان انتخاب شده برای مش‌بندی کریستال دارای ۲۰ گره و ۸ نقطه انتگرالگیری می‌باشد. نوع المان انتخاب شده از گروه المان های C3D20R مربوط به خانواده المان‌های تنش سه بعدی[3] است.



شکل ۴- مسئله تک‌کریستال حل شده به روش CPFEM در نرم افزار آباکوس

به منظور اعتبارسنجی روش استفاده شده در این مقاله، مقایسه تنش برشی حاصل از حل المان محدود کریستال پلاستیسیته یا

---

[1] User defined material subroutine
[2] Current strength
[3] 3D-Stress

CPFEM و حل تحلیلی در جدول ۲ انجام شده است. این گروه از نتایج به دلیل اهمیتی که در تعیین قابلیت تحمل کریستال تحت یک بارگذاری معین دارند جز اصلی ترین نتایج به شمار می‌روند، بدین معنا که مقدار آن در هریک از سیستم‌های لغزشی به حد بحرانی برسد، لغزش اتفاق افتاده و در نتیجه پلاستیک شدن از همان جهت آغاز می‌شود. نتایج تا چهار رقم اعشار مورد تحلیل قرار گرفته‌اند. ملاحضه می‌کنیم که بیشینه خطای مطلق برابر ۰.۰۱ می‌باشد و این حاکی از قابلیت استناد نتایج مستخرج در این مقاله دارد.

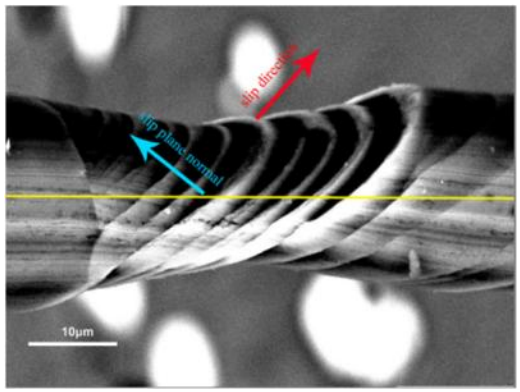
جدول ۳-مقایسه حل تئوری اجزاء محدود تنش برشی

α-سیستم	τ_{crss}-حل تحلیلی(Mpa)	τ_{crss}-حل اجزاء محدود(Mpa)	خطای مطلق
۱	۰.۰۰۰۰	۰.۰۰۰۹	۰.۰۰۰۹
۲	۸۱.۶۴۹۷	۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۳	-۸۱.۶۴۹۷	-۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۴	-۸۱.۶۴۹۷	-۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۵	-۸۱.۶۴۹۷	-۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۶	۰.۰۰۰۰	۰.۰۰۰۹	۰.۰۰۰۹
۷	۰.۰۰۰۰	۰.۰۰۰۹	۰.۰۰۰۹
۸	۸۱.۶۴۹۷	۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۹	۸۱.۶۴۹۷	۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۱۰	۰.۰۰۰۰	۰.۰۰۰۹	۰.۰۰۰۹
۱۱	۸۱.۶۴۹۷	۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳
۱۲	-۸۱.۶۴۹۷	-۸۱.۶۶	۰.۰۱۰۳

- **شبیه‌سازی سه‌بعدی آزمون کشش**

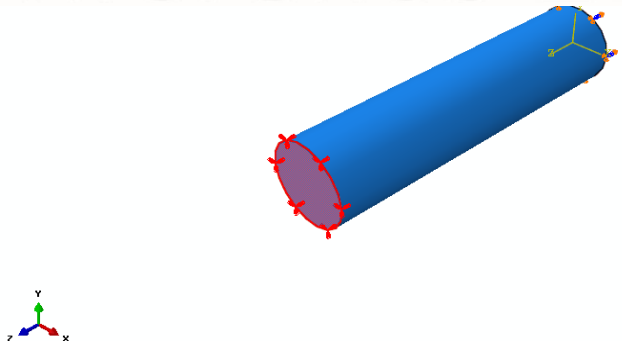
قابلیت استناد روش انتخاب شده در بخش قبل اثبات شد. در این بخش آزمون کشش تک محوره به عنوان یکی از پایه‌ای‌ترین آزمون‌ها جهت شناسایی خواص مواد، به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته بر روی یک تک‌کریستال شبیه‌سازی می‌شود. آزمون کشش به عنوان یک گام اولیه در ورود به میکرومکانیک مواد و همچنین مطالعه و شبیه‌سازی فرآیندهای میکرو همانند فرایندهای میکروفرمینگ[1] و میکرو ماشینکاری[2] انتخاب مناسبی جهت نمایش رفتار غیر یکنواخت و وابسته به جهت مواد می‌باشد. نتایج تجربی آزمون کشش برای یک نمونه تک‌کریستال در شکل ۵ نمایش داده شده است.

[1] Micro –formoing
[2] Micro-machining



شکل ۵- لغزش در آزمون کشش نمونه تک کریستال(Robertson & Beaudoin, 2008)

هدف از مدلسازی المان محدود کریستال پلاستیسیته، (CPFEM) در این قسمت، مطالعه رفتار تک‌کریستال فولاد ضد زنگ 316L در ناحیه گلویی شدن و مقایسه آن با الگوی تغییر شکل ارائه شده در شکل ۵ می‌باشد. و همچنین برای اثبات عدم توانایی روش المان محدود ماکرومکانیک که از پلاستیسیته کلاسیک سود می‌برد، در پیش‌بینی رفتار ماده در میکرومکانیک، نتایج مدل-سازی به روش اجزاء محدود ماکرومکانیک(مکانیک پیوسته) با نتایج حاصل از CPFEM مقایسه شده است. شکل مدل مورد استفاده به‌صورت استوانه با قطر و طول به ترتیب ۱ و ۴ میلیمتر می‌باشند. شرایط مرزی به گونه ای می‌باشند که مدل از یک انتها در تمام جهات ثابت شده است و از هر گونه چرخشی ممانعت به عمل آمده و در انتهای دیگر جابجایی در راستای محور Z اعمال شده است. مدل در مابقی جهات مقید شده است. جهت‌گیری اولیه کریستال در قالب اندیس‌های میلر به‌صورت $[0\ 2\ 1]$ $(\bar{4}\ 1\ \bar{2})$ می‌باشد که در بیان زوایای اولر[1] معادل $(37.1°,\ 115.5°,\ 283.3°)$ قرار می‌گیرد. مدول یانگ فولاد ضدزنگ 316L برابر $E = 200GPa$ و ضریب پواسون برابر با $\nu = 0.3$ می‌باشد. نمودار تنش-کرنش این فولاد نیز در شکل ۲ آورده شده است. که این خواص در مدلسازی به روش المان محدود ماکرومکانیک مورد نیاز خواهند بود.



شکل ۶- مدل استفاده شده برای شبیه سازی آزمون کشش

[1] Euler angles

- **نتایج شبیه‌سازی کلاسیک و CPFEM**

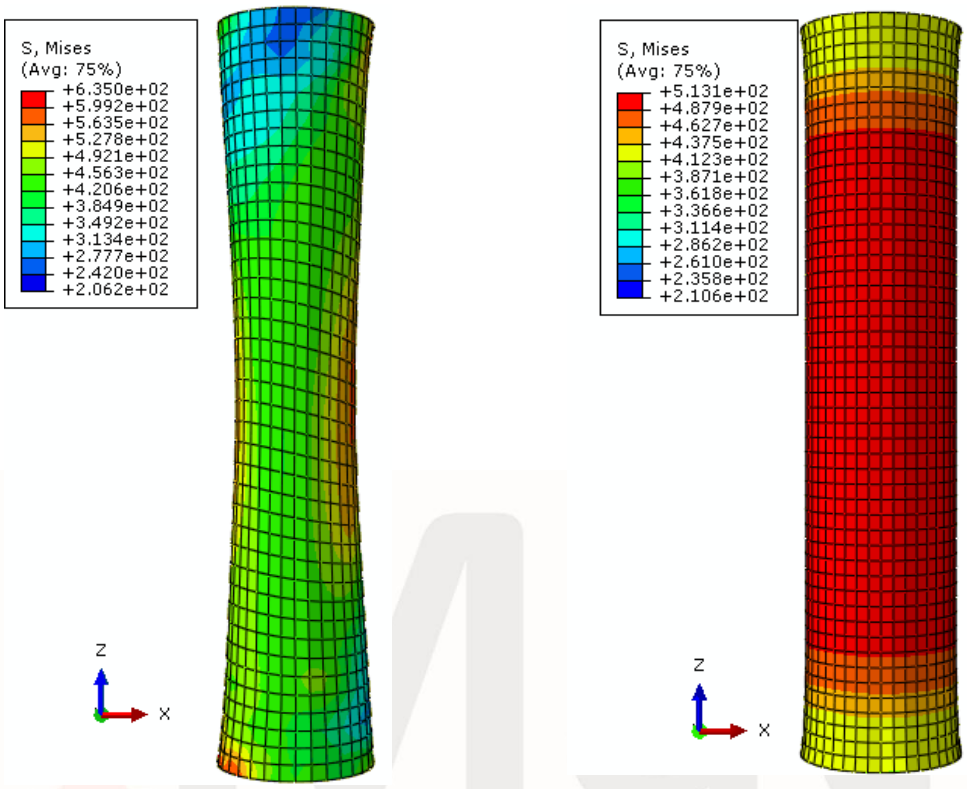
صفحات لغزش یک ساختار پله‌ای را در حین تغییرشکل ایجاد می‌کنند(شکل ۵). هر پله نمایانگر نوارهای لغزشی می‌باشد که در حالت ماکرو این نوارها و خطوط لغزش مفهومی آشنا دارند. در منطقه تغییرشکل که در شکل ۷- (ب) نمایش داده شده است، سطح تغییرشکل هموار است، اما لبه المان‌ها دارای جهتی مشابه با جهت خطوط لغزش می‌باشند. هرچه ارتفاع نوارهای لغزش کاهش پیدا کند، در ناحیه تغییرشکل سطح هموارتری ایجاد خواهد شد. هنگامی که صفحات کریستالی در حین آزمون کشش روی هم می‌لغزند، منجر به بوجود آمدن جابجایی نسبی بین نیمه‌ی بالایی 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 تغییرشکل جبران می‌گردد(شکل ۵ وشکل ۷). با توجه به شکل ۹- (الف) ملاحضه می‌شود که تئوری کلاسیک پلاستیسیته یا همان روش المان محدود ماکرومکانیک از شناسایی این پدیده در حین تغییرشکل، ناتوان می‌باشد. اما با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته و روش تحلیل CPFEM، توانسته‌ایم این مهم را در هنگام تغییرشکل فلزات کریستالی پیش‌بینی کنیم.

در توضیح بیشتر شکل ۹ باید عنوان شود که در شکل (الف) که مسئله با استفاده از تئوری کلاسیک پلاستیسیته حل شده است اثری از چرخش و تحول شبکه[1] و حالت پله‌ای شدن در اثر چرخش، که همان نقش بافت[2] در حین تغییر شکل را ایفا می‌کند، مشاهده نمی‌شود. اما در شکل ۹- (ب) این چرخش در شبکه و پله‌ای شدن را، که مطابق با الگوی تغییرشکل تک‌کریستال است (شکل ۵)، توانسته‌ایم با روابط کریستال پلاستیسیته، پیش‌بینی نماییم.

نکته قابل توجه دیگر در رفتار تغییرشکل تک‌کریستال این است که رفتار موضعی شدن تغییرشکل در تک‌کریستال هم از آنچه در حالت ماکرو اتفاق می‌افتد، متفاوت است. در حالتی که مدلسازی ماکرومکانیک 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 درشکل ۸ به نمایش گذاشته شده است. دلیل بیضوی شدن سطح مقطع در منطقه موضعی شدن تغییرشکل، چرخش شبکه و محدودیت تغییرشکل کریستال‌ها در امتداد صفحات لغزش می‌باشد.

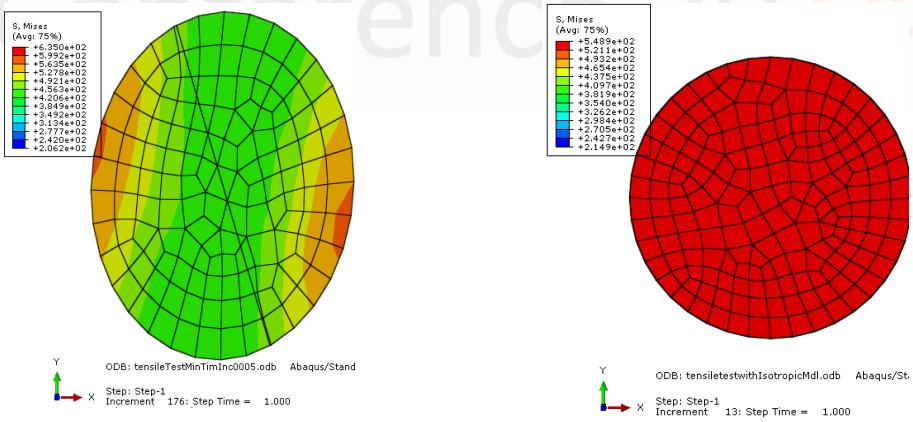
---

[1] Lattice evolution
[2] Texture



(ب) (الف)

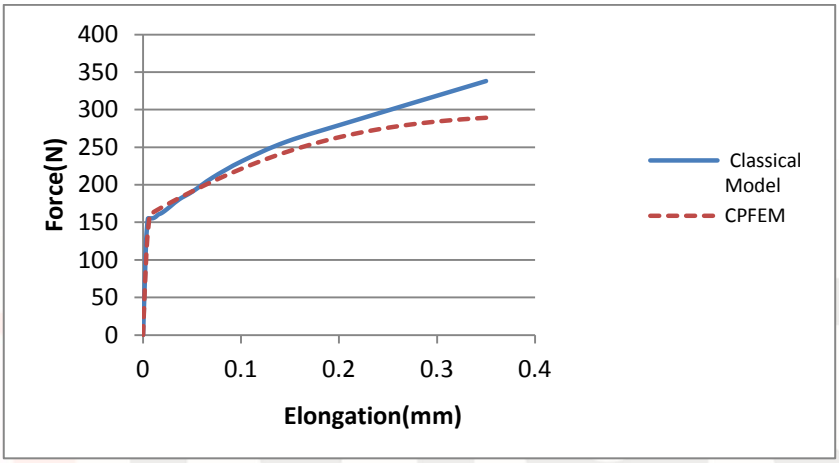
شکل ۷- نمای تغییرشکل یافته مدل؛ (الف) مدل کلاسیک، (ب) مدل المان محدود کریستال پلاستیسیته.



(ب) (الف)

شکل ۸- سطح مقطع ناحیه‌ای که موضعی شدن تغییرشکل در آن اتفاق می‌افتد، (الف): مدل‌سازی معمولی، (ب): مدل‌سازی تک‌کریستال با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته(CPFEM)

تفاوت مشهود دیگر در رفتار تغییرشکل تک‌کریستال و مدل کلاسیک در منحنی بار- ازدیاد طول[1] آنها می‌باشد. بار مورد نیار برای تغییرشکل در مدل کلاسیک (ماده همگن)، بیشتر از بار مورد نیاز یک تک‌کریستال می‌باشد. دلیل این مسئله را می‌توان در وجود مرزدانه‌ها 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 تغییرشکل نیاز می‌باشد. شکل ۹ نمایانگر منحنی بار-ازدیاد طول حاصل از تحلیل المان محدود آزمون کشش مدل تک‌کریستال با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته و هم چنین نمودار حاصل از تحلیل اجزا محدود مدل کلاسیک است.



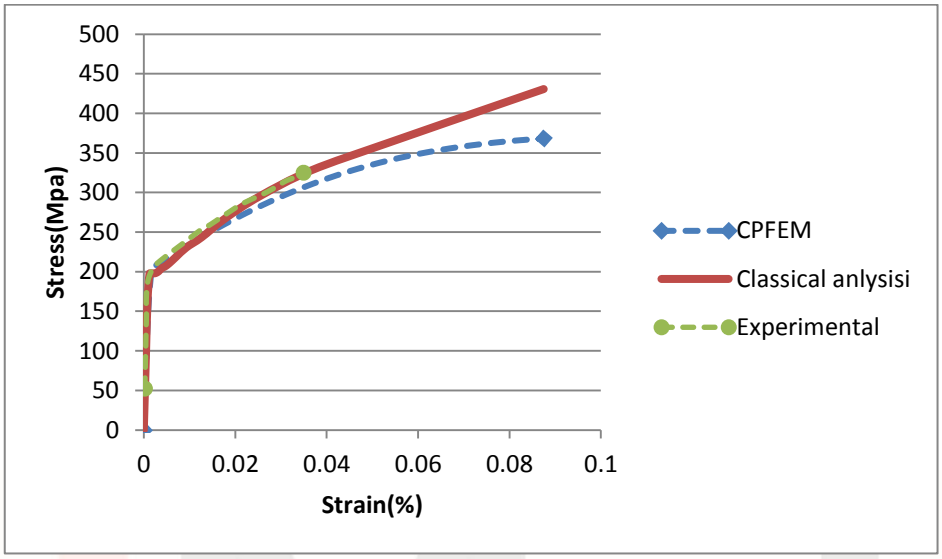
شکل ۹- منحنی بار-جابجایی برای دو مدل‌سازی کریستال پلاستیسیته و کلاسیک

نتیجه حاصل شده در این قسمت در تطابق با فیزیک تغییرشکل مواد کریستالی است که براین واقعیت که مواد ریزدانه(ماده با تعداد دانه‌های بیشتر) در دمای پایین استحکام بالاتری دارند صحه می‌گذارند(Dieter, 1976).

در شکل ۱۰ مقایسه بین منحنی‌های تنش-کرنش حاصل از دو مدل فوق الذکر با منحنی تجربی انجام شده است. همان طور که پیش‌بینی می‌شد، منحنی‌های حاصل از آزمون تجربی و روش اجزاء محدود ماکرومکانیک بر یکدیگر منطبق هستند. ولی منحنی بدست آمده از شبیه‌سازی آزمون کشش تک‌کریستال به مراتب مقادیر کمتری را نشان میدهد. و این بدین معنی می‌باشد که بار مورد نیاز برای تغییرشکل تک‌کریستال به مراتب کمتر از بار مورد نیاز برای تغییرشکل پلی‌کریستال‌ها می‌باشد. در واقع با افزایش تعداد دانه‌ها نواحی مرزدانه‌ای افزایش پیدا می‌کنند و نواحی مرزدانه‌ای بیشتر یعنی موانع بیشتر در سر راه حرکت نابجایی‌هایی که با حرکت خود تغییرشکل 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 تک‌کریستال، و صرفا با روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته پیش‌بینی کنیم.

---

[1] Force-elongation



شکل ۱۰- مقایسه نمودار تنش کرنش برای مقادیر تجربی، تحلیل کلاسیک، و تحلیل کریستال پلاستیسیته(CPFEM)

روش پیشنهاد شده در این پایان‌نامه جهت مطالعه رفتار تغییرشکل پلاستیک فلزات کریستالی و بطور خاص فولاد ضد زنگ 316L می‌تواند به عنوان نقطه شروعی برای تحقیقات کامل‌تر و گسترده‌تر در زمینه‌های شکل‌دهی میکرو ، شناسایی ترک‌های میکرو و همچنین مدل‌سازی رفتار آلیاژهای دوفازی از قبیل آلیاژهای تیتانیوم و نیکل و همچنین فولادهای دوفازی فریت-مارتنزیت یا فریت-آستنیت که از خانواده فولادهای ضدزنگ می‌باشند مورد استفاده قرار گیرد. انجام تحلیل اجزاء محدود بر روی مدل‌های میکروساختار پلی‌کریستال، RVEs[1]، و تجزیه تحلیل تاثیر اندازه و تعداد دانه و جهات کریستالی بر روی رفتار ماده در مقیاس ماکرو از موارد پژوهش‌های آتی مولفین این مقاله می‌باشد. استفاده از متدولوژی ارائه شده جهت شناسایی حد پایین برای تعداد دانه به نحوی که با آن تعداد دانه ماده رفتار تغییرشکل همگن و یکنواختی از خود نشان دهد، موضوع مهم دیگری است. همچنین از روش ارائه شده در این مقاله می‌توان در زمینه مدل‌سازی رشد ترک‌ها در زمینه میکروساختار نیز بهره جست. اخیرا مطالعه تاثیرات اندازه دانه بر روی شکل‌پذیری در فرایندهای شکل‌دهی و بخصوص شکل‌دهی گرم بسیار مورد توجه قرار گرفته است، با استفاده از روش ارائه شده در این مقاله می‌توان بدون نیاز به انجام عملیات حرارتی و آزمون‌های هزینه‌بر با تولید میکروساختارها با تعداد دانه‌های مختلف و اندازه دانه‌های متفاوت تاثیر این پارامترها را مورد مطالعه قرار داد.

[1] Representative volume element

Asaro, R. J., & Lubarda, V. A. (2006). *Mcechanics of Solid and material.* United States of America Cambridge University Press

Dieter, G. (1976). *Mechanical metallurgy*: Mc Graw Hill

Erich, S. (1924). Paper presented at the international conference on applied mechanic

Gonzalez, D. (2012). *A contribution on modelling deformation and residual stress in 3D polycrystals.* PhD, Faculty of Engineering and Physical Sciences, Uk

Han, T., & P, D. (2005). Latice Strain Partitioning in a Two-phase Alloy and its Redistribution upon Yeilding *Materials Sci. andEng, 405*, 18-33 .

Huang, Y. (1991). A USER-MATERIAL SUBROUTINE INCORPORATING SINGLE CRYSTAL PLASTICITY IN THE ABAQUS FINITE ELEMENT PROGRAM US: Division of Applied Sciences Harvard University, Cambridge, Massachusetts.

M. Marvi-Mashhadi, M. M., A. Rezaee-Bazzaz. (2012). 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*, 197–202 .

McGarry, J. P., O'Donnell, B. P., McHugh, P. E., & McGarry, J. G. (2004). Analysis of the mechanical performance of a cardiovascular stent design based on micromechanical modelling. *Computational Materials Science, 31*, 421–438 .

Metallforschung, R. a. (2002)

Paul, S. K. (2013). Real microstructure based micromechanical model to simulate microstructural level deformation behavior and failure initiation in DP 590 steel. *Materials and Design* 397-406 Peirce D., A. R. J., Needleman A. (1982). An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica et Materialia, 30*, 1082 .

Robertson, I., & Beaudoin, A. (2008). In-Situ TEM Straining of Pre-Deformed Materials to Determine Constraints of Dislocation-Boundary Interactions

WATANABE, T. (1993). Grain boundary design and control for high temperature materials. *Materials Science and Engineering*, 11-28 .